



## (12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 108982390 B

(45) 授权公告日 2021.02.19

(21) 申请号 201811045064.8

审查员 杨培

(22) 申请日 2018.09.07

(65) 同一申请的已公布的文献号

申请公布号 CN 108982390 A

(43) 申请公布日 2018.12.11

(73) 专利权人 华南农业大学

地址 510642 广东省广州市天河区五山路  
483号

(72) 发明人 邱志 马瑞峻 张亚丽 陈瑜

萧金庆 郑普峰

(74) 专利代理机构 广州市华学知识产权代理有

限公司 44245

代理人 付茵茵

(51) Int.Cl.

G01N 21/31 (2006.01)

权利要求书1页 说明书4页 附图2页

### (54) 发明名称

一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法

### (57) 摘要

本发明涉及一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,不需要复杂的化学物质和繁琐的检测工序可以准确测定有机磷类农药的浓度,主要包括光谱检测系统、数据库系统、数据分析系统、显示系统等。通过建立一个光谱数据库A和编写一个能读取数据库A数据的光谱信息分析软件,对待测有机磷农药样品进行检测,获得待测有机磷农药样品的光谱信息,光谱信息分析软件根据获得的光谱信息以数据库A为基础预测的农药浓度信息。本发明提高了分析质量,显示直观,检测迅速,具有实时性,属于水体农药残留检测方法技术领域。



1. 一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,其特征在于:包括如下步骤:

(1) 通过便携式光谱仪获取水体某种有机磷农药浓度与吸光度间的光谱数据信息;

(2) 把步骤(1)的光谱数据信息预处理和利用最小二乘法计算后得到相应的农药种类模型;

(3) 不断重复步骤(1)和(2),得到多种农药的农药种类模型;将所得的各种农药的数据信息和农药种类模型导入数据库A中;

(4) 编写光谱信息分析软件,并连接数据库A;

(5) 通过便携式光谱仪对待测水体中若干种农药残留样品进行检测,其中农药种类已知,获取待测水体各种有机磷农药的未知浓度的光谱数据信息,得到新建的未知浓度数据库B,并将未知浓度数据库B与光谱信息分析软件连接;

(6) 在读取有机磷农药未知浓度数据库B时,可以通过逐个输入待测样品对应的农药编号,光谱信息分析软件主动读取该有机磷农药光谱特征波长对应的吸光度值,点击“预测农药计算”按钮,光谱信息分析软件计算出该有机磷农药样品的浓度值;逐个分析直至完成该组若干种农药残留样品的浓度值测量;

步骤(4)中,光谱信息分析软件界面包括选择的功能框、选择农药种类框、连接数据库按钮、计算按钮、显示特征波长功能框、待测浓度值显示框和保存按钮;

在光谱信息分析软件的界面上设置有有机磷农药特征波长相对应的吸光度输入框和待测浓度值显示框,其中待测浓度值显示框和有机磷农药特征波长相对应的吸光度输入框之间的关系为该种农药的数据信息模型 $y = ax + b$ ,其中, $y$ 为预测农药浓度, $x$ 为有机磷农药特征波长相对应的吸光度, $b$ 为常数;

步骤(3)中,通过安装数据库可视化操作界面软件将有机磷农药的数据信息和农药种类模型导入数据库A;

步骤(4)中,光谱信息分析软件包括的功能有连接数据库、农药种类下拉选项、有机磷农药特征波长显示、实际浓度、已知浓度、浓度误差以及农药浓度值和散点图保存。

2. 按照权利要求1所述的一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,其特征在于:步骤(3)中,农药的数据信息包括已知有机磷农药的农药浓度、光谱特征波长、农药吸光度值、模型相关性系数、均方根误差。

3. 按照权利要求1所述的一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,其特征在于:步骤(4)中,光谱信息分析软件连接且读取已知有机磷农药浓度的光谱数据库A的数据,在光谱信息分析软件的界面上选择需要检测分析的农药后,分析软件界面即显示该种有机磷农药的特征波长。

