

# NIR—2000 型近红外光谱技术的开发

陆婉珍

(石油化工科学研究院 北京 100083)

**摘要** NIR-2000 近红外光谱仪结合分析的需要,经过反复论证、研制、开发及修正,目前已小批量生产。经过全过程的实践,使我们对于分析仪器的开发有了一些新的体会。

**关键词** 仪器开发 软件开发 近红外光谱仪 分析 石油

## 1 前言

波长位于 700~2500nm 范围的振动光谱称近红外光谱,长期被人们所忽视,这主要是因为其吸收产生于分子振动光谱的倍频或合频,因此谱带弥散,且强度比中红外弱 10 倍到千倍。80 年代后期,由于计算机的普及以及各种数值处理方法的进展,人们重新认识到近红外光谱的特殊优越性,尤其是对于重复工作量极大的分析工作,如谷物、油品、药物控制分析等近红外光谱有着其他方法难以比拟的优点,以后这一技术用于工艺过程在线分析将成为众所瞩目的首选方法,人们在采用这一新技术的过程中,将能获得巨大的经济效益。

目前为了适应各种分析目标,硬件(光谱测量系统及各种采谱附件)及软件(各种数据处理及提取方法)都在不断改进。近红外光谱技术的应用已在农产品、食品工业、纺织工业、烟草工业、畜牧业、香料工业、石化工业等得到了广泛应用,近年来已有人用于临床,生命科学及天体的研究。

我国自 90 年代以来,已有不少从事测试工作的同志,注意到了这一新领域的发展,并开展了不少工作。但是由于尚无国产仪器供应,进口仪器价格昂贵再加上难以及时为使用者服务,进展受到一定限制。我们是从石化行业的化验室中看到了这一技术的发展前途。该技术熟练使用时,工作效率及费用可以有 10 倍,甚至几十倍的提高。从 1995 年开始从硬件(仪器)、软件及应用三方面同时进行了研究。

## 2 近红外分光光谱仪的研制及开发<sup>(1)</sup>

近红外光谱技术是采用已知样品分析结果建立模型后进行分析的。模型的使用希望是长期的(2 年以上)并且可以在不同仪器上使用,因此这类仪器的最主要的性能要求是稳定,包括波长及吸光度的重复性都必须分别达到 1nm 及  $0.3 \times 10^{-5}$  A. U.,为此在设计过程中尽可能的采用了非移动式光学元件,其中尤其是检测器。为了使谱图扫描,快以便叠加后增加信噪比,采用了电荷转移器件,虽然这种器件属于半导体,但经一定改进可以在室温下工作,并选择曝光时间(检测器件接受光照)以保证其响应的稳定。因为光源、分光器件及检测器在光谱仪中是固定不动的,为保证上述稳定性的要求,各器件的相对位置也必须长期保持稳定,同时采用了分级稳压和滤波电路以保证高度稳定的光源电源。

在样机研制达到一定水平后,为了响应党中央提出的“要加强高技术研究并加快产业化”的指示,同时为了充分发挥综合优势,我们立即与深圳英贤公司联合,于 1997 年即开始了首批样机的生产,在生产中又进一步解决了多项技术问题,及各项元器件的供应问题,与此同时将四台样机送交不同的潜在用户实地使用,并经考验提出应该改进的意见,在各用户的协助下再次修改设计及制造过程并补充了或改进了一部分仪器的技术指标,于 1999 年秋季完成了一批生产样机,目前已分交各用户使用。

## 3 计算软件的开发<sup>(2)</sup>

近红外光谱分析技术是包括光谱仪计算软件

及应用模型的成套技术,因而从光谱信息的数值化,原始数据的处理(平滑,微分等),化学计量学方法建立模型,样品光谱转换为分析结果以及最后的显示、打印、登录等都需采用一套快速且便于操作的软件进行。

目前与 NIR-2000 近红外光谱配套的软件是以中文 WINDOWS95/98 作为操作平台,以 visual C 语言编写。系统主菜单分为模型建立,未知样品测定及系统管理三部分,模型建立部分具有建立与维护样品训练集,光谱数据选取与优化,多种化学计算学方法建立模型,模型评价,图文处理等功能。未知样品测定部分可以用常规的批处理方式求出各样品的分析结果,也可以选定一定时间间隔实时记录分析结果。系统管理部分包括软件的初始值、操作权限以及一些特殊工具。

在实际应用第一版软件时出现了一些需要改进的问题,因此 1999 年已修改为第二版,使用后仍出现了一些需要改进问题如:①采用已有的线性关联,有时不能满足要求,因此非线关联方法仍需在再版软件中增加;②如微量物的分析等也要求在软件设计中寻找方法,这些都将在第三版中完善。

#### 4 应用情况及模型的建立

虽然近红外方法已经在众多领域中应用,我们因为限于人力,主要的应用是围绕石化开展的。目前已经建立了汽油(14 项)、煤油(3 项)、柴油(16 项)及沥青(1 项)、原油(2 项)、润滑油(3 项)等各种测试模型,可以快速,经济的得到测试结果,例如汽油的辛烷值及柴油的十六烷值,过去都是仪器投资高,测定时间长,费用高的测试项目,采用近红外光谱法后则大大改善了分析环境,节

约了用费,并能快速反馈结果,及时保证优化工艺的需求。

为了更好的实现实时优化各项工艺操作条件,近红外在线分析仪也对我们提出了更能长期稳定,光纤传导等研制课题。

石化工业中大量需要的高分子性能的检测也将在下一步进行。正是这类需求又对我们提出了漫反射定量附件的研制等课题。

#### 5 体会

5.1 现代计算机的计算功能,将使仪器所测得的信息,更快速、更直接的转化为人们所需要的信息,因此,近代分析仪器的硬件及软件一体化,将是必然趋势。

5.2 仪器的开发及应用必须密切结合,应用是仪器开发的源头,仪器开发是应用的保障。

5.3 分析仪器是结合机、光、电、化学等学科的高新技术,及时产业化不仅是有利于我国知识经济的发展,也是这类技术能不断完善、提高所不可缺少的步骤,NIR-2000 近红外光谱仪在产业化的过程中,解决了很多研制过程中所没有想到的问题,使性能得到了大幅度的提高。

5.4 分析仪器要能为广大科技工作者所欢迎,不论是基本原理、整体性能或是新型附件都必须紧跟现代科技的发展,不断研究完善永无止境。

#### 参考文献

- 1 袁洪福、龙义成、徐广通、陆婉珍,“近红外光谱仪的研制”(分析化学)1999,5
- 2 袁洪福、陆婉珍,“现代光谱分析中常用的化学计量学方法”(现代科学仪器)1998,5
- 3 网页:WWW.sinonir.com.cn

### Development of NIR 2000 Near Infrared Spectrometer

Lu Wanzhen

(Research Institute of Petroleum Processing SINOPEC Beijing 100083)

**Abstract** NIR-2000 near infrared spectrometer has been developed according to the requirement for routine analysis in refineries. Both hardware and software are specially developed for the instrument. Some experience is useful for instrument development.

**Key words** Instrument Development, Software Design, Near Infrared Spectrometer, Analysis, Petroleum.