



西南科技大学

硕士研究生学位论文开题报告

学 号： 7020210232

姓 名： 吴豪

学 院： 信息工程学院

专业(领域)： 信息与通信工程

研究方向： 通信与信息系统

导师姓名： 郑万国、刘爽利

攻 读 学 位： 工学硕士

2022 年 10 月 31 日

论文题目	融合自注意力机制的光谱重建技术研究		
选题来源	学校自选项目	论文类型	综合研究
开题日期	2022-11-09	开题地点	东 9A4-48

一、立题依据（包括研究目的、意义、国内外研究现状和发展趋势，需结合科学研究发展趋势来论述科学意义；或结合国民经济和社会发展中迫切需要解决的关键科技问题来论述其应用前景。附主要参考文献目录）（不少于 800 字）

1.1 研究目的

本研究拟通过对计算型光谱系统的编码效应进行原理分析，并利用现有的特征和去噪算法，提取编码的特征分析和去噪处理，以得到高质量的特征数据。利用自注意力机制提高特征间的自相关性原理，融合到光谱重建技术中，提高光谱重建结果的准确性和精度，使得新型计算光谱设备能够准备检测出目标物体的光谱信息。

1.2 研究意义

光谱，作为光与物质相互作用后承载物质“指纹”信息的载体，能够有效反映目标物体的理化特性。通过光谱分析设备，将物体的辐射（或者反射信号）分离成不同波长的光谱信息，利用所获取的高分辨率光谱信息结合物体的“指纹效应”，可以实现对目标特性的识别。因此，作为一种非接触式、连续在线、可多组分测量且灵敏度高、检测范围广的检测手段，光谱检测技术在生物医药、食品检验、化学分析，医疗保健，环境监测，远程探测，半导体工业，太阳能，物联网，安全控制，防伪等诸多领域都有着重要应用。

要获得一个物体的光谱信息需要一个光谱采集系统目前的光谱采集系统主要分为计算型和传统光谱信息采集系统二种，二者的区别在于原始数据是否只有经过某种算法变换才能被人直观理解，即系统硬件获取的原始数据与算法转换后的输出数据不同，这使得计算成为计算型系统的核心。计算光谱系统通常包括光谱调制或欠采样部分，往往采用了复杂的算法从原始数据中提取光谱信息，以获得变换过后的光谱数据。然而随着光谱重建技术的发展，大多数的光谱系统或多或少也都采用了一定重建算法，例如压缩感知、字典学习和稀疏编码等。

在传统光谱采集系统中，直接通过窄谱滤波片得到物体光谱信息，但整个系统的体积庞大和极度的复杂。同时，当在较暗场景中检测光谱时信噪比极低甚至全是噪声信号。而对于计算光谱系统，通过宽谱滤光片构成但这使得光谱系统探测到的数据看起来与原始光谱完全不同。运用压缩感知到计算光谱系统中进行光谱重建，将这个过程变成了从较低维

向量恢复较高维向量的数学问题，从而高概率恢复稀疏光谱，原始光谱被通过计算恢复，使得计算光谱系统能够在较暗场景中得到物体准确的光谱。

计算型光谱系统目前存在着一个主要问题是光谱的准确度不高和精度不够，所以需要运用各种重建算法来解决准确度和精度问题，目前基于传统机器学习的光谱重建技术都存在一些不足的地方，并不能得到足够准确和高精度的目标光谱。而伴随着深度学习在图像识别，图像分类，语音识别，目标物体检测等领域的广泛应用并取得了良好的结果，鉴于深度学习强大的适应能力，许多学者将其运用到光谱重建中。这些模型随后也被证明确实比传统的机器学习方法更有效。

深度学习模型一般具体强大的非线性拟合的效果，自注意力机制能够使得模型在训练时更关注于自身特征自相关性，而在光谱重建中噪音和特征的自相关性是比较重要的因素，而深度学习中的自注意力机制能够很好的利用特征间自相关的特点。因此，本文主要拟研究将深度学习中的自注意力机制融合到光谱重建中，以达到光谱重建更高的准确度和精度。

1.3 国内外研究现状和发展趋势

从计算光谱系统中获取一组原始数据（1D）并通过复杂的算法进行重建得到物体光谱信息。物体的光谱信息对物体检测、分类和图像成像都起着无比重要的作用，目前大多都是利用传统的机器学习算法来对物体光谱重建，而基于深度学习的光谱重建研究比较少。传统算法中大多基于先验知识进行训练，而深度学习更多是基于数据驱动来训练。

Chang and Lee (2008)^{[2][3]}利用非负约束最小二乘（NNLS）算法重建光谱数据。2011年，Chang^[7]改进了他们的算法实现，并对重建精度进行更为复杂的分析。他们采用高斯核模板进行降噪重建，并将算法改进为 l_1 范数最小化方法。Oliver 等人（2012）^[10]（与 Chang 相同的团队）利用了信号频谱的稀疏性，表明分辨率可以进一步提高，超过滤波器数量所设置的限制。张尚，董玉涵（2018）^[32]提出了一种基于稀疏优化和字典学习的重建算法，为了验证重建算法的有效性，设计并实现了一个简单的基于滤波器的微型光谱仪原型。实验结果表明， l_1 -范数最小化不仅对直接稀疏谱有效，而且对需要在字典中进行转换的一般谱也有效，说明字典学习可以在很大程度上提高一般谱的稀疏性。2019 年浙大杨宗银^[31]利用高斯基函数拟合的重建光谱数据，并且结合起来成功做成了世界上第一个微型化计算光谱仪。2020 年黄义东，崔开宇等人^[33]利用稀疏编码方法并结合压缩感知的算法，专注于寻找基谱（谱子字典）及其系数来表示。由于基础编码是过完备的，因此保证系数是稀疏的。使得光谱重建的准确度有了一定的保障，但是光谱分辨率不够高且设备较大不

