

一种实现超分辨率付里叶变换谱的新方法*

周冠群 张光昭

(无线电电子学系)

摘 要

用光学滤波器或电子滤波器滤出感兴趣的波段,分别测量背景干涉图和样品干涉图,然后相减得到纯的样品透射的干涉图,最后对这个干涉图进行自回归谱分析.与以往的二次谱分析法相比,可以减少信息的损失和畸变,提高谱线位置的预测精度.这种新方法的分辨率为FFT法的4倍左右.本文还讨论了谱线结构和噪声对分辨率和谱线位置精确度的影响.

关键词 超分辨率,付里叶变换谱,自回归谱分析

1 引言

近年来,超分辨率付里叶变换谱的研究得到了发展.1983年 Kawata 和 Minami 等人^[1]首次将最大熵谱法(MEM)应用到中红外付里叶变换谱中,1985年他们又用奇异值分解法(SVD)对谱分析法进行了改进^[2],1986年以来张光昭等人^[3-5]将最小二乘法(LS)和上述两种方法应用到远红外付里叶变换谱中.尽管他们所用的算法不同,但是,他们采用的二次谱分析的方法却是相同的.其实质是先利用付里叶变换的方法对测量到的干涉图进行数字滤波,得到对应于感兴趣谱段的干涉图,然后再进行自回归谱分析.但是,在付里叶变换和反变换过程中,会造成部分信息的损失和畸变,因而影响分辨率的提高和谱线位置的预测精度.

本文采用光学滤波(或电子滤波)的方法代替上述的数字滤波的方法,直接测量出感兴趣谱段的背景干涉图和样品干涉图,然后相减,得到纯样品透射的干涉图,最后对这个干涉图进行自回归谱分析.

2 差干涉图法

根据 Makhoul^[6]对自回归谱分析法的误差所做的分析,自回归谱分析法比较适合于拟合分立的谱线.对于在宽谱带背景上有一些吸收峰的透射谱,如果直接从干涉图进行预测,将只能得到背景谱的包络,无法提高分辨率.因此,关键在于如何提高需要预测的谱线在信号中所占的比重.显然,我们可以用差干涉图法,即用背景干涉图减去样品干涉图的方法来扣除背景的影响.具体步骤如图1所示.

本文1988年9月5日收到

* 国家自然科学基金资助项目

自回归谱分析法的分辨率与谱线结构的复杂性有密切的关系^[4]。在以往的二次谱分析中都采用数字滤波的方法截出感兴趣的谱段，以提高分辨率。由于在数字滤波过程中会造成部分信息的丢失和畸变，因此，我们这里采用光学滤波或电子滤波的方法，滤出感兴趣的谱段（具体方法见实验部分），再测量背景干涉图和样品干涉图。

从图1可以看出，在数据处理过程中，省去了二次谱分析法中的付里叶变换、谱段截取和付里叶反变换等步骤，不仅简化了计算程序，而且避免了信息的损失和畸变。实验中，我们只要分别测量样品干涉图和背景干涉图，然后用背景干涉图减去样品干涉图得到差干涉图，就可以对差干涉图进行自回归谱分析了。

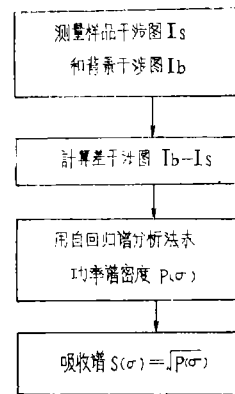


图1 用差干涉图法实现超分辨率付里叶变换谱的步骤
Fig. 1 The steps of realizing the super-resolution Fourier transform spectrum with difference interferogram.

3 实验结果

我们利用自制的远红外付里叶变换光谱仪按照图1的步骤进行了实验，在对差干涉图进行自回归谱分析时，采用的是Marple的LS算法^[7]，因为它具有计算速度较快和不易产生谱线分裂的优点。测量的是¹⁴NH₃的基态的反演谱，所用样品池的长度为5cm，两边的窗口各用一块3mm厚的结晶石英片，样品的气压为30Torr，在TGS检测器前还加了一块3mm厚的结晶石英片滤波，并用10μm厚的聚酯薄膜(Mylar)作为分束器，结果滤出50~130cm⁻¹之间的一段频谱。为了使分析的结果便于同FFT的结果进行比较，我们记录了2048点的样品干涉图和背景干涉图（光程差取样间隔为10.1248μm）并取零光程差两边的600点用作LS分析之用，结果如图2所示。图2(a)和(b)分别为600点的背景干涉图和样品干涉图，(c)是背景干涉图减去样品干涉图的差干涉图，(d)是N=600，P=248的LS预测谱，(e)和(f)分别是N=512和N=2048的FFT谱。比较(d)和(f)可见，N=600的LS谱和N=2048的FFT谱可以相比拟，因此，LS法的分辨率为FFT法的4倍左右。

