

虚拟仪器技术在离子迁移率谱仪中的应用

傅斯翊 魏永波 蒋大真

(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201800)

摘要 本文主要研究基于虚拟仪器技术的数据采集处理系统在离子迁移率谱仪(Ion Mobility Spectrometer, IMS)上的应用。通过使用美国 NI 公司生产的 LabVIEW 虚拟仪器软件开发平台进行设计,提高了离子迁移率谱仪在实际应用中的实时测量和处理的能力。

关键词 LabVIEW, 离子迁移率谱仪, 曲线拟合

中图分类号 TP39

离子迁移率谱仪(Ion Mobility Spectrometer, IMS)技术是一种依赖于物质结构构象进行物质区分的气体检测仪器分析方法。在离子迁移率探测器里,工作气体(载气)在离子源(射线、激光等)的作用下离子化,离子化载气与进入漂移区的样品气体发生作用,使样品气体离子化(二次离子化)而被分析。IMS 具有分析灵敏度高($10^{-8} \sim 10^{-14}$ g)、时间短、功能多样、成本适度等突出优点,是目前最为广泛使用的痕量化学物质探测技术之一^[1,2]。现在,基于 IMS 的产品已广泛应用于机场、码头、车站等的爆炸物、毒品、化学战剂等的探测。

IMS 系统一般分为三个部分:控制系统(温度控制、开门信号控制等)、离子漂移系统(样品采集、电离、电场分离)和数据采集处理系统(信号采集、信号处理)。本研究的目的是利用虚拟仪器技术,将 IMS 的数据采集获取终端从传统的固定结构硬件设备改为用软件方式在 PC 平台上实现,弥补了传统硬件仪器在数据处理过程中的功能单一、操作不便、更新困难等缺点。利用计算机软件上强大的数据处理功能,可使基于虚拟仪器的测试系统的测试精度和速度大为提高,更好地完成对仪器的控制和对数据的分析与显示。

LabVIEW 是美国 NI 公司发展的基于 G 语言(Graphical programming language)的可视化、图形化的优秀开发平台,主要用于数据的采集、分析、处理和表达,是国际上首推并应用最广泛的数据采集和控制开发环境之一^[3]。基于 LabVIEW 设计的虚拟仪器具有高效、灵活、界面友好、集成性强、使用方面、设备费用低、用户自定义功能等诸多优点,尤其对于 IMS 实际应用中的实时测量和调试,信号处理功能的增加和完善等方面有充分的优势。本研究的虚拟仪器技术基于 LabVIEW。

1 数据采集处理系统的结构分析

IMS 的数据采集处理系统包括硬件和软件两个部分。硬件部分的主要功能是获取 IMS 中的实测信号,软件部分则主要是提取 IMS 检测到的样品谱线信号中的有用信息。本系统的硬件部分采用 NI 公司的 PXI-6221 M 系列多功能卡(DAQ)作为数据采集卡,从 IMS 处采集信号,软件部分使用 NI 公司的虚拟仪器软件 LabVIEW 7.1 版。计算机对 PXI-6221 发出指令,启动采集卡,采集卡将模拟信号转换成数字信号,并将其按给定的数据结构存储,并作为待处理数据输入。利用 LabVIEW 7.1,计算机对采集来的数据进行处理、显示并存储结果。系统的整体框图如图 1。

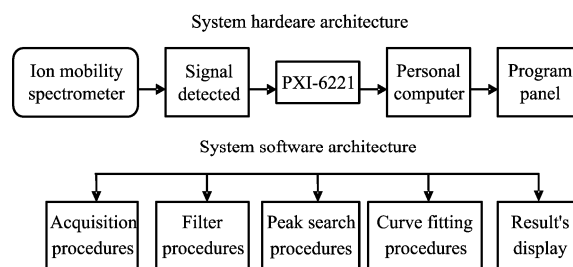


图 1 系统整体框图

Fig.1 Block diagram of the system

2 数据采集系统和处理算法的设计

采集系统和处理算法的设计主要是利用 LabVIEW 虚拟仪器技术改造原有 IMS 的数据采集处理部分,利用数字滤波和曲线拟合技术实现对实测谱线的分析和处理。信号采集部分的控制程序以

