

基于光谱分析的紫外水质检测技术

胡健

河北省廊坊水文勘测研究中心

DOI:10.12238/hwr.v9i2.6109

[摘要] 近半个世纪以来,世界各国经济迅速发展,现代化工业,尤其是合成化工业更是突飞猛进,在工业化快速发展和人口增长驱动下,水资源污染问题日益严重,水质检测成为环境保护和公共卫生领域的重要议题。本文立足于紫外光谱分析技术原理,分析了光谱预处理、特征波长提取和定量分析等紫外光谱数据分析方法。在探讨紫外光谱分析在水质检测中应用的基础上,结合相关实践经验,探讨了基于光谱分析的紫外水质检测技术的应用前景与发展趋势。

[关键词] 光谱分析; 紫外水质检测; 技术应用

中图分类号: X832 **文献标识码:** A

Ultraviolet water quality detection technology based on spectral analysis

Jian Hu

Langfang Hydrology Survey and Research Center, Hebei Province

[Abstract] In the past half century, the rapid economic development of all countries in the world, modern industry, especially the synthetic industry, is advancing by rapid leaps. Driven by the rapid development of industrialization and population growth, the problem of water pollution is becoming increasingly serious, and water quality testing has become an important issue in the field of environmental protection and public health. Based on the principle of UV spectral analysis, we analyzed spectral preprocessing, characteristic wavelength extraction and quantitative analysis. On the basis of exploring the application of UV spectral analysis in water quality detection, the application prospect and development trend of UV water quality detection technology based on spectral analysis are discussed.

[Key words] spectral analysis; ultraviolet water quality detection; technology application

引言

传统水质检测方法往往存在操作复杂、耗时较长、试剂消耗大等,难以满足现代水质检测的实时性、准确性和全面性要求。光谱分析技术作为一种高效、快速的分析方法,近年来在水质检测领域得到了广泛关注和应用。基于紫外光谱分析的水质检测技术凭借其操作简便、无需试剂、实时在线检测等优点,逐渐成为水质检测的重要手段。

1 紫外光谱分析技术原理

紫外光谱分析技术主要利用物质对紫外光的吸收特性,当紫外光照射到物质时,物质中的分子会吸收特定波长的光,使电子从基态跃迁到激发态。由于不同分子结构的化合物具有不同的吸收特性,因而通过测量物质对不同波长光的吸收强度,可绘制出紫外吸收光谱,从而分析物质的化学结构和性质。研究表明,不同分子结构的化合物具有不同的电子能级分布,因此其对紫外光的吸收特性也不同,且吸收光谱的形状、位置和强度反映了分子中电子能级跃迁的情况。在光谱分析中,可重点分析光谱图

中的吸收峰的位置、强度和形状,得到样品中分子的结构信息。比如,吸收峰的位置反映分子中电子能级跃迁的类型和能量,而其强度则反映分子中该类型电子的数量^[1]。紫外光谱分析技术的价值优势在于操作简便、快速高效、无需复杂的前处理步骤,且可同时分析多种成分,在化学、生物学、环境科学等领域具有广泛应用,适用于微量和痕量分析。

2 紫外光谱数据分析方法

2.1 光谱预处理方法

在水质检测中,紫外光谱数据分析环节至关重要,而光谱预处理方法则是确保分析准确性和可靠性的关键所在。在实践中,常用的光谱预处理方法主要包括基线校正、噪声降低、归一化、标准正态变量变换、导数光谱和多元散射校正等,上述不同的处理方法在适用条件、处理过程与预期效果等方面存在明显差异,应结合水质检测技术需求,予以灵活处理。以基线校正为例,其通常通过选择非峰区域的数据点并拟合一个多项式来估计基线,然后从原始光谱中减去基线,得到校正后的光谱,以确保光谱反

映的是样品本身的特性。

2.2 特征波长提取方法

在水质检测中,不同物质对紫外光的吸收特性不同,每种物质都有其特定的吸收峰,即特征波长。特征波长的提取有助于准确识别和分析水样中的物质成分及其浓度,从而提高水质检测的准确性和可靠性。在特征波长提取中,可采用算法优化提取方法,通过遗传算法与偏最小二乘法的结合,提取紫外光谱数据中的特征波长,选择具有代表性的技术参数建立更准确的回归模型,对于处理自变量与因变量之间的复杂关系具有积极作用。部分特征波长提取方法算法复杂度较高,且紫外光谱数据容易受噪声、基线漂移等因素影响,因而需较强的计算能力和专业的算法知识。

2.3 定量分析方法

在水质检测中,紫外光谱数据分析的定量分析方法主要基于朗伯-比尔定律,该定律表明当单色光穿过被测物质溶液时,其吸光度(A)与物质的浓度(c)、光程长度(l)以及摩尔吸收系数(ϵ)成正比,数学表达式为:

$$A=\epsilon\cdot c\cdot l$$

其中,A是吸光度, ϵ 是摩尔吸收系数,c是物质的浓度,l是光程长度(通常为比色皿的长度)。基于朗伯-比尔定律,紫外光谱数据分析的定量分析方法主要有校准曲线法、比较法、标准加入法、内标法、浓度直读法和光谱归一化分析等。

