

# 使用紫外-可见光纤光谱仪检测水质

## 1. 引言

水质在线监测是实现水环境保护、饮用水安全保障与报警、污水处理和污染物排放控制、水资源管理等方面的重要基础和有效手段。近年来,随着对水质监测实时性和监测频率要求的逐步提高,传统实验室手动分析已很难满足监测需求,使得光谱在线监测系统得到了快速发展。基于光纤光谱仪的紫外-可见(UV-Vis)光谱技术检测水质参数具有检测速度快、成本低、无二次污染、可实现在线原位测量等优点,在水质快速检测、多参数分析、水质分类和水质报警等领域都具有传统方法不可替代的优势。近年来越来越多的仪器仪表厂家加入进来。

紫外可见光谱法检测水质的基本原理有两类,一类是比尔-郎伯定律,不同的化合物有不同的吸收光谱,含有苯环或耦合双键的有机物以及特定无机物在紫外-可见波段有较强的吸收峰。结合主成分分析、偏小二乘和神经网络等算法,来分析水样的特征吸收,进而可以对水样所含组分进行定性与定量分析。另一类是基于颗粒物光散射理论。

目前基于紫外-可见光纤光谱仪的水质检测系统主要用于监测水体硝酸盐、化学需氧量 COD、生化需氧量 BOD、总悬浮物 TSS、总有机碳 TOC 和浊度等参数,该系统经常作为一种标准测量方法的替代方案。需要注意的是,基于紫外-可见光纤光谱仪的光谱测量模块不能满足所有水质参数测量需求,一般被用作一个子模块,和其他水质测量模块协同工作。

## 2. 系统组成介绍

在水质光谱在线检测领域，一个功能齐全的光谱模块通常包含四部分：光源、光路、光谱仪及上位机分析软件。

光源一般采用脉冲式氙灯，这是出于设备成本、稳定性以及自动化程度等方面的考虑，相比于氙灯、紫 LED 等其他光源，脉冲式氙灯的寿命、稳定性和成本都具有优势，并且紫外波段光谱连续。海洋光学为用户提供了两种脉冲式氙灯光源，一种是标准的 PX-2 型脉冲氙灯，它是一个紫外（波长 220 ~ 750nm）的高闪光速度、短弧的氙灯，适用于需要测试光的吸收与反射，或观察荧光和磷光的场合，特别用于对光或热不稳定的样品的测试。PX-2 型脉冲氙灯的操作速度可达 220Hz，并可直接由软件控制实现。PX-2 型脉冲氙灯配有 15 针的接头，可以将其与光谱仪连接起来。PX-2 型脉冲氙光源还配有一个 SMA905 连接器，可以连接海洋光学公司的微型光纤光谱仪及其它光纤组件，如光纤、试管支架、探测器和其它取样组件。用户还可以另外购买配合 PX-2 型脉冲氙灯使用的 CUV-FL-DA，它是一个直连的试管配件，可用于吸光率和荧光的测试，下图 1 是 PX-2 型脉冲氙灯照片，它的光谱输出特性如图 2 所示。另一种氙灯是迷你型脉冲式氙灯。



