What's FTIR?

❸ 关于傅里叶变换

■前言

这次讲述傅里叶变换。

FTIR 也可理解为傅里叶变换红外分光法的简称，FTIR 与傅里叶变换之间有深刻的关系。那么，傅里叶变换用在 FTIR 的什么地方呢？是在从上回（V01.2）说明中提到的迈克尔逊干涉仪产生的干涉信号最终求出必要的光谱波形的阶段内使用。

■傅里叶变换是指的什么？

如上边的说明那样，傅里叶变换是为取得某种被给与信号的频率成分所使用的数学上的变换。

所谓取得频率成分，是不断变化周期，测定信号中有什么样周期的、怎样大小的正弦波。

在自然界中也有取得与傅里叶变换相同结果的现象。首先想到的是耳对音的作用。

我们耳朵听到的声音是大气中传播的波（音波），但我们听到的音波不是波形的原形。在耳的内部有称为蜗牛体的器官，在这里将音波按频率区分，变换成每一频率的强度信号输送到脑部（图1）[1]。蜗牛体是一种共鸣装置，特定频率的音波在特定的位置上共鸣。入耳的音波，根据所含频率在蜗牛体的对应位置上引起共鸣。这个共鸣的强弱作为神经信号输送到脑才做为音被识别。（图2）。

傅里叶变换也同样，给与的信号波形按每个频率区分，作为结果当然返回的不是神经信号，而是以频率为横轴取得的函数（光谱波形）。

给与的信号波形用f（X）函数表示时，f（X）的傅里叶变换（Fourier transform）函数F（u）可按下式定义[2]。

$$F(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i2\pi ux}\,dx \qquad (1)$$

F（x）表现原函数（original function）或时间范围，F(u)表现像函数(image function)或频率范围。

以下，原函数 f(x)和像函数的关系用「⊃」符号简单地按下式表示。

$$F(x) \supset F(u) \qquad (2)$$

■各种波形的傅里叶变换

首先，从单纯函数进行傅里叶变换。

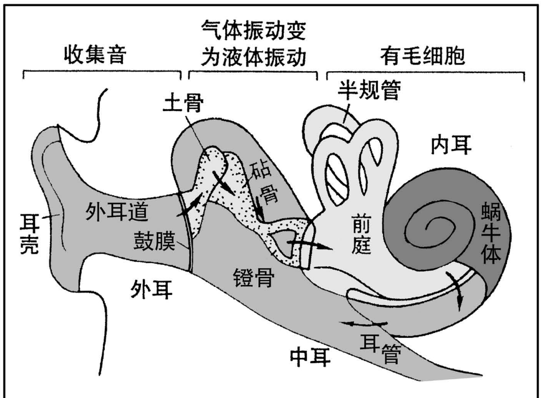

图1　耳及其内部结构

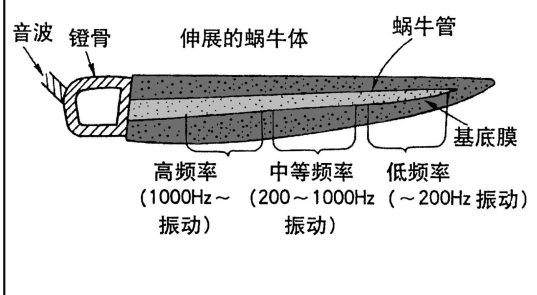

图2　在给与不同频率的音波时的蜗牛基底膜的振动

1、一定值⊃频率0（图3）

没有时间变化的信号的频率是零。

2、Cosine函数⊃特定频率（图4）

正弦波的偶函数傅里叶变换时，取与它的频率相当的特定值。傅里叶变换由于是数学上的变换，取正负两个值。周期缩短时，频率增大（图5）。

像以上那样无限延续的正弦波（例，余弦波）的傅里叶变换具有特定值。

这次，只将在某一时间出现的函数进行傅里叶变换。

3、有限幅脉冲⊃以频率0为中心的振动（图6）

具有有限幅的脉冲形函数进行傅里叶变换，如图所示，则成为以频率0为中心的振动衰减形的函数。此形函数称为Sinc函数。而且，原函数的有限脉冲一方，在许多地方作为最简单的滤波函数使用。

