基于 DMD 的近红外光谱仪的研究

王 莹1,刘 华1,2,李金环1,陆子凤1,许家林2,陈 斌3

(1. 东北师范大学 物理学院, 吉林 长春 130024;

中国科学院长春光学精密机械与物理研究所 应用光学国家重点实验室,吉林 长春 130033;
 3. 江苏大学 食品与生物工程学院,江苏 镇江 212013)

摘 要:数字微镜器件(Digital Micromirror Device, DMD)作为一种新型的空间光调制器,具有分辨率高、生产成本低、加工效率高等优点,使用起来非常灵活,因此实验室搭建了基于 DMD 的近红外光谱 仪。首先,介绍了 DMD 近红外光谱仪的基本工作原理。其次,对该光谱仪进行了波长标定,提出基于同一样品吸光度曲线相关系数的方法对其进行了波长台间差标准化,使得波长的台间差在理论上小于 0.1 nm,在模型转移时符合要求。又通过在强光与弱光条件下对其噪声与信噪比的测试实验对比得出 DMD 近红外光谱仪不同编码模版的选择准则:在强光条件下扫描方法优于阿达玛方法,在弱光条件下相反。最后,利用该光谱仪对实际样品汽油和柴油进行检测,测试结果表明该光谱仪性能稳定。该 DMD 近红外光谱仪检测波长范围为 1330~2500 nm,吸光度偏差小于等于 0.0004 AU。 关键词:近红外光谱仪;数字微镜器件;波长标准化;模版选择 中图分类号: TN214; H744 文献标志码:A DOI: 10.3788/IRLA201948.0620002

Research on near-infrared spectrometer based on DMD

Wang Ying¹, Liu Hua^{1,2}, Li Jinhuan¹, Lu Zifeng¹, Xu Jialin², Chen Bin³

(1. College of Physics, Northeast Normal University, Changchun 130024, China;
 2. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics,

Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;

3. College of Food and Biological Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

Abstract: As a new type of spatial light modulator, Digital Micromirror Device (DMD) has the advantages of high resolution, low production cost and high processing efficiency. It is very flexible to use, so the laboratory built a near infrared spectrometer based on DMD. First, the basic working principle of DMD near-infrared spectrometer was introduced. Secondly, the wavelength of spectrometer was calibrated, a method based on the correlation coefficient of the same sample absorbance curve was proposed to normalize the inter-wavelength difference, so that the inter-station difference of the wavelength was theoretically less than 0.1 nm, which meet the requirements when the model was transferred. The selection criteria of different coding templates for DMD near-infrared spectrometer were obtained by comparing the noise and signal-to-noise ratio test under strong light and weak light conditions: the scanning method was better than the Hadamard method under strong light conditions, the

收稿日期:2019-02-17; 修订日期:2019-03-21

基金项目:国家自然科学基金(61875036);吉林省中青年科技创新领军人才及团队项目(20160519021JH)

导师简介:刘华(1976-),女,教授,博士,主要从事光谱仪器、光学设计、衍射光学方面的研究。Email:liuhua_rain@aliyun.com

作者简介:王莹(1993-),女,硕士生,主要从事光谱仪器、光学设计方面的研究。Email:wangying179@sina.cn

opposite in weak light. Finally, the actual sample gasoline and diesel were tested by the spectrometer, and the test results showed that the spectrometer performance was stable. The near-infrared spectrometer based on DMD has a detection wavelength range of 1 330 to 2 500 nm, absorbance deviation is less than 0.000 4 AU. **Key words:** near infrared spectrometer; digital micromirror device; wavelength standardization;

template selection

0 引 言

随着微小型光谱仪技术的飞速发展,光谱检测 技术在环境监测、医学药品、农业食品、军事分析以 及工业流程监控等领域已经得到广泛的应用和发 展,与此同时,基于数字微镜器件(DMD)的近红外光 谱仪也逐渐成为现代光谱仪器的研究热点。由于数 字微镜器件自身的特性,将其安装在近红外光谱仪 中,不需要进行机械上的运动,通过软件就可以完成 阿达玛模板的更改,不用重新制造硬件,使研究更加 简便。该 DMD 近红外光谱仪的波长精度、工作波长 范围以及分辨率基本与目前主流的光栅光谱仪相一 致,当然受限于 DMD 的尺寸,无法与高精度傅立叶 变换光谱仪等的指标值相媲美,但是这并不影响其 应用,因为在其应用的范围内,这一精度已经足够。 由于采用单点探测器,成本大大降低。基于 DMD 近 红外光谱仪的诸多优点及优惠的价格完全可以替代 传统的光栅光谱仪及傅里叶变换近红外光谱仪[1-3]。

