

文章编号: 1672-8785(2024)07-0042-07

基于 LabVIEW 的透射转镜式傅里叶变换光谱分析软件设计

陈艺海 朱军锋 李成瑞 杜志强

(中国电子科技集团公司第四十一研究所电子测试技术重点实验室, 山东 青岛 266555)

摘 要: 为满足透射转镜式傅里叶变换红外光谱仪的数据采集、非线性拟合补偿、信号预处理和傅里叶光谱反演等测试需求, 设计了一套基于 LabVIEW 的集数据采集和信号分析为一体的透射转镜式傅里叶光谱分析软件。该软件通过调用 NI 数据采集卡的物理通道接口来采集干涉信号幅度随时间变化的干涉图数据, 并通过信号处理程序复原红外信号的频谱信息, 可实现波形文件的自动存储和数据处理重要流程的可视化, 适合在工控机上应用。测试面源黑体辐射源的辐射光谱曲线, 利用聚苯乙烯的吸收光谱测试波长准确性, 并利用水蒸气的光谱曲线测试光谱半高宽。采用本文设计的光谱分析软件, 复原出了红外信号的光谱分布, 实现了 0.40% 的波长准确性、 0.88 cm^{-1} 的光谱分辨率, 验证了系统的可用性。

关键词: 透射转镜式光谱仪; 红外光谱测试; 傅里叶光谱仪

中图分类号: TN215 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2024.07.006

Software Design of Transmission Rotary Mirror Fourier Spectrometer Based on LabVIEW

CHEN Yi-hai, ZHU Jun-feng, LI Cheng-rui, DU Zhi-qiang

(Science and Technology on Electronic Test and Measurement Laboratory, The 41st Research Institute of China Electronics Technology Group Corporation, Qingdao 266555, China)

Abstract: In order to meet the requirements of data acquisition, nonlinear fitting compensation, signal preprocessing and Fourier spectrum inversion of transmission rotary mirror Fourier spectrometer, a set of transmission rotary mirror Fourier spectrum analysis software integrating data acquisition and signal analysis is designed based on LabVIEW. By calling the physical channel interface of NI data acquisition card, the software collects the interferogram data of the amplitude of interference signal changing with time, and restores the spectrum information of infrared signal by signal processing program. It can realize automatic storage of waveform files and visualization of important data processing processes, which is suitable for industrial computer applications. The spectral curve of blackbody radiation source is measured. The wavelength accuracy is measured by poly-

收稿日期: 2024-01-25

基金项目: 国家自然科学基金项目(62127804)

作者简介: 陈艺海(1992-), 男, 山东青岛人, 硕士, 主要从事光电测试、红外光谱等方面的研究。

E-mail: chyhuc@163.com

styrene absorption spectrum, and the spectral half-height width is measured by water vapor spectrum curve. By using the spectral analysis software designed in this paper, the spectral distribution of infrared signal is recovered. The wavelength accuracy of 0.40% and the spectral resolution of 0.88 cm^{-1} are achieved, which verifies the usability of the system.

Key words: transmission rotary mirror spectrometer; infrared spectrum measurement; Fourier spectrometer

0 引言

时间调制型傅里叶变换光谱仪通过动镜扫描的方式测量连续变化的光程差而产生的干涉信号, 表现为时间积分的形式^[1]。基于旋转运动式的时间调制型光谱仪, 通过转镜的转动形成连续变化的光程差, 避免了直线运动型和摆动型动镜在运动中的启动加速和换向减速带来的误差; 时间分辨率可以很高, 动镜的转速和角度可控, 系统可靠性高且抗振动干扰能力强。

要使转镜式光谱仪能获取干涉数据并得到反演光谱, 不仅需要相应的光路和电路, 也需要搭建相应的软件系统来实现数据采集、信号处理和光谱反演。对于转镜式光谱仪, 光程差非线性导致干涉图周期变化和相位误差。在进行傅里叶变换之前, 需要对干涉信号进行切趾、滤波等预处理, 以保证干涉复原的质量。本文提出了一种集干涉信号采集和光谱信号处理为一体的红外光谱测试分析系统设计。首先介绍了傅里叶光谱仪的基本原理, 然后着重分析了透射转镜式傅里叶光谱软件的设计方案以及实现方法, 最后展示了本文设计的红外光谱测试软件的红外激光信号和黑体辐射信号的光谱测试结果。

