

LinkSpec 软件使用说明书

V0.961



目录

LinkSpec 软件使用说明书	1
第一章、 软件介绍	4
1.1. 安装	4
1.2. 注册	4
1.3. 主界面	5
1.4. 文件类型	5
1.5. 工程目录结构	6
1.6. 软件使用流程	6
第二章、 设备连接	8
第三章、 预处理	9
3.1. 目的	9
3.2. 光谱仪参数	9
3.3. 预处理方法	9
3.4. 吸收峰图谱	10
第四章、 数据获取（光谱采集）	12
5.1. 新建采样项目	12
5.2. 命名规则	12
5.3. 平均	14
5.4. 光谱采样	14
5.5. 光谱比对	15
5.6. 化学值导入	16
第五章、 样品检测	17
5.1. 导入模型	17
5.2. 预测结果	17
5.3. 连续预测	18
第六章、 光谱数据	19
6.1. 光谱显示	19
6.2. 数值显示	21
6.3. 导入光谱	22
6.4. 导入文件格式	23
6.5. 导出光谱	24
第七章、 标签打印	26
第八章、 恢复数据	27
9.1. 选择光谱时间范围	27
9.2. 选择光谱	28
9.3. 恢复目标文件夹	28
第九章、 快速导引	29
9.1. 软件快速入门	29
9.2. 连接失败	29
9.3. 数据丢失	30
9.4. 光谱显示异常	30

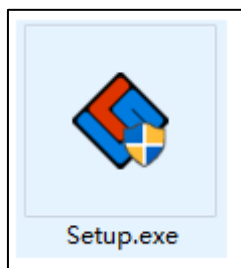


9.5.	工程文件（.nbp）打开失败	31
9.6.	误操作	31
9.7.	如何调节光谱仪参数	31
9.8.	反复提示暗电流或参比值需要重新测量	33
9.9.	如何切换英文版	33



第一章、 软件介绍

1.1. 安装

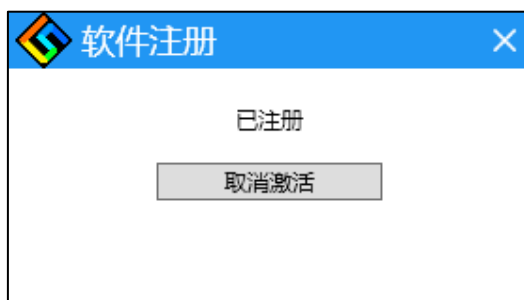


安装只需双击安装软件即可，中间选项默认即可

1.2. 注册



未注册软件可以试用读取光谱 60 次，超过次数后将有提示。将序列号发送给指点官方，返回激活码填入后会显示激活状态。



【注册版本】

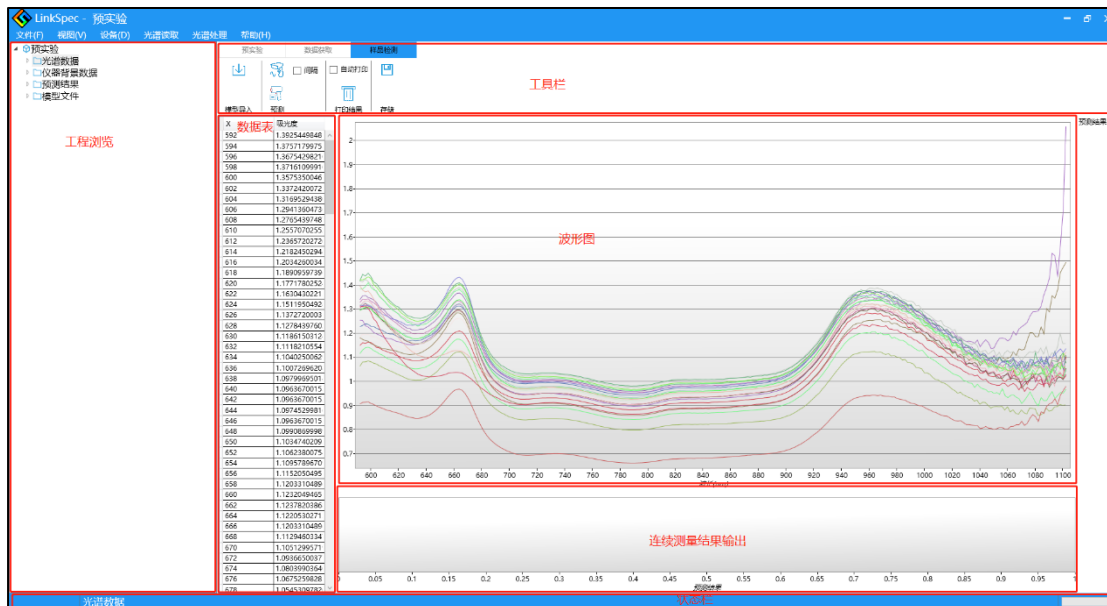
注册版本分为绑定计算机版本与绑定光谱仪版本

绑定计算机版本，可以读取不限数目的光谱仪，而且可以同时运行多个软件，但仅可在特定计算机使用。

绑定光谱仪版本，可以在不同的计算机上使用，但仅可读取某一台光谱仪数据。



1.3. 主界面



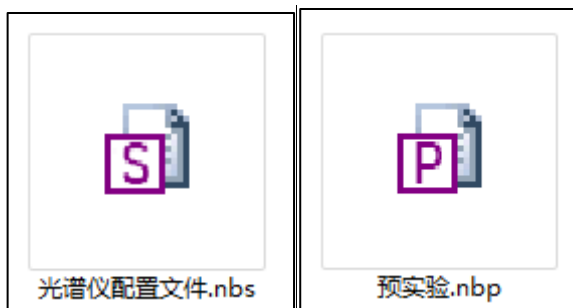
界面主要分为：工程浏览、工具栏、波形图、数据表、连续预测结果输出、状态栏等部分。其中，工程浏览、工具栏、波形图、数据表，可以在视图中选择隐藏



