

文章编号: 1001-3806(2018)02-0196-05

一种改善成像光谱仪光谱检测能力的新方法

曾言, 曾延安*, 张南洋生, 赵宇, 龙建明
(华中科技大学 光学与电子信息学院, 武汉 430074)

摘要: 为了改善成像光谱仪的检测能力,在不改变硬件结构的情况下,采用光谱细化最优化的新方法,利用液晶可调谐滤光片式成像光谱仪,取得了入射光近似光谱数据,进行了理论分析和实验验证。结果表明,在3组数值仿真数据中,相较于成像光谱仪测量光谱,该方法得到的近似光谱与入射光真实光谱的光谱强度差的标准差分别减小了79.3%, 68.3%和58.8%;在两组实验数据中,标准差分别减小了84.4%和60.7%;求解得到的近似光谱与入射光真实光谱的近似程度得到了显著提高,较好地分离了相隔较近的光谱峰。这一研究改善了成像光谱仪的光谱检测能力。

关键词: 光谱学;光谱分辨率;最优化方法;成像光谱仪

中图分类号: O433.1 文献标志码: A doi:10.7510/jgjs.issn.1001-3806.2018.02.011

A novel method to improve spectral detection capability of imaging spectrometers

ZENG Yan, ZENG Yan'an, ZHANG Nanyangsheng, ZHAO Yu, LONG Jianming

(School of Optics and Electronics Information, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: In order to improve spectral resolution of an imaging spectrometer without changing its hardware structure, a novel method of spectral refinement was adopted. An imaging spectrometer with liquid crystal tunable filter was used to obtain the approximate spectral data of the incident light for theoretical analysis and experimental verification. In three sets of numerical simulation data, the standard deviations of the spectral intensity difference between the approximate spectra and the true spectral were reduced by 79.3%, 68.3% and 58.8%, compared with the spectra measured with an imaging spectrometer. In two sets of experiment data, the standard deviations were decreased by 84.4% and 60.7%. The results show that the approximation degree between the approximate spectrum and the real spectrum of the incident light is improved and the spectral peaks are separated very well. It is helpful to improve the spectral detection capability of imaging spectrometers.

Key words: spectroscopy; spectral resolution; optimization method; imaging spectrometer

引言

全视场光谱数据的采集为遥感、生物医学、农业、食品检验和物证提取等领域中改善目标分析识别能力的基础之一^[1],而兼具成像和光谱检测功能的成像光谱仪则是获取目标多光谱数据立方体的重要仪器。在保持一定成像视场情况下,提高全视场光谱分辨能力是成像光谱仪研发及应用中被持续关注的问题。近年来,随着液晶技术和固体成像器件的快速发展,以液晶可调谐滤光片(liquid crystal tunable filter, LCTF)为核心的成像光谱仪得到了广泛的研究和应用^[2-5]。由于LCTF的电调谐分光原理,LCTF成像光谱仪的光谱检

测能力受到LCTF透过率特性的影响,成为制约其应用的关键问题。

改善光谱仪光谱检测能力是光谱检测仪器发展过程中不断被追求的目标,新技术、新方法不断涌现,例如基于Fourier变换光谱仪的反卷积方法、最大熵方法和线性预测技术等^[6-13]。反卷积方法是直接基于Fourier变换,通过反卷积系数消除光谱变换中的线型函数,以获得无限细的光谱数据。基于自回归模型谱估计方法的最大熵方法和线性预测技术是实现Fourier变换光谱仪超分辨率的重要手段^[6]。这些方法大都针对Fourier变换光谱仪分光原理进行研究,而对成像光谱仪光谱检测能力的改善方法目前尚鲜见公开文献报道。由于透过率函数随中心波长改变,LCTF成像光谱仪的采样过程采用的是非均匀的采样窗口,即不同透过率函数对实际光谱曲线的变窗口卷积过程。这种变窗口卷积过程给传统的反卷积方法带来挑战。

