

傅里叶变换红外光谱仪中新的切趾函数

董隽逸 李正直

(苏州大学物理系)

摘要——本文获得了一类新的切趾函数并给出了典型计算结果。它们的性能优于文献[1]中的 3000 多个切趾函数和几个通常使用的切趾函数。与文献[2]相比,它们相对应的仪器函数具有较高的次级峰值衰减速度。

一、引 言

对于理想的傅里叶变换红外光谱仪,两干涉光束间的光程差应在 $-\infty$ 到 $+\infty$ 区间变化。实际情况却并非如此,干涉仪的光程差的变化范围总是处于有限的区间 $[-L, L]$ 。由干涉图的傅里叶变换得到的光谱是真实光谱与仪器函数的卷积。未经切趾的仪器函数是 $\text{sinc}(x)$ 函数,它的次峰较高,易于干扰邻近的光谱线。因此,在傅里叶光谱方法中,应寻找性能良好的切趾函数,以满足特定的需要。一般地讲,切趾函数必须具有少降低分辨本领,多压低次级峰值的特点,并且具有较高的各次级峰的衰减速度^[1]。本文利用勒让德多项式得到了一类新的切趾函数,由微处理机的计算表明,它们的主要性能均优于目前所使用的切趾函数。

二、基 本 原 理

在傅里叶变换光谱学中,光谱 $B(\sigma)$ 是干涉图 $I(x)$ 的傅里叶变换,

$$B(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x) \exp\{-i2\pi\sigma x\} dx, \quad (1)$$

其中 σ 是波数, x 表示光程差。对于实际光程差的变化范围为有限区间 $(-L, L)$ 时,式(1)变为

$$\begin{aligned} B'(\sigma) &= \int_{-L}^L I(x) \exp\{-i2\pi\sigma x\} dx = \int_{-\infty}^{\infty} T(x) I(x) \exp\{-i2\pi\sigma x\} dx \\ &= 2L \text{sinc}(2L\sigma) * B(\sigma), \end{aligned} \quad (2)$$

其中

$$T(x) = \begin{cases} 1 & (|x| \leq L) \\ 0 & (|x| > L) \end{cases}$$

为截断函数, $\mathcal{F}\{T(x)\} = 2L \text{sinc}(2L\sigma)$ 。

本文 1984 年 5 月 22 日收到。

为了得到比 $\text{sinc}(2L\sigma)$ 更好的仪器函数,我们用对称切趾函数 $a(x)$ 代替截断函数 $T(x)$ 。 $a(x)$ 在区间 $(-L, L)$ 之外恒等于零。则式(2)变为

$$B'(\sigma) = \mathcal{F}\{a(x)\} * B(\sigma) = A(\sigma) * B(\sigma)。 \quad (3)$$

上式中
$$A(\sigma) = \mathcal{F}\{a(x)\} = \int_{-L}^L a(x) \exp\{-i2\pi\sigma x\} dx$$

是对应于切趾函数 $a(x)$ 的仪器函数。由于所采用的切趾函数 $a(x)$ 是对称函数,则仪器函数 $A(\sigma)$ 可写成

$$A(\sigma) = \int_{-L}^L a(x) \cos(2\pi\sigma x) dx。 \quad (4)$$

为用计算机计算,必须对连续信号进行离散处理。由离散傅里叶变换可知,式(4)的离散表示可写成^[4]

$$A(\sigma) = A\left(\frac{k}{N\Delta x}\right) = \sum_{n=0}^{N-1} a(n\Delta x) \cos(2\pi kn/N) \quad (k=0, 1, 2, \dots, N-1), \quad (5)$$