1 透射转镜式傅里叶变换红外光谱测试系统

傅里叶变换红外光谱分析仪 (Fourier Transform Infrared Spectroscopy, FTIR) 的工作原理是测量由光程差变化产生的干涉信号, 通过对干涉信号进行非线性校正等数据预处理, 再进行傅里叶变换等计算处理, 得到复原光谱信息, 从而确定各种组分和浓度。迈克尔

逊干涉仪是傅里叶变换光谱仪的核心。

转镜式迈克尔逊干涉仪的基本结构主要由一个 50:50 分束器、四个反射镜和一个全透光的转镜组成, 如图 1 所示。入射光经过望远系统变为平行光束, 传输到分束器后分为两路。其中, 透射光路经过 M1 反射、转镜透射和 M3 垂直反射后, 再经过转镜透射、M1 反射和分束器反射后进入红外探测器, 形成第一路输出光。入射光经过分束器后的反射光路, 经过 M2 反射、转镜透射和 M4 垂直反射后, 再经过转镜透射、M2 反射和分束器透射后进入红外探测器, 形成另一路输出光。两路输出光在探测器上重合。两路光与转镜的夹角不同, 并且均随着转镜的旋转而发生变化, 导致两路光之间的光程差发生变化, 形成干涉信号并被探测器探测, 从而实现了光程差的扫描^[2]。

在本项目搭建的透射转镜式傅里叶变换红外光谱测试系统中, 参考激光波长为 632 nm, 碲镉汞 (HgCdTe) 光电导型红外探测器的工作范围为 $600\sim 5000\text{ cm}^{-1}$, 系统示意图如图 2 所示。傅里叶变换光谱仪的前置望远镜系统接收由黑体辐射源发出的红外辐射, 并出射平行光束。转镜透射式迈克尔逊干涉仪系统将从前置望远镜系统出射的平行光分为两束光。随着透射式转镜的旋转, 两路光通过透镜的光程发生变化, 实现了光程差的扫描, 从而使这两束光产生干涉并会聚在探测器上。旋转透镜作为干涉仪部分的动件, 以稳定的角速度旋转。光电探测器通过等时间采样获得非线性光程差的干涉图, 红外探测器接收红外辐射信号, 连接至数据采集卡, 同时通过红外光谱测试软件控制采集和信号处理。

