

基于虚拟仪器的谷物成分近红外检测仪设计与试验*

尹慧敏¹ 吴文福² 付瑶³ 张亚秋² 刘兰涛²

(1. 吉林农业大学工程技术学院, 长春 130118; 2. 吉林大学生物与农业工程学院, 长春 130025;
3. 吉林大学数学科学学院, 长春 130012)

【摘要】 结合近红外光谱分析技术和虚拟仪器技术,设计了多波段谷物成分近红外检测仪。该仪器采用漫反射原理,由光路系统、电路系统和软件系统组成。卤钨灯发出的全波谱光被调频后,由滤光片形成扫描光谱,然后被样品吸收漫反射后的近红外光由检测器接收并转换为电信号,经调理后最终被采集卡送入计算机中作进一步处理。在制备26个样品的基础上,进行了系统性能测试。试验结果表明,仪器的噪声水平低,重复性相对较差,对预测的准确度还不理想,通过多次重复装样检测平均值可提高准确性。该仪器可以用于测定谷物样品中的蛋白质、淀粉和脂肪等多种成分。

关键词: 谷物 成分 近红外光谱分析仪 虚拟仪器技术
中图分类号: S237 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2010)05-0115-05

Design and Test of Near Infrared Detector for Grain Component
Based on Virtual Instrument

Yin Huimin¹ Wu Wenfu² Fu Yao³ Zhang Yaqiu² Liu Lantao²

(1. College of Engineering Technology, Jilin Agricultural University, Changchun 130118, China
2. College of Biological & Agricultural Engineering, Jilin University, Changchun 130025, China
3. College of Mathematics, Jilin University, Changchun 130012, China)

Abstract

Combining near infrared spectroscopy technology with virtual instrument technology, a multi-band near infrared detector for grain component was developed. Adopted diffuse reflection principle, the instrument is composed of optical system, circuit system and software system. The working process is as the follows: being frequently modulated, the full spectrum light issued by halogen light was transformed into the scan spectra via the scanning spectral filter through the sample diffuse reflectance, then it was converted to electrical signals after being received by the detector. After that, a conditioning conversion was adopted, and finally it was sent to computer by the acquisition card for further processing. A system-testing was performed based on the 26 prepared samples. Test results showed that the equipment has low noise level, inferior reproducibility, and the forecast-accuracy is not very good. But the accuracy can be improved by way of measuring average after loading repeatedly. The instrument can be used for measuring many ingredients in the grain samples, such as protein, starch and fat.

Key words Grain, Componet, Near infrared spectrometer, Virtual instrument technology

引言

近红外区域是指波长在 780 ~ 2 526 nm 范围内

的电磁波^[1]。近红外光谱(NIR)分析是利用近红外光谱区包含的物质光谱信息,进行有机物质定性和定量分析的一种分析技术,具有无损、高效、样品无

收稿日期: 2009-07-10 修回日期: 2009-09-04
* 吉林省科技发展计划国际科技合作项目(20080721)
作者简介: 尹慧敏,助教,主要从事农业信息化技术研究, E-mail: yhm_jlau@126.com
通讯作者: 吴文福,教授,博士生导师,主要从事农业机械测控与控制、农产品加工技术和智能机械研究, E-mail: wwflzb@126.com

需前处理等特点^[2~3]。

近年来我国在 NIR 仪研制和生产方面取得了一定成绩,但是一些关键的技术指标与国际先进水平相比还存在很大的差距,如信噪比、重复性等^[4]。NIR 分析属于微弱信号与多元信息的处理,对复杂样品进行分析就是从复杂、重叠和变动的光谱中提取微弱信息,难度很大^[5]。目前对该信号的提取广泛采用滤波和锁相放大两种方法^[6~7],前者效果不理想,后者研发困难,且成品价格昂贵。而虚拟仪器技术能够实现部分硬件的软件化^[8],可以很好地解决这个问题,并且能够缩短软件的开发周期。本文从仪器的实际应用出发,开发一套基于虚拟仪器的谷物成分近红外检测仪,并用配置的样品对样机进行性能测试。

1 系统方案设计

图 1 为 JD-NIR-01 型谷物成分近红外检测仪的系统结构图。本仪器使用单片机作为控制中心,完成对步进电动机的控制,达到对全谱照射光的斩波调制和形成光谱扫描,以及样品池的旋转。光源发出的光经斩光片、滤光片到达样品池,漫反射光被检测器收集转化为电信号,通过采集和调理处理后,经数据采集卡采集进入计算机作最后处理,得出所需检测成分的含量。温度传感器采集的温度由单片机经串口通讯送入计算机,用于对仪器进行温度补偿。

