

DOI: 10.3969/j.issn.1007-5461.2024.01.002

基于LabVIEW的质谱与红外光谱信号采集系统

余桂生, 胡勇军*, 孙晓楠

(华南师范大学生物光子学研究院, 广东 广州 510631)

摘要: 针对实验室现有示波器存在集成性差、可扩展性不强等缺点,同时为了提高质谱信号采集效率和精度,设计了一套基于LabVIEW的质谱与红外光谱信号采集系统。该数据采集系统依托LabVIEW软件平台与CSE22G8数据采集卡,并结合叠加平均去噪算法,实现了低信噪比背景下微弱质谱信号的实时采集与处理。此外,通过TCP通信协议实现可调谐光学参量振荡器(OPO)的同步控制,使用户可以在采集质谱信号的同时获得相应的红外吸收光谱图。测试表明,该系统的分辨率较实验室原有示波器提高一倍,采样点数可达每微秒2000个,波形重构能力显著提升,具有较好的数据采集性能。

关键词: 光谱学; 数据采集系统; LabVIEW; 叠加平均算法; 质谱

中图分类号: TH89 **文献标识码:** A **文章编号:** 1007-5461(2024)01-00026-11

Mass and infrared spectrum signal acquisition system based on LabVIEW

YU Guisheng, HU Yongjun*, SUN Xiaonan

(College of Biophotonics, South China Normal University, Guangzhou 510631, China)

Abstract: To address the shortcomings of the existing oscilloscope in laboratory, such as poor integration and weak scalability, and to improve the efficiency and accuracy of mass spectrum signal acquisition, a LabVIEW-based signal acquisition and processing system for mass spectrometry and infrared spectrum is designed. Based on the LabVIEW software platform and CSE22G8 data acquisition card, the designed system can realize real-time acquisition and processing of weak mass spectrometry signals under the background with low signal-to-noise ratio using the superimposed average denoising algorithm. In addition, the synchronous control of tunable optical parametric oscillator (OPO) is realized through TCP communication protocol, so that the user can obtain the corresponding infrared absorption spectrum while collecting mass spectrum signals. Tests show that the resolution of the system is doubled compared with the original oscilloscope in laboratory, the number of sampling points can reach 2000 per

基金项目: 国家自然科学基金(22027808)

作者简介: 余桂生(1995-),福建福州人,研究生,主要从事仪器控制与自动化、数据采集等方面的研究。E-mail: y_gs1995@163.com

导师简介: 胡勇军(1970-),湖南湘潭人,博士,教授,博士生导师,主要从事质谱成像、拉曼光谱基础和应用等方面的研究。

E-mail: yjhu@scnu.edu.cn

收稿日期: 2022-03-08; **修改日期:** 2022-04-21

*通信作者。

microsecond, and the waveform reconstruction ability is significantly improved, indicating that the system has better data acquisition performance.

Key words: spectroscopy; data acquisition system; LabVIEW; superimposed average algorithm; mass spectrometry

0 引言

近年来,随着科技的不断进步,在数据采集控制领域,计算机技术、传感技术、网络技术都得到了飞速发展^[1]。然而,传统仪器的工作对象单一,且采用手动操作模式,使其越来越不能满足日益复杂和变化多样的仪器结构功能需求^[2]。基于此时代背景,虚拟仪器技术应运而生。虚拟仪器技术的本质特征就是“软件即仪器”,用户可以通过自主编程来完成系统的相应设计,从而实现不同的功能^[3]。虚拟仪器成为数据采集控制领域中一个关键的设计发展方向^[4]。

目前,国内大多数实验室仍然使用传统示波器作为数据采集的主要设备,但是在某些特定的场景或者对数据采集有较高要求的项目和实验,示波器可能无法满足采集需求^[5]。在此背景下,本文设计了一种基于LabVIEW的质谱与红外光谱信号采集系统。该系统依托LabVIEW软件平台和CSE22G8高速数据采集卡,可替代传统示波器实现数据的采集、处理以及存储等功能;同时在该系统中应用了信号叠加平均算法以及TCP通信协议,实现了信号的去噪处理以及可调谐光学参量振荡器(OPO)的同步控制。用户可以在复杂的噪声环境中提取微弱的质谱峰信号,同时生成相应的红外吸收光谱图,再结合理论计算进行分子结构的研究。使用该系统可以显著提高质谱与红外光谱信号的采集效率和采集精度。相比于传统示波器,该系统具有更好的集成性和可扩展性,可满足各种复杂的采集需求。

1 信号叠加平均原理

噪声的处理方式有很多种,如高斯低通滤波去噪算法、自适应滤波去噪算法等,其中叠加平均去噪算法是一种相对简单且高效的信号处理方法^[6]。结合质谱信号及其噪声的特点,本研究采用叠加平均去噪算法对采集的质谱信号进行去噪处理,从而实现在复杂的噪声背景下提取微弱的质谱峰信号。