4. 按照权利要求1所述的一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,其特征在于:在电脑上安装一个数据库驱动包,使编写的光谱信息分析软件连接并且读取数据库A和数据库B里的有机磷农药光谱数据。

5. 按照权利要求1所述的一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,其特征在于:步骤(1)–(3)利用配置已知浓度有机磷农药建立农药种类模型的过程中,对于配制的浓度过低的有机磷农药样品,如果该组有机磷农药样品的光谱数据信息与该种农药的光谱模型相关性较低,甚至会影响该组有机磷农药建立光谱信息模型的精确度,则舍弃该组农药的原子吸收光谱数据信息。

## 一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法

### 技术领域

[0001] 本发明涉及一种水体农药残留检测方法,具体涉及一种便携式光谱仪快速检测水体中主要农药残留光谱的方法。

### 背景技术

[0002] 有机磷类农药是目前使用最广,用量最大的一类农药,但是大量使用后对人们的生活饮用水构成了严重的影响和产生的环境危害也日益严重,且有机磷农药能够存在较长时间。

[0003] 水体农药残留检测在全国的发展已经有多个高校、研究所及相关环境安全部门在研究,但各个高校、研究所等所使用的检测仪器设备及所采用研究的方法不尽相同,致使获取得到的数据类型不尽相同,且没有一个专门存储数据的开源数据库系统,这就很难实现资源数据的共享,不利于研究者之间的交流、学习和进步。

[0004] 传统的水体农药残留检测方法是把水体农药残留样品带回实验室,再把水体农药残留样品、光谱仪和笔记本电脑等设备放置在实验平台上,再统一做实验,这种方法不仅实验检测效率低下而且不能实时实地进行水体农药残留检测。

[0005] 目前对于水体农药光谱的检测方法的研究还不是很深入,特别是建立一个种类丰富且光谱信息齐全的水体农药光谱的数据库。

### 发明内容

[0006] 针对现有技术中存在的技术问题,本发明的目的是:提供一种能够快捷对水体中主要农药残留进行定性与定量检测的基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法。

[0007] 为了达到上述目的,本发明采用如下技术方案:

[0008] 一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,包括如下步骤:(1)通过便携式光谱仪获取水体某种有机磷农药浓度与吸光度间的光谱数据信息;(2)把步骤(1)的光谱数据信息预处理和利用最小二乘法计算后得到相应的农药种类模型;(3)不断重复步骤(1)和(2),得到多种农药的农药种类模型;将所得的各种农药的数据信息和农药种类模型导入数据库A中;(4)编写光谱信息分析软件,并连接数据库A;(5)通过便携式光谱仪对待测水体内若干种农药残留样品进行检测,其中农药种类已知,获取待测水体各种有机磷农药的未知浓度的光谱数据信息,得到新建的数据库B,并将数据库B与光谱信息分析软件连接;(6)在读取有机磷农药未知浓度数据库B时,可以通过逐个输入待测样品对应的农药编号,光谱信息分析软件主动读取该有机磷农药光谱特征波长对应的吸光度值,点击“预测农药计算”按钮,光谱信息分析软件计算出该有机磷农药样品的浓度值;逐个分析直至完成该组若干种农药残留样品的浓度值测量。

[0009] 步骤(3)中,农药的数据信息包括已知有机磷农药的农药浓度、光谱特征波长、农药吸光度值、模型相关性系数、均方根误差。

[0010] 步骤(4)中,光谱信息分析软件界面包括选择的功能框、选择农药种类框、连接数

数据库按钮、计算按钮、显示特征波长功能框、待测浓度值显示框和保存按钮。

[0011] 在光谱信息分析软件的界面上设置有有机磷农药特征波长相对应的吸光度输入框和待测浓度值显示框,其中待测浓度值显示框和有机磷农药特征波长相对应的吸光度输入框之间的关系为该种农药的数据信息模型 $y=ax+b$ ,其中, $y$ 为预测农药浓度, $x$ 为有机磷农药特征波长相对应的吸光度, $b$ 为常数。

