

文章编号: 1005-5630(2014)05-0377-03

近红外光谱分析在糖溶液浓度测量中的应用

张 娜¹, 范乃梅², 何 燕¹

(1. 郑州轻工业学院 计算机与通信工程学院, 河南 郑州 450002;

2. 郑州轻工业学院 软件学院, 河南 郑州 450002)

摘要: 提出了一种使用近红外光谱分析技术测量梨果肉溶液浓度的新方法。采用一种间接的相对分析方法, 通过大量的实验建立了糖溶液光谱图与其质量参数之间的关系模型库。通过与该关系模型库的对比, 可以精确得到不同浓度糖溶液的真实值。系统使用白光作为光源, 分析对比了不同浓度糖溶液光谱图, 波峰值在 1 406 nm 左右。实验结果表明, 测量值与标准值十分相符, 浓度分辨率为 0.05%, 绝对误差仅为 0.002%。

关键词: 液体浓度; 测量; 近红外; 光谱分析

中图分类号: TN 29 **文献标志码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.1005-5630.2014.05.001

Application of near-infrared spectrum analysis to measure sugar liquid concentration

ZHANG Na¹, FAN Naimei², HE Yan¹

(1. School of Computer and Communication Engineering, Zhengzhou University of

Light Industry, Zhengzhou 450002, China;

2. Software Engineering College, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou 450002, China)

Abstract: A new method to measure pear fleshes liquid concentration using near-infrared spectrum analysis is presented. Using an indirect relative analysis method and through a lot of experiments we established the base model of the relationship between sugar solution spectra and its quality parameters. Based on the base model, we accurately obtained different concentrations of sugar solution. The source used is a stabilized white light, which gives different wavelengths. An experiment was conducted to monitor changes in spectra of sugar solution. The transmission peak was identified at 1 406 nm. Experimental results show that the measured value and the true value very consistent. The measurement sensitivity can be 0.05%, and absolute error is 0.002%.

Key words: liquid concentration; measurement; near-infrared; spectral analysis

引 言

由于近红外光具有良好的传输特性, 且其仪器较简单、非破坏性和样品制备量小、几乎适合各类样品(液体、黏稠体、涂层、粉末和固体)分析, 同时具有分析速度快且可多组分多通道同时测定等特点, 从而得

收稿日期: 2014-04-11

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61201447)

作者简介: 张 娜(1977-), 女, 讲师, 硕士, 主要从事精密光学测量与传感技术方面的研究。E-mail: zn_dd@163.com

到广泛应用。近几年,随着近红外光谱分析技术与计算机技术、化学计量技术以及光纤的有机结合,与传统的方法相比较具有无损、无污染、准确、快捷等特点,广泛应用于石油化工、医药、烟草、食品生产、农业生产等领域^[1-4]。液体浓度是反映液体特征的一个非常重要的参量,对它的测量具有十分重要的意义^[5-8]。在食品卫生、工业生产等领域,液体浓度的在线检测是一个重要的技术环节。本文基于近红外光谱分析技术实现了糖溶液浓度的在线检测,整个实验装置简单、价格低廉、易于操作、分辨率高。

1 近红外光谱分析原理

近红外是波长在 780~3 000 nm 范围的电磁波,对植物十分敏感。现代近红外光谱(NIR)分析技术是近年来分析化学领域迅猛发展的高新分析技术。

近红外光谱是由物质吸收光能使分子振动从基态向高能级跃迁时产生的,记录的是分子中单个化学键的基频振动的倍频及和频信息,它受含氢基团 X-H(X=C,N,O)的倍频与和频的重叠主导。实验所用的蔗糖为二糖,分子式 $C_{12}H_{22}O_{11}$,化学结构主要由 C-H 基、O-H 基组成,具有明显的光谱特性,基团的吸收频谱表征了这些成分的化学结构。选用连续改变频率的近红外光照射蔗糖样品时,由于试样对不同频率近红外光的选择性吸收,可得到蔗糖溶液的光谱图。实验前,首先建立近红外光谱和蔗糖样品的化学组分之间的定量模型,再向模型库中输入蔗糖样品的近红外光谱信息,从而能够确定蔗糖样品的质量参数。

光源辐射出的待测元素的特征光谱被样品蒸汽中待测元素的基态原子所吸收,根据发射光谱被减弱的程度,进而求得样品中待测元素的含量,其符合朗伯-比尔定律,可表示为:

$$A = -\lg(I/I_0) = -\lg T = KCL \quad (1)$$

式中, I 为透射光强度, I_0 为发射光强度, T 为透射比, K 为溶液的消光系数, C 为溶液浓度, L 为光通过原子化器光程。由于 L 是不变值,所以 $A=KC$ 。

2 实验装置及结果

实验装置示意图如图 1 所示。为了达到整个实验系统功耗低、体积小要求,选取美国海洋光学的 HL-2000-B 型卤钨灯作为光源,能够发出稳定的不同波长的光,光谱仪的波长范围为 350~1 800 nm。传输光纤采用 Comm-Scope 5200 004A SRYL 型光纤,其纤芯的折射率 $n=1.52$,直径 $D=9 \mu\text{m}$,光谱图通过计算机显示。

本实验以梨的果肉切片为实验对象,通过干燥脱水的过程可以得到不同浓度的糖溶液,通过测量不同浓度下光谱的变化可以得到糖溶液的浓度值。每个梨果肉样本采集 5 次光谱,取平均光谱值待用。梨果肉样本光谱扫描时间为 30 ms,扫描次数为 10 次。实验结果显示在脱水处理过程中光谱的吸收带在 1 406 nm 附近,在这个波长范围接收到的光强大大衰减,在糖溶液浓度高于 45% 以后,光谱吸收带大约在 1 430 nm 并趋于稳定。实验结果如图 2 所示。