设输入信号 $f(t)$ 是有用信号 $s(t)$ 与随机白噪声 $n(t)$ 的合成,由信号叠加原理可知

$$f(t) = s(t) + n(t), \quad (1)$$

式中: $s(t)$ 为周期性信号或者可重复信号,其功率为 S ; $n(t)$ 为随机白噪声。由通信原理可知,信道中白噪声一般服从高斯分布,也称为高斯白噪声^[7],其均值为0、方差为 δ^2 ,功率谱密度服从均匀分布,幅度分布服从高斯分布,根据高斯白噪声的性质可知该噪声的功率为 δ^2 ,则输入信号的信噪比为

$$R_{\text{SNin}} = \frac{S}{N_{\text{in}}} = \frac{S}{\delta^2}, \quad (2)$$

经过 m 次叠加平均后,其输出信号为^[8]

$$y(t) = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m f(t_k + iT) = s(t) + \frac{1}{\sqrt{m}} \overline{n(t)}, \quad (3)$$

式中: T 为多点平均扫描时间间隔,且 $0 < t \leq T$; $f(t_k + iT)$ 为第 i 点的第 k 次样值; $\overline{n(t)}$ 为噪声信号有效值。可

见, 输出信号经过信号叠加平均后有效值不变, 而噪声经过叠加后变为^[8]

$$N(t) = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m n(t_k + iT) = \frac{1}{\sqrt{m}} \overline{n(t)}, \quad (4)$$

则输出信噪比变为^[8]

$$R_{\text{SNout}} = \frac{S}{N_{\text{out}}} = \frac{S}{\delta^2/m} = m \frac{S}{\delta^2} = m R_{\text{SNin}}. \quad (5)$$

由(5)式可知, 经过叠加平均算法处理后, 信号的信噪比显著提高。需要注意的是, 即使不断叠加也不能无限提高信号的信噪比, 所以要选择一个合适的叠加次数, 这样既可以节省信号处理的时间, 又可以显著提高信噪比。多次实验验证表明, 通常在采集质谱信号过程中将叠加次数设置为32次, 就可以在低信噪比背景下提取到微弱的质谱峰信号。

2 数据采集系统总体方案

2.1 质谱信号采集

首先待测物质经过激光的电离而离子化, 其经过电场的加速后具有一定的速度, 再经过飞行时间质谱仪到达另一侧的探测器, 最后通过测试探头将质谱信号传输至数据采集卡。信号传输到数据采集卡后首先进行初始化, 待用户输入叠加次数以及设置相关采集参数后进行叠加去噪处理, 不断重复采集过程直到采集结束, 最后生成质谱信号的数据文件并保存, 再经由 Origin 绘图软件绘制处理就可以得到待测物质的质谱信号图。

2.2 OPO 系统同步控制

用户输入的控制指令 (设置扫描模式、扫描开始位置、扫描结束位置、扫描速度等) 通过 LabVIEW 中的 TCP 数据传输模块传送至数据采集卡, 再经过 TCP 通信协议实现与 Laser Vision Motor Controls 的通信。待控制指令被执行, 完成红外扫描的相关设置后, 最终生成指定波段内特定扫描速度的红外吸收光谱图。图 1 为数据采集系统流程图。

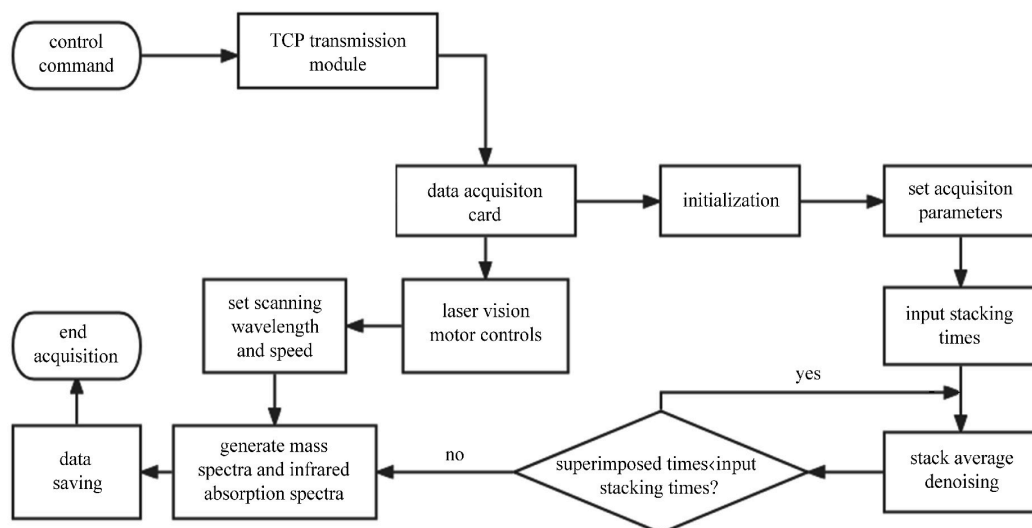


图 1 数据采集系统流程图

Fig. 1 Flow chart of the data acquisition system

2.2.1 OPO 系统光路图

OPO 系统的振荡器采用 Nd:YAG 激光器产生的 1064 nm 光作为泵浦光源, 通过 KTP 晶体产生种子光后, 再通过多个 KTA 晶体进行放大, 输出的激光波长范围可以覆盖 $2500\sim 4500\text{ cm}^{-1}$ 的红外光^[9]。此波长范围可覆盖有机分子的羟基、巯基等基团的伸缩振动区域。由此方法得到的红外光单脉冲能量约为 $3\sim 10\text{ mJ}$, 分辨率可达 1 cm^{-1} 。OPO 系统光路图如图 2 所示。

