

研究光谱线结构的新方法*

赵葆常 李春芳 薛鸣球

(中国科学院西安光学精密机械研究所)

1987年10月13日收到

通过求解积分方程式,从法布里-珀罗干涉仪(以下简称 F-P 干涉仪)的多光束干涉强度分布来复原高分辨光谱的尝试已经在理论上取得了成功^[1-3],但是在一般场合下求解这种积分方程是极不安定的,其耐噪声的能力约为 10^{-4} 数量级,所以要实现这种装置至少目前在技术上还有相当困难。本文用计算机模拟实验证明在某些特定的条件下,积分方程式的求解将变得相当安定,耐噪声的能力可以提高到 10^{-2} 数量级,使实现这种装置成为现实可能。

一、引 言

F-P 干涉仪具有高分辨本领和高集光本领的特点,因此一直受到光谱工作者的重视,广泛地用以研究超精细结构和测定一些离散光谱线的轮廓。近年来由于数字记录系统和数字计算机的飞速发展,又促进了 F-P 干涉光谱技术的研究。很多科学工作者就如何处理 F-P 干涉图以获得真实的物理光谱做了大量的工作^[1-6]。1985 年吉原邦夫、赵葆常、北出笃夫首先采用基于特征值分解的 Hilbert-Schmidt 法求解积分方程,获得了高分辨光谱的复原^[5]。1986 年冈田克彦、吉原邦夫和北出笃夫采用基本相同的方法来确定光谱线的轮廓同样也取得了成功^[7],但是因为没有充分注意到各参数的取值范围对积分方程式适定性的影响,所以耐噪声的能力没有突破性的提高。

本文通过大量计算机模拟实验证明,对于某个很窄的光谱范围,只要合理地选择各参数的取值范围,积分方程式的求解将可以变得相当安定。当我们在干涉强度分布中加入 10^{-2} 的随机噪声时,复原的光谱非常理想。

二、基 本 原 理

对于理想的 F-P 干涉仪,当光辐射垂直入射时,其输出光的强度分布 $I(x)$ 由下式给出:

$$I(x) = \int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} \frac{(1-R)^2}{1 - 2R \cos 2\pi\sigma x + R^2} B(\sigma) d\sigma, \quad (1)$$

式中 σ 为波数,单位为 cm^{-1} ; $B(\sigma)$ 为光谱强度分布; $\sigma \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$ 为所研究的光谱范围; x 为 F-P 干涉仪中两反射膜之间距离的二倍; R 为反射率。理论上 R 应该是波数 σ

* 国家自然科学基金资助的课题。

的函数,但由于我们在这里所研究的是一个很窄的光谱,所以可以把它看作为与波数无关的常数。

积分方程式(1)指出了 $I(x)$ 与 $B(\sigma)$ 之间的关系。我们的基本问题是由实验测量并记录 $I(x)$, 然后通过求解积分方程式来得到 $B(\sigma)$ 。我们把这种处理称为复原,这样得到的光谱称为复原光谱。

三、数学处理与困难

求解积分方程式通常采用数值方法。在计算机模拟实验中我们首先假设某个任意的光谱 $B(\sigma)$, 并用高精度数值积分由 $B(\sigma)$ 求得 $I(x)$, 这在计算上可以做得十分精确且不存在任何困难。在由 $I(x)$ 复原光谱时采用求解离散化的线性代数方程组的方法。为了探讨其安定性,我们采用一个乱数发生程序,在 $I(x)$ 中加入了各种不同量级的随机误差并调查它们对复原光谱的影响。

为了说明方程的不安定性。我们先作如下的代换:

令

$$K(x, \sigma) = \frac{(1 - R)^2}{1 - 2R \cos 2\pi\sigma x + R^2}, \quad (2)$$

则(1)式可改写成如下形式:

$$I(x) = \int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} K(x, \sigma) B(\sigma) d\sigma. \quad (3)$$

它的算子方程式为

$$I = K \cdot B, \quad (4)$$

式中 K 为 $m \times n$ 阶系数矩阵且 $m \geq n$, I 与 B 为列矩阵。

因为方程式(1)属于 Fredholm 第一类积分方程,在一般情况下它是不适定的,其离散化的代数方程组也总是病态的,它的条件数常常大得惊人。不论采取何种数学手段总不能得到安定的解。其不安定性表现为如果 B 有一个幅度较大的扰动,经过算子 K 的作用仅在 I 中引起一个微不足道的变化 δI , 反之若在 I 中加入一个极小的误差(这在实际测定中是不可避免的),经过 K 的作用将引起 B 大幅度强烈的振荡。从而使得我们想从由实验测得的干涉强度分布来复原光谱的工作遇到了极大的困难。我们从调查在积分方程中各参量的取值范围对方程安定性影响出发,找到了某些规律。在求解上述积分方程的具体做法上,我们曾尝试了 Hilbert-Schmidt 法^[5], 截断奇导值分解法和直接联立方程式法,三者均能获得极满意的结果。