1.4. 文件类型

1. 光谱仪配置参数

用于保存光谱仪参数，以.nbs 结尾。图标如下左图：



2. 光谱数据工程

用于保存光谱数据，以及相关配置参数，以.nbp 结尾。图标如上右图：



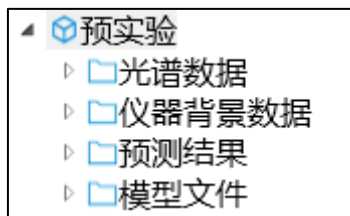
1.5. 工程目录结构

新建工程后，目录结构内至少有两个文件夹：‘光谱数据’、‘仪器背景数据’文件夹。

导入模型文件后会出现，‘模型文件’文件夹。

进入样品检测环节读取光谱后，出现‘预测结果’文件夹。

对于处理处理光谱后建立的文件夹会自动命名后添加



光谱数据：存放吸光度光谱

仪器背景数据：存放暗电流与参比值光谱

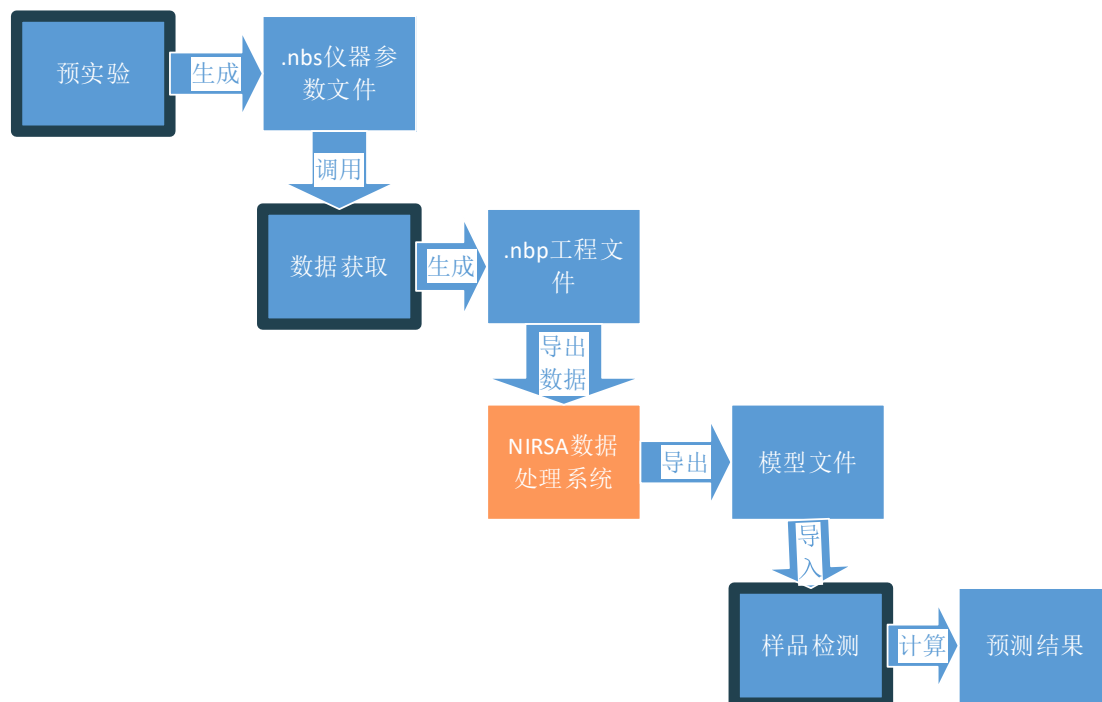
模型文件：存放.mdl 模型文件

预测结果：存放在‘样品检测’流程中产生的光谱

以上，及‘其他’都是工程保留名称新建或重命名时不可使用，且不可修改名称。

普通文件夹可以通过右击重命名修改文件夹名称。

1.6. 软件使用流程



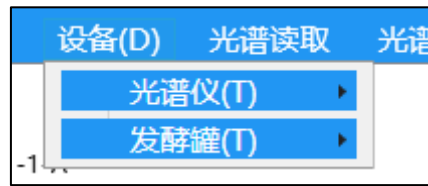
上图中，橙色框 NIRSA 数据处理系统为化学计量学软件，是第三方软件。



黑色外框为本文提及的软件功能分块。



第二章、 设备连接



INSION 近红外光谱仪接入计算机后，在[设备]>[连接]中出现相应串口。

连接后，没有出现串口，请检查串口驱动是否安装。

在端口选择后，左下角会出现相应的设备号。

视图中发酵罐为定制联动软件，普通版不存在。（需要定制可联系指点科技）

可支持设备有 InSION 光谱仪（更多品牌光谱仪接入请联系指点科技）。光谱仪接入后会自动识别，并显示相应的光谱仪参数。可参考《3.2 光谱仪参数》。



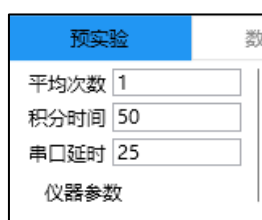
第三章、 预处理

3.1. 目的

预处理的目的是为了将光谱仪的参数调到最优，为‘数据获取’及‘样品检测’做准备。
注：若已经有工程打开，则预处理不能再进入，需要将工程先右击移除。

3.2. 光谱仪参数

对于 Inision 光谱仪可以配置如下参数：



平均次数：若光谱数据不稳定，可以适当增加平均次数。

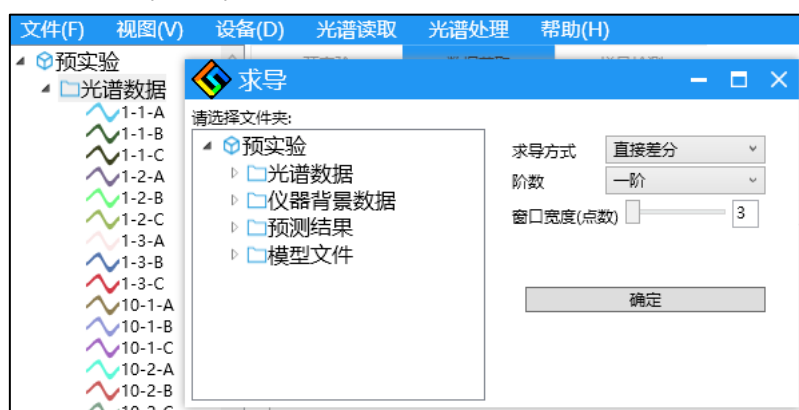
积分时间：若光谱饱和，可以适当将积分时间减小。

串口延迟：若光谱读取反复失败，可以适当将串口延时增加。

【技巧】可在参数上方用鼠标滚轮改变数值

3.3. 预处理方法

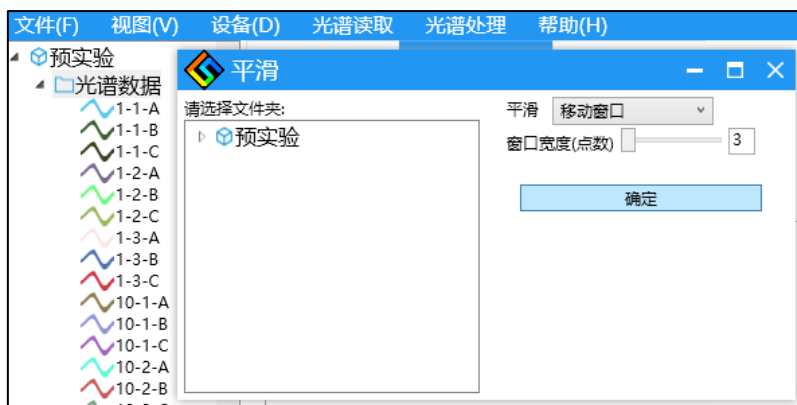
