



(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 108426845 A
(43)申请公布日 2018.08.21

(21)申请号 201810357588.4

(22)申请日 2018.04.20

(71)申请人 中国科学院地球化学研究所
地址 550081 贵州省贵阳市观山湖区林城西路99号

(72)发明人 白晓永 李汇文 操玥 吴路华
陈飞 王明明 杨钰杰 李朝君
田诗琪

(74)专利代理机构 贵阳中新专利商标事务所
52100
代理人 商小川

(51)Int.Cl.
G01N 21/31(2006.01)

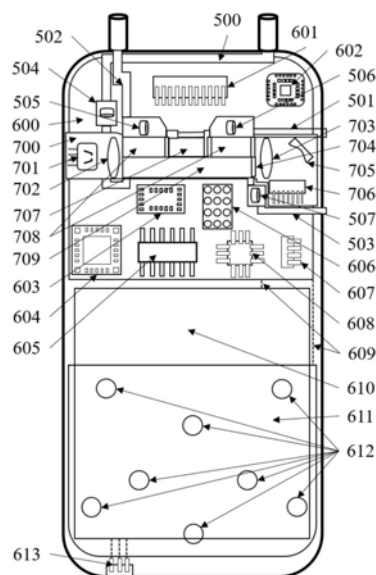
权利要求书1页 说明书5页 附图2页

(54)发明名称

一种便携式在线全光谱水质监测仪

(57)摘要

本发明公开了一种便携式在线全光谱水质监测仪,标准液样输入端与标准液样传输管连接,标准液样传输管与标准液样存放室连接;待测液样输入端与待测液样传输管相连,待测液样传输管与待测液样存放室连接;脉冲氙灯光源激发全光谱经过全光谱光路通道分线透镜后的透射下,经过透射光谱通路选择器和透射光谱聚焦透镜聚焦,再由光谱反光镜投射到光谱感光元件,经由光谱感光元件识别数字化光谱信息后存储在数据存储元件ROM;解决了现有技术监测过程复杂,精度也无法统一,不能进行实时多参数同时测定和可视化等问题。



1. 一种便携式在线全光谱水质监测仪,它包括标准液样输入端(101)和待测液样输入端(102),其特征在于:标准液样输入端(101)与标准液样传输管(500)连接,标准液样传输管(500)与标准液样存放室(709)连接,脉冲氙灯光源(701)激发全光谱经过全光谱光路通道分线透镜(702)后的透射下,经过透射光谱通路选择器(704)和透射光谱聚焦透镜(703)聚焦,再由光谱反光镜(705)投射到光谱感光元件(706),经由光谱感光元件(706)识别数字化光谱信息后存储在数据存储元件ROM(603);待测液样输入端(102)与待测液样传输管(502)相连,待测液样传输管(502)与待测液样存放室(707)连接,脉冲氙灯光源(701)激发的全光谱经过全光谱光路通道分线透镜(702)后的透射下,经过待测液样光谱通道(708)及待测液样存放室(707)后,透过待测液样光谱通道(708),由透射光谱通路选择器(704)选择通道,再由透射光谱聚焦透镜(703)聚焦,经过光谱反光镜(705)投射到光谱感光元件(706),经由光谱感光元件(706)识别数字化光谱信息后存储在数据存储元件ROM(603)。

2. 根据权利要求1所述的一种便携式在线全光谱水质监测仪,其特征在于:脉冲氙灯光源(701)、全光谱光路通道分线透镜(702)、透射光谱聚焦透镜(703)、透射光谱通路选择器(704)、光谱反光镜(705)、光谱感光元件(706)、待测液样存放室(707)、待测液样光谱通道(708)、标准液样存放室(709)均安装在不透光的全密闭箱(700)中。

3. 根据权利要求1所述的一种便携式在线全光谱水质监测仪,其特征在于:全光谱光路通道分线透镜(702)将全光谱光源分成两束,一束由待测液样光谱通道(708)进入待测液样存放室(707)内,一束进入标准液样存放室(709)。

4. 根据权利要求1所述的一种便携式在线全光谱水质监测仪,其特征在于:待测液样输入端(102)用带刻度液样采集软管(800)连接,带刻度液样采集软管(800)的0m刻度方向置于液样中。

