



積分方程式を解くことによる二光束干渉分光法

趙 葆常*・北出 篤夫**

* 中国科学院西安光学精密機械研究所 中華人民共和國陝西省西安市

** 名古屋大学工学部応用物理学科 〒464 名古屋市千種区不老町

(1986年12月24日受理)

Two-Beam Interference Spectroscopy by Solving an Integral Equation

Bao-Chang ZHAO* and Atsuo KITADE**

* Xian Institute of Optics and Precision Mechanics, Xian, China

** Department of Applied Physics, Faculty of Engineering, Nagoya University,
Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya 464

The relation between interferogram of two-beam interferometer and the spectrum can be regarded as an integral equation. After a slight modification of basic equation, the eigenvalue analysis based on the theory of Hilbert and Schmidt is applied to solve the integral equation. From a computer simulation, it becomes clear that the instrumental function of this method is different from that obtained by Fourier transformation and the spectrum of better S/N may be obtained in the higher wave number region. This is experimentally verified using the interferogram in the far infrared region. The drawback of this method is to need an electronic computer of large capacity.

1. はじめに

今までに、著者らは、分光装置で観測される強度分布とスペクトルの間の関係を積分方程式とみなして、これを解きスペクトルを求める手法を理論的に研究してきた。この方法を用いると、たとえば、ファブリー・ペロー干渉計を用いた狭帯域の高分解能分光法では、通常の方法より高い分解能が得られ^{1,2)}、あるいはこの干渉計を広いスペクトル領域でも用いることができる^{3,4)}。回折格子分光器の場合にもこの手法を適用でき^{5,6)}、一般のコンボリューションの式も積分方程式とみなして同様に解くことができる⁷⁾。これらの積分方程式を解くために Hilbert & Schmidt の理論に基づく固有値解析法が用いられた。その利点は、この方法が一種のフィルター作用をもち、実験的に得られたデータに含まれる雑音に対して比較的安定に解けることと、対称核のみならず非対称な複雑な核の場合にも適用できていろいろな応用が考えられることである。

著者の一人は、すでにこの手法 (以下 HSM と略す)

を広げた光源の場合の二光束干渉分光法に適用し、計算機実験で正しくスペクトルが求められることを示した⁸⁾。理想的な二光束干渉分光法の場合 (以下 FTS と略す) 干渉図形とスペクトルの間の関係は、フーリエ変換で結ばれ逆変換により直ちにスペクトルが求まる。しかしながら、この場合にも基本的関係式を若干変形し、HSM を適用すると FTS とは異なる装置関数が得られることが、計算機シミュレーションで判明した。

すなわち、FTS と HSM で得られる装置関数は、同じ半値幅をもちながらサイドローブが後者のほうが小さくなる。また、雑音が存在する場合にはそれをある程度除去する効果をもつことも知られた。それゆえ、スペクトルの S/N は HSM のほうが良くなる可能性が生じる。これは、実際に遠赤外領域で得られた干渉図形に適用されて実験的にも確かめられた。その理由は、HSM では、スペクトルの再生に二段階の計算を行ない、後半に一種の雑音フィルターがかかる結果と推定される。この点については、本論文で定性的に調べる。

FTS のデータ処理に関しては、いくつかの数学的な

取扱いが試みられている。たとえば、最大エントロピー法^{9,10}あるいは、コンボリューション法^{11,12}、数学的フィルタリング法¹³、アポダイゼーション法¹⁴等である。最大エントロピー法は非常によく分解されたスペクトルを提示する場合もあるが、すべての場合に適用できるとは限らない。アポダイゼーション法は簡単で有効な方法であるが、常に分解能の低下をもたらし、最近では良い検知器を使用した場合にアポダイゼーション法を施さない例も多い。数学的フィルタリング法では、常に注意深いデータの取扱いが必要である。Frieden はいわゆるプロレート・スフェロイド関数を用いて、回折により不鮮明になった物体の像の回復を試みた¹⁵。彼は論文の中で、その手法の分光法への応用の可能性についても述べているが、HSM ではそれぞれの核に対応した固有関数展開を行なう点でより一般的であるということが出来る。

