

# 干涉型红外光谱仪的光谱复原\*

李正直 倪振宇

(杭州大学物理系, 浙江, 杭州, 310028)

**摘要**——利用希尔伯特-史密特定理积分方程能得到高分辨率复原光谱。当光谱分布波数范围较大时, 将其分为几个小区域, 适当选取参数, 可大大减小计算点数( $\sim 41$ ); 当反射率随波长改变时用修正的希尔伯特-史密特定理能进一步减少计算机时间和容量。

**关键词**——光谱畸变消除, 干涉型红外光谱仪, 消卷积。

## 1. 引 言

利用与傅里叶光谱学类似的处理方法, 可得到多光束干涉仪的复原光谱<sup>[1~3]</sup>, 但这种补偿受到一些条件限制, 特别是当得到的仪器函数的次极大较大及因输入光谱尖锐峰值引起的吉布斯现象时, 得到的光谱往往含有误差和畸变<sup>[4]</sup>。近年来, 有人提出用希尔伯特-史密特理论解积分方程, 从而再现多光束干涉型光谱仪的输入光谱<sup>[5~8]</sup>。结果表明, 用这种方法得到的复原光谱, 不仅分辨率高, 而且能有效地抑制噪声的影响。但是, 由于计算时的点数很多( $\sim 400$ ), 所需要的计算时间很长, 并要求计算机具有非常大的容量, 因而费用昂贵, 用通常实验室微机难以完成。

我们对较大的波数范围进行分段处理和适当地选取参数, 使抽样点数大大减少( $\sim 41$ ), 并对希尔伯特-史密特定理进行了修正, 从而在很大程度上减少了计算时间和计算机容量, 得到了高分辨率复原光谱。

## 2. 工作原理

形为

$$f(x) = \int K(x, y) g(y) dy \quad (1)$$

---

本文 1989 年 2 月 17 日收到, 修改稿 1989 年 6 月 14 日收到。

•浙江省自然科学基金资助课题。

的函数  $f(x)$  可用对称核齐次 Fredholm 方程

$$\varphi(x) = \lambda \int K(x, y) \varphi(y) dy \quad (2)$$

在  $[a, b]$  上的特征函数  $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots$  的线性组合表示, 即

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \varphi_i(x), \quad (3)$$

式中

$$c_i = \int f(x) \varphi_i(x) dx. \quad (i=1, 2, \dots) \quad (4)$$

式(1)~(4)即为对称核的希尔伯特-史密特定理<sup>[7]</sup>, 根据这一定理容易证明

$$g(y) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \lambda_i \varphi_i(y). \quad (5)$$

当  $K(x, y)$  是非对称核时, 可先构成两个对称函数

$$K_L(x, y) = \int K(z, x) K(z, y) dz, \quad (6)$$

$$K_R(x, y) = \int K(x, z) K(y, z) dz. \quad (7)$$

$K_L$  和  $K_R$  有共同的正特征值, 且满足特征方程

$$\varphi'(x) = \lambda'^2 \int K_L(x, y) \varphi'(y) dy, \quad (8)$$

$$\bar{\varphi}'(x) = \lambda'^2 \int K_R(x, y) \bar{\varphi}'(y) dy. \quad (9)$$

$\varphi'(x)$  和  $\bar{\varphi}'(x)$  可通过下面的公式相联系:

$$\bar{\varphi}'(x) = \lambda' \int K(x, y) \varphi'(y) dy, \quad (10)$$

$$\varphi'(x) = \lambda' \int K(y, x) \bar{\varphi}'(y) dy. \quad (11)$$

因此, 在  $\{\varphi'_i(x)\}$  和  $\{\bar{\varphi}'_i(x)\}$  各自构成的正交系统中, 若  $f(x)$  可以用式(1)表示, 那末它就可以用级数

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \bar{\varphi}'_i(x) \quad (12)$$

展开, 式中  $a_i = \int f(x) \bar{\varphi}'_i(x) dx$  ( $i=1, 2, \dots$ ). 这时, 同样能够得到

$$g(y) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \lambda'_i \varphi'_i(y). \quad (13)$$

