

基于数字显微镜技术的阿达玛变换近红外光谱仪

刘 佳, 陈奋飞, 廖乘胜, 许 谦, 曾立波, 吴琼水*

武汉大学电子信息学院, 湖北 武汉 430079

摘 要 构建了一个基于数字显微镜技术的新型阿达玛变换近红外光谱仪。光学信号采用光纤引入, 以光栅作为分光元件, 利用数字显微镜代替传统的机械式阿达玛模板进行光学编码调制, 使用单点 InGaAs 红外探测器检测调制后的光信号, 通过快速阿达玛解码还原出原始光谱。通过实验检验了光谱仪的分辨率、信噪比、稳定性以及谱图获取速度等指标。实验结果表明, 所研制的光谱仪灵敏度高, 信噪比高, 响应速度快, 体积小, 其在油品检测、食品安全等行业有着广泛的应用前景。

关键词 近红外光谱仪; 阿达玛变换; 数字显微镜

中图分类号: TH744.1 文献标识码: A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2011)10-2874-05

引 言

近年来近红外光谱检测作为一种无损检测方法受到广泛关注, 其在石油、食品安全、国防等领域有着极为广泛的应用, 已经成为一种十分重要的常规分析测试方法。近红外光谱仪的研制也成为关注热点。根据工作原理, 光谱仪可分为两大类, 经典光谱仪和调制式光谱仪。

典型的经典光谱仪有棱镜光谱仪、光栅光谱仪和声光可调谐滤光器等。棱镜分光光谱仪结构简单, 成本低, 不足之处是其获得的光谱为“非匀排光谱”; 光栅光谱仪具有分辨率高的特点, 缺点是存在机械转动部件, 抗振性差, 且扫描速度慢。声光可调谐滤光器光谱扫描速度极快, 且精度高^[1,2], 但成本昂贵, 单个滤光器工作波段范围较窄。

调制式光谱仪是高性能光谱仪器, 傅里叶变换红外光谱仪是最典型的调制式光谱仪, 采用傅里叶变换光调制方法, 能够获得极高的信噪比和光谱分辨率, 但其成本较高, 抗振和防潮能力差, 无法适应一些工业现场等恶劣环境应用。阿达玛变换(hadamard transform, HT)光谱仪是近年来兴起的另一种高性能调制式光谱仪, 其采用阿达玛变换光调制方法, 具有信噪比高, 体积小, 解码速度快等优点。但传统的阿达玛变换编码模板采用机械式模板, 通过机械移动方法来变换模板, 测量速度慢, 故障率高, 模板的机械偏移将会导致谱图产生波长漂移。

本项目组从 20 世纪 80 年代即开始阿达玛变换仪器的研究, 90 年代即研制出了世界上第一个高分辨 HTMI 型阿达玛变换显微荧光图像分析仪, 1999 年参加了匹兹堡展览, 受到了国际同行以及国家科委的充分肯定。在国家九五、十五科技攻关等项目的持续资助下, 尝试将阿达玛变换和数字显微镜(digital micromirror device, DMD)技术相结合, 成功研制出了一种新型的阿达玛变换光谱仪。其采用高精度的高速数字显微镜代替了传统的机械式模板, 成功克服了光谱仪抗振能力差的问题, 实现了高速、高分辨率、高信噪比以及极强的环境适应性性能的完美结合。大量的测试以及现场应用结果表明, 本系统性能优异, 能够满足常规应用测试需求。

1 阿达玛变换原理

阿达玛变换是近四十年来发展起来的基于平面波函数的一种变换^[3]。在光学应用中, HT 类似于统计学中的称量设计方法。在秤(检测器)的精度一定的情况下, 几个物体分组称量后计算所得各物体的重量, 比一个一个单独称出的重量要准确, 其原理如图 1 所示。

采用 n 个 HT 模板对试样信号进行调制, 可以得到 n 个调制的信号, 用检测器检测每一个调制信号的量值, n 次测量后则可以通过 HT 解码把 n 次测得的调制信号还原成试样的信号。在一般测量中, 如线阵 CCD 光谱仪, 检测器在每一时间间隔内只测量一个分辨单元的信号强度, 而阿达玛变换

收稿日期: 2010-11-25, 修订日期: 2011-03-16

基金项目: 国家“十五”攻关项目(2004BA210A02), 国家自然科学基金项目(60808010)和中国石油科技创新基金项目(2009D-5006-01-06)资助