早在 2006年, Iowa 大学的 Xiang D 就已经利用 0.7 in(1 in=2.54 cm)的 DMD 设计了近红外阿达玛变 换光谱仪,并展开研究^[4]。2012年, JooYoungChoi 改 进了光谱仪,将净分析方法 (Net Analyte Signal, NAS)直接应用在 DMD 的模板上,提高了仪器的信 噪比^[5]。在 2015年,丹麦的 B.Rose 制作了基于 DMD 的近红外光谱仪,按照短波近红外和长波近红外制 作了样机,并且和线阵探测器型的光谱仪做了比较, 指出了 DMD 光谱仪的价格优势和光谱响应可编程 的优势^[6]。同年,美国 TI 公司专门开发了应用于近红 外光谱仪的 DMD 产品, DLP4500NIR 以及超小型的 DLP2010,并且分别开发了样机 NIRScanEVM 和 NIRscanNano^[7]。

近年来关于 DMD 近红外光谱仪的研究有:对 其进行分辨率指标的测试;对于使用光纤接口的光 谱仪,设计了集光结构,提高了光能的利用率;提出 使用 DMD 像素可编程的特点修改模板进行谱线弯 曲修正,并进行了仿真分析^[8-9];对双光栅 DMD 光谱 仪的噪声进行了分析,做了噪声的补偿来矫正光谱 响应曲线;为了提高光谱仪的 DMD 反射后的光谱 的聚光效率,设计了抛物面聚光系统。虽然对 DMD 近红外光谱仪的研究已经取得了一定成果,但仍存 在一些问题,例如两台光谱仪在模型转移时如何保 证波长台间差的一致性;在不同条件下哈达玛模板 的选择问题等还需进一步探索^[10-13]。

文中首先对 DMD 近红外光谱仪进行了安装与 调试,并研制了样机,提出了基于同一样品吸光度曲 线相关系数的方法进行波长台间差标准化,使得波 长的台间差在理论上小于 0.1 nm,在模型转移时符 合要求。然后,通过在强光与弱光条件进行的实验说 明了 DMD 近红外光谱仪不同编码模版的选择准 则:在强光条件下选择扫描方法的信噪比好且噪声 低;在弱光条件下选择扫描方法的信噪比好且噪声 低;在弱光条件下选择阿达玛方法的噪声低且信噪 比好。最后,利用该光谱仪进行了汽油辛烷值的测 试,并给出研制样机的测试结果和对汽油柴油的分 析结果。结果表明该光谱仪的性能稳定,与其他光谱 仪相比,该光谱仪具有明显优势,已经达到预期实验 效果,可以大规模生产使用。

1 DMD 近红外光谱仪的基本原理

DMD 近红外光谱仪由光源、准直透镜、平面衍射光栅、成像透镜、DMD、单点探测器以及光谱采集系统组成。其光学系统的基本结构如图1所示。

待测光由狭缝入射到准直透镜后成为复色平 行光,经平面衍射光栅后被色散为波长不同的光 谱带,再由成像透镜聚焦在 DMD 表面上。DMD 的 不同位置则会按照波长顺序进行选通,选通后的 光谱经会聚透镜后聚焦到单点探测器内进行光谱 采集。



图 1 DMD 近红外光谱仪的基本结构图 Fig.1 Basic structure diagram of DMD near-infrared spectrometer

根据光学系统原理,利用光学设计软件构建了光 谱仪结构,并对其进行优化,最终形成的实际光学系统 如图2所示。该系统的工作谱段为1.33~2.5μm。在探 测器表面形成的光斑能量分布如图3所示,能量半径 在1mm以内。探测器使用的是尺寸2mm的光敏面。



