

文章编号: 1672-8785(2016)10-0023-07

AOTF 测量光谱分辨率提升算法的仿真

苏 歌 徐 睿 王建宇

(中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083)

摘 要: 根据声光可调谐滤波器 (Acousto-Optical Tunable Filter, AOTF) 光谱测量系统分辨率随衍射波长变化的特点, 研究了利用反卷积算法提高 AOTF 光谱仪测量光谱分辨能力的方法。结合光谱分辨率的分布, 在谱段范围内进行坐标非线性变换, 使整个光谱范围内的传递函数相同。再利用非线性迭代反卷积方法和傅里叶自反卷积方法对仿真 AOTF 光谱系统获取的线谱数据进行分辨率提升处理。仿真结果在分辨率上很大程度地得到了还原, 原来由于分辨率低而丢失的信息得到了复原。

关键词: 光谱分辨率; AOTF; 非线性坐标变换; 非线性迭代反卷积; 傅里叶自反卷积

中图分类号: O43 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2016.10.005

Simulation of Resolution Enhancing Algorithms for Spectra Measured by AOTF

SU Ge, XU Rui, WANG Jian-yu

(Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Abstract: According to the feature that the resolution of the Acousto-Optical Tunable Filter (AOTF) spectral measurement system changes with the diffraction wavelength, a method using deconvolution algorithm to improve the spectral resolution capability of AOTF spectrometers is studied. Combining with the distribution of spectral resolution, nonlinear coordinate transformation is performed in the spectral range so as to keep a same transfer function over the entire spectral range. Then, the nonlinear iterative deconvolution method and Fourier self-deconvolution are used to process the line spectral data acquired by the Fourier spectral system for resolution improvement. The simulation results are restored in resolution to a great extent and the original low resolution information which is lost because of low resolution is recovered.

Key words: spectral resolution; AOTF; nonlinear coordinate transformation; nonlinear iterative deconvolution; Fourier self-deconvolution

0 引言

随着 AOTF 工艺的日渐完善, 由于其重量轻、响应迅速、电可编程调谐和环境适应能力强等优点^[1], 该分光器件已经在深空探测遥感领域占据了重要地位^[2]。AOTF 的光谱分辨率会随衍射波长不断变化, 且两者呈二次关系, 其分

辨率相对于传统的光谱仪如光栅光谱仪、傅里叶变换光谱仪等较低, 这使得测量获得的光谱丢失了特征峰, 从而难以得到真实的光谱曲线。

目前, 为了满足宽谱段要求, 常用晶体的光谱分辨率参数在可见谱段接近 5 nm, 在短波红外波段为 10 nm 左右, 在中波谱段接近 20 nm。

收稿日期: 2016-05-12

作者简介: 苏歌(1992-), 女, 硕士研究生, 主要研究成像光谱信息处理。

E-mail: suge201311@163.com

所以精细光谱会由于卷积而产生光谱展宽和重叠。基于 AOTF 的光谱仪和光谱成像系统越来越多地被用于需要达到高光谱分辨率要求的领域。AOTF 光谱仪相对于其他光谱仪有很多优点,但在分辨率要求较高的光谱分析中, AOTF 很难达到要求。

1 原理介绍

1.1 非线性坐标变换

AOTF 是基于声光效应原理通过改变射频驱动频率来实现衍射波长扫描的新型分光元件。以 AOTF 为核心分光器件的光谱仪,其光谱响应特征是:(1) AOTF 的衍射效率分布函数可与 sinc^2 函数匹配;(2) 光谱带宽随衍射中心波长变化,具体关系为 $FWHM = \frac{0.9\lambda^2}{\Delta n L \sin^2 \theta_i}$ 。所以,波长越小,衍射光谱的半高宽就越小,光谱的分辨率就较高;波长越大,衍射光谱的半高宽就越大,光谱分辨率就较低。

由于 AOTF 的变分辨率特性,不能直接应用光谱分辨率提升算法,所以需要用一种相对尺度变换方法在波长和分辨率之间进行一定的尺度变换,才能使得参与反卷积算法的仪器的响应函数保持不变。非线性坐标变换的原理是对原始波长进行以下非线性变换,将原来的波长等价变换为一个新的波长空间尺度 λ_{eq} :

$$\lambda_{eq}(\lambda) = \int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{1}{FWHM(\lambda)} d\lambda \quad (1)$$