法布里-珀罗干涉仪是一种高分辨率光谱仪, 在垂直方向透过的光强  $J(x)$  和光谱强度分布  $B(\sigma)$  的关系为

$$J(x) = \int_0^{\sigma_M} \frac{(1-R)^2}{1-2R \cos 2\pi x \sigma + R^2} B(\sigma) d\sigma, \quad (14)$$

式中  $\sigma = 1/\lambda$  为波数,  $R$  为平板表面的反射率,  $x$  为两个反射表面间距的 2 倍. 设  $\bar{\sigma} = \sigma/\sigma_M$ ,  $\bar{x} = x/x_M$  ( $\sigma_M, x_M$  分别是  $\sigma$  和  $x$  的最大值), 则式(14)可写为

$$J(\bar{x}) = \int_0^1 \frac{(1-R)^2}{1-2R \cos 2\pi x_M \sigma_M \bar{\sigma} \bar{x} + R^2} B(\bar{\sigma}) d\bar{\sigma} = \int_0^1 K(\bar{x}, \bar{\sigma}) B(\bar{\sigma}) d\bar{\sigma}. \quad (15)$$

式(15)即核为  $K(\bar{x}, \bar{\sigma})$  的第一类 Fredholm 积分方程. 由实验测得的  $J(\bar{x})$ , 利用希尔伯特-史密特理论能获得复原光谱  $B'(\bar{\sigma})$ .

### 3. 计算机模拟及其结果

为获得较高的精确度, 当给定的波数范围较大时(如  $0 \sim 150 \text{cm}^{-1}$ ), 如果光谱分布比较复杂, 则要求选取的计算点数很多( $\sim 400$ )<sup>[5,6]</sup>, 事实上, 在希尔伯特-史密特理论中变量的范围是任意的, 因此, 我们把波数范围  $(\sigma_m, \sigma_M)$  分成若干个相等的较小区域, 在较小的区域  $(\bar{\sigma}_p, \bar{\sigma}_q)$  内, 把函数用充分稠密的点集  $\bar{\sigma}_0 = a, \bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \dots, \bar{\sigma}_N = 1$  (这里  $a = \bar{\sigma}_p / \bar{\sigma}_q, \bar{\sigma}_i = a + i \cdot (1-a) / N, i = 1, 2, \dots, N$ ) 来表示, 同时, 相应选取  $\bar{x}$  的变化范围, 使  $K(\bar{x}, \bar{\sigma})$  成为对称核. 利用与函数对应的  $n$  维欧氏空间量的一些基本关系, 可以把积分化成累和的形式, 使理论用于实际计算.

#### 3.1 反射率 $R$ 与光波长无关时

显然,  $K(\bar{x}, \bar{\sigma})$  是对称核, 此时,  $K(\bar{x}, \bar{\sigma})$  的本征值  $\lambda$  和本征函数  $\varphi$  满足的本征方程为

$$\sum_{k=1}^N \left\{ K(\bar{x}_i, \bar{\sigma}_k) - \frac{\delta_{ik}}{\lambda} \right\} \varphi(\bar{\sigma}_k) = 0, \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (16)$$

由式(16)可同时求出  $\lambda_n$  和  $\varphi_n$ . 又由于  $c_n = \sum_{i=1}^N J(\bar{x}_i) \varphi_n(\bar{x}_i)$ , 因此, 利用式(5)就可以得到复原光谱  $B'(\bar{\sigma}_k) = \sum_{n=1}^N \lambda_n c_n \varphi_n(\bar{\sigma}_k)$ .

当入射光是波数为  $\bar{\sigma}_0$  的理想单色光时,  $B(\bar{\sigma}) = \delta(\bar{\sigma} - \bar{\sigma}_0)$ , 由式(15)可以得到

$$J(\bar{x}) = K(\bar{x}, \bar{\sigma}_0).$$

根据希尔伯特-史密特理论中对称核的展开定理, 有  $K(\bar{x}, \bar{\sigma}_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n(\bar{x}) \varphi_n(\bar{\sigma}_0)}{\lambda_n}$ , 从而有

$$c_n = \int_0^1 J(\bar{x}) \varphi_n(\bar{x}) d\bar{x} = \varphi_n(\bar{\sigma}_0) / \lambda_n,$$