图 2 光学系统结构





Fig.3 Energy distribution of light spots on the detector surface

通过分析 DMD 近红外光谱仪的基本工作原 理,合理选择系统参数进行设计、安装与调试,完成 光谱仪器的搭建工作,其光机结构实物如图 4 所示。



Fig.4 Optical-mechanical real figure

2 DMD 光谱仪的波长标准化方法

2.1 波长标定

基于 DMD 的近红外光谱仪与线阵探测器型的 光谱仪结构十分相似, DMD 的 1 列条纹与线阵探测 器的 1 个像元相对应。通常使用多项式拟合某个像 元位置与该像元波长的关系。实验室搭建的 DMD近 红外光谱仪微镜阵列的列数为 912 列,波长的范围 为 1 330~2 500 nm, 在实际标定时使用 456 点采样。

首先使用 3 个激光器进行粗标定,再利用海洋 光学的氙校准光源精确定标。进行粗标定的 3 个激 光器的波长分别为 1 550、1 625、2 210 nm。以标号为 n2 的光谱仪进行光谱采集为例,利用 1 550 nm 激光 器采集得到的光谱如图 5 所示,从图中可以看出 1 550 nm 激光器对应的微镜组序号为 85,同样利用





1 625、2 210 nm 激光器采集光谱得到的微镜组序号 分别为 113 与 355。利用 3 点 2 次多项式进行多项式 拟合后,得到该光学系统的波长与微镜的位置具有 线性关系。为了进一步提高精度,再次利用海洋光学 的氙校准光源精确定标,n个点标定即有 n 阶方程。 最后得到对应的微镜位置与中心波长的关系如公 式(1)所示:

y=-9.648x³-0.0007746x²+2.943x+1304 (1) 2.2 波长台间差标准化

首先利用以上标定方法对标号为 n2 和 n3 的两 台光谱仪分别进行标定后,再分别测试同一样品医 用酒精的吸光度,利用基于同一样品吸光度曲线相 关系数的方法来标定多台光谱仪的波长的一致性。 测试结果如图 6 所示。





Fig.6 Absorbance curve of medical alcohol before wavelength normalization

由两台光谱仪的测试结果可以看出吸光度的几

个峰值明显不重合,而使用激光器标定的3个波长 位置两条曲线具有良好的重合性。

进行归一化测试时,选取一台光谱仪作为标准 样机,另一台光谱仪以这一台为标准,使两台光谱仪 的波长台间差满足要求,可以进行模型转移。实验采 用增加控制点的方法,用 Matlab 进行模拟计算,使 两台光谱仪测试同一样品吸光度时的相关度最大。 为了使整个波长范围内各个谱段均可以有效地被操 作控制,所以在有效波长范围内增加3个控制点。增 加的控制点的横坐标分别为1410、1950、2350 nm, 并根据粗标定的结果计算出对应的微镜组序号,如 表1所示。

表 1 添加的控制点微镜组序号与标定波长 Tab.1 Added control point micromirror serial number and calibration wavelength

Micromirror serial number	Calibration wavelength/nm
36.5	1 410
239.1	1 950
429.4	2 350

由计算得出 1 410、1 950、2 350 nm 对应的微镜 组序号分别为 36.5、239.1、429.4,使它们在微镜组序 号±10 的范围内变动,步长取 0.1。可以得到控制点 在该范围内变化时的相关系数图。图 7(a)~(c)分别 为 1 410、1 950、2 350 nm 的控制点变动时两条吸光 度曲线的相关系数图。



Fig.7 Correlation coefficient figure of two curves when the control points of 1 410, 1 950, 2 350 nm are changed

通过以上方法对控制点进行逐次搜索,直至搜 索到最佳控制点位置为止,并利用最佳控制点画出 光谱图像。由此得到波长重新标定之后的两台光谱 仪的吸光度曲线如图 8 所示。





Fig.8 Absorbance curve of medical alcohol after wavelength normalization

通过归一化前后两台光谱仪吸光度曲线的对 比,说明实验采用的归一化方法可以实现不同光谱 仪测得的光谱数据之间的模型传递。为了验证方法 的可行性,使用两台仪器对另一种浓度的酒精溶液 进行了测量,并且对异化前后的吸光度曲线进行了 比较,如图 9、10 所示。实验结果表明该归一化方法 可行。



