

FTIR 光谱仪中傅里叶插值采样方法的研究

李妍^{1,2}, 李胜¹, 高闯光¹, 徐亮¹, 李相贤¹

(1. 中国科学院安徽光学精密机械研究所 环境光学与技术重点实验室, 安徽 合肥 230031;
2. 中国科学技术大学, 安徽 合肥 230026)

摘要: 为解决传统“Brault”采样方法中参考信号过零点计算复杂、耗时较多的问题, 提出了基于傅里叶插值技术寻找过零点的方法。通过与其他插值方法进行比较研究, 结果表明, 这种方法确保了过零点信息准确性的同时简化了数据处理的复杂度, 得到的过零点信息线性拟合系数大于 0.999。在 2 100~2 200 cm⁻¹ 波段范围内, 当参考激光信号误差较小时, 傅里叶插值方法得到的仪器 SNR 是三次样条插值法所得到的 1.03 倍, 而线性插值方法与傅里叶插值方法得到的结果一致; 当参考激光信号误差较大时, 傅里叶插值方法得到的仪器 SNR 是线性插值方法得到的仪器 SNR 的 1.05 倍。

关键词: 采样方法; 傅里叶变换红外光谱仪; “Brault”方法; 傅里叶插值; 过采样

中图分类号: O438.2; TP274+.2 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201847.0123001

Fourier interpolative sampling algorithm in Fourier transform infrared spectrometer

Li Yan^{1,2}, Li Sheng¹, Gao Minguang¹, Xu Liang¹, Li Xiangxian¹

(1. Key Laboratory of Environmental Optics and Technology, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China; 2. University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: In order to solve the problem of complex and time-consumption of reference signal zero crossings in the traditional "Brault" sampling method, a method based on Fourier interpolation technique was proposed to find the zero-crossing. Compared with other interpolation methods, the results showed that this method could ensure the accuracy of zero-crossing information and simplify the complexity of data processing. The linear fitting coefficient of zero-crossing information obtained was greater than 0.999. In the range of 2 100 -2 200 cm⁻¹, when the error of reference laser signal was small, the instrumental SNR obtained by the Fourier interpolation method was 1.03 times that obtained by the cubic spline interpolation method, and the result obtained by the linear interpolation method was consistent with Fourier interpolation method. When the error of reference laser signal was relatively large, the instrumental SNR obtained by the Fourier interpolation method was 1.05 times of the SNR obtained by the linear interpolation method.

Key words: sampling method; Fourier transform infrared spectroscopy; "Brault" method; Fourier interpolation; oversampling

收稿日期: 2017-06-07; 修订日期: 2017-08-12

基金项目: 国家自然科学基金(41375027, 41605015)

作者简介: 李妍(1990-), 女, 博士生, 主要从事傅里叶变换红外光谱学、光学数据采集与处理等相关技术方面的研究。

Email: yli@aiofm.ac.cn

导师简介: 高闯光(1962-), 男, 研究员, 博士生导师, 博士, 主要从事环境光学与环境遥感检测技术方面的研究。

Email: mggao@aiofm.ac.cn

0 引言

随着雾霾现象的日益严重,对环境监测仪器的需求也随之加深。傅里叶变换红外(Fourier transform infrared, FTIR)光谱技术作为一种非接触式气体检测技术,具有灵敏度高、响应迅速、无交叉干扰以及多组分连续在线监测等优势,采用此技术的 FTIR 光谱仪逐渐成为了国内外环境检测领域研究的重点。目前,国内在 FTIR 光谱仪的硬件研发上具备一定的基础,部分研究成果已经用在环境监测、石油化工、等领域^[1-2]。现有仪器大多采用 He-Ne 激光触发采样方法^[3-6],虽然这种方法采样精度较高,但是采样频率偏低,且对仪器及硬件的要求很高。针对上述问题,Brault^[7]提出“Brault”采样方法,它逐渐成为专家学者研究的重点^[8-11],这种方法具有测量范围宽(可拓展至近红外甚至紫外波段)、采样频率较高(不受激光频率的限制)、对光路稳定性以及准直性要求较低等优点。此方法中需要首先对两路信号进行过采样^[12-15],其次需要寻找参考信号过零点信息。目前寻找参考信号过零点信息时均采用基于相似三角形理论^[16]的“软”过零方法,但是这种方法计算比较复杂。