5. 根据权利要求1所述的一种便携式在线全光谱水质监测仪,其特征在于:带刻度液样采集软管(800)与待测液样输入端(102)的接口采用螺旋安装法进行安装,带刻度液样采集软管(800)接口外径比待测液样输入端(102)外径大。

6. 根据权利要求1所述的一种便携式在线全光谱水质监测仪,其特征在于:待测液样的光谱信息及测定参数经过显示屏接口模块(601)投射到显示器(200)进行水质的实时可视化;另同时待测液样的光谱信息及测定参数通过数据传输接口(613)输出至计算机。

7. 根据权利要求1所述的一种便携式在线全光谱水质监测仪,其特征在于:待测液样排泄端(103)连接至待测液样排泄管道(501),存储于待测液样存放室(707)内的待测液样经由待测液样排泄输送泵(506)的输送,由待测液样排泄端(103)排出;标准液样排泄端(104)连接至标准液样排泄管道(503),存储于标准液样存放室(709)内的标准液样经由标准液样排泄输送泵(507)的输送,由标准液样排泄端(104)排出。

8. 根据权利要求1所述的一种便携式在线全光谱水质监测仪,其特征在于:液样输入端过滤片接口一(400)、液样输入端过滤片接口二(401)、液样输入端过滤片接口三(402)用于放置对应类型过滤片,过滤片为无纺布过滤膜、PP熔喷滤芯或树脂滤芯,输入端过滤片接口一(400)设有无纺布过滤膜。

一种便携式在线全光谱水质监测仪

技术领域

[0001] 本发明属于水质监测技术,尤其涉及一种便携式在线全光谱水质监测仪。

背景技术

[0002] 目前主流的水质监测方案主要依靠对水的各项指标进行检测,不仅需要去野外从事大量的液样取样工作,劳动强度大,费时费力,并且对于液样的保存条件有很高的要求,不仅需要避免外源物的污染、避免阳光照射,并且需要对样品进行即时测定。而测定结果往往不能即时得出,并且需要较长的测定时间,而在需要测定多个参数时,需要使用到多种仪器和试剂,且监测过程十分复杂,精度也无法统一,不能进行实时多参数同时测定和可视化,然而水质监测却又是关系到各行各业发展必不可少的重要环节。便捷、快速而准确地实时在线测定水质,并对测定结果进行实时可视化输出对于相关领域的发展具有重要的意义。

发明内容

[0003] 本发明要解决的技术问题是:提供一种便携式在线全光谱水质监测仪,以解决现有技术进行水质监测存在的监测过程十分复杂,精度也无法统一,不能进行实时多参数同时测定和可视化等问题。

[0004] 本发明的技术方案是:

一种便携式在线全光谱水质监测仪,它包括标准液样输入端和待测液样输入端,标准液样输入端与标准液样传输管连接,标准液样传输管与标准液样存放室连接,脉冲氙灯光源激发全光谱经过全光谱光路通道分线透镜后的透射下,经过透射光谱通路选择器和透射光谱聚焦透镜聚焦,再由光谱反光镜投射到光谱感光元件,经由光谱感光元件识别数字化光谱信息后存储在数据存储元件ROM;待测液样输入端与待测液样传输管相连,待测液样传输管与待测液样存放室连接,脉冲氙灯光源激发的全光谱经过全光谱光路通道分线透镜后的透射下,经过待测液样光谱通道及待测液样存放室后,透过待测液样光谱通道,由透射光谱通路选择器选择通道,再由透射光谱聚焦透镜聚焦,经过光谱反光镜投射到光谱感光元件,经由光谱感光元件识别数字化光谱信息后存储在数据存储元件ROM。

[0005] 脉冲氙灯光源、全光谱光路通道分线透镜、透射光谱聚焦透镜、透射光谱通路选择器、光谱反光镜、光谱感光元件、待测液样存放室、待测液样光谱通道、标准液样存放室均安装在不透光的全密闭箱中。