于是可得到仪器函数

$$B'_0(\bar{\sigma}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \varphi_n(\bar{\sigma}) \varphi_n(\bar{\sigma}_0). \quad (17)$$

#### 3.2 反射率 $R$ 与光波长有关时

显然, 这时  $K(\bar{x}, \bar{\sigma}) \neq K(\bar{\sigma}, \bar{x})$ , 因此, 核  $K(x, \bar{\sigma})$  是非对称的. 由式(6)、(7), 算得与  $K(\bar{x}, \bar{\sigma})$  相关的两个对称函数  $K_L(\bar{x}, \bar{\sigma})$  和  $K_R(\bar{x}, \bar{\sigma})$  为

$$K_L(\bar{x}_i, \bar{\sigma}_j) = \sum_{k=1}^N K(\bar{z}_k, \bar{x}_i) K(\bar{z}_k, \bar{\sigma}_j), \quad (18)$$

$$K_R(\bar{x}_i, \bar{\sigma}_j) = \sum_{k=1}^N K(\bar{x}_i, \bar{z}_k) K(\bar{\sigma}_j, \bar{z}_k). \quad (19)$$

$K_L$  和  $K_R$  具有相同的正的本征值, 且满足本征方程

$$\sum_{k=1}^N \left\{ K_L(\bar{x}_i, \bar{\sigma}_j) - \frac{\delta_{ik}}{\lambda'^2} \right\} \varphi'(\bar{\sigma}_k) = 0, \quad (20)$$

$$\sum_{k=1}^N \left\{ K_R(\bar{x}_i, \bar{\sigma}_j) - \frac{\delta_{jk}}{\lambda'^2} \right\} \bar{\varphi}'(\bar{\sigma}_k) = 0. \quad (i, j=1, 2, \dots, N) \quad (21)$$

本征函数  $\varphi'$  和  $\bar{\varphi}'$  具有以下关系:

$$\begin{cases} \bar{\varphi}'_n(\bar{x}_i) = \lambda'_n \sum_{j=1}^N K(\bar{x}_i, \bar{\sigma}_j) \varphi'_n(\bar{\sigma}_j), \\ \varphi'_n(\bar{x}_i) = \lambda'_n \sum_{j=1}^N K(\bar{\sigma}_j, \bar{x}_i) \bar{\varphi}'_n(\bar{\sigma}_j). \end{cases} \quad (22)$$

从式(18)~(21)可求解与  $K_L$  和  $K_R$  相对应的本征值  $\lambda'^2$  和本征函数  $\varphi'$ 、 $\bar{\varphi}'$ ，再由式(22)确定  $\lambda'$  的正负号，就能得到复原光谱  $B'(\bar{\sigma})$ ，但这过程需要很长的计算时间和很大的计算机容量。事实上，从式(22)可以看出， $\bar{\varphi}'$  或  $\varphi'$  的正负号和  $\lambda'$  直接相关，因此，如果核  $K_L$  和  $K_R$  共同的本征值为  $\lambda_1'^2, \lambda_2'^2, \lambda_3'^2, \dots$ ，那末，我们可以假定  $\lambda_1', \lambda_2', \lambda_3' \dots$  全为正，并且将它们按大小进行排列，即  $0 < \lambda_1' \leq \lambda_2' \leq \lambda_3' \leq \dots$ 。这时，如果相应的  $K_R$  的本征函数为  $\varphi'_1, \varphi'_2, \varphi'_3, \dots$ ，那末，从式(22)确定的  $\bar{\varphi}'_1, \bar{\varphi}'_2, \bar{\varphi}'_3, \dots$  便是相应的  $K_L$  的本征函数，从而使计算时间和计算机容量都减少了一半。再利用式(13)，即可得到复原光谱

$$B'(\bar{\sigma}_k) = \sum_{n=1}^N \lambda'_n c'_n \varphi'_n(\bar{\sigma}_k),$$

