

文章编号: 1002-1582(2008)S-0066-03

## 便携式近红外光谱分析仪的研制及应用\*

叶华俊<sup>1,2</sup>, 刘立鹏<sup>2</sup>, 张学峰<sup>2</sup>, 周新奇<sup>2</sup>, 夏阿林<sup>1</sup>, 王健<sup>1,2</sup>

(1. 杭州电子科技大学 电子信息学院, 杭州 310018; 2. 聚光科技(杭州)有限公司, 杭州 310052)

**摘要:** 针对野外和现场快速无损分析应用, 研制了一种便携式近红外光谱分析仪。该仪器具有体积小、结构简单、响应速度快、功耗低、抗震性好、使用方便和维护成本低等优点。详细描述了仪器的总体设计及主要结构, 展现了其性能特点。对仪器进行了性能测试, 结果显示该分析仪性能稳定, 已达到了国际同类仪器水平。苹果糖度的现场无损测定数据表明, 该分析仪具有较强的建模能力及高可靠性, 其中校正标准偏差和验证集预测标准偏差分别为 0.266 和 0.309。实验结果表明, 该分析仪具有较强的现场应用能力, 能够适应各种现场的应用环境。

**关键词:** 光学测量; 便携; 近红外; 光谱分析

中图分类号: TG15.3 文献标识码: A

## Development and application of a portable near infrared spectroscopy analyzer

YE Hua-jun<sup>1,2</sup>, LIU Li-peng<sup>2</sup>, ZHANG Xue-feng<sup>2</sup>, ZHOU Xin-qi<sup>2</sup>, XIA A-lin<sup>1</sup>, WANG Jian<sup>1,2</sup>

(1. Electronic Information College, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China)

(2. Focused Photonics (Hangzhou), Inc., Hangzhou 310052, China)

**Abstract:** A portable near infrared spectroscopy analyzer is developed for fieldwork analysis applications. Compared with other analyzers, the analyzer has many advantages, such as compact space, simple structure, fast time response, low power waste, anti-shake and low maintenance cost. Its features and configuration are described. The performance tests reveal the analyzer performs well. Furthermore, the analyzer has been successfully applied to non-damage measurement of apple sugar content on fieldwork. The low root mean square errors of calibration (RMSEC) and prediction (RMSEP) are given of 0.266 and 0.309 respectively. The results demonstrate that the analyzer is excellent in modeling and can deal with complex environment.

**Key words:** portable; near infrared; spectroscopy analysis

### 0 引言

快速无损测定现场样品在实际应用中具有十分重要的意义。传统的野外和现场工作人员用化学方法检测样品时, 需采样到实验室检测, 整个过程从采样到测量, 工作量较大, 例如采样过程需要包装、记录、运输, 测量前还需破坏性预处理等。这样的分析过程效率低、周期长、易出错, 而且每种参数的测量都要进行不同的实验, 应用起来极不方便, 难以实现现场、快速、准确、无损化。

计算机技术、数字化光谱仪器以及化学计量学方法的有机结合, 在解决光谱信息提取和消除背景干扰方面取得了良好的效果, 推动了近红外光谱技术的飞跃发展<sup>[1-6]</sup>。近红外光谱技术主要具有以下优点: (1) 可以同时测定多种组分; (2) 分析速度快; (3) 实现无损和无污染性测试、费用低; (4) 适应性广, 几乎适合各类样品分析; (5) 可使用光纤实现远程分析检测。该技术在许多领域获得了广泛应用, 已成功应用于农业、畜牧业、林业、生物、医学、石油化工和工业流程检测等方面, 对推进生产和科研领域的技术进步发挥了巨大作用<sup>[7-10]</sup>。然而普通近红外光谱分析仪体积大并且笨重, 已制约了近红外现场应用技术的进一步发展。现场工作者急需一种可以方便携带的近红外光谱分析仪器。

我国便携式近红外光谱仪主要依赖进口, 进口产品高昂的价格和脱节的售后服务阻碍了该技术在我国的普及,

严重影响了我国应用技术水平的进步。此外, 近红外光谱分析技术能否有效工作, 很大程度上依赖于校正模型, 国外仪器的校正模型不仅价格昂贵, 而且不适合国内的样品。因此, 研制出具有完全自主知识产权, 性能与国外知名仪器相媲美的便携式近红外光谱分析仪, 对提升国产科学仪器的国际竞争力具有十分重要的意义。本文主要介绍了所研制的便携式近红外光谱分析仪的总体设计及主要结构, 并对其进行应用测试。