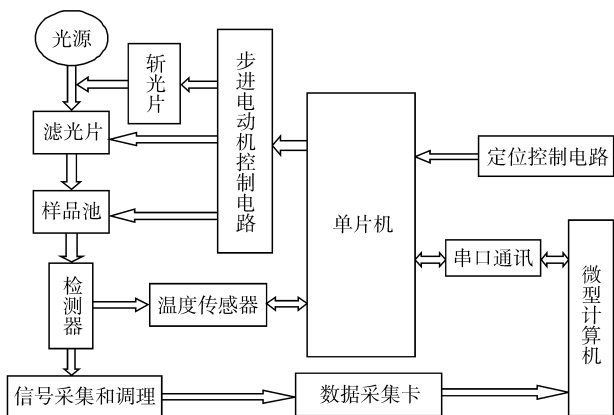


图 1 系统结构框图

Fig. 1 Diagram of the system structure

为了高效、快速地完成仪器的开发,上位机利用图形化高级程序设计语言 LabVIEW 进行开发。

2 硬件系统设计

2.1 光路设计

光路系统主要由卤钨灯、滤光片和斩光片等组成。卤钨灯光通过近红外窄带干涉滤光片形成单色后垂直照射到样品上,被吸收漫反射后由检测器接

收。

仪器共有 9 个窄带干涉滤光片,带宽为 10 ~ 20 nm,其中参考波长的中心波长为 2 237.8 nm,检测波长的中心波长为:2 175.9、1 710.8、1 676.5、1 759.6、2 090.4、2 134.4、1 811、2 050 nm,将其分别编号为 1 ~ 8。这 9 个滤光片均匀分布在滤光盘圆周上,步进电动机带动滤光盘转动形成扫描光谱,而斩光片则将光调制为频率域的光。卤钨灯架为角度可调节式,这种结构可以减小机械制造的误差,保证近红外光可以垂直照射样品;检测器与入射光成 45°角,用来消除镜面反射造成的影响。斩光片上有 9 个均匀排布的圆孔,通过斩光片的转动将连续光切割为定频率的交变光信号,以便对检测器转化的电信号进行收集和去噪。

2.2 仪器驱动电路

本系统步进电动机脉冲分配器选用的是 AT89C2051,它是由 ATMEL 公司推出的一种小型单片机,其主要特点是采用了 Flash 的存储技术,其软件、硬件与 MCS-51 完全兼容,便携,省电;驱动电路主要由 TIP122 构成,功能是增强电流驱动能力。

为了保证滤光片准确定位,必须采用定位控制电路。本系统中选用光敏三极管和点激光实现定位。

2.3 信号调理电路设计

信号调理电路如图 2 所示。检测器选择在长波近红外区敏感的 PbS 型光电池。由于光电池产生的短路电流与光强有良好的线性关系,通过 I/V 转换、低通滤波和二级放大后,可得到数据采集卡采集范围内的电压。

2.4 数据采集卡

本系统采用的是 NI 公司生产的微机系统扩展卡形式的数据采集卡,型号是 PCI-6070E,以及它的附件 SCB-68。其中 SCB-68 是屏蔽式 I/O 接线盒,用来将 PCI 卡上的引脚引到主机外面以方便连线。

本系统使用 2 个单端模拟输入通道对光谱信号和控制采集信号同时采集。

3 软件系统设计

软件分为上位机和下位机程序。下位机程序负责控制光路结构的运转、光谱信息采集控制信号的生成以及温度的采集并将其通过串口通讯传送给上位机,用汇编语言进行编写;上位机程序负责采集光谱信息并进行分析运算,采用 LabVIEW 编写。这里主要介绍上位机程序的编写。