[0006] 全光谱光路通道分线透镜将全光谱光源分成两束,一束由待测液样光谱通道进入待测液样存放室内,一束进入标准液样存放室。

[0007] 待测液样输入端用带刻度液样采集软管连接,带刻度液样采集软管的0m刻度方向置于液样中。

[0008] 带刻度液样采集软管与待测液样输入端的接口采用螺旋安装法进行安装,带刻度液样采集软管接口外径比待测液样输入端外径大。

[0009] 待测液样的光谱信息及测定参数经过显示屏接口模块投射到显示器进行水质的实时可视化;另同时待测液样的光谱信息及测定参数通过数据传输接口输出至计算机。

[0010] 待测液样排泄端连接至待测液样排泄管道,存储于待测液样存放室内的待测液样经由待测液样排泄输送泵的输送,由待测液样排泄端排出;标准液样排泄端连接至标准液样排泄管道,存储于标准液样存放室内的标准液样经由标准液样排泄输送泵的输送,由标准液样排泄端排出。

[0011] 液样输入端过滤片接口一、液样输入端过滤片接口二、液样输入端过滤片接口三用于放置对应类型过滤片,过滤片为无纺布过滤膜、PP熔喷滤芯或树脂滤芯,输入端过滤片接口一设有无纺布过滤膜。

[0012] 本发明有益效果:

本发明利用全光谱技术开发了一种便携式在线全光谱水质监测仪,液样中不同物质具有不同的物质结构,因此其所能吸收的能量也不一样,所吸收的光谱也具有不同的特征光谱,因此通过区分由液样透射后的不同光谱特征确定液样中的不同物质类型,通过与标准液样的光谱特征进行对应波段透射光谱强弱对比计算不同物质的具体含量。本发明可以通过与系统自带标准光谱曲线或用户自配标准液样光谱曲线本进行对比计算,实现野外实时在线水质多参数监测,不仅可以在实时记录测量点经纬度的情况下监测不同深度液样的多个参数,并且可以对监测结果进行实时可视化,本发明消除了由于采样带来的劳动成本,降低了水质监测成本,同时监测计算水质的多种参数并实时可视化监测结果,大大缩减了检测时间,有效解决了现有水质监测方案的多种弊端;解决了现有技术进行水质监测存在的监测过程十分复杂,精度也无法统一,不能进行实时多参数同时测定和可视化等问题。

[0013] 附图说明:

图1是本发明正面示意图;

图2是本发明带刻度液样采集软管配件结构示意图;

图3是本发明内部元件组成及分布示意图;

图4本发明充电头配件示意图。

具体实施方式

[0014] 附图中:100-仪器外壳;101-标准液样输入端;102-待测液样输入端;103-待测液样排泄端;104-标准液样排泄端;200-仪器显示屏;300-仪器开关机按键;301-仪器向上选择按键;302-仪器向右选择按键;303-仪器确定选择按键;304-仪器向下选择按键;305-仪器取消或删除选择按键;306-仪器向左选择按键;307-仪器菜单按键;400-液样输入端过滤片接口一;401-液样输入端过滤片接口二;402-液样输入端过滤片接口三;500-标准液样传输管;501-待测液样排泄管道;502-待测液样传输管;503-标准液样排泄管道;504-标准液样输送泵;505-待测液样输送泵;506-待测液样排泄输送泵;507-标准液样排泄输送泵;600-仪器主板;601-显示屏接口模块;602-GPS模块;603-数据存储元件ROM;604-中央处理器CPU;605-随机存取存储器RAM;606-液样输送泵控制器;607-键盘主板管理模块;608-电源管理模块;609-主板间导线;610-锂电池;611-键盘主板;612-键盘主板按键接口;613-充电及数据传输接口;700-不透光全密闭箱;701-脉冲氙灯光源;702-全光谱光路通道分线透镜;703-透射光谱聚焦透镜;704-透射光谱通路选择器;705-光谱反光镜;706-光谱感光元

件;707-待测液样存放室;708-待测液样光谱通道;709-标准液样光谱通路(标准液样存放室);800-带刻度液样采集软管;801-带刻度液样采集软管接口垫片;900-充电器。