式中

$$c'_n = \sum_{i=1}^N J(\bar{x}_i) \bar{\varphi}'_n(\bar{x}_i).$$

考虑波数为  $\bar{\sigma}_0$  的理想单色光入射，有  $B(\bar{\sigma}) = \delta(\bar{\sigma} - \bar{\sigma}_0)$ ，这时  $J(\bar{x}) = K(\bar{x}, \bar{\sigma}_0)$ ，由式(10)

$$\text{得到} \quad c_n = \int_0^1 K(\bar{x}, \bar{\sigma}_0) \bar{\varphi}'_n(\bar{x}) d\bar{x} = \frac{1}{\lambda'_n} \varphi'_n(\bar{\sigma}_0). \quad (23)$$

由此得到仪器函数

$$B'_0(\bar{\sigma}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \varphi'_n(\bar{\sigma}) \varphi'_n(\bar{\sigma}_0). \quad (24)$$

需要指出的是，在式(17)和(24)中，只有当  $N \rightarrow \infty$  时， $B'_0(\bar{\sigma})$  才近似为  $\delta(\bar{\sigma} - \bar{\sigma}_0)$ 。事实上，当给定波数  $\sigma_M$  时，只要我们适当地选取  $\sigma_M$ ，就可以用有限个  $\varphi'_n$  使  $B'_0(\bar{\sigma}) \approx \delta(\bar{\sigma} - \bar{\sigma}_0)$ 。在我们的计算中，取  $N=41$ ，就能使  $B'_0(\bar{\sigma})$  非常接近于  $\delta$  函数，从而可以获得分辨率很高的复原光谱。

图1(a)是  $K(\bar{x}, \bar{\sigma})$  为对称核时波数  $\sigma_0$  的入射单色光，图1(b)是用这种方法得到的仪器函数，可见它的旁瓣很小。

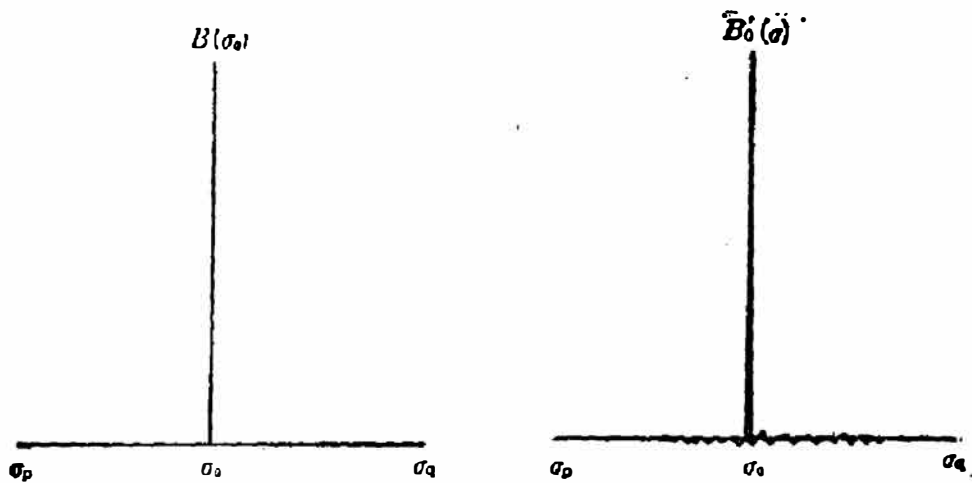


图1 (a) 波数为  $\sigma_0$  的单色光

(b) 用本文方法得到的仪器函数

Fig. 1 (a) The perfectly monochromatic line at  $\sigma_0$ .

(b) Instrumental profile of the present method.