### 1 便携式近红外光谱分析仪

便携式近红外光谱分析仪主要由硬件系统和软件系统构成。硬件系统保证了仪器性能的稳定, 软件系统保证了预测样本的准确性。

#### 1.1 硬件系统

图 1 和图 2 分别为便携式近红外光谱分析仪的样机与结构示意图。该分析仪硬件系统由分析仪主机和测样附件构成。

分析仪主机主要包括光谱仪、自动校验模块、数据处理模块、接口电路、HMI 模块、内部光源和 Li-ion 电池组。从光源发出的光与待测样品作用后, 被出射光纤收集, 传输到主机内的自动校验模块, 再进入光谱仪获得光谱信号, 数据处理后得到性质结果。

自动校验模块用于校验仪器性能, 主要有以下功能: (1)

\* 收稿日期: 2008-06-04

E-mail: huajuny@yahoo.com.cn

基金项目: 浙江省重大应用电子技术和新型电子元器件资助项目(2007C11091); 浙江省自然科学基金人才基金资助项目(R104315)

作者简介: 叶华俊(1979-), 男, 江苏人, 杭州电子科技大学硕士研究生, 从事分析仪器方面的研究。

检验光谱仪工作是否正常;(2)测量暗电流;(3)检验和校正吸光度和波长偏差。该模块通过对光谱信号漂移和偏差的检验和校正,确保仪器性能不受环境温度变化,不受电子元件、光源和其它光学元件的劣

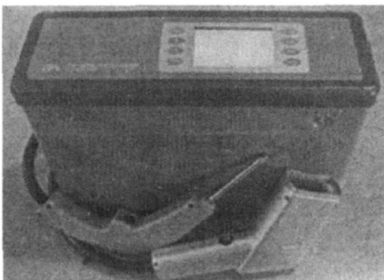


图1 便携式近红外光谱分析仪

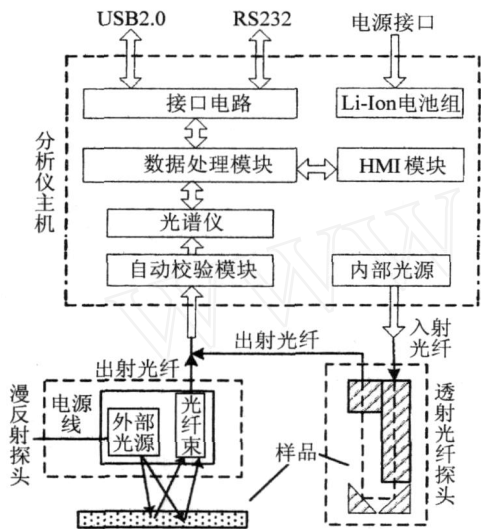


图2 便携式近红外光谱分析仪系统

化情况的影响。

接口电路实现分析仪和外部设备之间的数据和状态信息的通讯。HMI为人机交互界面,其功能包括仪器参数设置输入,系统维护,模型选择,预测结果显示,报警状态查看和密码管理等。Li-ion 电池组为仪器和光源的长时间野外和现场工作提供电力支持,持续能力大于 10h。

测样附件为仪器对样品进行光谱采集时所用的光谱收集器件。针对不同的测量对象,附件的设计也不尽相同。便携式光谱分析仪的测样附件主要有漫反射探头和透射光纤探头。漫反射探头主要用来测量固体物,如水果、饲料等。浸入透射式光纤探头主要用于测量液体,如汽油、柴油等。

1.2 软件系统

软件是分析仪的重要组成部分,包括仪器控制软件和化学计量学软件。

1.2.1 仪器控制软件

仪器控制软件负责控制仪器进行光谱采集、查看和简单的信号处理,其功能主要包括仪器的初始化、自检与故障诊断、定时事件处理、通讯处理、光谱数据的采集和处理等,其流程如图3所示。

定时事件主要处理对定时精度要求不高的定时任务,在定时任务中包含两个定时处理区:短定时任务和长定时任务。短定时任务可执行温度采集及控制、电池监测、电机位置检测、仪器状态指示等。长定时任务可执行定时暗电流采集等。

通信处理模块实现对接收到的数据按照通信协议进行解析,根据命令执行相应的处理、返回数据或响应命令。

数据采集和处理模块主要实现以下功能:暗电流光谱采

集、参比(零点)光谱采集和测量光谱采集,并计算吸光度。

1.2.2 化学计量学软件

化学计量学软件负责建立化学计量学模型,将待测物光谱及性质数据关联起来,一般包括校正模型的建立和未知样品的预测等功能。

图4为化学计量学软件流程图。校正模型的建立通常包括光谱数据的预处理、光谱区间和其它参数的选择以及模型的验证。校正功能的完善与否直接影响模型分析结果的准确性。样品的预测是在校正模型的基础上实现的,通过调用模型文件中的控制参数和校正模型对未知样品光谱进行计算,获得样品性质预测结果。