式中, λ_0 为测量光谱的起始波长, $FWHM(\lambda)$ 为分辨率关于波长的二次拟合函数。波长的变换也会引起光谱能量的变化。当波长轴压缩时,光谱能量减小。当波长轴延伸时,光谱能量增加。所以,波长轴等价变换后,需要将光谱能量乘上以下因子,以保证变化后的能量不变:

$$C(\lambda) = d\lambda/d\lambda_{eq} = FWHM(\lambda) \quad (2)$$

用变分辨率 AOTF 光谱仪采样光谱,得到的结果可以表示为光谱数据和仪器响应函数的卷积,即

$$y(\lambda) = \int h(\lambda, \lambda') x(\lambda') d(\lambda') + n(\lambda) \quad (3)$$

通过波长轴的非线性坐标变换后,上式为

$$y(\lambda_{eq}) = \int h(\lambda_{eq}, \lambda'_{eq}) x(\lambda'_{eq}) d(\lambda'_{eq}) + n(\lambda_{eq}) \quad (4)$$

相应的各式中都应该用变换后的坐标求解。反卷积求解结束后,所有的光谱应还原到真实的波长空间中。

1.2 傅里叶自反卷积算法

光谱测量中,光谱仪实际测得的信号为 $y(\lambda)$, 真实的光谱信号为 $x(\lambda)$, 光谱仪的仪器响应函数为 $h(\lambda)$, 则实际测得信号与真实信号之间的关系是

$$y(\lambda) = x(\lambda) \otimes h(\lambda) \quad (5)$$

$\otimes$ 表示卷积。当光谱仪的仪器响应函数和实际测得的信号已知时,利用傅里叶变换的性质,就可得到真实的光谱信号

$$x(\lambda) = F^{-1}\{Y(f)/H(f)\} \quad (6)$$

$H(f)$ 、 $Y(f)$ 分别表示 $h(\lambda)$ 、 $y(\lambda)$ 的傅里叶变换。由于实际光谱测量中会有噪声引入,反卷积时高频噪声会被放大,最终,反卷积结果可能偏离真实的值。所以在反卷积过程中,要引入窗函数来抑制高频部分的高频噪声。最终的傅里叶自反卷积 (Fourier self-deconvolution, FSD) 算法^[3]就可以表示为

$$x(\lambda) = F^{-1}\{W(L, f)gY(f)/H(f)\} \quad (7)$$

式中, $W(L, f)$ 是长度为 L 的窗函数。根据实际需求,实验室中常用的 AOTF 晶体的衍射效率曲线服从 $\sin^2$ 模型^[4]。所以,传递函数是可以确定的。由于反卷积会有病态结果,窗函数采用高斯模型减小了旁瓣引入的震荡。最终采用的仪器响应函数 $h(\lambda)$ 和窗函数 $W(L, f)$ 分别为

$$h(\lambda) = \sin^2(0.866 \frac{\lambda - \lambda_0}{FWHM})$$

$$W(L, f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{f^2}{2\sigma^2}) \quad (8)$$

窗函数的引入可以提高反卷积结果的信噪比。窗函数的截断长度越大,得到的反卷积结果的信噪比就越大,而且能很好地抑制负旁瓣,但

这是以牺牲分辨率为代价的。FSD 方法是在傅里叶变换域中去卷积,再乘以窗函数,整个过程需要对测量光谱、仪器响应函数和窗函数进行傅里叶变换,并且要对处理后的结果再进行逆变换,过程比较复杂繁琐。

1.3 非线性迭代反卷积算法

非线性迭代反卷积算法又称为 Jansson 算法^[5]。光谱测量过程可以表示为

$$y(\lambda) = x(\lambda) \otimes h(\lambda) \quad (9)$$

式中, $y(\lambda)$ 表示测量光谱, $h(\lambda)$ 表示仪器响应函数, $x(\lambda)$ 表示目标的真实光谱特征曲线。反卷积求解问题的目的是希望通过测得的光谱曲线 $y(\lambda)$ 反演,去除仪器响应函数的影响,得到降质前的真实光谱特征曲线 $x(\lambda)$ 。为求得 $x(\lambda)$,