够微型化。

上面的方法多是基于先验知识，并且严重依赖于选定的先验和已知的滤波函数。为了克服这些限制，现在有学者提出了基于深度学习的方法。比如线性卷积神经网络 CNN 在各个领域得到了很多应用。线性 CNN 是一堆卷积层，输入从初始层依次流向后面的层。这种网络架构只有一条路径，不包括多个分支。但因为其线性的关系不能够使得一些噪音也得到好的拟合，而 U-Net 模型由编码器和解码器组成。编码器通过连续的下采样操作提取编码不同的特征。解码器的上采样操作将特征图恢复到具有更多光谱带的原始光谱大小。U-Net 网络一般是做图像处理比如分类，切割作为输入，也可以做 RGB 重建高光谱图像是通过编码器和解码器内部的复杂变换将它们映射到高维光谱图像。2022 年黄义东，崔凯玉团队利用了的编码解码器模型的这个特点将光谱特征输入到网络中，成功使得从 25 个特征点重建 100 个波段的光谱信息，提高了 4 倍的光谱分辨率的同时使得光谱准确率与商用光谱仪的结果对比有着百分之九十左右的准确率，但依旧准备一些峰值不匹配和宽谱重建效果不好的问题。

参考文献

- [1]Hagen NA, Kudenov MW, 2013. Review of snapshot spectral imaging technologies. Opt Eng, 52(9):090901. <https://doi.org/10.1117/1.oe.52.9.090901>
- [2]Bulygin TV, Vishnyakov GN, 1992. Spectrotomography: a new method of obtaining spectrograms of two dimensional objects. Analytical Methods for Optical Tomography, p.315-323. <https://doi.org/10.1117/12.131904>
- [3]Candès EJ, Wakin MB, 2008. An introduction to compressive sampling. IEEE Signal Process Mag, 25(2):21-30. <https://doi.org/10.1109/msp.2007.914731>
- [4]Candès EJ, Romberg J, Tao T, 2006. Robust uncertainty principles: exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information. IEEE Trans Inform Theory, 52(2):489-509. <https://doi.org/10.1109/tit.2005.862083>
- [5]Baraniuk RG, 2007. Compressive sensing. IEEE Signal Process Mag, 24(4):118-121. <https://doi.org/10.1109/msp.2007.4286571>
- Rajwade A, Kittle D, Tsai TH, et al., 2013. Coded hyperspectral imaging and blind compressive sensing. SIAM J Imag Sci, 6(2):782-812. <https://doi.org/10.1137/120875302>
- [6]Vigneau E, Devaux MF, Qannari EM, et al., 1997. Principal component regression, ridge

- regression and ridge principal component regression in spectroscopy calibration. *JChemomet*, 11(3):239-249. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-128X\(199705\)11:3<239::AID-CEM470>3.0.co;2-A](https://doi.org/10.1002/(SICI)1099-128X(199705)11:3<239::AID-CEM470>3.0.co;2-A)
- [7]Kurokawa U, Choi BI, Chang CC, 2011. Filter-based miniature spectrometers: spectrum reconstruction using adaptive regularization. *IEEE Sens J*, 11(7):1556-1563. <https://doi.org/10.1109/jsen.2010.2103054>
- [8]Das AJ, Wahi A, Kothari I, et al., 2016. Ultra-portable, wireless smartphone spectrometer for rapid, non-destructive testing of fruit ripeness. *Sci Rep*, 6:32504. <https://doi.org/10.1038/srep32504>
- [9]Okamoto T, Yamaguchi I, 1991. Simultaneous acquisition of spectral image information. *Opt Lett*, 16(16):1277-1279. <https://doi.org/10.1364/ol.16.001277>
- [10]Oliver J, Lee W, Park S, et al., 2012. Improving resolution of miniature spectrometers by exploiting sparse nature of signals. *Opt Expr*, 20(3):2613-2625.
- [11]Oliver J, Lee WB, Lee HN, 2013. Filters with random transmittance for improving resolution in filter-array-based spectrometers. *Opt Expr*, 21(4):3969-3989. <https://doi.org/10.1364/oe.21.003969>
- [12]Hansen P, Strong J, 1972. High resolution Hadamard transform spectrometer. *Appl Opt*, 11(3):502-506. <https://doi.org/10.1364/AO.11.000502>
- [13]Hayes MH, 1996. *Statistical Digital Signal Processing and Modeling*. John Wiley & Sons, New York, USA.
- [14]Golay MJE, 1951. Static multislit spectrometry and its application to the panoramic display of infrared spectra. *J Opt Soc Am*, 41(7):468-472. <https://doi.org/10.1364/josa.41.000468>
- [15]Wang Z, Yi S, Chen A, et al., 2019. Single-shot on-chip spectral sensors based on photonic crystal slabs. *Nat Commun*, 10(1):1020. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-08994-5>
- [16]Willett RM, Gehm ME, Brady DJ, 2007. Multiscale reconstruction for computational spectral imaging. *Computational Imaging V*, Article 64980L. <https://doi.org/10.1117/12.715711>
- [17]Wolffenbuttel RF, 2004. State-of-the-art in integrated optical microspectrometers. *IEEE Trans Instrum Meas*, 53(1): 197-202. <https://doi.org/10.1109/tim.2003.821490>
- [18]Soldevila F, Irlles E, Durán V, et al., 2013. Single-pixel polarimetric imaging spectrometer by compressive sensing. *Appl Phys B*, 113(4):551-558.