式中 Δx 为取样间隔, N 为取样点数, $N\Delta x = 2L$ 。

一般情况下,干涉图是以图 1 方式输入计算机进行傅里叶变换的^[5]。也就是说,图 1(a) 中从 $-L$ 到 0 的信息的离散排列与图 1(b) 中从 $N/2$ 点开始到 N 点的所有信息的离散排列方式是完全相同的。同样,切趾函数的离散点也应该以图 1(b) 相同的方式输入计算机进行处理。显然,它是关于 $n = N/2$ 点对称的,且有 $a(0) = a(N)$ 。为了简单起见,在下面的讨论中我们用 $A(k)$ 代替 $A\left(\frac{k}{N\Delta x}\right)$, $a(n)$ 代替 $a(n\Delta x)$ 。那么, $A\left(\frac{k}{N\Delta x}\right)$ 可表示为

$$\begin{aligned} A(k) &= \left(\sum_{n=0}^{N/2} + \sum_{n=N/2}^N \right) a(n) \cos\left(\frac{2\pi nk}{N}\right) - a(N/2) \cos(\pi k) - a(N) \cos(2\pi k) \\ &= 2 \sum_{n=0}^{N/2} a(n) \cos\left(\frac{2\pi nk}{N}\right) - a(N/2) \cos(\pi k) - a(0)。 \end{aligned} \quad (6)$$

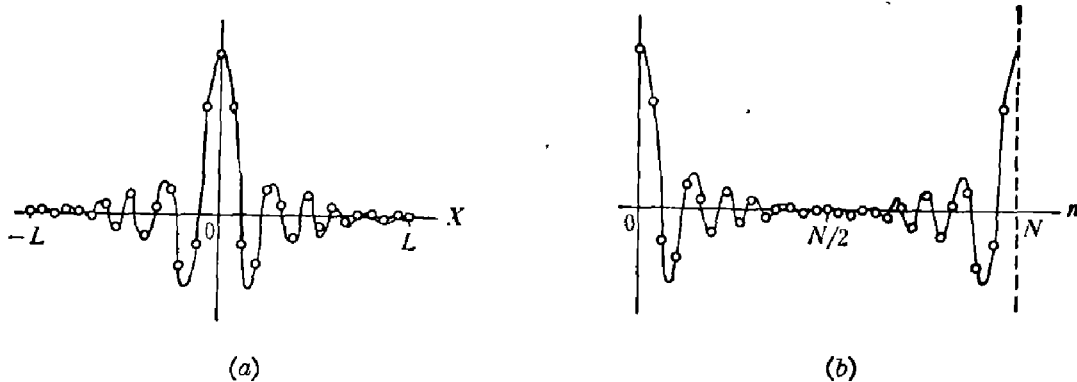


图 1 干涉图的离散处理

由于 $\cos(2n\alpha)$ 可表示为 $\cos \alpha$ 的幂次数形式,其幂次数为 $2n, 2n-2, 2n-4, \dots$, 所以 $A(k)$ 可以表示为下面的形式:

$$A(k) = \sum_{n=0}^{N/2} D(n) \cos^{2n}\left(\frac{\pi k}{N}\right) \quad (k=0, 1, \dots, N/2), \quad (7)$$

$D(n)$ 是函数 $A(k)$ 的展开系数。若引入参数 $x = x_0 \cos\left(\frac{\pi k}{N}\right)$, 这里 x_0 是可供选择的常数因子,则

$$A(k) = \sum_{n=0}^{N/2} W(n) x^{2n}, \quad (8)$$

其中 $W(n) = D(n)x_0^{-2n}$ 。

由式(8)可以看出, $A(k)$ 是 x 的 N 阶多项式。为了寻找新的切趾函数, 我们把它作为勒让德多项式来处理。那么

$$\begin{aligned} A(k) &= P_N(x) = \sum_{i=0}^{N/2} (-1)^i \frac{(2N-2i)!}{2^N i! (N-i)! (N-2i)!} x^{N-2i} \\ &= \sum_{n=0}^{N/2} (-1)^{N/2-n} \frac{(N+2n)!}{2^N (N/2-n)! (N/2+n)! (2n)!} x^{2n} \end{aligned} \quad (9)$$

比较式(8)、(9), 可得

$$W(n) = (-1)^{N/2-n} \frac{(N+2n)!}{2^N (N/2-n)! (N/2+n)! (2n)!} \quad (10)$$

把下列关系式

$$\cos^{2n}\left(\frac{\pi k}{N}\right) = 2^{-2n} C_{2n}^n + 2^{1-2n} \sum_{i=0}^{n-1} C_{2n}^i \cos\left[2(n-i)\frac{\pi k}{N}\right]$$