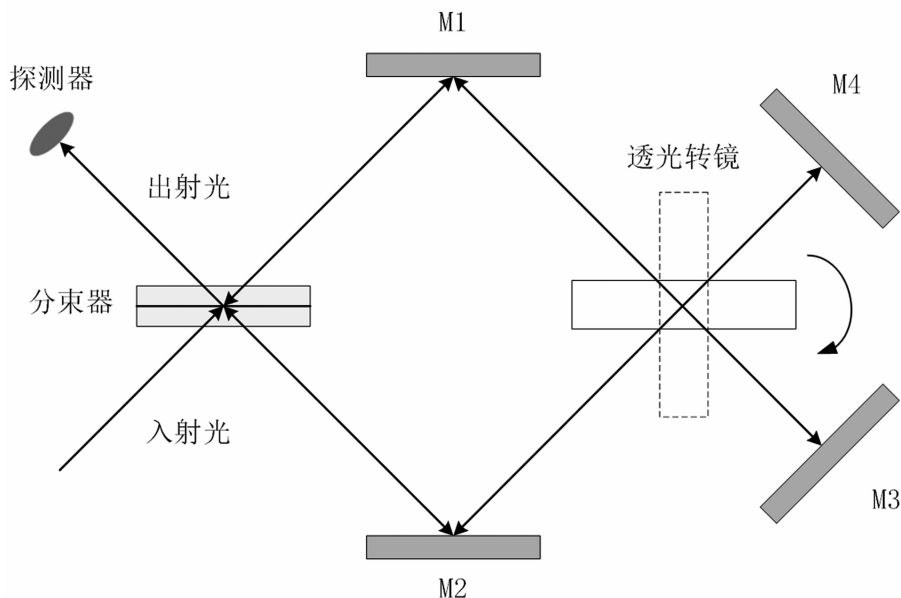


图 1 透射转镜式迈克尔逊干涉仪的结构示意图

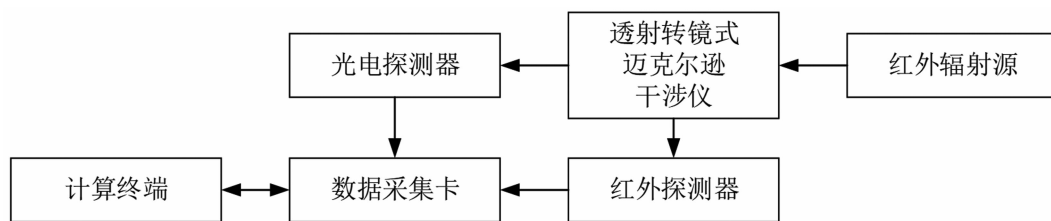


图 2 傅里叶变换红外光谱测试系统示意图

2 软件设计

红外光谱分析软件的主界面分为标题栏、功能区、状态栏三个部分(见图 3)。标题栏包括软件标题和全局退出按钮。在状态栏中,左侧为功能单选按钮,用于实现软件的两大基本功能的切换;右侧是计算机当前时间。功能区为子面板,基于状态栏区的单选按钮,切换调用虚拟仪器(Virtual Instrument, VI)子程序,从而实现数据采集和信号分析两大基本功能的切换。本软件主要分为数据采集和信号处理两大功能。数据采集模块实现 FTIR 运行时信号的实时观察和双通道数据存储,信号分析模块用于对打开的波形文件进行干涉信号选取、非线性校正、预处理和傅里叶变换等计算。基于 LabVIEW 的项目中包含数据采集、信号分析、主界面三个 VI,两大功能通过单选按钮实现对应子 VI 的调用,从而实现不同功能。

数据采集模块分为采集参数设置区和波形

展示区。在波形展示区中,“信号实时采集”波形窗口持续显示红外和激光信号。当开启存储开关时,“数据实时存储”开始递增地显示当前写入的波形文件。信号分析模块分为参数设置区和波形展示区,如图 4 所示。在波形展示区中,上半部分为带标签栏的波形窗口。依次点击标签,在完成对应波形切换的同时,完成对应步骤的执行。波形展示区的下半部分为反演光谱图,可以根据需求切换横坐标的表示方式(波数(cm^{-1})和波长(μm))。

基于 LabVIEW 的透射转镜式傅里叶变换红外光谱分析软件的工作流程如图 5 所示。FTIR 运行时,红外探测器和激光探测器的信号分别连接到 NI 数据采集卡,组成双通道信号。在数据采集模块中,通过调用红外和激光对应的物理通道接口,实时获取信号并将其传递到计算机。首先对两通道进行设置,包括信号最大值、最小值、单位、输入接线端配置

