

ВОССТАНОВЛЕНИЕ И АНАЛИЗ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА, ПОЛУЧАЕМЫХ СО СТАТИЧЕСКОГО ФУРЬЕ-СПЕКТРОМЕТРА

Н.С. Васильев¹, И.Б. Винтайкин¹, Иг.С. Голяк¹, Ил.С. Голяк¹, И.В. Кочиков², И.Л. Фуфурин¹
1 Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия,
2 Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Аннотация

В статье решается задача восстановления спектров комбинационного рассеяния света в спектральном диапазоне 800–1050 нм, получаемых на макете статического фурье-спектрометра. Исследован характер искажений, вносимых оптической системой статического фурье-спектрометра. Предложен метод исправления оптических искажений. Метод апробирован на примере восстановления спектра монохроматического источника излучения. На основе анализа спектрограмм профилей интерференционных картин получена карта распределения периодов двумерной интерференционной картины. Построено отображение для исправления оптических искажений двумерной интерферограммы. Результаты исправления продемонстрированы на профилях интерференционных полос. В работе проведено сопоставление различных известных методов коррекции фазы с целью выявления оптимального способа для решаемой задачи. Предложен критерий соответствия восстановленных спектров эталонному спектру. В качестве эталонного использовался спектр комбинационного рассеяния света стильбена, зарегистрированного на дифракционном спектрометре с разрешением $\delta\nu = 14 \text{ см}^{-1}$.

Ключевые слова: фурье-оптика, цифровая обработка сигналов, интерференционная картина, комбинационное рассеяние света, инфракрасная фурье-спектроскопия, обработка изображений, распознавание.

Цитирование: Васильев, Н.С. Восстановление и анализ спектров комбинационного рассеяния света, получаемых со статического фурье-спектрометра / Н.С. Васильев, И.Б. Винтайкин, Иг.С. Голяк, Ил.С. Голяк, И.В. Кочиков, И.Л. Фуфурин // Компьютерная оптика. – 2017. – Т. 41, № 5. – С. 626-635. – DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-5-626-635.

Введение

Беспроботборный анализ химических соединений на подстилающих поверхностях является крайне актуальной задачей, которая возникает в различных областях производства, промышленного и экологического контроля. Широкое распространение среди методов беспроботборного анализа получили спектральные методы [1], в том числе фурье-спектрометрии, преимущества которой связаны с выигрышем в светосиле [2] и мультиплекс-факторе [3]. Применение фурье-спектрометрии в области комбинационного рассеяния является эффективным методом для идентификации химических соединений, так как спектры комбинационного рассеяния света являются своего рода «отпечатками пальцев», позволяющими точно определить исследуемое вещество. По этой причине в мире разрабатываются приборы [4–7] на основе фурье-спектрометров. Однако есть некоторые сложности в разработке таких комплексов. Так, комбинационное рассеяние света (КРС) обладает гораздо более слабым квантовым выходом по сравнению с люминесценцией, поэтому усложняется получение спектров КРС во вне-лабораторных условиях ввиду низкого отношения сигнал/шум в регистрируемом спектре. Вследствие этого возникает необходимость своевременной и эффективной обработки получаемых данных, чтобы восстановить спектр для дальнейшей его идентификации. Преимущество же спектрометрических комплексов на основе статического фурье-спектрометра (СФС) [8] заключается в отсутствии подвижных частей последнего, что повышает эффективность при работе во вне-

лабораторных условиях, а также уменьшает габариты и энергопотребление по сравнению с динамическими фурье-спектрометрами.

1. Устранение оптических искажений

1.1. Анализ интерферограммы от монохроматического источника

Для анализа характера регистрируемых двумерных картин рассмотрим интерферограмму от монохроматического источника света с длиной волны 785 нм. При этом ширина двумерной интерференционной картины – 3384 элемента, высота – 2704 элемента. Для монохроматического источника должны наблюдаться строго вертикальные интерференционные полосы.

В большом масштабе характер искажений интерференционных полос не заметен, однако при рассмотрении тонкой вертикальной полосы видны искажения интерференционных полос от структуры (рис. 1). Для монохроматического источника должны были бы наблюдаться строго вертикальные интерференционные полосы, однако в реальности получаются искривленные полосы (рис. 1). При этом формы интерференционных полос разительно отличаются в левой и правой частях двумерной интерферограммы, что видно на рис. 2. Отличие полос предположительно связано с неравномерностью периода модуляции сигнала в интерферограмме. В работах, посвящённых обработке изображений, встречаются различные методы устранения искажений схожего рода [9–12], опирающиеся на калибровку камеры по шахматному паттерну либо требующие отображения 3D-сцены в 2D, что обладает

большой вычислительной ёмкостью и неэффективно для систем экспресс-анализа. К сожалению, в случае с двумерными интерферограммами они зачастую малоприменимы. Работы [13, 14] посвящены определению и компенсации радиальной дисторсии вследствие неидеальности объективов используемых камер в рамках классической модели Брауна [15]. В работах предлагается составление контура тестового изображения с последующей оценкой дисторсии по ней.

y, номер пикселя

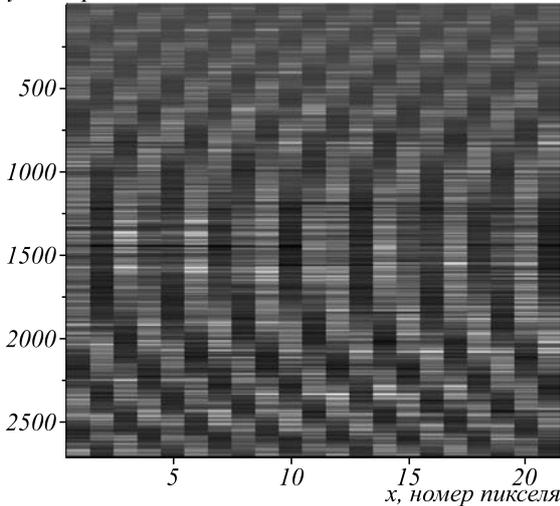


Рис. 1. Фрагмент интерферограммы размером 2700×21 пикселей

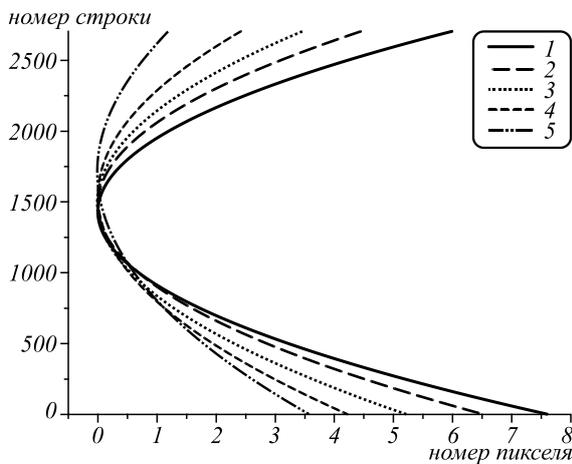


Рис. 2. Форма интерференционных полос из различных областей интерферограммы (1 – 300-й столбец, 2 – 975-й столбец, 3 – 1650-й столбец, 4 – 2325-й столбец, 5 – 3000-й столбец)

Существующие методы устранения оптических искажений с составлением контура изображения в данном случае оказываются неэффективными, поскольку характерный размер проекции изображения объекта (интерференционной полосы) на матрицу фотоприемного устройства составляет порядка 2-3 пикселей. В этом случае выделение границ тестового объекта в условиях зашумленности тестового изображения становится невозможным. Поэтому искажение анализируется исходя из структуры периодически повторяющихся объектов частотными методами [16].