[0012] 步骤(3)中,通过安装数据库可视化操作界面软件导入农药的数据信息和农药种类模型。

[0013] 步骤(4)中,光谱信息分析软件连接且读取已知有机磷农药浓度的光谱数据库A的数据,在光谱信息分析软件的界面上选择需要检测分析的农药后,分析软件界面即显示该种有机磷农药的特征波长。

[0014] 在电脑上安装一个数据库驱动包,使编写的光谱信息分析软件连接并且读取数据库A和数据库B里的有机磷农药光谱数据。

[0015] 步骤(4)中,光谱信息分析软件包括的功能有连接数据库、农药种类下拉选项、有机磷农药特征波长显示、实际浓度、已知浓度、浓度误差以及农药浓度值和散点图保存。

[0016] 步骤(1)–(3)利用配置已知浓度有机磷农药建立农药种类模型的过程中,对于配制的浓度过低的有机磷农药样品,如果该组有机磷农药样品的光谱数据信息与该种农药的光谱模型相关性较低,甚至会影响该组有机磷农药建立光谱信息模型的精确度,则舍弃该组农药的原子吸收光谱数据信息。

[0017] 本发明的原理是:本发明主要包括光谱检测系统、数据库系统、数据分析系统、显示系统等。通过光谱仪器测量多种标准的有机磷农药,把测量得到的每一种农药光谱数据信息导出到对应的Excel表格中,获取有机磷农药的数据信息和农药种类模型,并将有机磷农药的数据信息和农药种类模型导入数据库A中,编写一个能读取数据库A中农药的数据信息和种类模型的光谱信息分析软件。用光谱仪器测量未知浓度的有机磷农药,并且对每一组未知农药浓度的实验样品标上一个编号,获取未知有机磷农药的光谱数据信息数据,并将未知有机磷农药的光谱数据信息数据导入数据库B中。打开“基于吸光度检测水体有机磷农药分析”软件,我们根据实际测量农药实验的组数的数量情况,在弹出式菜单下拉按钮中可以选择“输入待测样品编号求待测浓度值”和“输入特征波长求待测浓度值”功能选项,在本地电脑上将待测的未知农药浓度的光谱数据信息和农药种类模型导进到数据库B中,点击连接数据库按钮,输入数据库B的数据库名、用户名以及密码即可连接读取该数据库数据,在弹出式菜单下拉按钮中选择需要测量农药浓度的农药种类,在确定选择要测量浓度的有机磷农药种类后,光谱数据分析软件会自动读取并打印出数据库A中的该种有机磷农药模型。在读取有机磷农药未知浓度数据库B时,在选择农药可以通过输入待测样品对应的农药编号,光谱数据信息分析软件主动读取编号所对应的农药样品光谱特征波长对应的吸光度值,点击“预测农药计算”按钮,光谱信息分析软件计算出该有机磷农药样品的浓度值;逐个分析直至完成该组若干种农药残留样品的浓度值测量。

[0018] 总的说来,本发明具有如下优点:

[0019] 1. 本发明所使用的便携式微型光谱仪测量的吸收光谱法具有光谱仪体积小、工作效率高、灵敏度高及样品使用量少等优点,可在不同的环境中进行试验,但是由于测量的结果具有不确定性,因此,本发明通过配制多种不同浓度的水体农药标准样品,获取相对应的