四、各参数之间的制约关系

设所研究的光谱之最大波数为 $\sigma_{\max}$, 最小波数为 $\sigma_{\min}$, 波数范围为 $\Delta\sigma = (\sigma_{\max} - \sigma_{\min})$; x 的最大值为 $x_{\max}$, 最小值为 $x_{\min}$, 变化范围为 $\Delta x = (x_{\max} - x_{\min})$; 干涉图采样间隔为 δx , 采样点数为 N ; 计算复原光谱时的光谱取样间隔为 $\delta\sigma$, 计算点数也为 N ; F-P

干涉仪的反射率为 R ; 等效光束数为 P_e 。

首先由反射率 R 根据下式确定等效光束数 P_e :

$$P_e = \frac{3.03 \sqrt{R}}{1 - R}. \quad (5)$$

下面,我们将按如下的关系式来确定各参量的取值:

$$N = 2P_e, \quad (6)$$

$$\delta\sigma = \frac{\Delta\sigma}{(n-1)}, \quad (7)$$

$$x_{\max} = \frac{1}{2P_e \cdot \delta\sigma}, \quad (8)$$

$$\sigma_{\min} = \frac{1}{2P_e \cdot \delta x}. \quad (9)$$

显然

$$x_{\min} = x_{\max} - (N-1)\delta x, \quad (10)$$

$$\sigma_{\min} = \sigma_{\max} - (N-1) \cdot \delta\sigma. \quad (11)$$

由(6)–(9)式我们还可以得到

$$x_{\max}\Delta\sigma = x_{\max}(\sigma_{\max} - \sigma_{\min}) \approx 1, \quad (12)$$

$$\sigma_{\max}\Delta x = \sigma_{\max}(x_{\max} - x_{\min}) \approx 1. \quad (13)$$

计算机模拟实验表明当各参数的取值近似满足上述关系时,方程组的解是极为安定的。

从数学上来看,在基本满足上述关系时,方程组的条件数都在 10 左右。表 1 给出了反射率 R ,有效光束数 P_e 。方程个数 N 以及相应的条件数 cond 。

表 1 $x \in [10, 10.01]$ $\sigma \in [100, 100.1]$

反射率 R	0.8	0.9	0.927	0.963
有效光束数 P_e	13.5	29	40	80
方程个数 N	28	58	80	160
条件数 cond	11.4	10.6	10.4	10.3

表 2 $x \in [10, 10.01]$, $\sigma \in [100, 100.1]$, $N = 80$

反射率 R	0.8	0.9	0.927	0.963
条件数 cond	3.7×10^4	33.8	10.4	2.37

在表 2 与表 3 给出了偏离上述关系时条件数的变化情况,从这些数据可以看出当 $N > 2P_e$ 时条件数迅速增大,方程组的安定性变坏。而当 $N < 2P_e$ 时,条件数减小,这对求解方程是有利的。但降低了复原光谱的分辨本领。所以没有采用价值。

表 3 $x \in [10, 10.01]$, $\sigma \in [100, 100.1]$, $R = 0.927$

方程个数 N	40	60	80	160
条件数 cond	3.0	4.9	10.4	2.2×10^2

五、计算机模拟实验

为了证实上述结论的普适性,我们曾做了大量的计算机模拟实验.

图 1(a)–(d) 为 $R = 0.953$, $P_c \approx 63$, 方程个数 $N \approx 2P_c \approx 128$, $\sigma_{\min} = 100\text{cm}^{-1}$, $\sigma_{\max} = 100.1\text{cm}^{-1}$, $\Delta\sigma = 0.1\text{cm}^{-1}$, $\delta\sigma = 0.0007874\text{cm}^{-1}$; $x_{\min} = 10\text{cm}$, $x_{\max} = 10.01\text{cm}$, $\Delta x = 0.1\text{cm}$, $\delta x = 7.874 \cdot 10^{-3}\text{cm}$, $\text{cond} = 10.9$. 图 1(d) 中曲线 1 为最大光程差为 640cm 时的复原光谱, 曲线 2 为最大光程差为 10cm 时的复原光谱, 同样在干涉强度分布中加入了 10^{-2} 的噪声. 比较(c)与(d)我们可以看出为了达到相同的分辨, 其最大光程差竟相差 64 倍. 图 2 给出了一个发射双谱线的例子, $R = 0.963$, $P_c = 80$, $N = 2P_c = 160$. 而在图 3, 在我们假设的原光谱中加入了四条吸收线且 $R = 0.927$, $P_c = 40$, $N = 2P_c = 80$, 光谱与干涉图的取值范围均为 $\sigma \in [100, 100.1]$ 及 $x \in [10, 10.01]$, 同样复原时在干涉强度分布中都加入了 10^{-2} 的随机噪声, 我们可以看到复原都是极为理想的. 在上面三个例子中基本上都满足了 $N = 2P_c$ 的条件, 但是在有些情况中, 对于 $N > 2P_c$ 也可以获得很好的复原, 在图 4(a)–(c) 给出了这样一个例子, 在这个计算机实验中取 $R = 0.9$, $N = 80$, 它等于 2.75 倍的有效光束数. 光谱与干涉图的取值范围同前例, 与前三个例子