В настоящей работе предложен несколько отличный от указанных статей [13–15] подход к анализу искажения, которое приводит к некорректному усреднению. После чего приводится метод его устранения.

Из-за неравномерности распределения периода двумерной интерференционной картины простое суммирование строк не позволит получить правильную одномерную интерферограмму монохроматического источника. На рис. 3 показан результат суммирования всех строк, виден характерный провал интенсивности, свидетельствующий о наложении сигналов разных частот при суммировании.

S, отн.ед.

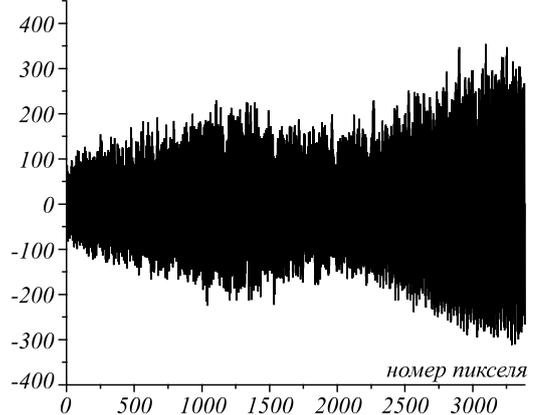


Рис. 3. Суммированная по строкам интерферограмма

Для того чтобы удостовериться в правильности предположения о неравномерности периода сигнала по длине строки интерферограммы, рассмотрим спектрограмму центральной строки и результат дискретного преобразования Фурье центральной строки. Далее для качественного анализа спектров и спектрограмм будем использовать частоту, нормированную на частоту Найквиста.

На рис. 4 представлена спектрограмма центральной строки двумерной интерферограммы, на которой показано, что при движении от левого края к правому в центральной строке частота сигнала уменьшается.

На рис. 5 приведён модуль фурье-образа центральной строки интерференционной картины, выражающий зависимость интенсивности излучения сигнала от частоты, нормированной на частоту Найквиста. Из рис. 5 видно, что форма сигнала сильно искажена в области максимума. Это означает, что исходный сигнал в центральной строке двумерной интерферограммы не является строго периодическим. Для корректного усреднения интерферограммы по строкам необходимо сначала выровнять интерференционные полосы. Предварительно требуется найти последовательность отображений, преобразующих искаженную интерферограмму в интерферограмму со строго вертикальными полосами.

1.2. Поиск распределения периода

Для того чтобы понять характер оптических искажений, нарушающих периодичность интерференционной картины монохроматического источника, найдём распределение периода по интерферограмме. Для это-

го в каждой строке изображения будем выделять область с помощью умножения на гауссиан, смещенный по строке в интересующую нас точку по горизонтали. После чего вычисляется спектр для анализа периода строки в данной области интерферограммы.

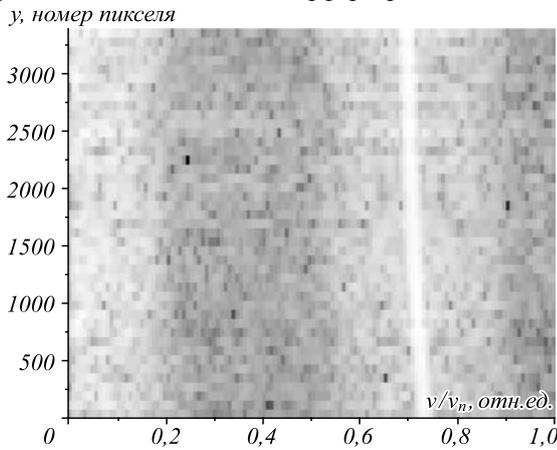


Рис. 4. Спектрограмма центральной строки двумерной интерферограммы

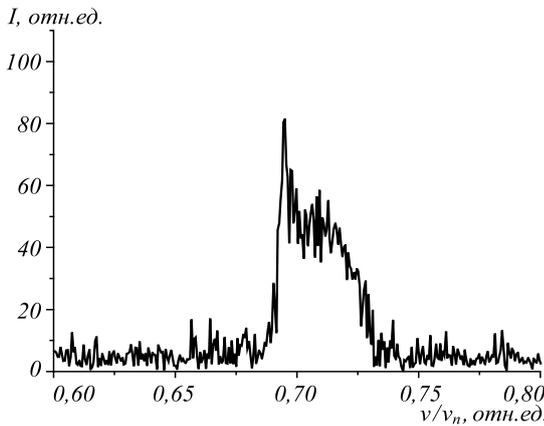


Рис. 5. Модуль фурье-образа центральной строки

Обозначим двумерную интерферограмму от монохроматического лазерного источника высотой h и шириной w через A_{ij} , где i – номер строки, j – номер столбца. Исследуем, как изменяется период сигнала в отдельно взятой строчке. Построение зависимости периода от координаты в интересующей области, по вертикали в строке i , по горизонтали в столбце k , разобьем на следующие этапы:

1. С помощью гауссиана выделим область в строке i рядом с пикселем k по горизонтали

$$B_{ijk} = A_{ij} \exp\left(\frac{-(j-k)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1)$$

где σ – ширина гауссиана; B – вспомогательная матрица.

2. Находим дискретное преобразование Фурье полученной после свёртки строки с гауссианом по формуле (2)

$$C_{ilk} = B_{ijk} \exp\left(\frac{2\pi l}{w} jl\right), \quad (2)$$

где l – комплексная единица; k – частотный индекс, изменяется от 0 до $w-1$; C – вспомогательная матрица.