代入式(7)后, 再与式(6)比较系数, 可得

$$a(n) = \left(\frac{x_0}{2}\right)^{2n} \sum_{i=0}^{N/2-n} \left(\frac{x_0}{2}\right)^{2i} W(n+i) C_{2(n+i)}^i \quad (11)$$

上式当 $n=N/2$ 时须乘以 2。把式(10)代入式(11), 即得

$$\begin{aligned} a(n) &= \frac{x_0^{2n}}{2^{2(N/2+n)}} \sum_{i=0}^{N/2-n} (-1)^{N/2-n-i} \left(\frac{x_0}{2}\right)^{2i} \frac{[2(N/2+n+i)]!}{i! (N/2-n-i)! (N/2+n+i)! (2n+i)!} \\ &\quad (n=0, 1, 2, \dots, N/2-1), \end{aligned} \quad (12)$$

$$a(N/2) = 2 \frac{x_0^N (2N)!}{2^{2N} (N!)^2} \quad (13)$$

由前面所述的对称性可得

$$a(N/2+j) = a(N/2-j) \quad (j=1, 2, \dots, N/2) \quad (14)$$

式(12), (13), (14)就是我们所得到的新的切趾函数的离散表示式。把它们代入式(5)就可以得到与切趾函数 $a(n)$ 相对应的仪器函数 $A(k)$ 的离散值。

三、结果与讨论

我们使用微处理机计算了 $a(n)$ 和 $A(k)$, 采用快速傅里叶变换(FFT)算法。在计算过程中发现, 当 N 超过 28 时, 切趾效果就不太理想了。

图 2 是应用式(12)、(13)、(14), 取 N 等于 16, x_0 分别取 1.0058、1.0150、1.0300、1.0650 所计算得到的归一化的切趾函数。原点左边的曲线是类似于图 1 的方式由 $N/2$ 至 N 区间的曲线平移过来的。

由于 $N=16$, 点数较少, 用这些点去计算式(5)显然是难以得到满意的结果的。因此, 在计算过程中, 我们采用内插的方法把原来的数据点扩大了一倍, 使得取样间隔为 $\Delta x = 0.0625$ (L 取 1), 以减小混迭效应。同时还采取了文献[5]所提出的方法: 取输入计算机的数据点为 N' , 把 $N'-2N$ 个数据点规定为零, 在第 N 与 $N+1$ 个点间插入这 $N'-2N$ 个零, 使得原来第 $N+1$ 个点变为第 $N'-N$

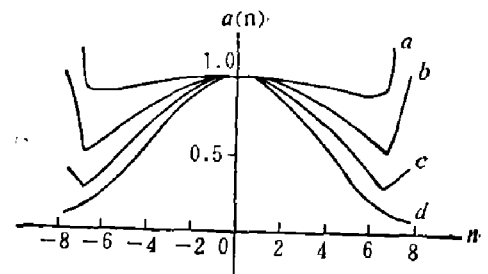


图 2 新的切趾函数

(a) $x_0=1.0058$ (b) $x_0=1.0150$
(c) $x_0=1.0300$ (d) $x_0=1.0650$

+1 个点,第 $2N$ 个点变为第 N' 个点。这样处理以后,增加了时域的截断长度,导致频域中取样间隔的减小,计算得到的离散值就比较接近于连续值了。本文取 $N'=256$ 对式(5)进行了计算,所得到的典型的规一化的仪器函数如图 3 所示。为了比较,图中画出了 $\text{sinc}(x)$ 函数和与常用的三角函数、海宁(Hanning)函数、以及 Nicolet 红外傅里叶光谱仪所使用的 Happ-Genzel 函数^[6] $0.54+0.46 \cos\left(\frac{x\pi}{2L}\right)$ 所对应的仪器函数。由图 3 可以看出,在不增大仪器函数半宽度的情况下,本文所得到的切趾函数能够明显地压低次极大峰值;在保持次极大峰值不变的情况下,则可以有效地减小半宽度,提高分辨率。