第一作者:傅斯翊,男,1981年出生,2007年于中国科学院上海应用物理研究所获硕士学位,专业:信号与信息处理

收稿日期:2007-01-12,修回日期:2007-03-21

多通道的输入同步模块为核心，其中一个通道输入用作控制门信号的采样时钟周期，其余的通道用来采集 IMS 产生的谱线信号的输入，以及 IMS 需要

的其它控制信号的输出，例如温度控制信号等。其程序结构如图 2 所示。

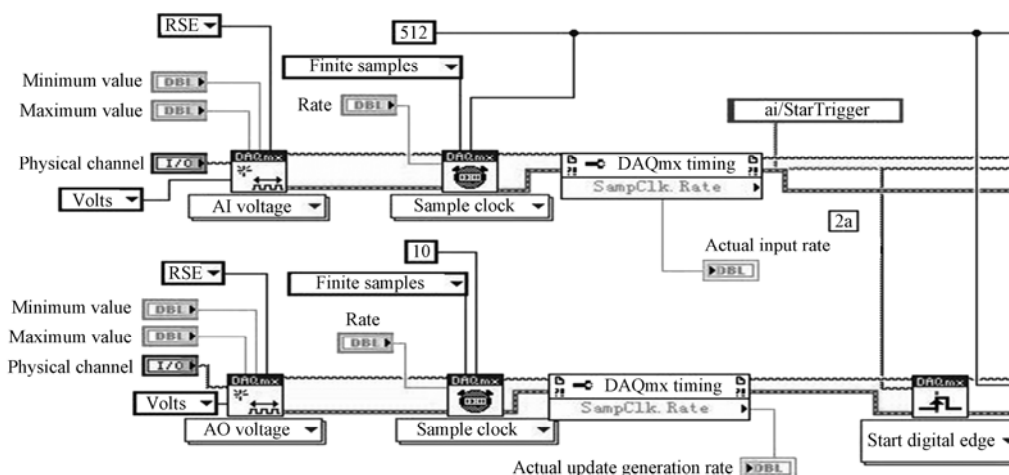


图 2 信号采集控制程序图
Fig.2 Signal acquisition and the control procedure of an IMS

为获得 IMS 检测到的样品谱线信号中所含有用信息，须对采集到的信号进行曲线拟合处理，从峰值、峰位以及峰形特征中提取相应物质的信息。IMS 采集到的信号中，往往带有来自外界或者电路内部的干扰噪声，这些噪声不仅可能掩盖某些微弱的有用信号，而且还会干扰峰值位置的确定、影响谱拟合分析。因此，须对信号进行平滑去噪处理，以提高信噪比、保持峰值峰位特征，尽量减少噪声对于谱信息的波动影响。我们采用函数拟合的方法分析信号，并提取有用的数据信息。整个数据处理工作主要有如下两部分。

2.1 平滑去噪

原始信号含有的噪声一般是白噪声或高频冲激噪声，所以本文采用的方法为快速傅立叶变换滤波算法。该法将离散的时域信号转换为频域信号，在频域内截去指定的高频噪声分量(截断百分比可人为控制)，再重建出时域信号。由于实验中采集到的信号峰函数的频谱主要为低频，重建信号的平滑程度与频域内滤除的高频波数量有关。实验发现，如果滤除的高频波过少(<70%)，就达不到所要求的平滑效果；但若滤除 95% 以上的高频波，则会导致平滑波分量过少，丢失有用信息。一般滤除 80%~85% 的高频波可获得较佳的平滑效果^[4]。