2. HSM の装置関数

よく知られているように、理想的な二光束干渉計によって得られる干渉図形 $J(x)$ (バイアス成分を差し引いたものとする) は、その光源スペクトルを $B(\sigma)$ として次のように表わされる。

$$J(x) = \int_{\sigma_m}^{\sigma_M} (\cos 2\pi\sigma x) B(\sigma) d\sigma \quad (1)$$

ここで、 x は光路差でその最小値、最大値を X_m, X_M とし、スペクトルは σ_m から σ_M まで拡がっているものとする。この式を積分方程式とみなしたときの核の固有関数は、プロレート・スフェロイド関数である。Hilbert & Schmidt の理論によれば、そのとき解は、

$$B'(\sigma) = \sum_{n=1}^N C_n \lambda_n \phi_n(\sigma) \quad (2)$$

で表わされる。ここに λ_n, ϕ_n はそれぞれ核の固有値と固有関数で、 C_n は $J(x)$ を ϕ_n で展開したフーリエ係数である。 N は計算点の数、あるいは $J(x)$ のデータの数である。いま(2)式に従いスペクトル再生を行なうと、これは、多くの展開項を保持する必要がある点でフーリエ変換によるものと同一である。すなわち、HSM の特徴は、(2)式において、すべての固有値、固有関数を用いなくてもスペクトルが再生できる点にあるが、この場合には C_n が n の増加とともに収束せず (Fig. 1 参照)、あえて途中で切れれば、分解能を損うからである。そこで、この C_n の収束性を良くし、HSM を FTS に適用させるため、(1)式を次のように変形する。

$$D(\bar{x}) = J(\bar{x})U(\bar{x})$$

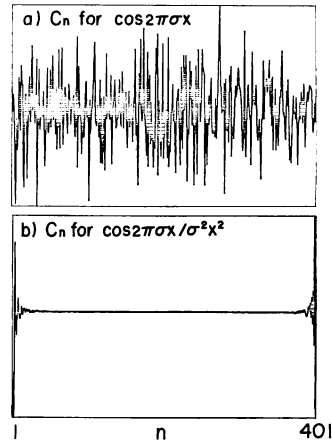


Fig. 1 Comparison of Fourier coefficients C_n for (a) $U(x)=V(\sigma)=1$ and (b) $U(x)=1/x^2$ and $V(\sigma)=1/\sigma^2$. $N=401$.

$$= \int_a^1 (\cos 2\pi\sigma M \bar{x} \bar{\sigma}) U(\bar{x}) V(\bar{\sigma}) \{B(\bar{\sigma})/V(\bar{\sigma})\} d\bar{\sigma} \quad (3)$$

$$C_n = \int_a^1 D(\bar{x}) \phi_n(\bar{x}) d\bar{x} \quad (4)$$

$$B'(\bar{\sigma}) = V(\bar{\sigma}) \sum_{n=1}^{N'} C_n \lambda_n \phi_n(\bar{\sigma}) \quad (5)$$

ここに、 $\bar{x} = x/X_M, \bar{\sigma} = \sigma/\sigma_M, a = X_m/X_M = \sigma_m/\sigma_M$ である³⁾。すなわち、核の係数行列が n の大きなところで小さな値をもつよう x, σ とともに減衰する関数 $U(x), V(\sigma)$ を乗じる (ただし、核を対称に保つため U, V は同じ形にとる)。これは、干渉図形 $J(x)$ に $U(x)$ を乗じ、光源スペクトル $B(\sigma)$ を $V(\sigma)$ で除することに相当する。このとき(4)、(5)式における λ_n, ϕ_n は、核 $\{(\cos 2\pi\sigma x)U(x)V(\sigma)\}$ の固有値と固有関数となる。この変形により、フーリエ係数は n のある領域で収束し非常に小さな値となり、(5)式の和は N より小さな N' に限定することができる。この収束性が HSM の利点をもたらす。たとえば、ファブリー・ペロ干涉分光法や、回折格子分光法では、もともとの核の形からこのような変形を行わずとも係数 C_n が収束する。