作者简介:曾言(1992-),男,硕士研究生,主要从事多光谱图像采集及分析的研究。

* 通讯联系人。E-mail: zya401@hust.edu.cn

收稿日期:2017-03-30;收到修改稿日期:2017-05-17

作者针对 LCTF 透过率特性对成像光谱仪光谱检测能力的影响,根据其分光原理建立了 LCTF 成像光谱仪光谱检测模型,参考传统光谱仪数据处理中的反卷积方法,利用最优化原理提出了一种适用于 LCTF 成像光谱仪光谱检测的改进反卷积方法。通过理论仿真及对成像光谱的实验测试,验证了该方法能够有效地改善 LCTF 成像光谱仪光谱检测能力。

1 理论模型

成像光谱仪中分光器件的特性是影响其光谱检测能力的关键因素。作者首先利用 LCTF 器件的光谱透过率特性建立 LCTF 成像光谱仪光谱检测的数学模型。LCTF 的分光原理是基于向列液晶材料的双折射现象,以电压控制改变其利奥波片组件的双折射特性,实现其光谱透过率可调谐^[4-5]。如果仅以调谐波长所对应的输出光谱分布为采样值,拟合 LCTF 成像光谱仪的光谱输出分布,由于 LCTF 光谱透过率函数对入射光谱的卷积作用,成像光谱仪的输出光谱与入射光谱相比,会降低对光谱细节的分辨。因此,利用成像光谱仪获得的采样输出光谱分布反求入射光谱是改善其光谱检测能力的主要方法之一。

1.1 LCTF 成像光谱仪的光谱检测模型

就成像光谱仪的分光工作原理而言,通过已知测量光谱和仪器函数反求入射光输入光谱是一个抽样恢复问题,是典型的数学物理反问题。在解决该类问题时,需要先建立入射光输入光谱与输出光谱间关系的数学模型。理想情况下,成像光谱仪测量波长为 λ 处的光谱强度 $E_i(\lambda)$ 是入射光输入光谱在波长 λ 处的取值,考虑到由分光器件特性决定的仪器函数,由成像光谱仪得到的光谱强度 $E_o(\alpha)$ 是一个与中心波长 α 有关的积分值,即:

$$E_o(\alpha) = \int_{\lambda_2}^{\lambda_1} E_i(\lambda) T(\lambda, \alpha) d\lambda \quad (1)$$

式中,积分区间 $[\lambda_1, \lambda_2]$ 表示的是 LCTF 的透过率窗口, $T(\lambda, \alpha)$ 为透过率函数,其形式取决于光谱仪的分光器件。对应 LCTF 成像光谱仪而言,透过率函数取决于 LCTF 的光谱透过率,然而生产商通常并未提供器件的光谱透过率函数。因此,本文中采用了 AvaSpec 公司的商用光纤光谱仪对其光谱透过率进行测量,拟合得到了每一中心波长下透过率函数的解析形式为:

$$T(\lambda, \alpha) = A \exp \left[\frac{-(\lambda - \mu)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (2)$$

式中, A, μ, σ 为参量,在每一中心波长 α 下均有不同的取值,在 720nm ~ 980nm 中心波长的透过率测量范围内, A, μ, σ 与中心波长 α 的关系可以用一次或二次多项式拟合。利用 AvaSpec 光纤光谱仪测得的 LCTF 在 720nm ~ 980nm 调谐波长下 1nm 的波长间隔的光谱透过率曲线,均表现为高斯函数曲线形式,如图 1 所示。