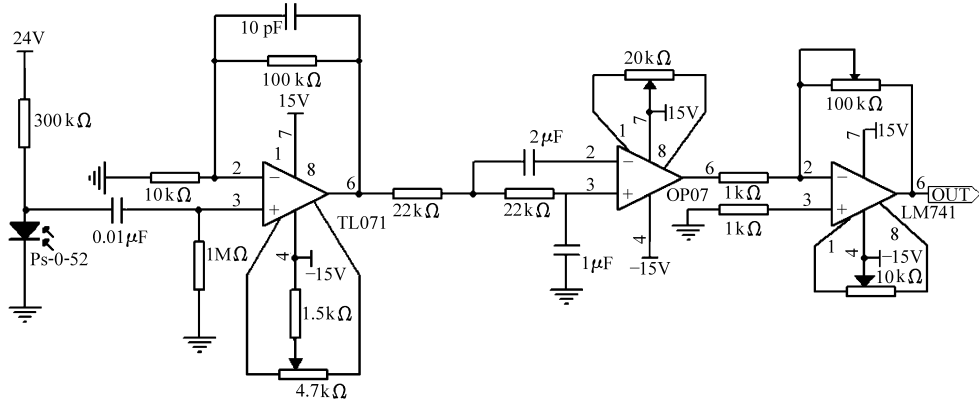


图 2 信号调理电路

Fig. 2 Signal conditioning circuit

3.1 程序前面板设计

前面板是图形用户界面,通过操作该面板按钮可以完成需要的任务。该面板主要由初始化设置、数据和图形显示等组成,可以进行物理通道、工作方式、数据存储位置、低通截止频率等的选择,可以直接显示样品反射光谱,也可以显示样品在不同波长近红外光的照射下的吸收光强等,如图 3 所示。

3.2 程序框图设计

根据仪器本身特性,在程序设计时采用了顺序结构,分为 3 帧,分别为数据采集以及初步处理、数据拆分组、样品吸光度及含量计算。由于整个程序很大,这里只给出数据采集部分的程序框图。

系统采用的是 NI 公司的采集卡,该卡支持 DAQmx 驱动程序,所以设计时可以直接使用 DAQmx-Data Acquisition 函数开发。数据采集程序主要是物理通道的选择,采样模式、采样率、每通道采样数、输入方式的配置,采样范围等基本参数的设置。程序框图如图 4 所示。