[0015] 本实施例提供一种便携式在线全光谱水质监测仪,包括用户可操作的工作界面,该工作界面主要由仪器正面的仪器显示屏200及仪器显示屏200下方多个功能按键组成300-307,用户通过功能按键300-307对仪器显示屏200显示的内容进行操作。此外操作部件还包括仪器顶部的待测液样输入端口102以及标准液样输入端口101,待测液样输入端口102用带刻度液样采集软管800连接,液样采集软管800置于待测液样中,软管0m刻度方向置于液样中,刻度用于反应水管浸入液样的深度,亦即监测水体对应深度的水质参数情况。

[0016] 使用时,将连接好的液样采集软管800置于待测液样中,通过功能按键300-307选择仪器操纵系统中对应的监测模式,读取软管与液样接触面的监测深度刻度,在系统中选择输入对应的深度参数,并开始待测液样的采样,此时液样输送泵控制器606激活待测液样输送泵505进行待测液样的采样工作,待待测液样存放室707完全被液样填满后,采样工作结束,待测液样输送泵505停止工作,仪器激活GPS模块,记录监测点的经纬度参数并记录,开始监测水质参数,仪器激活脉冲氙灯光源,在由脉冲氙灯光源701激发的全光谱经过全光谱光路通道分线透镜702后的透射下,经过待测液样光谱通道708及待测液样存放室707后,透过待测液样光谱通道708,由透射光谱通路选择器704选择通道,再由透射光谱聚焦透镜703聚焦,经过光谱反光镜705投射到光谱感光元件706,经由光谱感光元件706识别数字化光谱信息后存储在数据存储元件ROM603,经由中央处理器CPU604及随机存取存储器RAM605计算分析与标准液样光谱特征差异,计算得到待测液样的水质参数情况,仪器通过显示屏将监测数据进行实时可视化。

[0017] 该仪器的脉冲氙灯光源701能够发出的光谱波长范围为185~2000nm覆盖了红外、可见光、紫外全光谱波段范围。

[0018] 仪器的数据存储元件ROM603、中央处理器CPU604、随机存取存储器RAM605、液样输送泵控制器606、键盘主板管理模块607、电源管理模块608、GPS模块602、显示屏接口模块601均焊接在仪器主板600上,仪器电器元件均由锂电池610供电,锂电池610由充电器900经由充电及数据传输接口613进行充电。

[0019] 对于仪器测定不同深度液样水质参数,是按照如下方式实现的:待测液样输入端102用带刻度液样采集软管800连接,液样采集软管置于待测液样中,软管0m刻度方向置于液样中,刻度用于反应水管浸入液样的深度,亦即监测水体对应深度的水质参数情况,平视带刻度液样采集软管800与液样表面交界处的刻度,即为实测液样深度水质参数。

[0020] 对于带刻度液样采集软管800的安装方式为:带刻度液样采集软管800与待测液样输入端102采用螺旋安装法进行安装,在对齐带刻度液样采集软管800与待测液样输入端102之后,通过旋转带刻度液样采集软管800或者仪器进行对接安装,带刻度液样采集软管800接口外径比待测液样输入端102外径稍大,在接触端有带刻度液样采集软管接口垫片801以防止液样渗漏。

[0021] 进一步的,所述的待测液样输入端口102放置有对应类型过滤片,过滤片包括无纺布过滤膜、PP熔喷滤芯、树脂滤芯,使用人员针对水质的不同参数测定有选择地选择过滤片数量和类型,其中,无论测定任意类型水质参数,输入端过滤片接口一400必须设有无纺布过滤膜,以防固体杂质堵塞仪器内部管道。

[0022] 进一步的,所述的标准液样输入端101为可选操作端元,仪器内部存储有测量好的多参数标准液样对应的光谱曲线,如需对该标准光谱外的其他参数进行测定,则需自行配置新的标准液样,测定其具体参数及对应的全光谱曲线。