式 (9) 需要满足

$$\min \|y(\lambda) - h(\lambda) \otimes x(\lambda)\|^2 \quad (10)$$

最初假设 $x^{(0)}(\lambda) = y(\lambda)$, 迭代公式是

$$x^{(k)}(\lambda) = x^{(k-1)}(\lambda) + f(x^{(k-1)}(\lambda))[y(\lambda) - h(\lambda) \otimes x^{(k-1)}(\lambda)] \quad (11)$$

式中, $x^{(k)}(\lambda)$ 是第 k 次迭代结果; $f(x^{(k-1)}(\lambda))$ 是松弛函数或者加权函数,用来抑制不真实峰的形成^[6]。

1.4 基于 AOTF 光谱分辨率特点的反卷积算法

本文的主要思想是将非线性坐标变换与非线性迭代反卷积、FSD 分别结合来处理分辨率随衍射波长变化的 AOTF 测量光谱数据。主要思想及处理步骤如图 1 所示。

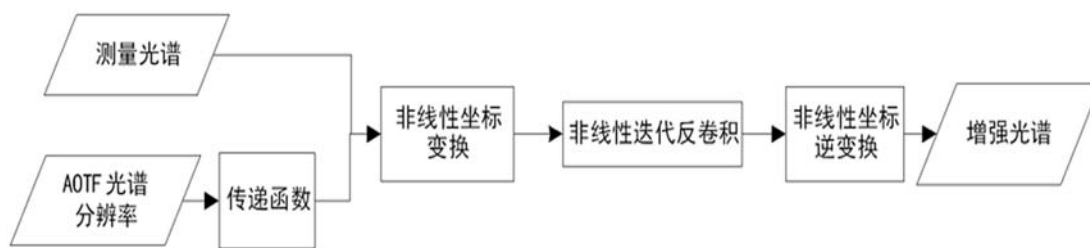


图 1 光谱分辨率提升处理的过程

2 改进的反卷积方法的仿真

为了验证前文提出的针对变分辨率 AOTF 光谱仪采集光谱的分辨率提升方法,即将非线性坐标变换分别与非线性迭代反卷积、傅里叶自反卷积方法相结合,对重叠峰的分辨进行仿真。

首先只对两个重叠峰的分辨进行仿真,然后对复杂一点的光谱曲线进行仿真。为了更真实更准确地对 AOTF 光谱仪采样光谱进行仿真,用 AOTF 的真实传递函数作为仿真中使用的仪器响应函数,即式 (7) 给出的传递函数模型。仿真使用的测量系统的分辨率就是实验所用的 AOTF 晶体的光谱分辨率,其特征曲线如图 2 所示。

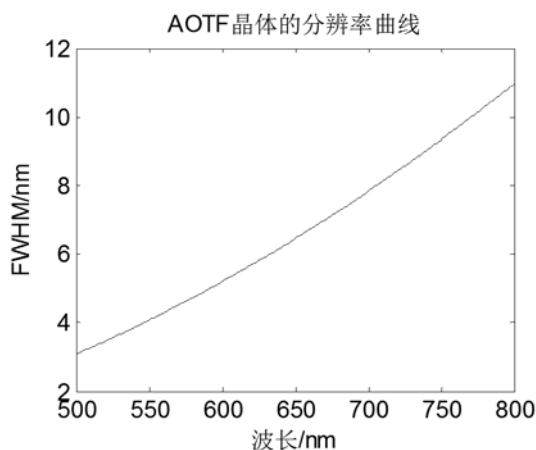


图 2 仿真所用 AOTF 晶体分辨率变化曲线

对于两个重叠峰的分辨,假设进入 AOTF 测量系统的是两个冲激信号,如图 3 所示。假设该

仿真信号进入系统的部分是在 490 nm~516 nm 谱段。在该谱段的四个信号分别是：(1) 在 504.7 nm 处的一个冲激信号；(2) 在 501.3 nm 和 504.7 nm 处有两个强度相同的冲激信号；(3) 在 501.3 nm 和 504.7 nm 处有两个强度不同的冲激信号，强度量值分别是 2 和 1；(4) 在 501.3 nm 和 504.7 nm 处有两个强度不同的冲激信号，强度量值分别是 2 和 0.6。图 3(a) 所示的单根谱线是仪器响应函数对谱线的展宽效果的仿真，图 3(b)~3(d) 是由于仪器响应函数引起的展宽而导致谱线重叠的仿真。