求导：直接差分、Savizky-Golay



求导

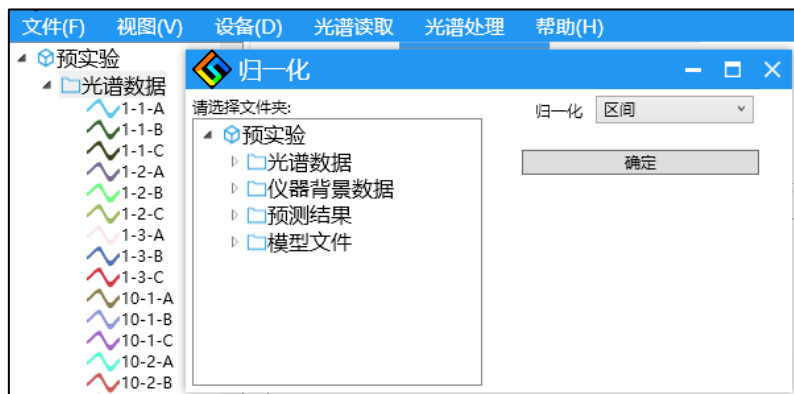
平滑：移动窗口、高斯、中值、Savizky-Golay





平滑

归一化：最大值、均值、区间、[0-1]区间、Z-score



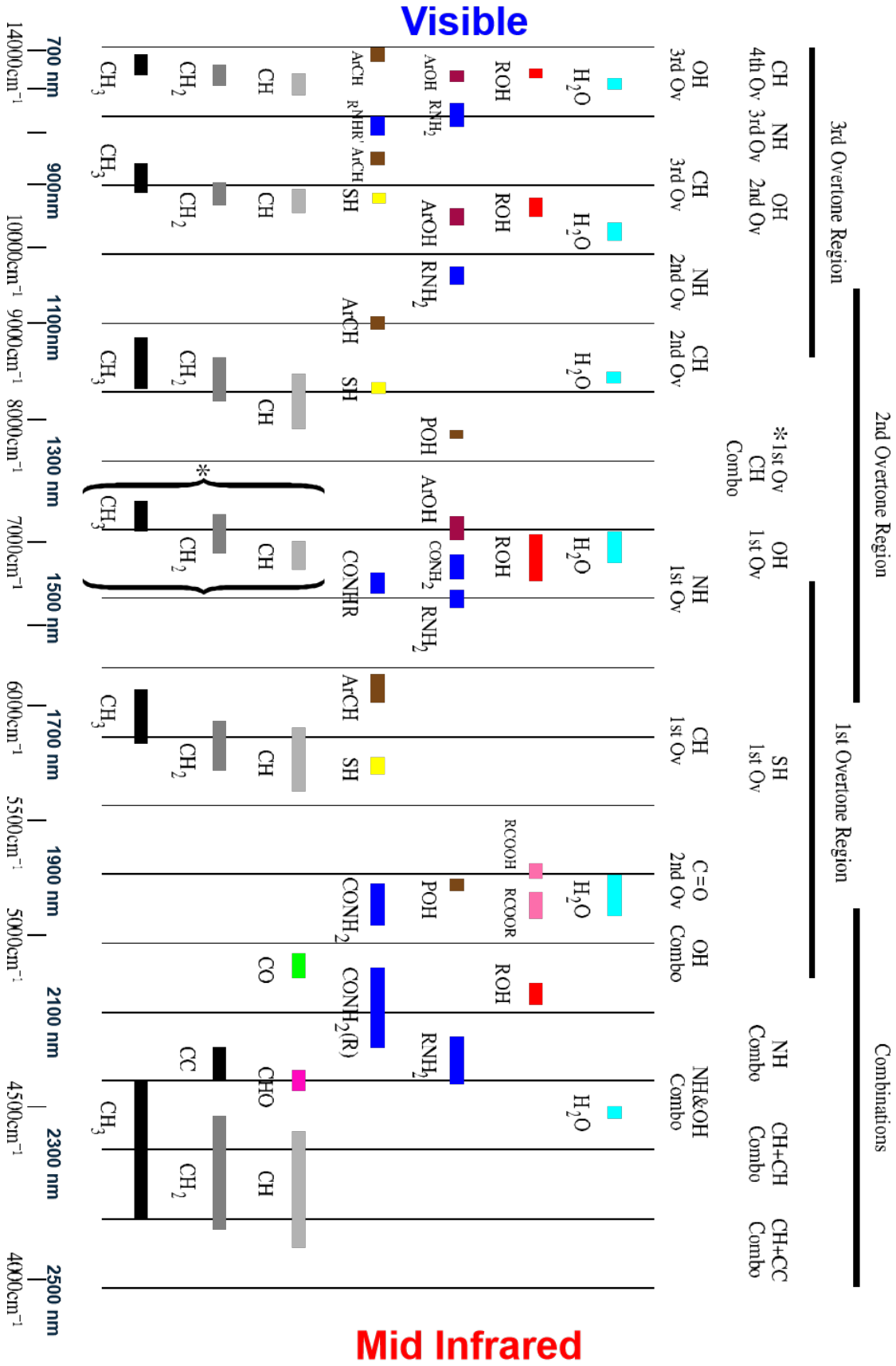
归一化

通过预实验将仪器参数调节到理想状态后，保存为配置参数文件，方便在‘数据获取’时使用。确保后期使用的配置参数与之前一致。

3.4. 吸收峰图谱

在帮助中，有常见化学键对应的近红外吸收峰波段图。





第四章、 数据获取（光谱采集）

进入‘数据获取’环节后

光谱采集需要暗电流、参比电流（白板电流），有背景数据后才可以采集吸光度光谱。背景数据可能受外界环境所影响，建议两个小时左右重新采集。

当有工程建立后，预实验选项卡将不再可以选择。

5.1. 新建采样项目



新建项目中配置文件必须为.nbs 类型文件，否则将有错误提示。

5.2. 命名规则

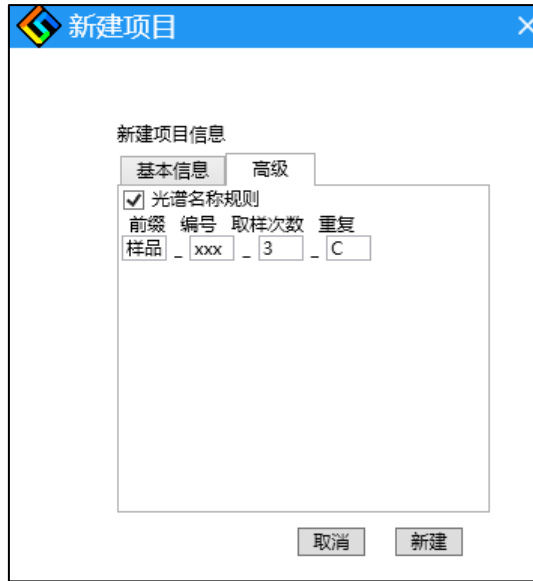
数据获取项目建立时，在高级选项卡中，可以设置，光谱名称规则不设置规则，则光谱不会进行比对，命名自动数字递增
可以配置的字段有：前缀、编号、取样次数、重复次数。

编号 xxx 代表三位数字，不足前位补 0

取样次数取值范围[1-9] 若为 1，则取样次数不显示

重复次数取值范围[A-F] 若为 A，则重复次数不显示

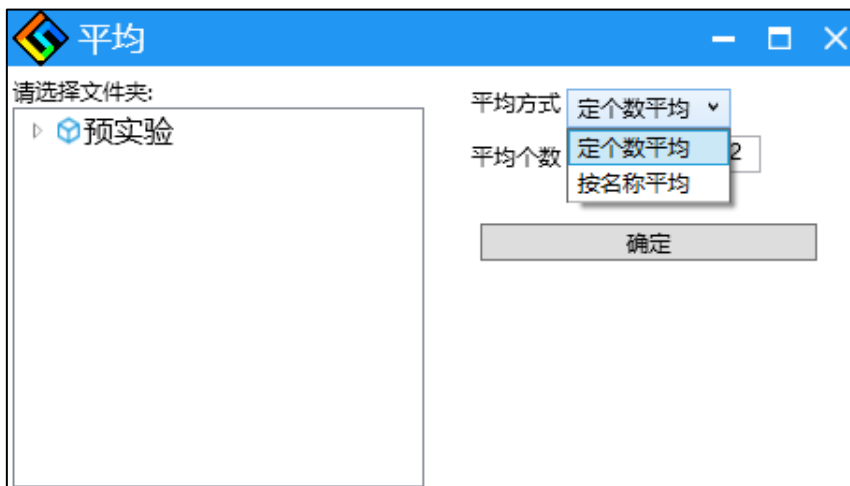




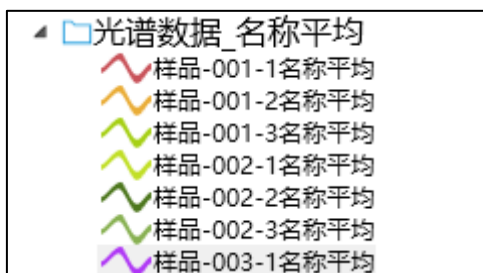
上图中配置自动生成光谱名称如下图



5.3. 平均



光谱命名采用设定规则后，可以按分组平均
 若没有设定规则，按组平均将没有作用
 对应 4.1 中配置的自动名称光谱按组平均后，如下图：



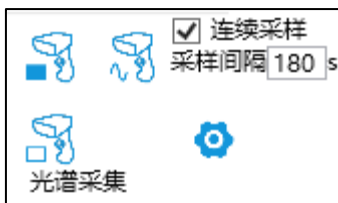
如果光谱为连续编号，则如下图：



5.4. 光谱采样

吸光度光谱必须先读取：暗电流光谱及参比值（白板）光谱。
 光谱采用可以用单次采样，以及连续间隔采样。

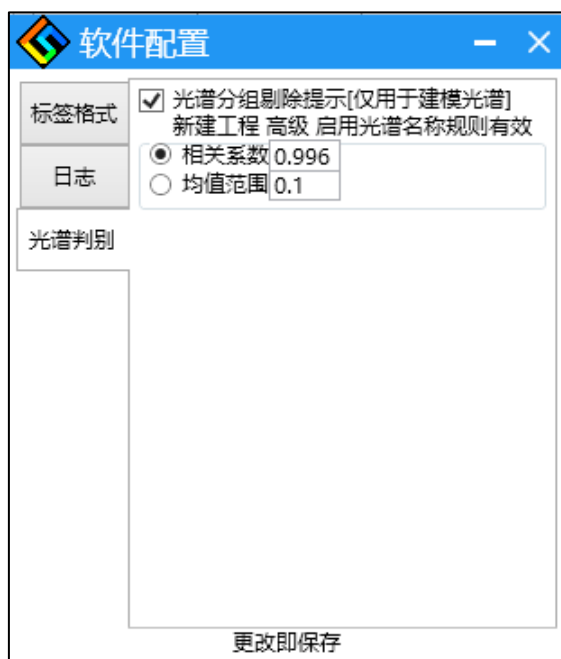




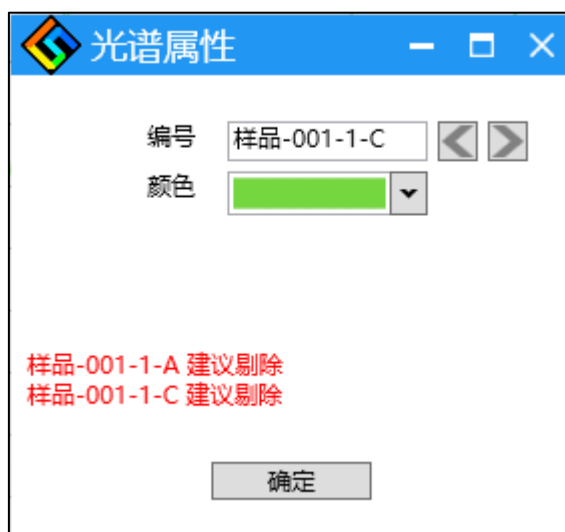
连续采样的重复次数再新建工程时配置。参考《4.1 命名规则》
中断连续采样，只需要将‘连续采样’复选框取消勾选。取消勾选后可能运行一个采样周期。