为了比较差干涉图法和以往的二次谱分析法对谱线位置的预测精度，我们对N=512点的干涉图按照文献〔4〕提出的方法进行了二次谱分析，并将计算结果连同差干涉图的结果和N=2048的FFT的结果，以及文献〔8〕给出的理论值（对J相同而k不同的谱线求平均得到的）一并列入表1。从表中可以看出，用差干涉图的预测结果比用二次谱分析法精确得多，完全可以同N=2048的FFT的结果相比。

采用差干涉图法时采样数据点数无需受 2^k 这一条件的限制，因此，易于最大限度地增加谱仪的扫描长度，提高分辨率。

因实验条件所限，样品池中含有少量水汽，使¹⁴NH₃谱中含有一些水的谱线。

应当指出，由于自回归谱分析法更适合于拟合分立的谱线，因此，这种方法比较适合于气体谱线的研究。

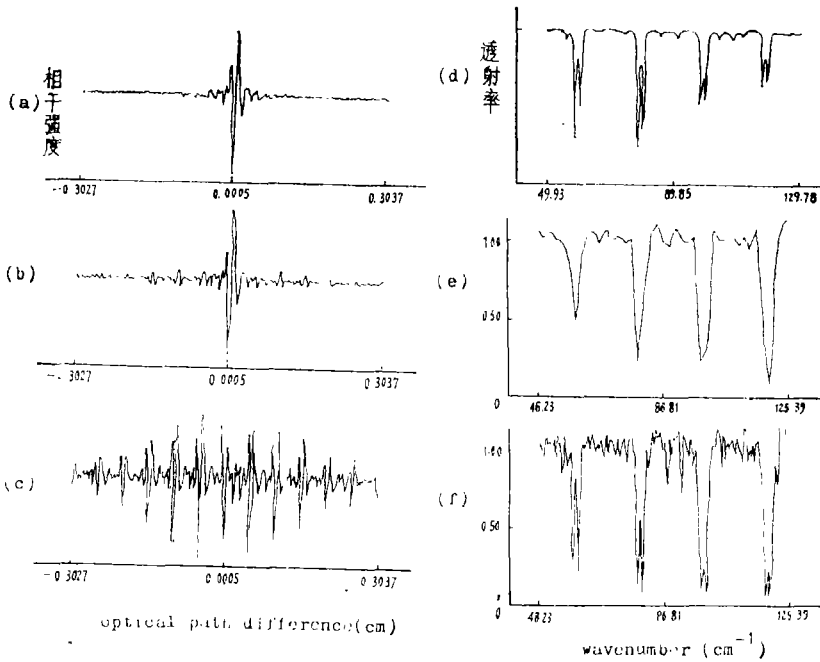


图2 $^{14}\text{NH}_3$ 的LS谱分析和FFT谱

a. 600点背景干涉图, b. 600点样品干涉图, c. 差干涉图, d. LS预测谱 ($N=600$, $P=248$), e. $N=512$ 的FFT谱, f. $N=2048$ 的FFT谱,

Fig.2 $^{14}\text{NH}_3$ FFT spectrum and LS spectral estimates

a. 600 points background interferogram, b. 600 points sample interferogram, c. difference interferogram, d. LS prediction spectrum with $N=600$, $P=248$, e. FFT spectrum with $N=512$, f. FFT spectrum with $N=2048$

表1 $^{14}\text{NH}_3$ 谱线的理论值和预测值的比较 (单位: cm^{-1})

Tab.1 The comparison of the theoretical values of the $^{14}\text{NH}_3$ spectral line wavenumbers with the prediction values (unit: cm^{-1})

序号	理论值	N=512的二次谱分析 的计算值和偏差		N=600的差干涉图法 的计算值和偏差		N=2048FFT法 的计算值和偏差	
		计算值	偏差	计算值	偏差	计算值	偏差
1	58.83	56.93	1.90	58.55	0.28	58.70	0.13
2	60.35	59.69	0.66	60.30	0.05	60.33	0.02
3	78.65	78.68	0.03	78.73	0.08	78.59	0.06
4	80.12	80.37	0.25	80.13	0.01	79.96	0.16
5	98.40	98.13	0.27	98.54	0.14	98.31	0.09
6	99.86	100.04	0.18	99.84	0.02	99.88	0.02
7	118.11	117.84	0.27	118.12	0.01	118.10	0.01
8	119.47	119.75	0.28	119.51	0.04	119.10	0.37

4 噪声和谱线结构对分辨率和谱线位置预测精度的影响

我们设计了如下形式的高斯谱的模拟干涉图：

$$y_n = \sum_{j=1}^k e^{-\pi(n-N/2)^2(\Delta x)^2 a_j^2} \cos [2\pi\sigma_j(n - N/2)\Delta x] + e_n \quad (1)$$