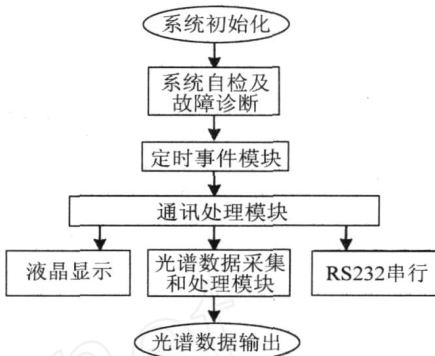


图3 控制软件流程图

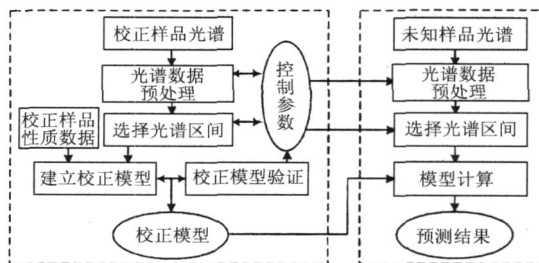


图4 化学计量学软件流程图

2 仪器性能测试

对研制仪器的主要性能作了系统的测试,获得光谱范围、波长准确性和重复性、光谱分辨率、杂散光、吸光度噪音等性能指标参数。测试结果如表1所示。测试数据显示所研仪器性能稳定,已经达到国际同类仪器水平。

表1 光谱分析仪的主要性能参数

性能参数	实测数据
波长范围	600 - 1100nm <sup>a</sup>
波长准确度	±0.04nm
波长重复性	±0.01 nm
光谱分辨率	<5.0nm
杂散光	<0.10 %
吸光度线性斜率	0.997,截距 0.0179
波长温漂	<0.01 nm/
吸光度噪声	RMS < 2.0 × 10 <sup>-4</sup> (低透过率) RMS < 1.0 × 10 <sup>-4</sup> (高透过率)
仪器尺寸	320mm × 260mm × 120mm
仪器重量	< 5kg
电池持续电力	> 10h

<sup>a</sup> 波长范围可扩展至 600—2500nm。

3 应用分析

为了验证仪器的现场应用能力,使用研制的便携式分析仪无损测量获取 53 个陕西和山东产的红富士苹果样本的近

红外光谱数据,用于测定苹果的糖度。图 5 为苹果样本光谱。

随机选取 40 个样本数据,对光谱数据进行预处理(在这里进行均值中心化、平滑和一阶导数操作),选取 800—1000nm

波段光谱,使用偏最小二乘(PLS)算法建立校正模型。将校正模型和控制参数(预处理参数和选择光谱区间参数)传入仪器,并对剩下的 13 个验证样本进行预测,结果如图 6 所示。可见预测结果较好,其中校正和验证相关系数分别为  $R_c = 0.987$  和  $R_v = 0.979$ ,校正标准偏差和验证集预测标准偏差分别为  $SEC = 0.266$  和  $SEV = 0.309$ 。结果说明仪器具有较强的现场应用能力。

#### 4 结论

研制的便携式近红外光谱分析仪性能稳定、成本低廉、操作简便、体积小、抗震、维护方便等优点,易于实现仪器的商品

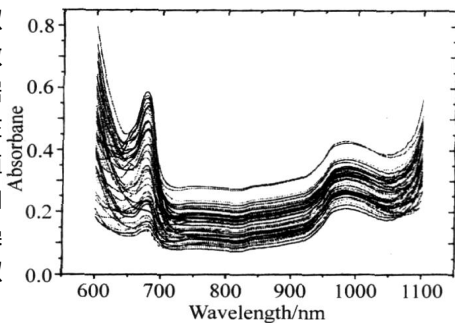


图 5 苹果样本近红外光谱

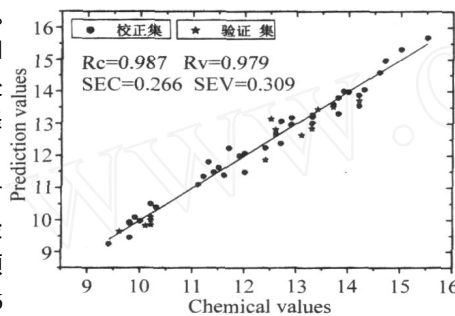


图 6 苹果糖度的化学值得与预测值的相关性

化、市场化,使用不同附件就很方便地应用于不同领域,较好地满足了野外与现场分析的迫切需要。该分析仪已成功应用于果品、饲料等领域,取得了较好的应用效果,并有较大的应用前景。

