

傅里叶光谱仪的智能数据采集器 与光谱数据处理系统

李 嘉 陈今涌

摘要: 根据傅里叶光谱学的基本原理, 组成傅里叶变换光谱仪实时数据采集和处理系统。系统中智能数据采集器对干涉图作数据采集, 配以干涉图处理与谱图变换软件包的IBM-PC/XT微机作为光谱数据处理系统, 对干涉图进行数据处理与谱图变换, 以获得正确的光谱图。

一、引 言

傅里叶光谱测量方法, 是利用时间域的干涉图和频率域的光谱图之间对应的傅里叶变换关系, 把干涉仪获得的干涉图, 经过傅里叶变换, 产生光谱图的一种先进的光谱测量技术。傅里叶光谱仪, 它能同时测量、记录所有谱元的信号, 并以极高的效率采集来自光源的辐射能量, 从而具有多通道和高通量的优点, 使它比传统光谱仪具有高得多的信噪比和分辨率。

近年来由于计算机系统的引入, 解决了傅里叶光谱仪数据处理的实时性问题, 使傅里叶光谱仪已成为红外、远红外、亚毫米波段以至近红外非常有效的光谱测量与分析工具。

我所七十年代初已开始研制快速扫描小型干涉光谱仪, 波数范围 $6000\sim 7000\text{cm}^{-1}$, 分辨区间 40cm^{-1} , 扫描时间 $1\sim 2\text{s}$ 。根据光谱测量技术发展的要求, 近年开发了实时数据采集和数据处理系统, 并与上述小型干涉光谱仪联机, 组成一台完整的傅里叶变换光谱仪。

二、傅里叶光谱学原理

傅里叶变换光谱学的基本方法是通过干涉仪产生干涉图, 并对经过样品吸收的干涉图实现傅里叶积分变换, 来测定光谱图。图1为一典型的迈克尔逊干涉仪。

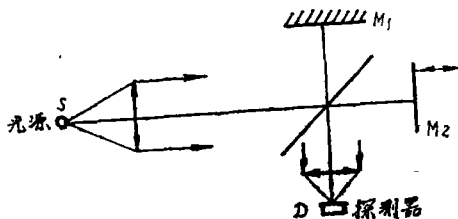


图1 迈克尔逊干涉仪原理图

光源单色光谱辐射能量 $B_0(\sigma)$ 进入干涉仪时, 动镜 M_2 连续平行移动, 从探测器接收到的光强即为:

$$I(x, \sigma) = 2RTB_0(\sigma)[1 + \cos(2\pi\sigma x)] \quad (1)$$

式中: RT 为分束片的反射率和透射率,

σ 为光源的波数,

x 为两干涉光束的光程差。

对于无限窄的波数 σ , 从 (1) 式可得:

$$dI(x, \sigma) = 2RTB_0(\sigma) \cdot [1 + \cos(2\pi\sigma x)] d\sigma \quad (2)$$

积分得:

$$I_D(x) = \int_0^{\infty} I(x, \sigma) d\sigma = \int_0^{\infty} 2RTB_0(\sigma) [1 + \cos(2\pi\sigma x)] d\sigma \quad (3)$$

消去 (3) 式中直流分量, 于是有:

$$I_D(x) = \int_0^{\infty} 2RTB_0(\sigma) \cdot \cos(2\pi\sigma x) d\sigma \quad (4)$$

从数学上可知, 傅里叶积分变换为:

$$F(x) = FT[f(\sigma)] = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\sigma) e^{i2\pi\sigma x} d\sigma \quad (5a)$$

$$f(\sigma) = FT^{-1}[F(x)] = \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx \quad (5b)$$

为了把 (4) 式移值到傅里叶积分变换上, 令 $B_0(\sigma) = B_0(-\sigma)$, 则:

$$I_D(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} RTB_0(\sigma) e^{i2\pi\sigma x} d\sigma \quad (6)$$

因此存在:

$$B(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} I_D(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx = FT^{-1}[I_D(x)] \quad (7)$$