假设以上信号经过 AOTF 测量系统，分辨率参数使用图 2 给出的参数。在 490 nm~516 nm 区间，光谱分辨率在 2.9 nm~3.4 nm 之间变化，采样间隔为 0.1 nm。以上四个信号经过 AOTF 光谱测量系统，与仪器响应函数卷积，被采样后，得到仿真的测量光谱信号，如图 4 所示。

利用非线性坐标变换分别与傅里叶自反卷积、非线性迭代反卷积结合的方法对图 4 中仿真的测量光谱信号进行分辨率提升处理。在傅里叶自反卷积过程中，为了减小震荡的引入，选择旁瓣比较平滑的高斯模型作为窗函数，反卷积的结果图 5 所示。

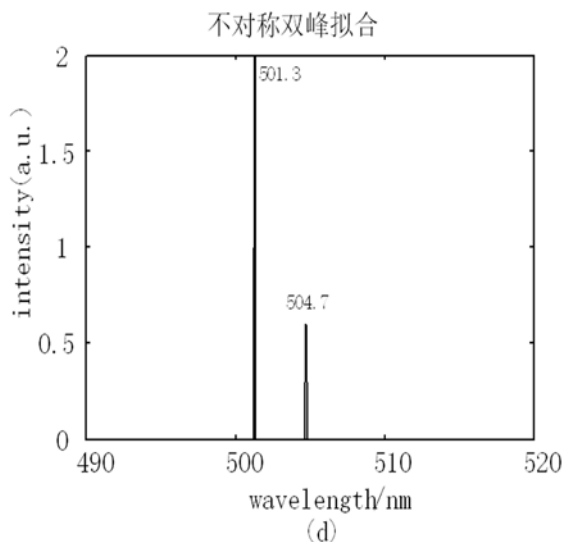
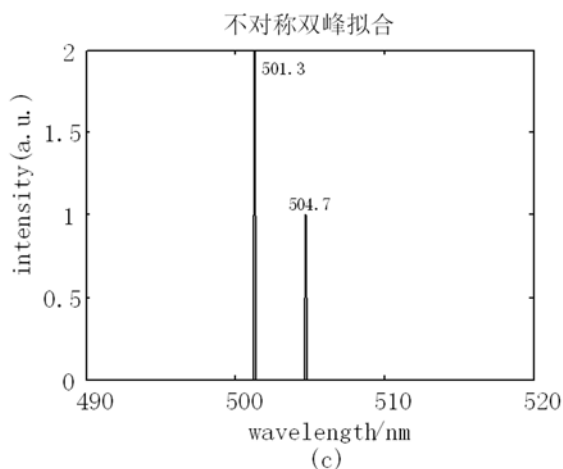
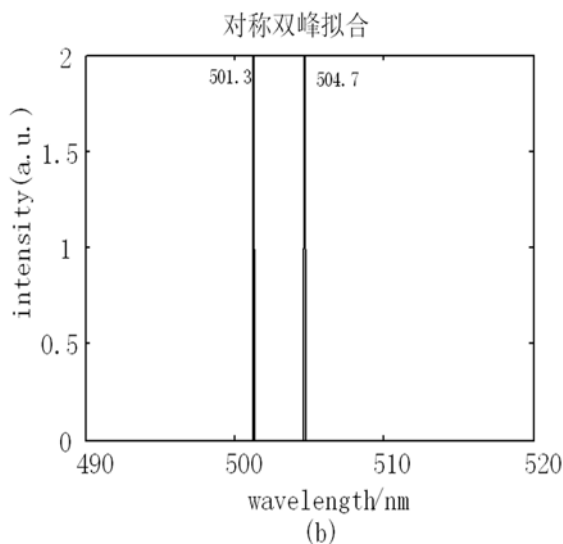
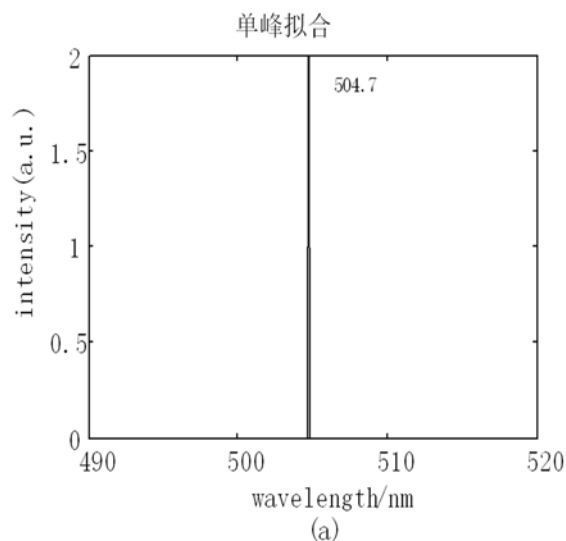
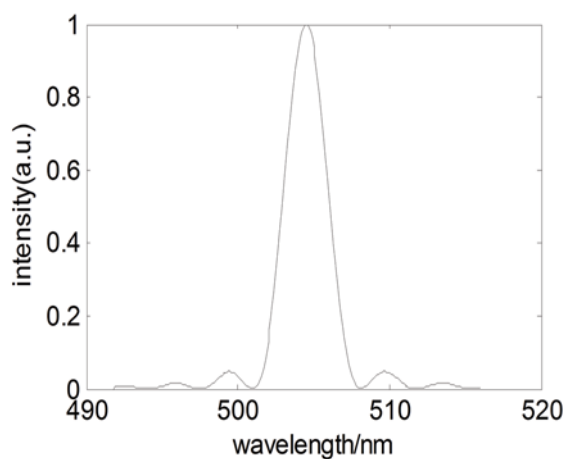
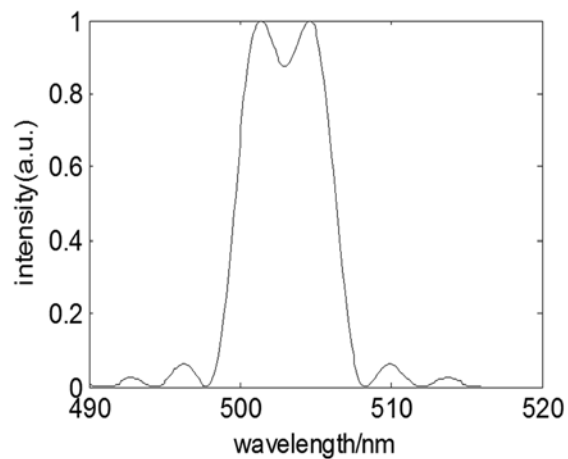