3. Находим циклическую частоту сигнала в окрестности пикселя i по вертикали и k по горизонтали

$$\omega_{ik} = \frac{2\pi}{w} \arg \max_{l \in \left[0, \frac{w}{2}\right]} |C_{ilk}|. \quad (3)$$

4. Находим период T_{ik} , соответствующий горизонтальному периоду интерферограммы в окрестности пикселя i по вертикали и k по горизонтали

$$T_{ik} = \frac{2\pi}{\omega_{ik}}. \quad (4)$$

Из (1–4) можно записать следующее аналитическое выражение для вычисления периода интерферограммы в окрестности пикселя i по вертикали и k по горизонтали

$$T_{ik} = \frac{w}{\arg \max_{l \in \left[0, \frac{w}{2}\right]} \left| A_{ij} \exp\left(\frac{-(j-k)^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{2\pi l}{w} jl\right) \right|}. \quad (5)$$

На рис. 6 показано распределение периода по интерферограмме и его аппроксимация с помощью эллиптического параболоида.

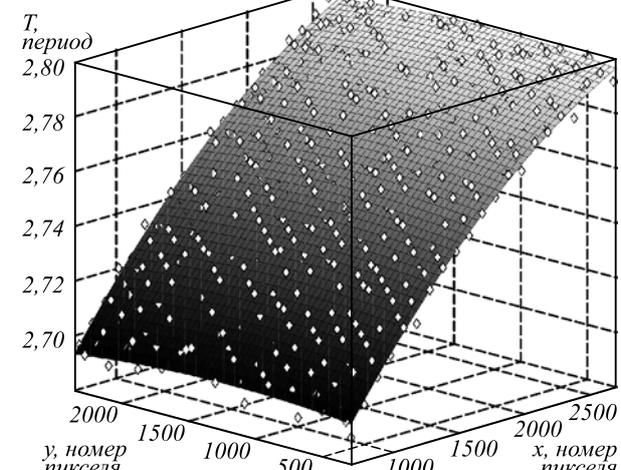


Рис. 6. Распределение периода сигнала по интерферограмме

Распределение периода будем аппроксимировать с помощью эллиптического параболоида, используя следующее выражение:

$$f(x, y) = p_{xx}x^2 + p_{yy}y^2 + p_x x + p_y y + p, \quad (6)$$

где p_{xx} , p_{yy} , p_x , p_y , p – коэффициенты параболоида, определяемые с помощью метода наименьших квадратов, получаемые путём аппроксимации экспериментальных данных параболоидом вида (6). Приближение определяется с помощью минимизации функции:

$$\left(f(x, y; p_{xx}, p_{yy}, p_x, p_y, p) - T_{yx}\right)^2 \rightarrow \min.$$

1.3. Преобразование, приводящее интерферограмму к одному периоду

Выравнивание периодов на двумерной интерферограмме происходит посредством отображения $T(x, y) \mapsto (x', y')$ (7–8) координат точек исправленной интерферограммы (x, y) в координаты точек искаженной (x', y') с последующей интерполяцией интенсивностей в точках искаженной интерферограммы на новую сетку:

$$x' = \left(\frac{p_{xx}}{3} x^3 + \frac{p_x}{2} x^2 + (p_{yy} y^2 + p_y y + p) x \right) \frac{w-1}{g}, \quad (7)$$

$$y' = y, \quad (8)$$

где

$$g = \max_{y \in [0, h-1]} \left(\frac{p_{xx}}{3} (w-1)^3 + \frac{p_x}{2} (w-1)^2 + (p_{yy} y^2 + p_y y + p) (w-1) \right).$$

После применения данного отображения интерференционные полосы становятся равноотстоящими друг от друга. Далее необходимо сдвинуть их по горизонтали и получим исправленную интерферограмму (рис. 7).

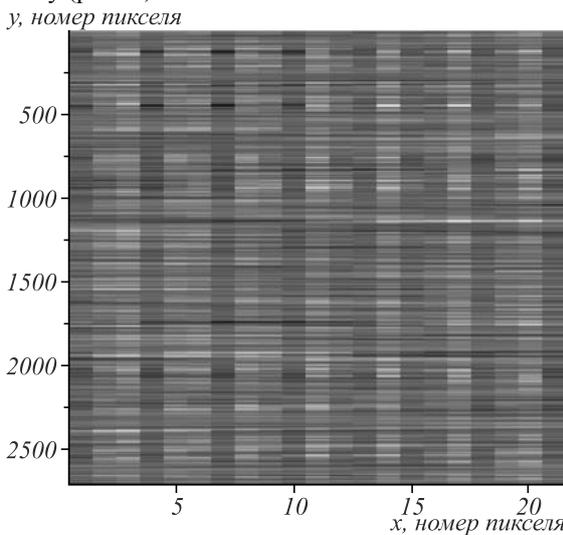


Рис. 7. Фрагмент исправленной интерферограммы

На рис. 7 показан фрагмент скорректированной двумерной интерферограммы. После проведения указанных процедур исправления двумерных интерферограмм возможно проведение корректного усреднения в одномерную интерферограмму. Из рис. 8 видно, что на просуммированной интерферограмме отсутствует характерное уменьшение интенсивности в области 2000-го элемента по горизонтали (рис. 3).

1.4. Применение отображений к интерферограмме КРС исследуемых веществ

Полученные преобразования, устраняющие искажения в двумерной интерферограмме, применяются к интерферограмме КРС исследуемого веще-

ства (рис. 9). Устранив оптические искажения и просуммировав строки, получаем одномерную интерферограмму, из которой далее восстанавливаем спектр (рис. 10).