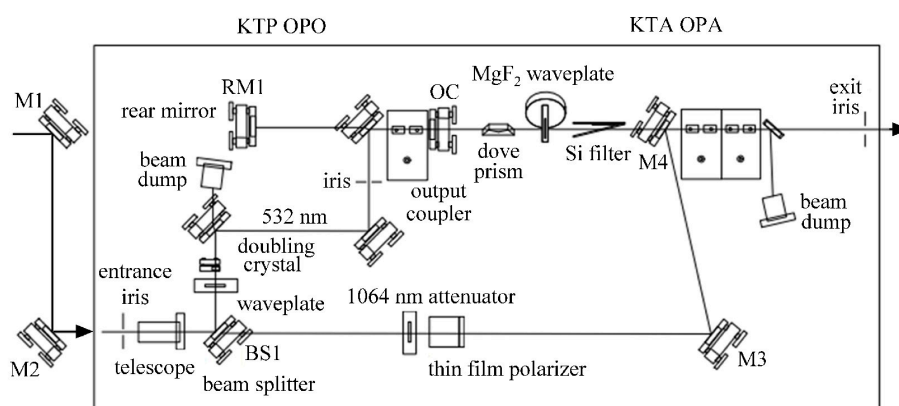


图 2 OPO 系统光路图

Fig. 2 Optical path diagram of OPO system

2.2.2 OPO 系统运动控制原理

OPO 系统内置参数转换器, 用于接收并转换计算机程序传递过来的参数, 同时搭载了高度集成的数字信号处理器 (DSP), 用于驱动系统内控制 OPO 和 OPA 晶体的直流伺服电机。用户可以通过基于 Microsoft Windows 的程序控制电机的运转, 通过设置各个电机的运转速度和运转方向等参数实现不同波长的输出。此外还可以发送 TELLSTAT 指令获取系统返回的一组二进制数字, 再通过参数对照表就可以得出各电机的运动状态。

3 基于 LabVIEW 的数据采集系统软件设计

3.1 数据采集系统前面板

前面板如图 3 所示, 其操作界面主要分为四个部分: 1) 波形显示: 用于显示质谱信号的原始波形以及经过叠加平均算法处理后的波形, 用户可根据实验需求设置合适的叠加次数, 同时可以实时观测质谱信号的最大值和最小值, 也可以根据需求进行波形的倒置处理; 2) 参数配置: 用于数据采集相关参数的设置, 主要分为采集参数(采样率、采样点数等)、通道参数(电压幅值范围、输入阻抗等)以及触发参数(触发方式、触发等级等)设置; 3) OPO 系统同步控制: 用户根据实验需求输入下位机 IP 地址、端口、电机运转速度以及扫描波长等参数, 实现指定波段内的红外扫描; 4) 积分: 实现了对处理后的质谱信号的积分运算, 用户可以根据需求输入若干个积分区间, 在每个积分区间内对特定的质谱峰信号进行积分运算, 并生成记录积分变化趋势的曲线图, 即红外吸收光谱图。

3.2 数据采集系统程序框图

3.2.1 参数配置

该模块主要由三个部分构成: 通道参数配置、采集参数配置以及触发参数配置。其编程思想是将设置

参数以文本或者属性节点的形式捆绑成簇, 再将含有参数的簇元素创建为数组, 实现采集参数 (采样率、采样点数等)、通道参数 (电压幅值范围、输入阻抗等) 以及触发参数 (触发方式、触发等级) 的设置, 程序框图如图4~6所示。