- [19]Shaltout A, Liu JJ, Kildishev A, et al., 2015. Photonic spin Hall effect in gap—plasmon metasurfaces for on-chip chiroptical spectroscopy. *Optica*, 2(10):860-863. <https://doi.org/10.1364/optica.2.000860>
- [20]Rueda H, Arguello H, Arce GR, 2015. DMD-based implementation of patterned optical filter arrays for compressive spectral imaging. *J Opt Soc Am A*, 32(1):80-89. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.32.000080>
- [21]Sun T, Kelly K, 2009. Compressive sensing hyperspectral imager. *Computational Optical Sensing and Imaging*, Article CTuA5. <https://doi.org/10.1364/COSI.2009.CTuA5>
- [22]Swift RD, Wattson RB, Decker JA, et al., 1976. Hadamard transform imager and imaging spectrometer. *Appl Opt*, 15(6):1595-1609. <https://doi.org/10.1364/AO.15.001595>
- [23]Takhar D, Laska JN, Wakin MB, et al., 2006. A new compressive imaging camera architecture using optical domain compression. *Computational Imaging IV*, Article 606509. <https://doi.org/10.1117/12.659602>
- [24]Wagadarikar A, John R, Willett R, et al., 2008. Single disperser design for coded aperture snapshot spectral imaging. *Appl Opt*, 47(10):B44-B51. <https://doi.org/10.1364/ao.47.000b44>
- [25]Wagadarikar AA, Pitsianis NP, Sun XB, et al., 2009. Video rate spectral imaging using a coded aperture snapshot spectral imager. *Opt Expr*, 17(8):6368-6388. <https://doi.org/10.1364/oe.17.006368>
- [26]Wang LZ, Xiong ZW, Gao DH, et al., 2015. Dual-camera design for coded aperture snapshot spectral imaging. *Appl Opt*, 54(4):848-858. <https://doi.org/10.1364/ao.54.000848>
- [27]Redding B, Liew SF, Sarma R, et al., 2013. Compact spectrometer based on a disordered photonic chip. *Nat Photon*, 7(9):746-751. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2013.190>
- [28]Ren WY, Fu C, Arce GR, 2018. The first result of compressed channeled imaging spectropolarimeter. *Imaging and Applied Optics*, Article JT4A.21. <https://doi.org/10.1364/3D.2018.JT4A.21>
- [29]Huang E, Ma Q, Liu ZW, 2017. Etalon array reconstructive spectrometry. *Sci Rep*, 7:40693. <https://doi.org/10.1038/srep40693>
- [30]Miniaturization of optical spectrometers. *ZongYin Yang SCIENCE* 29 Jan 2021 Vol 371, Issue 6528. [DOI: 10.1126/science.abe0722](https://doi.org/10.1126/science.abe0722).

- [31][Single-nanowire spectrometers](#). ZongYin Yang SCIENCEVOL. 365, NO. 645706 SEP 2019 : 1017-1020NO ACCESS. DOI: [10.1126/science.aax8814](#)
- [32]A Spectral Reconstruction Algorithm of Miniature Spectrometer Based on Sparse Optimization and Dictionary Learning. Shang Zhang , Yuhua Dong(2018).
- [33] One-shot ultraspectral imaging with reconfigurable metasurfaces. Xusheng Cai, Jian Xiong, Kaiyu Cui(2019).
- [34] T. Adao, J. Hruška, L. Pádua, J. Bessa, E. Peres, R. Morais, and J. J. Sousa, “Hyperspectral Imaging: A Review on UAV-Based Sensors, Data Processing and Applications for Agriculture and Forestry,” (2017).
- [35] M. E. Paoletti, J. M. Haut, J. Plaza, and A. Plaza, “Deep learning classifiers for hyperspectral imaging: A review,” ISPRS J. Photogramm. Remote. Sens. 158, 279–317 (2019).
- [36]R. Calvini, A. Ulrici, and J. M. Amigo, “Chapter 3.9 - Growing applications of hyperspectral and multispectral imaging,” in Hyperspectral Imaging, vol. 32 J. M. B. T. D. H. i. S. Amigo and Technology, eds. (Elsevier, 2020), pp. 605–629.
- [37]T. W. Sawyer and S. E. Bohndiek, “Towards a simulation framework to maximize the resolution of biomedical hyperspectral imaging,” Proc. SPIE 10412, 104120C (2017).
- [38] T. W. Sawyer, C. Williams, and S. E. Bohndiek, “Spectral band selection and tolerancing for multispectral filter arrays,” in Frontiers in Optics - Proceedings Frontiers in Optics + Laser Science APS/DLS, (2019).
- [39] X. Soria, A. D. Sappa, and R. I. Hammoud, “Wide-Band Color Imagery Restoration for RGB-NIR Single Sensor Images,” Sensors 18(7), 2059 (2018).
- [40]M. Jahanirad, A. W. A. Wahab, and N. B. Anuar, “An evolution of image source camera attribution approaches,” Forensic Sci. Int. 262, 242–275 (2016).
- [41]K. E. Paul and V. S. Saraswathibai, “Maximum accurate medical image demosaicing using WRGB based Newton Gregory interpolation method,” Measurement 135, 935–942 (2019). 15. M. Jahanirad, A. W. A. Wahab, and N. B. Anuar, “An evolution of image source camera attribution approaches,” Forensic Sci. Int. 262, 242–275 (2016).
- [42] K. E. Paul and V. S. Saraswathibai, “Maximum accurate medical image demosaicing using WRGB based Newton Gregory interpolation method,” Measurement 135, 935–942 (2019).
- [43] C. Williams, G. S. Gordon, T. D. Wilkinson, and S. E. Bohndiek, “Grayscale-to-Color:

- Scalable Fabrication of Custom Multispectral Filter Arrays,” *ACS Photonics* 6(12), 3132–3141 (2019).
- [44] A. H. Macleod, *Thin-Film Optical Filters* (CRC Press, 2017), 5th ed.
- [45] J. Jia, K. J. Barnard, and K. Hirakawa, “Fourier Spectral Filter Array for Optimal Multispectral Imaging,” *IEEE Transactions on Image Process.* 25(4), 1530–1543 (2016).
- [46] B. Henz, E. S. L. Gastal, and M. M. Oliveira, “Deep joint design of color filter arrays and demosaicing,” *Comput. Graph. Forum.* 37(2), 389–399 (2018).
- [47] S. Nie, L. Gu, Y. Zheng, A. Lam, N. Ono, and I. Sato, “Deeply learned filter response functions for hyperspectral reconstruction,” in *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, (2018), pp. 4767–4776.
- [48] J. Li, C. Bai, Z. Lin, and J. Yu, “Optimized color filter arrays for sparse representation-based demosaicking,” *IEEE Transactions on Image Process.* 26(5), 2381–2393 (2017).
- [49] K. Shinoda, M. Kawase, M. Hasegawa, M. Ishikawa, H. Komagata, and N. Kobayashi, “Joint optimization of multispectral filter arrays and demosaicking for pathological images,” (2018).
- [50] B. Arad, O. Ben-Shahar, and R. Timofte, “Ntire 2018 challenge on spectral reconstruction from rgb images,” in *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops*, (2018), pp. 929–938.
- [51] J. Aeschbacher, J. Wu, and R. Timofte, “In defense of shallow learned spectral reconstruction from rgb images,” in *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision Workshops*, (2017), pp. 471–479.
- [52] B. Sun, N. Yuan, C. Cao, and J. Y. Hardeberg, “Design of four-band multispectral imaging system with one single-sensor,” *Futur. Gener. Comput. Syst.* 86, 670–679 (2018).
- [53] N.-S. Syu, Y.-S. Chen, and Y.-Y. Chuang, “Learning Deep Convolutional Networks for Demosaicing,” *arXiv:1802.03769* (2018).
- [54] N. Savage, *Nat. Photonics* 3, 601–602 (2009).
- [55] R. F. Wolffenbuttel, *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 53, 197–202 (2004).
- [56] O. Manzardo, H. P. Herzig, C. R. Marxer, N. F. de Rooij, *Opt. Lett.* 24, 1705–1707 (1999).
- [57] H. Y. Zhang, X. L. Wang, J. Soos, J. Crisp, *Proc. SPIE* 2475, 376–383 (1995).
- [58] D. Sander, J. Muller, *Sens. Actuators A Phys.* 88, 1–9 (2001).

- [59] J. Bao, M. G. Bawendi, *Nature* 523, 67–70 (2015).
- [60] U. Kurokawa, B. I. Choi, C.-C. Chang, *IEEE Sens. J.* 11, 1556–1563 (2011).
- [61] F. Gu, H. Yu, W. Fang, L. Tong, *Appl. Phys. Lett.* 99, 181111 (2011).
- [62] P. Ren et al., *Adv. Mater.* 26, 7444–7449 (2014).
- [63] X. Hu et al., *Adv. Opt. Mater.* 6, 1800293 (2018).
- [64] C. J. Kim et al., *Adv. Mater.* 23, 1025–1029 (2011).
- [65] B. Tian, T. J. Kempa, C. M. Lieber, *Chem. Soc. Rev.* 38, 16–24 (2009).
- [66] X. Zhuang, C. Z. Ning, A. Pan, *Adv. Mater.* 24, 13–33 (2012).
- [67] C.-Z. Ning, L. Dou, P. Yang, *Nat. Rev. Mater.* 2, 17070 (2017).
- [68] Z. Yang et al., *Nano Lett.* 11, 5085–5089 (2011).
- [69] T. Kuykendall, P. Ulrich, S. Aloni, P. Yang, *Nat. Mater.* 6, 951–956 (2007).
- [70] F. Gu et al., *J. Am. Chem. Soc.* 133, 2037–2039 (2011).
- [71] Z. Yang et al., *Nano Lett.* 14, 3153–3159 (2014).
- [72] See supplementary materials.
- [73] T. Yang, C. Li, Z. Wang, H. Ho, *Optik* 124, 1377–1385 (2013).
- [74] C. C. Chang, H. N. Lee, *Opt. Express* 16, 1056–1061 (2008).
- [75] N. Blind, E. Le Coarer, P. Kern, S. Gousset, *Opt. Express* 25, 27341–27369 (2017).
- [76] D. J. Mulla, *Biosyst. Eng.* 114, 358–371 (2013).
- [77] J. S. Bouillard, S. Vilain, W. Dickson, A. V. Zayats, *Opt. Express* 18, 16513–16519 (2010).
- [78] A. S. Stender et al., *Chem. Rev.* 113, 2469–2527 (2013).
- [79] A. T. Harris, *Cytometry A* 69, 872–879 (2006).

二、研究内容和目标（说明课题的具体研究内容，研究目标和效果，以及拟解决的关键科学问题。此部分为重点阐述内容）（不少于 2500 字）

2.1 研究内容

经过充分的调研、分析光谱重建原理和特征的构成与计算光谱系统的设计原理基础上，针对计算光谱系统编码矩阵的设计，提出了利用不同滤波函数相同的排列方式和相同的滤波函数不同排列方式两种方法来构成新的编码矩阵；为了得到更清晰明确的特征信息，利用现有的去噪算法来获得更易重建的数据；因为目前的重建算法不能很好的考虑到滤波函数转换后的自相关性，因此利用自注意力机制能够更好的寻找自相关特征的优势，将其融合到光谱重建中，以得到更高准确性和精度的光谱信息。具体的研究内容包括以下几个部分：

（1）利用不同滤波函数相同排列设计光谱重建编码矩阵

计算光谱系统为了得到光谱的过程大致分为两步第一步是由入射光经过设计的材料的滤波函数进行转换得到的编码，第二步将编码进行重建从而得到目标光谱信息。对于编码矩阵的设计会影响这重建结果，因此本课题拟提出利用不同滤波函数但相同排列的方法来设计光谱重建的编码矩阵。该方法通过设计不同的透过的滤波函数并对该滤波函数进行测试和材料筛选，做到能够设计的同时具有真实的材料，能够使得编码特征更加明显和好分辨，为重建提高准确度。