图 9 波长归一化前未知样品的吸光度的曲线







Fig.10 Absorbance curve of unknown sample after wavelength normalization

3 不同条件下阿达玛模版的选择准则

完成 DMD 近红外光谱仪的标定与波长标准化后,对该光谱仪的模版选择问题做了有意义的实验 探究。分别在强光条件(如透明液体测试时的透射 光谱)与弱光条件下(如固体颗粒测试时的散射光 谱)对 H 互补矩阵、S 矩阵和扫描方法的信噪比进 行了测试。3 种方法中 DMD 的行与列的开关状态 不同,则 DMD 接收到的光谱信息不同,最后进入探 测器的能量也就不同,利用 DMD 光谱选择的特点 分别测出在强光与弱光条件下的噪声与信噪比,并 进行对比分析,得出在强光与弱光条件下的模声选择

在强光条件下采用 H 互补矩阵、S 矩阵和扫描 方法采集得到的噪声与信噪比随波长的变化关系 如图11、12 所示。图中绿色曲线表示采用 S 矩阵方法







图 12 强光条件下不同编码方法的信噪比

Fig.12 Signal-to-noise ratio of different methods under strong light

时得到的噪声与信噪比随波长的变化关系,红色曲 线表示采用H互补矩阵方法时得到的噪声与信噪比 随波长的变化关系,蓝色曲线表示采用扫描方法时 得到的噪声与信噪比随波长的变化关系。如图11中 的蓝色曲线所示,扫描方法的不同波长的噪声与该 波长处的光源功率的大小成正相关。利用 H 互补矩 阵方法和 S 矩阵方法得到的噪声都比扫描方法的噪 声大。由图可见 S 矩阵方法的噪声比扫描方法的噪 声大,而信噪比比扫描方法的信噪比小。由于 H 矩阵 方法需要加载更长的时间,其噪声并没有得到改善。

在弱光条件下 H 互补矩阵、S 矩阵和扫描方法 3 种方式采集得到的噪声与信噪比随波长变化的关 系如图 13、14 所示。图中绿色曲线表示采用 S 矩阵 方法时得到的噪声与信噪比随波长的变化关系,红 色曲线表示采用 H 互补矩阵方法时得到的噪声与信 噪比随波长的变化关系,蓝色曲线表示采用扫描方 法时得到的噪声与信噪比随波长的变化关系。由图 可见,在弱光条件下扫描方法噪声最大,信噪比最 低,与强光条件下得到的结果完全相反。利用 H 互 补矩阵方法和 S 矩阵方法得到的噪声都比扫描方法 的噪声小,其中 S 矩阵方法得到的信噪比明显优于 扫描方法的信噪比。通过对 3 种方法的实验测试结 果对比,说明在强光条件下适合选择扫描方法,而在 弱光条件下适合选择阿达玛方法。







图 14 弱光条件下不同编码方法的信噪比

Fig.14 Signal-to-noise ratio of different methods under weak light

4 DMD 光谱仪实际测试与分析

4.1 DMD 光谱仪的吸光度重复性测试

利用阿达玛模板与条纹扫描方法分别对某一中性 滤光片的吸光度进行测试,并对吸光度的标准偏差进 行分析。两种模板得到的吸光度标准偏差值都是通过 连续测试 2h,每隔 5min 测试一次,每次是 16 次连续 采集的平均值,得到的 24 个数据的标准偏差值。

图 15 为利用阿达玛方法得到的吸光度随波长 的变化曲线,图 16、17 分别为在强光与弱光条件下 得到的吸光度标准偏差值。



图 15 利用哈达玛方法得到的中性滤光片的吸光度曲线 Fig.15 Absorbance curve of neutral filter obtained by Hadamard method



图 16 利用哈达玛方法得到的强光条件下吸光度的标准偏差

Fig.16 Standard deviation of absorbance under strong light conditions obtained by Hadamard method



图 17 利用哈达玛方法得到的弱光条件下吸光度的标准偏差

Fig.17 Standard deviation of absorbance under weak light conditions obtained by Hadamard method