Fig. 1 に、a) $U(x)=V(\sigma)=1$ すなわち \cos 核の場合と、b) $U(x)=1/x^2, V(\sigma)=1/\sigma^2$ の場合の C_n の比較を示す。これは、装置関数の計算の過程で得られたもので、b)の場合両端での値を 1 とし、中央付近では 10^{-5} と非常に小さな値をとる。すべての分光情報は干渉図形 $J(x)$ に含まれるゆえ、 C_n では一種の情報の局在化が起こっていると解釈できる。そのため、(5)式でこれらの中央部分を用いないでスペクトルを再生したと

き、そのスペクトルは FTS とは異なった様子を示し、しかも分解能が低下しないことが予想される。\$U(x)\$ と \$V(\sigma)\$ に別の形を与えたときも同様に解けるが、その結果はこの場合とほとんど変わらない。ただし、あまり強い減衰は計算誤差を生じ、逆に弱い減衰では効果が小さい。

実際のスペクトルの計算では、まず干渉図形のサンプリング間隔 \$\Delta x\$ とサンプリング点数 \$N\$ が与えられ、\$\Delta\sigma=1/2 X_M\$ からスペクトルの計算点間隔 \$\Delta\sigma\$ と最大波数 \$\sigma_M\$ が決まる。また \$\sigma_m=2\Delta\sigma\$、\$X_m=2\Delta x\$ とする。これは、ある程度任意であるが、今の例では、全体の \$1/200\$ 以下であり実際のスペクトルでは問題とならない。そのため、以下の FTS と HSM の比較ではそれぞれ \$x=0\$ から \$X_M\$ までの \$(N+2)\$ 個と \$X_m\$ から \$X_M\$ までの \$N\$ 個の干渉図形点を用いて行なう。

Fig. 2 は \$N'\$ による装置関数の変化の様態を示している。\$N'\$ が \$N\$ に近いとき装置関数は全部の固有値を使った場合に近い。しかし、\$N'\$ を小さくしていくと、半

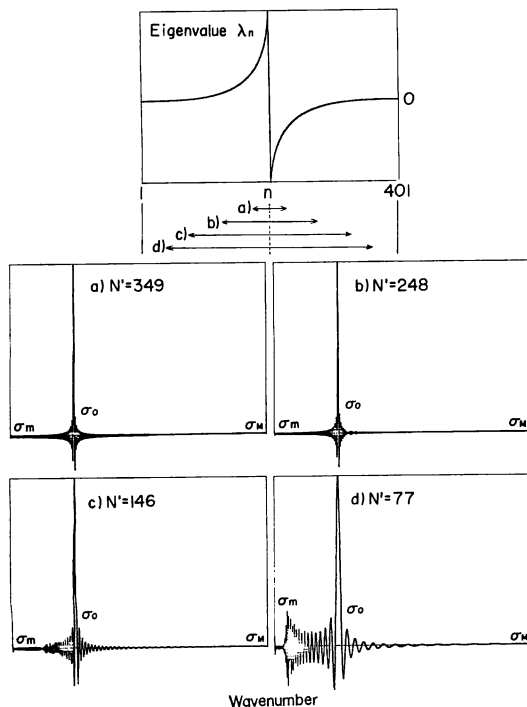


Fig. 2 Variation of instrumental functions of the present method with \$N'\$. The upper figure is the variation of eigenvalues \$\lambda_n\$ and arrows indicate the regions of \$n\$ which are not used in the recovery of instrumental functions. \$\sigma_m=0.493\text{ cm}^{-1}\$, \$\sigma_M=197.534\text{ cm}^{-1}\$, \$\sigma_0=50\text{ cm}^{-1}\$ and \$N=401\$. \$U(x)=1/x^2\$ and \$V(\sigma)=1/\sigma^2\$.