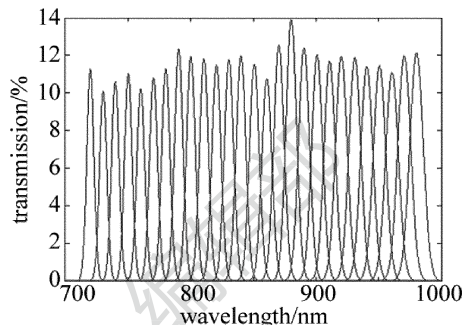


Fig. 1 Relationship between transmission and wavelength of LCTF

在 LCTF 的光谱透过率函数 $T(\lambda, \alpha)$ 确知的情况下, LCTF 成像光谱仪的测量过程即是对 (1) 式的一个求解过程,显然该求解过程是一个反卷积过程。(1) 式属于第 1 类 Fredholm 积分方程^[14],此类方程通常是不适定的。对于 LCTF 成像光谱仪而言, (1) 式中 $T(\lambda, \alpha)$ 经实测形式为高斯函数,易证 (1) 式的解,即所求入射光谱分布,具有存在性,但定解问题需要引入额外约束条件^[14]。考虑到 LCTF 成像光谱仪对调谐波长下光谱分布测量值反映了入射光场的光谱信息,因而本文中以其作为约束条件,采用正则化方法将 (1) 式的求解问题转换为可稳定求解的近似问题,在偏差允许的范围内可用近似问题的解代替原问题的解,也即求解出入射光场的光谱分布。相比于通过 LCTF 成像光谱仪测得的调谐波长下的光谱数据 $E_o(\alpha)$ 而言,该方法所求得的入射光谱近似解与实际入射光谱之间的偏差较小。近似光谱与入射光谱的接近程度衡量了该方法对实际入射光谱的分布 $E_i(\lambda)$ 的逼近程度,反映了该方法对 LCTF 成像光谱仪光谱检测性能的改善。

1.2 采用先验约束的正则化求解方法

截断奇异值分解(truncated singular value decomposition, TSVD)正则化方法是解决第 1 类 Fredholm 积分方程求解的常用方法^[15],它把积分方程求解问题转换为最优化解问题^[16],通过调整系数矩阵完成正则化近似求解,需将 (1) 式中的光谱测量积分方程离散化为矩阵形式:

$$E_o = TE_i \quad (3)$$

式中,矩阵核函数 T 为 LCTF 的光谱透过率函数离散

化得到的。经验证直接利用 TSVD 方法所得近似解与入射光光谱的偏差较大,且解的稳定性不佳。作者参考 TSVD 正则化方法的最优化求解过程,考虑入射输入光谱与该方法近似光谱解的一致性作为约束条件,提出了一种采用了先验约束的正则化求解方法。新方法设输出光谱 E_o 插值为 E_o' ,使 E_o' 向量长度与所求输入光谱 E_i 向量长度保持一致,以 β 为正则化参量定义正则化项 $\beta \|E_i - E_o'\|$,则由(1)式转换而来的最优化问题可以表述为 $\min_{E_i'} \{ \|E_i'\|_2 \}$ 满足 Γ 的最小值:

$$\Gamma = \sum_{\alpha=\lambda_1, t=10}^{\lambda_2} \left[\left\| \sum_{\lambda=\lambda_1, t=1}^{\lambda_2} E_i'(\lambda) T(\lambda, \alpha) t - E_o(\alpha) \right\|^2 + \beta \|E_i'(\lambda) - E_o'(\alpha)\|^2 \right] \quad (4)$$

式中, $E_i'(\lambda)$ 表示入射光输入光谱的近似解, t 代表的是近似光谱解的离散化步长,通过调整离散化步长增加 $E_i'(\lambda)$ 的向量长度,使 $E_i'(\lambda)$ 相较 $E_o(\alpha)$ 更为细化,使得求解 LCTF 光谱测量过程的积分方程问题转化为了一个可以稳定求解的最优化求解问题。求解过程如下,令

$$T = t \begin{bmatrix} T_{\alpha_1, \lambda_1} & \cdots & T_{\alpha_1, \lambda_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{\alpha_m, \lambda_1} & \cdots & T_{\alpha_m, \lambda_n} \end{bmatrix}, E_i' =$$

$$[\lambda_1 \cdots \lambda_n]^T, E_o = [\alpha_1 \cdots \alpha_m]^T, (4) \text{ 式转换为:}$$

$$\Gamma = \|TE_i' - E_o\|^2 + \beta \|E_o' - E_i'\|^2 \quad (5)$$

令:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial E_i'} = T^T(TE_i' - E_o) + \beta(E_i' - E_o') = 0$$

