

LabVIEW 编程及其在小质谱实验中的应用

LabVIEW Programming and Its Possible Applications in Mass-Spectrometer

陈墨

(复旦大学 光科学与工程系, 上海 200433)

指导老师: 俞熹

【摘要】通过对超级玛丽的编程熟悉 LabVIEW 操作环境和其完成数据采集、分析、显示、反馈的方式。以该程序实现的功能为基础,提出了以 LabVIEW 实现小质谱仪实验自动化的方案,并着重分析了软件端实现噪声抑制的方法。

【Abstract】 My work provides a quick view to the environment of LabVIEW and its capability of data acquisition, analysis, display and response by programming a Super-Mario game. Applicable proposal for improvement of mass-spectrometer is raised with emphasis on noise suppression.

【关键词】 LabVIEW; 超级玛丽; 小质谱改进; 噪声抑制

【Keywords】 LabVIEW; Super-Mario; improvement for mass-spectrometer; noise suppression

引言

虚拟仪器是基于计算机的仪器。将仪器装入计算机,以通用的计算机硬件及操作系统为依托,实现各种仪器功能。目前在这一领域内,使用较为广泛的计算机语言和开发环境是美国 NI 公司的 LabVIEW。

LabVIEW(laboratory virtual instrument engineering workbench)是一种图形化的编程语言和开发环境,提供了与遵从 GPIB,VXI,RS-232 和 RS-485 协议的硬件及数据采集卡通信的全部功能,还内置了支持 TCP/IP, ActiveX 等软件标准的库函数,被公认为是标准的数据采集和仪器控制软件。¹

本文介绍了利用 LabVIEW 实现数据采集,分析和显示,进而完成超级玛丽程序的实验结果。提出了可以利用该程序中的模块,增加有限的硬件,进行近代物理实验中小质谱仪实验改进的方案,并着重讨论了在软件端通过动态监测控制测量过程,从而实现噪声抑制的算法。

前期实验成果

完成了简单的超级玛丽程序,能够进行数据采集,动态监测和分析,数据处理和数据显示。具体来说,可以监测键盘输入,根据按键历史和当前按键进行响应,得到超级玛丽的动作,并显示在屏幕上。此外还可以实现窗口跟随和场景循环等²

讨论

简单来看,如果把键盘改为小质谱的加速电压和微电流计信号输入,通过程序中对坐标响应的模块,就能完成小质谱实验中信号的测量和显示。通过 LabVIEW,也能方便地实现数据的存储。

但是小质谱实验存在一个很大的问题,就是干扰太强。主要来源有两个,一是机械泵震动造成绘图仪的笔的震动;二是微电流计线圈中感应出的噪声电流。如果采用 LabVIEW 进行测量,无需绘图仪,第一种噪声就去除了。但是第二种噪声仍然存在,表

现为曲线上的毛刺。换用更好的微电流计或屏蔽措施可以改善这一情况。但好的测量系统，不应该仅仅在硬件上追求理想化，因为这往往意味着指数上升的成本，更重要的是用低成本的仪器通过优秀的实验设计和处理得到更好的结果。通过 LabVIEW 可以动态监测数据测量，并实时地对测量本身做出响应的特性，可以在测量的同时对数据进行是否是噪声的判断，并决定剔除数据或重新测量。判断的算法主要有下面几种：

1.自身比较。在同一个加速电压下测量多个微电流信号，并且对这些信号进行比较，如果有数据与其他相比有明显偏离，那么就剔除。但是由于多次测量会牺牲测量速度。并且由于噪声常常是由于人的走动引起的，会持续一定的时间，所以并不能保证在测得数据中正常信号一定比噪声信号多。

2.差值比较。依次测得 A,B,C 三个数据，如果 $|C-B|$ 比 $|B-A|$ 大很多，就认为是 C 是噪声信号。这种方式只消耗 CPU 的计算时间（可以忽略），而不影响测量时间，所以测量速度较前一种方法快很多，但也存在几个问题。首先， $|C-B|$ 与 $|B-A|$ 差多少可以接受？考虑到测量的曲线中既有平坦区，又有峰谷等陡峭的变化，用差值限制不合适，采用倍数关系限制比较好。比如差 5 倍以内认为是可以接受的信号。但是如果测到 $B=A$ 那么测量程序就会卡主。所以还需要加入一定的修正功能。此外，在平坦区与峰的过渡段，正常测量的 $|C-B|$ 与 $|B-A|$ 也会差很多倍，完全可能超过限制。抬高限制的倍数又会使平坦区的抑制噪声能力减弱。解决方法：保存多组连续的差值，如果他们之间相差的倍数符合上升关系，那么有可能正出现一个峰的信号，认为是正常信号，如果差值之间的倍数关系无规则的增大减小，就认为是噪声。

3.综合法。可以看到方法 1 优势在于判断准确，方法 2 优势在于测量速度。可以将 1,2 结合起来。由于大部分物理实验中，关心的都是峰或者谷，对平坦区的精度没有太高的要求，所以对平坦区的测量以方法 2 为主，对峰谷测量采用方法 1。实现算法如下：先采用方法 2，将允许的差值设定为一个比

