

文章编号: 2095-2163(2019)05-0111-05

中图分类号: TP212.14

文献标志码: A

傅里叶变换红外光谱仪量化误差仿真分析

袁钱图¹, 邵丽萍², 白忠臣¹

(1 贵州大学 医学院, 贵阳 550025; 2 贵州大学 大数据与信息工程学院, 贵阳 550025)

摘要: 分析了数模转换器的量化误差对傅里叶变换红外光谱精度的影响。采用积分离散求和的方法对干涉图进行建模仿真分析。将干涉图信号经过 8 位、12 位、16 位以及 20 位数模转换器转换之后进行快速傅里叶变换, 最后解谱光谱数据。同时, 也定量比较了不同位数的数模转换器的光谱图相较于原始光谱图的偏离程度, 以及在吸收峰位置分析量化误差对光谱图偏移的影响。结果表明, 20 位数模转换器的平均偏离误差为 1.884 97, 且该模型可作为由量化误差引起相关误差的修正算法的理论依据。

关键词: 傅里叶变换光谱仪; 红外吸收光谱; 量化误差; 迈克尔逊干涉仪

Computer simulation analysis of quantization error of Fourier spectrometer

YUAN Qiantu¹, SHAO Liping², BAI Zhongchen¹

(1 College of Medicine, Guizhou University, Guiyang 550025, China;

2 College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang 550025, China)

【Abstract】 The influence of quantization error on infrared spectral accuracy of Fourier transform is analyzed. The method of integral to discrete summation is used to model and simulate the interferogram. The interferogram signal is subjected to fast Fourier transform after converted by digital-to-analog converters with 8 bit, 12 bit, 16 bit, and 20 bit, and the spectrum data is decoded. At the same time, the deviation degree between the spectrum diagram of the digital-to-analog converter with different bits and the original spectrum is quantitatively compared, and the influence of quantitative error for the spectrum migration is analyzed at the position of the absorption peak. The result shows that the average deviation error of the 20 bit digital-to-analog converter is 1.884 97, and the model can be used as the theoretical basis on the correction algorithm of correlation error caused by quantization error.

【Key words】 Fourier transform spectrometer; infrared absorption spectrum; quantization error; Michelson interferometer

0 引言

傅里叶变换红外光谱(Fourier transform infrared spectroscopy, FTIR)自从 19 世纪中后期发明问世以来,迄今已经得到了广泛的应用^[1]。特别适用于近红外和中红外光谱测量分析生物和化学材料的成分,具有高分辨率和高信噪比等优点,只需要一个光电探测器就可以完成干涉图的获取,既节约了成本,也减小了设备体积^[2]。傅里叶变换红外光谱,利用的是干涉图和光谱图互为傅里叶积分对的关系,通过对干涉信号进行傅里叶积分变换的方法来测定和研究光谱^[3-4]。20 世纪中叶,两大优点高光通量和多通道的发现助推了傅里叶变换红外光谱学的快速发展^[5]。而另一项对于傅里叶变换红外光谱学的发展起决定性作用的就是快速傅里叶变换算法的成

功研发^[6]。相较于常规的傅里叶变换运算,Cooley-Tukey 提出的快速傅里叶变换算法在运算速度上提高了几个数量级,为傅里叶变换红外光谱测量技术的广泛运用奠定了基础。

通常的傅里叶变换红外光谱仪工作原理如图 1 所示。入射光经迈克尔逊干涉仪产生干涉,使得在光电传感器处可以探测到干涉信号。放大器将微弱的干涉信号进行 I/V 转换、电压放大和滤波,数模转换器将干涉模拟信号转换数字信号。最后利用傅里叶积分变化将干涉信号进行解谱得到被测物的吸收光谱。

虽然傅里叶变换红外光谱技术目前已然渐趋成熟,但在实际使用中不可避免地会产生误差。准确分析傅里叶变换红外光谱仪的测量误差对于减少噪音,提高精度显得尤为重要。研究可知,数模转换器

基金项目: 贵州省科技支撑计划(SY[2017]2887);中央引导地方科技发展专项,中科引地(20174004);国家自然科学基金-地区项目(61865002);贵州省 MEMS 传感器及系统应用科技创新人才团队,黔科合平台人才([2018]5616)。