5.5. 光谱比对

【文件】【配置】【光谱判别】可以对重复采集光谱的特征进行比对，并给出相应的提示。

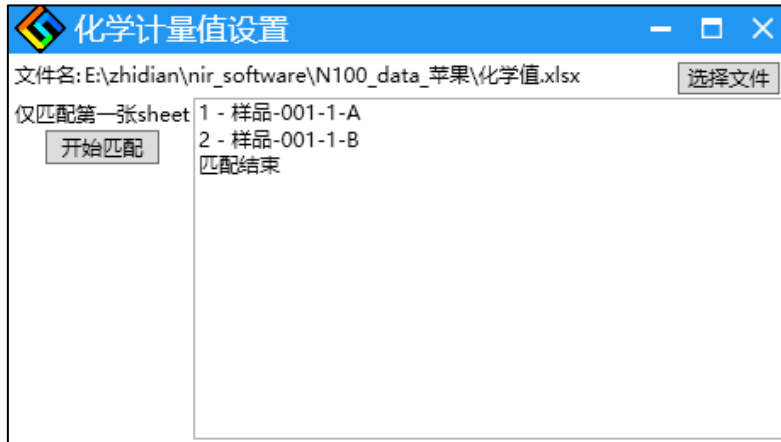


在光谱名称分组中比对光谱的相关性，给出是否需要重新测量的提示。
相关系数建议在 0.996 左右，均值范围需要根据实际情况而定
下图，展示了自动剔除提示窗口。



5.6. 化学值导入

右击光谱文件，可以导入光谱化学值



导入为 excel 文件
格式如下：

	A	B
1		酒精度
2	样品-001-1-A	1
3	样品-001-1-B	2
4		

第一行为化学值名称（第一个可空）
第一列为光谱名称



第五章、 样品检测

5.1. 导入模型

模型使用需要在有工程的基础上进行，需要配置仪器参数。

模型文件可接受类型为*.mdl 文件，由《NIRSA 数据处理系统》生成

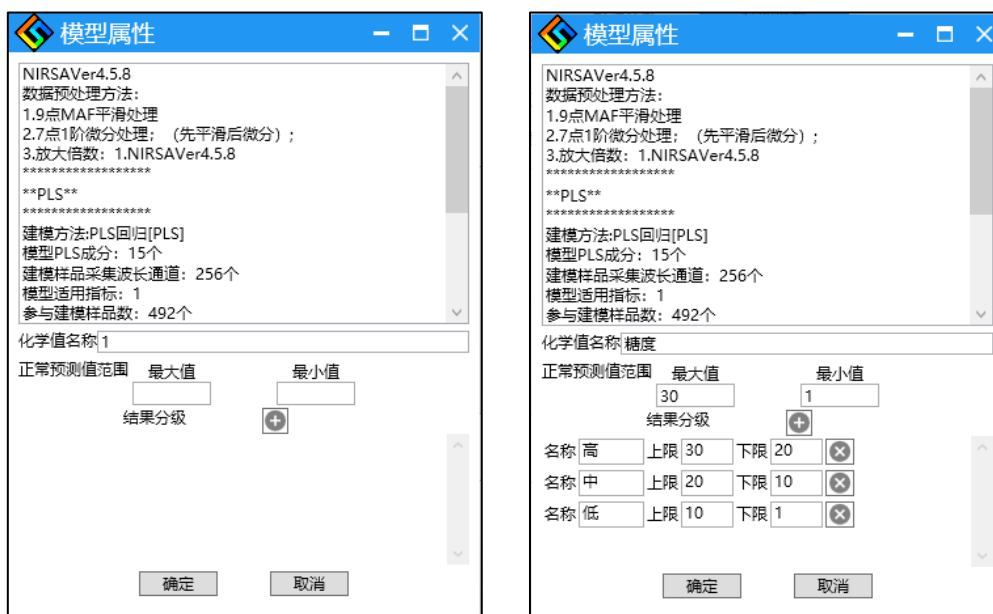


在样品检测栏导入.mdl 的模型文件后，将在“模型文件”文件夹内出现相应文件。



5.2. 预测结果

右击模型文件可以设置输出参数



如上图设置，将模型检测化学值名称设为糖度，可接受范围为[1,30]
[20,30]区间为高，[10,20]区间为中，[1,10]区间为低。

5.3. 连续预测



连续检测，可以根据设定间隔时间连续检测。

每次的预测结果可以通过标签打印机直接打印，参考 [《第7章标签打印》](#)

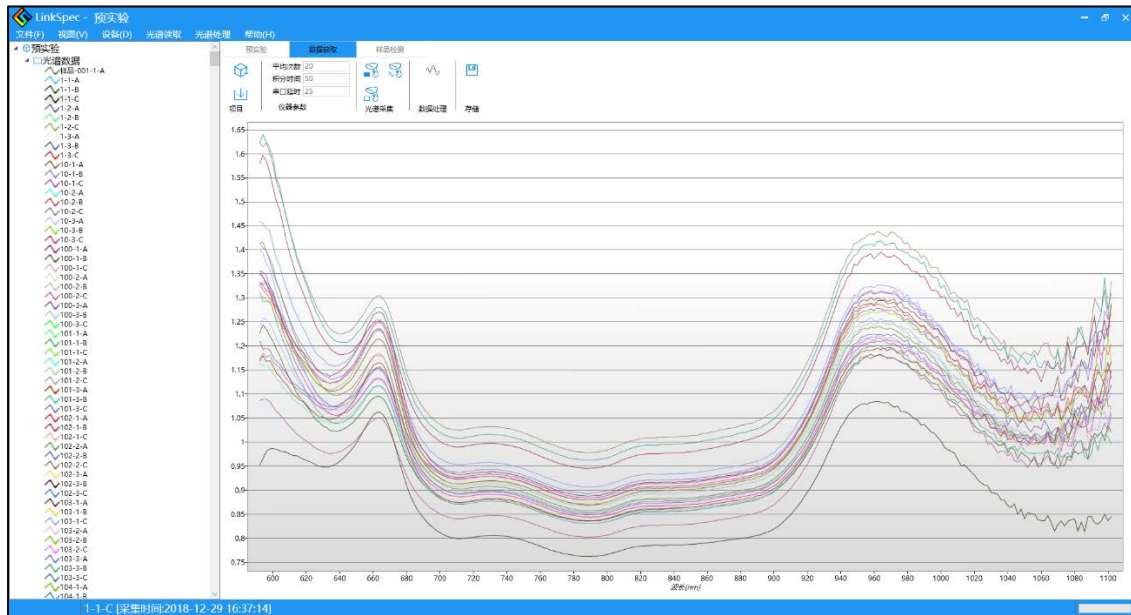


第六章、 光谱数据

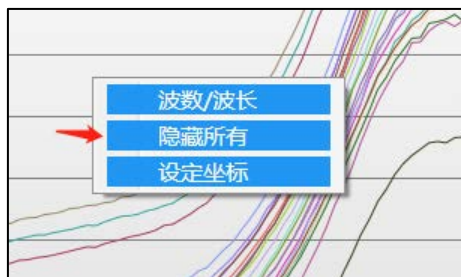
6.1. 光谱显示

【显示与隐藏】

在左侧选中光谱名称，在右侧即显示相应的光谱。



在右侧，波形图显示区域右击，即可隐藏



或在工程浏览区域中在光谱名称上右击隐藏对应光谱



【放大与缩小】

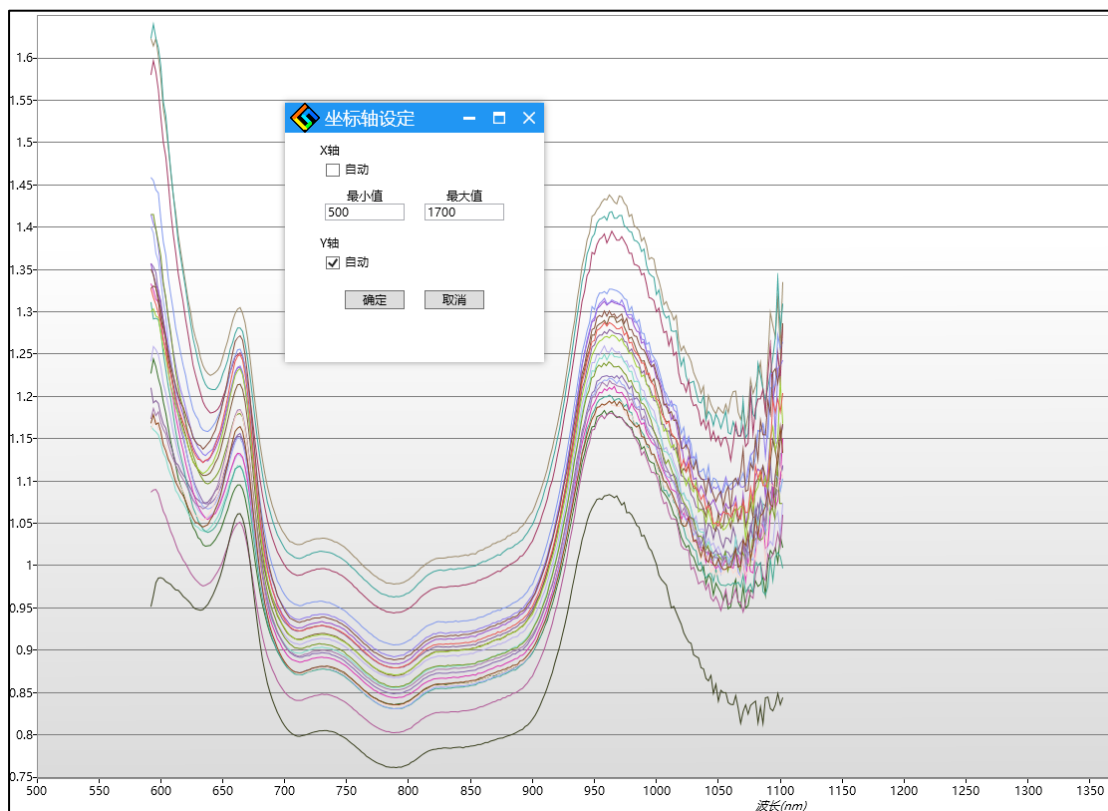
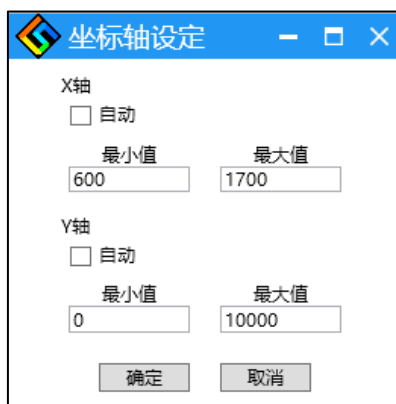