作者简介: 刘 佳, 1986 年生, 武汉大学电子信息学院博士研究生 e-mail: Liujiayp@yahoo.com.cn

* 通讯联系人 e-mail: qswu@whu.edu.cn

多通道检测技术在同一时间里却可以同时检测多个分辨单元里组合信号的总强度。根据误差理论,多次测量降低了噪声影响,从而能够得到高信噪比。在相同的实验条件下,经阿达玛变换后,信号的均方差可减少 $(n+1)^2/4n$ 倍,信噪比可提高 $(n+1)/2\sqrt{n}$ 倍^[4]。因此阿达玛变换光谱仪非常适合对微弱信号进行测量。

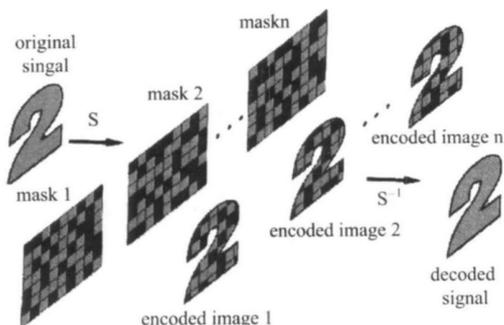


Fig 1 The principle of hadamard transform

2 仪器设计

2.1 设计指标

参考国内外商品化近红外光谱仪器的性能指标,并结合自身设计和研发能力,提出了如下指标,波长范围: 900~1 600 nm; 光谱分辨率: 优于 8 nm; 信噪比: 优于 2 000: 1; 谱图采集速度: 小于 1 秒/图。

2.2 光路设计

所设计的阿达玛变换近红外光谱仪,包含入射光纤接口,入射狭缝,球面反射镜,数字微镜,平面衍射光栅及检测器等。光路如图 2(侧视)和图 3(俯视)所示,待测光谱信号经过入射狭缝 1,首先由球面镜 2 准直成平行光后反射到光栅 3 处发生衍射,经球面镜 4 成像到 DMD 5 上,DMD 每个微小单元分别与不同波长光谱相对应,在外部电路的控制下,按照阿达玛循环编码方式,所有波长的光谱被 DMD 进行光学调制。经调制后的光线被球面镜 6 准直后再次经过光栅产生二次衍射,二次衍射的目的是让第一次衍射后按波长发散的光重新混叠到一起,并入射到球面镜 7,最后被聚焦至检测器 8。

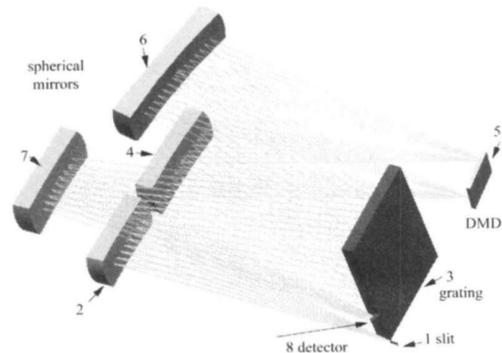


Fig 2 Side view of optic part

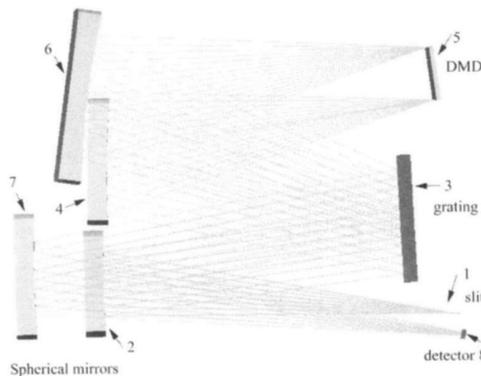


Fig 3 Top view of optic part

系统工作原理如下:经 DMD 调制后的信号被聚焦到探测器上进行收集,光信号转化为电信号,经放大后进行 A/D 转换并保存数据。由 FPGA 电路控制 DMD,并通过 USB 接口与 PC 机通信。

2.3 光学参数设计

首先确定选择使用的衍射级次为 +1 级,因为入射角 i 很小时,第 1 级衍射光衍射角较小,同时因光谱级次越小,自由光谱范围越大,可以防止光谱级次重叠的问题。

针对光谱波段处于近红外波段的特点,由平面衍射光栅理论,查阅国家光栅制造中心提供的光栅型号,选择最合适的光栅刻线距离为 $d=0.005\text{ mm}$ 。

入射狭缝位于球面镜 1 焦点附近,球面镜 1 的作用是将狭缝发出的发散光准直成平行光。其焦距越大,则光线平行度越好。

球面镜 2 的作用是将光栅衍射出来的色散光分别成像到 DMD,此时 DMD 上是波长 900~1 600 nm 的狭缝像分布。DMD 的宽度为 11.059 2 mm。利用 light tools 进行光学模拟仿真并考虑像差的影响,焦距为 75 mm 的球面镜能使 900~1 600 nm 的狭缝像分布在整个微镜上。