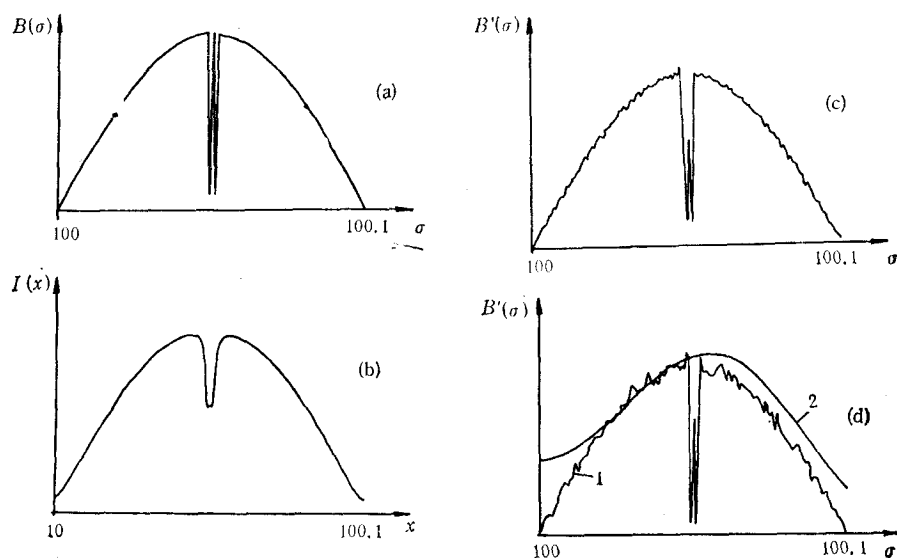


图 1 (a) 假设原光谱 $B(\sigma)$, $\sigma \in [100, 100.1]$; (b) 干涉图 $I(x)$, $x \in [10, 10.01]$; (c) 在干涉强度分布中加入 10^{-2} 的随机噪声后的复原光谱 $B'(\sigma)$, (d) FFT 的复原光谱(加入了 10^{-2} 的噪声)

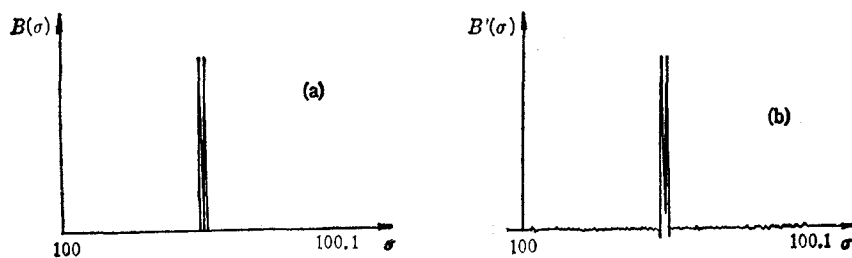


图2 $x \in [10, 10.01]$; (a) 假设的原光谱 $B(\sigma)$, $\sigma \in [100, 100.1]$;
(b) 在干涉强度分布中加入了 10^{-2} 的随机噪声后的复原光谱

