

便携式近红外光谱检测系统的开发

冯帮¹ 陈斌¹ 颜辉²

(1.江苏大学机械工程学院, 镇江 212013; 2.江苏科技大学生物与化学工程学院, 镇江 212013)

[摘要] 在MicroNIR-1700近红外光谱仪上开发了便携式近红外光谱检测系统,介绍了系统光谱仪控制和样品质量检测的功能。为了验证系统的可行性与实用性,以标准白板为检测对象进行了多次光谱检测的重复性试验,在波长1000~1600nm范围内,吸光度最大偏差的最大值为0.0062,标准偏差的最大值为0.0021,系统具有很高的重复性精度;对幸水桃的可溶性固形物进行了实测试验,使用该光谱检测系统采集光谱,同步利用阿贝折射仪在相应部位测量SSC,经卷积平滑法和标准正态变换预处理后,采用PLS方法建立定标模型,其校正集和预测集的相关系数 r 分别为0.902和0.867,均方根误差RMSECV和RMSEP分别为1.091,1.158。

[关键词] 近红外光谱仪;应用系统;可溶性固形物

中图分类号: TP274 文献标识码: A 文章编号: 2055-5200(2014)02-012-05

DOI: 10.11876/mimt201402004

Development of portable near infrared spectrum detection system FENG Bang¹, CHEN Bin¹, YAN Hui². (1.School of Mechanical Engineering,Jiangsu University,Zhenjiang,212013,China; 2.Environmental and biological engineering college ,jiangsu university of science and technology, Zhenjiang 212013, China)

[Abstract] Developed a portable near infrared spectrum detection system in MicroNIR-1700 spectrometer and introduced its function of spectrometer controlling and detecting sample's quality. In order to verify the feasibility and practicability of the system ,the spectrum detection repeatability was tested for many times with standard whiteboard for object detection, in the range of 1000 ~ 1600 nanometer, the maximum of the largest absorbance deviation and the standard deviation are 0.0062 and 0.0021 respectively, system has high repeatability precision. A practical test was done about Xingshui peach's soluble solids content(SSC), using the spectrum detection system to collect spectrum meanwhile using the abbe refractometer measuring the SSC in the corresponding position. After preprocessing the sample spectra using convolution smoothing and standard normal transformation, PLS method was adopted to establish the calibration model. The correlation coefficient r of the calibration set and prediction set were 0.902 and 0.867 respectively, root mean square error RMSECV and RMSEP are 1.091,and 1.158 respectively.

[Key words] near infrared spectroscopy; application system; soluble solids content

基金项目: 国家自然科学基金项目(编号: 31171697), 阵列式半导体激光器件的食品原料品质近红外快速检测方法的研究。镇江市科技支撑—农业项目(编号: NY2012034), 便携式水果品质无损检测仪的研制。

作者简介: 冯帮, 硕士研究生, 研究方向: 测试计量技术及仪器, E-mail: 871018911@qq.com。

通讯作者: 陈斌, E-mail: ncp@ujs.edu.cn。

便携式近红外光谱仪自问世即受到业内广泛关注。它具有体积小、重量轻、低功耗、低成本、携带方便等优点。并具有近红外光谱技术分析速度快、样品准备简单、从单个光谱可进行多种组分分析、无损检测、没有化学污染等优点，被广泛运用于农业和食品领域实时现场检测中^[1-2]。

光谱仪应用软件使近红外光谱仪器与实际应用领域结合，软件包括光谱仪控制、测量样品组成（性质）和其他附加功能。光谱仪控制部分负责实现光谱采集、查看和简单的信号处理；后者则负责将采集到的光谱信号与化学计量学模型关联起来，得到样品组成（性质）^[3]。

MicroNIR-1700近红外光谱仪是美国JDSU公司推出的一款商品化的小型近红外光谱仪，其配套软件只包含仪器控制和光谱采集功能，需要进行必要的应用开发才能用于生产实际，因此本文在此基础上开发了近红外光谱检测应用系统，主要用于水果的可溶性固形物的检测。