球面镜 3 的作用是将 DMD 反射过来的发散光准直成平行光再次入射到光栅,故其焦点位置应在微镜面附近。对准直之后的平行光的要求是:(1)入射方向应与第一次从光栅衍射出来的平行光方向一致;(2)不同波长的光线入射到光栅处的位置应一致。这是为了保证从光栅出射的光线能够正确的混叠在一起,经过球面镜 4 成像后光斑直径最小,从而可以使用检测面很小的检测器,提高测量速度,减少设计成本。通过光学模拟,球面镜 3 合适的焦距也是 75 mm。

从光栅出射的混合光谱经过球面镜 4 聚焦成像到检测器上。根据红外检测器尺寸和位置,球面镜 4 的焦距为 100 mm。检测器采用 Judson 公司生产的 InGaAs 红外检测器,检测面直径 1 mm,截止波长 $1.7\text{ }\mu\text{m}$ 。检测器前置高通滤光片,防止低于 900 nm 波长的光线其高衍射级次进入检测器而产生误差信号。

2.4 阿达玛模板设计及编解码方法

与传统的机械式模板不同,本系统采用数字微镜作为阿达玛模板。数字微镜是一种基于 MEMS(micro-electro-mechanical systems,微电子机械系统)技术的光机电一体化元

件。其光学部分表面由高密度的微小镜片阵列组成，镜片表面采用反射率极高的铝材料，十分适合作为光学反射镜。在外部电路的控制下，每个微小镜片单元均能以 10 kHz 的速度在两个特定的方向上进行偏转。

在本系统中，采用的是美国 TI 公司生产的 0 55XGA Discovery 4000 型 1 024×768 单元的数字微镜，单个微镜单元尺寸仅 10.8 μm×10.8 μm。如图 4 所示，每个单元均能进行 ±12° 的偏转^[5,7]。将 +12° 对应于反射光能够被后续光路收集，我们标记为 On，对应于阿达玛编码中的 1；-12° 对应于反射光不能进入后续光路，我们标记为 Off，对应于阿达玛编码中的 0。利用镜片 on 和 off 状态来进行阿达玛编码。取列方向(对应 1 024 列)组合成为编码码元。

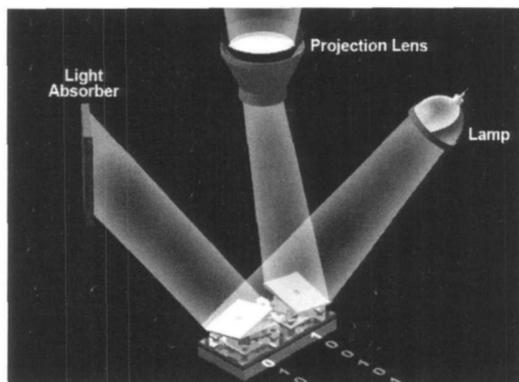


Fig. 4 Pixels in "on" and "off" state

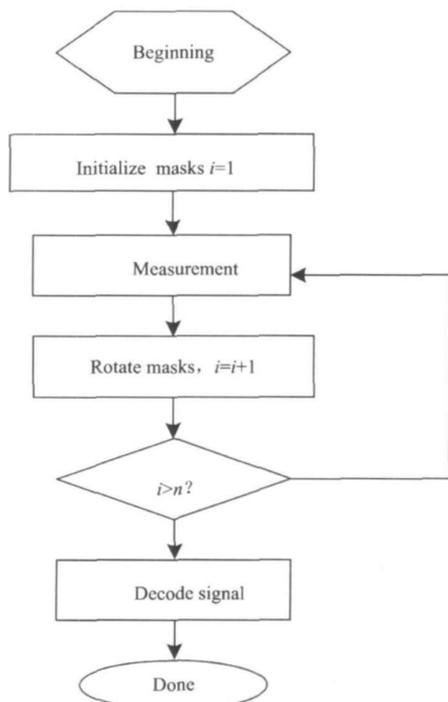


Fig. 5 Flow chart

阿达玛变换光谱调制的方法如下：由外部电路控制 DMD 每个单元的 On/Off 状态，构成一个由 1 和 0(码元)组

成的阿达玛模板。设每个模板由 n 个码元组成，为了实现阿达玛变换，总共需要 n 个模板。因此，类似于传统的机械模板编码方式，我们采用循环编码的方式进行编码。第 i 个模板可以由第 $i-1$ 个模板通过循环移动 1 个码元来得到。流程如图 5(图中 n 为预设定模板总数)所示。