在软件设计中采用函数/信号调理/波形调理中的滤波器函数对光谱信号进一步除杂,这个函数可以根据需要选择滤波器类型、截止频率、拓扑结构等,能够达到非常好的滤波效果。

4 试验

仪器软、硬件设计和调试结束后,首先对样品进

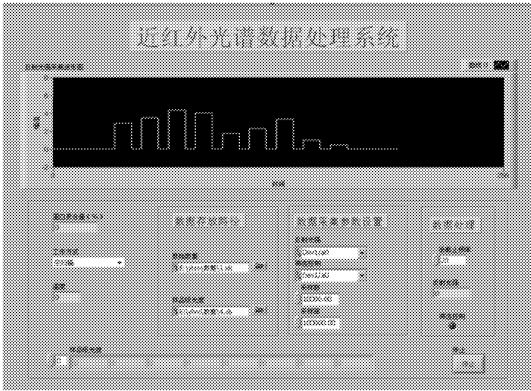


图 3 仪器前面板

Fig. 3 Virtual instrument front panel

行扫描,然后选取各个定标波长组合下多元线性回归模型中所得出的检验相关系数最大的定标模型所对应的波长组合为最优波长,最后建立 BP 神经网络模型。

样品由淀粉和蛋白粉按比例混合均匀按梯度配制而得,其中 20 个样品作为训练集,剩余样品作为检验集。

4.1 样品光谱

已知一组样品(26 个样品)的蛋白含量,在本仪器上先扫描空白,然后装样,扫描样品得到吸光度谱。将采集的信号转化成反射吸光度的方法为

$$A = \lg(1/R_{\infty}) = \lg(I_R/I_S)$$

式中 A ——漫反射吸光度 R_{∞} ——漫反射率

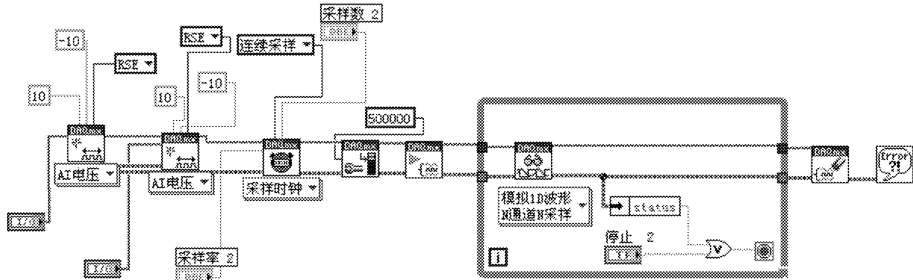


图 4 数据采集程序框图

Fig. 4 Program block diagram of data acquisition

I_R ——参考波长反射光强度
 I_S ——检测波长反射光强度

从图 5 样品集吸收光谱可以看出,每个样品的吸收光谱曲线形态相似,具有良好的规律性。

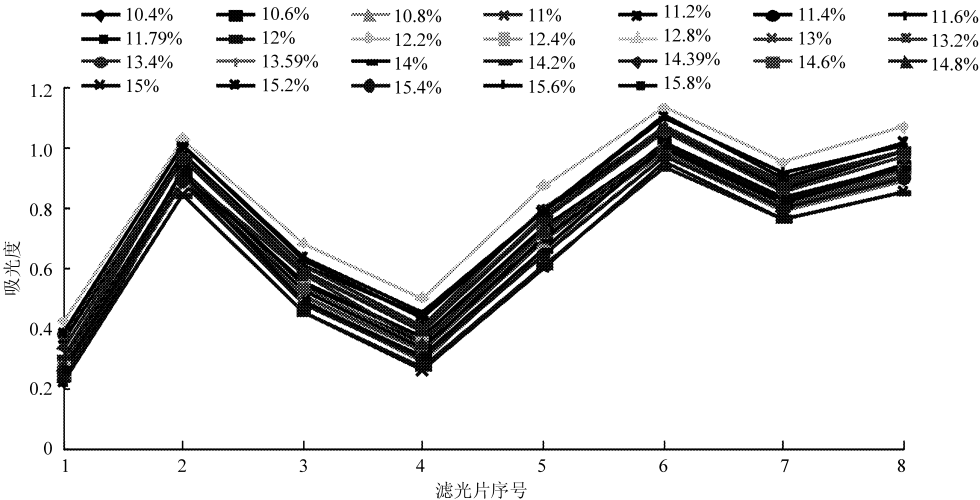


图 5 样品集吸收光谱
Fig. 5 Absorption spectrum of samples

4.2 模型的建立

采用枚举法以不同近红外光的吸收度与蛋白质含量对样品建立多元线性回归模型,最终确定当选取 1、3、4、8 滤光片后的近红外光所建立的模型对检验集进行预测效果最佳,相关系数 $R = 0.707$ 。

使用 DPS 软件对优选出的最佳波段建立 BP 神经网络模型,确定隐含层数目为 2,输入层节点数为 4,根据经验值和系统训练结果的比较确定第一隐含节点数为 16,第二隐含节点数为 10,最小训练速率为 0.1,动态参数为 0.6,sigmoid 函数的参数为 0.9,允许误差为 0.000 000 1,迭代次数为 20 000,数据转换为标准化变换。

最终得到的 BP 神经网络的拟合残差为 8.77×10^{-6} ,训练集和检验集中化学值和预测值的预测相关系数分别为 0.994 和 0.996。

由上可知,在采用分光元件实现光谱扫描的近红外光谱分析仪器中使用多元线性回归方法进行波长优选,然后采用 BP 神经网络模型,有助于提高模型检测精度。

4.3 系统测试

主要从噪声水平、重复性和准确性 3 方面对仪器性能进行说明。

(1) 噪声水平

仪器在不改动任何条件的情况下,重复 10 次采集光谱,取其中信号相对较强的 3 个波长,记录采集到的反射光强,得到的反射光强及统计结果见表 1。

(2) 重复性

取两个样品,每个样品先测量空白,然后连续测量 10 次,记录 10 次的吸光度谱,代入蛋白质模型,计算蛋白质含量。检验仪器的重复性,表 2 是试验

得到的数据。

表 1 噪声水平试验结果
Tab.1 Test results of noise level

试验序号	波长/nm		
	1 676.5	1 710.8	2 175.9
1	2.654 182	3.042 273	3.253 091
2	2.664 818	3.032 727	3.251 364
3	2.664 636	3.033 273	3.263 545
4	2.655 818	3.032 091	3.268 182
5	2.666 545	3.041 091	3.269 000
6	2.645 684	3.042 123	3.259 710
7	2.665 480	3.043 970	3.246 890
8	2.666 050	3.032 620	3.259 490
9	2.669 410	3.029 110	3.269 270
10	2.666 920	3.046 740	3.269 230
最大值	2.669 410	3.046 740	3.269 270
最小值	2.645 680	3.029 110	3.246 890
极差	0.023 72	0.017 630	0.022 380
均值	2.661 950	3.037 600	3.260 980

表 2 重复性试验结果
Tab.2 Test results of repeatability %

试验序号	样品 1	样品 2	试验序号	样品 1	样品 2
1	13.64	12.89	9	13.47	12.67
2	13.45	12.69	10	13.56	12.99
3	13.76	12.76	最大值	13.76	13.11
4	13.29	13.11	最小值	13.29	12.67
5	13.47	12.67	极差	0.47	0.44
6	13.45	12.69	平均值	13.51	12.85
7	13.76	12.76	相对误差	3.7	3.42
8	13.29	13.11			