式中， N 是取样点数， Δx 是取样间隔， a_j 是谱线宽度， σ_j 是第 j 条谱线的波数， e_n 是 高 斯 白 噪 声。通 过 改 变 噪 声 电 平、谱 线 条 数 及 各 条 谱 线 的 间 距、可 以 分 析 它 们 对 LS 法 的 分 辨 率 和 预 测 误 差 的 影 响。

4.1 噪声和谱线结构对分辨率的影响

利用式(1)的模拟干涉图，取 $N=128$ 、 $\Delta x=0.004\text{cm}$ 、 $a_j=0$ ，并选取不同的噪声电平和谱线结构，用LS法进行预测 ($p=48$) 找出所能达到的极限分辨率，结果如图3所示。由图可见，仅有两条谱线时分辨率最高，随着谱线的增多，分辨率下降。并且，谱线相邻较近时(实线)比相邻较远时(虚线)分辨率下降得要快得多。因此，实验中为保证较高的分辨率，应尽量减少测量谱段内的谱线条数。这可用光学滤波器或电子滤波器来解决。另外，由图可见，噪声对分辨率也有很大的影响。

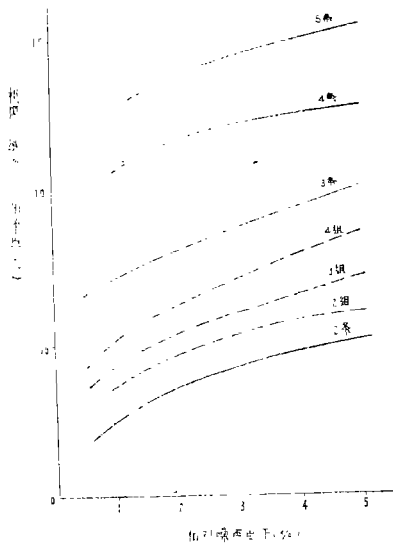


图3 噪声电平和谱线结构对LS法分辨率的影响
 实线：各条谱线等间隔
 虚线：每组包含两条谱线，各组相间10个分辨率单元，各组中两条谱线间隔相同

Fig.3 The effects of noise levels and spectral line constructions on the resolution
 solid line: spectrum consists of several close equi-interval lines
 desh line: the interval between groups is 10 resolution units

4.2 谱线间距和噪声对谱线位置预测精度的影响

利用式(1)的模拟干涉图，取 $N=128$ ， $\Delta x=0.004\text{cm}$ ， $a_j=0$ 、 $k=3$ ，固定相对噪声电平为 1%，改变谱线间距，计算预测误差。计算结果表明，随着谱线间距的增大，预测误差不断减小。固定谱线间距为 1 个分辨率单元，改变相对噪声电平，计算预测误差。结果表明，噪声越小，预测误差也越小。

5 结 论

本文提出的新方法可以有效地提高付里叶变换谱的分辨率和谱线位置的预测精度,而且还可大大简化数据处理的过程,但是,必须选择适当的光学滤波器或设计合适的电子滤波器,以便滤出感兴趣的谱段。

参 考 文 献

- [1] Kawata S et al., *Appl. Opt.*, 22 (1983) 3593
- [2] Minami K et al., *Appl. Opt.*, 24 (1985) 162
- [3] 张光昭等, *波谱学杂志*, 3 (1986), 4, 403
- [4] 张光昭等, *波谱学杂志*, 4 (1987), 3, 275
- [5] 谢泽明等, *中山大学学报(自然科学版)*, 1988, 2, 55
- [6] Makhoul J, *Proc. of the IEEE*, 63 (1975), 561
- [7] Marple L, *IEEE Trans. ASSP*, ASSP-28 (1980), 441
- [8] Uzbek S et al., *J. of Molecular Spectroscopy*, 88 (1981), 239

A New Method of Realizing the Super-resolution Fourier Transform Spectrum

Zhou Guangqun* Zhang Guangzhao

Abstract

A new method of realizing the super-resolution Fourier transform spectrum is presented. The background and sample interferogram are measured respectively with an optical or electronical filter, then the sample interferogram is subtracted from the background interferogram to get the pure sample transmission interferogram, which is finally processed with the autoregressive spectrum estimation. Compared with the two-step spectrum estimation, the new method reduces the information loss and distortion, and improves the accuracy of the spectral peak frequency estimation. The experimental results show that the resolution of this new method is about 4 times as high as that of the FFT method. The effects of the structure of spectral lines and noise on the resolution and accuracy of the spectral peak frequency estimation are discussed.

Keywords super-resolution, Fourier transform spectrum, autoregressive spectrum analysis

*Department of Radio and Electronics