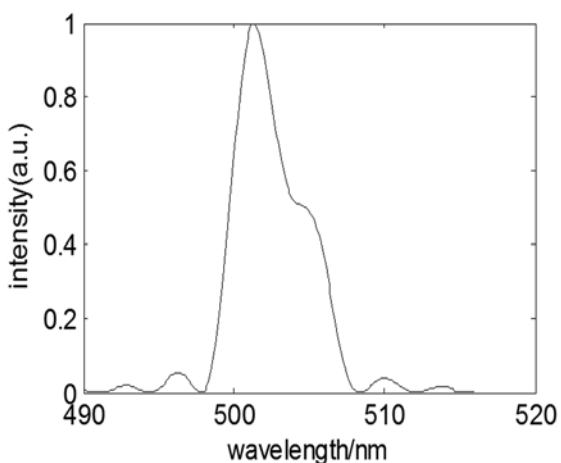
图 3 冲激信号仿真



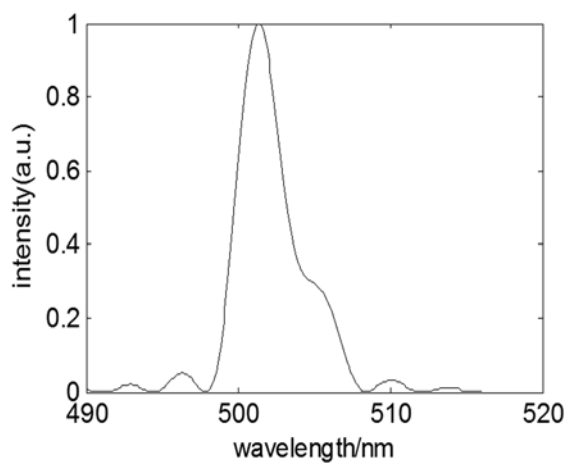
(a) 单峰谱线经过测量系统后的光谱



(b) 对称双峰拟合经过测量系统后的光谱

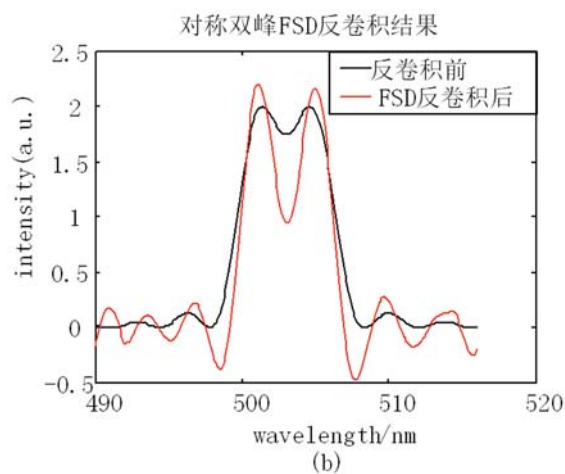
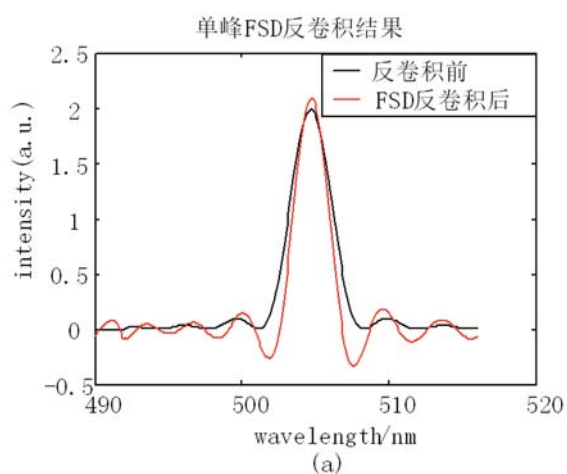