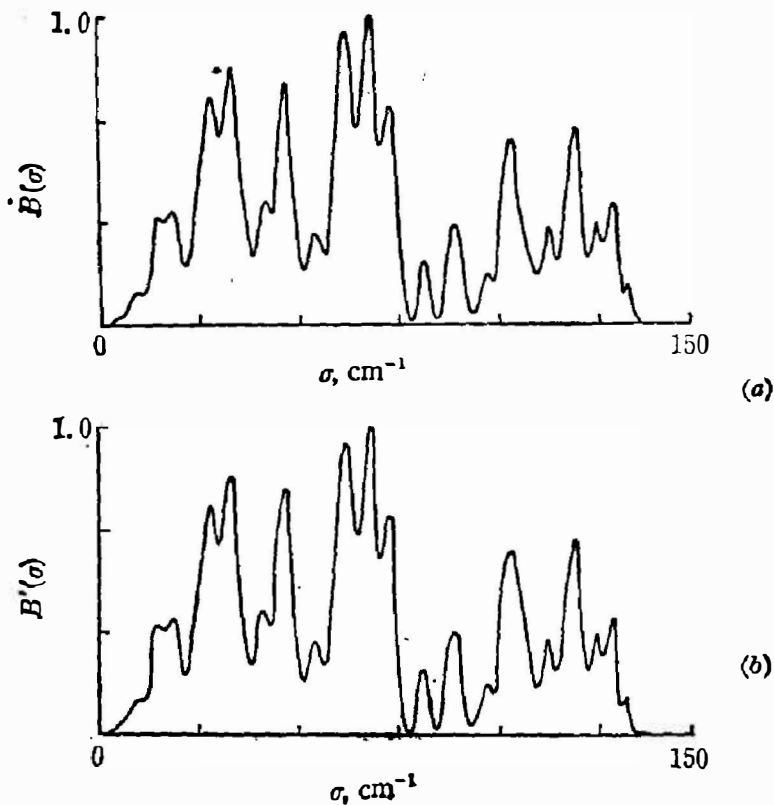


图 2 (a) 远红外区一种大气吸收谱线 (b) 复原的光谱 ( $N_0=410$ ,  $R=0.4\sim 0.6$ ,  $X_q=0.276$  cm)

Fig. 2 (a) An atmospheric absorption spectrum in the far-infrared region.

(b) Reconstructed spectrum with  $N_0=410$ ,  $R=0.4\sim 0.6$ ,  $X=0.276$  cm.

图 2(a) 是远红外区一种大气吸收谱线, 图 2(b) 是  $K(\bar{x}, \bar{\sigma})$  为非对称核时得到的复原光谱, 这时假定反射率  $R=0.4\sim 0.6$  且随波数  $\sigma$  线性变化, 在整个波数范围内选取的计算点数  $N_0=410$ . 从图 2 可以看出,  $B(\sigma)$  和  $B'(\sigma)$  符合得很好. 为了研究这种复原光谱的抗干扰能力, 我们把随机噪声迭加到归一化的  $J(\bar{x})$  上, 结果表明, 当随机噪声的最大幅值为  $\pm 10^{-4}$  时, 仍能得到很好的复原光谱.

## 4. 结 论

用希尔伯特-史密特理论解积分方程是一种实现高分辨率复原光谱的有效方法. 由于本征值和本征函数仅由核本身决定, 且与光谱形状无关, 因此, 只要储存计算结果, 就可以直接用于其它任意形状的光谱, 可以在极短时间内完成光谱的复原.

## 参 考 文 献

- [1] Bell R. J., *Introductory Fourier Transform Spectroscopy*, Academic Press, New York, 1973.
- [2] Röseler A., *Optik*, **6** (1966/1967), 606.
- [3] Kies E. M., *J. Opt. Soc. Am.*, **62** (1973), 916.
- [4] Yoshihara K. et al., *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*, **19** (1980), 2523.
- [5] Yoshihara K. et al., *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*, **24** (1985), 207.
- [6] Yoshihara K. et al., *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*, **24** (1985), 575.
- [7] Tricomi F. G., *Integral Equations*, Interscience Publishers, Inc., New York, 1957.

## THE RECOVERY OF SPECTRUM IN INTERFEROMETRIC INFRARED SPECTROMETER\*

LI ZHENGZHI, NI ZHENYU

(*Department of Physics, Hangzhou University, 310028, Hangzhou, Zhejiang, China*)

### ABSTRACT

Using the theory of Hilbert and Schmidt, the spectrum is recovered with a high resolution from an integral equation representing the relation between the spectral distribution and its multiple-beam interferogram. The number of calculating points becomes small ( $\sim 41$ ) by dividing the larger wavenumber into several smaller ones and choosing appropriate parameters. The results also show that after a modification of the theory of Hilbert and Schmidt, both the calculating time and the capacity of a computer are further reduced for the case where the reflectivity of the reflecting surfaces varies with wavenumber.

---

\* Project supported by the Fund of the Natural Sciences of Zhejiang Province, P. R. O.