式中 $B(\sigma) = RTB_0(\sigma)$ 为复原光谱。(7) 式即为傅里叶变换光谱学的基本方法。

三、干涉图的采集、处理和光谱变换

快速扫描干涉光谱仪输出干涉图和与干涉图信号同步的动镜位移两路信号, 如图2a、图2b表示了这两路信号。

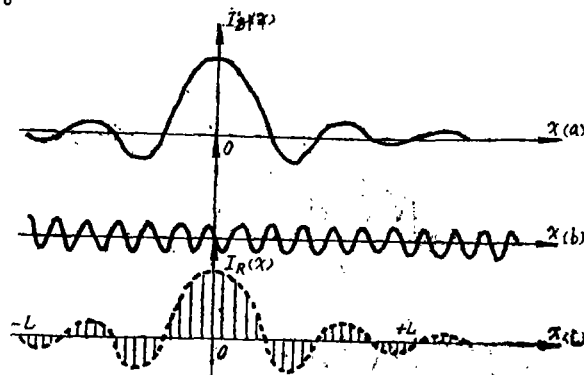


图 2 a、连续干涉图信号 b、莫尔条纹信号 c、以等距 Δx 采样的干涉图

为此, 根据上述原则, 我们所确定的计算机数据采集及处理系统框图如图 3 所示。

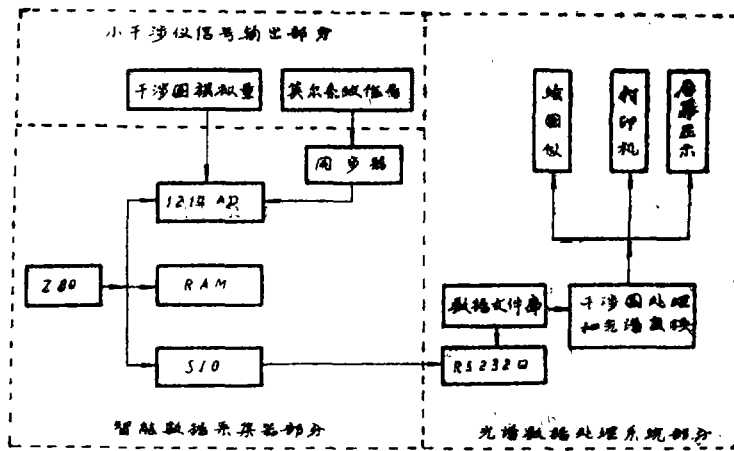


图 3 数据采集和处理系统框图

1. 干涉图的信号采集

(1) 采样间隔的选定

对于干涉图采集数据, 只能如图 2c 一样在 $-L \sim +L$ (或 $0 \sim +L$) 之间以等间隔 Δx 采集。从图中可知, 通过数据采集器采集的干涉图 $I_R(x)$ 相当于连续干涉图 $I_D(x)$ 受到一个矩形函数和梳状函数共同调制的结果。

$$I_R(x) = I_D(x) \cdot T(x) \cdot \text{III}(x - n \cdot \Delta x) = I_D(x) \cdot \text{III}(x / \Delta x) \quad (8)$$

式中:
$$T(x) = \begin{cases} 1, & |x| \leq L \\ 0, & |x| > L \end{cases} \quad (9)$$

$$\text{III}(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - n) \quad (10)$$

根据 (8) 式, 求出复原光谱为:

$$\begin{aligned} B_R(\sigma) &= FT^{-1}[I_R(x)] = FT^{-1}[I_D(x) \cdot \text{III}(x / \Delta x)] \\ &= FT^{-1}[I_D(x)] * FT^{-1}[\text{III}(x / \Delta x)] = B_D(\sigma) * \text{III}(\sigma / \Delta \sigma) \end{aligned} \quad (11)$$

图 4 即为 (11) 式的说明, 从图中可以看出, 为不使 $0 \sim \Delta \sigma$ 区间内光谱发生交叠, 必须满足:

$$\frac{1}{2} \cdot \Delta \sigma \geq \sigma_{\max} \quad (12)$$

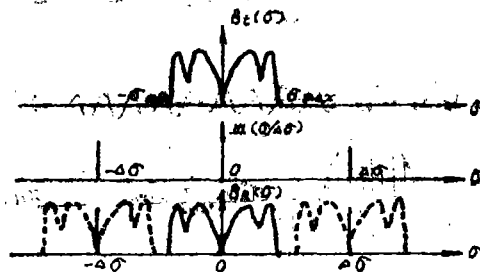


图 4 复原光谱 $B_R(\sigma)$ 的说明

从梳状函数的傅里叶变换可知 $\Delta\sigma = 1/\Delta x$, 因此有:

$$\Delta x \leq 1/2\sigma_{\max} \quad (13)$$

这就是干涉图取样所必须满足的条件。因莫尔条纹位移测量系统使用 1200条/mm 的光栅, 所以 $\Delta x = 0.833\mu\text{m}$ 。

(2) 数据采集

莫尔条纹信号反映出了干涉仪动镜的移动, 波形是余弦信号, 每周期表示光程差 $1.666\mu\text{m}$, 必须把它转换成数字信号后, 才能作为干涉图数据采集的同步信号。硬件框图如图 5。并使用图 6 的程序框图, 可采集到任意幅的干涉图数据。

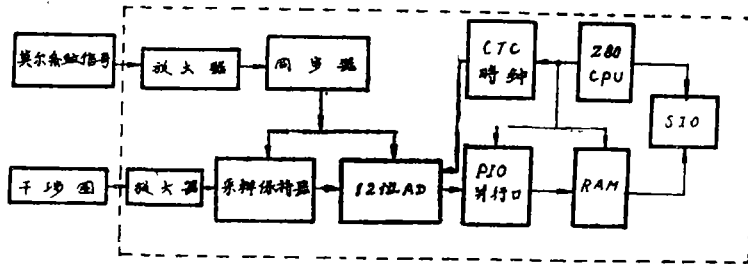


图 5 智能数据采集硬件框图

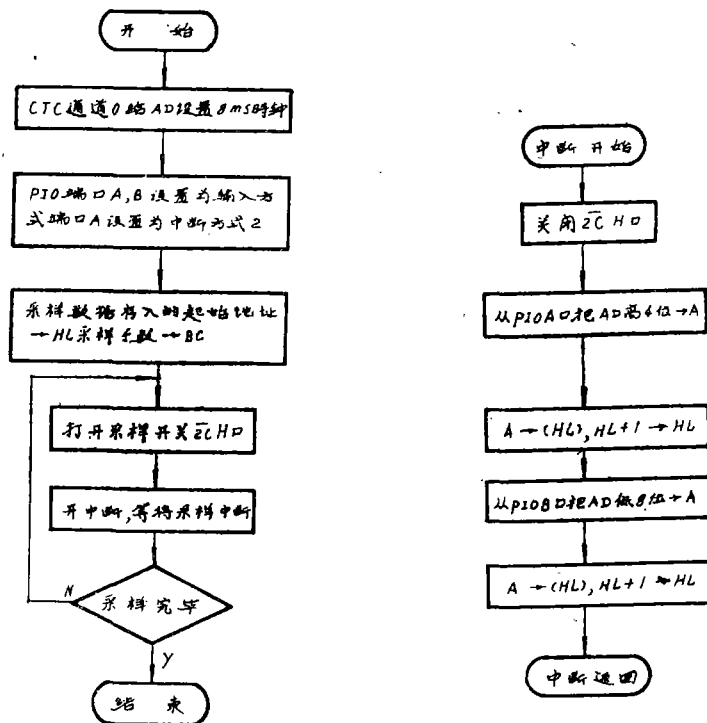


图 6 a、干涉图采集程序主框图

b、干涉图采集程序中断框图

2. 干涉图的处理和光谱变换

如图 3 所示, 采集到的干涉图数据经过串口送入数据处理系统, 各幅干涉图分别存于数据文件 $L-i$ 中。以便对干涉图进行处理和光谱变换。

(1) 干涉图的处理

a. 消干涉图的随机误差

由于种种原因, 每幅干涉图, 都带有随机误差, 为消除此种误差, 编制了可将多幅干涉图以原点对齐进行累加, 及平均等干涉数据的预处理程序。

b. 消干涉图的直流分量、

由公式 (3) 可知: $I_D(x) = \int_0^{\infty} 2RTB_0(\sigma)[1 + \cos(2\pi\sigma x)] d\sigma$ 当 $x = \infty$ 时, 因