[0023] 对于自行配置的标准液样,其具体测定方案为:标准液样输入端101与标准液样传输管500相连,通过受液样输送泵控制器606控制下的标准液样输送泵504输送至标准液样光谱通路(标准液样存放室)709内,在由脉冲氙灯光源701激发的全光谱经过全光谱光路通道分线透镜702后的透射下,经过透射光谱通路选择器704控制由透射光谱聚焦透镜703聚焦,再由光谱反光镜705投射到光谱感光元件706,经由光谱感光元件706识别数字化光谱信息后存储在数据存储元件ROM603,经由中央处理器CPU604及随机存取存储器RAM605计算分析光谱信息与测定标准液样参数关系后建立新的参数模型存储在数据存储元件ROM603以待后续测定液样参数所用。

[0024] 仪器的透射光谱通路选择器704根据用户选择来控制输出的投射光谱来源,若根据仪器自带标准液样数据进行水质参数测定,则透射光谱通路选择器704选择投射由待测液样光谱通道708输出的光谱,若用户需要自行配置测定标准液样参数,透射光谱通路选择器704选择投射由标准液样光谱通路709输出的光谱,选择透过的光谱经由透射光谱聚焦透镜703聚焦投射到光谱反光镜705反射到光谱感光元件706。

[0025] 对于监测后废液的处理方式为:待测液样排泄端103连接至待测液样排泄管道501,存储于待测液样存放室707内的待测液样废液经由待测液样排泄输送泵506的输送,由待测液样排泄端103排出;标准液样排泄端104连接至标准液样排泄管道503,存储于标准液样存放室709内的标准液样废液经由标准液样排泄输送泵507的输送,由标准液样排泄端104排出。

[0026] 仪器标准液样的参数测定采用多级测定法进行,采用正交实验设置了多份不同参数标准液样,然后对其进行光谱信息提取,再将其对应的光谱信息与蒸馏水光谱信息进行对比,通过分析不同波段光谱特征与水质各参数关系得到光谱与水质参数标准参照。基于此标准参照再对待测液样进行水质参数的确定。

[0027] 模型的算法采用了目前机器学习算法中精度较高且具有高稳定性和可靠性的随机森林算法。算法的构建如下:

①以独立同分布的随机向量 Θ_t 组成树形结构分类器 $\{h(X, \Theta_t), t=1, \dots, p\}$,从标准液样某一特定参数及对应的全光谱波段特征数据集中随机有放回地抽取定量的训练样本,对于每个样本集进行决策树建模,然后组合多棵决策树的预测,通过计算 t 棵决策树 $\{h(X, \Theta_t)\}$ 的预测均值得到最终的回归预测值。

[0028] ②在自变量 X (全光谱各个波段特征值)和因变量 Y (标准液样某一具体水质参数)组成的集合中,随机抽样出的训练集 (X_i, Y_i) 相互独立。随机森林算法整体的监测结果用回归预测向量 $h(X)$ 的泛化误差均方值来描述。其定义为:

$$E_{X,Y}(Y - h(X))^2$$

其中, Y (标准液样某一具体水质参数)为训练样本集 X (全光谱各个波段特征值)对应的实际值, $h(X)$ 表示模型对样本集 X (全光谱各个波段特征值)的预测值。 $E_{X,Y}(\cdot)^2$ 算子表示:

$$E_{X,Y}(\cdot)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\cdot)^2$$

③在构建了森林之后,对于待预测样本集合 X (待测液样相应具体水质参数对应的全光谱各个波段特征值),用下式计算对应样本最终的计算结果(监测值):

$$Y_k = \operatorname{argave}\left(\sum_i^N h_i(x_k | f_j)\right)$$

其中, Y_k 表示随机森林算法对第 k 个液样(某一特定深度待测液样相应具体水质参数)的计算结果(监测值), $\operatorname{argave}(\cdot)$ 表示取均值, $h_i(\cdot)$ 表示第 i 棵决策回归树的计算结果, $x_k | (f_j)$ 表示对于第 k 个输入样本(某一特定深度待测液样相应的全光谱特征参数),第 i 棵决策树基于 x_k 全光谱的各波段特征参数,利用函数 f_j 计算得到的待测液样相应的具体水质参数。