原函数的脉冲幅变窄时，像函数的振动下部变宽（图7）。在幅度达到0的极限时，像函数的频率0的部分变为无限宽，最终全频率上成为固定值（图8）。这个幅为0的函数也称为δ函数。

4、与三角波函数⊃Sinc函数相似的波形（图9）。

与Sinc函数的最大区别是这个函数不取负值（实际是Sinc函数2次方的函数）。

5、高斯函数⊃高斯函数（图10）

近似于光谱峰形的高斯函数进行傅里叶变换时仍然是高斯函数。但是，使原函数一侧的高斯函数幅变窄，则像函数一侧的高斯函数幅变宽。（图11）

6、对称指数函数⊃劳伦兹函数（图12）

劳伦兹函数比高斯函数更近似于光谱峰形。

7、梼函数⊃梼函数（图13）

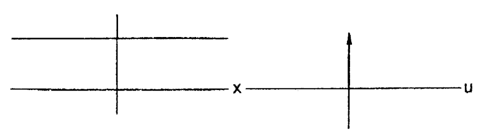

图3　一定值的傅里叶变换

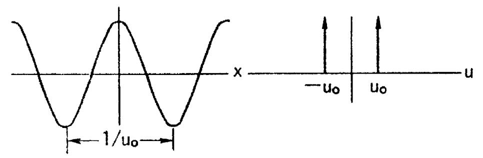

图4　cosine函数的傅里叶变换

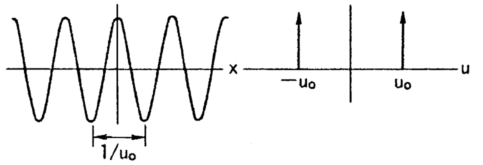

图5　周期更短的cosine函数的傅里叶变换

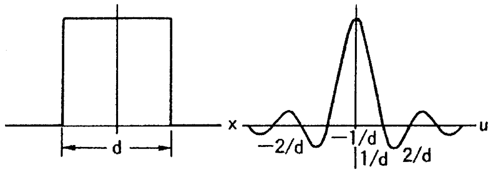

图6　有限幅脉冲的傅里叶变换

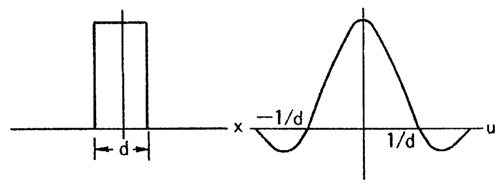

图7　有限幅脉冲幅变窄

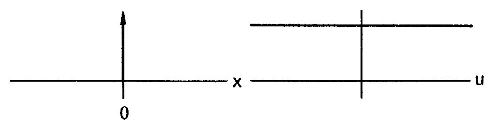

图8　幅为0的有限幅脉冲的傅里叶变换

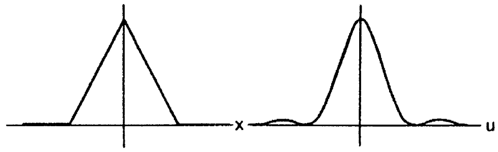

图9　三角波函数的傅里叶变换

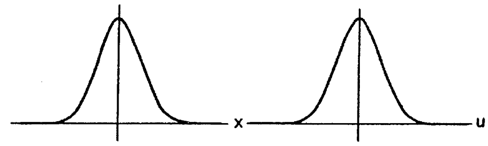

图10　高斯函数的傅里叶变换

梯函数呈δ函数按一定间隔无限个排列的形状。该函数傅里叶变换后仍然是梯函数。但与前面的例子相同，将原函数中梯的间隔增大时，像函数中梯的间隔缩小（图 14）

■傅里叶变换的特征

下面例举傅里叶变换数学上的特征。

1、线性

$f(x) \supset F(u)$，$g(x) \supset G(u)$ 时，

$$f(x)+g(x) \supset F(u)+G(u) \text{ 成立} \tag{3}$$

另外，C 为常数时，

$$c \times f(x) \supset c \times F(u) \text{ 成立} \tag{4}$$

这称为线性。减法也同样成立。

举例说明，正弦波相加的信号进行傅利叶变换，结果仍然是各个正弦波的傅利叶变换的相加(图15)。

2、褶积（卷积）

2个函数 $f(x)$ $g(x)$ 的褶积（或卷积）「＊」如下定义

$$f(x) * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, g(x-\tau)\, d\tau \tag{5}$$

这是与 2 个函数加算或乘算相同的一种算法。

