

一种 IMS 信号校正算法

郑小保¹, 徐威¹, 张国栋²

(1. 中国电子科技集团公司第二十二研究所, 山东 青岛 266107; 2. 中国移动通信集团设计院有限公司 山东分公司, 济南 250001)

摘要: **目的** 降低外界环境对离子迁移率的影响。**方法** 讨论用标校物的 IMS 信号迁移时间对待测物质的 IMS 信号迁移时间进行校正的算法, 通过对待测物质 IMS 信号进行修正, 来减少外界环境的变化对 IMS 信号迁移时间的影响, 提高探测的准确性, 最后通过用空气作为标校物进行试验验证。**结果** 迁移区电压的变化对 IMS 信号的影响降低了 96%, 迁移区温度的变化对 IMS 信号的影响降低了 53%。**结论** 该方法有效, 为该校正技术在 IMS 信号处理中的应用奠定了基础。

关键词: 离子迁移谱; 迁移率; 校正

DOI: 10.7643/issn.1672-9242.2020.07.003

中图分类号: TN919 **文献标识码:** A

文章编号: 1672-9242(2020)07-0012-04

Emendation Arithmetic for Ion Mobility Spectrometry Signal

ZHENG Xiao-bao¹, XU Wei¹, ZHANG Guo-dong²

(1. The 22nd Research Institute of CETC, Qingdao 266107, China; 2. Shandong Branch of China Mobile Communication Group Design Institute Co. Ltd, Jinan 250001, China)

ABSTRACT: The paper aims to reduce the influence of external environment on ion mobility. In this paper, the algorithm of correcting the IMS signal migration time of the material to be measured by using the IMS signal migration time of the calibrator was discussed. By modifying the IMS signal of the material to be measured, the influence of the change of the external environment on the migration time of the IMS signal was reduced, and the accuracy of the detection was improved. Finally, the air was used as calibration object for verification. The influence of the voltage change in the migration zone on the IMS signal was reduced by 96%. The influence of the temperature in the migration zone on the IMS signal was reduced by 53%. This method is effective, which lays a foundation for the application of this correction technology in IMS signal processing.

KEY WORDS: ion mobility spectrometry; mobility rate; emendation

离子迁移谱 (Ion Mobility Spectrometry, IMS) 技术是 20 世纪 60 年代发展起来的一门检测技术, 主要用来分析混合气体中存在的微量气体成分, 特别适合于一些挥发性有机化合物的痕量探测, 如毒品、爆

炸物、化学战剂和大气污染物等。但是实际得到的 IMS 信号的迁移率受环境因素影响比较大, 提高 IMS 信号迁移率的探测精度, 减少误判一直是 IMS 技术的研究热点之一。

收稿日期: 2020-01-13; 修订日期: 200-02-23

Received: 2020-01-13; **Revised:** 200-02-23

作者简介: 郑小保 (1982—), 男, 硕士, 高级工程师, 主要研究方向为信号处理。

Biography: ZHENG Xiao-bao (1982—), Male, Masters, Senior engineer, Research focus: signal processing.

通讯作者: 徐威 (1969—), 男, 硕士, 研究员, 主要研究方向为电子与信息技术、嵌入式系统、信号处理技术等。

Corresponding author: XU Wei (1969—), Male, Master, Researcher, Research focus: electronic and information technology, embedded system, signal processing technology, etc.

IMS 信号的迁移率随周围环境因素的变化而变化, 迁移管的构造、电场强度、温度、气压和湿度等一些因素都会对它产生影响。一般采用精确控制或测量迁移环境的做法来提高迁移率的探测精度, 但有些是不易控制的, 有些精确测量的成本比较高。利用修正技术, 对 IMS 信号的峰位置进行校正, 减弱外界因素对 IMS 技术中离子迁移率的影响, 一方面保证物质的正确识别, 另一方面还可以降低设备的实现难度及成本。