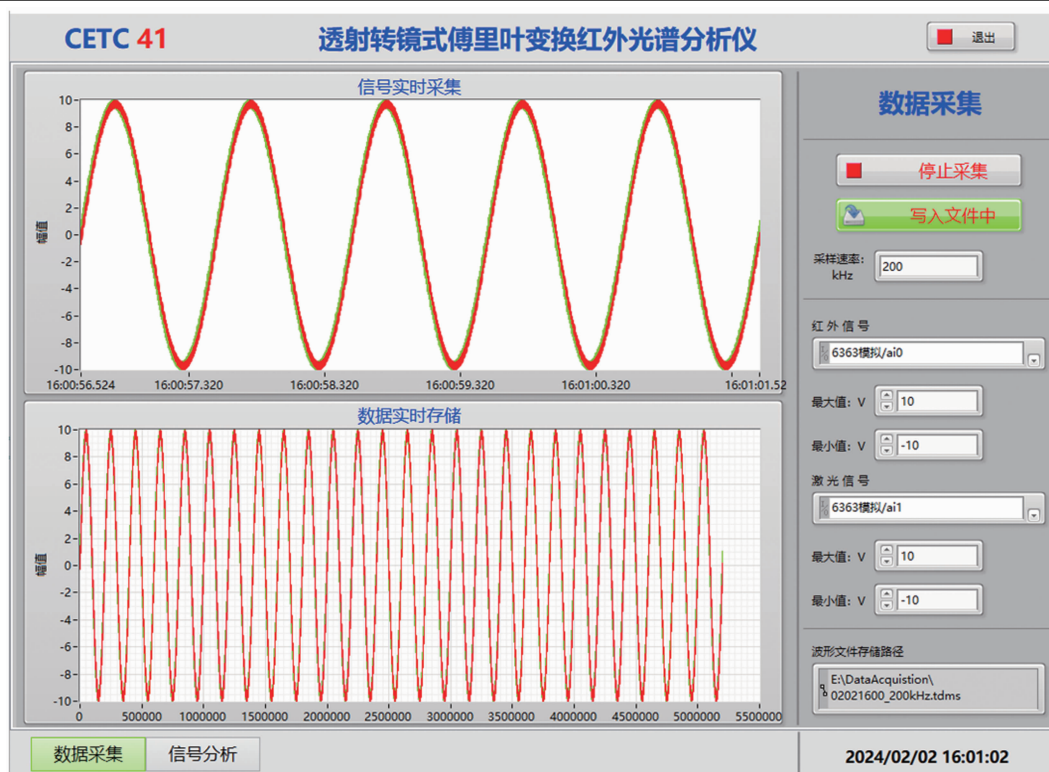


图 3 傅里叶变换光谱分析软件的主界面和数据采集模块

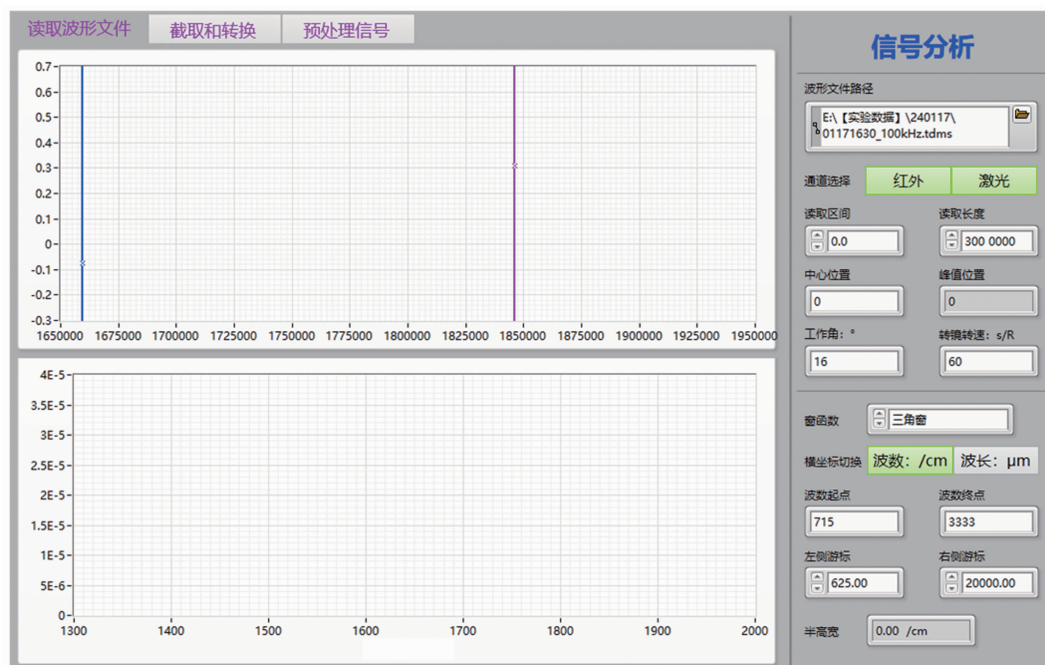


图 4 傅里叶变换光谱分析软件的信号分析模块

等;接着进行时钟设置,包括采样率、采样模式、采样时钟源等(比如基于激光信号的外部时钟源控制数据采集),开启采集任务。

基于数据流的传递,设计数据采集和数据

存储独立循环控制的方法。先创建队列引用,将读取 VI 获得的数据接入队列;在新的 while 循环中出队列,将数据释放。通过可独立控制的 while 循环,在必要的时候开启存储任务,

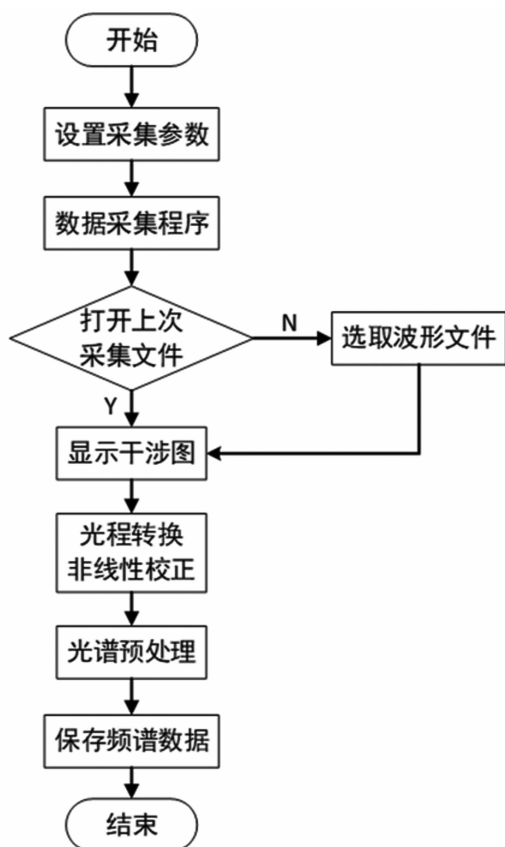


图5 傅里叶光谱分析软件主程序的流程图

新建波形文件。在每个循环里将出队列的新增数据插入波形文件末尾，并可实时显示完整的存储中的波形文件。基于当前计算机时间和指定文件夹，生成波形文件(tmds 格式)，由此完成了数据采集模块的功能。

信号分析子程序打开后，默认开启上次采集的波形文件，也可以手动选取历史文件。显示合适的零光程差附近的波形，截取合适的范围进行后续的处理。采用分档式与分段式相结合的读取方式，切换档级时会锁定峰值。分档式(指定读取长度)的作用相当于波形横向放大缩小。分段式的作用相当于波形横向平移，波形读取的起始点由档级与读取区间的乘积决定。选择合适的零光程差附近的波形后，根据设置的工作角计算截取半径。以零光程差点为 $t=0$ 时刻，将截取波形利用透射转镜式干涉仪光程计算公式^[3]进行光程转换：