1 MicroNIR-1700 近红外光谱仪简介^[4]

MicroNIR-1700近红外光谱仪采用线性渐变滤光片（LVF, Linear Variable Filter）作为分光器件，使用阵列式InGaAs探测测器，避免了采用光栅等类型的复杂分光系统，实现了光谱仪的小型化。在 $\Phi 45 \times 42\text{mm}$ 的体积上集光源、滤光片和检测器等于一体，不需要任何移动部件，重量为60g左右。其中光源采用双集成真空乌灯，寿命为1.8万小时，检测器采用128元非制冷镓砷（InGaAs）二极管阵列检测器，波长范围950~1 650 nm，分辨率为12.5 nm，积分时间最小为100 μs ，最大14 ms；仪器的控制和光谱数据的采集由控制终端上的软件触发，其命令和



图1 JDSU MicroNIR-1700光谱仪

光谱数据经USB数据线在仪器和终端之间传输。控制终端可采用笔记本电脑和基于android系统的平板电脑，便于现场采样和实时测量（如图1所示）。在采集样品光谱之前，应先测量仪器的暗电流，测量参照信号后再采集样品的光谱，这样可以进行样品光谱的归一化处理，以提高光谱质量与准确度。

2 便携式近红外光谱检测系统的构架

便携式近红外光谱检测系统整体构架如图2所示，采用VC++平台进行开发，主要包括光谱仪控制和样品测量2个模块。前者负责初始化光谱仪、光源控制以及光谱采集之前的参数设置；后者负责待测样品光谱采集、相关质量指标化学计量学模型导入、样品质量指标分析和数据信息管理等内容。

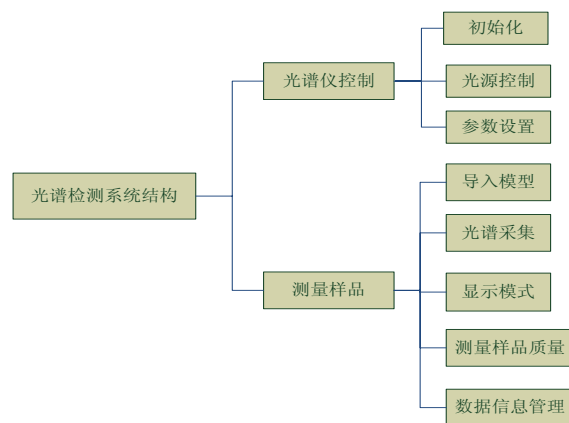


图2 便携式近红外光谱检测系统整体构架

3 系统实现

3.1 光谱仪控制^[5]

3.1.1 初始化 在上位机控制终端（笔记本电脑）上安装设备驱动程序，将近红外光谱仪通过USB数据线与上位机连接起来。光谱仪器驱动程序安装包中包含了一系列控制仪器的接口函数，如“FT_ListDevices”、“FT_OpenEx”、“FT_Write”和“FT_Read”等接口函数，通过调用这些函数可实现对光谱仪的控制功能。首先检测光谱仪的连接状态，上位机调用“FT_ListDevices”函数，其调用格式为FT_ListDevices (&numDevs,NMLL,FT_LIST_NUMBER_ONLY)，其中 numDevs 为连接到上位机的同类设备数，后面两个参数为常量。若该函数返回值为0，则表示光谱仪器连接成功；若函数返回值不为0，则表示设备没有连接成功，需重新连接设备或安装设备驱动。光谱仪与上位机连接成功后，再次调用“FT_

ListDevices”函数获取光谱仪序列号、仪器版本和设备ID等信息，为光谱仪的打开作准备，此时的函数格式为FT_ListDevices (para1,para2,para3)，其中para1为连接到上位机的设备索引，通常为0；para2用于存放获得的设备信息如光谱仪序列号，para3与para2相对应。光谱仪的打开操作可通过如下函数实现：

FT_OpenEx (char *para1,flag,&handle)

其中参数para1可以是序列号、仪器版本或设备ID，此时flag与para1相对应。若设备打开成功，参数handle获得非零设备句柄值，否则handle仍为初始值0，当前设备不可用。光谱仪成功打开后，可利用设备句柄进行光谱仪复位、获取光谱仪的分辨率、查询光谱仪校正信息等操作。此时，光谱仪初始化工作已完成。

3.1.2 光源的控制 光谱仪上没有光源开关，光源的控制是通过向光谱仪发送命令实现的。首先须打开光谱仪，获得设备句柄，然后调用“FT_Write”函数向光谱仪写光源开与关的命令实现的。调用函数参数格式为：FT_Write(para1,para2)，其中参数 para1 为设备句柄，para2 为对应的光源开与关的命令值，光源打开操作设置参数 para2 为“L0”，关闭光源则设置参数 para2 为“L1”。