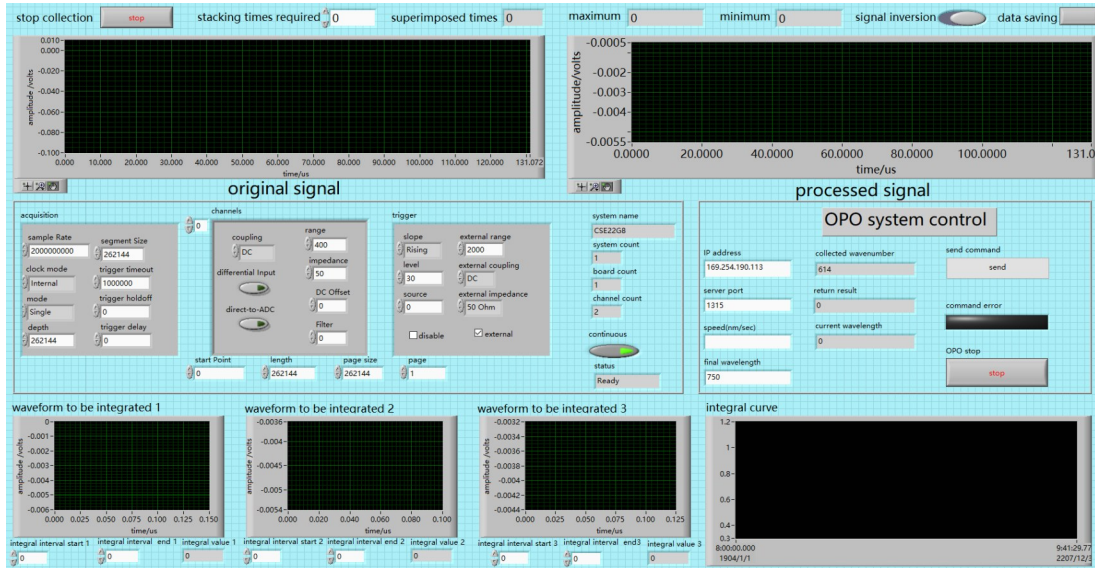


图3 数据采集系统前面板

Fig. 3 Front panel of data acquisition system

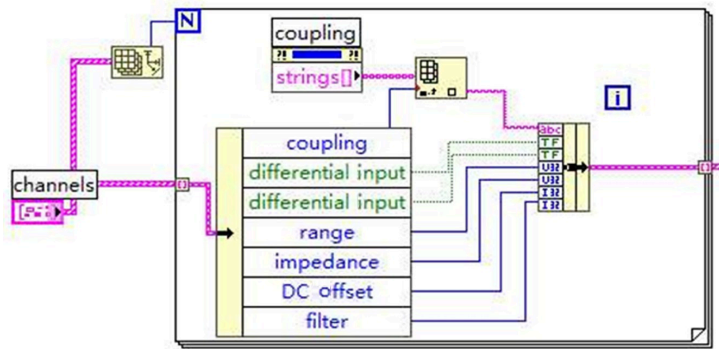


图4 通道参数配置

Fig. 4 Setting of channel parameters

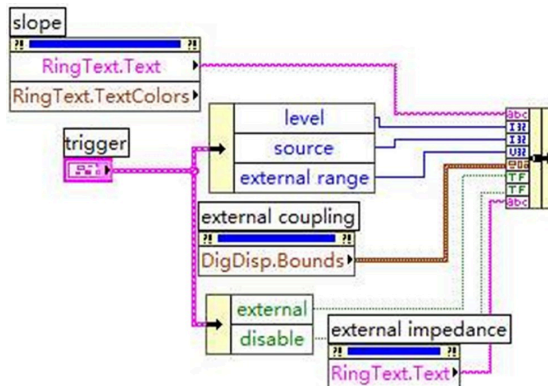


图5 触发参数配置

Fig. 5 Setting of trigger parameters

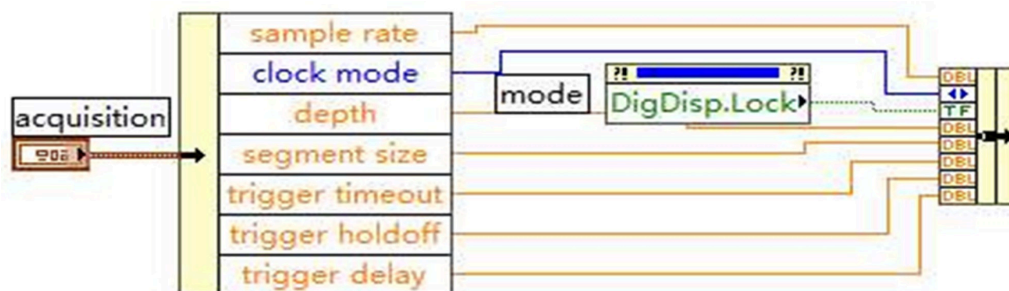


图 6 采集参数配置

Fig. 6 Setting of acquisition parameters

3.2.2 OPO 系统同步控制

该模块实现了数据采集系统通过 TCP 通信协议向下位机自带的控制软件 Laser Vision Motor Controls 发送指令。其由循环结构和条件结构组成, 其中外部循环控制程序的整体运行, 内部循环实时获取当前波长数据, 并判断目标波长与当前波长的绝对值之差是否小于 0.01, 若条件成立则向 OPO 系统发送停止命令; 条件结构用于判定用户是否按下 send 按键, 按钮触发时, 通过 TCP 通信模块向下位机发送控制指令(如 goto、setspd 等), 从而实现 OPO 系统的同步控制功能, 程序框图如图 7 所示。