文中针对上述问题,运用傅里叶插值技术寻找参考信号过零点信息。在不同的采样频率下,选取合

适的缩放因子,得到准确的过零点信息。在降低了计算难度的同时减少了运算时间,并与其他插值方法得到的光谱进行了比较研究。

1 工作原理

在重建红外干涉图的过程中,使用相同的频率过采样激光与红外信号,同时为保证得到准确的复原光谱,需对 2 路信号进行插值操作,随后确定激光过零点信息,通过此过零点来重采样红外干涉图,图 1 为激光与红外信号处理示意图。

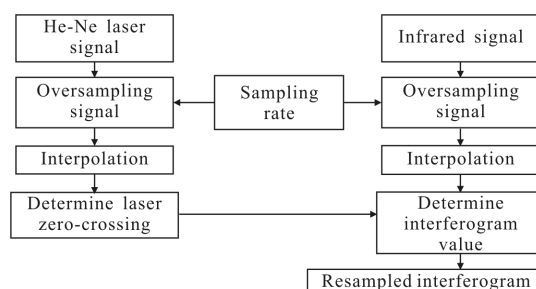


图 1 激光与红外信号处理示意图

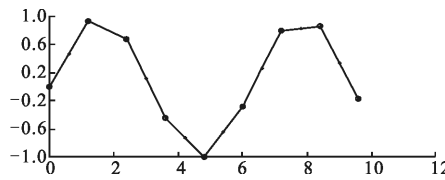
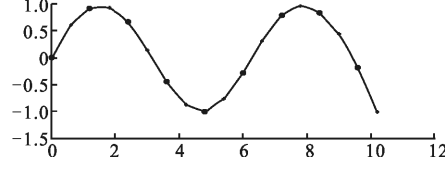
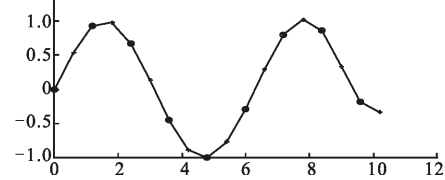
Fig.1 Schematic diagram of laser and infrared signal processing

1.1 插值方法的选择

目前最常用的插值方法有线性插值、三次样条插值^[17-19]等,表 1 为相同条件下不同插值方法的参

表 1 不同插值方法的参数比较

Tab.1 Comparison of parameters of different interpolation methods

Interpolation method	Parameters		
	Interpolation results(the circle represents the original data, the solid line indicates the interpolation result)	Interpolation function runtime/s	Take up computer memory(RAM)/MBit
Linear interpolation		0.118 1	1 950
Cubic spline interpolation		0.153 5	1 945
Fourier interpolation		0.089 5	1 853

数比较。其中所使用的计算机操作系统平台为 Windows7 64 位, 处理器为 Intel Core i7-4700MQ (2.4 GHz/L3 6M), 编程环境为 matlab, 使用 tic 和 toc 函数计算程序中插值函数的运行时间, 单位为 s, 为了确保得到的数据可靠, 多次测量时间取平均值, 根据统计学原理, 一般进行 10 次测量, 利用 feature ('memstats') 函数计算占用计算机的内存的大小。

如表 1 所示线性插值速度较快, 但是曲线平滑性较差, 在顶点处其斜率会发生改变且占用的计算机内存较多; 三次样条插值的运算时间较长, 但是插值结果的平滑性较好; 傅里叶插值方法运算速度快、占用内存少、结果较为平滑, 但在端点会出现“龙格现象”^[9], 即插值函数在起始和末尾的端点处发生了剧烈波动, 造成了较大的误差。

由于 FTIR 光谱仪同步数据采样与处理中, 需要寻找参考信号过零点后才可进行红外信号的重建, 在周期内数据点数较少时, 需要使用相关算法计算拟合曲线的过零点信息, 而在周期内数据点数较多、采样数据过大时, 结合计算时间与计算精度, 可以直接搜索距离零点最近的值所对应的位置信息。综合考虑上述情况, 傅里叶插值可以根据选取的合适的插值因子而简化寻零以及插值重建过程, 因此, 文中主要讨论傅里叶插值方法在 FTIR 光谱仪数据处理中的应用。

1.2 傅里叶插值

首先将时域中的数据 x 转换为频域进行插值, 以 0 填充插值点, 利用插值因子 n 合理缩放以保持频域上的对称性, 然后将其转换到时域, 此时的数据用 y 表示。如果时域中的数据 x 是一个向量, 其数据长度为 m , 采样间隔为 Δx , 那么数据 y 的采样间隔 Δy 为:

$$\Delta y = \Delta x m / n \quad (1)$$

式中: n 为插值因子; m 为数据长度。 n 不能小于 m 。数学描述如公式(2)所示:

$$\begin{aligned} S &= \text{FFT}(I); \\ S'(a) &= S(a), a=1, \dots, m; \\ S'(b) &= 0, b=m+1, \dots, n(m-1); \\ I' &= \text{IFFT}(S') \end{aligned} \quad (2)$$