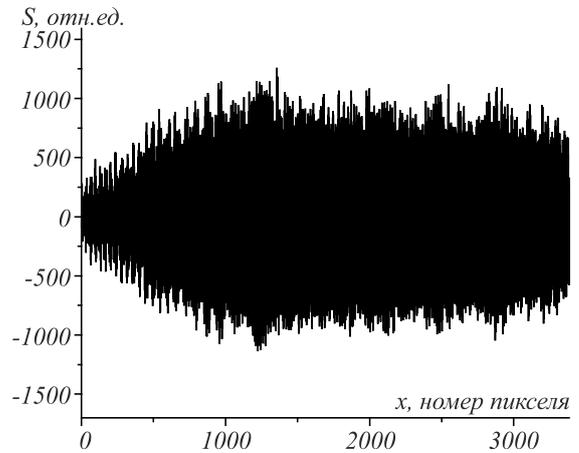


Рис. 8. Просуммированная по строкам интерферограмма после исправления

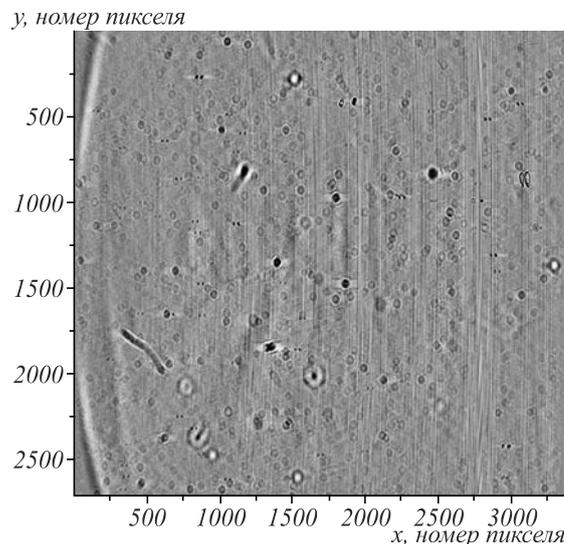


Рис. 9. Пример реальной двумерной интерферограммы

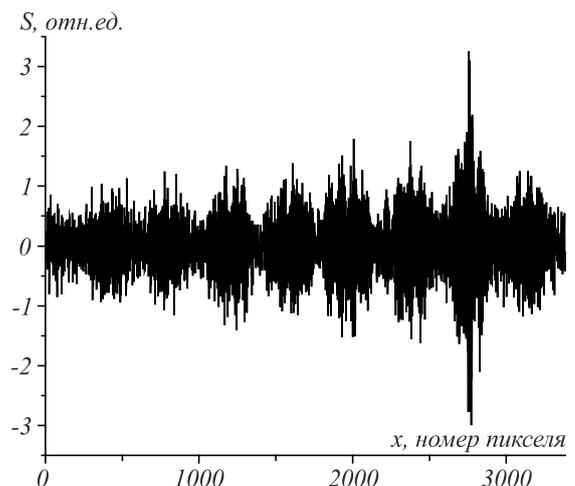


Рис. 10. Усреднённая по строкам интерферограмма после исправления

2. Фазовая коррекция спектров

Разрешение, достижимое на статическом фурье-спектрометре, ограничивается размерами матрицы фотоприемника. В этом случае актуальной видится регистрация односторонних интерференционных картин вместо двусторонних. Минусом применения односторонних интерферограмм в отличие от двусторонних является необходимость фазовой коррекции спектра, что увеличивает вычислительные затраты на обработку одной интерферограммы. Ошибки в фазе спектра возникают в основном по двум причинам: неточное положение нулевой разности хода и фазовый сдвиг падающего излучения из-за различных компонентов оптической системы.

Интерферограмма, содержащая фазовую ошибку, имеет следующий вид:

$$I(x) = \int_0^{\infty} B(v) \cos(2\pi xv - \phi(v)) dv, \quad (9)$$

где $I(x)$ – односторонняя интерферограмма; $B(v)$ – спектр; $\phi(v)$ – фазовая ошибка.

В зависимости от ситуации, функция $\phi(v)$ может как не зависеть от волнового числа v , так и иметь зависимость более сложного вида [17].

Наиболее популярными на сегодняшний день являются: метод фазовой коррекции Мертца (мультипликативный метод) [18] и его аналог в пространственной области – метод фазовой коррекции Формана (свёрточный метод) [19]. В работе [20] было показано, что метод Мертца менее точен по сравнению с методом Формана за счёт вносимых фотометрических ошибок (от 0,1 % до 1 %) в спектр, а также обладает слабой устойчивостью к зашумлённым сигналам. Дальнейшие исследования в этой области привели к модификациям этих методов, отражённым в ряде работ авторов [21–23].

Были протестированы: метод Формана, метод Мертца, объединение методов Формана и Мертца (далее ФМ) и гибридный метод, основанный на алгоритме Формана из работы [21] (далее ГибФ).

ФМ состоит из двух этапов. На первом этапе применён алгоритм Формана с целью относительной симметризации короткой двусторонней интерферограммы. Оценка симметричности проводилась посредством выражения

$$\Delta = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} i |I_s(x_i)|}{\sum_{i=0}^{N-1} |I_s(x_i)|} - x_0, \quad (10)$$

где Δ – среднее отклонение от симметрии; x_0 – координата максимума короткой двусторонней интерферограммы; $I_s(x_i)$ – значение короткой двусторонней интерферограммы в точке x_i ; N – число точек короткой двусторонней интерферограммы. Чем ближе Δ к нулю, тем симметричнее интерференционная картина.

Функция фазовой ошибки представлялась в виде

$$\phi(v) = a + bv + cv^2, \quad (11)$$

где $\phi(v)$ – зависимость фазы от частоты; a, b, c – коэффициенты; v – частота.

Таким образом, в конце этапа Формана получалась односторонняя интерферограмма с некоторой симметрией относительно нулевой разности хода.

На втором этапе к этой интерферограмме применён алгоритм Мертца, включающий умножение асимметричной гауп-функции, описанной в работе [24], на дополненную нулями до двусторонней интерференционной картины одностороннюю

$$I(x) = I(-x_{\max} < x < x_{\min}),$$

где x_{\min} – длина короткой части односторонней интерферограммы; x_{\max} – длина ее длинной части. Данная процедура повышает эффективность восстановления спектров даже с учётом того, что интерференционная картина не полностью симметрична, что реально в условиях зашумлённого сигнала даже после применения алгоритма Формана.

В результате из конечной интерференционной картины $I(-x_{\max} < x < x_{\max})$ восстанавливался действительный спектр.

3. Сопоставление результатов с эталонами

Для проверки корректности предлагаемых методов восстановления спектров последние сопоставлялись с данными, регистрируемыми с использованием дифракционного спектрометра с разрешением $\delta v = 14 \text{ см}^{-1}$.

Проверка осуществлялась на примере спектров комбинационного рассеяния света вещества стильбена (рис. 11).

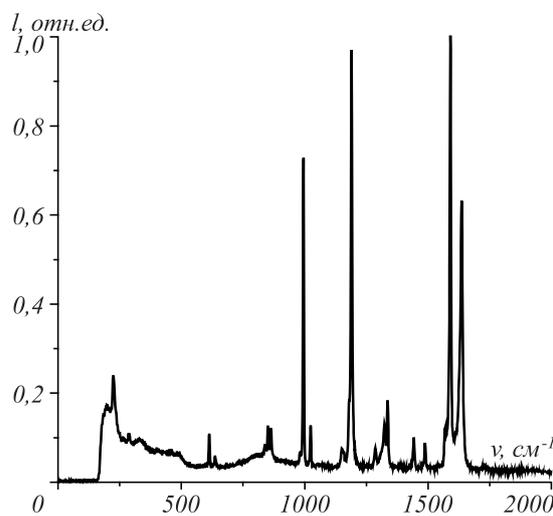


Рис. 11. Спектр КРС вещества стильбен с дифракционного спектрометра

При возбуждении лазером с длиной волны излучения 785 нм наблюдаются интенсивные полосы в интервале от 840 до 901 нм (от 837 до 1648 см^{-1} в рамановском сдвиге). Для сопоставлений использовались 14 наиболее селективных линий.