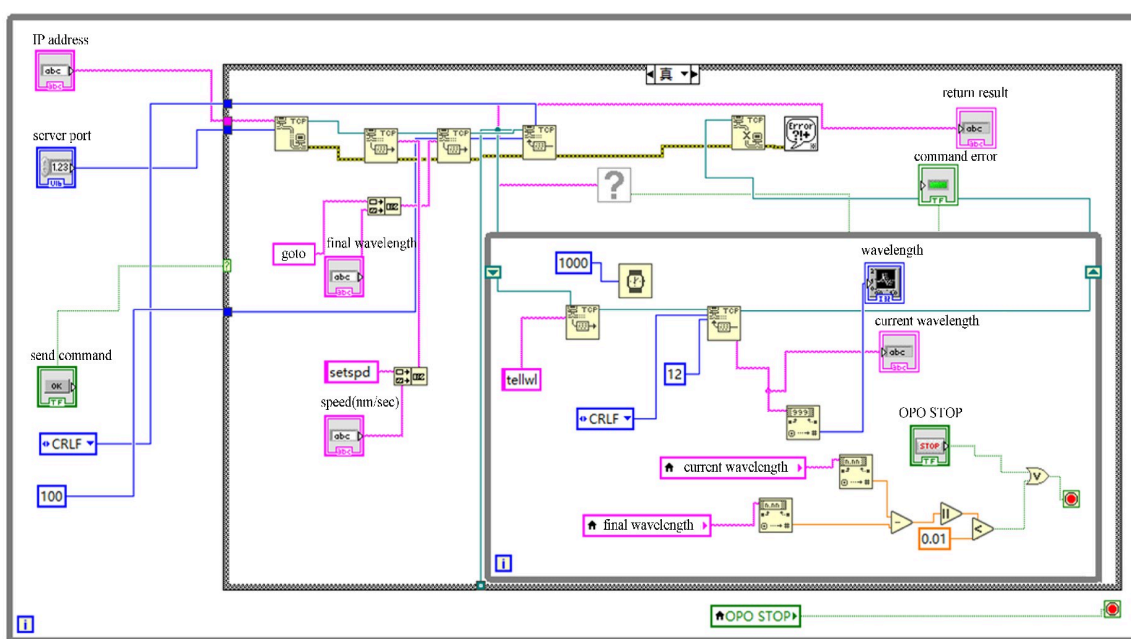


图 7 OPO 系统控制模块

Fig. 7 Control module of OPO system

3.2.3 信号处理

信号处理模块由若干顺序结构和条件结构组成, 其外部嵌套了一层循环结构。外部的循环结构控制该模块的运行, 内部的顺序结构保证了程序流的执行顺序。第一帧的条件结构判定叠加次数是否为 0, 若条件成立则开始新一轮叠加处理; 第二帧的条件结构判断目前的叠加次数是否等于需要的叠加次数, 若相等则进行信号平均处理。通过积分函数对叠加后的波形在指定区间内进行积分, 并生成相应的积分曲线图, 最后输出数据文件进行存储, 程序框图如图 8 所示, 信号处理流程图如图 9 所示。