式中: S 为频域数据; $S'(a)$ 为原始时域数据傅里叶变换后的频域数据, 数据长度为 m ; $S'(b)$ 为频域中插值的零点, 数据长度为 $n(m-1)-m$; I' 为插值后的数据经傅里叶逆变换回时域的数据。

如图 2 所示, 原始信号数据点距离零线较远, 在

选取过零点时会出现较大误差, 因此需对原始信号进行傅里叶插值, 以保证得到较为精确地过零点信号。

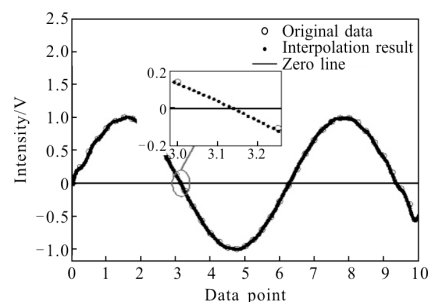


图 2 傅里叶插值

Fig.2 Fourier interpolation

1.3 红外干涉信号的插值重建

采用相同频率等时间间隔同步采样激光与红外干涉信号, 然后将 2 路信号进行傅里叶插值得到过采样的干涉信号, 在此基础上提取激光干涉信号的过零点信息, 通过这些过零点信息对过采样的红外干涉信号进行插值重建, 得到等光程差间隔的红外干涉信号。红外信号插值重建过程如图 3 所示。

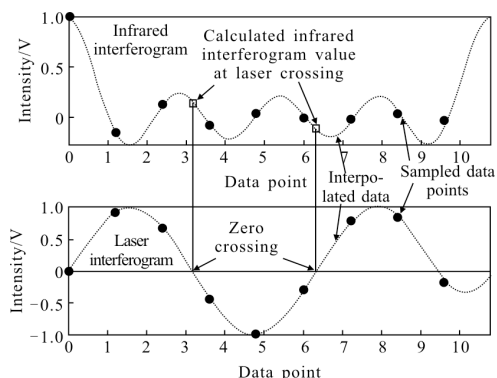


图 3 红外信号插值重建过程

Fig.3 Infrared signal interpolation reconstruction process

2 模拟仿真

为了分析傅里叶插值算法所得到的过零点信息, 首先模拟一个标准的正弦直流信号如下:

$$y = a \sin(\omega t + \varphi) \quad (3)$$

式中: a 为幅值; $\omega = 2\pi f$ 为角频率; φ 为相位角, $-\pi \leq \varphi \leq \pi$ 。在仿真中设置幅值 $a=1000$, 角频率 $\omega=0.3$, 初相位 $\varphi=2$ 。利用一维傅里叶对其进行插值得到插值因子和时间的关系曲线, 如图 4 所示, 图中, 插值因子与所需时间成正相关。