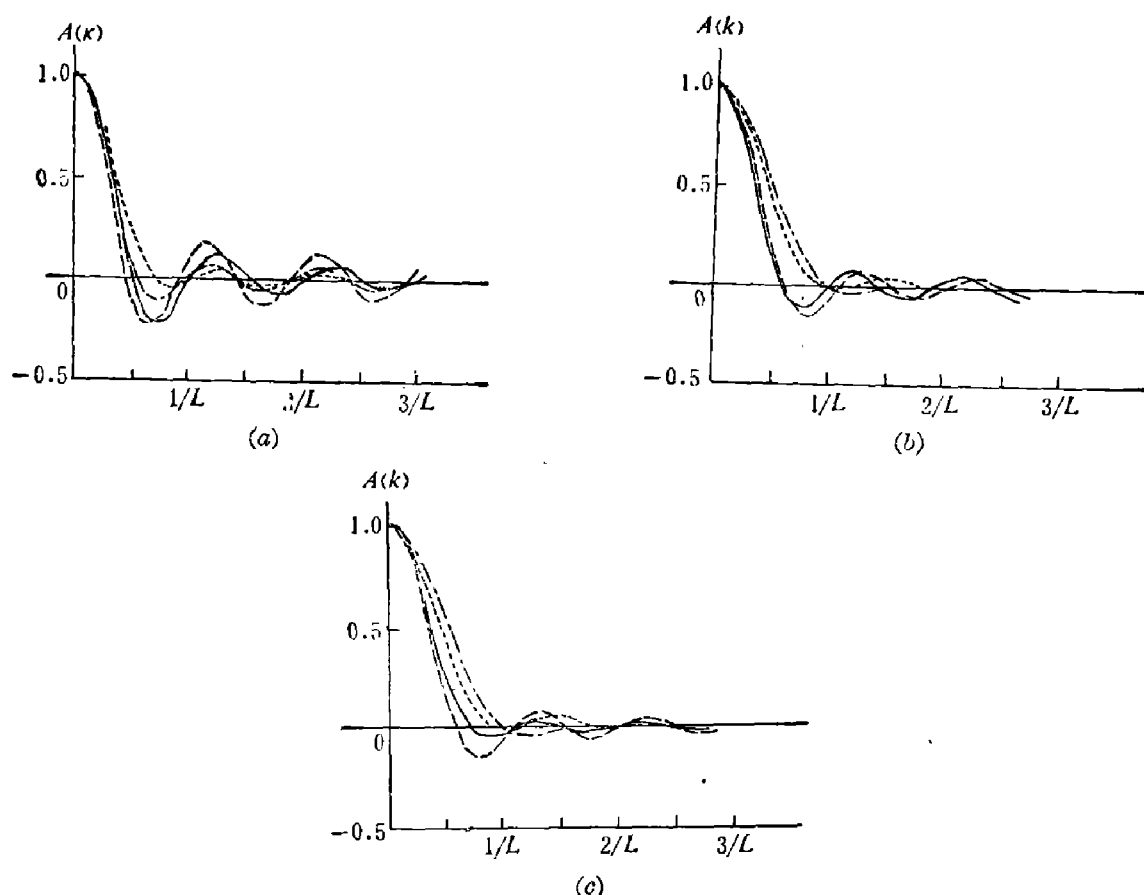


图 3 本文的仪器函数与 $\text{sinc}(x)$ 函数和常用切趾函数对应的仪器函数的比较

(a)—— $\text{sinc}(x)$ 函数 (b)—— $x_0=1.0150$ (c)—— $x_0=1.0300$
 $x_0=1.0058$ Happ-GenzelHapp-Genzel
 $x_0=1.0150$ HanningHanning
 $x_0=1.0300$ $\sin^2(x)$ 函数 $\sin^2(x)$ 函数