$$\int_0^{\infty} 4RTB_0(\sigma)\cos 2\pi\sigma x d\sigma = 0, \text{ 所以得 } I_D(\infty) = \int_0^{\infty} 2RTB_0(\sigma) d\sigma \text{ 当 } x=0 \text{ 时, } I_D(0) \\ = \int_0^{\infty} 4RTB_0(\sigma) d\sigma, \text{ 因此可以看出:}$$

$$I_D(\infty) = \frac{1}{2} I_D(0) \quad (14)$$

即干涉主极大为干涉极远边缘值的 2 倍。可以认为干涉极远边缘值为干涉图的背景成分, 即直流分量, 它不包含任何光谱信息。光谱信息包含在干涉图的交流分量中。如 (7) 式所示 $B(\sigma) = FT^{-1}[I_D(x)]$ 在进行傅里叶变换前需消去干涉图的直流分量。为消去直流分量, 采用:

$$I = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N I(j \cdot \Delta x) \quad (15)$$

求出直流分量 I , 计算出各点的交流分量为:

$$I_p(j \cdot \Delta x) = I(j \cdot \Delta x) - I \quad (16)$$

C. 数据添零

每幅干涉图的采样个数 k , 它不一定为 2^N 个, 在光谱转换时要进行快速傅里叶变换 FFT , 必须要求个数为 2^N 。因此, 添加零给消去直流分量的干涉量, 相当于增添了零背景数, 干涉图数据个数也增加到 2^N 个, 而不会增加光谱的误差。

对干涉图处理的程序框图在图 7 给出。

(2) 切趾

由于干涉图取样是在 $-L \sim +L$ (或 $0 \sim +L$) 之间, 从 (8) 式可知 $I_t(x) = I_D(x) \cdot T(x)$, 因此光谱为:

$$B_t(\sigma) = B_0(\sigma) * t(\sigma) \quad (17)$$

我们称矩形函数 $T(x)$ 为截短函数, 且

$$t(\sigma) = FT^{-1}[T(x)] = 2L \cdot \text{sinc}(2\pi\sigma L) \quad (18)$$

$t(\sigma)$ 称为仪器谱线函数或扫描函数, ILS 。 ILS 可以认为, 当输入的光谱为一无限窄的单一谱线时, 经干涉仪调制, 计算机解调后, 输出的光谱, 其图形如图 8 中的曲线 $t(\sigma)$ 。

$t(\sigma)$ 是一个旁瓣振荡的 sinc 函数, 而旁瓣是光谱信号误差的来源之一。 sinc 函数的第一旁瓣是负值, 强度为主峰的 22%, 因此在进行光谱转换前, 常需对旁瓣进行抑制, 这个过程叫做切趾。

对于仪器谱线函数, 它产生强烈旁瓣的物理根源是干涉图在 $\pm L$ (或 0 和 L) 处取样的尖锐不连续性。因此抑制旁瓣的基本方法是用一渐变的权重函数 (或称切趾函数) 来缓和这种