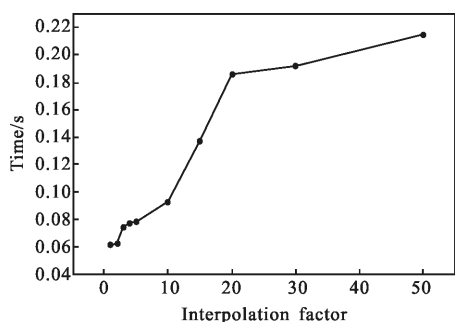


图 4 插值因子与插值时间的关系曲线

Fig.4 Relation curve of interpolation factor and time

图 5 为不同插值因子时仿真得到的过零点值,由图中可以看出插值因子越大,寻找到的零点值越精确。

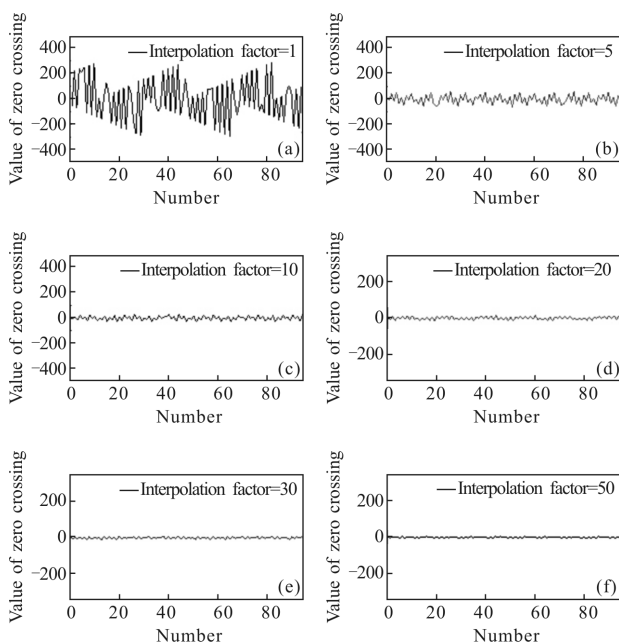


图 5 不同插值因子时的零点值

Fig.5 Zero value with different interpolation factors

图 6 为过零点均匀性在不同插值因子下的比较,可以看出,随着插值因子的增加,零点间隔的异常值逐渐减少,但是会逐渐出现由龙格现象而导致的端点处异常。

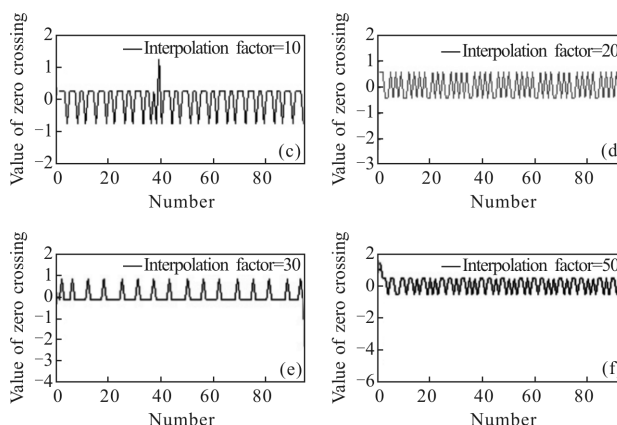
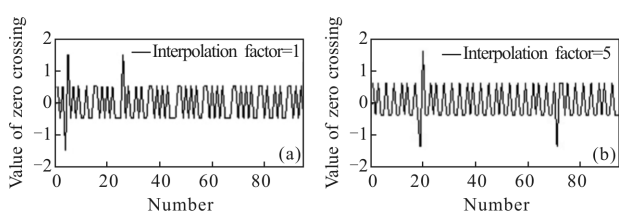


图 6 过零点均匀性在不同插值因子下的比较

Fig.6 Comparison of zero-crossing uniformity under different interpolation factors

由模拟结果可知,在傅里叶插值中随着插值因子的增大,过零点的值逐渐接近零点,其零点均匀性也会有所改善。但是到达一定程度后,端点处会出现异常值,且会增加运算时间。在实际应用中,尤其是数据的实时在线处理时,要综合考虑过零点的准确性以及运算时间。由于“Brault”方法是基于过采样技术,因此可适当降低插值因子以提高运算速度。

3 信号采样与处理

3.1 实验原理

图 7 为激光与红外信号采样与处理的连接示意图。FTIR 光谱仪信号采样与处理系统主要由信号检测器、放大器、滤波器、具备外部触发功能的同步采集卡、上位机通信接口以及外围辅助电路构成。其中采用波长为 632.8 nm 的单频 He-Ne 激光作为参考信号,首先根据仪器要求,设置合适的采样频率来同步采样参考与目标干涉信号,以保证两者在时间上的一致性,简化后续的处理工作;然后将探测到的两路信号分别通过放大滤波后送入同步采集卡的两个并行通道,为了使得系统进行连续采样,将驱动迈克尔逊干涉仪中动镜的转向信号作为触发来实现信号的连续采样。为了提高数据处理的速度,减小数据处理时间,将采集卡采集到的信号在计算机中进行插值、重采样,得到重建后的等光程差间隔红外干涉图。最后对其进行切趾、相位校正及快速傅里叶变换(FFT),最终得到常温常压(300 K, 1 atm)(1 atm=1.01×