则输入光谱最优化近似解为:

$$E_i' = (T^T T + \beta I)^{-1} (T^T E_o + \beta E_o') \quad (6)$$

式中, I 为单位矩阵。由于正则化项的引入, (6) 式中的 $(T^T T + \beta I)$ 矩阵可逆, 则该式能够稳定求解。所得近似解 E_i' 与输入光谱 E_i 的近似程度由正则化参量 β 决定; (6) 式中的 T 是透过率函数矩阵与参量 t 的乘积, t 决定了近似光谱 E_i' 的向量长度, 反映了 E_i' 的细化程度, β 和 t 可由数值仿真中最优化近似解与输入光谱的逼近程度决定。

2 实验结果与分析

为了验证上述 LCTF 成像光谱仪光谱检测模型和采用先验约束条件的正则化求解方法, 在实测 LCTF 光谱透过率曲线基础上, 以模拟光谱输入的数值仿真验证正则化求解方法的可行性, 确定正则化参量 β 和离散化步长 t , 并采用氙卤连续谱光源和汞氩光源进行实验验证。

2.1 数值仿真

选用 CRi 公司的 VariSpec 近红外型 LCTF 作为成像光谱仪分光器件进行数值仿真和实验验证, LCTF 的波长调谐分辨率为 10nm, 其实测光谱透过率函数 $T(\lambda, \alpha)$ 如图1所示。以 MATLAB 仿真生成入射光光谱数据模拟光谱检测模型输入, 以(1)式生成仿真光谱测量值, 后利用 $T(\lambda, \alpha)$ 求解入射光光谱近似解, 并与仿真入射光光谱对比以确定采用该 LCTF 时的正则化参量 β 和离散化步长 t 。数值仿真的输入光谱数据采用分离双峰、重叠双峰、重叠三峰 3 种形式, 由于一般光谱曲线符合高斯函数形式, 因此, 仿真输入光谱曲线应为高斯峰 $f(\lambda)$ 、基线漂移 $g(\lambda)$ 、随机白噪声 $k(\lambda)$ 3 种成分合成的结果^[17], 即:

$$E_i(\lambda) = f(\lambda) + g(\lambda) + k(\lambda) \quad (7)$$

$$\begin{cases} f(\lambda) = a_0 \exp\left[-\frac{(\lambda - b_0)^2}{2c_0^2}\right] + a_1 \times \\ \exp\left[-\frac{(\lambda - b_1)^2}{2c_1^2}\right] + a_2 \exp\left[-\frac{(\lambda - b_2)^2}{2c_2^2}\right] \\ g(\lambda) = g_0 + g_1 \lambda + (g_2 \lambda)^2 \\ k(\lambda) = k_0 N_w(\lambda) \end{cases} \quad (8)$$

式中, 不同下标的 a, b, c, g, k 均为生成光谱的参量常数; $N_w(\lambda)$ 为白噪声函数。仿真输入光谱与仿真测量光谱分别为图 2a ~ 图 2c 中的实线与虚线。根据 LCTF 成像光谱仪光谱检测模型和采用先验约束条件的正则化求解方法过程, 考虑到入射光输入光谱与正则化方法的近似解光谱的一致性这一先验约束条件, 取 $t=5$, $\beta=0.001$, 其它取值验证过程冗长, 这里不再赘述。对于 3 种形式输入光谱, 以(6)式求得的光谱近似解如图 2d ~ 图 2f 所示, 图中实线为入射光光谱, 虚线为本文中方法所得光谱近似解。图 2a 和图 2d 中双峰间隔为 100nm, 模拟大间隔分离双峰输入; 图 2b、图 2e 与图 2c、图 2f 为峰间隔 10nm 的重叠双峰和重叠三峰输入, 模拟具有一定精细结构的待测输入光谱。对比图 2 中 3 种形式输入下的输入光谱近似解曲线可见, 先验约