3 紫外光谱分析在水质检测中的应用

3.1 水质检测指标与方法

紫外光谱分析可用于检测水中的多种污染物和成分。其中,在无机物检测方面,硝酸盐、亚硝酸盐等无机盐在紫外光照射下会表现出特定的吸收光谱,通过测量其吸光度可推断其浓度,而铅、汞、铬等重金属离子对人体健康有害,通过紫外光谱分析同样可检测其在水中的含量。在有机物检测方面,化学需氧量(COD)是衡量水中有机污染物含量的重要指标,紫外光谱分析可快速、准确地测定COD值,且酚类、氰化物、石油类等有机污染物在紫外光照射下也有特定的吸收光谱,通过测量其吸光度可检测其存在和浓度。在具体检测方法应用中,单光谱检测法操作简单,适用于单一成分的检测,而对于复杂水样,则适用性较差。连续光谱检测法则解决了单光谱检测方法相关性弱、适用范围有限的问题,适用于多成分、复杂水样的检测。

3.2 水质参数与紫外光谱的关系

3.2.1 水质参数的紫外吸收特性

水体中的有机污染物,特别是含有不饱和键(如双键、三键)和芳香环的有机物,对紫外光有较强的吸收。比如,酚类、氰化物、石油类等有机物在紫外光照射下会表现出特定的吸收光谱。重金属离子虽然本身对紫外光的吸收较弱,但可通过与显色剂反应,生成有色络合物,进而在紫外光下产生吸收峰,实现定量检测。氨氮、总磷、总氮等水质参数也可通过与显色剂反应,生成有色络合物,进而在紫外光下进行检测^[2]。

3.2.2 不同水质参数对紫外光谱的影响机制

首先,pH值的变化会影响水中有机物的电离状态,从而影响其分子结构中的电子跃迁能级。比如,某些酸性或碱性条件下,有机物分子中的某些基团会发生质子化或去质子化,导致吸收峰的位置发生移动。其次,温度的变化会影响分子的热运动状态,从而影响紫外光谱的吸收强度。一般来说,温度升高会导致分子的热运动加剧,使得分子间的碰撞频率增加,可能导致吸收强度的降低,且某些有机物在高温下可能发生分解或转化,产生新的吸收峰或导致原有吸收峰消失。

3.3 基于紫外光谱的水质检测模型构建

3.3.1 模型构建步骤

利用紫外光谱仪对水样进行扫描,采集大量具有代表性的光谱数据,获得水样在不同波长下的吸光度数据,使其涵盖不同水质参数和浓度范围。采用一阶导数、二阶导数等光谱预处理方法,对采集到的光谱数据进行平滑、去噪等预处理,以消除仪器噪声和背景干扰。由于全光谱数据包含大量冗余信息,为提高模型计算效率和预测性能,需选择对目标水质参数敏感的特征波长。使用已知浓度的标准水样数据,对模型进行训练,调整模型参数,使模型能够准确预测未知水样的水质参数。使用独立的验证集数据,对训练好的模型进行验证,评估模型的预测性能和泛化能力。

3.3.2 检测模型实例

以化学需氧量(COD)检测模型为例,通过扫描水样在紫外可见光谱区的吸光度曲线,选择特定波长的吸光度作为COD的相关数据,并结合偏最小二乘法回归(PLSR)等化学计量学方法,建立COD值与吸光度之间的关系模型。实践表明,该种基于紫外光谱的COD检测模型具有速度快、操作简便、无需化学试剂等优点,适用于水质在线检测。再如,多参数水质检测模型则可引入通道注意力机制模块,构建基于紫外光谱的水质多参数检测模型,实现对浊度、化学需氧量和硝酸盐等多种水质参数的同步准确检测。

3.3.3 关键问题

首先,光谱数据的采集和处理过程中,需要严格控制实验条件,避免外界干扰和仪器噪声对数据的影响,以确保光谱数据的准确性和可靠性。其次,特征波长的选择对模型的预测性能至关重要,需利用先进算法和工具,从全光谱数据中提取出最具代表性的特征波长。再次,所构建的水质检测模型应具有良好的泛化能力,可在不同水质条件下准确预测水质参数,因此应充分考虑水样的多样性和代表性。

3.4 紫外光谱水质检测系统的应用

3.4.1 系统总体架构

紫外光谱水质检测系统包含光谱采集及分析终端层、光谱数据、算法、模型资产层和光谱算法平台功能层等功能单元,彼此之间相互协同,共同实现紫外光谱水质检测效果。其中,光谱采集及分析终端层主要配置紫外光谱仪和样品处理单元,以发出特定波长的紫外光,使紫外光穿透水样并发生吸收作用;光谱数据、算法、模型资产层则对采集到的光谱数据进行预处理,