（2）利用相同滤波函数不同排列方式设计光谱重建编码矩阵

在传统的彩色 CCD 成像中，三原色波段绿色占比相对于蓝色和红色更多，并且还有一定的排列方式，比如间隔排列和二叉树排列等。而光谱重建矩阵中也需要设计其波段的排列方式，因此需要对该排列方式进行研究，本课题中拟采用二叉树排列的方式来设计编码矩阵的排列方式，二叉树的排列方式能够使得相近波段的透过率函数以一定的上下级或者平级的特点来使得滤波函数特征表达更加明确，同时使得编码矩阵的特征能够更加明显清晰和有利于区别与噪音，使得光谱重建的要求降低，同时使用联合优化方法，通过同时考虑空间变量和光谱变量，可以获得最好的性能。

（3）融合自注意力机制的光谱重建技术研究

根据设计的编码矩阵来构建光谱重建的数据集并进行算法重建，但目前各种利用传统算法重建的光谱准确度、精度和分辨率依旧不够，因此需要新的算法来获得更高准确率和精度。本文就拟研究将自注意力机制融合进光谱重建中达到在分辨率不改变的同时提高重建准确性和精度的结果。为了使计算型光谱系统能够在较暗或者噪声杂乱环境中使用，用的宽谱

滤光片排列的滤光片阵列使得光的吸收效率较窄谱滤光片阵列提高数倍。宽谱滤光片的光透过率曲线不是一种只是一个波段有光透过，它是多个波段同时透过，因此在阵列中光谱吸收波段叠加的部分，光透过率是极高的，但会导致了一个问题是特征的叠加，这就需要进行特征的拆解从而来求解矩阵。因此可以利用自注意力机制可以提取向量之间的相关性的特性来保证经过叠加后反解出的参数是对应原始的光透过率函数的结果，并且还可以通过深度学习中的非线性优化来优化噪音对重建结果的影响，使得光谱重建的结果具有更高的准确性和精度，并能进一步的做提升光谱分辨率的研究。而将自注意力机制融合进光谱重建的工作目前是一个比较新颖的研究，需要从光谱重建的原理与自注意力机制的特点相结合从而得到更好的结果，这是一个非常具有价值的研究工作，也颇具挑战。

2.2 研究目标和效果

针对目前计算型光谱系统虽然已经有了较为准确的光谱仪但都不够微型化和便携性，而具有微型化和便携性的计算型光谱仪的光谱重建精度和准确率是比较低的，不具备较好的商业价值和实际需求，因此以编码矩阵的研究提出设计不同的滤波函数和排列方式并融合自注意力机制的重建算法，最终实现以下的目标和效果：

(1) 针对编码矩阵的构成原理设计出更易于特征提取和重建的滤波函数但相同排列的编码矩阵；

(2) 根据彩色 CCD 的拜耳设计并利用二叉树的排列形式并且是相同滤波函数同排列的编码矩阵并与不同的滤波函数相同排列的方式结合对比使得光谱编码矩阵更清晰简洁并明显与噪音有差异的编码矩阵；

(3) 将自注意力机制融合到光谱重建中并取得高准确性和精度的结果。

2.3 拟解决的关键问题

本课题针对计算型光谱系统的编码矩阵设计时遇到的透过率函数选择和排列方式的问题和在确定编码矩阵后进行光谱重建时环境噪音和 CCD 本身自带的噪音函数问题，通过设计不同的滤波函数和排列方式使得编码具有更清晰和明确的特征信息，并需要对比 CCD 本身的噪声函数做数据的处理将其噪音和本身特征区别开来，最后使用自注意力机制的自相关性来帮助光谱重建，提升光谱重建的准确性和精度。因此，本课题拟定解决以下关键问题：

(1) 编码矩阵的实际设计问题

在模拟仿真中可以使用理想化的滤波函数和排列来使得编码矩阵的特征明确清晰，但在实际设计和加工时可能找不到与之对应的滤波函数，因此需要对其滤波函数的设计更加的合理化，并且要与实际滤波函数进行交叉验证和筛选，从而选出效果好且实

际存在的滤波函数，让特征的提取变的简单。本课题就此可以拟采用逆向设计筛选的做法，用设计出较好效果的滤波函数去进行算法库查询，找到透过率函数基本一致或者大致相当的材料，并将该材料进行测试最后进行实际仿真测试，在实际设计中还需要考虑加工难度问题，因此在设计时还要考虑材料加工难度问题。

(2) 重建过程中 CCD 和环境影响的噪音过于大

在重建数据集收集集中需要利用 CCD 和商用光谱仪来分别收集编码数据和光谱数据，并构成数据集，但在采集过程中会有着环境噪音和 CCD 本身存在的噪音，而这些噪音在一定程度上甚至会覆盖掉部分特征信息，使得重建的特征错误，最后拟合出来的重建矩阵也是错误。因此需要对该实验收集环境和步骤进行优化处理并基于 CCD 自身所存在的噪声函数进行拟合，最好做到能够直接将 CCD 的噪声函数能够直接得出一个模型这样就可以使得重建时光谱特征更加简单无多余掺杂数据，或者使得编码特征更加突出从而重建出准确的物体光谱信息。

(3) 如何较好的将自注意力机制融合到光谱重建中的问题

在计算光谱重建中大多重建方法都是基于先验知识进行重建的，但重建精度和重建准确性都不够高，因为有这各种各样的因素影响导致纯线性的拟合方式不能得到好的结果。因此利用深度学习较好的非线性拟合的能力，从而直接将不同 CCD 的成像函数进行拟合已达到推广到不同商业活动中，而自注意力机制的使用能够使得在利用先验知识本身存在的自相关特征信息，从而将其更好的重建，但就目前来说也就 2022 年清华的一个团队做了一个全连接的编码解码器网络，因此从头开始利用全自注意力机制网络构造光谱重建是一个颇具挑战的事情。