値幅は変わらないでサイドローブだけが小さくなっていく。さらに \$N'\$ を小さくすると、装置関数の歪みと半値幅の拡がりを観測する。これは、\$\sigma_m=0.983\text{ cm}^{-1}\$, \$\sigma_M=197.534\text{ cm}^{-1}\$, \$X_m=0.050624\text{ mm}\$, \$X_M=10.175\text{ mm}\$, \$\sigma_0=50\text{ cm}^{-1}\$ (仮定したデルタ関数の位置), \$N=401\$ で計算されたものである。また、\$U(x)=1/x^2\$ である。\$N'=248\$ での \$110\text{ cm}^{-1}\$ 以上における RMS 値は、\$2.42\times 10^{-5}\$ で、FTS のそれは \$2.17\times 10^{-4}\$ であるから 1 桁小さい。

実際の \$N'\$ の選択の仕方については、次のように考える。計算機でなんらかのサブルーチンを使って計算される固有値、固有関数は、核の行列に対するもので、積分方程式の固有値としてはその逆数を取らなければならない³⁾。すなわち、大きな固有値に大きな計算機誤差が含まれることになる。そこで、逆数を取る前の固有値に対して、ある最小値を設定し、それ以下ならば(5)式の再生に使用しないことにする。その設定値を変えて、装置関数の形を調べていけば最良の \$N'\$ を見いだすことができる。\$U(x)=1/x^2\$ のときは、\$N\$ の半分に近い。

実際の場合には干渉図形 \$J(x)\$ には雑音 \$\epsilon(x)\$ が含まれる。そのとき対応するフーリエ係数 \$C_n'\$ は、次のように書かれる。

$$C_n' = \int_a^1 \epsilon(x) U(x) \phi_n(x) dx \quad (6)$$

\$J(x)\$ に比した \$\epsilon(x)\$ の不規則性のゆえにフーリエ係数の \$n\$ に関する収束性が悪い。そのため、(5)式の和の項数を \$N'\$ に限定したとき、雑音パワーは、\$N'\$ に関係して減少することになる。したがって、再生されたスペクトルにおいては、\$S/N\$ が向上することが定性的にわかる。

Fig. 3 は、規格化された干渉図形 \$J(x)\$ にピーク値 \$\pm 0.05\$ のランダム雑音 (RMS 値 \$1.01\times 10^{-3}\$) を入れた場合の装置関数を、HSM, FTS, FTSA (三角形のアポダイゼーション法を施した FTS) で比較したものである。HSM の場合、\$N'=242\$ である。低波数側では HSM と FTS にほとんど差がないが、\$110\sim 197\text{ cm}^{-1}\$ での RMS 値はそれぞれ \$1.49\times 10^{-4}\$, \$2.96\times 10^{-4}\$, \$2.62\times 10^{-4}\$ であり、FTS に比べて HSM のほうが約 2 倍よくなっている。雑音 \$\pm 0.01\$ の場合にはこの利得は約 6 倍となる。半値幅は、FTS と HSM で差がなく、FTSA は拡がる。この場合には、\$U(x)=1/x^3\$、\$V(\sigma)=1/\sigma^3\$ を用いた。これらのことから、実際のスペクトルに適用した場合にも HSM は高波数側で良い \$S/N\$ をもつことが期待される。

以上の考察より、HSM は二つの効果をもつことがわ

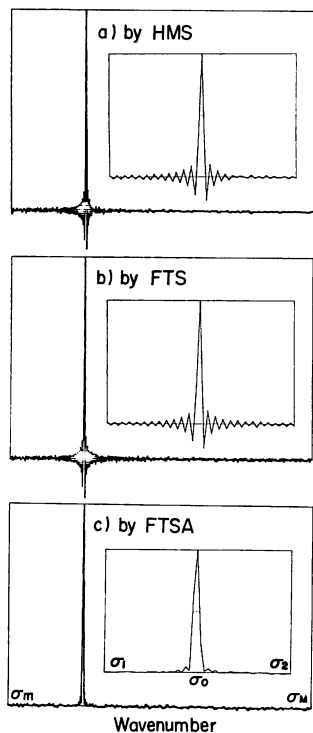


Fig. 3 Comparison of instrumental functions by (a) HSM, (b) FTS and (c) FTSA in the presence of noise with its peak value of ± 0.05 and the RMS value of 1.01×10^{-3} , $N' = 242$, $U(x) = 1/x^3$ and $V(\sigma) = 1/\sigma^3$. $\sigma_1 = 37.7 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_2 = 62.3 \text{ cm}^{-1}$. The other parameters are the same as in Fig. 2.