Существуют различные методы сравнения спектральных данных [25–30]. Применение этих методов авторы связывают в первую очередь с проведением количественного и качественного анализа. В нашем

случае их прямое использование нецелесообразно, так как должно учитывать искажения спектра, возникающие в процессе его восстановления, а не в процессе регистрации. Анализируются искажения, вносимые в спектр, обусловленные численными методами коррекции фазы. Для построения меры расхождения восстановленных спектров и эталонного спектра используются положения точек максимума в спектре комбинационного рассеяния, так как именно такие искажения наиболее критичны при проведении вне-лабораторного экспресс-анализа. Для исключения локальных максимумов, вызванных случайным шумом, все точки ниже порога отсекались. Порог распознавания определялся эмпирически с использованием расчётных величин дисперсии шума. Для уменьшения влияния дискретности сетки зарегистрированных значений на положения максимумов использовалась интерполяция зарегистрированных точек кубическими сплайнами.

По найденному массиву точек максимумов эталонного спектра $\{a_i\}_1^N$ и анализируемого спектра $\{b_j\}_1^M$ вычислялась невязка:

$$\Delta = \max_{i=1,\dots,N} \left(\min_{j=1,\dots,M} |a_i - b_j| \right),$$

где N, M – длина массивов положений максимумов эталонного и анализируемого спектра. Результаты показаны в табл. 1.

Табл. 1. Сопоставление мер расхождения эталонного и анализируемого спектров комбинационного рассеяния стильбена

	Метод Мертца	Метод Формана	ГибФ	ФиМ
Невязка, см ⁻¹	21,7	15,1	11,8	11,1

Как видно из табл. 1, наименьшее расхождение восстановленного спектра с эталонным получено при использовании ФиМ для фазовой коррекции. Исходя из этого, при восстановлении спектров КРС предлагается применение ФиМ. На рис. 12 приведены спектры, восстановленные с СФС после коррекции. Именно эти спектры используются в дальнейшем для идентификации. Для сравнения на рисунке также представлены спектры КРС с дифракционного спектрометра, приведены значения меры расхождения и коэффициента корреляции. В обоих случаях значение коэффициента корреляции превосходит 0,9, что подтверждает эффективность предложенного комплекса процедур для восстановления спектров КРС.

Заключение

В работе рассмотрен метод восстановления спектров комбинационного рассеяния света, получаемых на макете статического фурье-спектрометра. Продемонстрировано, что характер искажений, вносимых оптической системой прибора, может быть описан параболоидом с центром искажения за границами интерферограммы. Проведена оценка степени искажения, и разработан способ их устранения. Эффектив-

ность разработанного метода показана на примере исправления двумерной интерференционной картины от монохроматического источника излучения с длиной волны 785 нм.

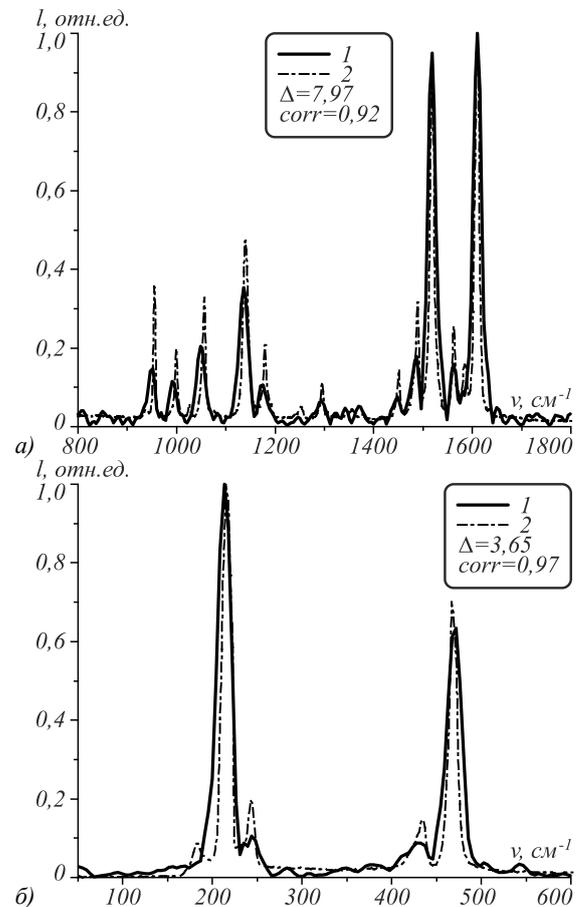


Рис. 12. Сравнение спектров КРС веществ со статического фурье-спектрометра (1) и дифракционного спектрометра (2): (а) – спектр КРС РОРОР; (б) – спектр КРС Серы

Проведён анализ различных способов фазовой коррекции одномерных интерференционных картин, а также предложен объединённый метод на основе алгоритма Формана и Мертца. Показано, что объединённый алгоритм ФиМ показывает наименьшее расхождение с эталонным спектром стильбена, зарегистрированным на дифракционном спектрометре с разрешением $\delta\nu = 14 \text{ см}^{-1}$. Результаты апробированы на реальных химических соединениях.

Предложенные методы восстановления КРС спектров апробированы в серии лабораторных исследований по беспроботборному экспресс-анализу химических соединений по их КРС спектрам.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-29-09625.

Литература

1. Golyak, I.S. Interferometer with rotating plate: Fundamentals / I.S. Golyak, A.N. Morozov, S.I. Svetlichnyi, I.L. Fufurin // Proceedings of the 2015 International Conference On Industrial Informatics, Machinery and Materials. – 2015. – P. 188-192. – ISBN: 978-1-60595-078-5.