作者简介: 袁钱图(1994-),男,硕士研究生,主要研究方向:光谱数据采集与处理;邵丽萍(1996-),女,硕士研究生,主要研究方向:通信与信息系统;白忠臣(1979-),男,博士,副教授,主要研究方向:纳米传感器。

收稿日期: 2019-06-25

在将光电探测器检测到的模拟信号进行数模转换时将会带来量化误差,误差过大就会导致输出信号的不平滑^[7]。李妍^[8]和熊伟^[9]均对量化误差做出过研究,但并未对量化误差所导致的光谱偏离进行分析。因此本文的研究致力于通过仿真分析的方法定量分析量化误差对光谱的影响。

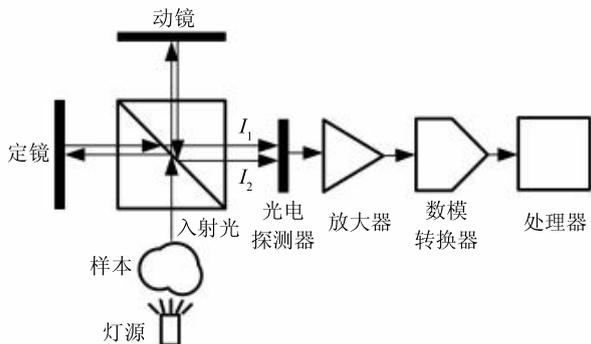


图1 傅里叶变换红外光谱仪工作原理图

Fig. 1 Working principle diagram of FTIR

1 量化误差

数模转换器指的是将模拟量转换为数字量的电子元器件。数字信号的大小是一个相对的值,与数模转换器的参考模拟量的大小相关。模数转换器的性能,可以用转换精度来衡量。转换精度惯用其输出的数字信号的最大位数来表示。性能越好、精度越高的数模转换器,输出的数字量的位数也就越高,输出信号的失真也就越少。

量化是指将输入模拟量信号的幅值进行离散化处理,即将输入模拟信号用一个最接近数模转换器可识别的最小数量单位的整数倍来代换^[10]。例如将10 V的信号分成5份,那么可探测到的信号为0 V、1 V、2 V、3 V、4 V以及5 V,如果将信号分成10份,那么可探测到的信号为0 V、1 V、2 V、3 V、4 V、5 V、6 V、7 V、8 V、9 V以及10 V。分辨率越高,可探测到的信号也就越多,被淹没的信息也就越少。

假设一个信号的取值区间为 $[-1, 1]$ 、数模转换器的位数为 m ,则一个量化单位所对应的模拟量 q 为:

$$q = 2^{-m+1}, \quad (1)$$

设被分析的信号 $x(t)$ 为:

$$x(t) = c_0 + \sum_{m=1}^M c_m \sin(m\omega t + \theta_m), \quad (2)$$

经采样后,可得一个整周期的采样序列 $\{x_k\}$, ($k = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1$), 然后由DFT时频变换有:

$$c_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} x_k c_m = \left| \frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} x_k w_N^{km} \right|, \quad (m = 1, 2, \dots,$$

$$M), \quad (3)$$

$$\theta_m = \text{tg}^{-1} \left[\text{Im} \left(\frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} x_k w_N^{km} \right) / \text{Re} \left(\frac{2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} x_k w_N^{km} \right) \right], \quad (4)$$

其中,

$$w_N^{km} = \exp(-j2\pi km/N) \quad (5)$$

在此基础上,考虑到数模转换器的量化效应,可得真实的采样数据为:

$$\hat{x}_k = x_k + e_k \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (6)$$

其中, e_k 即为量化误差,在区间 $[-q/2, q/2]$ 内均匀分布的随机变量^[11-13]。

量化误差属于系统误差一类,存在一定的规律性,采取特定的方法可以降低或消除系统误差^[14]。本文分析的对象为8位、12位、16位、20位的数模转换器,以及未经由数模转换的干涉信号。

2 干涉信号获取原理

傅里叶变换红外光谱仪所使用的迈克尔逊干涉仪主要包含分束器、动镜和定镜三个部分。入射光经由分束器被分成强度相同的两束光,两束光再经过动镜和定镜的反射,再次被分束器分别分成等强度的两束光。由于动镜的位置变化,两束光产生光程差,在光电传感器位置处产生干涉,进而形成干涉信号,被光电传感器接收^[15-16]。