#### 参考文献:

- [1] 陆婉珍. 现代近红外光谱分析技术(第二版)[M]. 北京:中国石化出版社, 2007.
- [2] Du Y P, Liang Y Z, et al. Spectral regions selection to improve prediction ability of PLS models by changeable size moving window partial least squares and searching combination moving window partial least squares[J]. Analytica Chimica Acta, 2004, 501(2):183—191.
- [3] Halland D M, Thomas E V. Partial least-squares methods for spectral analyses. 1. Relation to other quantitative calibration methods and the extraction of qualitative information[J]. Analytical Chemistry, 1988, 60(11): 1193—1202.
- [4] Inoue M, Tajima K, Mizutani M, et al. Regular consumption of green tea and the risk of breast cancer recurrence: follow-up study from the Hospital-based Epidemiologic Research Program at Aichi Cancer Center (HERPACC), Japan[J]. Cancer Letter, 2001, 167(2):175—182.
- [5] Leardi R, Norgaard L. Sequential application of backward interval partial least squares and genetic algorithms for the selection of relevant spectral regions[J]. Journal of Chemometrics, 2004, 18(11): 486—497.
- [6] Abrahamsson C, Johansson J, Sparen A, et al. Comparison of different variable selection methods conducted on NIR transmission measurements on intact tablets[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. 2003, 69(1-2):3—12.
- [7] Bangalore A S, Shaffer R E, Small G W. Genetic Algorithm-Based Method for Selecting Wavelengths and Model Size for Use with Partial Least-Squares Regression: Application to Near-Infrared Spectroscopy[J]. Analytical Chemistry, 1996, 68(23):4200—4212.
- [8] Thomas E V, Haaland D M. Comparison of multivariate calibration methods for quantitative spectral analysis[J]. Analytical Chemistry, 1990, 62(10):1091—1099.
- [9] Tanaka M, Ojima T. Near-infrared monitoring of the growth period of Japanese pear fruit based on constituent sugar concentrations[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 1996, 44(8): 2272—2277.
- [10] Ying Y B, Liu Y D. Nondestructive measurement of internal quality in pear using genetic algorithms and FT-NIR spectroscopy[J]. Journal of Food Engineering, 2008, 84(2):206—213.

(上接第 65 页)

率半径的增加,抛光参数变化对于接触区的影响也随之显著,也就是说对于抛光参数变化对平面工件接触区的影响比球面工件的显著;一般来讲,曲率小的工件抛光参数的取值范围稍大,从表 2 可以看出曲率较小的球面工件较平面件在气囊压缩量和气囊内部压力两个参数上的取值范围稍大。

表 2 有效抛光接触区抛光参数合理的取值范围

参数	取值范围	
气囊进动角/ (°)	平面工件	20 ~ 25
	球面工件	
气囊压缩量/ mm	平面工件	0.1 ~ 0.3
	球面工件(曲率半径 < 40mm)	0.1 ~ 0.6
充气压力/ kPa	平面工件	10 ~ 25
	球面工件(曲率半径 < 40mm)	10 ~ 30
气囊转速/ min	无明显的限制	
驻留时间/ s	无明显的限制	

这些实验中得到的结果为今后气囊整体抛光中的针对不

同曲率的工件几种重要工艺参数选取和优化奠定了基础,为使得该技术更加趋于成熟有着重要的意义。

#### 参考文献:

- [1] Bingham R G, Walker D D, Kim D H, et al. Novel automated process for aspheric surfaces[J]. Proc SPIE, 2004(4093):445—450.
- [2] David D. Walker, et al. New results from the precessions polishing process scaled to larger sizes[J]. Proc SPIE, 2004, 5494: 71.
- [3] Walker D, Brooks D, King A, et al. The 'Precessions' Tooling for polishing and figuring flat, spherical and aspheric surfaces[J]. Optics Express, Published by Optical Society of America, 2003, (11): 958—964.
- [4] David D. Walker, et al. First aspheric form and texture results from a production machine embodying the precession process[J]. Proc. SPIE 4451, 267(2001).
- [5] 高波. 气囊抛光实验样机的研制及其关键技术的研究[D]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学, 2005.
- [6] 宋剑锋, 姚英学, 谢大纲, 等. 超精密气囊工具抛光方法的研究[J]. 华中科技大学学报(自然科学版), 2007, 35(279):104—107.
- [7] 刘研. 气囊式抛光原理分析及工艺实验研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2004.