2. **Jacquot, P.** Conditions optiques d'emploi des cellules photo-electriques dans les spectrographs et les interferometers / P. Jacquot, J.C. Dufour // *Journal des Recherches du Centre National de la Recherche Scientifique*. – 1948. – Numéro 9. – P. 91-103.
3. **Fellget, P.** A contribution to the theory of the multiplex interferometric spectrometer. I. – les principes généraux des méthodes nouvelles en spectroscopie interférentielle – A propos de la théorie du spectromètre interférentiel multiplex / P. Fellget // *Journal de Physique et Le Radium*. – 1958. – Vol. 19, Numéro 3. – P. 187-191. – DOI: 10.1051/jphysrad:01958001903018700.
4. **Винтайкин, И.Б.** Рамановский спектрометр на основе статического интерферометра Майкельсона / И.Б. Винтайкин, Н.С. Васильев, И.С. Голяк, И.С. Голяк, А.А. Есаков, А.Н. Морозов, С.И. Светличный, С.Е. Табалин, И.Л. Фуфурин // *Известия РАН. Энергетика*. – 2016. – № 6. – С. 144-152.
5. **Dzsaber, S.** A Fourier transform Raman spectrometer with visible laser excitation / S. Dzsaber, M. Negyedi, B. Bernáth, B. Gyüre, T. Fehér, C. Kramberger, T. Pichler, F. Simon // *Journal of Raman Spectroscopy*. – 2015. – Vol. 46(3). – P. 327-332. – DOI: 10.1002/jrs.4641.
6. **Hu, G.** Raman spectroscopic detection using a two-dimensional spatial heterodyne spectrometer / G. Hu, W. Xiong, H. Shi, Z. Li, J. Shen, X. Fang // *Optical Engineering*. – 2015. – Vol. 54(11). – 114101. – DOI: 10.1117/1.OE.54.11.114101.
7. **Морозов, А.Н.** Физические основы расчёта интерферометра с вращающейся пластинкой / А.Н. Морозов, С.И. Светличный, С.Е. Табалин, И.Л. Фуфурин // *Оптический журнал*. – 2013. – Т. 80, № 8. – С. 37-41.
8. **Бойко, А.Ю.** Статический Фурье-спектрометр видимого и ближнего ультрафиолетового диапазонов спектра / А.Ю. Бойко, И.С. Голяк, И.С. Голяк, С.К. Дворук, А.М. Доровских, А.А. Есаков, В.Н. Корниенко, Д.В. Косенко, И.В. Кочиков, А.Н. Морозов, С.И. Светличный, С.Е. Табалин // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки*. – 2009. – № 3. – С. 10-28.
9. **Heikkila, J.** A four-step camera calibration procedure with implicit image correction / J. Heikkila, O. Silvén // *Proceedings of the 1997 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. – 1997. – P. 1106-1112. – DOI: 10.1109/CVPR.1997.609468.
10. **Tsai, R.Y.** A versatile camera calibration technique for high-accuracy 3D machine vision metrology using off-the-shelf TV cameras and lenses / R.Y. Tsai // *IEEE Journal of Robotics and Automation*. – 1987. – Vol. 3, Issue 4. – P. 323-344. – DOI: 10.1109/JRA.1987.1087109.
11. **Meng, X.** A new easy camera calibration technique based on circular points / X. Meng, Z. Hu // *Pattern Recognition*. – 2003. – Vol. 36, Issue 5. – P. 1155-1164. – DOI: 10.1016/S0031-3203(02)00225-X.
12. **Prescott, B.** Line-based correction of radial lens distortion / B. Prescott, G.F. McLean // *Graphical Models and Image Processing*. – 1997. – Vol. 59, Issue 1. – P. 39-47. – DOI: 10.1006/gmip.1996.0407.
13. **Жимбуева, Л.Д.** Метод определения суммарной дисторсии цифровых изображений / Л.Д. Жимбуева // *Компьютерная оптика*. – 2011. – Т. 35, № 3. – С. 347-355.
14. **Кунина, И.А.** Слепая компенсация радиальной дисторсии на одиночном изображении с использованием быстрого преобразования Хафа / И.А. Кунина, С.А. Гладилин, Д.П. Николаев // *Компьютерная оптика*. – 2016. – Т. 40, № 3. – С. 395-403. – DOI: 10.18287/2412-6179-2016-40-3-395-403.
15. **Brown, D.C.** Close-range camera calibration / D.C. Brown // *Photogrammetric Engineering*. – 1971. – Vol. 37, Issue 8. – P. 855-866.
16. **Song, Y.** Correction of spatial heterodyne interferogram base on frequency domain analysis / Y. Song, X. Wei, W. Xinqiang, H. Jin, Q. Yanli // *Acta Optica Sinica*. – 2013. – Vol. 33(5). – 0530001. – DOI: 10.3788/aos201333.0530001.
17. **Морозов, А.Н.** Основы фурье-спектрометриии / А.Н. Морозов, С.И. Светличный. – 2-е изд. – М.: Наука, 2014. – 456 с. – ISBN: 978-5-02-039051-5.
18. **Mertz, L.** Correction of phase errors in interferograms / L. Mertz // *Applied Optics*. – 1963. – Vol. 2, Issue 12. – P. 1332-1332. – DOI: 10.1364/AO.2.001332.
19. **Forman, M.L.** Correction of asymmetric interferograms obtained in Fourier spectroscopy / M.L. Forman, W.H. Steel, G.A. Vanasse // *Journal of the Optical Society of America*. – 1966. – Vol. 56, Issue 1. – P. 59-61. – DOI: 10.1364/JOSA.56.000059.
20. **Chase, D.B.** Phase correction in FT-IR / D.B. Chase // *Applied Spectroscopy*. – 1982. – Vol. 36, Issue 3. – P. 240-244. – DOI: 10.1366/0003702824638430.
21. **Ben-David, A.** Computation of a spectrum from a single-beam Fourier-transform infrared interferogram / A. Ben-David, A. Ifarraguerrri // *Applied Optics*. – 2002. – Vol. 41, Issue 6. – P. 1181-1189. – DOI: 10.1364/AO.41.001181.
22. **Furstenberg, R.** Phase correction of interferograms using digital all-pass filters / R. Furstenberg, J.O. White // *Applied Spectroscopy*. – 2005. – Vol. 59, Issue 3. – P. 316-321. – DOI: 10.1366/0003702053585345.
23. **Wu, X.** A new model for the phase correction of interferograms / X. Wu, Z. Liu, H. Li // *Analytical Methods*. – 2015. – Vol. 7, Issue 6. – P. 2399-2405. – DOI: 10.1039/C4AY02433H.
24. **Porter, C.D.** Correction of phase errors in Fourier spectroscopy / C.D. Porter, D.B. Tanner // *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*. – 1983. – Vol. 4, Issue 2. – P. 273-298. – DOI: 10.1007/BF01008607.
25. **Rosolowsky, E.W.** The spectral correlation function: A new tool for analyzing spectral line maps / E.W. Rosolowsky, A.A. Goodman, D.J. Wilner, J.P. Williams // *The Astrophysical Journal*. – 1999. – Vol. 524, Issue 2. – P. 887-894. – DOI: 10.1086/307863.
26. **Kasseck, C.** Substance identification by depth resolved spectroscopic pattern reconstruction in frequency domain optical coherence tomography / C. Kasseck, V. Jaedicke, N.C. Gerhardt, H. Welp, M.R. Hofmann // *Optics Communications*. – 2010. – Vol. 283, Issue 23. – P. 4816-4822. – DOI: 10.1016/j.optcom.2010.06.073.
27. **Gutiérrez-Rodríguez, A.E.** New dissimilarity measures for ultraviolet spectra identification / A.E. Gutiérrez-Rodríguez, M.A. Medina-Pérez, J.F. Martínez-Trinidad, J.A. Carrasco-Ochoa, M. García-Borroto. – In book: *Advances in pattern recognition. MCPR 2010* / ed. by J.F. Martínez-Trinidad, J.A. Carrasco-Ochoa, J. Kittler. – Berlin, Heidelberg: Springer, 2010. – P. 220-229. – DOI: 10.1007/978-3-642-15992-3_24.
28. **Кочиков, И.В.** Численные процедуры идентификации и восстановления концентраций веществ в открытой атмосфере при обработке единичного измерения фурье-спектрометра / И.В. Кочиков, А.Н. Морозов, И.Л. Фуфурин // *Компьютерная оптика*. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 554-561.