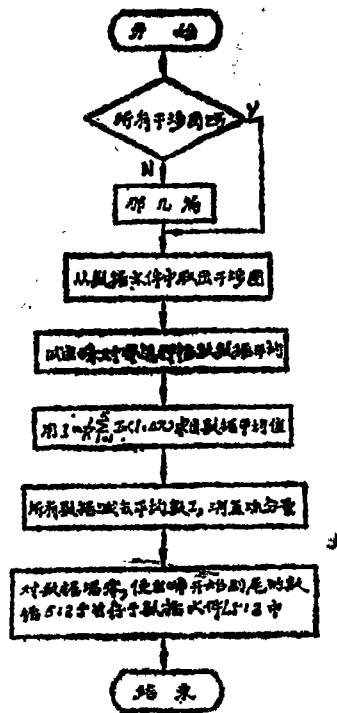


图 7 干涉图处理程序框图

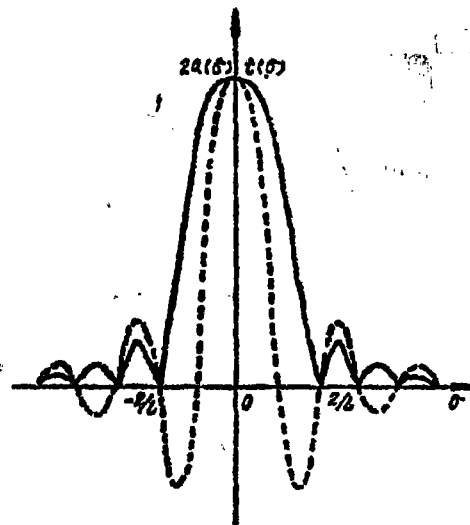


图 8 仪器谱线函数 \$t(\sigma)\$ 与三角形切趾函数 \$a(\sigma)\$ 的 2 倍即 \$2a(\sigma)\$ 的比较

尖锐不连续性。最常用的人工切趾函数是三角形函数:

$$A(x) = \begin{cases} 1 - |x/L|, & |x| \leq L \\ 0, & |x| > L \end{cases} \quad (19)$$

$$a(\sigma) = FT^{-1}[A(x)] = L \cdot \text{sinc}^2(\pi\sigma L) \quad (20)$$

比较 \$a(\sigma)\$ 和 \$t(\sigma)\$ 两函数, 如图 8 所示, \$a(\sigma)\$ 较 \$t(\sigma)\$ 旁瓣峰值下降 4 倍, 负旁瓣消失了, 基本上达到了切趾的目的。

3) 相位修正和光谱变换

进行光谱变换时, 因为由双边干涉图计算光谱存在数据量大的明显缺点, 因此通常采用单边干涉图计算光谱:

$$B(\sigma) = 2 \int_0^L A(x) \cdot I_D(x) \cdot \cos(2\pi\sigma x) dx \quad (21)$$

读取单边干涉图时, 一般很难采到光程差 \$x=0\$ 这一原点, 它存在一个误差 \$e\$, 使干涉图产生一个漂移量。由于干涉域存在原点误差, 必然引起光谱域产生一个误差 \$\varphi(\sigma)\$, 称之为相位误差。

Mertz 和 Forman 等人提出了较简单的相位误差的修正方法。从原点左边一小距离 \$-\Delta\$ 开始读取干涉图, 到 \$L\$ 为止, 在 \$-\Delta \sim +\Delta\$ 区间进行 FFT。

求出:
$$B_\varphi(\sigma) = \int_{-\Delta}^{+\Delta} I_D(x) A(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx \quad (22)$$

求得: $\varphi_{\Delta}(\sigma) = \arctg\{FT_{\Delta}^{-1}[I_D(x) \cdot A(x)]_{\Delta} / FT_{\Delta}^{-1}[I_D(x) \cdot A(x)]_{\Delta}\}$ (23)

把 $\varphi(\sigma)$ 按太劳级数展开:

$$\varphi(\sigma) = \varphi(\sigma_0) + \frac{d\varphi}{d\sigma}(\sigma - \sigma_0) + \frac{1}{2!} \cdot \frac{d^2\varphi}{d\sigma^2}(\sigma - \sigma_0)^2 + \dots$$
 (24)

由于 $\varphi(\sigma)$ 是 σ 的慢变函数, 因此 σ 的高阶项可以略去, 则取:

$$\varphi(\sigma) \approx \varphi(\sigma_0) + \frac{d\varphi}{d\sigma}(\sigma - \sigma_0)$$
 (25)

从 (23) 式求出离散的 $\varphi_{\Delta}(\sigma)$ 后, 由曲线拟合 (25) 式线性方程 $\varphi_{\Delta}(\sigma) = a + b \cdot \sigma$, 再用 $\varphi_{\Delta}(\sigma)$ 对复原光谱进行线性相位修正:

$$B_0(\sigma) = \left[\int_0^L I_D(x) \cdot A(x) \cdot e^{-i2\pi\sigma x} dx \right] \cdot e^{i\varphi_{\Delta}(\sigma)} = B(\sigma) \cdot e^{i\varphi_{\Delta}(\sigma)}$$
 (26)