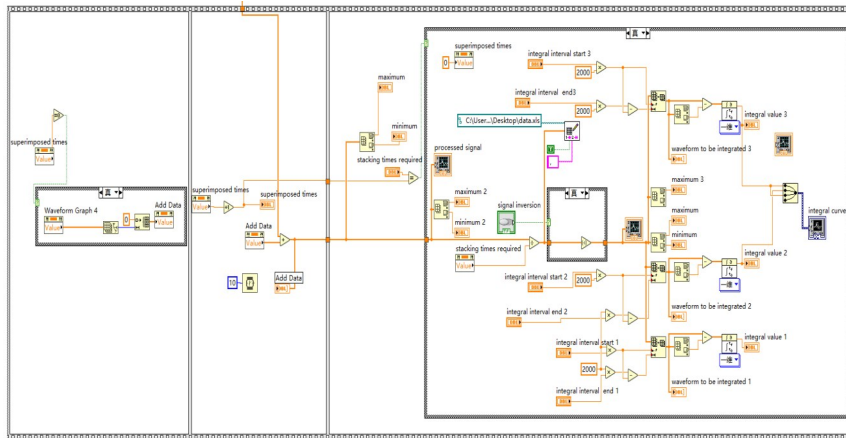


图8 信号处理模块

Fig. 8 Module of signal processing

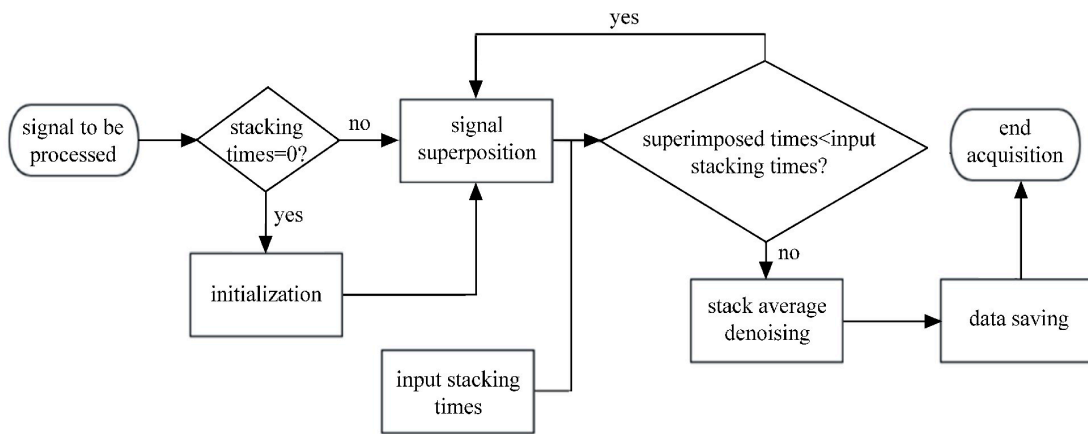


图9 信号处理流程图

Fig. 9 Flow chart of signal processing

4 实验验证

为了验证叠加平均算法及该系统在质谱以及红外光谱信号采集处理过程中的性能,利用丙烯腈(AN)和甲醇(MEOH)作为试样分子进行实验。本实验的具体步骤是将氦气作为载气经过鼓泡法带走自由挥发的液体样品,形成气体混合物,再经过脉冲阀,在绝热膨胀的作用下形成低温的超音速分子束,进入真空腔产生混合团簇。随后包含混合团簇的分子束进入质谱仪的反应区,被 118 nm 的真空紫外光电离^[10]。最后对阳离子团簇进行质量选择,并用微通道板(MCP)进行收集,再传输至数据采集设备进行数据的采集与处理。

为了对比实验室现有示波器与采集系统的性能优劣,用安捷伦公司生产的 DSO5032A 示波器与该数据采集系统在同一时间段内进行质谱信号的采集。DSO5032A 示波器与 CSE22G8 数据采集卡的最高采样率、存储深度、带宽等主要参数对比如表 1 所示。

4.1 信号叠加平均算法验证

图 10 是未经处理的丙烯腈和甲醇阳离子的质谱信号图,可以发现该质谱信号信噪比较低,许多微弱的质谱峰信号都被噪声掩埋,从而无法准确分辨出质谱峰信号的位置以及特征。图 11 是经过叠加平均处理后的丙烯腈和甲醇阳离子的质谱图,图中标注了各个质谱峰对应的团簇,可以发现经过叠加平均去噪算法处理

后信噪比均有显著提升,且示波器和采集系统均能在复杂的噪声环境下提取到微弱的质谱峰信号。为进一步分析性能差异,进行了分辨率和采样点数的对比。

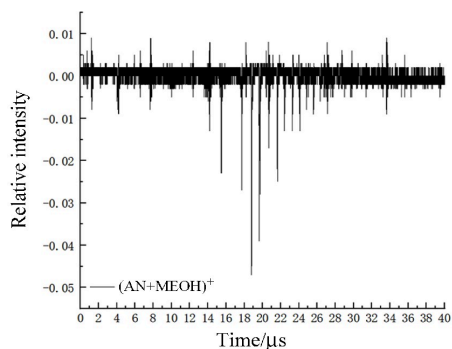


图 10 原始信号
Fig. 10 Original signal

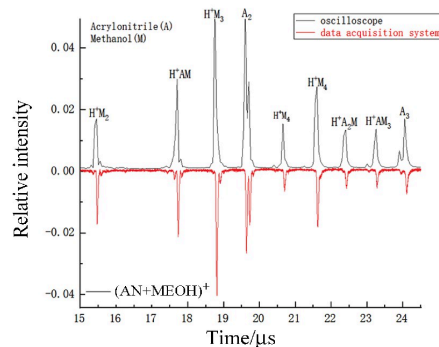


图 11 经过处理的信号
Fig. 11 Processed signal

表 1 参数对比

Table 1 Parameter comparison

Main parameters	DSO5032A	CSE22G8
Maximum sampling rate/(GSa·s ⁻¹)	2	2
Storage depth /pts	10000	260000
Bandwidth /MHz	300	500
Number of channels	2	2
Manufacturer	Agilent	GaGe

4.2 性能对比

4.2.1 分辨率

分辨率是衡量测试系统优劣的有效指标之一,图 12 为示波器与数据采集系统分别采集的质谱信号分辨率对比图。选取 22 μs 附近的质谱信号峰并计算其半峰宽,得出示波器和数据采集系统所采集的信号半峰宽分别为 96 ns 和 44 ns。再根据半峰宽与分辨率的关系计算示波器和数据采集系统的分辨率,结果分别为 110 和 240。由此可知,数据采集系统的分辨率远高于示波器,而分辨率是影响质谱信号质量的关键因素之一,所以对于分辨率要求较高的实验,应优先考虑使用数据采集系统。

