

## 盲目反卷积光谱图超分辨复原算法

杨怀栋, 徐立, 陈科新, 黄星月, 何庆声, 谭峭峰, 金国藩

清华大学精密测试技术与仪器国家重点实验室, 北京 100084

**摘要** 反卷积是实现光谱图超分辨复原的重要手段, 与常规反卷积相比, 盲目反卷积具有不需要预先准确获取卷积核函数的优势。着眼于充分利用光谱信号的特点和已有的光谱图反卷积成果, 详细讨论了空域迭代盲目反卷积方法用于光谱图反卷积时的算法实现问题, 并在分析光谱图卷积退化过程的基础上, 针对光谱图反卷积算法特点, 提出了光谱图卷积退化简化计算模型和最小二乘高斯拟合模型, 以解决算法中相应的计算问题。基于 Matlab 平台的仿真表明, 对于所用的高斯型谱线和点扩散函数, 空域迭代盲目反卷积算法效果良好, 在信噪比为 50 dB 时, 分辨率提高约 30%。

**关键词** 光谱; 超分辨; 盲目反卷积

**中图分类号**: O433

**文献标识码**: A

**文章编号**: 1000-0593(2007)07-1249-05

### 引言

分辨率是光谱测量中至关重要的指标, 它表示将波长极为接近的谱线分开的能力, 反映光谱超精细结构测量的程度。两条相邻的光谱能否被分辨, 主要取决于观测到的两谱线的强度分布轮廓和它们的相对位置。当相对位置一定, 如色散率恒定时, 分辨率就主要取决于观测到的谱线强度轮廓了, 而谱线轮廓的增宽和畸变则成为导致分辨率下降的首要因素<sup>[1]</sup>。

有多种机制导致观测谱线轮廓增宽和畸变, 可归纳为内在因素和外在因素。内在因素有谱线的自然展宽、碰撞展宽和多普勒展宽等。外在因素有光谱仪器的衍射、孔径几何宽度、光学像差及其他不完善, 探测器和电路的低通特性等<sup>[2]</sup>。这些增宽和畸变因素的综合影响在研究中常常被归结为理想光谱线的卷积退化过程<sup>[3]</sup>。

为提高分辨率, 研究光谱的超精细结构, 人们提出了很多方法消除谱线的展宽和畸变。最直接的方法是针对它的各种来源, 从物理上消除, 如控制实验条件, 改进光谱仪器等。这些方法注重硬件的改进, 既受技术、设备、加工工艺, 使用环境等条件限制, 也不适合强调微小型、智能化和高性价比的场合。应运而生的是光谱图的超分辨复原技术。它注重发挥现代信号处理技术的优势, 强调通过深入挖掘现有光谱观测所含的信息来克服各种缺憾, 重现高分辨率的光谱图, 而针对理想光谱图卷积退化过程的光谱图反卷积方法则是它的重要分支<sup>[4]</sup>。常规的反卷积方法已取得了长足的进展, 研

究出了 Wiener 滤波、Jansson 迭代等方法<sup>[2]</sup>。这类方法要求卷积核函数(即表征退化特点的卷积因子, 也称为点/线扩散函数)已知, 可是通过理论分析或测量等手段准确获取卷积核函数并非易事。而且卷积核函数因仪器而异, 往往随使用环境、年限等变化, 这导致算法缺乏通用性, 限制了应用范围。盲目反卷积方法则不需要卷积核函数准确已知, 在这方面略胜一筹, 但光谱图盲目反卷积研究远不如常规反卷积成熟。邹谋炎等基于二变量多项式盲目分解问题的研究提出了空间域迭代盲目反卷积方法, 也在应用于光谱图盲目反卷积方面进行了初步的原理性尝试<sup>[5, 6]</sup>。着眼于光谱图反卷积的应用研究, 本文首先详细论述了光谱图迭代盲目反卷积的算法实现问题, 随后针对光谱图盲目反卷积的实际应用, 提出了光谱图卷积退化的简化计算模型和点扩散函数的高斯拟合方法, 并进行了基于 matlab 平台的算法仿真。

### 1 空域迭代盲目反卷积方法与算法实现

空域迭代盲目反卷积方法与常规反卷积方法不同之处在于, 它不需要事先确定卷积核函数, 而是从一个初始猜测开始, 迭代的估计两个卷积因子, 直到收敛, 方法的步骤如下:

由观测函数  $g$  估计一个卷积核函数的起始猜测  $h^{(0)}$ , 并开始以下迭代过程(其中  $k=0, 1, 2, \dots$ ):

(1) 依据  $g$  和  $h^{(k)}$  进行常规反卷积, 求出原函数的估计  $\hat{v}^{(k)}$ ;

收稿日期: 2006-02-13, 修订日期: 2006-05-16

基金项目: 国家自然科学基金项目(60378016, 60578002)和教育部科学技术研究重点项目(106014)资助

作者简介: 杨怀栋, 1976年生, 清华大学精仪系光学工程助理研究员 e-mail: yanghd@tsinghua.edu.cn



$$(F_b^{T(k)} F_b^{(k)} + \lambda \cdot I) h^{(k)} = F_b^{T(k)} s \quad (14)$$

其中  $\lambda$  为规整化参数,  $\lambda$  越大, 噪声抑制越明显, 信号细节复原程度也越低, 因此它应根据信号复原与噪声放大程度折中选择, 用于光谱时可由下式确定,

$$C = \frac{1}{N_o} \sum_{i=1}^{N_o} [d^{(k)}(i)]^2 \quad (15)$$

常数  $C$  ( $0.1, 0.5$ ), 根据信噪比选择, 信噪比越低, 取值越趋向  $0.5$ 。求解出增量  $h^{(k)}$  和新的点扩散函数  $h^{(k+1)} = h^{(k)} + \Delta h^{(k)}$  后, 应进一步进行高斯拟合, 以利充分抑制噪声。

(4) 迭代终止条件。寻找合适的判据, 结束迭代过程尤为重要。为此, 考察光谱图卷积退化过程,

$$g = o * h \quad (16)$$

若光谱真值已知, 那么当前估计与真值间的误差或误差变化率就是最可靠的判据, 如,

$$e_0 = o - \hat{o} \quad (17)$$

但除仿真外, 实际应用中真值都未知, 因此, 难以应用。另一选择是光谱观测值与所估计的等效退化光谱之间的误差或误差变化率, 如

$$e_1 = g - \hat{o} * \hat{h} = o * h - \hat{o} * \hat{h} \quad (18)$$

易见, 该误差取决于  $\hat{o}$  和  $\hat{h}$  组合, 不能表征  $o - \hat{o}$ , 而且由盲目反卷积过程知, 该误差对迭代过程不敏感, 因此不合理。还有一个选择就是各估计量之间的误差或误差变化率了, 如

$$e_2 = o^{(k)} - o^{(k-1)} \quad (19)$$

对于收敛的算法, 各估计间的误差或误差变化率一般会随迭代趋向极小。首先来考察各次物光谱估计值间的误差或误差变化率, 由于光谱曲线一般比较复杂, 难以用较简单而恰当的量衡量该误差或误差变化率, 不便作为判据。相比之下, 点扩散函数通常形式简单, 数据较少, 因此用点扩散函数估计间的误差或误差变化率作为判据, 是好的选择。如绝对和相对误差

$$e_3 = \hat{h}^{(k+1)} - \hat{h}^{(k)} \quad (20)$$

$$e_3 = \frac{\hat{h}^{(k+1)} - \hat{h}^{(k)}}{\hat{h}^{(k)}} \quad (21)$$

对于典型的光谱点扩散函数, 如高斯函数, 对反卷积结果影响最大的特征参数是半高宽, 因此可用高斯拟合后的半高宽相对误差来描述终止条件

$$e_4 = \left| \frac{\Delta h^{(k+1)}}{h^{(k)}} \right| \quad (22)$$

其中,  $h^{(k)}$  为  $k$  步迭代后的高斯点扩散函数半高宽。

至此, 已详细阐述了空域迭代盲目反卷积方法及其用于光谱时的关键步骤实现问题, 建立了光谱盲目反卷积算法的框架, 下面将进一步讨论算法的具体实现。

## 2 光谱卷积退化过程简化计算模型

注意观察 (1) 式和 (2) 式会发现无论是空域 Jansson 迭代算法, 还是频域 Wiener 滤波, 其输入与输出序列间总是一一对应的, 但通过 (5), (6) 式计算卷积后, 卷积结果长度就大于卷积因子, 破坏了对应关系, 导致后续运算无法继续进行。为解决该矛盾, 进一步分析光谱图卷积退化过程。光谱