(3) 准确性

取一样品再重新检测 5 次,每次重新装样,验证

检测结果的准确度。表 3 为试验得到的数据。

表 3 准确性试验结果
Tab.3 Test results of accuracy %

试验序号	化学值	预测值	偏差	相对误差
1	13.59	14.01	0.42	3.09
2	13.59	13.28	0.31	2.28
3	13.59	14.17	0.58	4.27
4	13.59	13.39	0.20	1.47
5	13.59	13.73	0.14	1.03

从表中得到预测值均值为 13.72%，平均偏差为 0.33%，平均相对误差为 2.43%。

(4) 误差分析

噪声水平和重复性试验是在同一次装样的条件下得到的,而准确性试验是将样品重新装样检测后,进行预测得到的。从试验可以看出本系统的噪声水

平低,重复性较差,对预测的准确度还不理想,这主要是由于不同次装样导致实际光程和样品的松紧程度不同所造成的,但是采用多次重复装样检测,最后取均值能提高样品含量的预测准确性。

5 结束语

结合 NIR 技术和虚拟仪器技术,搭建了一个近红外谷物成分检测仪器。用户可以根据需求建立不同粮食的预测模型,从而达到对多种成分的同时检测。该系统利用计算机丰富的软件资源,实现了部分硬件的软件化,简化了仪器结构,缩短了仪器的开发周期。该仪器调试、扩展和维护方便,人机界面友好,增加了系统的灵活性,能直接实时地对测试数据进行分析 and 处理。通过试验证明仪器性能稳定,可以用于测定粮食样品中的蛋白质、淀粉和脂肪等多种成分。

参 考 文 献

1 陆婉珍. 现代近红外光谱分析技术[M]. 北京:中国石化出版社,2000.

2 严衍禄,赵莲蓬,韩东海,等. 近红外光谱分析基础与应用[M]. 北京:中国轻工业出版社,2005.

3 孙旭东,章海亮,欧阳爱国,等. 南丰蜜桔可溶性固形物近红外特征波段选择[J]. 农业机械学报,2009,40(7):129~132.
Sun Xudong, Zhang Hailiang, Ouyang Aiguo, et al. Selection of NIR characteristic wavelength bands for soluble solids content in Nanfeng mandarin fruit[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2009,40(7):129~132. (in Chinese)

4 徐广通,袁洪福,陆婉珍. 现代近红外光谱技术及应用进展[J]. 光谱学与光谱分析,2002,20(2):134~142.
Xu Guangtong, Yuan Hongfu, Lu Wanzhen. Development of modern near infrared spectroscopic techniques and its applications[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2002, 20(2):134~142. (in Chinese)

5 向贤毅,温志渝,龙再川,等. 微型近红外光谱仪分析系统的研制[J]. 光谱学与光谱分析,2009,29(8):2 286~2 290.
Xiang Xianyi, Wen Zhiyu, Long Zaichuan, et al. Research on the near-infrared spectrometer system[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009,29(8):2 286~2 290. (in Chinese)

6 占细雄,林君,周志恒. 近红外光谱仪中的微弱信号检测技术[J]. 仪器仪表学报,2002,23(3):29~31.
Zhan Xixiong, Lin Jun, Zhou Zhiheng. The technique of acquiring weak signal in NIR spectrometer[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2002,23(3):29~31. (in Chinese)

7 修连存,郑志忠,陈春霞,等. 国产便携式近红外药品分析仪原理及其应用[J]. 现代科学仪器,2008(4):120~123.
Xiu Liancun, Zheng Zhizhong, Chen Chunxia, et al. Principle and application of domestic portable near infrared medicine analyzer[J]. Modern Scientific Instruments, 2008(4):120~123. (in Chinese)

8 梁晓艳,吉海彦. 基于 LabVIEW 的近红外测量系统[J]. 微计算机信息,2008,24(1~2):100~101.
Liang Xiaoyan, Ji Haiyan. The measuring system of NIR based on virtual instrument[J]. Microcomputer Information, 2008, 24(1~2):100~101. (in Chinese)

(上接第 67 页)

11 NUMECA int. User manual[M]. 2006, 7A. Brussels; NUMECA International.

12 Deb K. Multi-objective optimization using evolutionary algorithms[M]. Chichester, U. K: John Wiley & Sons, 2001.

13 Farina M, Deb K, Amato P. Dynamic multiobjective optimization problems: test cases, approximations, and applications [J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2004, 8(5): 425~442.

14 田辉. 离心泵内部流动数值计算及叶片型线优化设计[D]. 西安: 西安交通大学,2008.
Tian Hui. Numerical simulation of the flow in centrifugal pump and the blade profile optimization[D]. Xi'an: Xian Jiaotong University, 2008. (in Chinese)