2.2 函数拟合

实际的检测信号包含多种物质的特征谱线，可近似为多个高斯峰叠加的结果。为获得信号中具有

实际意义的各种参数物理量的详细信息，我们采用多个高斯函数叠加的模型作为拟合函数。具体形式如下：

$$f(x) = \sum_{i=1}^n G_i(x) = \sum_{i=1}^n A_i \exp\left(-\left(\frac{x-B_i}{C_i}\right)^2\right)$$

式中， A_i 表示第 i 峰的高度， B_i 表示第 i 峰的位置， C_i 表示第 i 峰的半高宽， n 为信号中物质谱峰的个数。

对于给定的谱线数据和拟合函数式，采用 Levenberg-Marquardt(LM)算法进行拟合。在非线形拟合算法中，LM 算法是梯度下降法与高斯-牛顿法的结合，既有高斯-牛顿法的局部收敛性，又有梯度下降法的全局特性^[5,6]。

LM 算法要求给定待拟合曲线系数 A_i 、 B_i 、 C_i 的初始猜想值，在最大迭代次数不变的情况下，初始猜想值应尽量接近最佳拟合参数。在通过寻峰得到物质谱峰个数 n 的同时，也可获得 LM 算法分析所需要的初始值。本文中先对信号进行数值微分，再用判断一阶导数过零点的方法确定信号的峰值位置信息。

3 实际样品的测量和处理结果

通过 IMS 离子分离系统所产生的实际输入的实际样品信号，采用快速傅立叶变换滤波算法处理，结果如图 3、图 4。

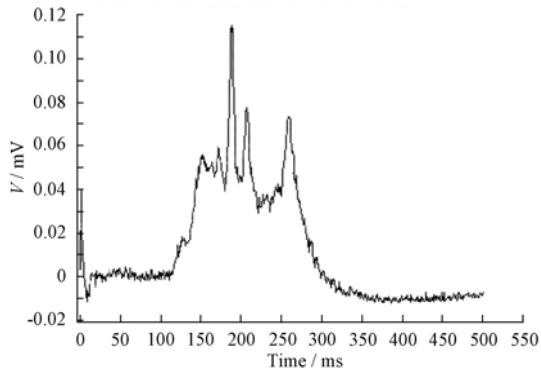


图 3 原始信号
Fig. 3 The original signals

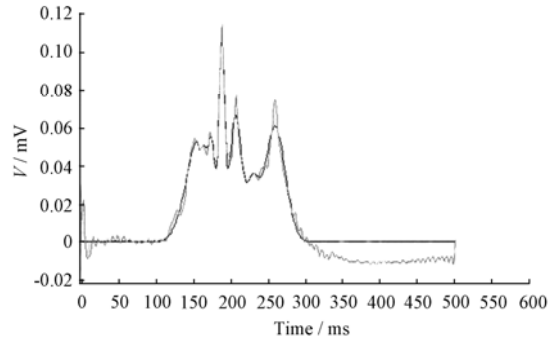


图 6 最终拟合结果
Fig. 6 Final fitting results

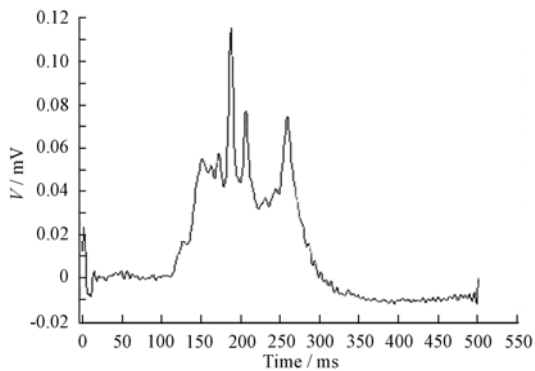


图 4 滤波后信号比较
Fig. 4 Signals after fitting

可以看到, 滤波不仅消除了高频噪声的抖动, 且信号的失真控制也很好, 基本无峰位失真现象。对滤波算法平滑去噪的信号进行寻峰, 以确定后续拟合计算需要的初值, 峰值信息的确定和寻峰结果如图 5 所示。