经过动镜和定镜反射回来在光电探测上汇合的两束光存在光程差。若入射光源为单色光,则在光电探测器上相干叠加后的光强度为:

$$I' = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(2\pi\nu\Delta x), \quad (7)$$

其中, I_1 、 I_2 为产生干涉的两束光的光强; ν 为入射光的波长; Δx 为两束干涉光 I_1 和 I_2 的光程差。

若产生干涉的两束光的光强相同,即为 $I_1 = I_2 = I$,则公式(1)可转换为:

$$I' = 2I \cdot (1 + \cos(2\pi\nu\Delta x)) = 4I \cdot \cos^2(2\pi\nu\Delta x / 2). \quad (8)$$

由式(8)可以得出,两束光强相等的光在光电探测器上叠加之后的光强呈现周期性变化,干涉光的光强值在动态变化区间为 $[0, 4I]$ 。

当入射光不是单色光,而是多色光,对式(8)进行变换,假设入射光的光谱分布函数为 $B(\nu)$,则波数为 $\nu \sim \nu + d\nu$ 的两束单色光叠加后的光强为:

$$dI' = 2B(\nu) \cdot (1 + \cos 2\pi\nu\Delta x) \cdot d\nu, \quad (9)$$

两束多色光相干叠加后的光强为:

$$I(\Delta) = \int_0^{\infty} 2B(\nu) d\nu + \int_0^{\infty} 2B(\nu) \cos(2\pi\nu\Delta x) \cdot d\nu, \quad (10)$$

当两束光的光程差为零时, 干涉强度达到最大值:

$$I(0) = 4 \int_0^{\infty} B(\nu) d\nu, \quad (11)$$

利用式(11)将式(10)转变为:

$$I(\Delta x) = 0.5 I(0) + \int_0^{\infty} 2B(\nu) \cos(2\pi\nu\Delta x) d\nu = 0.5 I(0) + I(\Delta x), \quad (12)$$

由式(12)可以看出, 干涉图的强度 $I(\Delta x)$ 由两部分组成, 分别 $0.5 I(0)$ 和 $I(\Delta x)$ 。其中, $0.5 I(0)$ 是与光程差 ε 无关的直流分量, 在进行快速傅里叶变换之前需要引入去直流处理。而另外的 $I(\Delta x)$ 是与光程差相关的部分, 称为干涉函数, 即干涉图的交流信号可表示为:

$$I(\Delta x) = \int_0^{\infty} 2B(\nu) \cos(2\pi\nu\Delta x) d\nu, \quad (13)$$

其中, 被积函数为偶函数, 可将其改为:

$$I(\Delta x) = \int_0^{\infty} B(\nu) \cos(2\pi\nu\Delta x) d\nu. \quad (14)$$

式(14)表明, 随着动镜运动光程差的变化, 干涉图的交流量 $I(\Delta x)$ 可用傅里叶积分表达为许多频率的分量和, 各个频率分量的谱密度即为该波数的单色光的光强^[17]。

3 仿真分析

在进行仿真干涉图建模时, 采用黑体的辐射光谱来代替光谱分布函数 $B(\nu)$, 由此得到干涉图。黑体辐射的普朗克公式可表示为:

$$M_\lambda = \frac{c_1}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{c_2/\lambda T} - 1}, \quad (15)$$

其中, M_λ 为光谱辐射出射度 ($W \cdot cm^{-2} \cdot \mu m^{-1}$); λ 为波长 (μm), $\lambda = 1/\nu$; c_1 为第一辐射常数, $c_1 = 2\pi h c^2 = 3.7415 \times 10^4 W \cdot cm^{-2} \cdot \mu m^{-1}$; c_2 为第二辐射常数, $c_2 = ch/k = 1.43879 \times 10^4 \mu m \cdot K$; T 为温度 (K)。

在进行计算机仿真分析时, 无法直接对式(14)的积分进行计算, 需要将其变换为离散求和的方式进行计算。转换可得:

$$I(\varepsilon) = \sum_{\nu=\nu_1}^{\nu_2} 2B(\nu) \cos(2\pi\nu\Delta x) \Delta\nu, \quad (16)$$