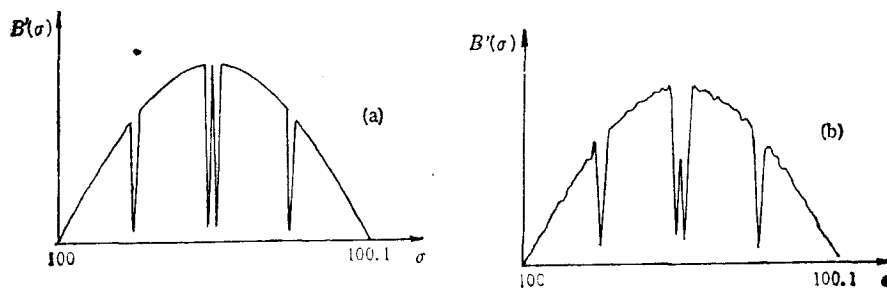


图3 (a) 假设的原光谱 $B(\sigma)$, $\sigma \in [100, 100.1]$, (b) 当噪声为 10^{-2} 时的复原光谱

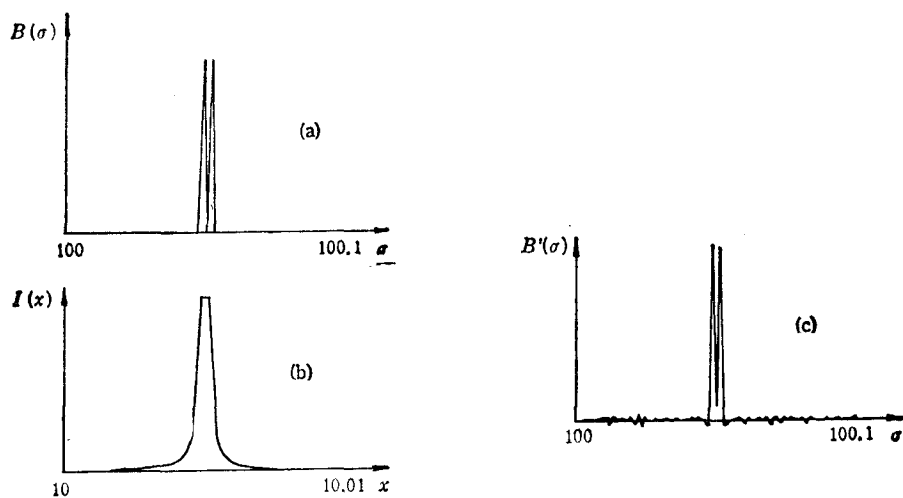


图4 (a) 假设的原光谱 $B(\sigma)$, $\sigma \in [100, 100.1]$; (b) 干涉图 $I(x)$, $x \in [10, 10.01]$;
(c) 当噪声为 10^{-2} 时的复原光谱

相比, 看不出复原光谱有非常明显的恶化。但是当反射率 R 增大时我们就很难在 $N = 2.75P_0$ 的条件下获得满意的复原。我们认为 $N = 2P_0$ 只是当噪声为 10^{-2} 且不作任何特征值截断时方程个数的下限。在上面四个例子中均没有作特征值截断处理。

六、结 束 语

从 F-P 干涉仪的多光束干涉强度分布来复原高分辨光谱的研究经过很多学者的努力已经取得了长足的进步,但至今问题并未彻底解决,追究其原因主要是数学处理上的困难,所以至今仍停留在理论方面的探索.我们感到任何一项研究最终的目的应该归于实际的应用,本文为 F-P 干涉光谱技术的实际应用提供了一种有价值的方法.

此外,通过上面的例子可以看出与传统的用 F-P 干涉仪来研究光谱线的精细结构相比,我们的方法至少有如下二方面的优点:

(1) 用传统方法我们观察到的并不是真实的光谱,而是形状相似的干涉强度分布,而经上述处理后才是真实的光谱图.

(2) 在原干涉图上不能被分辨的细节在复原光谱中得到了极好的分辨.

- [1] V. G. Cooper, *Appl. Opt.*, **10**(1987), 523.
- [2] D. M. Zipoy, *Appl. Opt.*, **18**(1979), 1988.
- [3] P. B. Hays and R. G. Roble, *Appl. Opt.*, **10**(1971), 193.
- [4] 吉原邦夫,北出笃夫,分光研究, **29**(1980) 173.
- [5] K. Yoshihara, B. C. Zhao and A. Kitade, *Jap. J. Appl. Phys.*, **24**(1985), L207.
- [6] K. Yoshihara and B. C. Zhao, *Jap. J. Appl. Phys.*, **24**(1985), L575.
- [7] K. Okada, K. Yoshihara and A. Kitade, *Jap. J. Appl. Phys.*, **25**(1986), L918.

A NEW METHOD FOR STUDING THE SPECTRAL LINE STRUCTURE

ZHAO BAO-CHANG LI CHUN-FANG XUE MING-QIU

(Xian institute of optics and precision mechanics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The attempt to reconstruct high resolution spectrum using the interferogram of the Fabry-Perot interferometer has been achieved theoretically by solving an integral equation. But ordinarily, the solution of the equation is unstable. It is necessary to keep the antinoise ability at a level of 10^{-4} . At present, it is very difficult to manufacture such a device, which attains this level. It is demonstrated by using computer simulation experiments that solving of the equation will become rather stable under certain conditions and the antinoise ability can be enhanced to 10^{-2} . This result makes it possible to develop a satisfactory device.