3.1.3 光谱扫描参数设置 样品的近红外光谱质量受到光谱仪积分时间、采样次数和增益的影响，光谱

信号的强弱与积分时间和增益成正比，平均采样数影响光谱的准确度和平滑度。因此，在光谱采集之前需对这些参数进行合理的设置，以便提高光谱信号的信噪比。调用“FT_Write”函数，向光谱仪发送设置参数命令，光谱仪的主要参数通常设置为积分时间为10ms，采样次数为70，增益为1。

3.2 样品测量

3.2.1 光谱采集与显示 光谱仪初始化和仪器的参数设置完毕后，即可采集光谱数据。同样调用“FT_Write”函数向光谱仪发送采集光谱命令，此时光谱数据将采集到光谱仪缓存里面，等待一个延时，调用“FT_Read”函数通过USB读取光谱数据到电脑上，并显示出来。为了方便查看光谱数据，系统将采集到的原始光谱设为默认状态。根据公式(1)、(2)和(3)，在进行暗光谱和采参照光谱的采集操作之后，用户可以获得被测样品的吸光度(A)、反射率(R)和透射率(T)等不同数据类型的光谱图^[6]，为后面样品指标的测量奠定基础。

$$A = -\log\left(\frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}}\right) \quad (1)$$

$$R = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \quad (2)$$

$$T = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \quad (3)$$

其中， S_{λ} ， D_{λ} ， R_{λ} 分别为在波长 λ 处的样品原

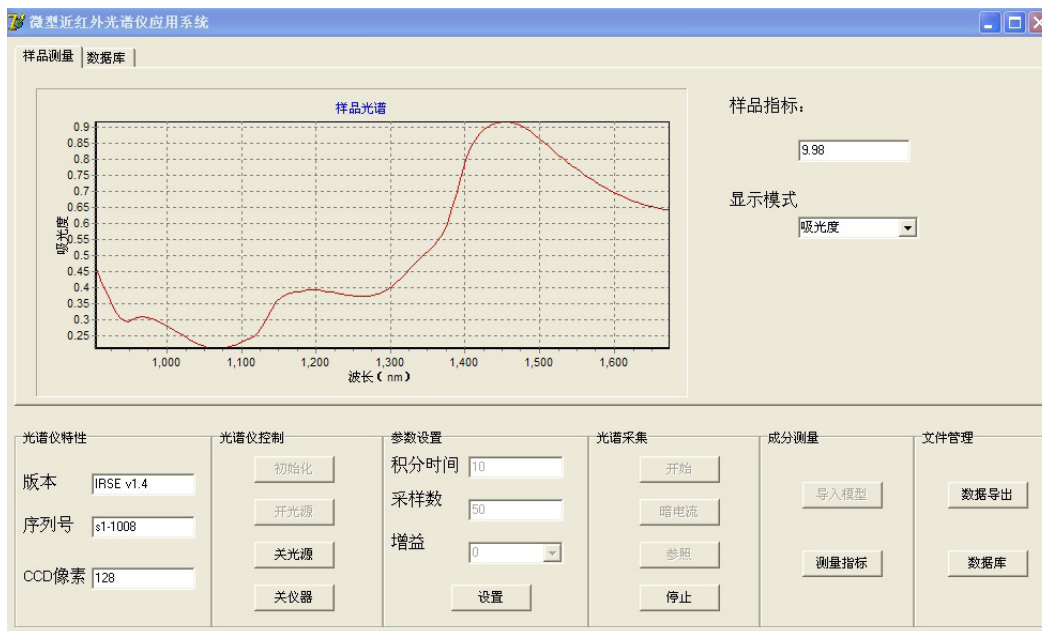


图3 系统的实际工作界面

始光谱强度值、暗光谱强度值和参考光谱强度值。

3.2.2 样品成分测量 MicroNIR-1700 近红外光谱仪的波长区段为 950 ~ 1 650 nm, 在该范围内近红外光谱可用于农产品的水分、果品的可溶性固形物等成分的定量检测^[7-9]。将采集到的样品光谱, 转换成模型中光谱的模式(通常为吸光度谱), 并对吸光度光谱进行平滑、归一化或者标准正态变量变换等预处理, 然后导入化学计量学模型中, 即可实现快速、无损地检测样品成分。实际工作界面如图 3 所示。