在表 1 中,列出了本文所获得的一些典型的仪器函数的次极大峰值的绝对值 $|h|$ 与 $\text{sinc}(x)$ 函数的次极大峰值的绝对值 $|h_0|$ 的比值 $|h/h_0|$,以及前者的半宽度 W 与后者的半宽度 W_0 的比值 W/W_0 。几个常用的切趾函数所对应的仪器函数与 $\text{sinc}(x)$ 函数的相应比值也列在表 1 中。

表 1 仪器函数的相对次极大峰值 $|h/h_0|$ 和相对半宽度 W/W_0

x_0	1.0058	1.0112	1.0150	1.0160	1.0265	1.0300	1.0400	1.0500	1.0650	1.1300	$\sin^2(x)$	Happ-Genzel	Hanning
$ h/h_0 $	1.000	0.6330	0.4767	0.4456	0.2242	0.1761	0.09814	0.06047	0.03535	0.008372	0.2251	0.6324	0.1231
W/W_0	0.9274	1.022	1.077	1.090	1.205	1.236	1.314	1.378	1.457	1.683	1.473	1.099	1.662

由表 1 可见, 用本文的切趾函数所得到的仪器函数, 在分别保持与矩形、三角、Happ-Genzel、海宁函数相对应的仪器函数的半宽度不变的情况下, 次极大峰值可在原有的基础上分别压低 30%, 85%, 35%, 90% 左右; 在分别保持与它们的次极大峰值相同的条件下, 其半宽度可分别减小 7.2%, 19%, 7.0%, 22% 左右。

为了进一步改善本文提出的切趾函数的性能, 我们用因子 $\frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{\pi k}{N} \right)$ (其中 $k=0, 1, 2, \dots, N/2$) 权重于式 (12)、(13), 结合式 (14) 组成另一种切趾函数 $a'(n)$ 。由 $a'(n)$ 对式 (5) 进行计算所得到的三个典型的仪器函数 $A'(k)$ 的半宽度和次极大峰值为: 当 x_0 分别取 1.0100, 1.0060, 1.0300 时, 其 $|h/h_0|$ 分别为 0.2823, 0.4763, 0.07349; W/W_0 则分别为 1.133, 1.052, 1.377。由此可见, 它们的性能有了进一步的改善, 这一点还可由 Filler 图^[3] 表示出来。

所谓 Filler 图就是仪器函数的次极大峰值和半宽度的关系图。纵坐标和横坐标分别表示仪器函数的次极大峰值的绝对值 $|h|$ 和 $\text{sinc}(x)$ 函数的次极大峰值的绝对值 $|h_0|$ 的比值, 仪器函数的半宽度 W 和 $\text{sinc}(x)$ 函数的半宽度 W_0 的比值。图 4 中画出了一些典型的数值在 Filler 图上的表示。图上右边的一条曲线是文献 [1] 由 3000 多个切趾函数所得到的经验边界曲线, 而左边则是文献 [2] 从理论上推得的边界曲线。

事实上, 离开原点愈远的次级峰干扰邻近光谱峰的几率愈大。若用次级峰的衰减速度来衡量切趾函数的优劣的话, 那么, 本文计算得到的结果在实用上是优于文献 [2] 的结果的。我们用类似于前面的计算方法计算了文献 [2] 的切趾函数。现把文献 [1]、[2] 和本文的仪器函数的前十个次级峰值列于表 2 中, 其中第一栏中的

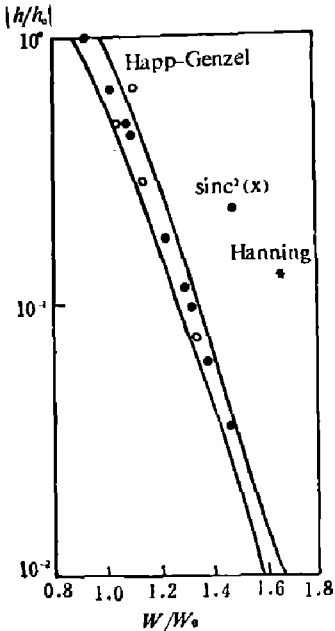


图 4 反映切趾函数性能的 Filler 图

● $N=16$, x_0 取不同值的切趾函数
○ 含有权重因子 $\frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{\pi k}{N} \right)$ 的切趾函数