放大：在波形图显示区域中鼠标单击，从左到向右拖动

缩小：在波形图显示区域中鼠标单击，并从右向左拖动

【设定显示范围】

在显示区域右击，选择‘设定左边’，取消自动显示，并且填入数值

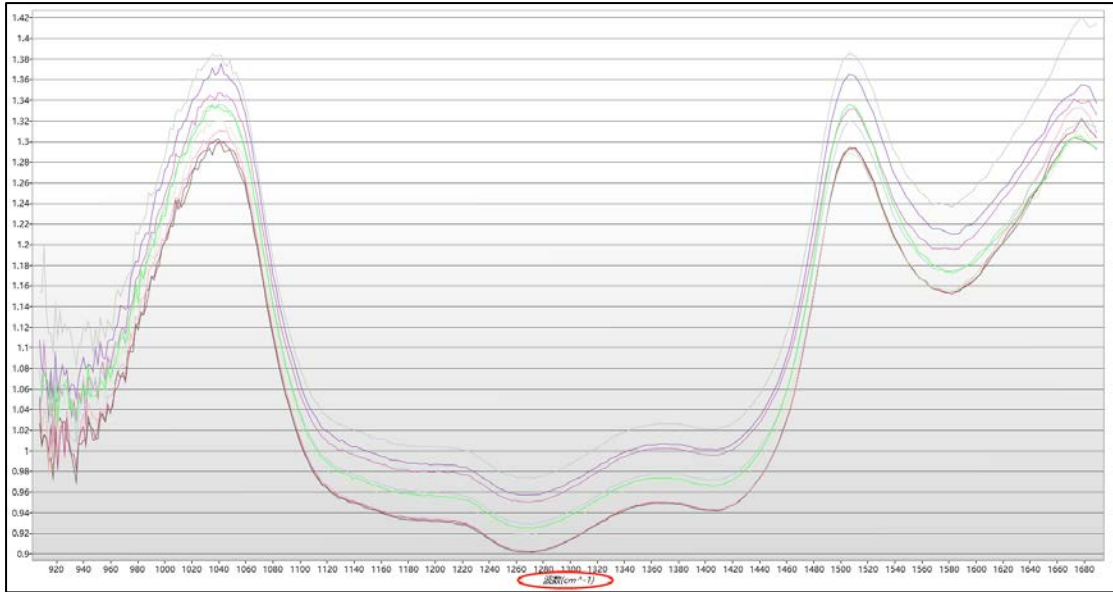


【波长与波数】

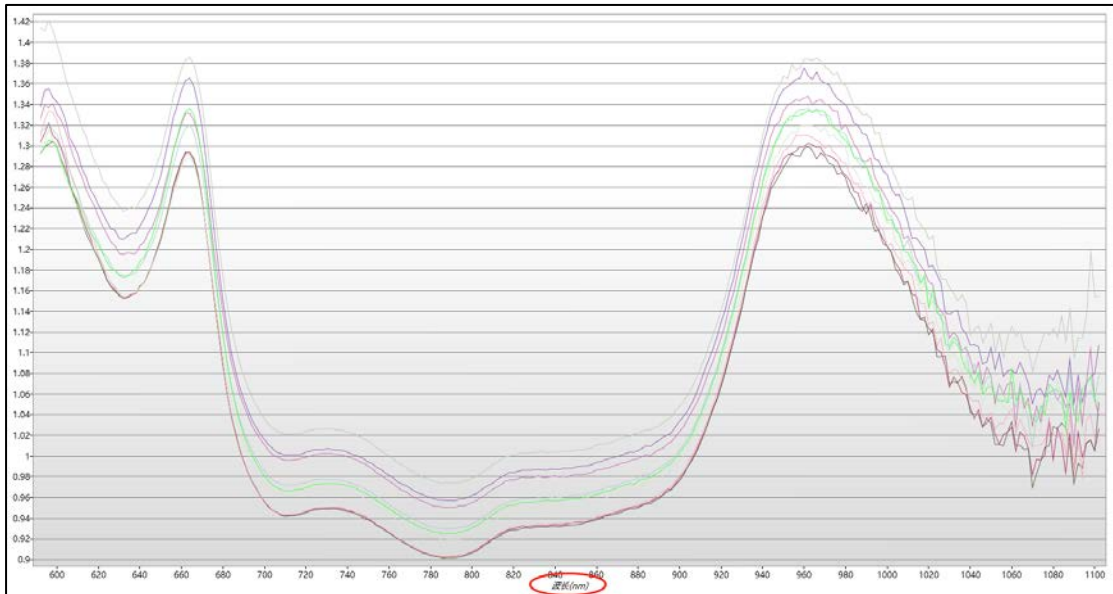
在‘波形图’区域中右击，可以切换波长与波数的显示。

注意：切换后，已显示光谱仍处于原显示状态，不会发生变化，需要隐藏后重新显示。





此处，上下两张图为同一组数据的不同显示

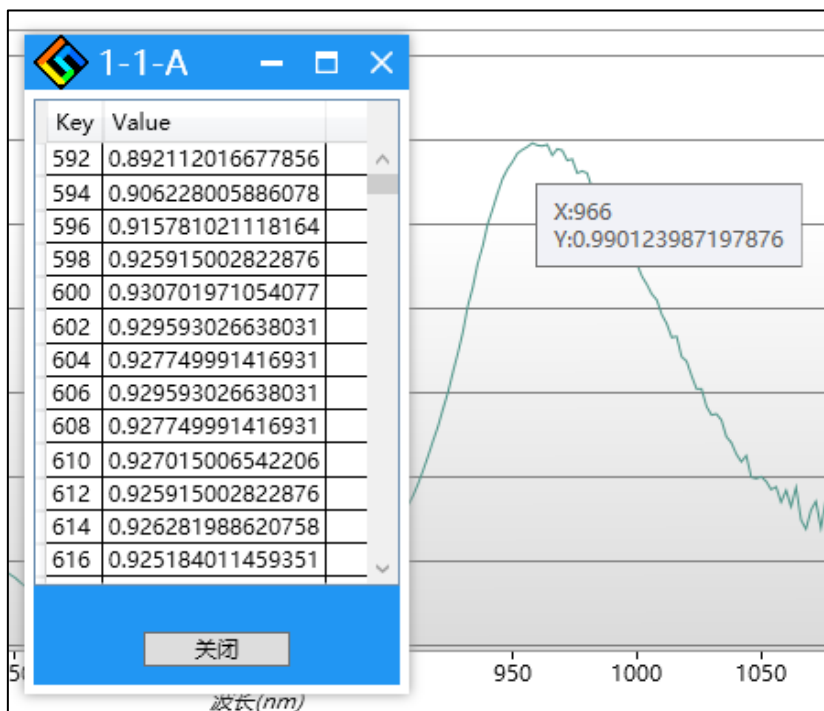


6.2. 数值显示

光谱除了图形显示之外也可以查看数值

参考《1.3 主界面》打开数据表板块，也可以对光谱进行右击‘查看数值’，打开窗口，如下图：

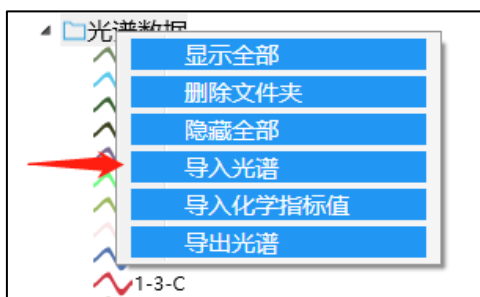




还可以将鼠标停留在光谱图上方，将显示对应光谱波段的数值

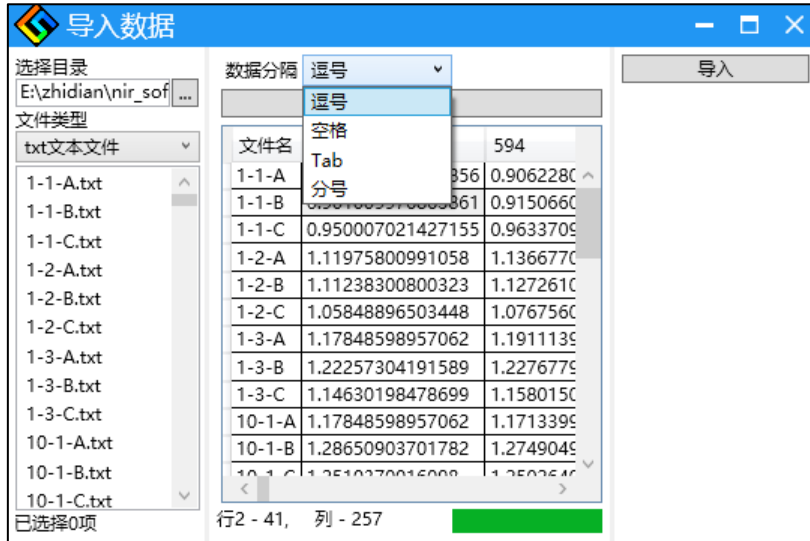
6.3. 导入光谱

在光谱数据文件夹右击，出现‘导入光谱’