图卷积退化过程是各理想光谱线向周围弥散为像斑后叠加的过程, 如图 1 所示。其离散情况计算式为

$$g(n) = \sum_{i=1}^{N_o} o(i) h(n-i), \quad n = 1, 2, \dots, N_o + N_h + 1 \quad (23)$$

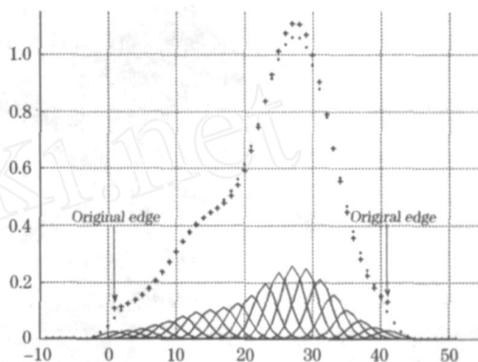


Fig 1 Schematic diagram of convolution degradation

+ : Object spectrum; o : Degrade spectrum;  
h : Point spread function

由图 1 所示光谱图卷积退化过程和离散卷积计算过程得知, 卷积使能量向边缘泄漏, 导致光谱展宽, 但由于点扩散函数通常很短, 主要能量还是集中于理想光谱所在区间, 泄漏的能量就可以忽略, 若设  $N_h$  为奇数, 且  $(N_h + 1)/2$  为点扩散函数序列的中心, 则卷积退化过程可近似为

$$g(n) = \sum_{i=1}^{N_o} o(i) h(n-i), \quad n = (N_h - 1)/2 + 1,$$

$$(N_h - 1)/2 + 2, \dots, N_o + N_h - 1 - (N_h - 1)/2 \quad (24)$$

显然 (24) 式是一个部分卷积, 其结果是舍弃了两翼展宽产生的额外数据, 这样观测数据和光谱真值或估计将一一对应。在反卷积算法中用 (25) 式所描述的模型计算光谱卷积, 就不再产生矛盾了。

盲目反卷积迭代步骤 2 中最小二乘拟合问题是基于完全卷积模型, 此时, 也应做相应的修改, 有

$$F = F((N_h + 1)/2 : (N_h - 1)/2 + N_o, :) \quad (25)$$

其中运算  $F(m:n, :)$  表示截取  $F$  的  $m$  至  $n$  行, 修改后的  $F$  将是  $N_h \times N_h$  维的方阵。

## 3 最小二乘高斯拟合

盲目反卷积算法中一个重要的环节是高斯拟合, 它是基于各种展宽因素的综合影响近似为高斯函数的假设。设  $h(n), n = 1, 2, \dots, N_h$  为点扩散函数序列, 则待拟合的高斯函数可以设为,

$$f(n, ) = \frac{1}{\sigma} \cdot e^{-\ln 2 \cdot (n - \mu)^2 / 3 \sigma^2} \quad (26)$$

其中  $\mu = [\mu_1, \mu_2, \mu_3]$  为待定参量, 易知  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$  将分别为所拟合高斯峰的峰高、中心和半高半宽 (HMHW), 可见采用该模型可以直接获得点扩散函数的特征参数, 为后续计算, 如终止条件的判定提供便利, 从而提高算法效率。进一步设拟

合误差为，

$$J(\alpha) = \sum_{n=1}^{N_h} |h(n) - f(n, \alpha)|^2 \quad (27)$$

则高斯拟合问题可表示为如下的优化模型，

$$\min_{\alpha} J(\alpha) = \sum_{n=1}^{N_h} |h(n) - f(n, \alpha)|^2 \quad (28)$$