图 18 为利用条纹扫描方法得到的吸光度随波 长的变化曲线,图 19、20 分别为在强光与弱光条件 下得到的吸光度标准偏差值。



图 18 利用扫描方法得到的中性滤光片的吸光度曲线

Fig.18 Absorbance curve of neutral filter obtained by scanning





Fig.19 Standard deviation of absorbance under strong light



图 20 利用扫描方法得到的弱光条件下吸光度的标准偏差 Fig.20 Standard deviation of absorbance under weak light conditions obtained by scanning method

通过图像对比:利用哈达玛方法时弱光条件 下得到的可见吸光度的 RMS 偏差基本上在0.0006 以内;利用扫描方法时强光条件下可见吸光度的 RMS 偏差基本上在 0.0004 以内。说明在弱光条 件下利用哈达玛方法得到的结果稳定,在强光条件下利用扫描方法得到的结果稳定,这与上述在强、弱光条件下进行模板选择的对比实验结果相吻合。

4.2 实际样品测试

江苏大学陈斌教授科研组利用该光谱仪进行了 实际样品汽油和柴油的性能分析测试。测试环境温 度 25℃,用 10 mm 的石英比色池装入汽油样品,以 空气做本底测量汽油的透过率。进行光谱扫描,每个 样品共测 3 次本底和样品,最后求得每个样品的平 均值。依次获得 100 种汽油样品原始光谱信息,并将 这些信息输入到计算机中得到吸光度与波长的关 系,如图 21 所示。



在得到的光谱信号中不仅含有样品待测成分信息,还夹杂着一些非目标因素,例如:高频噪声、基线 漂移、杂散光、样品背景等,这些因素会对建立稳定 而可靠的模型造成干扰,为此需要对光谱信息进行 预处理来降低对光谱信息的影响。采用 NIRSA 数据 处理系统对原始光谱做不同的预处理,结果如表 2 所示,表中 Rc 表示校正集相关系数。

由表可见:对于研究法辛烷值(RON),和马达 法辛烷值(MON)都是经过归一化建立的 PLSR 模 型(RON,相关系数 *Rp*=0.918 0,预测均方根误差 RMSEP=0.724 2,如图 22(a)所示。MON,相关系 数 *Rp*=0.899 6,预测均方根误差 RMSEP=0.420 5, 如图 22(b)所示)。测定的结果与用标准法测定的 辛烷值有很好的相关性,表明该光谱仪可以用于 汽油属性的测量,为汽油产品的检测提供一种快 速、准确、简便的方法,同时这种技术还可以扩展 到中波红外光谱仪器的研制中,进一步扩展其应 用领域。

红外与激光工程

- as a rest of the second second by the second se										
Pretreatment	RON(Research octane number)			MON(Motor octane number)						
	Rc	RESEC	Rp	RMSEP	Rc	RESEC	Rp	RMSEP		
Raw	0.9106	0.7556	0.8741	0.8994	0.9000	0.4355	0.879 5	12.248 7		
MAF	0.9291	0.670 1	0.930 5	0.7276	0.9245	0.3852	0.8638	0.5245		
SGF	0.923 9	0.699 5	0.9133	0.7767	0.9126	0.4111	0.8191	0.5715		
Normalization	0.9300	0.6700	0.9322	0.6577	0.9182	0.399 5	0.9204	0.3731		
Center	0.9106	0.7556	0.8741	0.8994	0.9000	0.4355	0.8358	0.5539		
1st order	0.9281	0.6677	0.9180	0.7242	0.9541	0.304 6	0.8130	0.5735		
2nd order	0.9410	0.644 6	0.8889	0.7150	0.9476	0.3332	0.8576	0.4584		
MSC	0.9510	$0.572\ 4$	0.8962	0.7931	0.9404	0.3457	0.8861	0.4425		
SNV+Go trend	0.9471	0.584 7	0.9083	0.746 5	0.9237	0.385 9	0.8996	0.4205		

表 2 汽油的不同光谱预处理方法所建 PLSR 模型效果(RON 和 MON)

Tab.2 PLSR model effect of different spectral pretreatment methods for gasoline (RON and MON)