光谱信息数据,并将光谱信息数据导入所建立的光谱数据库系统中,可最大程度减少分析过程的不确定性,提高分析质量。

[0020] 2.本发明仅仅是通过利用原子吸收光谱法对未知水体农药标准样品进行检测即可得出该水体农药中主要农药的含量,操作简单,检测迅速且具有实时性。

[0021] 3.显示直观。

### 附图说明

[0022] 图1是本发明方法的步骤组成示意图。

[0023] 图2是光谱信息分析软件的软件界面图。

[0024] 图3是光谱信息分析软件连接数据库B图。

[0025] 图4是光谱信息分析软件保存待测农药浓度值图。

### 具体实施方式

[0026] 下面将结合具体实施方式来对本发明做进一步详细的说明。

[0027] 一种基于原子吸收光谱信息的水体农药残留检测方法,包括如下步骤:

[0028] 通过光谱仪器测量多种标准的有机磷农药,把测量得到的每一种农药光谱数据信息导出到对应的Excel表格中,对光谱数据信息进行预处理时所选的光谱波段范围从200nm到800nm,把光谱数据信息预处理和利用最小二乘法计算后获取有机磷农药的数据信息和农药种类模型。

[0029] 将已知有机磷农药的农药浓度、光谱特征波长、农药吸光度值、农药种类模型、模型相关性系数、均方根误差等数据信息导入数据库A中,数据库A中包含多种农药信息,并可共享添加。

[0030] 用光谱仪器测量未知浓度的有机磷农药,并且对每一组未知农药浓度的实验样品标上一个编号,获取未知有机磷农药的光谱数据信息数据,并将未知有机磷农药的光谱数据信息数据导入未知农药浓度数据库B中。

[0031] 编写一个能读取数据库A中农药的数据信息和种类模型的光谱信息分析软件,编写的光谱信息分析软件的界面需要具有选择的功能框、选择农药种类框、连接数据库按钮、计算按钮、显示特征波长功能框、待测浓度值显示框及保存按钮等功能,并连接光谱数据库A。

[0032] 打开“基于吸光度检测水体有机磷农药分析”软件,我们根据实际测量农药实验的组数的数量情况,在弹出式菜单下拉按钮中可以选择“输入待测样品编号求待测浓度值”和“输入特征波长求待测浓度值”功能选项,在本地电脑上将待测的未知农药浓度的光谱数据信息和农药种类模型导进到数据库B中,点击连接数据库按钮,输入数据库B的数据库名、用户名以及密码即可连接读取该数据库数据,在弹出式菜单下拉按钮中选择需要测量农药浓度的农药种类,在确定选择要测量浓度的有机磷农药种类后,光谱数据分析软件会自动读取并打印出数据库A中的该种有机磷农药模型,并在分析软件界面即显示该种有机磷农药的特征波长。

[0033] 在读取有机磷农药未知浓度数据库B时,在选择农药可以通过输入待测样品对应的农药编号,光谱数据信息分析软件主动读取编号所对应的农药样品光谱特征波长对应的

吸光度值,点击“预测农药计算”按钮,光谱信息分析软件计算出该有机磷农药样品的浓度值;逐个分析直至完成该组若干种农药残留样品的浓度值测量。

[0034] 在上述步骤的基础上,进一步地在光谱信息分析软件界面中分别点击“保存数据”按钮和“保存图像”按钮即可保存该种待测有机磷农药的浓度值以及该种有机磷农药的散点图像。

[0035] 上述实施例为本发明较佳的实施方式,但本发明的实施方式并不受上述实施例的限制,其他的任何未背离本发明的精神实质与原理下所作的改变、修饰、替代、组合、简化,均应为等效的置换方式,都包含在本发明的保护范围之内。