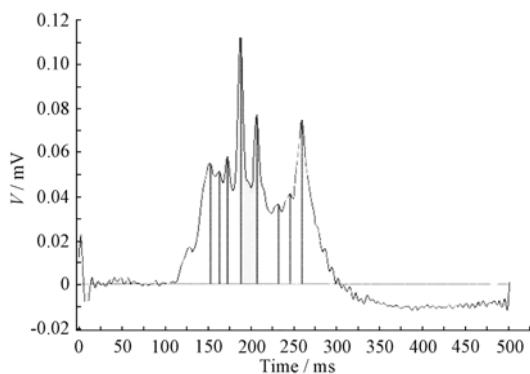


图 5 滤波后信号的寻峰结果 (谱峰个数 $n=8$)
Fig. 5 Peak search of the signal after fitting (peaks=8)

通过寻峰算法可快速而准确地得到所需要的峰谱信息, 并作为初始参数值。利用找到的拟合参数初始值和经过平滑后的信号, 通过 LM 算法最终得到的拟合结果如图 6。其中浅色曲线为原始信号, 深色曲线为拟合结果。

拟合的结果基本上能有效地还原出原始信号的谱峰信息, 并且从拟合曲线可以快速准确地得到各物质谱峰的参数, 实现测量的目的。

4 结论

本文利用虚拟仪器技术完成了对 IMS 技术中的信号采集和处理。从实验采集运行的结果来看, 该系统可有效地运用于离子迁移率谱仪试验装置中, 对收集到的谱线信号进行有效的处理和分析, 且计算时间短、操作简单。近年来, 虚拟仪器技术在测控领域的发展飞速, 成为数据采集和测量控制开发环境应用最为广泛的技术之一, 本文的研究结果对于利用虚拟仪器技术在 IMS 项目上的开发和应用将发挥前瞻性的作用, 并且在设备小型化、减少测量时间、最大限度地降低系统成本、增强系统功能和灵活性、多样性等方面给现有的 IMS 技术带来更大的提升空间, 对于 IMS 今后的普及和发展将起到重要的作用。

参考文献

- 1 张东风, 孔德义, 梅涛, 等. 仪器仪表学报, 2006, 27(2): 199-204
ZHANG Dongfeng, KONG Deyi, MEI Tao *et al.* Appar Instr Trans, 2006, 27(2): 199-204
- 2 徐淑武. 离子迁移谱检测技术原理及其应用中的问题研究. 华东师范大学硕士学位论文, 2004
XU Shuwu. The research in ion mobility spectrometry theory and application, East China Normal University Master's Degree Thesis, 2004
- 3 Bishop R H. LabVIEW6i 实用教程. 北京: 电子工业出版社, 2003. 11-24
Bishop R H. LabVIEW6i practical tutorial. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2003. 11-24

- 4 成 诚. 便携式 X 荧光能谱仪的研制. 中国科学院研究生分院博士论文, 2006
CHENG Cheng. Research of portable X-ray energy dispersive spectrometer. Graduate University of CAS Doctor's Degree Thesis, 2006
- 5 司 捷, 周贵安. 清华大学学报, 1997, **37**(7): 71-73
SI Jie, ZHOU Guian. Tsinghua University Transaction, 1997, **37**(7): 71-73
- 6 Hagen M T, Menhaj M B. IEEE Trans on Neural Networks, 1994, **5**(6): 989-993

Application of an ion mobility spectrometer based on virtual instrument technology

FU Sihong WEI Yongbo JIANG Dazhen

(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

Abstract This paper presents the application of virtual instrument technology on an ion mobility spectrometer (IMS). By designing the data acquisition and processing system of IMS on LabVIEW platform, the ability of signal processing and real time measurement in practice has been improved.

Key words LabVIEW, Ion mobility spectrometer, Curve fitting

CLC TP39