(c) 不对称双峰拟合经过测量系统后的光谱



(d) 不对称双峰拟合经过测量系统后的光谱

图 4 冲激信号经过系统后的仿真测量光谱



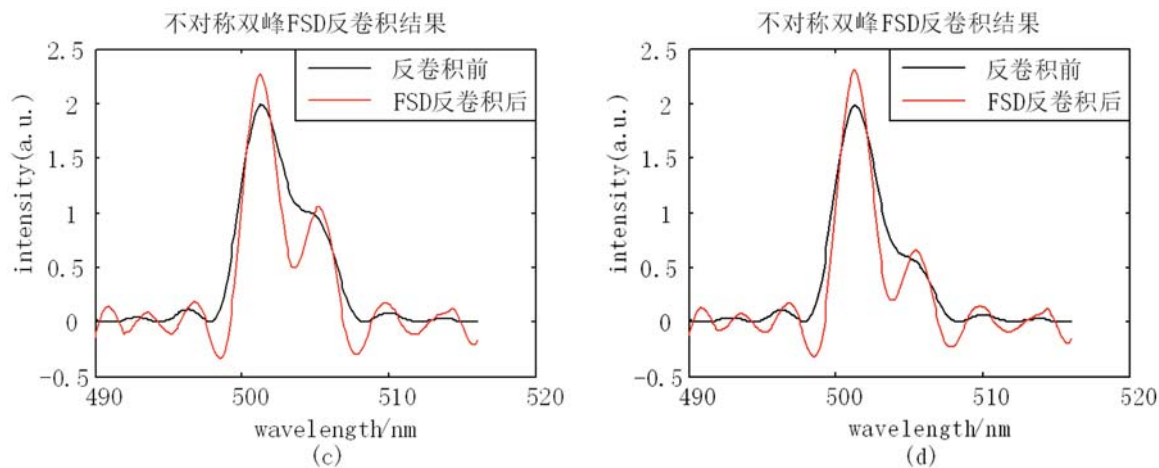


图 5 用 FSD 算法结合非线性坐标变换处理冲激信号的仿真测量光谱的结果

采用非线性坐标变换和非线性迭代反卷积相结合的方法对图 4 中的信号进行处理。处理

过程中, 迭代次数选为 10 次, 得到的反卷积结果如图 6 所示。

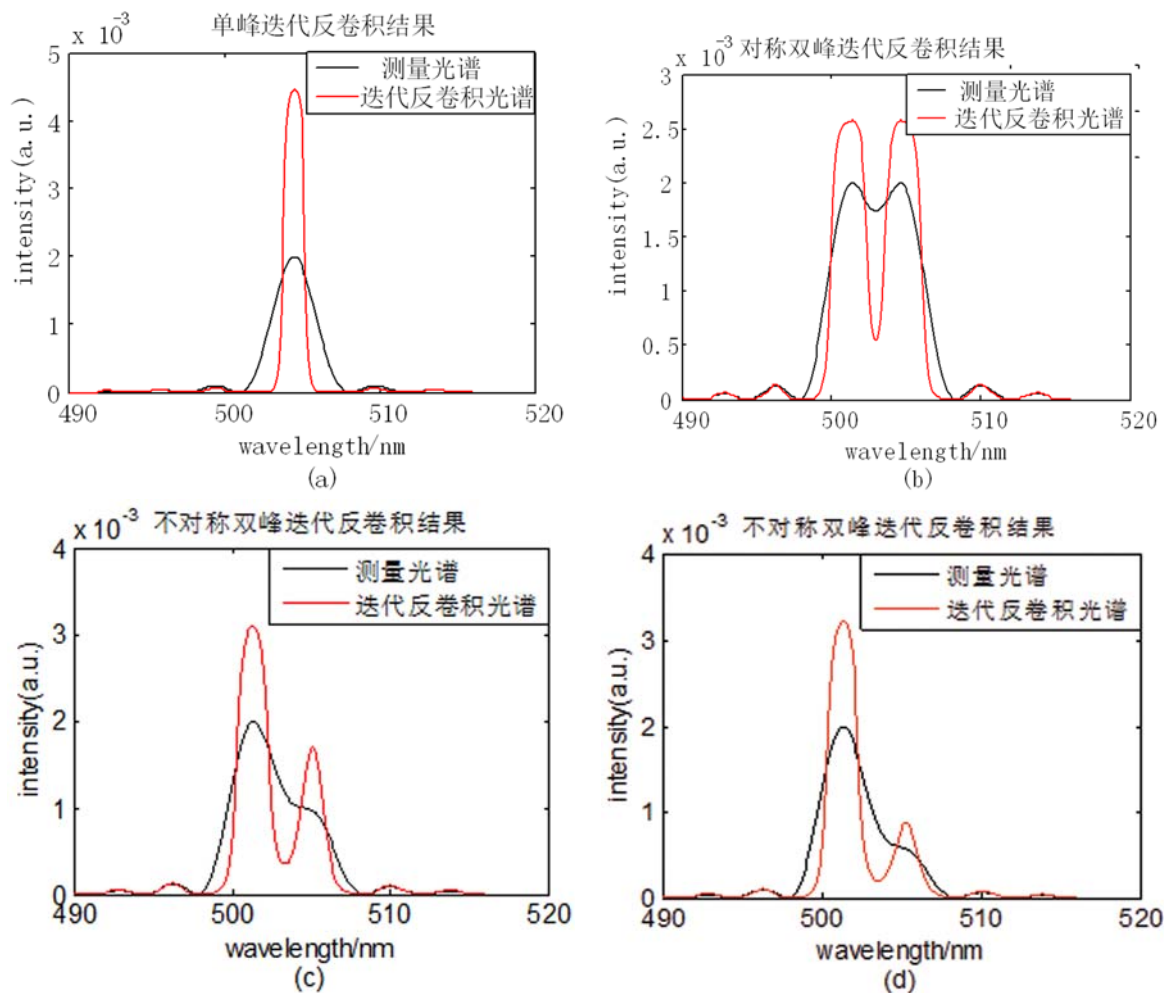


图 6 用 FSD 算法结合非线性坐标变换处理冲激信号仿真测量光谱的结果

表 1 FSD 方法处理结果的仿真参数 (\ 表示不存在)