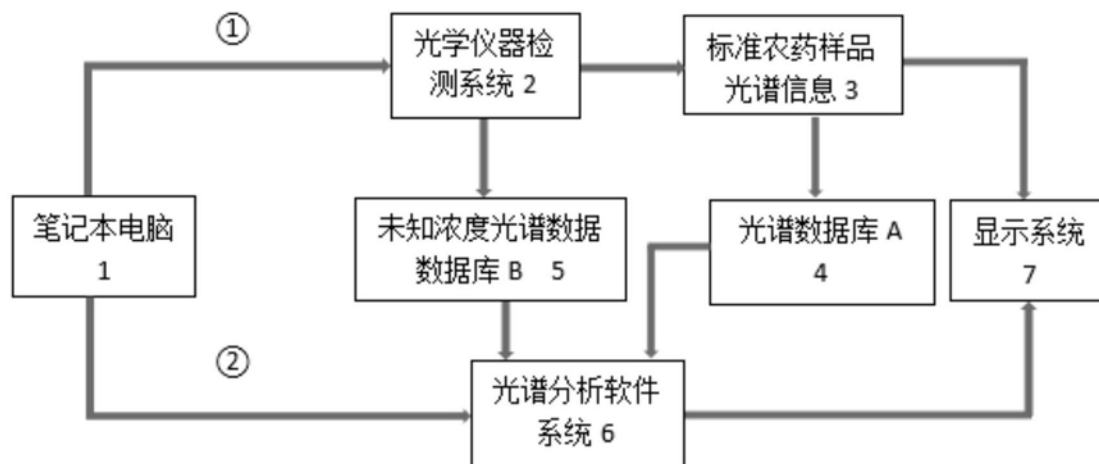


图1

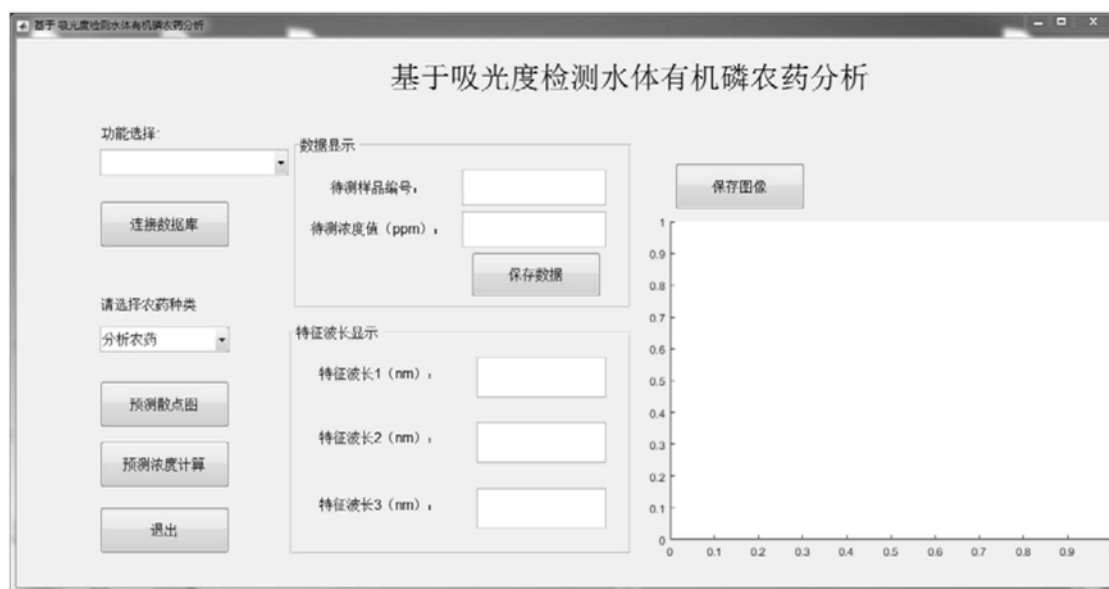


图2