10⁵ Pa)下空气的背景光谱。

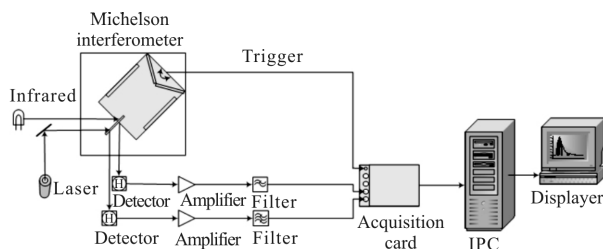


图 7 激光与红外信号采样与处理的连接示意图

Fig.7 Connection diagram of laser and infrared signal sampling and processing

3.2 实验结果分析

经过反复实验验证,为了保证复原光谱的质量,将采集卡的采样率设置为 60 kS/s (即每秒 60 k 个采样点),每个通道的采样数设置为 380 000。同步采样两路信号,其波形图如图 8(a)所示。图 8(b)为红外干涉信号 ZPD 附近两路信号的局部放大图,以这两路信号为原始信号进行后续处理。

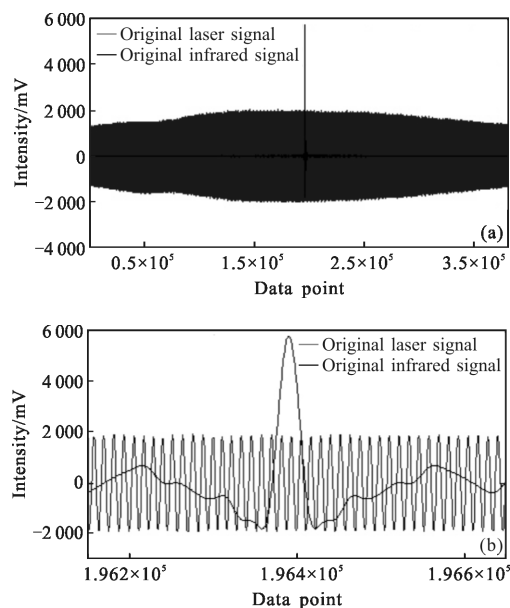


图 8 同步采样激光与红外信号

Fig.8 Synchronous sampling of laser and infrared signal

对参考和目标信号进行傅里叶插值,考虑到既要方便准确地检测到激光过零点信息又要加快运算速度,两路信号的傅里叶插值因子选取为 20,再在经过插值后的激光干涉信号中寻找过零点信息。

在此过程中寻找到的过零点数为 64 508,图 9 为激光过零点位置的线性拟合,可以看出其拟合效

果非常好,相关系数大于 0.999,接近于 1。

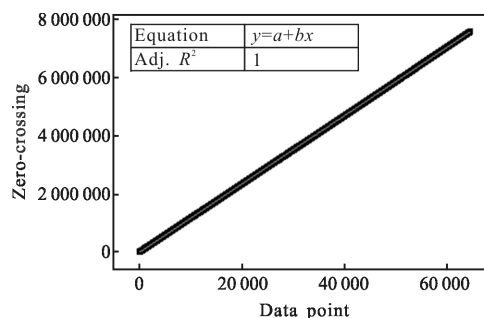


图 9 激光过零点位置的线性拟合

Fig.9 Linear fitting of zero-crossing position of laser

根据得到的过零点信息对红外干涉信号进行重采样,得到等光程间隔的红外干涉信号。

图 10 所示为经过傅里叶变换之后的空气背景光谱。在 2 100~2 200 cm⁻¹ 波段内,三次样条插值方法、线性插值方法以及傅里叶插值方法得到的仪器 SNR 分别为 2179.6、2 232 和 2 232,傅里叶插值方法得到的仪器 SNR 是三次样条插值方法的 1.03 倍。在参考激光信号误差较大时,傅里叶插值的优势较为明显,可以优化激光信号波形,得到较为准确的零点信号,在这种情况下,傅里叶插值方法得到的光谱信噪比是线性插值方法的 1.05 倍。

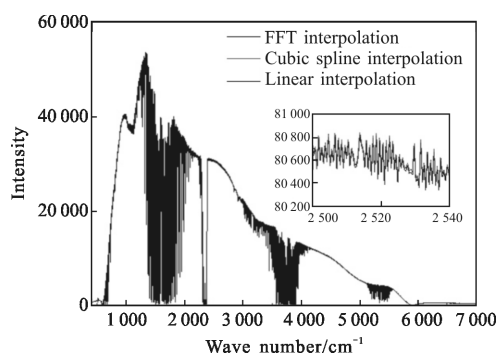


图 10 不同插值方法得到的光谱图

Fig.10 Spectrum of different interpolation methods

4 结论

文中研究了基于“Brault”采样方法的傅里叶插值采样方法,简化了激光过零点信息的查找,在确保过零点信息准确性的同时降低了数据处理的复杂度,得到的过零点信息线性拟合系数大于 0.999,同时与其他插值方法进行了比较,结果表明:在 2 100~