Table 1 Comparison of standard deviation of spectral intensity difference after numerical simulation

	standard deviation of difference between $E_i(\lambda)$ and $E_o(\alpha)$	standard deviation of difference between $E_i(\lambda)$ and $E_i'(\lambda)$
bimodal (non-overlapping) spectrum	6.28×10^3	1.30×10^3
bimodal (overlapping) spectrum	5.02×10^3	1.59×10^3
tri-peak spectrum	5.20×10^3	2.14×10^3

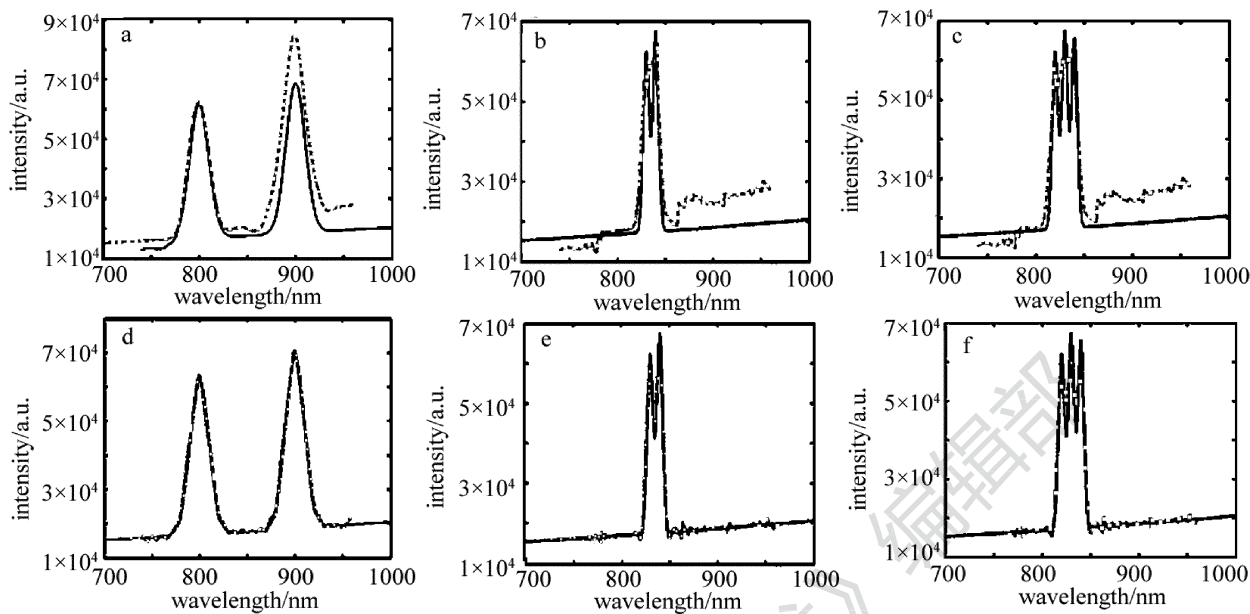


Fig. 2 Simulation results
a ~ c—the original data d ~ f—the algorithm-modified data

束条件正则化方法求解所得光谱与输入光谱的接近程度得到了显著改善。光谱边缘处的震荡现象并非输入光谱中噪声导致,是由于有限数据数值迭代求解的普遍现象。作者以光谱强度差的标准差衡量仿真结果中光谱近似解与模拟输入光谱的吻合程度,表 1 中给出了光谱强度差的标准差对比,显见采用先验约束条件正则化方法的近似解更为接近真实光谱。