这样, 干涉图切趾、相位修正和光谱变换的程序框图表示如图 9。

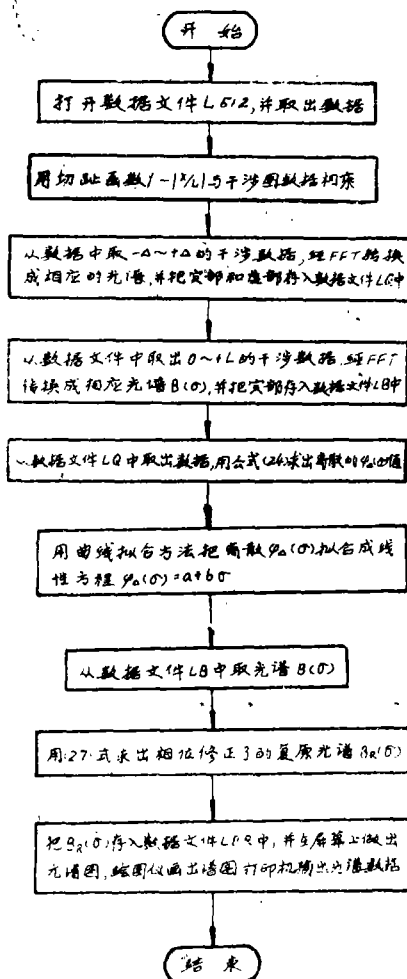


图 9 切趾、相位修正和光谱变换程序框图

四、结 语

为了检验数据处理及光谱转换工作的正确性,我们以1000k绝对温度的热电阻丝作为光源,在4000~6000波数范围内对波长 $2\mu\text{m}$ 的滤光片进行测试,得到了正确的光谱图形,峰值波长为 $1.95\mu\text{m}$ 。如图10。

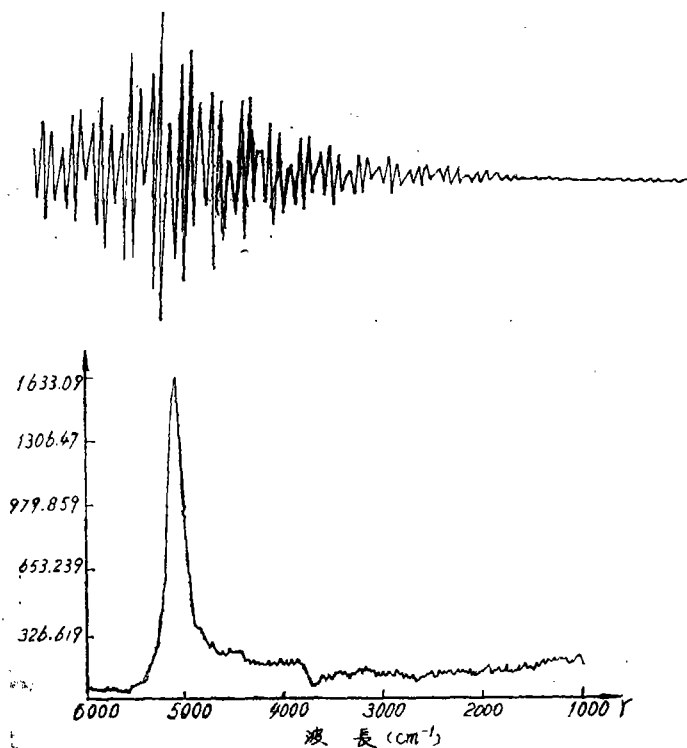


图10 上图:实测时采集到的干涉图
 下图:经变换所得到的光谱图

本系统既可作为实验室使用的快速分析仪器,又适合野外测量工作的特点。在野外,智能数据采集器采集数据后,录入磁带中存贮,事后,可经由智能数据采集器的串行口送入数据处理系统,进行数据处理和光谱变换。

参 考 文 献

- [1] R.J. Bell, «Introductory Fourier Transform Spectroscopy», Academic, 1972.
- [2] 沈学础, 物理学进展, 1982, 12, 3.

An Intelligent Data Sampler and Spectrum Data Processing System for Fourier Spectrometer

Li Jia Chen Jinyong

Abstract

An on-line data sampling and processing system for Fourier Spectrometer was developed by means of the principle of Fourier Spectroscopy. The intelligent data sampler collects the interferogram data in the system and the spectrum data processing system, equipped with an IBM-PC/XT microcomputer with a software package of the interferogram processing and transferring into spectrograph, processes the interferogram and then transfers it to spectrograph to get correct spectrograph.