2 200 cm^{-1} 波段范围内, 当参考激光信号误差较小时, 傅里叶插值方法得到的仪器 SNR 是线性插值法得到的仪器 SNR 的 1.03 倍, 而线性插值方法的结果与傅里叶插值方法的结果一致; 当参考激光信号误差较大时, 傅里叶插值方法得到的仪器 SNR 是线性插值方法得到的仪器 SNR 的 1.05 倍。这为高精度 FTIR 光谱仪的研制提供了理论基础和参考依据。

参考文献:

- [1] Li Xiangxian, Wang Zhen, Xu Liang, et al. Study on temperature dependence of the greenhouse gases and carbon isotope ratio spectral analysis [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2015, 44(4): 1178-1185. (in Chinese)
- [2] Tong Jingjing, Gao Minguang, Xu Liang, et al. Measurement and study of 1,3-butadiene based on open path FTIR spectroscopy [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(1): 239-243. (in Chinese)
- [3] Li Yan, Gao Minguang, Xu Liang, et al. Based on trigger sampling method and phase correction of infrared spectrum measurement applications [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2015, 35(7): 2054-2059. (in Chinese)
- [4] Saptari V. Fourier-Transform Spectroscopy Instrumentation Engineering [M]//Tutorial Texts in Optical Engineering volume TT61. Washington USA: SPIE Press, 2004.
- [5] Minami K, Kawata S, Minami S. Zero-crossing sampling of Fourier-transform interferograms and spectrum reconstruction using the real-zero interpolation method [J]. *Applied Optics*, 1992, 31(29): 6322-6327.
- [6] Li Zhigang, Wang Shurong, Han Wenhui, et al. Data sampling of fourier transform spectrometer interferogram using laser interference fringe[J]. *Journal of Optoelectronics Laser*, 2000,11(5):503-506. (in Chinese)
- [7] Brault J W. New approach to high-precision Fourier transform spectrometer design[J]. *Applied Optics*, 1996, 35(16): 2891-2896.
- [8] Brasunas J C, Cushman G M. Uniform time-sampling Fourier transform spectroscopy [J]. *Applied Optics*, 1997, 36(10): 2206-2210.
- [9] Pougatchev N S, Campbell J F, Regan C R, et al. Advanced technologies high resolution Fourier transform spectrometer for atmospheric studies[C]//Proceeding of 2000 IEEE, 2000: 237-243.
- [10] Davis S P, Abrams M C, Brault J W. Fourier transform spectrometry[M]. San Diego, California: Academic Press, 2001.
- [11] Palchetti L, Lastrucci D. Spectral noise due to sampling errors in fourier-transform spectroscopy [J]. *Applied Optics*, 2001, 40(19): 3235-3243.
- [12] Griffiths P R, de Haseth J A., Fourier Transform Infrared Spectrometry [M]. 2nd ed. New York: Wiley & Sons,2007.
- [13] Ren Libing, Wei Haoyun, Li Yan. Digital filter method of oversampling Fourier transform infrared spectrometer [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2012, 41(6): 1438-1441. (in Chinese)
- [14] Turner A, Hoult R A, Forster M D. Digitisation of interferograms in Fourier Transform Spectroscopy: US, patent5914780[P]. 1999-06-22.
- [15] Alber G M, Marshall A G. Effect of sampling rate on Fourier transform spectra: oversampling is overrated [J]. *Applied Spectroscopy*, 1990, 44(7): 1111-1116.
- [16] Ren Libing, Wei Haoyun, Li Yan. Study on the application of soft zero-crossing detection in the infrared spectral measurement system [C]//Proceeding of the Chinese Optical Society, 2010. (in Chinese)
- [17] Zhou Feng, Zhao Chunyu, Huang Zhenyu, et al. Time-domain linear interpolation algorithm and its error analysis for estimating signal period[J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2011, 32(8): 1725-1730. (in Chinese)
- [18] Wu Jie, Liu Kaipei, Le Jian, et al. Study on harmonic analysis based on cubic spline interpolated arithmetic fourier transform [J]. *Electrical Measurement & Instrumentation*, 2016, 53(1): 15-31. (in Chinese)
- [19] Li Xinfu, Li Xiaofan. Comparison of the accuracy for fractal and lagrange interpolation [J]. *Journal of Natural Science of Heilongjiang University*, 2008, 25(3): 323-325. (in Chinese)