图 1 PX-2 脉冲式氙灯

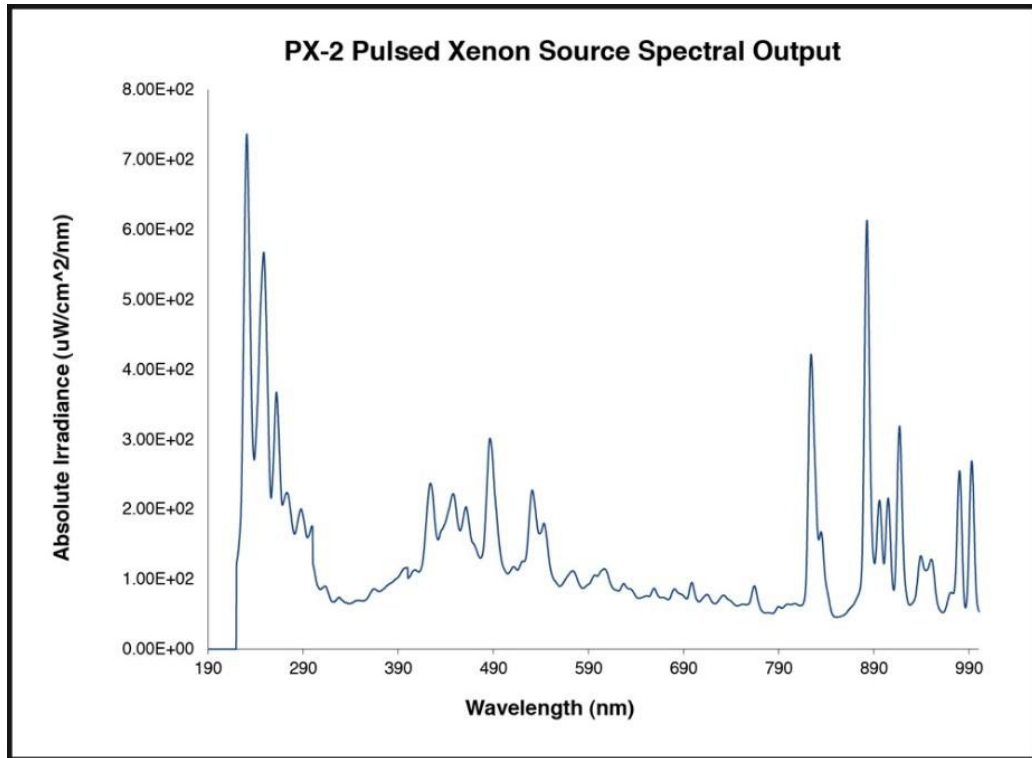


图 2 PX-2 氙灯输出光谱图

光谱仪是整个光谱检测模块的核心，海洋光学有多种系列的光谱仪，可以全方位的满足客户需求，这里特别介绍一款工业用光谱仪-PC3000。PC3000 光谱仪具有与 USB 系列光谱仪相当的光学性能，兼具 USB 系列光谱仪的成熟性和 Flame 系列光谱仪的稳定性。该光谱仪采用非对称交叉 Czerny-Turner 光路，搭载 2048 像素的 Sony ILX511B 线阵型 CCD 传感器和高性能处理器，可测波长范围为 200nm-1100nm。该光谱仪的最小积分时间可达到 1 毫秒，满量程信噪比达 250:1。下表是 PC3000、USB2000+以及 Flame 光谱仪的性能对比。

表 1-1 PC3000、USB2000+、Flame 对比表

项目	PC3000	USB2000+	Flame
光路设计	Czerny-Turner	Czerny-Turner	Czerny-Turner
波长范围	350-1000nm	350-1000nm	350-1000nm
信噪比	250:1	250:1	250:1
动态范围	1300:1	1300:1	1300:1
温度稳定性 (pixel/°C)	0.02	0.2	0.03
LCH 计算速度	~0.5ms	~5ms	~2ms
接口	以太网	USB2.0	USB3.0

为满足工业应用对通信稳定性的要求，海洋光学将传统的 USB 接口改进为以太网接口，具备更高的传输速率和更好的可靠性，光谱仪通过屏蔽双绞线和以太网交换机与系统服务器连接，可直接将测试数据提交给系统服务器；对外观、散热和安装方式进行改进，以便于安装在机柜内。

上位机软件用于光谱仪控制、数据采集与处理。为适应工业恶劣环境，上位机软件在通讯、调度、数据计算与界面方面都必须特别考虑，海洋光学在此有丰富的经验。下面是一个工业软件设计构造，它有 5 个模块组成：

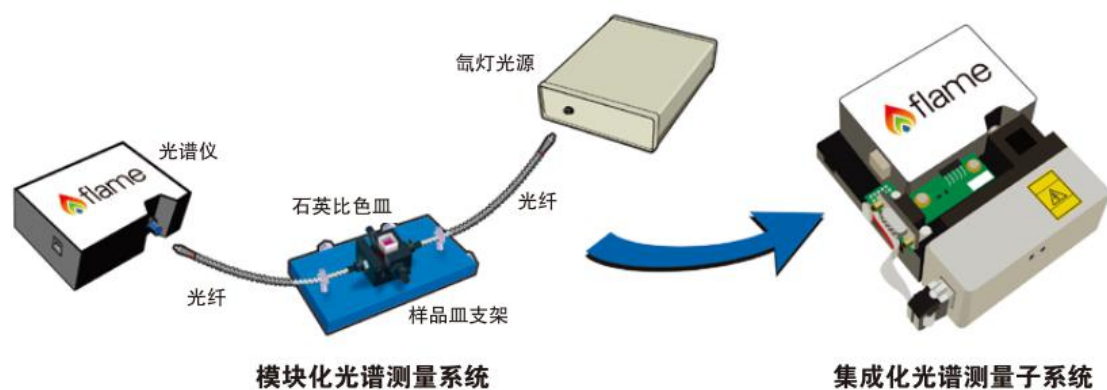


图 3 工业软件设计示例

- 调度模块：为主程序核心，主要负责承担各模块之间的管理及任务调度；
- 通讯模块：主要负责与工业现场总线的通讯，解析通讯命令，并通过调度模块完成相关任务，如启动测量过程，读取测量数据等；
- 计算模块：计算光谱数据；
- 底层驱动：主要控制光谱仪、光源、电子快门、传动模块等硬件设备；
- 测量模块：根据测量时序、流程完成一个完整的测量流程；
- 数据库：主要用于保留系统参数、测量历史数据等信息；
- 用户界面：完成用户交互功能，主要包括系统参数配置，测量数据显示，历史数据浏览，系统功能测试等。

在故障维修与运行维护方面，光源和光谱仪都采用模块化方式安装布置，且均对通道号进行标识，方便找到故障的光源。并且配套的通过交换机及光谱仪上的状态指示灯可了解是否存在网络线缆故障。软件也能够识别光源故障。

下图是一个集成模块的示例，该模块集成了实验室吸光度测量的光源、光谱仪和光路部件，并带有标准的 USB 和串口控制输出端，可以由上位机软件直接控制。整个模块体积小巧，结构齐全。可以直接用于吸光度测量，其中光路部分也可以方便的改造成在线流通管道形式，以将整个模块嵌入整套水质测量系统中。



### 3. 结语

工业光谱水质检测迥异于实验室环境，工业环境下，在线光谱分析系统必须充分考虑应用环境的特殊性，各种影响因素都必须仔细评估。除了光谱仪，整个模块及其测量附件的选择在相当程度上取决于光谱仪厂家的行业应用经验和水平，这一点在专用的在线分析系统开发方面体现的更为明显。海洋光学在该领域丰富的开发经验将为客户提供高价值的解决方案。