2.2 实验验证

在数值仿真基础上,以气卤混合 (deuterium-halo-

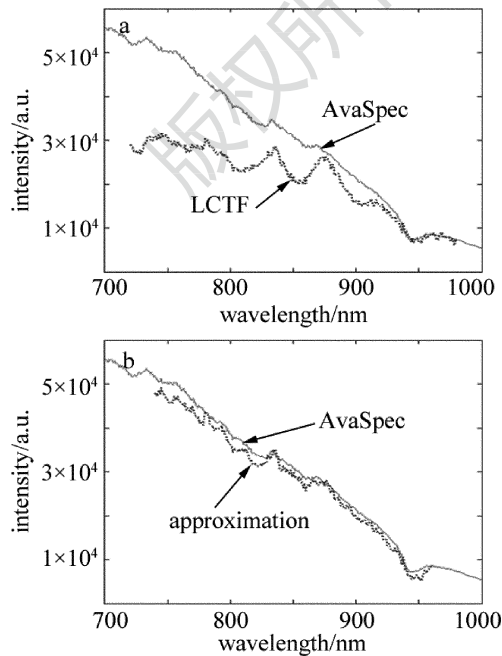


Fig. 3 Experimental results with the continuous spectrum(DHc)

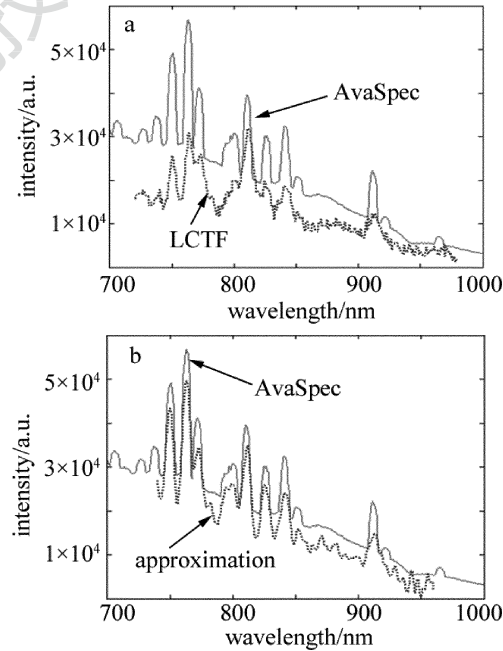


Fig. 4 Experimental results with the coupled spectrum(DHc + CAL)
Table 2 Comparison of standard deviation of spectral intensity difference after experiment

	standard deviation of difference between $E_i(\lambda)$ and $E_o(\alpha)$	standard deviation of difference between $E_i(\lambda)$ and $E_i'(\lambda)$
the continuous spectrum	6.68×10^3	1.04×10^3
the coupled spectrum	5.91×10^3	2.32×10^3

gen combined, DHc) 光源作为连续光谱输入,以 DHc 光源与汞氩校准用 (calibration, CAL) 光源耦合后的混合光源作为分离光谱输入,实验验证了 LCTF 成像光

谱仪光谱测量模型与先验约束条件正则化方法的有效性,所得实验结果分别如图 3 和图 4 所示,两次实验光谱强度差的标准差对比见表 2。采用 AvaSpec 光纤光谱仪测得的输入光谱曲线如图 3、图 4 中实线所示。经 LCTF 成像光谱仪后的光谱测量值如图 3a、图 4a 中虚线所示。利用光谱测量值和对应调谐波长的 $T(\lambda, \alpha)$,以先验约束条件正则化方法进行求解,光谱近似解曲线如图 3b、图 4b 中虚线所示。

实验结果分析可见,通过先验约束条件正则化方法解得的 $E_i'(\lambda)$ 与直接光谱测量值 $E_o(\alpha)$ 相比更吻合输入光谱 $E_i(\lambda)$ 。特别是采用 DHc 光源作为输入时,对于利用 LCTF 成像光谱仪直接进行光谱检测中存在的被误识别的光谱峰,本文中方法的光谱近似解结果与原始输入光谱更为吻合;对于 DHc 光源与 CAL 光源耦合后的光源光谱,多个因相隔较近而未测量出的光谱峰在经算法改进后变为可分离状态,说明该算法对于改善 LCTF 成像光谱仪光谱检测能力有较好的效果。