使用这种褶积时傅里叶变换具有以下性能

$f(x) \supset F(u)$，$g(x) \supset G(u)$ 时，

$$f(x) \times g(x) \supset F(u) * G(u) \tag{6}$$

和

$$f(x) * g(x) \supset F(u) \times G(u) \text{成立} \tag{7}$$

比起前面的线性，关系稍许复杂，但函数相乘的机会多，是有用的性能。

下面举几个例子

● 正弦波的相乘（调制）

高频率的正弦波（载波）乘以低频率的正弦波时(一种调制操作)，产生的波形进行傅里叶变换时，结果是各个正弦波的傅里叶变换的褶积（图 16)。

● 正弦波脉冲（正弦波的窗函数）

只在一定时间内连续的正弦波脉冲，可看作为无限连续正弦波与有限幅脉冲相乘的波形，产生的波形的傅里叶变换仍然是各个波形的傅里叶变换的褶积(图17)。有限幅脉冲可认为是最单纯的窗函数。其它的三角波函数成高斯函数时也如此。

● 高斯函数与梯函数（抽样）

由于高斯函数、梯函数都是经傅里叶变换后仍然成为同样函数的函数（大小或幅度变化)，所以，2个函数相乘的波形进行傅里叶变换，当然也成为高斯函数与梯函数的褶积（图 18)。

这个梯函数可看成在原函数范围内将高斯函数按一定间隔跳跃式抽样。这样则可认为在傅里叶变换后的像函数范围内原高斯函数可折返。

3、横轴的扩大、缩小

原函数横轴的扩大、缩小，在傅里叶变换后的像函数上是相反的动作。

若 a 是实常数，$f(x) \supset F(u)$时

则成为

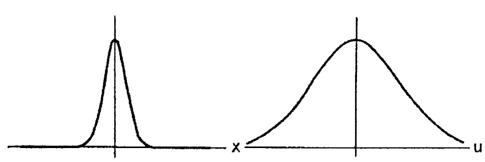

图 11　幅窄的高斯函数的傅里叶变换

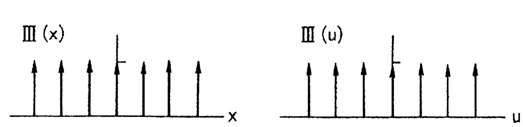

图 13　梯函数的傅里叶变换

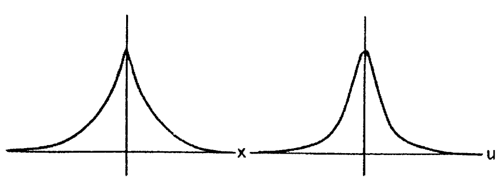

图 12　对称指数函数的傅里叶变换

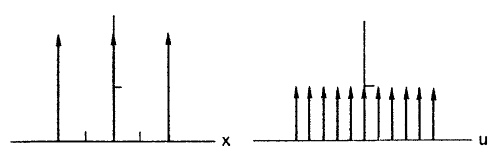

图 14　梯函数的间隔宽时的博里叶变换

$$f(ax) \supset \frac{1}{|a|} F\left(\frac{u}{a}\right) \tag{8}$$

例如，看下前面的频率不同的正弦波的傅里叶变换图（图4，图5）

现在，认为a为1以上的数值时，可看出正弦波的周期缩短时频率增高。

4、对偶性

傅里叶变换和逆变换具有对偶性，

即，$f(x) \supset F(u)$，时，

$F(x) \supset f(-u)$ 成立

因此，知道一个傅里叶公式时，则自动可以得到成对的另一个公式。例如，δ函数的傅里叶变换（图8）与一定值的傅利叶变换（图3）是对偶性的一例。

■结束语

这次讲述了傅里叶变换及其特征。在我们的FTIR上能像用计算机计算那样容易地进行傅里叶变换。标准的FTIR只需软件即可进行。使用选购件演算板时，可比硬件快几百倍地进行傅里叶变换。