将每次检测的信号强度 y 表示为

$$y_i = \sum_{j=1}^n S_{ij} X_j \quad (1)$$

式(1)中 x_j 是第 j 个码元的信号强度，矢量 $S_j = (S_{1j}, S_{2j}, \dots, S_{ij})$ 的值对每一个 on 的码元为 1, off 的码元为 0。写成矩阵形式为

$$Y = SX \quad (2)$$

对式(2)求解(反阿达玛变换)得

$$X = S^{-1}Y \quad (3)$$

即可还原成待测信号^[8,12]。

由光谱范围可知，为达到优于 8 nm 的分辨率，必须至少采集 88 个以上有效测量点，由于 DMD 有 1 024 个像元，故可选取 128 个有效点，根据抽样定理，阿达玛变换的码元数必须大于等于 $2 \times 128 = 256$ 个。通过调整狭缝和入射角参数，使得一个狭缝像覆盖 8 个并列微镜单元，那么根据瑞利准则，每隔 4 个单元的距离做一次调制，即可达到 256 个阿达玛码元。理论光谱分辨率为： $(1\ 600 - 900) / 128 = 5.5$ nm。

3 实验结果及讨论

3.1 分辨率测试

以 Applied Harmonics Corporation 公司的 Dcrystal laser 1 064 nm 波长的激光作为标准波长，进行本光谱仪的分辨率测试，获得光谱如图 6 所示。

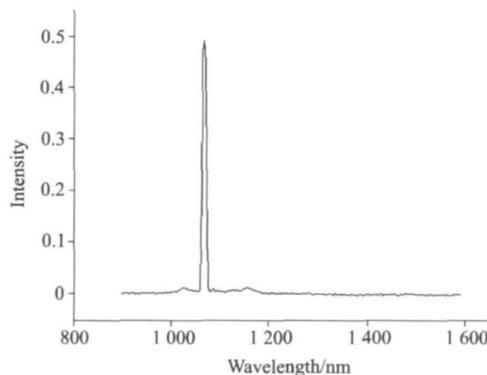


Fig. 6 Spectrogram of a 1 064 nm laser

经计算光谱仪在 1 064 nm 处的分辨率(半高峰宽)为 8 nm，已经能够满足常规工业测试需求。但尚未达到理论的 5.5 nm 分辨率，主要是由狭缝宽度的加工误差和光栅衍射时带来的衍射角展宽问题造成的。今后，将通过提高狭缝精度、仪器加工精度等措施来提高仪器的分辨率。

3.2 信噪比测试

目前光谱仪信噪比测试在国内外还没有一个统一的办法，故选用傅里叶红外光谱仪国标方法来测试本光谱仪的信

噪比。对稳压卤素灯光源连续采集两幅光谱, 并相除, 得到结果如图 7 所示。

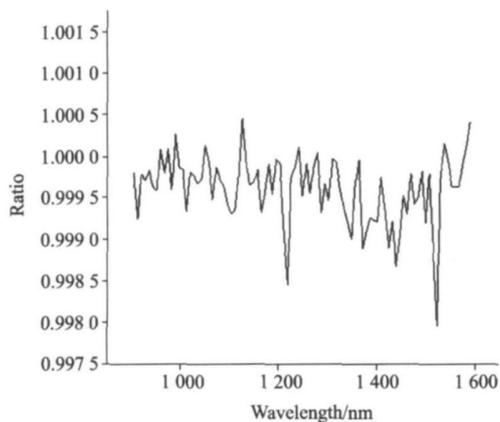


Fig 7 Ratio of two spectrograms

计算出比值信号在全波段的 RMS 值, 最终得出 SNR 为 2 199: 1, 优于实验指标。未来将采用大面积球面镜与极低噪声运放电路来进一步提高光谱仪的信噪比。