$$OPD = 2t(L_1 - L_2 + \sqrt{2}\sin\theta) \quad (1)$$

$$L_1 = \sqrt{n^2 - 2^{-1} - 2^{-1}\sin 2\theta} \quad (2)$$

$$L_2 = \sqrt{n^2 - 2^{-1} + 2^{-1}\sin 2\theta} \quad (3)$$

式中， t 为转镜的厚度(cm)， n 为折射率，OPD 为光程差(cm)。

在转镜式傅里叶变换光谱仪中，光程差与时间之间不是线性关系。光程差非线性给复原光谱带来噪声和波数漂移^[4]。对干涉信号进行多项式拟合，再对干涉曲线进行均匀采样，消除光程差非线性的影响。先对每个插值点进行检索，在其左右两侧各获得三个初始信号的数据点。利用二次或四次拟合，并基于最小二乘或最小绝对残差等方法，获得最佳拟合系数，从而得到线性采样值。对线性采样后的光程差数组计算基频，生成傅里叶变换的波数数组。对于幅值信号，将中值滤波信号作为直流量，再将红外信号减去直流分量。将信号划分为中央干涉区、左侧非中央干涉区、右侧非中央干涉区，并分别设定不同的阈值。将超过阈值的点视为毛刺^[5]，并将其取值改为左右两点的平均值，实现了毛刺剔除和降噪。将信号添加窗函数(可选三角窗、Hamming 窗、Blackman-Harris 窗等)，将干涉信号截止到边缘，实现切趾处理。