Fig.22 Predicting results of RON and MON

5 结 论

第6期

文中通过对搭建样机进行波长标定以及利用基 于同一样品吸光度曲线相关系数的方法对其进行波 长台间差标准化,使得在模型转移时符合要求。又在 强光与弱光条件下进行噪声与信噪比的测试实验, 对比实验结果得出 DMD 近红外光谱仪不同编码模 版的选择准则:在强光条件下适合选择扫描方法;在 弱光条件下适合选择阿达玛方法。最后利用该光谱 仪对实际样品汽油和柴油进行检测,测试结果表明 该光谱仪性能稳定,已经满足对某些物质进行成分 分析的条件,具有重要的理论意义与实际应用价值, 可以大规模生产使用。该 DMD 近红外光谱仪波长 范围为1330~2500 nm,光谱分辨率小于 10 nm,通过 24 次采集后取 RMS 值,得到每个点的吸光度重复 性最小值小于等 0.0004 AU,采样速度:利用 103 点 采样时间约为 1s。

参考文献:

- Xu J L, Liu H, Lin C B, et al. SNR analysis and hadamard mask modification of DMD hadamard transform nearinfrared spectrometer[J]. *Optics Communications*, 2017, 383: 250–254.
- [2] Quan X Q, Liu H, Lu Z W, et al. Correction and analysis of noise in Hadamard transform spectrometerwith digital micro-mirror device and double sub-gratings [J]. *Optics Communications*, 2016, 359: 95–101.
- [3] Dong Xiang. Advances in near-infrared glucose monitoring using purecomponent selectivity analysis for model characterization and a novel digital micro-mirror array spectrometer [D]. Iowa City: University of Iowa, 2006.
- [4] Xiang D, Arnold M A. Solid-state digital micro-mirror array

spectrometer for hadamard transform measurements of glucose and lactate in aqueous solutions [J]. *Applied Spectroscopy*, 2011, 65(10): 1170.

- [5] Joo Young Choi. Advancing solid-state near-infrare dspectros copy for clinical measurements of glucose and urea [D]. Iowa City: University of Iowa, 2012.
- [6] Rose B. Programmable spectroscopy enabled by DLP [C]// International Society for Optics and Photonics, SPIE Opto, 2015: 93760I.
- [7] Pruett E. Latest developments in Texas Instruments DLP nearinfrared spectrometers enable the next generation of embedded compact, portable systems [C]//SPIE, 2015, 9482: 94820C.
- [8] Gao Lingxiao, Zhang Zhihai, Zhang Wenkai. Noiseimprovement of complementary S matrixuesd in DMD spectrometer [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42 (11): 3082-3086. (in Chinese)
 高玲肖,张智海,张文凯. 互补S矩阵在 DMD 光谱仪中噪 声改善的研究[J]. 红外与激光工程, 2013, 42(11): 3082-3086.
- [9] Yang Minzhu, Zhou Yaopu, Zhang Lei, et al. Nonlinear effects of the Fourier transform spectrometerdetector and itscorrection [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2017, 46

(10): 1023001. (in Chinese)

杨敏珠, 邹曜璞, 张磊, 等. 傅里叶变换光谱仪探测器非线性的影响及其校正方法 [J]. 红外与激光工程, 2017, 46 (10): 1023001.

- [10] Wang Xiaoduo, Liu Hua, Lu Zhenwu, et al. Design of a spectrum-folded Hadamard transform spectrometer in nearinfrared band [J]. *Optics Communications*, 2014, 333: 80– 83.
- [11] Quan X D, Liu H, Lu Z W, et al. Correction and analysis of noise in Hadamard transform spectrometer with digital micro-mirror device and double sub-gratings [J]. *Optics Communications*, 2016, 359: 95–101.
- [12] Quan X Q, Liu H, Lu Z W, et al. Design of stray light suppressed digital micromirror device-based spectrometer with compound parabolic concentrator [J]. *Optical Engineering*, 2015, 54(11): 115101.
- [13] Xu Jialin. Research on the Key Technologies of Hadamard Transform Near-infrared Spectrometer based on DMD [D]. Changchun: Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, 2017. (in Chinese) 许家林. 基于 DMD 的阿达玛变换近红外光谱仪关键技术 研究 [D]. 长春: 中国科学院长春光学精密机械与物理研 究所, 2017.