下次准备讲解“干涉仪与FTIR”。

参考文献

1）松永是《谈五官》日本规格协会（1989）

2）间宫真佐人，西川利男合著《化学计量的傅里叶变换法入门》，共立出版（1983）

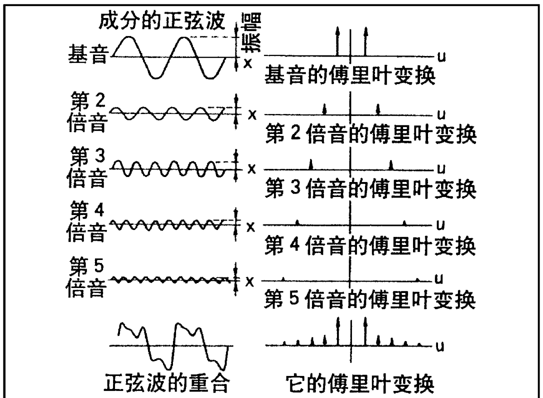

图15　正弦波的重合及其傅里叶变换

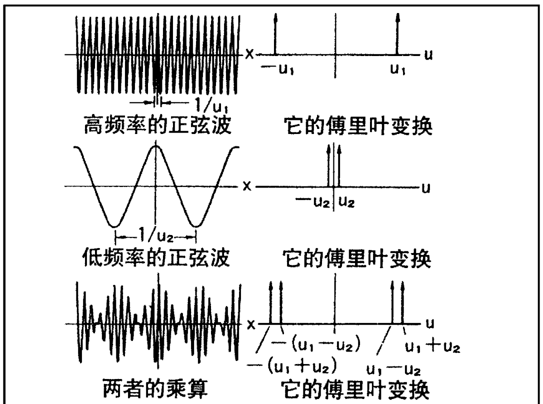

图16　相乘所得的正弦波的傅里叶变换的图示

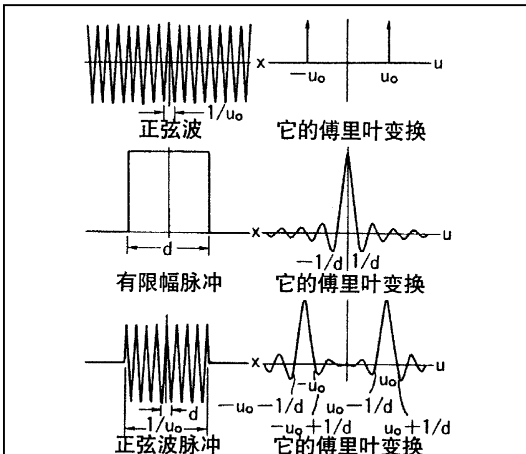

图17　正弦波脉冲的傅里叶变换的图示

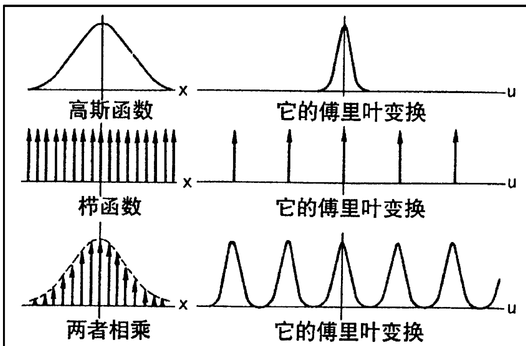

图18　高斯函数与栉函相乘及其傅里叶变换