三、研究方案设计及其可行性分析（包括：研究方法，技术路线，理论分析、计算、实验方法和步骤及其可行性等）（不少于 800 字）

3.1 研究方法

（1）文献综合研究法

通过调研关于光谱重建方面的文献，从而弄清光谱重建背后的数学原理和数学模型，而且了解目前对光谱重建的研究所使用的方法和所达到的结果，基于调研的内容能够帮助了解到现在的研究现状和有价值的研究方向，同时还能够避免一些不切实际的想法，以防浪费时间。在调研的算法文献中能够清晰的知道目前算法的发展和能够解决的问题，帮助将现效果好的算法迁移到光谱重建中以得到好的结果。还能从调研的文献中知道光谱重建主要的应用方向和对人们生活是否有一些改变和帮助。

（2）实证研究法

利用商业的传统的光谱仪所收集的光谱信息与所研究的光谱重建出的光谱信息进行对比，可以得出重建结果的好坏，从而判定算法和特征提取的方向，以达到更好的结果。或者能够根据现有的设备实验环境与模拟仿真的结果进行对比看实验是否还有改进的地方。

（3）实验法

在实验时可以先使得算法不改变的情况下改变光谱重建的滤波函数来控制变量以求在算法不变的情况使得直接出来的数据特征更加明显和方便处理。或者在已经设计好了滤波片函数后进行改进算法来使得重建结果提升的方式来对比结果，用实验来验证改进能够帮助向更好的方向进行。

3.2 技术路线

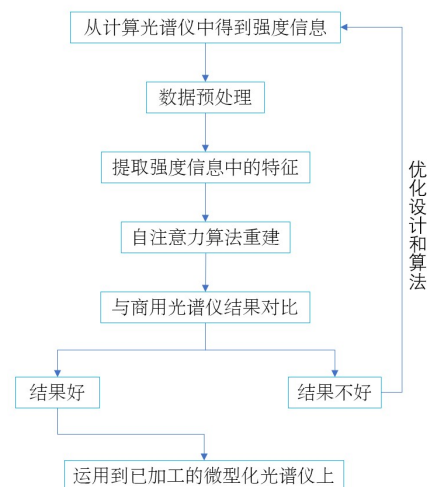


图 1 技术路线

如图 1 所示，在该技术路线中主要是利用算法对收集的数据集进行训练已达到更好的结果，并在最后运用到微型化光谱仪中。图 1 所示的关键技术具体阐述如下：

(1) 计算光谱系统光谱重建原理

计算光谱的光谱重建是基于光谱调制的入射光被设计的滤光片，将光信号转换为电信号。然后应用一种算法对电信号数据进行处理，重建入射频谱。而光谱成像装置由数以千计的微光谱仪组成也就是多个单点式的计算光谱系统组成，所以主要研究的光谱重建是单点光谱重建的工作原理。计算光谱的重建目前主要是用滤波片的设计来做的，而每一个滤波片都有一个设计好的滤波传输响应函数，当入射光照射到滤光片上时光信号经过传输函数 $h(\lambda)_i = 1, 2, 3, \dots, N$ ，式中的 N 为单个光谱系统中的滤波片数， λ 是波长，待测的入射光谱被记为 $f(\lambda)$ 。因此可以表示出经过了滤波片被转换后的电信号的信号强度为：

$$I_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} f(\lambda) h_i(\lambda) R(\lambda) P(\lambda) d\lambda, \quad (1)$$

式中 $R(\lambda)$ 是波长为 λ 的量子吸收效率， $P(\lambda)$ 为透镜系统的色散曲线， λ_1 和 λ_2 分别是预重建的入射光谱分布的波长下限和上限。

在实验中可以利用商用的传统光谱系统来获得物体的光谱曲线，就能够得到一个简化修正后的函数表示 $H_i(\lambda) = h_i(\lambda) R(\lambda) P(\lambda)$ ，这样可以将信号强度的方程变成：

$$I_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} f(\lambda) H_i(\lambda) d\lambda, \quad (2)$$

可以将上式中的积分方程离散化，可以得到一个如下的矩阵方程式：

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ \vdots \\ I_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1M} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_M \end{bmatrix}, \quad (3)$$

上式中 N 是使用到的滤波片数量，而 M 为要重建的光谱信号的波段数。原则上，如果有足够数量的方程组，则可以直接通过矩阵反演重构出物体的光谱。但在实践中 N 通常小于光谱采样点 M 的数量，用来缩小光谱仪的尺寸，因此就不能得到该矩阵的唯一解。即使 N 可以得到增加，使矩阵满足反演条件，但测量值和透射光谱曲线的校准值之间仍会出现误差，而采集设备中也会因为噪音的存在使得特征不够明显，因此不能通过直接求解式 (3) 的矩阵方程，这样就无法准确地重建物体的光谱信息，结果会存在较大的误差。

(2) 自注意力机制技术

Attention 机制的具体计算过程，如果就目前大多数方法进行抽象的话，可以将其归纳为两个过程：第一个过程是根据 Query（输入向量中选取的一个 Value）和 Key（每个 Value 对应的键，可以由）计算权重系数，第二个过程根据权重系数对每个 Value 进行加

权求和。而第一个过程又可以细分为两个阶段：第一个阶段根据 Query 和 Key 计算两者的相似性或者相关性；第二个阶段对第一阶段的原始分值进行归一化处理。

在第一个阶段，可以引入不同的函数和计算机制，根据 Query 和某个 Key，计算两者的相似性或者相关性，最常见的方法包括：求两者的向量点积、求两者的向量 Cosine 相似性或者通过再引入额外的神经网络来求值，即如下方式：

点积： $Similarity(Query, Key_i) = Query \cdot Key_i$

Cosine 相似性： $Similarity(Query, Key_i) = \frac{Query \cdot Key_i}{\|Query\| \cdot \|Key_i\|}$