1 离子迁移率

离子迁移率是单位强度电场作用下的离子平均迁移速度, 用 K 表示, 其单位为 $\text{m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 计算公式为:

$$K = \bar{v}_d / E \quad (1)$$

式中: E 为电场强度; \bar{v}_d 为离子的速度

离子迁移率和中性迁移气体分子之间的基本关系最早由法国科学家 Langevin 给出, 但是计算出的迁移率值和实验值差别非常大。之后, 陆续有人对这一理论进行了修改, 并不断提出了新的理论。迄今为止, 传统弱场下最为成功的离子迁移率理论是由 Mason 等提出的, 由式 (2) 表示:

$$K = \left(\frac{3e}{16N} \right) \left(\frac{2\pi}{\mu k T_{\text{eff}}} \right)^{1/2} \left[\frac{(1+\alpha)}{\Omega_D(T_{\text{eff}})} \right] \quad (2)$$

式中: e 为离子所带电荷, ; N 为中性迁移气体分子的密度, ; k 为玻尔兹曼常数, ; μ 为折合质量, $\mu = \frac{Mm}{M+m}$, 其中 m 为离子的质量, M 为迁移气体分子的质量, T_{eff} 为离子的有效温度 (K), 在单一温度近似情况下, 它就是迁移管内中性气体分子的温度; α 为校正因子, 在 $m > M$ 情况下, α 一般小于 0.02; $\Omega_D(T_{\text{eff}})$ 是碰撞截面, 其值取决于有效温度导致的离子团形状。

从式 (2) 可以看到: 迁移率 K 反比于碰撞截面以及迁移气体的密度, 为了消除迁移气体密度的影响以及调整到标准条件下, 常采用约化迁移率:

$$K_0 = K \frac{273}{T} \frac{P}{760} \quad (3)$$

式中: P 为环境大气压; T 为迁移管温度。约化迁移率相当于把迁移率对环境气压和环境温度进行了归一化, 一般认为它是常数, 只与离子和迁移气体分子的性质以及它们之间的相互作用有关。实际上, 迁移管的构造、电场强度、温度、气压和湿度等一些因素仍会对它产生影响。因此, 在实际应用中, 一般需针对所使用的迁移管及其工作条件对约化迁移率进行相应的修正。

2 校正算法

实际应用中, 离子的迁移率是依据测定它通过迁移区的时间获得的, 因此离子的迁移时间 t 是一个非常重要的参数, 常被用来直接标定离子的迁移率。只有在实际测得的离子迁移时间和样本库中存储的离子迁移时间差别不是很大时, 才能判定所测样品中含有某种物质。离子迁移率和离子迁移时间的关系为:

$$K = \frac{L}{E \times t} = \frac{L^2}{V \times t} \quad (4)$$

式中: L 为迁移管中迁移区的长度; E 为迁移管中的电场强度; V 为迁移区两端电压; t 为物质的迁移时间。对同一台仪器, 迁移区的长度、迁移区两端所加的电压均为常数, 即 $K \times t$ 常数。所以对未知样品的约化迁移率一般通过式 (5) 计算得到:

$$K'_0 = \frac{K_0 \times t_0}{t'} \quad (5)$$

式中: K'_0 与 K_0 分别为待测和已知样品的约化迁移率; t' 与 t_0 分别为其对应的迁移时间。

由离子迁移率理论公式 $K = \frac{L^2}{V \times t}$ 和约化迁移率公式 $K_0 = K \frac{273}{T} \frac{P}{760}$ 可以得到:

$$t = \frac{L^2}{K_0 V} \frac{1}{T} \frac{273}{760} = t_0 \times \frac{1}{V} \frac{273}{T} \frac{P}{760} = t_0 \times A \quad (6)$$