在导入数据窗口中，依次选择文件目录、文件类型
文件类型为 txt 时，需要选择数据分隔的类型





导入数据时应注意原有数据与文件数据的匹配性。
导入后的光谱名称为文件名。

6.4. 导入文件格式

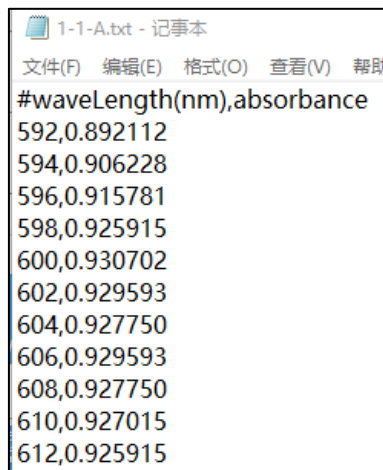
【txt】

#开始为注释行，不作为数据读入。不可导入非数值。

每一行包括一个波长值数据，一个光谱吸收值数据，有 128 个波段就应该对应有 128 行数据。数据分隔符号，可以选择为，逗号、空格、tab，以及分号。

光谱名称为文件名。

导入数据文件为 txt 时，可以选择多个文件一起导入。



Txt 文件数据示例

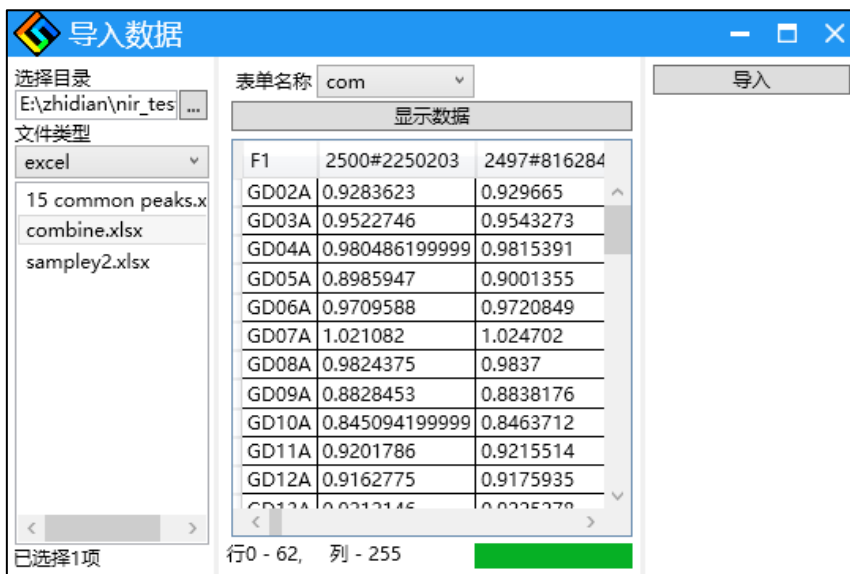
【excel】

每一行为一组光谱数据，第一列为光谱名称。

导入数据文件为 excel 时，仅可选择单个文件单个表单。

可以兼容 excel 的 xlsx 与 xls





	A	B	C	D	E	F
1		2500.225	2497.816	2495.412	2493.013	2490.6
2	GD02A	0.928362	0.929665	0.931075	0.934083	0.939
3	GD03A	0.952275	0.954327	0.956247	0.959076	0.9630
4	GD04A	0.980486	0.981539	0.982814	0.985482	0.989
5	GD05A	0.898595	0.900136	0.902112	0.905159	0.909
6	GD06A	0.970959	0.972085	0.973927	0.977439	0.9826
7	GD07A	1.021082	1.024702	1.028152	1.032446	1.0376
8	GD08A	0.982438	0.9837	0.984789	0.986894	0.9904
9	GD09A	0.882845	0.883818	0.884985	0.887766	0.8925
10	GD10A	0.845094	0.846371	0.848066	0.851739	0.8578
11	GD11A	0.920179	0.921551	0.92298	0.925604	0.9299

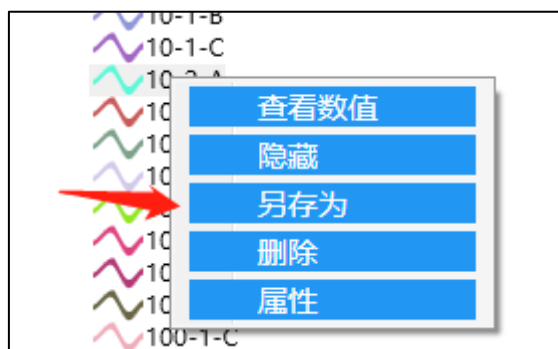
Excel 文件数据示例

6.5. 导出光谱

【单一光谱导出】

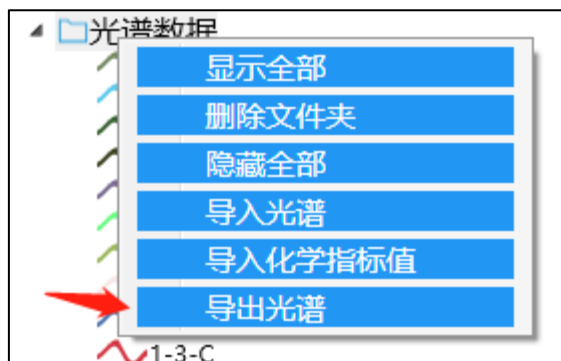
右击光谱‘另存为’，可以导出光谱数据。

默认文件名为‘工程名称+光谱名称’

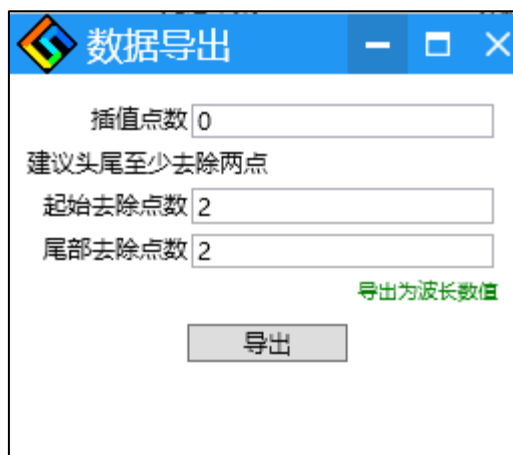


【光谱文件夹导出】





数据获取导出后使用建模软件进行建模，请使用原始数据，或时平均后的数据。光谱预处理中的求导、平滑、归一化，可能对预测结果产生影响。



插值点数，在两个波段点中间均匀插入点的个数。

导出时，头尾至少各去除两个点，否则可能影响预测（预测时将相对光谱进行插值，若首尾没有去除点，则不足的点将与原数据相同，求导后将为 0）

光谱读取点数为 A

插值点数为 B

起始去除点数为 C

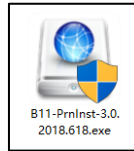
尾部去除点数为 D

则最终导出光谱点数为 $(A-1)*B+A-C-D$



第七章、 标签打印

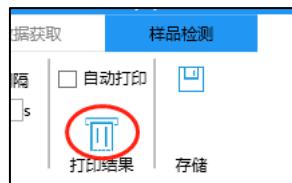
标签打印机可支持‘精臣 B11’，标签尺寸为 50*30
打印机驱动需要单独安装