其中, $\Delta\nu$ 为光谱的分辨率, 单位为 cm^{-1} 。

干涉图的信号采集采用等光程差间隔的方法进

行干涉图采样^[18]; 通过累加求和的方式将在 $[\nu_1, \nu_2]$ 区间中对相隔波数为 $\Delta\nu$ 的所有波数进行求和, 将有限量个频率的分量之和表示干涉图强度, 等同于将原本的积分公式用数值积分来替换。

同理, 干涉图的直流量可表示为:

$$\frac{1}{2} I(0) = \sum_{\nu=\nu_1}^{\nu_2} 2B(\nu). \quad (17)$$

这里, 还设定了干涉图仿真参数, 即: 等光程差采样间隔为 $0.8523 \mu m$; 动镜的最大运动距离为 $1.6 cm$; 光谱的分辨率为 $0.625 cm^{-1}$; 波数 ν 的取值范围为 $700 \sim 1300 cm^{-1}$; 黑体温度 T 取值为 $300 K$ 。为了比较量化误差对光谱图的影响, 在 $900 cm^{-1}$ 处构造了一个吸收峰。并通过光谱细化^[19], 将 $895 \sim 905 cm^{-1}$ 之间的光谱进行细化, 细化的精度为 $0.001 cm^{-1}$ 。

3.1 光谱图建模分析

通过等光程差采样得到的原始干涉图如图2所示, 将图形的部分进行放大, 包含零光程差位置, 可以看到流畅的曲线。干涉图在零光程位置时干涉的强度达到最大值, 虽然幅值在不断地波动, 但总体幅值从零光程差位置向两端延伸时呈现递减的趋势, 并且干涉图关于零光程差位置对称。

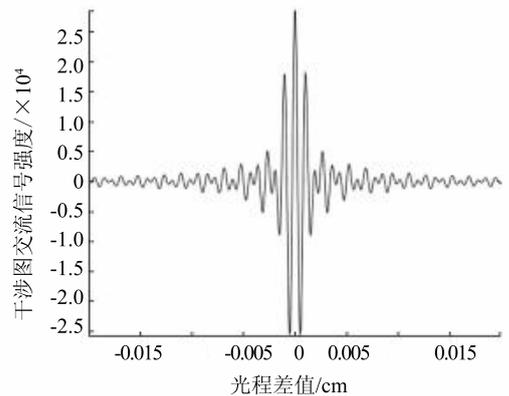


图2 干涉图

Fig. 2 Interferogram

将原始干涉图数据进行不同位数的数模转换, 得到的光谱图如图3所示。从光谱图中可以看出数模转换器的位数越小, 光谱图的波动越大。其数值就相对于原始光谱图的数值偏离越大, 所得到的光谱图也就越不精确。

3.2 光谱图偏差分析

为了量化光谱图的偏离程度, 将具有量化误差的光谱图数值减去对应位置的原始光谱图的数值的绝对值来表示偏离程度, 如图4所示。数值越大, 表示具有量化误差的光谱图偏离原始光谱图越大, 信

号失真越多。8位、12位、16位、20位数模转换器的平均偏离误差分别为5 592.879 920 361 564、445.458 606 211 454 8、29.033 388 409 199 084、1.884 972 977 702 324。经由分析可知,20位数模转换器的平均偏离误差最小,而8位数模转换器的平均偏离误差最大。

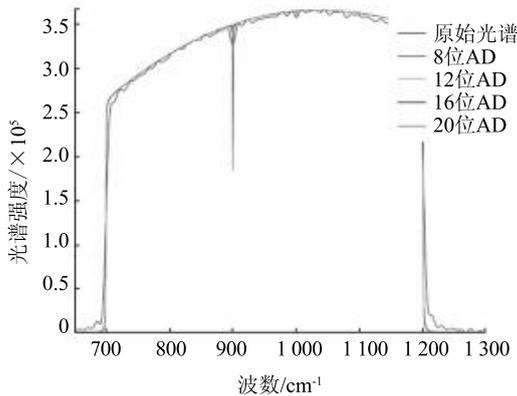


图3 经过量化与未经量化的光谱

Fig. 3 Quantized and unquantized spectra

895 ~ 905 cm^{-1} 之间的光谱细化图如图4所示。8位、12位、16位、20位数模转换器以及原始光谱图如图5所示。

由图5可得到,900 cm^{-1} 处吸收峰的位置分别为(899.661, 327 123.972 063 478 4)、(900.014, 203 431.678 543 270 6)、(900.013, 185 121.082 034 579 6)、(900.013, 183 984.889 481 238 0)、(900.013, 183 908.643 867 329 3)。经由分析可知,8位数模转换器的吸收峰在纵坐标和横坐标上偏离原始光谱的位置最大,而20位数模转换器的吸收峰的位置误差偏离最小。