实验通过烘干得到不同浓度的糖溶液,分别选取 20%、30%、40% 3 个浓度值显示其光谱图。由图可得,不同浓度的糖溶液在 1 406 nm 波长处接收光强衰减最大,几乎减半,可见该实验对象的光谱灵敏带在 1 400 nm 左右。由于采用了近红外光谱分析技术,通过测量光谱图可以得到溶液的浓度值。表 1 为测量所得的 8 组浓度值与标准值及绝对误差。由表 1 可得,该光谱分析法所得的糖溶液浓度测量值与标准值十分相符,在小浓度下测量灵敏度达到 0.05%,绝对误差仅为 0.002%。

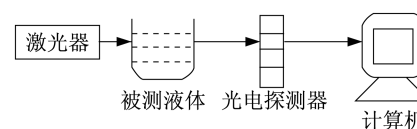


图 1 实验装置示意图

Fig. 1 Experimental setup

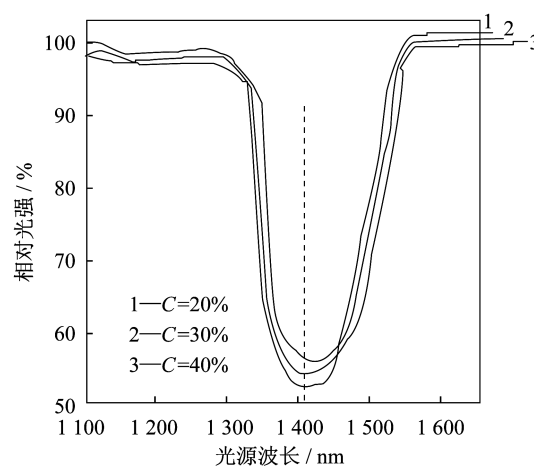


图 2 梨果肉溶液光谱图

Fig. 2 Spectra of pear fleshes solution

图3为糖溶液在光源波长为1406 nm时测量值与标准值对比图。图中实线表示测量值与标准值之间的理想关系,小圆点表示测量所得浓度值,每组测量值取10点平均值,由图可得,测量值与标准值十分相符。

表1 糖溶液浓度测量表及绝对误差
Tab.1 Measured value and absolute error of sugar solution concentration %

标准值	测量值	绝对误差
0.05	0.051	+0.001
0.10	0.101	+0.001
0.15	0.152	+0.002
0.20	0.198	-0.002
0.25	0.250	0
0.30	0.300	0
0.35	0.351	+0.001
0.40	0.401	+0.001

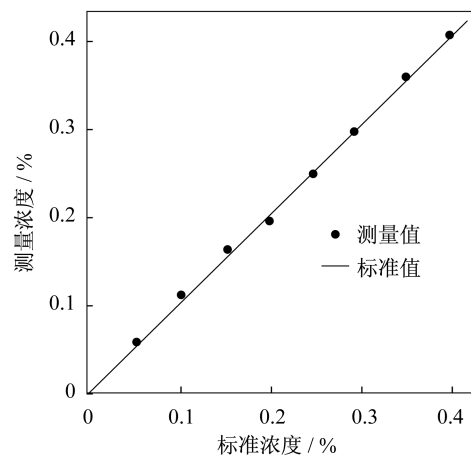


图3 实验结果图

Fig.3 Results of sugar concentration

3 结论

本文基于强度调制原理以及近红外光谱分析技术实现了梨果肉浓度的精确测量。测量前利用统计分析的方法在样品待测参数值与近红外光谱数据之间建立一个关联模型,通过被测样品光谱图的测量,可以得到被测样品的浓度值,即通过间接分析法测量糖溶液的质量参数。实验结果表明,测量值与标准值十分相符。该方法快速、准确、方便,可用于糖溶液浓度的在线检测及质量分析。该方法将应用于食品生产,从而实现工业化生产。

参考文献:

- [1] 王云,徐可欣,常敏. 近红外光谱技术检测牛奶中脂肪及蛋白质含量校正模型的建立[J]. 光学仪器, 2006, 28(3): 3-7.
- [2] 赵珂,熊艳,赵敏. 基于近红外光谱技术的脐橙快速无损检测[J]. 激光与红外, 2011, 41(6): 649-652.
- [3] 丁佳,张树群,黄泳,等. 高精度数据采集系统在近红外光谱测量仪中的应用[J]. 光学仪器, 2009, 31(1): 35-39.
- [4] 董若琰,王锡昌,刘源,等. 近红外光谱技术快速无损测定带鱼糜及其制品中磷酸盐含量[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(6): 1542-1546.
- [5] 张娜,何燕,张彦,等. 基于菲涅尔反射的液体浓度精确测量系统[J]. 光学技术, 2012, 38(5): 598-601.
- [6] 李志全,乔淑欣,蔡亚楠,等. 基于多孔硅 Bragg 反射镜的液体浓度测量方法[J]. 光学技术, 2006, 32(6): 863-868.
- [7] 荣民,张连水. 光纤光栅传感器检测液体浓度[J]. 激光与光电子学进展, 2008, 45(5): 65-68.
- [8] KRISHNA V, FAN C H, LONGTIN J P. Real-time precision concentration measurement for flowing liquid solutions[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2000, 71(10): 3864-3869.