式中: L 为迁移管迁移区的长度; V 为迁移区两端电压; P 为环境大气压; T 为迁移管温度; t 为迁移时间; t_0 为约化迁移时间。

假定在某一段时间内 P 、 V 和 T 为常数, 则某物质的迁移时间可以表示为 $t = t_0 \times A$, A 为在一段时间内由 P 、 V 和 T 决定的常数。选定一种物质作为校正物, 其约化迁移时间为 t_1 。假定得到了校正物和未知物质在一定环境下的迁移时间分别为 t'_1 和 t'_2 , 其校正物的约化迁移时间 t_1 为已知。根据 $t_1 = t'_1 A_1$, 就可以计算出此时的 A_1 , 则可进一步得到未知物质的约化迁移时间 $t_2 = t'_2 A_1 = \frac{t'_2}{t'_1} t_1$, t'_1 和 t'_2 为实际测量值, 很容易得到未知物质的约化迁移时间, 这样就对未知物质的迁移时间做了校正, 可以对物质进行准确判断。

通过式 (6) 可以对迁移管两端的电压 V 、环境大气压 P 和迁移管温度 T 的变化进行校正。

3 校正结果

用 CTZ-1 型微量炸药探测仪上实际采集的 TNT (样品) 信号对本校正方法进行实际验证。性能样机的基本参数: 迁移管管长为 70 mm, 单帧迁移谱信号长度为 40 ms。

以如下采样参数下的数据得到的空气离子迁移时间作为标校物的标准迁移时间,其约化迁移时间的参数为1。标准环境:迁移温度为75℃,环境温度为15℃,压强为1.01 MPa,迁移区两端电压为4000 V。此环境下空气的离子迁移时间为14.16 ms,样品的离子迁移时间为19.56 ms。样品质量浓度为10 ng/μL。

其他环境不变,高压从3600~4000 V变化时,TNT样品和空气的IMS信号迁移时间如图1所示。迁移时间基本随着迁移区电压的变化呈线性变化。

从图2可以看出,校正后的TNT的离子迁移时间基本为一条直线。校正前TNT的离子迁移时间平均误差为1.024 ms,校正后TNT的离子迁移时间平均误差减少为0.038 ms。经过修正后的IMS信号峰位置的平均误差减少了96%,基本上去除了电压变化

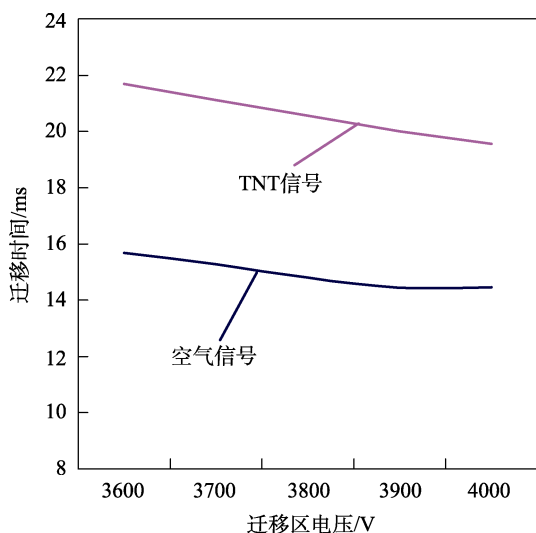


图1 IMS信号迁移时间和迁移电压之间的关系
Fig.1 Relationship between migration time and migration voltage of IMS signal

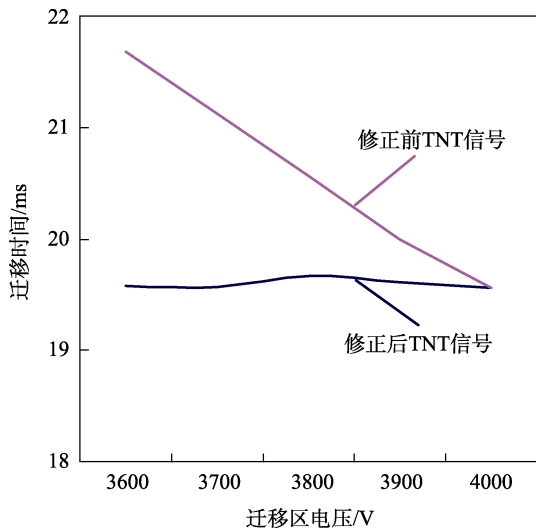


图2 迁移电压变化时修正前后的TNT信号
Fig.2 TNT signal before and after correction when the migration voltage changes