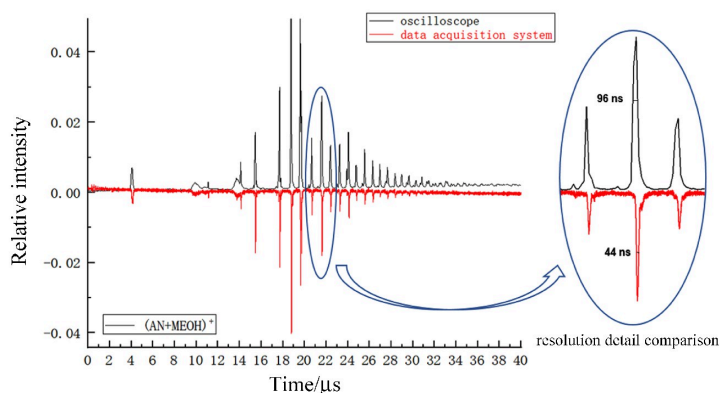


图 12 分辨率对比

Fig. 12 Resolution comparison

4.2.2 采样点数

由示波器的相关理论可知,采集存储器是示波器的的重要组成部分,而存储深度是评价存储器的关键指标之一。存储深度与采样率成正比,理论上存储深度越大,示波器的采样率就越高,可捕获的时间波形也越长。图 13 为采样点数对比图,由图可见数据采集系统的采样点数远大于示波器,说明其采样率远大于示波器。由于示波器采用基于 CPU 架构的设计模式,导致其在实时获取并处理信号的过程中为了快速更新保持响应而舍弃了存储深度,从而降低了采样率。而数据采集卡的设计模式使其可以兼顾高速率响应和高存储深度,计算可知,数据采集系统对于时间长度在 $130 \mu\text{s}$ 以内的数据都可以保持最高 2 GSa/s 的采样速率,足以满足大多数采集需求。

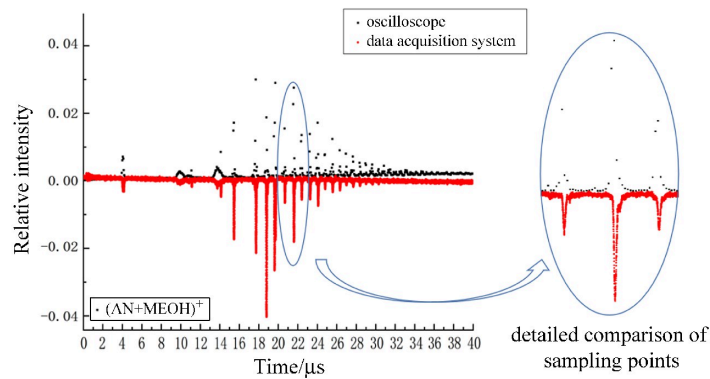


图 13 采样点数对比

Fig. 13 Comparison of sampling points

4.3 红外吸收光谱图

图 14 为丙烯腈和甲醇阳离子的红外吸收光谱图,其由数据采集系统积分模块导出的数据文件经过 Origin 绘制而成,记录了待测物质在不同波长红外射线照射下质谱峰信号的积分值变化趋势^[11]。其原理是利用一束不同波长的红外射线照射物质的分子,某些特定波长的红外射线被吸收,能量发生变化,从而形成该分子的红外吸收光谱^[12,13]。由图 14 可见,在波数 3049 、 3507 、 3631 cm^{-1} 附近均存在明显的吸收峰。根据红外吸收光谱理论, 3049 cm^{-1} 附近的吸收峰与 CH 键的伸缩振动有关。参考 $(\text{CH}_3\text{OH})_2^+$ 和 $(\text{CH}_3\text{OH})_3^+$ 中游离 OH 键的伸缩带位置^[14],可知 3631 cm^{-1} 附近的吸收峰是由游离的 OH 键的伸缩振动产生的。根据 CH_3CNH^+ 中 NH 键的伸缩带位置^[15],可知 3507 cm^{-1} 附近的吸收峰是由 NH 键的伸缩振动产生的。

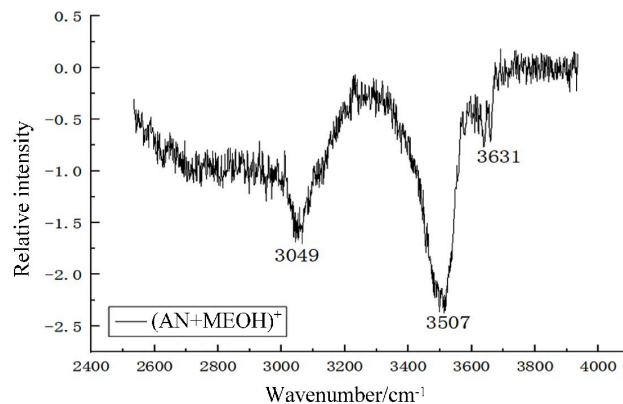


图 14 红外吸收光谱图

Fig. 14 Infrared absorption spectrum

5 结 论

介绍了基于 LabVIEW 实现的质谱与红外光谱的数据采集系统, 该系统通过叠加平均去噪算法进行去噪处理, 实现了复杂噪声环境中微弱质谱信号的提取, 同时通过编写通信模块控制 OPO 系统, 使该系统可以在采集质谱信号的同时生成对应的红外吸收光谱图。以甲醇和丙烯腈阳离子作为试样分子进行了实验验证, 测试表明, 该数据采集系统在采集效率和采集精度方面均得到了显著提升, 与传统示波器相比, 其具有采样率更高、存储深度更大、分辨率更高的特点, 可满足各类数据采集的需求, 具有比较广阔的应用前景。

参考文献:

- [1] Li N X, Qin C C, Yu K X. Division-of-amplitude laser polarization dynamic detection based on LabVIEW [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2018, 35(4): 408-413.
李宁馨, 秦朝朝, 于可新. 基于 LabVIEW 的分振幅激光偏振动态检测研究 [J]. 量子电子学报, 2018, 35(4): 408-413.
- [2] Li L, Yang Y X, Chen Y H. Oscilloscope acquisition and storage system based on LabVIEW [J]. *Foreign Electronic Measurement Technology*, 2019, 38(2): 132-137.
李琳, 杨永侠, 陈昱含. 基于 LabVIEW 的示波器采集存储系统 [J]. 国外电子测量技术, 2019, 38(2): 132-137.
- [3] Wu S H, Fu Z L, Du X, et al. Intelligent traffic light system based on virtual instrument[J]. *Electronic Measurement Technology*, 2019, 42(1): 99-102.
武世豪, 符宗略, 独秀, 等. 基于虚拟仪器的智能交通信号灯系统 [J]. 电子测量技术, 2019, 42(1): 99-102.
- [4] Liu P F, Zhou B, Tao Y B, et al. Real-time monitoring system of flue gas velocity field based on LabVIEW [J]. *Instrument Technique and Sensor*, 2019(7): 72-77.
刘鹏飞, 周宾, 陶依贝, 等. 基于 LabVIEW 的烟气速度场实时监测系统 [J]. 仪表技术与传感器, 2019(7): 72-77.
- [5] Wu P F, Cui M, Wang Z B, et al. Invention relates to a method of transient power signal simulation and quality detection based on LabVIEW [J]. *Foreign Electronic Measurement Technology*, 2021, 40(8): 41-45.
武鹏飞, 崔敏, 王志斌, 等. 基于 LabVIEW 的暂态电能信号模拟及质量监测方法 [J]. 国外电子测量技术, 2021, 40(8): 41-45.
- [6] Wang Y, Liang H T, Yang A R. Construction of laser spectral image database based on Median filter denoising algorithm [J]. *Laser Journal*, 2022, 43(2): 110-113.
王研, 梁洪涛, 杨阿荣. 基于中值滤波去噪算法的激光光谱图像数据库构建 [J]. 激光杂志, 2022, 43(2): 110-113.
- [7] Zhang W X, Yan H P, Wang J G. Gaussian noise filtering algorithm based on PCNN time matrix [J]. *China Measurement & Test*, 2016, 42(8): 108-112.
张文兴, 闫海鹏, 王建国. PCNN 赋时矩阵高斯噪声滤除算法 [J]. 中国测试, 2016, 42(8): 108-112.
- [8] Li X R, Li Y Q, Zhang S. The Labview implement of synchronization overlapping average algorithm to suppress noise [J]. *Journal of North China Electric Power University (Natural Science Edition)*, 2009, 36(4): 73-76.
李星蓉, 李永倩, 张硕. 同步叠加平均算法抑制噪声的 Labview 实现 [J]. 华北电力大学学报 (自然科学版), 2009, 36(4): 73-76.
- [9] Zhang F J, Wang J X, Wang H H. Experimental investigation of intracavity KTP optical parametric oscillator [J]. *Laser & Infrared*, 2010, 40(5): 484-487.
张凤娟, 王加贤, 王红华. 内腔式 KTP 光学参量振荡器的实验研究 [J]. 激光与红外, 2010, 40(5): 484-487.

- [10] Lu Q, Hu Y J, Chen J X, *et al.* Laser desorption postionization mass spectrometry imaging of folic acid molecules in tumor tissue [J]. *Analytical Chemistry*, 2017, 89(16): 8238-8243.
- [11] Qian J L, Huang X D, Liu K, *et al.* Infrared absorption spectra of methane/nitrogen glow discharge products [J]. *Chinese Journal of Quantum Electronics*, 2021, 38(5): 677-683.
钱佳丽, 黄晓东, 刘珂, 等. 甲烷/氮气辉光放电产物的红外吸收光谱研究 [J]. 量子电子学报, 2021, 38(5): 677-683.
- [12] Yi L X, Gao L, Zhao L J, *et al.* Dibutyl phthalate theoretical analysis and detection in infrared [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, 36(9): 2789-2792.
衣玲学, 高磊, 赵丽君, 等. 邻苯二甲酸二丁酯中红外吸收光谱的理论分析及检测 [J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(9): 2789-2792.
- [13] Wang H L, Hu Y J, Xing D. Recent progress of two-step laser desorption/laser ionization mass spectrometry and its application [J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2011, 39(2): 276-282.
王红磊, 胡勇军, 邢达. 双步激光解析/激光电离质谱法及其应用的新进展 [J]. 分析化学, 2011, 39(2): 276-282.
- [14] Ai Q, Yang Z J, Zeng X Q, *et al.* Study on the FTIR spectra of OH in olivines from Mengyin kimberlite [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2013, 33(9): 2374-2378.
艾群, 杨志军, 曾祥清, 等. 山东蒙阴金伯利岩中橄榄石的OH红外光谱研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(9): 2374-2378.
- [15] Lin J W, Li J, Wu J X, *et al.* Influence mechanism and analysis of infrared spectrum of NH_4^+ and F^- on fluorite flotation [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2021, 41(4): 1281-1287.
林嘉威, 李解, 武靖轩, 等. NH_4^+ , F^- 对萤石浮选的影响机理及红外光谱分析 [J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(4): 1281-1287.