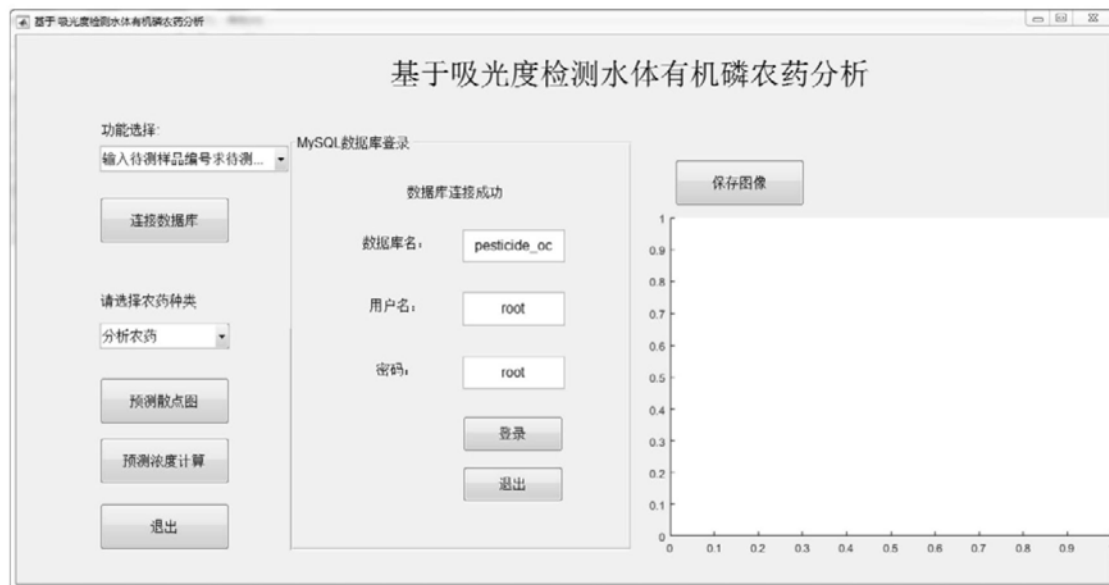


图3

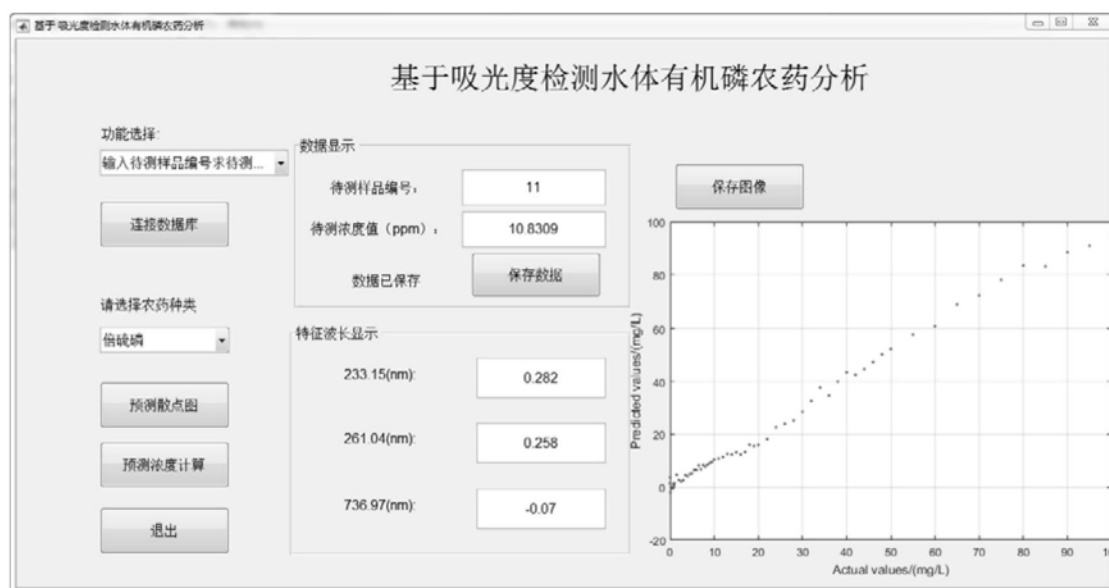


图4