对峰位置的影响,大大提高了判断的准确性。

其他环境不变,迁移温度在50~120℃变化时,TNT的离子迁移时间和空气的离子迁移时间如图3所示。迁移时间基本随着迁移区温度的变化呈线性变化。

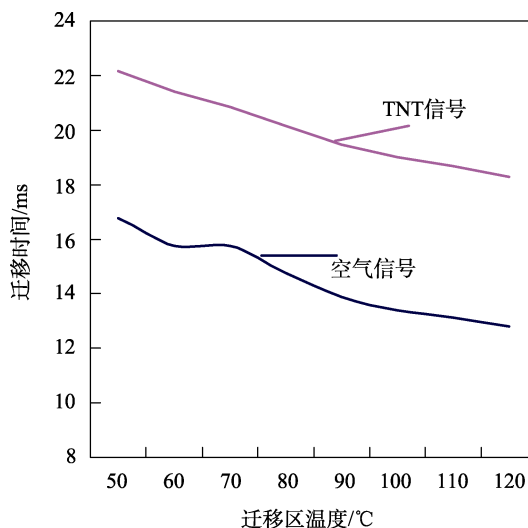


图3 IMS信号迁移时间和迁移温度之间的关系
Fig.3 Relationship between migration time and migration temperature of IMS signal

从图4可以看出,校正后的TNT信号基本为一条直线,校正前TNT的离子迁移时间平均误差为1.14 ms,校正后平均误差减少到0.54 ms。经过校正后的TNT的离子迁移时间平均误差减少了53%,使峰位置的精确判断得到了较大的提高,减少了虚警和误判,提高了IMS的性能。

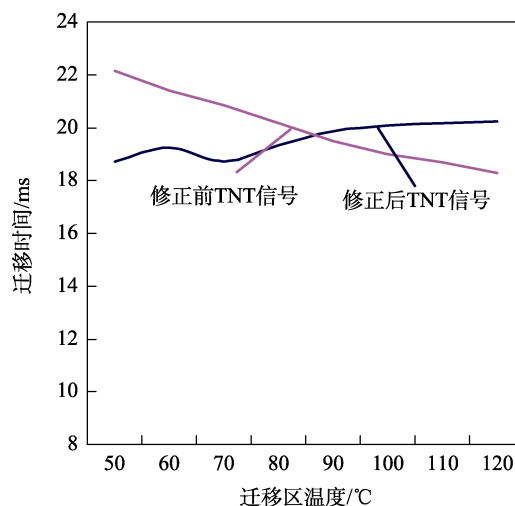


图4 迁移温度变化时修正前后的TNT信号
Fig.4 TNT signal before and after correction when the migration temperature changes

4 结论

通过对校正算法的讨论,实现了对探测物质离子

迁移时间的校正,有效降低了外界环境对离子迁移率的影响,为 IMS 信号的校正技术提供了一个思路。最后通过实际验证证明了该方法的有效性,为该校正技术在 IMS 信号处理中的应用奠定了基础。

参考文献:

- [1] 吴俊杰, 郑小保, 徐威, 等. 基于变换域的 IMS 信号处理方法及其改进[J]. 电波科学学报, 2009, 24(4): 709-713.
WU Jun-jie, ZHENG Xiao-bao, XU Wei, et al. IMS Signal Processing Method Based on Transformation Domain and Its Improvement[J]. Journal of Radio Science, 2009, 24(4): 709-713.
- [2] 郑君里, 应启珩, 杨为理. 信号与系统[M]. 北京: 高等教育出版社, 2000
ZHENG Jun-li, Ying Qi-xian, Yang Wei-li, Signal and System Higher Education Press, 2000
- [3] 原普, 毛云志, 郭华民. 爆炸物检测中微弱 NQR 信号的处理[J]. 电波科学学报, 2006, 21(2): 204-208.
YUAN Pu, MAO Yun-zhi, GUO Hua-min, Processing of Weak NQR Signal in Explosive Detection[J]. Journal of Radio Wave Science, 2006, 21(2): 204-208.
- [4] 汪冬梅, 王海水, 曾广赋, 等. 二次微分和傅里叶解卷积技术的表观分辨率研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2004, 24(2): 152-154.
WANG Dong-mei, WANG Hai-shui, ZENG Guang-fu, et al. Apparent Resolution of Quadratic Differential and Fourier Deconvolution Techniques[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2004, 24(2): 152-154.
- [5] 朱凯然, 何学辉, 郑小保, 等. 基于总体最小二乘的核四极矩共振参数估计[J]. 电波科学学报, 2012, 27(1): 134-140.
ZHU Kai-ran, HE Xue-hui, ZHENG Xiao-bao, et al. Estimation of Nuclear Quadrupole Moment Resonance Parameters Based on Total Least Square[J]. Journal of Radio Wave Science, 2012, 27(1): 134-140.
- [6] 季仁东. 离子迁移谱实验方法研究[D]. 曲阜: 曲阜师范大学, 2004.
JI Ren-dong. Experimental Method of Ion Migration Spectrum[D]. Qufu: Qufu Normal University, 2004.
- [7] 吕勇杰. 离子迁移谱技术及其在毒品和爆炸物检测中的应用[D]. 上海: 华东师范大学, 2006.
LYU Yong-jie. Ion Migration Spectroscopy and its Application in Drug and explosive Detection[D]. Shanghai: East China Normal University, 2006
- [8] 徐淑武. 离子迁移谱检测技术原理及其应用中的问题研究[D]. 上海: 华东师范大学, 2004.
XU Shu-wu. Research on the principle and Application of Ion Migration Spectrum Detection Technology[D]. Shanghai: East China Normal University, 2004.
- [9] 徐淑武, 郑健, 毕志毅, 等. 离子迁移谱检测技术及其应用[J]. 物理学和高新技术, 2003, 32(8): 539-542.
XU Shu-wu, ZHENG Jian, BI Zhi-yi, et al. Ion Migration Spectrum Detection Technology and Its Application[J]. Physics and High and New Technology, 2003, 32(8): 539-542.
- [10] 许峰, 王海龙, 关亚凤. 离子迁移谱研究进展[J]. 化学进展, 2005, 17(3): 514-522.
XU Feng, WANG Hai-long, GUAN Ya-feng. Research Progress of Ion transfer Spectroscopy[J]. Chemical Progress, 2005, 17(3): 514-522.
- [11] 郑小保, 张国栋, 徐威, 等. FSD 技术在 IMS 信号处理中的应用[J]. 无线电通信技术, 2014, 40(1): 79-81.
ZHENG Xiao-bao, ZHANG Guo-dong, XU Wei, et al. Application of FSD in IMS Signal Processing[J]. Radio Communication Technology, 2014, 40(1): 79-81.
- [12] 陈立伟, 谭志良, 崔立东. 改进的 LMS 算法在 Simulink 仿真平台实现[J]. 装备环境工程, 2015, 12(6): 26-30.
CHEN Li-wei, TAN Zhi-liang, CUI Li-dong, Improved LMS algorithm implemented on Simulink Simulation Platform[J]. Equipment Environment Engineering, 2015, 12(6): 26-30.
- [13] 张军, 牛宝良, 黄含军, 等. 爆炸分离冲击数据的零漂校正[J]. 装备环境工程, 2018, 15(5): 6-9.
ZHANG Jun, NIU Bao-liang, HUANG Han-jun, et al. Zero Drift Correction of Explosion Separation Impact Data[J]. Equipment Environmental Engineering, 2018, 15(5): 6-9.