3.3 准确性测试

对 1064 nm 激光进行连续 20 次测量, 并对采集到的点数据进行高斯拟合, 求得 20 次测量的中心波长位置, 得到图 8。

由图 8 表明, 在连续多次测量中, 光谱的波长漂移小于 ± 0.1 nm, 证明光谱仪具有良好的准确度。

3.4 采集速度测试

经过多次重复测量, 连续采集 11 次总时间小于 5 s, 能

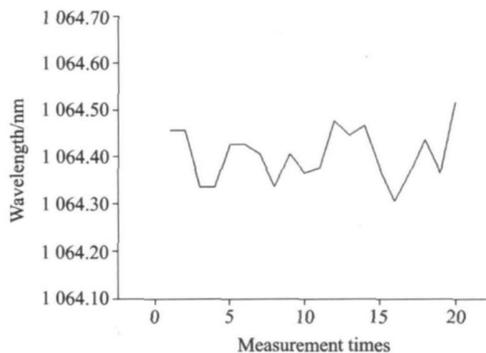


Fig 8 Accuracy of spectrograms

够实现快速高精度测量。

4 结 语

通过实验证实了基于数字微镜技术的阿达玛近红外光谱仪的高速、高分辨率和高信噪比特性。该光谱仪体积小巧, 环境适应性强, 十分适合于工业现场及便携式应用。目前, 该光谱仪已经由北京华夏科创仪器技术有限公司小试生产, 并应用于成品油的检测, 经过了工业现场的严苛试验, 受到了用户的高度评价。我们下一步将通过优化参数设计, 提高加工精度, 提高电路信噪比等手段进一步提高系统的性能。

目前研制的光谱仪工作在近红外波段, 实际上, 中红外波段的光谱仪应用范围更为广泛, 我们下一步计划将波长拓展到中红外波段。一旦取得突破, 其必将在生物、化学、医疗、石油地质勘探等^[13]诸多领域找到广阔的应用空间。

References

- [1] LEI Meng, FENG Xin-hu, ZHANG Xin-min, et al(雷 猛, 冯新沪, 张新民, 等). Modern Scientific Instruments(现代科学仪器), 2009, 4(8): 44.
- [2] CHANG Ling-ying, ZHAO Bao-chang, QIU Yue-hong, et al(常凌颖, 赵葆常, 邱跃洪, 等). Journal of Applied Optics(应用光学), 2010, 31(3): 345.
- [3] Harwit J V, Slone N J. Hadamard Transform Optics. London: Academic Press, 1979.
- [4] TANG Hong-wu, ZHOU Jin-song, LI Tao, et al(唐宏武, 周锦松, 李 涛, 等). Chinese Journal of Analytical Chemistry(分析化学评述与进展), 2005, 33(3): 417.
- [5] DeVere R A, Hammaker R M, Fateley W G. Vibrational Spectroscopy, 1999, 19: 177.
- [6] Fateley W G, Hammaker R M, DeVere R A. Journal of Molecular Structure, 2000, 550: 117.
- [7] Torsten Diehl, Wolfgang Ehrfeld, Manfred Lacher, et al. Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 1999, 5(1): 106.
- [8] ZHOU Jin-song, LÜ Qun-bo, XIANG LI Bin(周锦松, 吕群波, 相里斌). Acta Photonica Sinica(光子学报), 2005, 34(10): 1518.
- [9] Ruth A D, Stephen A D, Brian K H, et al. Transactions on Instrumentation and Measurement, 1990, 39(1): 163.
- [10] Brian K H, Jin B P, Stephen A D. Transactions on Instrumentation and Measurement, 1994, 43(3): 397.
- [11] Susanto R, Bogdan J F. Transactions on Circuits and Systems, 1999, 46(8): 1094.
- [12] Renato G, Maria A S. Electrophoresis, 2005, 26: 3151.
- [13] XU Hao, TANG Hong-wu, LI Ying, et al(徐 昊, 唐宏武, 李 莹, 等). Journal of Analytical Science(分析科学学报), 2008, 24(4): 385.

A Digital Micromirror Device-Based Hadamard Transform Near Infrared Spectrometer

LIU Jia, CHEN Fen-fei, LIAO Cheng-sheng, XU Qian, ZENG Li-bo, WU Qiong-shui*

School of Electronic Information, Wuhan University, Wuhan 430079, China

Abstract A Hadamard transform near infrared spectrometer based on a digital micromirror device was constructed. The optical signal was collected by optical fiber, a grating was used for light diffraction, a digital micromirror device (DMD) was applied instead of traditional mechanical Hadamard masks for optical modulation, and an InGaAs near infrared detector was used as the optic sensor. The original spectrum was recovered by fast Hadamard transform algorithms. The advantages of the spectrometer, such as high resolution, signal-noise-ratio, stability, sensitivity and response speed were proved by experiments, which indicated that it is very suitable for oil and food-safety applications.

Keywords Near infrared spectrometer; Hadamard transform; Digital micromirror device

(Received Nov. 25, 2010; accepted Mar. 16, 2011)

* Corresponding author