29. **Кочиков, И.В.** Распознавание веществ в открытой атмосфере по единичной интерферограмме фурье-спектрометра / И.В. Кочиков, А.Н. Морозов, С.И. Светличный, И.Л. Фуфурин // Оптика и спектроскопия. – 2009. – Т. 106. – № 5. – С. 743-749. – ISSN 0030-4034.
30. **Морозов, А.Н.** Статистическая оценка вероятности правильного обнаружения веществ в ИК фурье-спектрометрии / А.Н. Морозов, И.В. Кочиков, А.А. Новгородская, А.А. Сологуб, И.Л. Фуфурин // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 4. – С. 614-621. – DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-614-621.

Сведения об авторах

Васильев Николай Сергеевич, 1986 года рождения. Кандидат физико-математических наук (2015 год), работает доцентом кафедры физики Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов – спектроскопия и распознавание образов. E-mail: nickliamg@gmail.com.

Винтайкин Иван Борисович, 1990 года рождения, работает ассистентом кафедры физики. Область научных интересов – численные методы и вычислительная математика. E-mail: vintaykin_ivan@mail.ru.

Голяк Игорь Семенович, 1985 года рождения. Кандидат физико-математических наук, работает доцентом кафедры физики Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов – спектроскопия и цифровая обработка изображений. E-mail: igorgolyak@yandex.ru.

Голяк Илья Семенович, 1985 года рождения. Кандидат физико-математических наук, работает старшим научным сотрудником АО «Центр прикладной физики МГТУ им. Н.Э. Баумана». Область научных интересов – спектроскопия. E-mail: iliyagol@mail.ru.

Кочиков Игорь Викторович, 1959 года рождения. Доктор физико-математических наук (2003 год), работает ведущим научным сотрудником в Научно-исследовательском вычислительном центре МГУ им. М.В. Ломоносова. Область научных интересов – вычислительная электродинамика, исследование структуры молекул, распознавание образов и обработка изображений. E-mail: igor@kochikov.ru.

Фуфурин Игорь Леонидович, 1984 года рождения. Кандидат физико-математических наук (2010 год), работает доцентом кафедры физики Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов – атмосферная оптика, спектроскопия и вычислительная математика. E-mail: igfil@mail.ru.

ГРНТИ: 29.31.26, 28.23.15

Поступила в редакцию 24 мая 2017 г. Окончательный вариант – 11 сентября 2017 г.

RECOVERY AND ANALYSIS OF RAMAN SPECTRA OBTAINED USING A STATIC FOURIER TRANSFORM SPECTROMETER

N.S. Vasil'ev¹, I.B. Vintaykin¹, I.G. Solyak¹, I.L. Solyak¹, I.V. Kochikov², I.L. Fufurin¹

¹The Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia,

²Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

Abstract

The recovery of Raman spectra in the 800-1050-nm spectral range from a prototype static Fourier-transform spectrometer is described. Distortion effects introduced by the optical system of the static Fourier-transform spectrometer are studied. A method of correcting optical distortion is suggested. The proposed algorithm is tested using a monochromatic radiation source. A two-dimensional map of period distribution in the distorted interference pattern is plotted. A mapping that enables optical distortions of the two-dimensional interferogram to be corrected is proposed. The correction results are demonstrated by plotting interference fringe profiles. A comparison of various well-known phase correction methods in order to identify an optimal algorithm is presented. A matching criterion for the obtained spectra is proposed. Raman spectrum of a stilbene crystal obtained by a diffraction spectrometer with a resolution of $\delta\nu = 14 \text{ cm}^{-1}$ is used as a reference.

Keywords: Fourier optics and digital signal processing, interference pattern, Raman spectroscopy, FTIR spectroscopy, Image processing, Recognition.

Citation: Vasil'ev NS, Vintaykin IB, Golyak IG, Golyak IL, Kochikov IV, Fufurin IL. Recovery and analysis of Raman spectra obtained using a static Fourier transform spectrometer. Computer Optics 2017; 41(5): 626-635. DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-5-626-635

Acknowledgements: The work was partially funded by the Russian Federation Ministry of Education and Science, grant No. 16-29-09625.