表 2 仪器函数前十个次级峰值

参考文献[2]		h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	h_7	h_8	h_9	h_{10}
Q	4.7	-0.2190	0.2084	-0.2164	0.2114	-0.2150	0.2111	-0.2155	0.2116	-0.2115	0.2194
	10	-0.0994	0.0991	-0.0986	0.1002	-0.0993	0.1001	-0.0996	0.0998	-0.1015	0.0977
	50	-0.0200	0.0197	-0.0196	0.0199	-0.0201	0.0194	-0.0205	0.0193	-0.0202	0.0201
参考文献 [1]	1	-0.05804	0.05349	-0.04389	0.03598	-0.03020	0.02592	-0.02260	0.02012	-0.01807	0.01640
	2	-0.01414	0.00805	-0.01346	0.01364	-0.01248	0.01119	-0.01003	0.00905	-0.00822	0.00752
	3	-0.00286	-0.00044	-0.00308	0.00373	-0.00369	0.00346	-0.00319	0.00293	-0.00270	0.00250
x_0	1.0058	-0.2155	0.1716	-0.1489	0.1386	-0.1213	0.1101	-0.0992	0.0881	-0.0788	0.0678
	1.0150	-0.1025	0.0826	-0.0716	0.0650	-0.0590	0.0543	-0.0495	0.0447	-0.0396	0.0342
	1.0300	-0.0376	0.0338	-0.0303	0.0297	-0.0266	0.0245	-0.0225	0.0203	-0.0180	0.0155
x_0	1.0060	-0.1024	0.0985	-0.0902	0.0826	-0.0757	0.0690	-0.0624	0.0565	-0.0502	0.0434
	1.0100	-0.0605	0.0606	-0.0607	0.0566	-0.0522	0.0478	-0.0438	0.0397	-0.0352	0.0304
	1.0300	-0.0024	0.0145	-0.0158	0.0158	-0.0151	0.0142	-0.0131	0.0119	-0.0106	0.0091

Q 是文献[2]中供选择的常数因子,最后一栏是含有权重因子 $\frac{1}{2}\left(1+\cos\frac{\pi k}{N}\right)$ 的切趾函数所对应的仪器函数的次级峰值。

显然,在保持仪器函数的半宽度和次极大峰值不变的情况下,衰减速度越快,切趾性能就越好。由表2可以清楚地看到,文献[2]的次级峰值几乎保持不变,即没有衰减。而本文所得到的仪器函数的衰减速度与文献[1]的相当或偏好。

可以认为,本文提出的切趾函数的主要性能均超过了文献[1]所提出的切趾函数及常用的切趾函数,而且比文献[2]的切趾函数更有实用意义。虽然计算得到的切趾函数的离散样本点较少(16个),但这并不影响到它们的实际应用,因为可以用内插的方法得到实际所需的数据点。

致谢——本工作得到许国樑教授的关心和支持,在此深表谢意。

参 考 文 献

- [1] Norton R. H. and Beer R., *J. Opt. Soc. Amer.*, **66**(1976), 3: 259.
- [2] Барен В. А., *Оптика и Оптика*, **48**(1980), 2: 340.
- [3] Filler A. S., *J. Opt. Soc. Amer.*, **54**(1964), 6: 762.
- [4] E. O. 布赖姆, 快速傅里叶变换, 上海科学技术出版社, 1979, 139.
- [5] Forman M. L., *J. opt. Soc. Amer.*, **56**(1966) 7: 978.
- [6] Rabolt J. F. and Bellefleur R., *Appl. Spectrosc.*, **35**(1981), 1: 132.

NEW APODIZATION FUNCTIONS IN FT-IR SPECTROMETRY

DONG JUNYI, LI ZHENZHI

(Department of Physics, Suzhou University)

ABSTRACT

A new class of apodization functions is obtained. Its main properties are better than those of apodization functions usually used and introduced in the article by R. H. Norton and R. Beer, 1976. Results show that the convergence of the secondary maxima of the instrumental functions obtained here is faster than that obtained by V. A. Vagin, 1980.