かる。一つは、FTS に比較してサイドローブの小さな装置関数をもつことであり、他方は、雑音をある程度軽減することである。

3. 遠赤外領域における実験結果

以上の利点を確認するため、遠赤外領域 (測定可能領域は 10 cm^{-1} から 110 cm^{-1} まで) の偏光干渉計で得られた干渉図形 $J(x)$ に対し HSM 法を適用した。試料は、圧力 4 mmHg 、光路長 60 cm の CD_3OH である。この干渉図形はゴーレイ検知器を使って得られたもので、比較的検知器雑音が多い。データ数は 801、サンプリング間隔は $0.6328 \times 40 \mu\text{m}$ で ($\sigma_M = 197.534 \text{ cm}^{-1}$)、 N と X_M 以外のパラメーターは、上述の装置関数のシミュレーションに使用されたものと同一である。

FTS と HSM による結果が Fig. 4 に示されている。明らかに高波数側で差異が認められ、上述の装置関数シミュレーションの傾向と一致する。すなわち、強度の弱

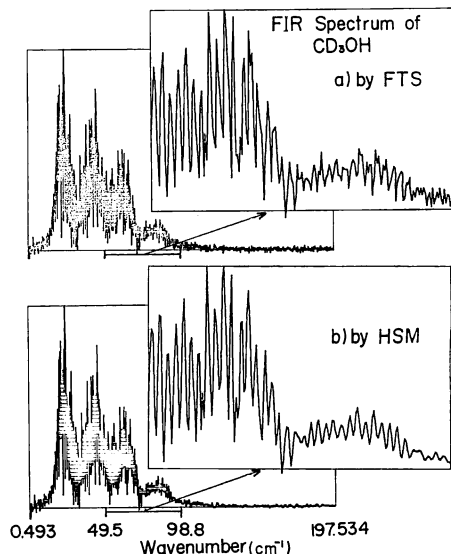


Fig. 4 Far infrared spectrum of CD_3OH by (a) FTS and (b) HSM. $N = 801$ and $N' = 464$. $\Delta\sigma = 0.246 \text{ cm}^{-1}$. $U(x) = 1/x^2$ and $V(\sigma) = 1/\sigma^2$.

い 70 cm^{-1} 以上において雑音軽減によるスペクトルの信頼性が増したものと考えられる¹⁶⁾。FTSA での結果では明らかに分解能の低下が見られる。

計算時間は、VP-100 を用いて約 200 s と非常に長いですが、その大半は固有値解析に用いられており、これは条件が与えられればあらかじめ計算して記憶させておき、必要なときに取り出して使えばよいので実際には、数秒以内でスペクトルが再生される。

4. おわりに

Hilbert & Schmidt の理論に基づく固有値解析法をフーリエ分光法へ適用した結果を報告した。HSM は計算時間と計算機容量が多く必要であるが、高波数側で FTS よりも良い S/N を示し、また、FTSA のように分解能を低下させることもない。スペクトル再生の際、パラメーター N' の決め方が問題となるが、上述のように同一条件の装置関数シミュレーションから求めてもよいが、雑音対策の観点から別の解法が考えられるので現在検討中である。HSM の数学的な取扱いは解析的に行えないので、雑音の除去がどのようなフィルターによるものかを定量的に考察したり、他の手法との比較をすることは困難であるが、少なくとも元のスペクトルがどのような形であっても適用できる一般性をもっている。逆に最大エントロピー法のような大幅な分解能の改善は望めない。また、フーリエ変換と数学的なフィルターを組み合わせる方法との直接の比較は行っていないが、