	反卷积前的测量光谱			FSD 反卷积			FSD 反卷积改善情况		
	峰值 位置 (nm)	半高 宽 (nm)	相邻 峰谷比	峰值 位置 (nm)	半高 宽 (nm)	相邻 峰谷比	峰值位置 改变值 (nm)	半高宽 改善比例	相邻峰谷比 增加倍数
单峰	504.7	3.17	\	504.7	2.47	-6.24	0	30%	\
对称	501.4	3.49	1.14	501.1	2.27	2.32	-0.3	35%	1
双峰	504.6	3.58	1.14	505	2.31	2.28	0.4	35.5%	1
不对称	501.3	3.19	\	501.2	2.53	4.58	-0.1	20.7%	\
双峰	504.7	3.58	\	505.2	2.19	2.12	0.5	38.8%	\
不对称	501.3	3.15	\	501.3	2.47	11.87	0	21.6%	\
双峰	504.7	3.84	\	505.5	2.37	3.35	0.8	38.3%	\

表 2 迭代反卷积方法处理结果的仿真参数 (\ 表示不存在)

	反卷积前的测量光谱			非线性迭代反卷积			非线性迭代反卷积改善情况		
	峰值 位置 (nm)	半高 宽 (nm)	相邻 峰谷比	峰值 位置 (nm)	半高宽 (nm)	相邻 峰谷比	峰值位置 改变值 (nm)	半高宽 改善比例	相邻峰谷比 增加倍数
单峰	504.7	3.17	\	504.7	1.46	\	0	53.9%	\
对称	501.4	3.49	1.14	501.4	2.12	53.4	0	39.3%	4.6
双峰	504.6	3.58	1.14	504.6	2.17	53.4	0	39.4%	4.6
不对称	501.3	3.19	\	501.3	1.66	37.8	0	48%	\
双峰	504.7	3.58	\	504.9	1.14	23.9	0.2	68.2%	\
不对称	501.3	3.15	\	501.3	1.59	58.3	0	49.5%	\
双峰	504.7	3.84	\	505.1	1.01	20.3	0.4	73.7%	\

对以上两种方法处理的结果进行分析。对于线谱, 分析参量是峰值中心位置、半高宽和吸收峰深度等。现对两种反卷积方法处理结果的三个主要参量进行定量分析, 具体结果见表 1。

从表中可以看出, 峰值中心位置在经非线性坐标变换和傅里叶自反卷积结合的算法处理后都有所改变, 但在经非线性坐标变换和非线性迭代反卷积结合的算法处理后基本上保持不变。从数据中也可以明显看出半高宽的变化, 经非线性坐标变换和非线性迭代反卷积结合的算法处理后半高宽减小得更多。半高宽的改善比例方面, 经非线性坐标变换和傅里叶自反卷积结合的算法处理后平均减小了 31.4%, 经非线性坐标变换和非线性迭代反卷积结合的算法处理后平均减小了 53.1%。相邻峰谷比方面, 前一种算法处理后平均提升了 1 倍, 后一种算法处理后平均提升了 4.6 倍。对称双峰峰谷比在经两种算法处

理后均有大幅度的提升; 两个不对称双峰在经改进的反卷积算法处理后, 原来不可分辨的双峰均可以分离开来。总的说来, 光谱分辨能力得到了明显的改善。另外, 对比图 5 和图 6, 可以发现, 经前一种算法处理后旁瓣也得到了加强, 两边出现了振动现象, 甚至出现了负值; 但经后一种算法处理后, 两边原有的旁瓣信息没有都得到增强, 只是有用信息得到了增强。所以, 后一种算法更具可行性。

3 结论

用单峰脉冲信号仿真了光谱测量系统传递函数对谱线展宽的影响, 用对称双峰脉冲、不对称双峰脉冲以及多谱线的 NeAr 光谱信号仿真了光谱测量系统的传递函数对谱线展宽造成光谱重叠现象的影响。

(下转第 47 页)