显然，这是非线性最小二乘拟合问题，可用牛顿法等求解。模型 (26) 的一种近似是，首先求出  $h$  的元素最大值，认为它就是待拟合高斯曲线的峰高，并将峰高归一化后进行拟合。设序列最大点  $h_{\max} = h(n_0)$ ，则按该值归一化后的新序列为

$$h_1 = h / h_{\max} \quad (29)$$

此时可设待拟合高斯函数为

$$f_{(1)}(n, a) = e^{-a \cdot (n - n_0)^2} \quad (30)$$

其中  $a$  为唯一待定参数，对 (31) 式两边取对数后，可将非线性拟合转化为线性拟合问题，有

$$\min_a \left[ \sum_{n=1}^{N_h} |\ln h_1(n) - \ln f_{(1)}(n, a)|^2 \right] \quad (31)$$

这其实是一元函数极值问题，易解得，

$$a = \frac{(n - n_0)^2 \ln h_1(n)}{(n - n_0)^4} \quad (32)$$

可见近似后使求解简单的多，但它的前提是序列极大值点就是拟合高斯曲线的极大值点，且基线为零，这些影响在应用时必须提前考虑。

光谱反卷积中将点扩散函数面积归一化也是必不可少的步骤。光谱卷积退化过程是能量重新分布的过程，遵守能量守恒，其表现就是卷积前后光谱曲线所包含面积应相等，即有，

$$\begin{aligned} \int g(x) dx &= \int o(x) * h(x) dx \\ &= \iint f(x) h(x - x) dx dx \\ &= \int o(x) dx \int h(x - x) dx \end{aligned} \quad (33)$$

显然若， $\int h(x) dx = 1$ ，则， $\int g(x) dx = \int o(x) dx$ 。

面积归一化的高斯点扩散函数序列可由下式计算，

$$f_{(2)}(n) = f(n) / \int f(x) dx \quad (34)$$

对点扩散函数归一化过程中易犯的错误是以最大值归一化取代面积归一化，这有悖反卷积前后的能量守恒，要注意避免。

### 4 光谱反卷积仿真研究

为验证前面所提出的光谱盲目反卷积算法，进行了基于 Matlab 平台的数值仿真。所用算法流程如图 2 所示，算法中采用 (24)，(25) 式所示部分卷积的计算模型和 (26) 式高斯拟合模型，终止条件为点扩散函数半高宽相对误差为  $|(h^{(k+1)} - h^{(k)}) / h^{(k)}|$ 。仿真原始光谱和点扩散函数均由高斯谱线组成。为说明一般的分辨率增强情况，原始光谱线包含较远的单峰和相邻双峰，且高低不同。卷积后的光谱线还叠

加了白噪声，使信噪比为 50 dB，各量具体表达式为

$$\begin{aligned} o(x) &= 0.3e^{-\ln 2(x-1.1)^2} + e^{-\ln 2(x+1.1)^2} + e^{-\ln 2((x+6.6)/0.8)^2} \\ h(x) &= e^{-\ln 2x^2} \end{aligned} \quad (35)$$

$$g(x) = o(x) * h(x) +$$

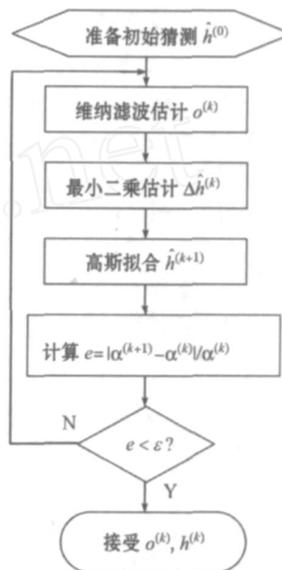


Fig 2 Flow chart of blind deconvolution algorithm

仿真结果如图 3 所示，算法在迭代 30 次后就满足终止条件了。图中上方为光谱估计，下方为点扩散函数估计，点划线和十字线分别为原始光谱和点扩散函数，细实线和点线分别为观测光谱和初始点扩散函数，虚线和粗实线分别为迭代中间估计和最终估计。