MLP 网络： $Similarity(Query, Key_i) = MLP(Query, Key_i)$

第一阶段产生的分值根据具体产生的方法不同其数值取值范围也不一样，第二阶段引入类似 SoftMax 的计算方式归一化的同时将原始计算分值所有元素加权求和为 1 的概率分布。即一般采用如下公式计算：

$$a_i = Softmax(Sim_i) = \frac{e^{Sim_i}}{\sum_{j=1}^{L_X} e^{Sim_j}}$$

第二阶段的计算结果每个 a 即为 Value 对应的权重系数，然后进行加权求和得到 Attention 数值：

$$Attention(Query, Key_i) = \sum_{i=1}^{L_X} a_i \cdot Value_i$$

自注意力机制是注意力机制的变体，其减少了对外部信息的依赖，更擅长捕捉数据或特征的内部相关性。自注意力机制主要是通过计算信息间的互相影响，来解决长距离依赖问题。self-attention 其思想和 attention 类似，但是 self-attention 的提出是在 Transformer 框架中用来将其他相关信息的“理解”转换成我们正在处理的信息的一种思路。

首先，self-attention 会计算出三个新的向量，把这三个向量分别称为 Query、Key、Value，这三个向量是用输入向量分变与一个对应矩阵相乘得到的结果，这个矩阵是随机初始化的，该矩阵在训练过程中会一直进行更新，从而使得参数能够更加的拟合实际情况。

计算 self-attention 的分数值，该分数值决定了在某个位置信息时，对输入向量的其他部分信息的关注程度。这个分数值的计算方法是 Query 与 Key 做点乘。接下来，把点乘的结果除做一个 SoftMax 的计算。得到的结果即是每个值对于当前位置的值得相关性大小，当然，当前位置的值相关性肯定会很大。

下一步就是把 Value 和 SoftMax 得到的值进行相乘，并相加，得到的结果即是 self-

attention 在当前节点的值。

在实际的应用场景，为了提高计算速度，我们采用的是矩阵的方式，直接计算出 Query, Key, Value 的矩阵，然后把向量的值与三个矩阵直接相乘，把得到的新矩阵 Q 与 K 相乘，乘以一个常数，做 SoftMax 操作，最后乘上 V 矩阵

这种通过 query 和 key 的相似性程度来确定 value 的权重分布的方法被称为 scaled dot-product attention:

$$A(Q, K, V) = \text{SoftMax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}}\right) \cdot V$$

以上就是 self-attention 的计算过程，说明注意力机制是可以很好地学习到上下文的信息的相关性。

自注意力机制的简化计算过程：

- (1) 将输入向量转化成嵌入向量；
- (2) 根据嵌入向量得到 q (query), k (key), v (value) 三个向量；
- (3) 为每个向量计算一个 score: $\text{score} = q \cdot k$ ；
- (4) 为了梯度的稳定，对 score 归一化处理；
- (5) 对 score 施以 SoftMax 激活函数；
- (6) SoftMax 结果点乘 Value 值 v，得到加权的每个输入向量的评分 v；
- (7) 相加之后得到最终的输出结果 z : $z = \sum v$ 。

3.3 理论分析、计算

基于光谱重建的原理公式，可以得出最主要的是根据滤波函数来解出方程式中间矩阵的唯一解。得到了唯一解就能够使得应用于各种设备中去，但因为在采集物体光谱时会受到各种的环境与设备等噪音影响，需要对噪音进行去噪或者优化处理，保证光谱重建结果的准确性和精度。

从式 3 可以看出光谱重建是一个类似与方程组求解唯一解的问题，基于这个方程组合设计的滤波片数量与预重建的光谱波段数对比进一步发现这是一个求解欠定方程的问题，即所求的未知数比已知方程多，这会导致方程的不好求解需要引入其他变量。如果是用的窄谱滤光片设计的光谱系统那么就是求解一个稀疏欠定方程组的问题，那么利用压缩感知和最小二乘就可以解出这个稀疏的方程，但窄谱的环境适应性太弱，所以需要用到宽谱设计的计算光谱系统，因此这就变成了一个求解纯欠定方程的问题。经过分析发现该方程组会是一个特征叠加的问题，所以需要利用自注意力机制中的相关性权重的计算来使得想

要的特征变得更加明显，从而重建出准确的光谱结果。

目前为了使计算型光谱系统能够在较暗或者噪声杂乱环境中使用，用的宽谱滤光片排列的滤光片阵列使得光的吸收效率较窄谱滤光片阵列提高数倍。宽谱滤光片的光透过率曲线不是一种只是一个波段有光透过，它是多个波段同时透过，因此在阵列中光谱吸收波段叠加的部分，光透过率是极高的，但会导致了一个问题是特征的叠加，这就需要进行特征的拆解从而来求解矩阵。

比如存在如下的模拟仿真的两条高斯光谱透过率曲线：

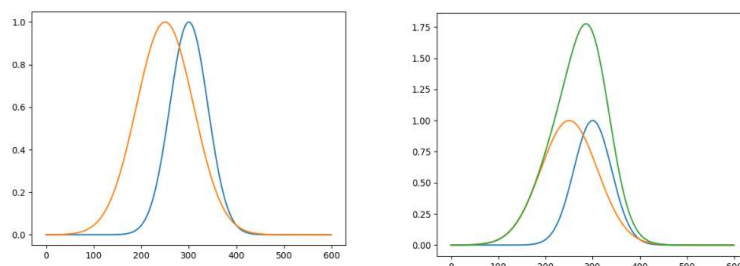


图 2 模拟的不同透过率曲线与叠加曲线

由模拟的透过率曲线就能看出，两条曲线之间会存在一定的相关性，但是经过光信号到电信号的转换后得到的只有一个光信号强度信号，通过传统的算法提取特征反向解方程会导致叠加的特征不能分解出来，就不能很好的构成最后的模型，使得光谱重建存在着各种缺陷。

因此可以利用自注意力机制可以提取不同向量之间的相关性的特性来保证经过叠加后反解出的参数是对应原始的光透过率函数的结果，并且还可以通过深度学习中的非线性优化来优化噪音对重建结果的影响，使得光谱重建的结果具有更高的准确性和精度，并能进一步的做提升光谱分辨率的研究。将自注意力机制融合进光谱重建的工作目前是一个比较新颖的研究，需要从光谱重建的原理与自注意力机制的特点相结合从而得到更好的结果，这是一个非常具有价值的研究工作，也颇具挑战。