その場合は分解能と雑音のバランスの取り方が HSM よりも難しいようである。

HSM には他の二光束干渉分光法への応用がいろいろと考えられる。たとえば、可視領域においては、コンペンセーターの精度が重要になり調整が困難となるが、これがない場合には、非常に装置的に簡単化された安定な分光法となりうる。他方、干渉図形は複雑になるが、核の形が計算で求められるので、HSM でスペクトルを再生することが可能である。集光鏡や平行鏡を用いない、さらに一般化された干渉計の場合も同様であり、HSM の有効性は高まるものと考えられる。将来、大容量の計算機が簡単に手で使用でき、また、固有价值解析の新しいアルゴリズムが出現すれば、さらに使いやすくなるであろう。

おわりに、本研究につき終始ご指導いただいたキクチ眼鏡専門学校吉原邦夫先生に深く感謝いたします。

文 献

- 1) K. Okada, K. Yoshihara and A. Kitade: "New method of determining spectral line profile using the Fabry-Perot interferometer," *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*, **25** (1986) L918-L921.
- 2) A. Kitade, K. Okada and K. Yoshihara: "Détermination de profils de raies spectrales par déconvolution d'interférogrammes Pérot Fabry," *J. Opt.*, **18** (1987) 57-62.
- 3) K. Yoshihara, B. C. Zhao and A. Kitade: "Far infrared spectroscopy by the Fabry-Perot interferometer IV," *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*, **24** (1985) L207-L209.
- 4) K. Yoshihara and B. C. Zhao: "Far infrared spectroscopy by the Fabry-Perot interferometer V," *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*, **24** (1985) L573-L577.
- 5) K. Yoshihara, A. Kitade and M. Tazawa: "A new method of grating spectroscopy," *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.*, **23** (1983) L400-L402.
- 6) B. C. Zhao, A. Kitade, K. Yoshihara and M. Tazawa: "A new spectroscopic method using the Fraunhofer diffraction pattern," *J. Infrared Milli. Waves*, **3** (1984) 985-996.
- 7) A. Kitade, Y. Iki and M. Tazawa: "Reconstruction and deconvolution of spectrum in grating spectroscopy,—computer simulation—," *J. Spectrosc. Soc. Jpn.*, **36** (1987) 30-35.
- 8) A. Kitade: "Fourier transform spectroscopy with an extended source of radiation,—computer simulation—," *Infrared Phys.*, **25** (1985) 715-721.
- 9) S. Kawata, K. Minami and S. Minami: "Super-resolution of Fourier transform spectroscopy data by the maximum entropy method," *Appl. Opt.*, **22** (1983) 3593-3598.
- 10) N. Iwama, A. Inoue and T. Tsukishima: "Least-square autoregressive (maximum entropy) spectral estimation for Fourier spectroscopy and its application to the electron cyclotron emission from plasma," *J. Appl. Phys.*, **52** (1981) 5466-5475.
- 11) J. K. Kaupinenn, D. J. Moffat, H. H. Mantsch and D. G. Cameron: "Fourier self-deconvolution," *Appl. Spectrosc.*, **35** (1981) 271-278.
- 12) G. W. Halsey and W. E. Blass: "Deconvolution examples," *Deconvolution with Application in Spectroscopy*, ed. P. A. Jansson (Academic Press, New York, 1984) pp. 187-225.
- 13) K. Minami, S. Kawata and S. Minami: "Super-resolution of Fourier transform spectra by autoregressive model fitting with singular value decomposition," *Appl. Opt.*, **24** (1985) 162-167.
- 14) V. A. Vagin: "Quasi-optimal apodization in Fourier spectroscopy," *Opt. Spectrosc.*, **54** (1983) 209-212.
- 15) B. R. Frieden: "Band-unlimited reconstruction of optical objects and spectra," *J. Opt. Soc. Am.*, **57** (1967) 1013-1019.
- 16) 岩下智明, 岡田克彦, 北出篤夫: "メチルアルコールの同位体種の遠赤外吸収スペクトル", *分光研究*, **35** (1986) 154-162.