References

- [1] Golyak IS, Morozov AN, Svetlichnyi SI, Fufurin IL. Interferometer with Rotating Plate: Fundamentals. 2015 Int Conf Ind Inform Mach Mater 2015: 188-192. ISBN: 978-1-60595-078-5.
- [2] Jacquot P, Dufour JC. Conditions optiques d'emploi des cellules photo-electriques dans les spectrographs et les interferometers. J Rech Cent Natl Rech Sci 1948; 9: 91-103.
- [3] Fellget P. A contribution to the theory of the multiplex interferometric spectrometer. I. - les principes généraux des méthodes nouvelles en spectroscopie interférentielle - A propos de la théorie du spectromètre interférentiel multiplex. J Phys Radium 1958; 19(3): 187-191. DOI: 10.1051/jphysrad:01958001903018700.
- [4] Vintaikin IB, et al. Raman spectrometer based on a static Michelson interferometer [In Russian]. "Proceedings of RAS. Power Engineering" Journal 2016; 6: 144-152.
- [5] Dzsaber S, Nagyedi M, Bernáth B, Gyüre B, Fehér T, Kramberger C, Pichler T, Simon F. A Fourier transform Raman spectrometer with visible laser excitation. J Raman Spectrosc 2015; 46(3): 327-332. DOI: 10.1002/jrs.4641.
- [6] Hu G, Xiong W, Shi H, Li Z, Shen J, Fang X. Raman spectroscopic detection using a two-dimensional spatial heterodyne spectrometer. Opt Eng 2015; 54(11): 114101. DOI: 10.1117/1.OE.54.11.114101.
- [7] Morozov AN, Tabalin SE, Fufurin IL, Svetlichnyi SI. Physical principles of the design of an interferometer with a rotating plate. J Opt Technol 2013; 80(8): 495-498. DOI: 10.1364/JOT.80.000495.
- [8] Boiko AY, Golyak IG, Golyak IS, Dvoruk SK, Dorovskikh AM, Yesakov AA, Kornienko VN, Kosenko DV, Kochikov IV, Morozov AN, Svetlichnyi SI, Tabalin SY. Static Fourier spectrometer of visible and near-ultraviolet spectral regions [In Russian]. Herald of the Bauman Moscow State Technical University: Series Natural Sciences 2009; 3: 10-28.
- [9] Heikkilä J, Silvén O. A four-step camera calibration procedure with implicit image correction. Proc CVPR 1997: 1106-1112. DOI: 10.1109/CVPR.1997.609468.
- [10] Tsai RY. A versatile camera calibration technique for high-accuracy 3D machine vision metrology using off-the-shelf TV cameras and lenses. IEEE J Robot Autom 1987; 3(4): 323-344. DOI:10.1109/JRA.1987.1087109.
- [11] Meng X, Hu Z. A new easy camera calibration technique based on circular points. Pattern Recogn 2003; 36(5): 1155-1164. DOI: 10.1016/S0031-3203(02)00225-X.
- [12] Prescott B, McLean GF. Line-based correction of radial lens distortion. Graph Models Image Process 1997; 59(1): 39-47. DOI:10.1006/gmip.1996.0407.
- [13] Zhimbueva LD. Method of determining the total distortion digital images [In Russian]. Computer Optics 2011; 35(3): 347-355. ISSN: 0134-2452.
- [14] Kunina IA, Gladilin SA, Nikolaev DP. Blind radial distortion compensation in a single image using fast Hough transform [In Russian]. Computer Optics 2016; 40(3): 395-403. DOI: 10.18287/2412-6179-2016-40-3-395-403.
- [15] Brown DC. Close-range camera calibration. Photogramm Eng 1971; 37(8): 855-866.
- [16] Song Y, Wei X, Xinqiang W, Jin H, Yanli Q. Correction of spatial heterodyne interferogram base on frequency domain analysis. Acta Optica Sinica 2013; 33(5): 0530001. DOI: 10.3788/aos201333.0530001.
- [17] Morozov AN, Svetlichnyi SI. Fundamentals of Fourier spectroradiometry [In Russian]. 2nd ed. Moscow: "Nauka" Publisher; 2014. ISBN: 978-5-02-039051-5.
- [18] Mertz L. Correction of phase errors in interferograms. Appl Opt 1963; 2(12): 1332-1332. DOI: 10.1364/AO.2.001332.
- [19] Forman ML, Steel WH, Vanasse GA. Correction of asymmetric interferograms obtained in Fourier spectroscopy. JOSA 1966; 56(1): 59-61. DOI: 10.1364/JOSA.56.000059.
- [20] Chase DB. Phase correction in FT-IR. Appl Spectrosc 1982; 36(3): 240-244. DOI:10.1366/0003702824638430.
- [21] Ben-David A, Ifarraguerri A. Computation of a spectrum from a single-beam Fourier-transform infrared interferogram. Appl Opt 2002; 41(6): 1181-1189. DOI: 10.1364/AO.41.001181.
- [22] Furstenberg R, White JO. Phase correction of interferograms using digital all-pass filters. Appl Spectrosc 2005; 59(3): 316-321. DOI: 10.1366/0003702053585345.
- [23] Wu X, Liu Z, Li H. A new model for the phase correction of interferograms. Anal Methods 2015; 7(6): 2399-2405. DOI: 10.1039/C4AY02433H.
- [24] Porter CD, Tanner DB. Correction of phase errors in Fourier spectroscopy. Int J Infrared Millim Waves 1983; 4(2): 273-298. DOI: 10.1007/BF01008607.
- [25] Rosolovsky EW, Goodman AA, Wilner DJ, Williams JP. The spectral correlation function: A new tool for analyzing spectral line maps. Astrophys J 1999; 524(2): 887-894. DOI: 10.1086/307863.
- [26] Kasseck C, Jaedicke V, Gerhardt NC, Welp H, Hofmann MR. Substance identification by depth resolved spectroscopic pattern reconstruction in frequency domain optical coherence tomography. Opt Commun 2010; 283(23): 4816-4822. DOI: 10.1016/j.optcom.2010.06.073.
- [27] Gutiérrez-Rodríguez AE, Medina-Pérez MA, Martínez-Trinidad JF, Carrasco-Ochoa JA, García-Borroto M. New dissimilarity measures for ultraviolet spectra identification. In book: Martínez-Trinidad JF, Carrasco-Ochoa JA, Kittler J, eds. Advances in Pattern Recognition. MCPR 2010. Berlin, Heidelberg: Springer; 2010: 220-229. DOI: 10.1007/978-3-642-15992-3_24.
- [28] Kochikov IV, Morozov AN, Fufurin IL. Numerical procedures for substances identification and concentration calculation in the open atmosphere by processing a single FTIR measurement [In Russian]. Computer Optics 2012; 36(4): 554-561.
- [29] Kochikov IV, Morozov AN, Svetlichnyi SI, Fufurin IL. Substance recognition in the open atmosphere from a single Fourier transform spectroradiometer interferogram. Opt Spectrosc 2009; 106(5): 666-671. DOI: 10.1134/S0030400X09050075.
- [30] Morozov AN, Kochikov IV, Novgorodskaya AV, Sologub AA, Fufurin IL. Statistical estimation of the probability of the correct substance detection in FTIR spectroscopy. Computer Optics 2015; 39(4): 614-621. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-614-621.

Authors' information

Nikolay Sergeevich Vasil'ev, born in 1986, Ph.D. (2015) is an associated professor of Physics chair of the Bauman Moscow State Technical University. His scientific interests include spectroscopy and pattern recognition. E-mail: nickliamg@gmail.com.

Ivan Borisovich Vintaykin, born in 1990, assistant of Physics chair of the Bauman Moscow State Technical University. His scientific interests include numerical methods and calculus mathematics. E-mail: vintaikin_ivan@mail.ru.

Igor Semenovich Golyak, born in 1986, Ph.D. (2015) is an associated professor of Physics chair of the Bauman Moscow State Technical University. His scientific interests include spectroscopy and digital image processing. E-mail: igorgolyak@yandex.ru.

Ilya Semenovich Golyak, born in 1986, Ph.D. (2015) is a senior researcher in the Center of Applied Physics of the Bauman Moscow State Technical University. His scientific interests include spectroscopy and optical engineering. E-mail: iliyagol@mail.ru.

Igor Viktorovich Kochikov, born in 1959, Ph.D. (Sc.D.) (2003) is a leading researcher in Scientific Research Computing Center of the Moscow University. His scientific interests include computational electrodynamics, molecular structure research, pattern recognition and image processing. E-mail: igor@kochikov.ru.

Igor Leonidovich Fufurin, born in 1984, Ph.D (2010) is an associated professor of Physics chair of the Bauman Moscow State Technical University. His scientific interests include atmospheric optics, spectroscopy and calculus mathematics. E-mail: igfil@mail.ru.

Received May 24, 2017. The final version – September 11, 2017.