对预处理后的波形信号进行傅里叶变换，取不展开相位的幅值。截取 $625 \sim 20000 \text{ cm}^{-1}$ 范围内的反演信号和波数数组，采用中值滤波进行光谱平滑，与背景光谱相减或直接将反演信号输出到下方的波形窗口。将反演数组、波数数组、波长数组自动写入一个 csv 文件并存储到文件夹中。可输入波数的起始点和终止点，选取特定的波段(比如水汽的吸收波段 $1300 \sim 2000 \text{ cm}^{-1}$ 等)，并可进一步计算波峰的半高宽从而测定光谱分辨率。

3 实验结果

基于透射转镜式傅里叶变换红外光谱测试系统，根据转镜折射率和厚度，选择线性较好的区间。最大工作角为 16° ，相应光程差范围约为 $-1 \sim 1 \text{ cm}^{-1}$ 。采集的干涉信号经过去直流后如图 6 所示。

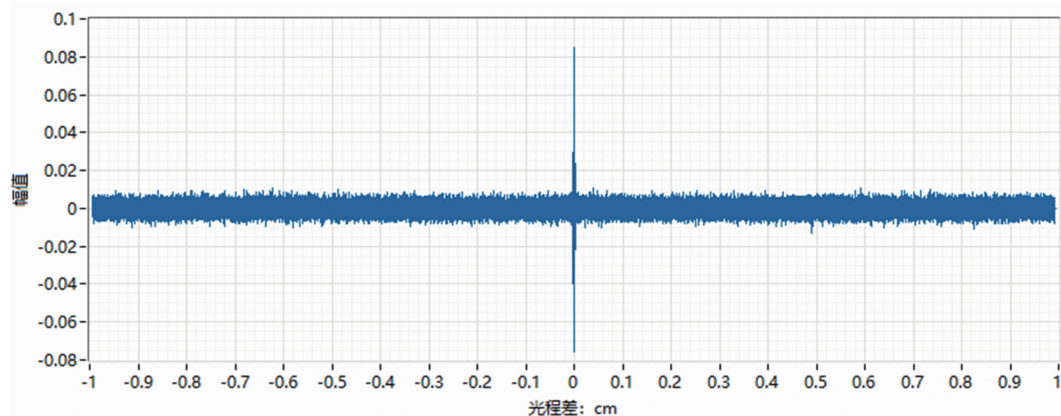


图 6 透射转镜式迈克尔逊干涉仪的红外干涉信号

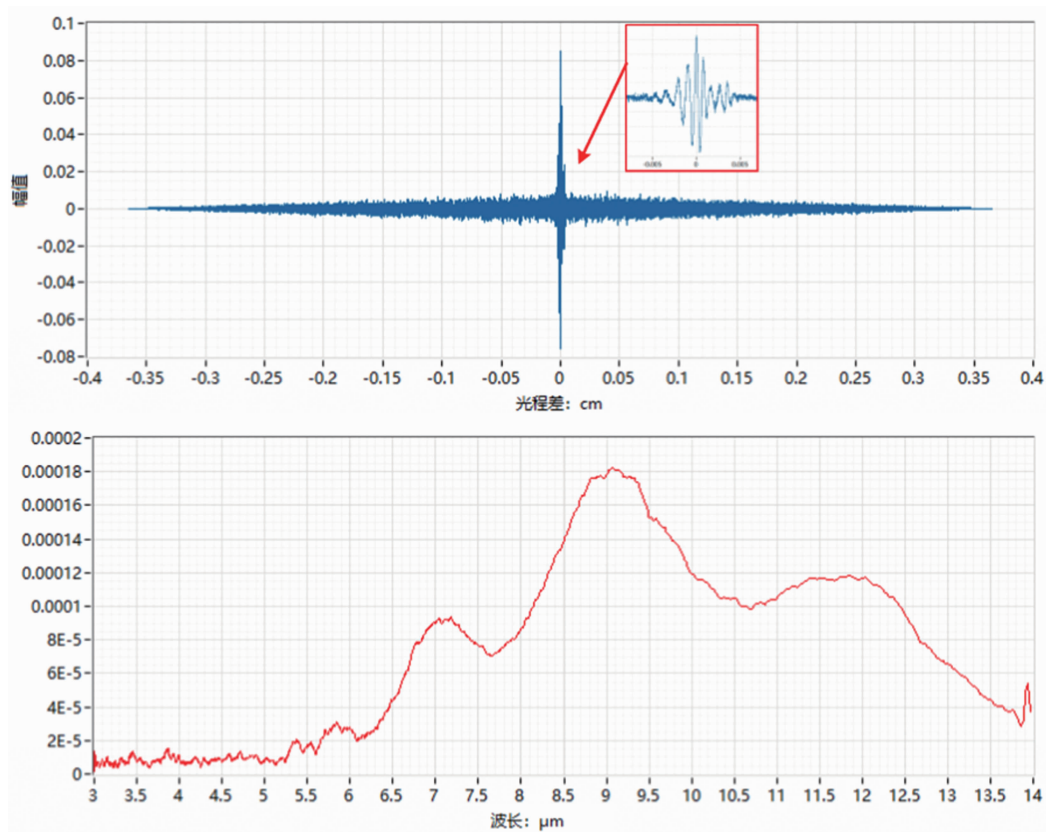


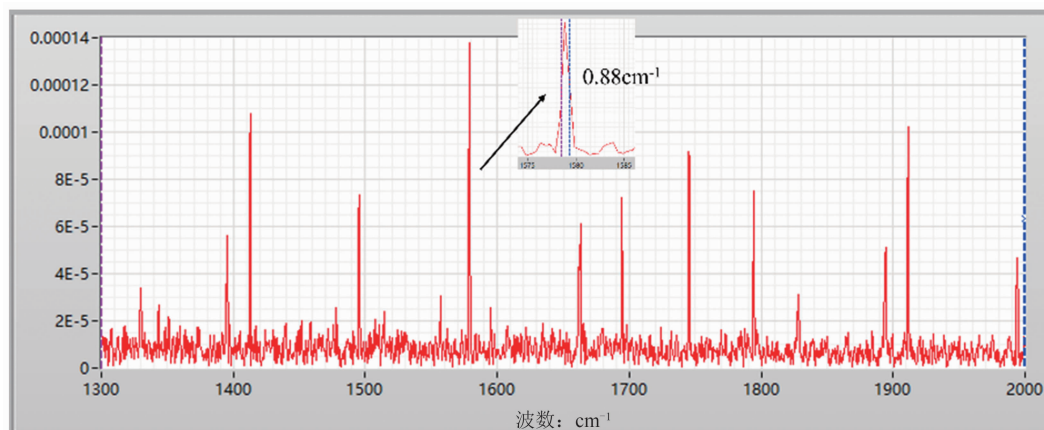
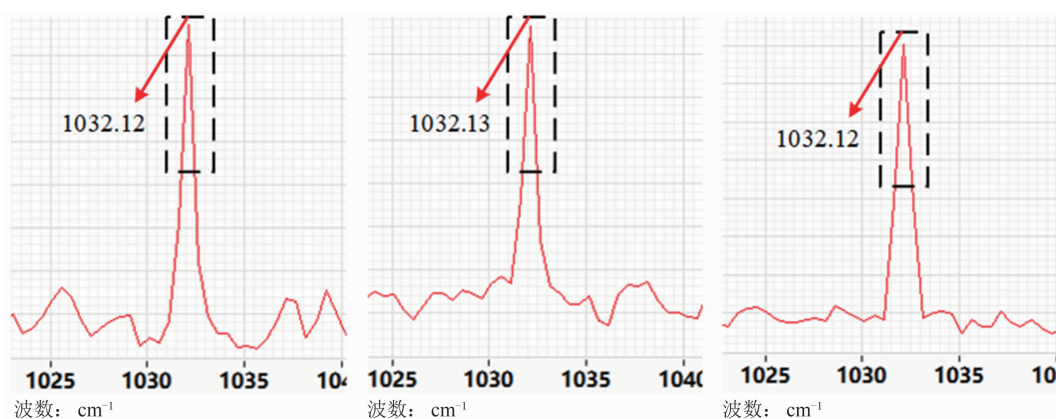
图 7 面源黑体辐射红外干涉信号