3.4 本研究的实验方法与步骤

首先需要经过计算型设计好的微型化光谱仪收集强度信息和收集同时用商用传统光谱仪收集的光谱信息，将强度信息与光谱信息就能构建出一组一一对应的数据集，并训练模型。

- 1) 搭建光谱标定实验平台；
- 2) 利用色卡作为标准光谱检测物来收集标定数据，并按顺序排列构成数据集；
- 3) 对数据进行分析，并预处理提取特征；

- 4) 构建算法模型，并将数据放入训练；
- 5) 利用测试光路进行算法测试，并评定结果；
- 6) 算法封装并部署到软件中。

3.5 可行性分析

(1) 目前在光谱重建上面已经有了先行者将宽谱设计的滤波片阵列用算法重建了出来，其结果已经达到了能够一定程度上的商用。

(2) 在高光谱成像中已经有相当多的利用不同透过率函数和排列方式的方法使得成像效果提升，因此将该方法运用到光谱重建中来也能够提升重建精度和准确率。

(3) 自注意力机制被证实在 CV 和 NLP 方向上能够对结果有着巨大的提升，而基于自注意力机制的原理解析也能得出能够提升光谱重建的准确性和精度。

四、本研究课题可能的创新之处（不少于 500 字）

（1）传统的光谱设备可以提供超高的分辨率和超宽光谱范围，但是它们通常依赖于较重的色散光学器，较长的光程，较大的检测器阵列以及可移动的部件，这使得它们很难适应频谱分析的一些需要便携性的新兴应用。基于滤光片设计的计算型光谱系统正好能够使得光谱仪的大小有明显相对于传统光谱仪变得更小，利用便携。甚至进一步微型化到亚毫米量级能为片上光谱学以及其他原位表征提供一系列机会，有可能集成到智能手机，快照式高光谱成像设备中。对于诸如基于智能手机的消费电子可能在检测伪造药品，钞票，监测皮肤健康，甚至是在确定食品中的糖和脂肪含量等领域会有潜在应用。另一方面，在工业上，这种基于无人机的微型光谱成像设备可能会彻底改变传统大规模农作物监测的方式，因此利用新型的技术具有重要意义；

（2）不同的滤波函数和排列方式的不同使得重建特征更加突出，便于后续特征提取和区别于噪音，以此提高光谱重建的准确率和精度；

（3）将自注意力机制融合到光谱重建中，目前就这方面的研究基本没有，最新的研究是 2022 年清华的崔开宇团队利用了全连接层的编码解码器框架，使得结果与他们 20 年的结果对比有着巨大的提升，甚至能够为光谱成像奠定了良好的基础；

（4）在检测中有时候不仅仅是需要光谱信息，还需要利用光谱信息来重构出高光谱图像，即光谱成像，当将光谱重建的效果具有了一定的准确性和精度后，可以将该重建出的光谱进行光谱成像的研究，能够使得光谱成像的设备也具有小型化的潜力，让新型的计算光谱成像仪应用到各个行业，为收集高光谱信息提供帮助。

五、研究基础与工作条件（1. 与本项目相关的研究工作积累基础 2. 包括已具备的实验条件，尚缺少的实验条件和拟解决途径）（不少于 500 字）

5.1 与本项目相关的研究工作积累基础

（1）阅读大量的相关文献，具有相关的基础知识，为开展实验奠定了坚实的基础。

（2）掌握了基本的实验技术，如设备的使用，数据如何收集和改进实验方法等相关实验技能。

（3）已经有了一组较好的数据集，并且具有了一些算法基础。

（4）已经将自注意力机制算法代码写出，并应用在了不同数据上得到对应的结果。

（5）将自注意力机制融合到光谱重建的数据集中，但就结果对比表明还需要进一步的改进。

5.2 已具备的研究条件，尚缺少的研究条件和拟解决的途径：

已具备的研究条件：

设备仪器：由海洋光学提供的商业光谱仪；实验室自主设计的微型化光谱仪；气浮光学实验平台；可见光光源；近红外光源；一台可用计算服务器和可用的超级计算机；若干光学透镜和支杆。

数据来源：数据已有一定的可以进行验证和实验的数据集，能够先行基于模拟仿真来进行重建研究。

测试软件：已经利用 QT 编写好了基于 OPENCV 的 DNN 模块的推理系统，能够对一些深度学习算法模型进行推理预测并用于部署到通用个人电脑上。

尚缺少的研究条件：

设备：需要更好的光谱重建阵列，因为先期加工的材料没有控制好品控问题导致存在着一些不应该有的人为误差，这会使得重建出来的光谱模型不具有更大的通用性。

数据：需要根据新的加工阵列来收集和提取特征以达到更好的结果。

测试软件：目前的深度学习模型推理是基于 OPENCV 的不具有更大的部署可能性。

拟解决的途径：

设备：跟进新的加工阵列并做好测试。

数据：重新基于新的滤光片阵列收集更好的数据集。

测试软件：应用 C++ 中的底层数学库自己学一个推理模型。

学位论文工作计划

时间	研究内容	预期效果
2022. 10-2022. 12	阅读大量相关文献和资料	完成开题报告和文献综述，形成系统的研究方案
2022. 01-2022. 04	对编码矩阵设计、计算光谱重建技术和自注意力机制研究	理解并能解析其数学原理
2022. 05-2022. 08	对获取的强度与光谱数据集，进行融合算法的研究	利用现有网络验证融合算法的有效性
2022. 09-2022. 01	利用光谱重建与商用光谱仪结果对比并改进算法	能够拟合实际光谱
2023. 02-2023. 06	完成毕业论文的撰写	完成毕业论文

导师意见：

导师（签名）：

日期： 年 月 日

评 定 小 组 成 员	姓 名	职 称	单位名称	职务

开题报告小组意见：

组长（签名）：

日期： 年 月 日

学院意见（签章）：

负责人：

日期： 年 月 日