在 文件>配置 中，可以配置标签打印格式



在样品检测中，打印标签查看结果

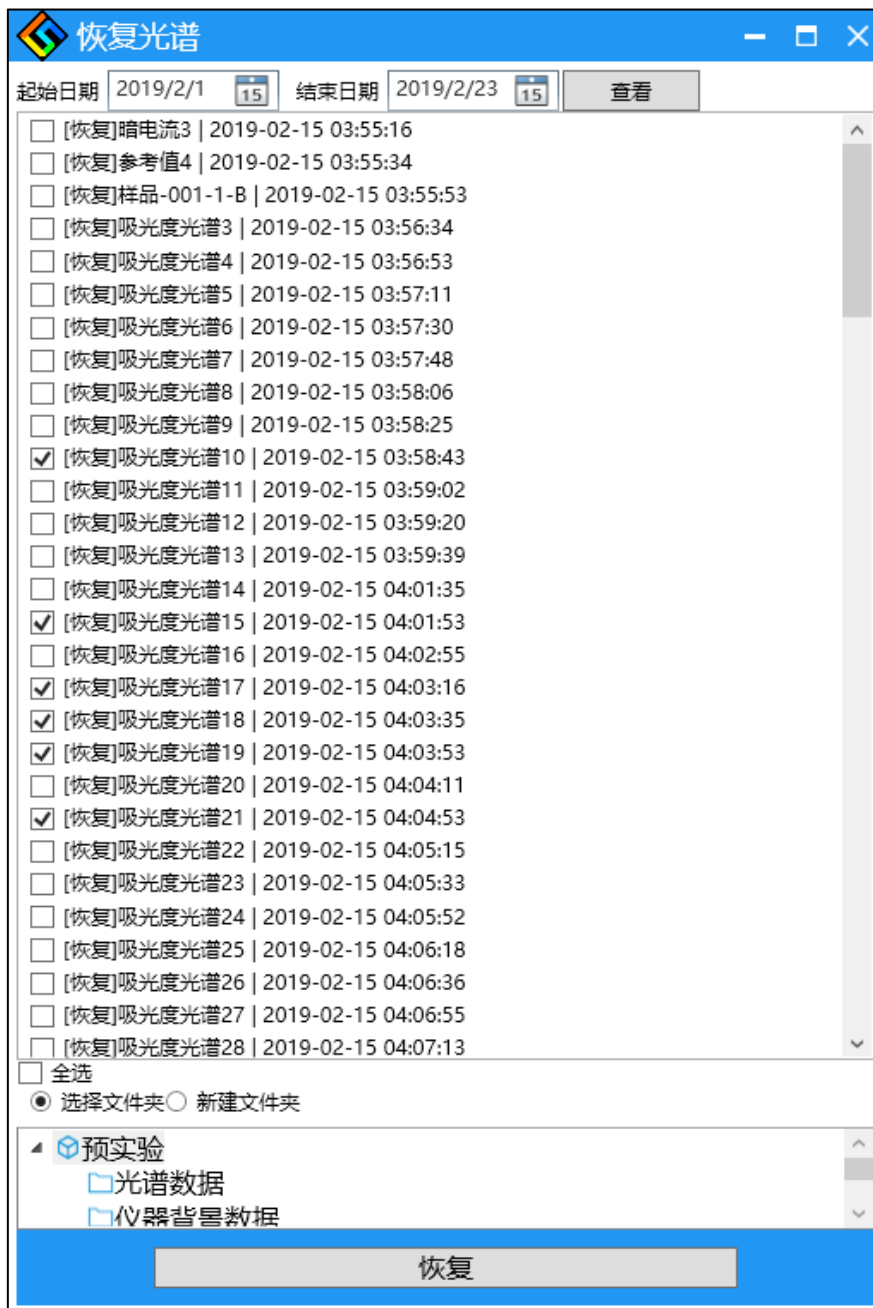


勾选“自动打印”，则在连续预测中，有新的光谱被预测时，相应的光谱信息与预测结果将被打印。



第八章、 恢复数据

对于所有读入光谱都有记录，但对删除、导入不作记录。



9.1. 选择光谱时间范围

选择的起始日期与结束日期，包含在检索范围之内。选择好起止日期后，点击查看按钮，将列出所有满足要求的光谱（包括仪器背景数据）

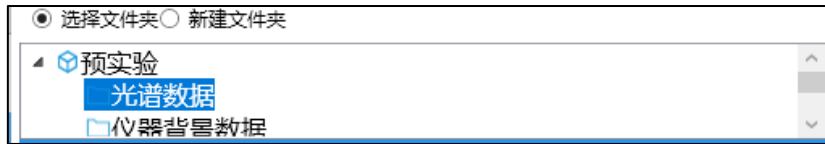


9.2. 选择光谱

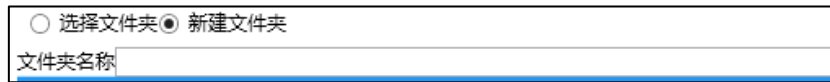
可以同左下角，全选框帮助快速选择。

9.3. 恢复目标文件夹

恢复目标文件夹可以时已由文件夹或新建一个文件夹（不可以重名）



选择现有文件夹方式



新建文件夹方式

光谱恢复后，记录的数据、名称、时间会被复原，但颜色会发生变化。

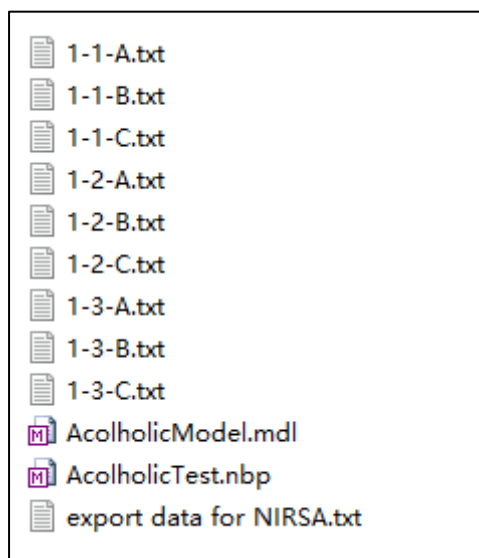


第九章、快速导引

9.1. 软件快速入门

在安装目录下有示例数据。

文件夹名称为 ‘Sample Data’，其中包含文件如下：



AcolholicModel.mdl 为 NIRSA 软件生成的模型文件，可以在本软件 ‘样品检测’ 环节导入使用。

AcolholicTest.nbp 为本软件保存的工程文件，可直接用本软件打开。包含数据为一组在线酒精测试数据。

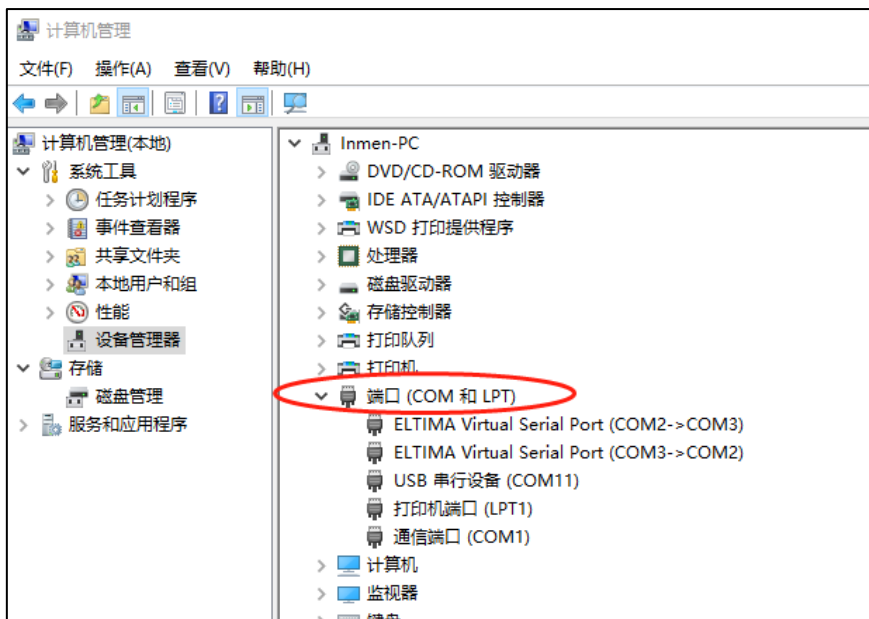
Export data for NIRSA.txt 为本软件导出给 NIRSA 分析的数据包文件，对应工程为 AcolholicTest.nbp。

其余文件为单独光谱文件可以通过本软件导入查看。导入方法请参考《6.3 导入光谱》。

9.2. 连接失败

串口驱动未安装正确，请检查 “计算机设备管理器”





确认设备被正确识别，以及正确的串口号。

9.3. 数据丢失

可以尝试重新打开软件。

请《参阅第 8 章》，若恢复数据窗口中缺少需要的数据。

请打开文件夹至安装目录， 如：

C:\Program Files (x86)\ZhiDian\LinkSpec

会有如下文件夹



请将其打包发送至 info@zhidian.la ， 将由工程师帮助您解决问题。

9.4. 光谱显示异常

不同的光谱仪数值范围不同，一下数据仅作参考：

暗电流数值范围： [0, 1500]

参考值数值范围： [0, 65535]