测试面源黑体辐射曲线, 预处理信号和反演光谱如图 7 所示。零光程差处的两侧信号长度相等, 实际处理时可根据需要降采样。通过趋势线去除使得信号的直流量稳定在零上, 通过窗函数解决了干涉区间有限的问题, 采用本文的光谱处理软件复原出了光谱辐射曲线。

测试水蒸气吸收光谱分辨率, 选取 $1300 \sim 2000 \text{ cm}^{-1}$ 的吸收光谱。挑选一个独立的、对称的波峰, 如 $1550 \sim 1600 \text{ cm}^{-1}$ 之间的峰

(见图 8)。测量其半高宽^[6-7], 得到实测分辨率为 0.88 cm^{-1} 。

将聚苯乙烯放置在光阑上, 测试 3 次吸收谱, 取其算术平均值并与相应谱带内的标准谱参考值进行对比。波长准确度的三次测试结果如图 9 所示。实际测量聚苯乙烯某一吸收峰三次并取平均值, 得到波数为 1032.12 cm^{-1} , 聚苯乙烯红外吸收谱带波数参考值为 1028 cm^{-1} , 波长准确度为 0.40% 。

图 8 1300~2000 cm^{-1} 红外吸收光谱曲线图 9 聚苯乙烯实测吸收波峰(参考值为 1028 cm^{-1})

4 结束语

本文基于 LabVIEW 编程软件开发出一款实用的红外光谱信号采集与光谱分析软件,实现了透射转镜式红外分光干涉仪的干涉信号采集和光谱反演。本文设计的光谱软件可以实现对红外光谱信号的精确测量,最高分辨率在 1 cm^{-1} 以内,波长准确度在 $\pm 0.5\%$ 以内。下一步工作拟从两个方面进行优化:一是利用触发采样电路提取参考激光信号的过零点信息,选取参考激光的半波长的整数倍作为光程差间隔,得到等光程差间隔采样干涉图;二是在保留光谱特征信息的前提下,有效去除背景噪声,提高光谱的信噪比并减小误差,准确计算物质的透过率谱线和吸光度谱线。

参考文献

[1] 魏儒义. 时间调制傅里叶变换红外光谱成像技

术与应用研究 [D]. 西安: 中国科学院西安光学精密机械研究所, 2013.

[2] 胡德信, 韩顺利, 张志辉. 转镜透射式傅里叶光谱仪光程差的非线性分析 [J]. 红外, 2018, 39(4): 39—42.

[3] 苏星, 黄惠民, 相里斌. 基于高速转镜的高分辨率干涉光谱仪非线性理论研究 [J]. 光子学报, 2001, 30(12): 1474—1480.

[4] 杨晓许, 周泗忠, 相里斌, 等. 转镜式傅里叶变换光谱仪光程差非线性的研究 [J]. 光学学报, 2004, 24(10): 1388—1392.

[5] 张维康. 干涉成像光谱仪高精度光谱复原与快速处理技术研究 [D]. 西安: 中国科学院西安光学精密机械研究所, 2019.

[6] 翁诗甫, 徐怡庄. 傅里叶变换红外光谱分析 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2010.

[7] 李冠. 近红外光谱数据采集中的校正研究 [D]. 成都: 电子科技大学, 2010.