3.2.3 数据信息管理 为了方便用户分析、处理和查询样品光谱, 该软件系统提供两种文件存储方式, 用户可将样品光谱存储为文本格式, 方便用户对光谱数据的再利用, 如建立化学计量学模型; 另一种方式是将光谱数据存储到样品信息库中, 用户可通过该数据库来查询和管理被测样品信息, 包含测量者、测量时间、样品对象、样品指标值和光谱数据等信息。

4 光谱检测系统测试

为了验证便携式光谱检测系统的可行性与实用性, 首先对标准白板进行光谱检测的重复性试验, 然后对桃子的可溶性固形物含量进行了实测试验。

4.1 光谱重复性试验

光谱的重复性是指在尽量相同的条件下, 包括程序、人员、仪器、环境等条件不变的状态下, 在一定的时间间隔内重复测量, 评价光谱之间的一致性, 通常用整个光谱区间的吸光度最大偏差或标准偏差来衡量。本次的重复性试验是在温度恒为 24℃ 的恒温实验室进行的, 扣除暗电流之后的采用白板的 100% 线进行试验, 每隔 15s 保存一次光谱数据, 共采集 4 min。各波长点处的吸光度最大偏差和标准偏差如图 4、图 5 所示, 在波长为 1 000 ~ 1 600 nm 范围内, 最大偏差最大值为 0.0062, 标准偏差最大值为 0.0021, 具有较高的

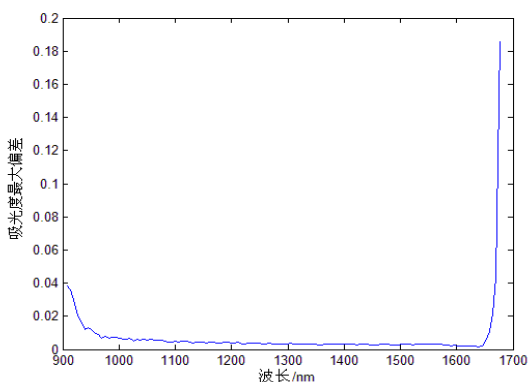


图4 各波长处吸光度最大偏差

重复性精度, 能满足一般精度要求检测的需要。

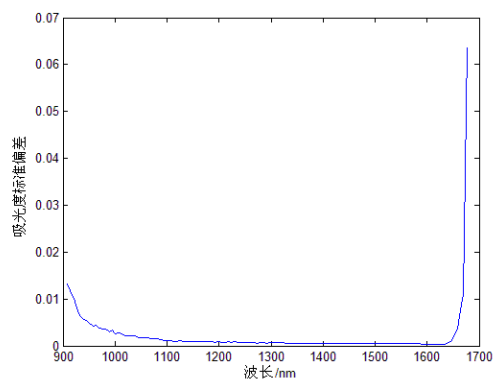


图5 各波长处吸光度标准偏差

4.2 桃子可溶性固形物实测试验

4.2.1 样品的准备 试验共选用 70 个不同成熟度的幸水桃, 于 2013 年 7 月 19 日早晨采于镇江市句容某果园, 采后将之保存在温度为 24℃ 的恒温实验室。

4.2.2 样品光谱的采集 光谱采集过程是在 24℃ 的恒温下进行的。根据预试验结果, 光谱仪打开后预热 15 min, 设定光谱仪积分时间为 10 ms, 采样次数为 70。为了减少主观操作所带来的误差, 将 70 个桃子从 1 ~ 70 分别编号, 然后在每个桃子赤道位置上间隔 120° 画 3 个直径大约为 2cm 的圆圈。在采集样品光谱时, 桃子紧贴光谱仪, 采集每个圆圈处桃子光谱, 总计 210 个样本。样品的吸光度谱图如图 6 所示。