3 结 论

LCTF 成像光谱仪的光谱检测能力受到 LCTF 光谱透过率特性制约,为了改善其光谱检测性能,本文中利用 LCTF 光谱透过率特性建立了光谱检测过程的数学模型,进而依据 LCTF 成像光谱仪的光谱测量值及 LCTF 的光谱透过率特性函数,基于最优化原理提出了反求入射光光谱的先验约束条件正则化方法求解方法。作者随后设计了数值仿真与实验测试,采用模拟输入光谱的数值仿真证实了该方法对于解决入射光输入光谱分布反求问题具有显著效果,并通过对不同光源成像光谱的实验测试进一步验证了该方法能够有效改善 LCTF 成像光谱仪的光谱检测能力。先验约束条件正则化方法求解方法不仅为改善 LCTF 成像光谱仪光谱检测能力的研究提供了新思路,还对其它分光方式的成像光谱仪光谱检测能力的改善有一定的参考价值。

参 考 文 献

[1] ZHENG C Y, GUO Zh H, JIN L. Measurement of total viable count

on chilled mutton surface based on hyper spectral imaging technique [J]. Laser Technology, 2015, 39(2): 284-288(in Chinese).

[2] DU P Sh, GUO J, DONG Q M. Application of liquid crystal tunable filter in multispectral imager[J]. Infrared, 2007, 28(11):4-8(in Chinese).

[3] SU L J. Study on the beam splitting technology of the imaging spectroscopy[D]. Xi'an: Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics of the Chinese Academy of Sciences,2006: 37-56(in Chinese).

[4] KOPP G, DERKS M, GRAHAM A. Liquid crystal tunable birefringent filters[J]. Proceedings of the SPIE, 1996, 2830:345-350.

[5] MILLER A P J, HOYT C C. Multispectral imaging with a liquid crystal tunable filter[J]. Proceedings of the SPIE, 1995, 2345:354-365.

[6] DONG Y. Study on resolution enhancement of Fourier transform spectroscopy[D]. Xi'an: Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics of the Chinese Academy of Sciences, 2001:17-38(in Chinese).

[7] DONG Y, XIANG L B, ZHAO B Ch. Theoretical study on Fourier self-deconvolution (FSD) of fourier transform spectrum [J]. Acta Photonica Sinica, 2002, 31(7): 841-846(in Chinese).

[8] WEI H L, WU Ch J, MA Zh J, *et al.* A new method for improving the measurement spectral resolution of atmospheric absorption spectra [J]. Acta Optica Sinica, 2002, 22(2): 165-169(in Chinese).

[9] KAWATA S, MINAMI K, MINAMI S. Superresolution of Fourier transform spectroscopy data by the maximum entropy method. [J]. Applied Optics,1983, 22(22):3593-3601.

[10] XIANG L B, ZHAO B Ch. A new method for supperresolution of Fourier transform spectra[J]. Acta Optica Sinica, 1995, 15(11): 1529-1533(in Chinese).

[11] KAUPPINEN J K, MOFFATT D J, HOLLBERG M R, *et al.* A new line-narrowing procedure based on Fourier self-deconvolution, maximum entropy, and linear prediction [J]. Applied Spectroscopy, 1991, 45(3):411-416.

[12] SU G, XU R, WANG J Y. Simulation of resolution enhancing algorithms for spectra measured by AOTF [J]. Infrared, 2016, 37(10):23-29(in Chinese).

[13] ZOU M Y. Deconvolution and signal recovery[M]. Beijing: National Defence Industry Press,2001: 32-42(in Chinese)

[14] WU H X. The study of numerical algorithms for Fredholm integral equations of the first kind[D]. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2008:21-32(in Chinese)

[15] LIANG F. Research on numerical solution methods for some inverse problems[D]. Shantou: Shantou University, 2010: 56-63(in Chinese)

[16] NOCEDAL J, WRIGHT S J. Numerical optimization[M]. Berlin, Germany: Springer, 2006: 8-13.

[17] FENG F, WANG F B, XIE F, *et al.* Implementation of spectral overlap resolution based on wavelet transforms and Gaussian fitting [J]. Acta Photonica Sinica, 2015, 44(6):630001(in Chinese).