[0029] ④为评估仪器监测结果的精度,我们的模型首先采用了一种可靠的精度估计方法,即利用未参与决策森林构建的袋外样本数据,对袋外数据(未参与模型训练的标准液样数据)的误差均方值(MSE_{OOB})进行计算:

$$MSE_{OOB} = n^{-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i^{OOB})^2$$

其中 y_i 表示袋外数据(未参与模型训练的标准液样数据)中第 i 个标准液样的某一特定水质参数的实际值, \hat{y}_i^{OOB} 表示模型针对该特定水质参数的预测值。 MSE_{OOB} 越小表示模型精度越高。其次,模型还采用了另外一种参数进行精度的评价,即解释方差百分数(PVE),该参数表示模型能显著解释样本数据的能力,该值越接近100%表示模型的效果越好,PVE由以下公式计算得到:

$$R_{rf}^2 = 1 - \frac{MSE_{OOB}}{\hat{\delta}_y^2}$$

其中 $\hat{\delta}_y^2$ 表示模型针对袋外数据(未参与模型训练的标准液样数据)某一特定水质参数进行预测的预测结果的方差。

[0030] 上述模型已经基于标准液样进行了训练并储存在系统内,使用人员一般不需要自行测定标准液样而直接测定待测液样水质情况即可。

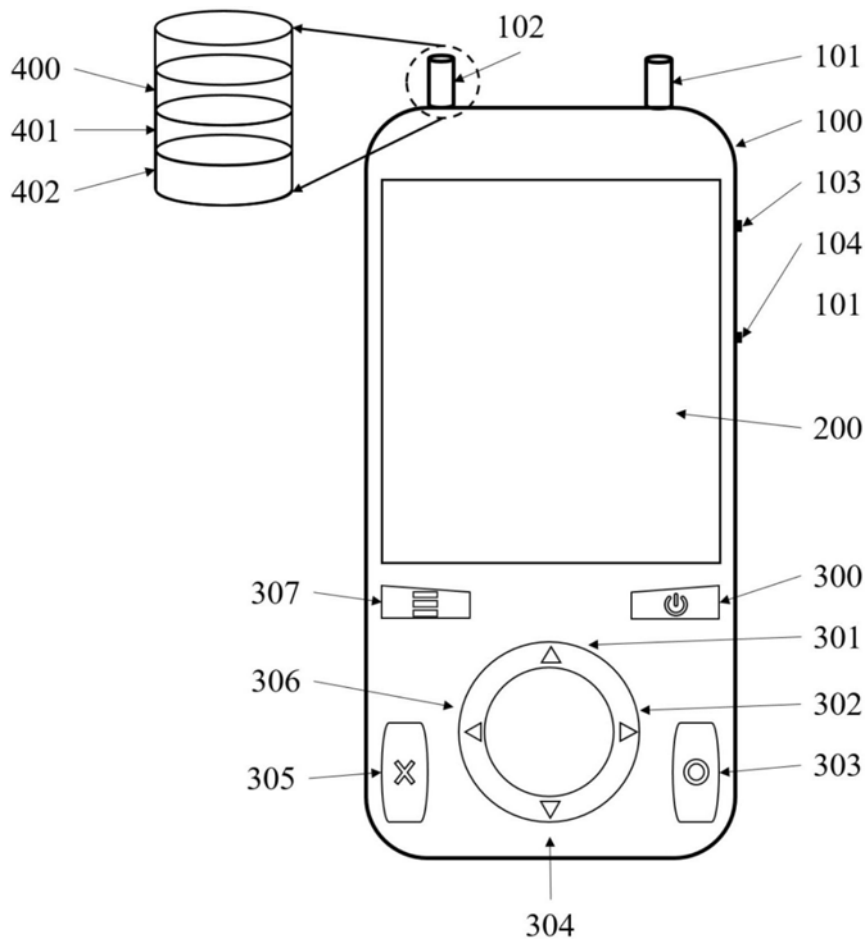


图1

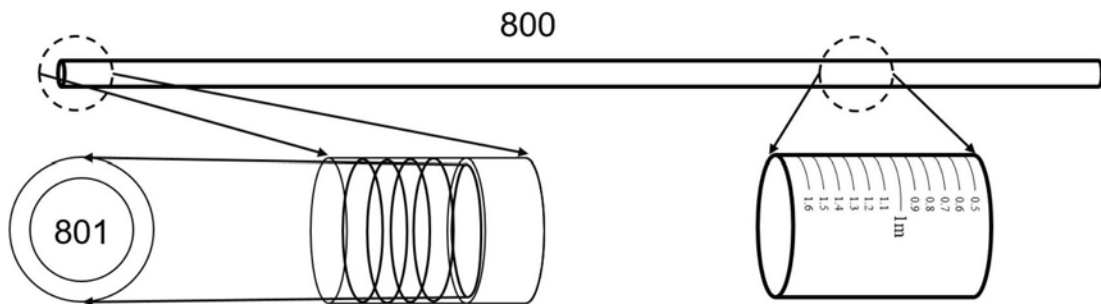


图2

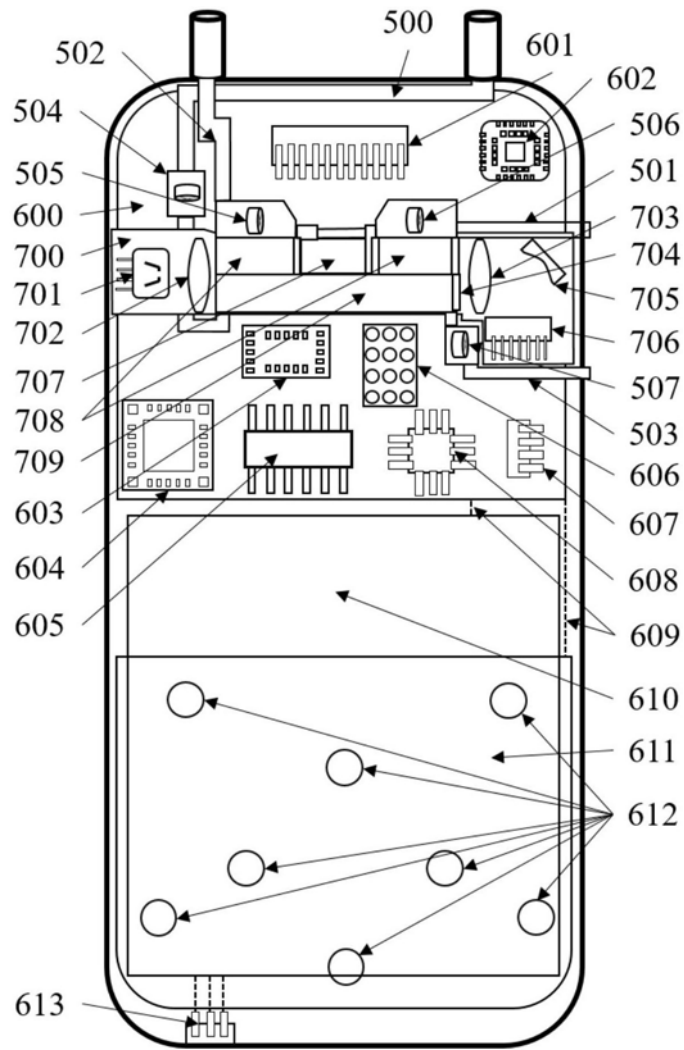


图3

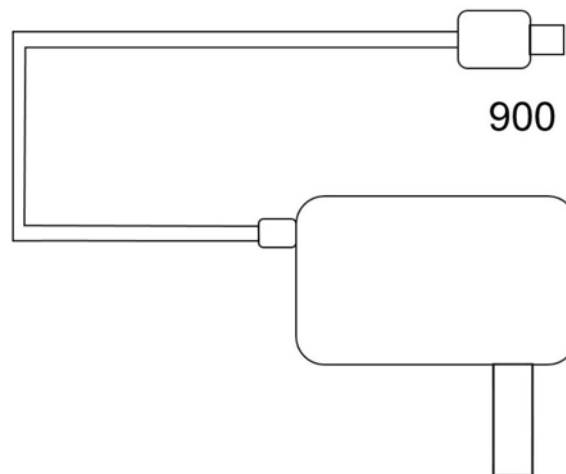


图4