吸光度数值范围： [0, 1] 少数情况为负值

暗电流成杂乱形状，无规律。



参考值、与吸光度光谱在大区间内较平滑。

9.5. 工程文件（.nbp）打开失败

由于工程文件中保存有模型文件相关信息，模型文件位置移动后，会打开失败。

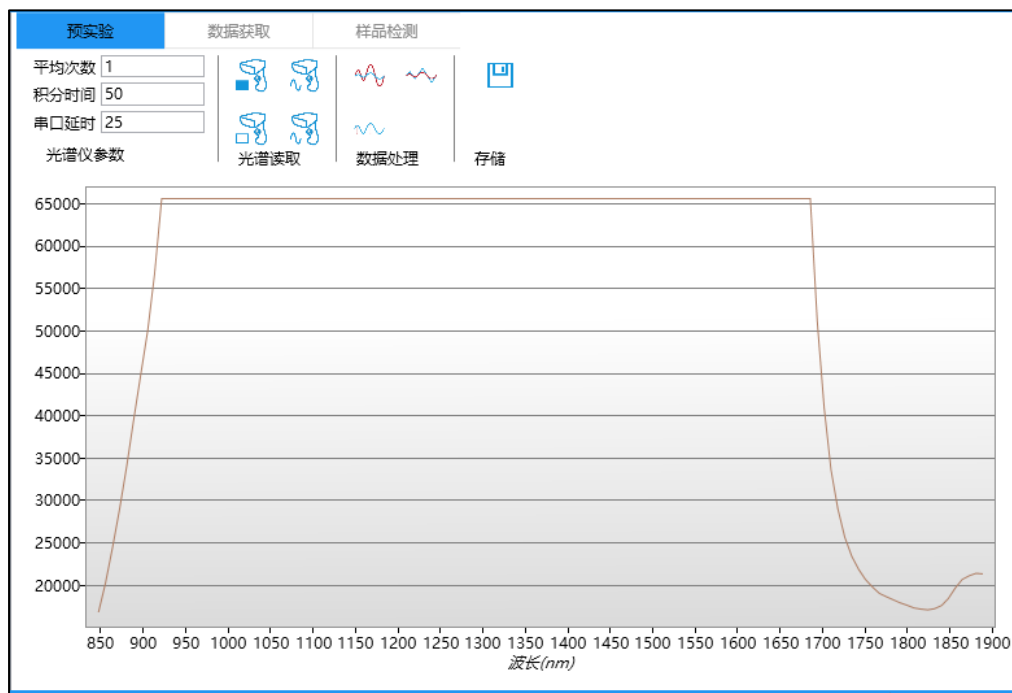
9.6. 误操作

对于删除光谱，文件夹，可以进行 **ctrl+Z** 进行撤销。请谨慎使用，撤销光谱与文件夹可能与现有对象有命名冲突！

9.7. 如何调节光谱仪参数

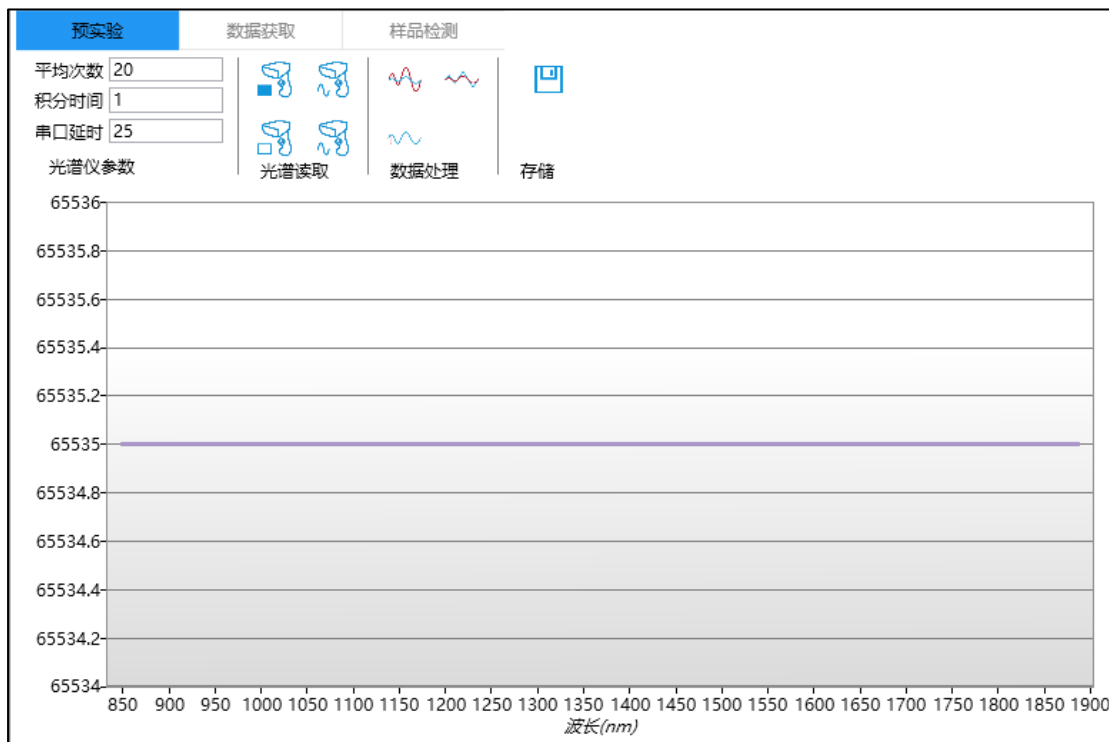
光谱仪参数调节的主要目标为使参比值最大，但不饱和。也需要通过调节光源功率大小来进行配合。

下图为参比值饱和状态（最高数值为 65000）



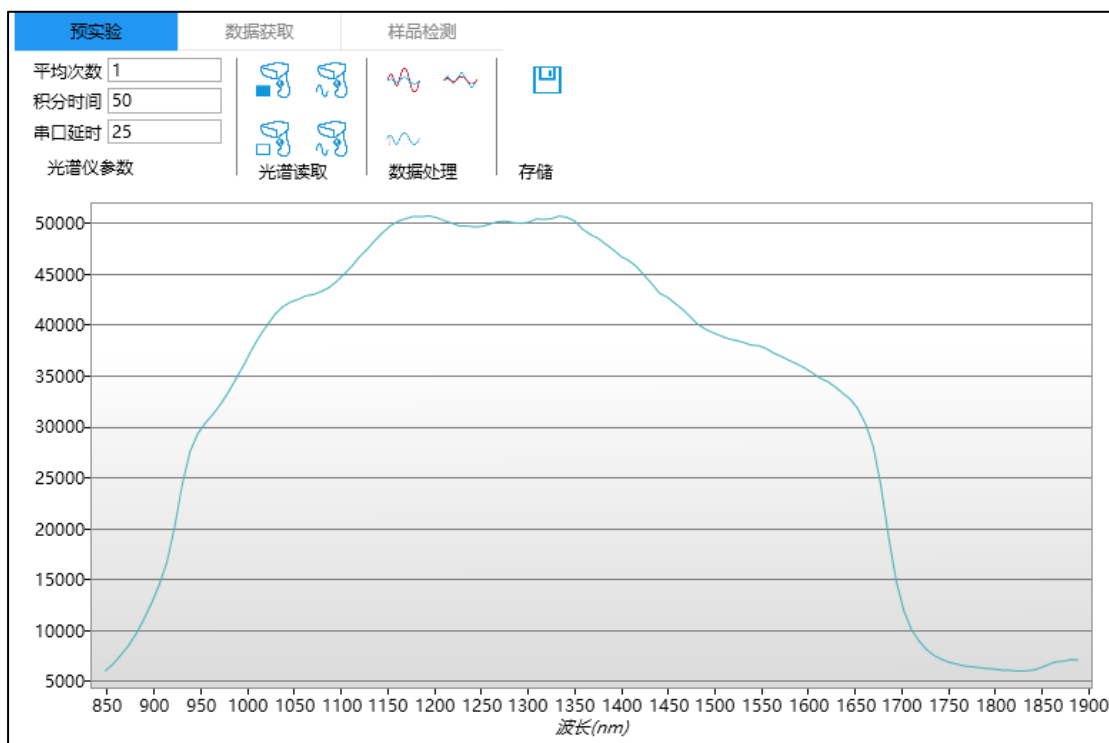
通过降低积分时间，仍然饱和（最高值为 65535）如下图：





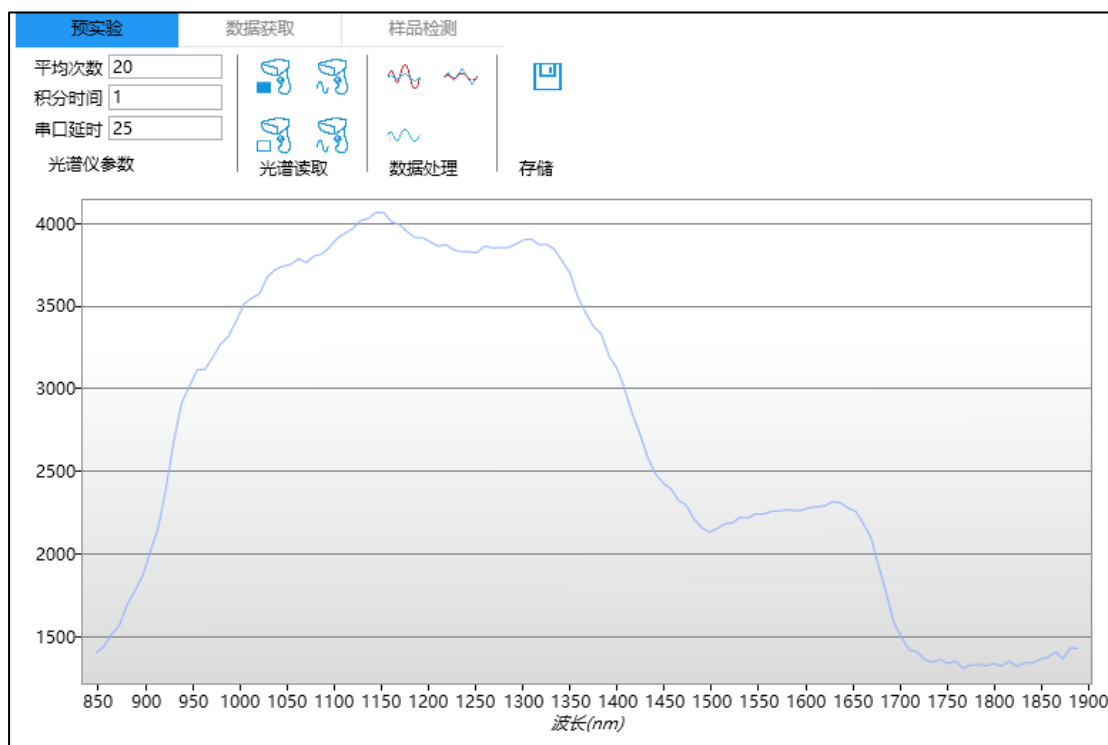
此时就不能再通过调节光谱仪参数达到目的，需要降低光源的功率。

如下图（此时最大值为 50000+，到仍未到饱和状态，可视为最佳状态）：



下图情况虽然可以体现光谱外形，但不建议采用。原因，最高值没有接近饱和，不能使光谱信息达到最容易解析的状态。





9.8. 反复提示暗电流或参比值需要重新测量

此种情况造成的原因：

- ①光谱仪通讯不稳定，导致部分数据再通讯过程中丢失。应该检查通讯线路，是否有外界干扰。另外可以尝试增加串口延时。
- ②测量中途更换过光谱仪，由于不同光谱仪之间存在台间差，具有不完全相同的仪器背景数据。

9.9. 如何切换英文版

本软件默认为中文版，有英文语言支持。

在安装目录下添加文件名为 `en.txt` 的空文件即可。

切换后界面如下：