提取特征波长,选择对目标水质参数敏感的光谱特征;光谱算法平台功能层负责模型的应用、数据的传输和显示等^[3]。

3.4.2系统工作流程

在紫外光谱水质检测系统中,紫外光源是核心部件之一,负责发射出200纳米至400纳米之间等特定波长的紫外光,用于照射待检测的水样,并通过凹面全息光栅或棱镜等分光元件产生不同波长的单色光。分光后得到的单色光垂直照射到样品池中的水样上,水样中的有机分子会吸收特定波长的紫外光,发生电子跃迁,形成吸收光谱,而未被水样吸收的光照射到光电检测器上,将光信号转换为电信号。转换后的电信号经过电路部分进行放大、滤波、模数转换等处理后,被传输到中央处理芯片或计算机上,以直观的形式显示出来,用于评估水质的优劣程度。

4 基于光谱分析的紫外水质检测技术的应用前景与发展趋势

4.1应用前景

与传统化学水质检验方法相比,紫外水质检测技术无需大量器具,具有非常理想的重复性能,可显著降低检测误差和操作失误,提高水质检测工作效率,因此其技术优势将推动其广泛应用。此外,随着全球环境问题的日益严峻,水资源保护与治理备受关注,水质检测作为保障水资源安全的重要手段,其重要性不言而喻,而紫外水质检测技术则可有效满足差异化的水质检测需求。在《水污染防治法》、《环境保护法》等法律法规导向下,紫外水质检测技术势必将获得良好的发展环境,形成显著经济效益与社会效益。

4.2发展趋势

4.2.1进一步提高分析精度

紫外水质检测技术的理论依据是朗伯比尔定律,即物质对光的吸收与其浓度成正比。未来,随着对朗伯比尔定律研究的深化,可通过更精确的算法和模型来提高水质检测精度。比如,可通过优化吸光度与水质参数之间的线性关系,减少非线性因素的影响。此外,可通过升级与改进水质检测仪器设备,采用脉冲氙灯、激光光源等更先进的光源技术,以提高光源的稳定性和强度,保障检测分析精度。为确保紫外水质检测技术的准确性和可靠性,还需同步建立标准化的检测流程和操作规范,实施检测质量控制。

4.2.2实现自动化和智能化检测

随着对水质检测实时性和检测频率要求的逐步提高,传统的实验室手动分析已很难满足检测需求。基于光谱分析的紫外水质检测系统可实现自动化检测,持续检测水体中的有机物、无机物、重金属等污染物的含量,无需人工干预。随着检测数据的积累,系统可通过机器学习等人工智能技术,不断学习和优化检测模型,提高检测精度和稳定性。未来的水质检测系统将不再是单一功能的设备,而是多种传感器和技术的集成平台,集成溶解氧、pH值、氨氮、重金属等多项功能,将大大提高水质检测的综合性。

4.2.3多参数综合分析技术的应用

传统的水质检测方法往往只能检测单一参数,难以满足当前复杂多变的水质检测需求,而基于光谱分析的紫外水质检测技术目前已在多参数综合分析方面取得了一定进展。通过结合不同的光谱分析方法和化学计量学技术,可实现对水体中有机物、无机物、重金属等多种污染物的同时检测。在未来发展中,同步荧光光谱、三维荧光光谱等更多的先进技术将被引入到水质检测中,以更全面、更准确地反映水质状况,进一步提高紫外-可见光光谱的分析效果,实现多参数综合分析。

5 结语

总之,基于光谱分析的紫外水质检测技术在实践领域具有诸多优势特点,可在更短时间内完成更多数量的水质检测任务。因此,技术人员应准确把握该项技术方法的核心精髓内涵,充分发挥其操作简便、无需试剂、实时在线检测等优势特点,设计并实现基于光谱分析的紫外水质检测系统,并探索与其他技术方法的有机结合与衔接,为全面提高水质检测工作成效奠定基础,为现代水资源管理作出应有贡献。

[参考文献]

- [1]高振,赵春江,杨桂燕,等.典型拉曼光谱技术及其在农业检测中应用研究进展[J].智慧农业(中英文),2022,4(2):121-134.
- [2]刘希伟,贾蕾.基于图像法的色度测量在梓江水质检测中的应用[J].皮革制作与环保科技,2024,5(09):58-60.
- [3]程俊丽,杨芳,任艳玲,等.气相色谱技术在饮用水水质检测中的应用研究进展[J].实验室检测,2024,2(07):53-56.

作者简介:

胡健(1981--),男,汉族,河北省廊坊市人,河北省廊坊水文勘测研究中心,高级工程师,本科,研究方向:水环境监测评价分析。