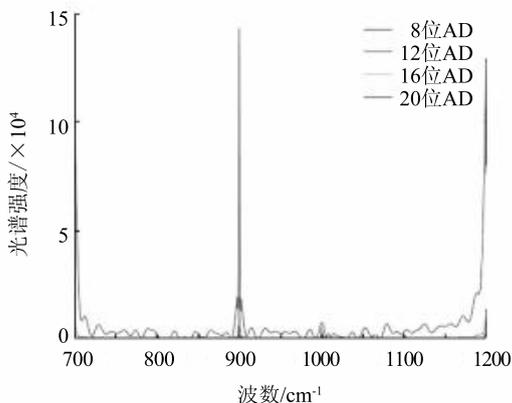


图4 经过量化的光谱图相对于原始光谱图的偏差

Fig. 4 Deviation of the quantized spectrum from the original spectrum

根据实验的数据可知,在4种数模转换器中,20位的数模转换器的量化误差对光谱图的精度影响最小,所得到的光谱图最接近原始的光谱图。而8位

的数模转换器的量化误差对光谱的精度影响最大,所得到的光谱图与原始光谱图偏离最大。

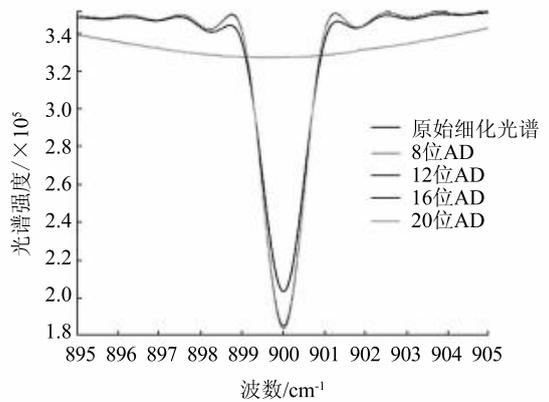


图5 900 cm^{-1} 处吸收峰细化光谱

Fig. 5 Absorption peak refinement spectrum at 900 cm^{-1}

4 结束语

本文通过积分转离散求和的方式对干涉图进行建模和计算得到干涉图。定量分析了数模转换器的量化误差导致的光谱图偏离。采用光谱细化技术分析了吸收峰的位置偏离。

通过仿真数据可知,数模转换器的量化误差会导致光谱幅值的偏离,并且量化误差越大,偏离的也就越大。量化误差会导致吸收峰峰位的改变。量化误差越大,峰值就越偏离真实值。量化误差会导致吸收峰横坐标的向左或向右偏移。

在光谱的实际运用中可以通过此模型定量分析傅里叶光谱的量化误差,依据实际需求的光谱精度合理选择适宜的数模转换器,为高精度的傅里叶光谱仪提供理论依据。通过本文的建模仿真数据可知,数模转换器的转换精度越高,即量化误差越小,解谱得到的光谱精度越高。

参考文献

- [1] 相里斌. 傅里叶变换光谱仪中的主要技术环节[J]. 光子学报, 1997, 26(6):550-554.
- [2] SEREN H R, HOLMSTROM S, AYERDEN N P, et al. Lamellar-Grating-Based MEMS Fourier transform spectrometer [J]. Journal of Microelectromechanical Systems, 2012, 21(2): 331-339.
- [3] 叶伏秋. 基于FFT的傅里叶光谱 Matlab 仿真分析[J]. 吉首大学学报(自然科学版), 2011, 32(1):49-51, 62.
- [4] 沈学础. 傅里叶变换光谱学—引论和进展[J]. 物理学进展, 1982, 2(3):275-322.
- [5] 林中, 范世福. 光谱仪器学[M]. 北京:机械工业出版社, 1989.
- [6] 陈晋. 快速傅里叶变换的研究[J]. 黑龙江科学, 2018, 9(24):62-63.