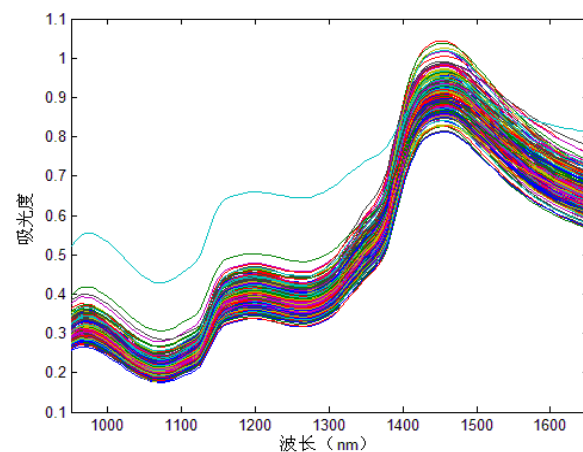


图6 70个桃子的近红外吸光度谱图

4.2.3 桃子可溶性固形物的测量 样品光谱采集完后, 在每个桃子的圆圈处切 5 mm 厚的桃块, 在阿贝折光仪棱镜表面中央挤出 1 ~ 2 滴汁液, 读出桃子可溶性固形物的具体数值。其中桃子的可溶性固形物的最大值为 21.75, 最小值为 8.26, 平均值为 14.04。

4.2.4 结果分析 对样品吸光度谱依次采用卷积平滑法(SG,窗口为7)和标准正态变量变换(SNV)进行预处理。按校正集与预测集3:1的比例,采用Kennard-Stone方法划分样品集^[10]。其中157个样品作为校正集,53个作为预测集。对校正集采用PLS方法建立校正模型,并对预测集进行预测。模型结果如表1所示,其校正集和预测集的相关系数r分别为0.902和0.867,均方根误差RMSECV和RMSEP分别为1.091,1.158。模型预测结果如图7所示。

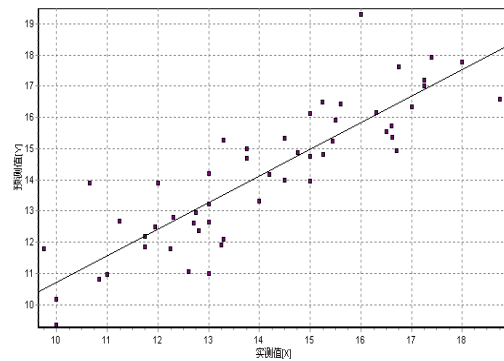


图7 SG+SNV预处理的PLS模型预测结果

表1 PLS模型结果图

模型	校正集			预测集		
	Rc	RMSECV	Rv	RMSEP	最大误差	平均误差
SG+SNV+PLS	0.902	1.091	0.867	1.158	3.2916	0.8679

5 结论

本文在MicroNIR-1700近红外光谱仪上开发了“便携式近红外光谱检测系统”,包含光谱仪控制、光谱采集、样品成分测量和数据管理等功能,功能基本完整。通过对光谱的重复性和桃子可溶性固形物的测试试验,对系统的稳定性和精度进行评价,结果表明,该系统设计可行,可以用于桃子可溶性固形物的快速定量检测。对于其他实际应用,只需收集一定数量的标准样品,并建立起相应的定标模型,将模型嵌入系统中,即可满足实际应用需求。

参 考 文 献

- [1] 陆婉珍,袁洪福,褚小立. 近红外光谱仪器[M]. 北京:化学工业出版社.2010,162-163.
- [2] 韩东海,李鹏飞,王加华. 便携式近红外仪及其应用[J]. 世界农业.2008,(04):66-67.
- [3] 陆婉珍,袁洪福,褚小立. 近红外光谱仪器[M]. 北京:化学工业出版社.2010,176-177.
- [4] <http://www.mei.net.cn/yqyb/201304/490735.html>
- [5] [http://www.ftdichip.com/Support/Documents/ProgramGuides/D2XX_Programmer's_Guide\(FT_000071\).pdf](http://www.ftdichip.com/Support/Documents/ProgramGuides/D2XX_Programmer's_Guide(FT_000071).pdf)
- [6] 李庆波,阎侯赖,张倩暄,等. 近红外光谱采集与处理软件系统的设计及实现[J]. 实验技术与管理.2010,27(5):102-110.
- [7] 李桂峰. 近红外光谱技术及其在农业和食品检测中的应用[J]. 农业与技术,2007,(5):91-94.
- [8] 毕卫红,许峰,吕超. 水果含糖量近红外检测系统及实验[J]. 红外技术.2007,(11):678-680.
- [9] 吴瑞梅,赵杰文,陈全胜,等. 近红外光谱技术结合特征变量筛选快速检测绿茶滋味品质[J]. 光谱学与光谱分析,2011,31(7):1782-1785.
- [10] 陆婉珍,袁洪福,褚小立. 近红外光谱仪器[M]. 北京:化学工业出版社.2010:37-38.