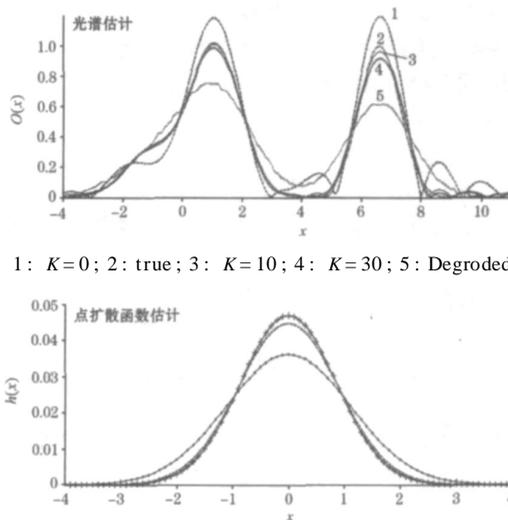


Fig 3 Simulation result of blind deconvolution algorithm

+ : True; . : Guessed; - : K=0; o : K=10; — : K=30

从图中可以看出对光谱和点扩散函数的估计都比较满意，相比之下对点扩散函数的估计更为准确一些。算法对分辨率的增强很明显，退化光谱中看不到双峰，在估计谱中清晰可见。为便于比较，采用单峰半高宽衡量分辨率，原始光

谱单峰半高宽为  $\sigma = 1.6$ , 观测光谱中单峰半高宽为  $\sigma_g = 2.6$ , 估计光谱分辨率约为  $\sigma_b = 1.8$ 。可见, 相比观测光谱, 估计光谱分辨率提高了约 30%。

## 5 结 论

本文结合光谱信号自身的特点和光谱图反卷积方面已有的成果, 探讨了空域迭代盲目反卷积方法用于光谱图反卷积时的算法实现问题。文章提出以较锐利光谱峰的高斯拟合结

果为点扩散函数的初始猜测, 利用常规光谱图反卷积方法估计物光谱, 利用最小二乘拟合方法估计点扩散函数增量, 并以点扩散函数估计半高宽间的误差判断迭代终止。文中还针对光谱反卷积算法的特点, 提出了光谱图卷积退化计算模型和最小二乘高斯拟合模型, 以解决算法中相应的计算问题。对算法的仿真表明, 对于所用的高斯谱线和点扩散函数模型, 盲目反卷积算法效果良好, 收敛较快, 在信噪比为 50 dB 时, 分辨率提高约 30%。综上所述, 光谱图空域迭代盲目反卷积算法富有潜力, 值得进一步研究。

## 参 考 文 献

- [1] Thorne A, et al. Spectrophysics: Principles and Applications. New York: Springer, c1999. 257.
- [2] YANG Huai-dong, XU Li, CHEN Ke-xin, et al (杨怀栋, 徐立, 陈科新, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2005, 25(9): 1520.
- [3] Jansson Peter A. Deconvolution with Application in Spectroscopy. New York: Academic Press, 1984. 38.
- [4] Chaudhuri Subhasis. Super-Resolution Imaging. Boston: Kluwer Academic Publishers, c2001. 6.
- [5] ZOU Mou-yan(邹谋炎). Deconvolution and Signal Recovery(反卷积和信号复原). Beijing: National Defence Industry Press(北京: 国防工业出版社), 2001. 151.
- [6] ZOU Mou-yan, et al. Meas. Sci. Technol., 1995, 6: 482.
- [7] Jansson Peter A. Deconvolution of Images and Spectra. New York: Academic Press, 1997. 76.

# Blind Deconvolution Algorithm for Spectrogram Super-Resolution Restoration

YANG Huai-dong, XU Li, CHEN Ke-xin, HUANG Xing-yue, HE Qing-sheng, TAN Qiao-feng, JIN Guo-fan  
State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tsinghua University, Beijing 100084, China

**Abstract** Deconvolution is an important way to realize spectrogram super-resolution restoration. Blind deconvolution is superior to the traditional one in that it does not need a well prepared convolution core. Taking advantages of the features of spectrogram and the existing achievements of spectrogram deconvolution, the authors bring forward a scheme to adapt the space domain iterative blind deconvolution method to spectroscopy application. Moreover, after probing into the spectrogram degradation described by convolution, computational models for spectrum convolution and Gauss fitting are worked out to meet the requirements of blind deconvolution algorithm. Accompanying results are simulations with MATLAB7.0. They shows that for the given spectrum and point spread function of Gauss type the blind deconvolution algorithm works well and a resolution enhancement of 30% can be achieved under a signal-to-noise ratio of 50 dB.

**Keywords** Spectroscopy; Super-resolution; Blind deconvolution

(Received Feb. 13, 2006; accepted May 16, 2006)