较小的值，如 $|C-B| < 3|B-A|$ ，一旦不满足，说明可能正进入一个峰，暂停扫描加速电压，测量多个数据并剔除异常信号，再继续扫描。同时，将多次测量得到的平均值再与之前的信号计算差值。如果这个差值又满足倍数关系的限制，说明之前的信号是噪声，恢复方法 2 测量一次的模式。这种方法测量速度适中并且能够动态调节，对峰谷部分的测量准确，平坦区的精度相对较差。注意到，在非噪声影响的情况下，方法 1 和方法 2 的切换处，就对应着波峰或者波谷。

上述第三种方法其实有一个内在要求，就是加速电压也由 LabVIEW 控制。这是容易实现的。只要有能够与 LabVIEW 接口的直流稳压电源，稍微改动超级玛丽程序中控制小怪的运动的模块就可以实现。

为了显示美观，方便观察，最好能够实现显示曲线的零点和 y 轴自动调整。超级玛丽程序中有一个窗口自动跟随以及场景循环的模块，稍作修改就能完成类似的功能。

对于小峰的测量其实也能作一定的改进。实验中测到的小峰，丰度比常常偏大，主要就是由于主峰展宽，形成小峰的一个本底，使小峰抬高导致的。减小缝宽当然能有效的改善这一情况，但在同一次实验中可操作性不大。根据之前的工作，将 ^{39}K 进行拟合，扣除本底以后，可以得到很准确的丰度比³。LabVIEW 中提供了一些基本函数的拟合，如高斯函数，洛伦兹函数等。如果按照本文之前所说的第三种数据采集方法，其实在动态切换判断噪声方式的时候，已经得到峰谷位置的信息，用这个信息作为拟合范围自动对数据进行拟合，扣除这个拟合结果以后再对小峰进行拟合。这样就得到了两个峰的高度和半高宽的信息。进一步，可以方便求得两峰的高度比或面积比，与理论丰度值进行比较。同时也可以得到仪器的分辨率。

到目前为止，如果将上面的设想全部实现，LabVIEW 已经可以完成小质谱的自动的动态噪声抑制扫描和数据处理，为了实现全自动化，还有三个功能需要补充。

1.对真空系统的控制。开始运行程序以后，自动打开机械泵。同时测量热偶规的信号，当真空度达到要求以后打开循环水系

统，并发出报警信号，提醒同学拉出 K2，打开蝶阀 K3，开启扩散泵。由于对电学设备的控制比较容易，对机械设备的控制很困难，所以开蝶阀这类操作还是不能自动完成。不过改用循环水系统以后，可以自动开启循环水。

2.自动确定开始和停止扫描的时间。当真空度达到要求以后，自动开始预热和增大钼带电流等工作。此时，放大两聚焦电极的微电流，输入电脑，由 LabVIEW 进行监测，当达到预定值（实验发现大约到 10^{-7} A 可以在出射缝处测到信号）时开始扫描。此时可以把加电流的速度减慢。当扫到信号以后可以让电流再增加 2~3 次以后停止增加。当聚焦电极上的电流信号衰减至小于预定值时，停止扫描，切断钼带电流，发出报警信号提醒同学开始进行收尾工作。

3.自动调节聚焦电压。找到峰以后，先让扫描电压定位在峰顶位置，根据两聚焦电极上电流大小，增大电流较大一侧的聚焦电压，直到信号达到极大。再按照当前左右聚焦电压的比例同时改变两聚焦电极电压，使信号达到最大。

至此，改进小质谱所需要的所有设备有：能够与 LabVIEW 接口的稳压电源四个（分别作为加速电压，左右聚焦电压，钼带加热电源），微电流计 2 个（现有一个，另两个用于测量聚焦电极电压），相应的 AD 卡。如果要完成对电源以及循环水等系统的开关，还需要继电器。

当然最重要的，需要 LabVIEW 程序的设计编写，以及调试硬件和软件接口等一系列工作。

全部实现以后，小质谱需要动手完成的就只有法兰盘和样品的准备以及开关 K1, K2, K3 以及实验结束时的整理工作了。实验真正完成了自动化。

小结

本文的前期工作证明了在缺少硬件支持的情况下对 LabVIEW 数据采集和分析功能进行训练的可行性，并且尝试了一种容易被学生接受，易于在教学中推广的寓学于乐

的方式。后期的实验改进方案设计，特别是对抑制噪声算法的讨论，可以低成本地实现小质谱实验的自动化和性能提高，并且有望在近期内实现软件和硬件的接口。

致谢

感谢俞熹老师和曹前同学在我学习和使用 LabVIEW 过程中的讨论和指导。

参考文献

1. LabVIEW7.1 编程与虚拟仪器设计，侯国屏等，清华大学出版社
2. 原程序可参考 2011 全国虚拟仪器大赛网站的推荐程序。
我的程序可在复旦大学物理实验网站口头报告的压缩包文件中找到
3. 请参考我的近代物理实验数据处理，小质谱仪部分