

---

USER MANUAL

# 安装及操作手册



**flavor**  
光谱测量分析软件

V2.0

# 目 录

<b>第一章 软件介绍</b>	4
一、软件简介	4
二、USB 光谱仪和设备控制	4
三、光谱学的功能	4
<b>第二章 软件下载及安装</b>	6
一、软件获取	6
二、软件安装	6
三、安装驱动程序	7
<b>第三章 软件界面</b>	8
一、总体介绍	8
二、界面结构	8
三、模块简介	9
<b>第四章 操作栏</b>	10
一、操作栏基本介绍	10
二、Detect 检测选项卡操作栏功能详细介绍	10
三、Algorithm 算法选项卡操作栏功能详细介绍	31
<b>第五章 设备与参数栏</b>	37
一、设备与参数栏基本介绍	37
二、设备模式详细介绍	37
<b>第六章 谱图面板</b>	42
一、谱图面板的基本介绍	42
<b>第七章 光谱记录</b>	44
一、光谱记录区域的基本介绍	44





# 第一章 软件介绍

## 一、软件简介

flavor 是一款光谱测量分析软件，可在 Windows 操作系统上运行。该软件可以控制任何 LQ Optics 的光纤光谱仪、拉曼光谱仪、激光器等设备的光谱检测设置和操作。flavor 软件的操作界面清晰简易，可同时控制多台设备，对设备进行参数设置，进行数据的图形和操作处理。

## 二、光谱仪和设备控制

flavor 可在多个窗口中轻松管理多台光谱仪（每台光谱仪具有不同的采集参数），并提供每台光谱仪的光谱图形和数据。使用 flavor，您可以将多个来源的数据同时显示在一个应用程序中，包括上升流/下降流测量、双光束参考和过程监控。

以下为 flavor 可使用的 LQ Optics 的光谱仪列表：

- RAPTOR 系列光谱仪
- TREX 系列光谱仪
- GODZILLA 系列光谱仪
- HiNA 系列光谱仪
- HiNA N 系列光谱仪
- BLADE 系列拉曼光谱仪
- BLAZE 系列便携式拉曼光谱仪

## 三、光谱学的功能

flavor 允许您执行多种基本的光谱实验：吸光度、反射率、辐照度和拉曼光谱，以及绝对辐照度、颜色和化学浓度等。还包括电子暗噪声校正、杂散光校正、Boxcar 像素平滑和平均次数等信号处理功能。flavor 的基本概念是实时显示数据，使您能够评估其实验

设置和数据处理选择的有效性，更改这些参数，立即查看效果并保存数据。

借助 flavor，您可以进行动力学应用的相关实验。作为时间采集功能（时序图）的一部分，您可以监控单个波长的强度，也可以取多个波长的平均值或者积分值进行监控。



## 第二章 软件下载及安装

### 一、软件获取

您可以通过 <https://www.lqoptics.com/support/> 网址下载最新版的 flavor 软件。

### 二、软件安装

双击 flavor.exe 启动软件安装程序，随后弹出运行动态图，一键完成安装。



图 2.1 安装界面

安装完毕后：

1. 生成桌面快捷图标；
  2. 自动开启软件，显示设备加载页面；（见图 2.2）
- ⚠ 注意：如果未连接光谱仪或未安装设备驱动，软件将会一直显示加载页面。**
3. 首次开启软件后，通过 USB 数据线将光谱仪设备与计算机连接，然后点击“Install Driver”安装驱动程序。

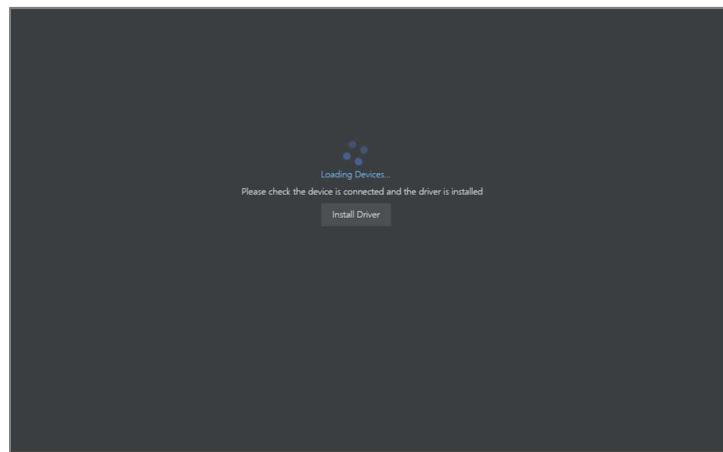


图 2.2 设备加载界面

### 三、安装驱动程序

1. 将光谱仪设备通过 USB 数据线连接至计算机；
2. 点击“Install Driver”；
3. 在弹出的驱动安装界面中，点击“Reinstall Driver”按键进行安装，安装可能需要几分钟。

**⚠ 注意：安装的是一个通用的驱动程序，适用于所有的 LQ Optics 的光谱仪设备。**

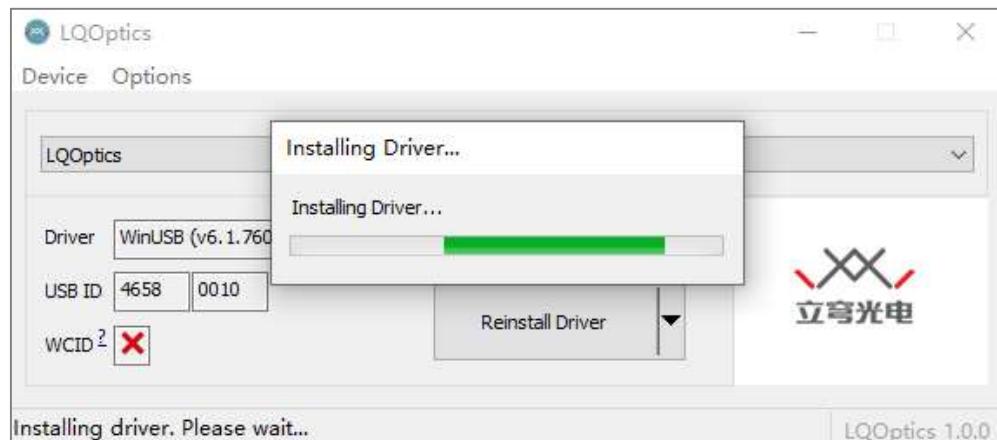


图 2.3 驱动安装界面



# 第三章 软件界面

## 一、总体介绍

flavor 由许多图标和按键形式的可视控件组成。本章介绍这些控件以及如何使用它们。

某些菜单选项和控件需要执行某些操作才能使用。当不可用时，点击这些控件会弹出相关信息。

## 二、界面结构

检测页面采用模块化设计，划分为四个模块，分别是操作栏模块、设备及参数模块、谱图面板模块、光谱记录模块。（见图 3.1）

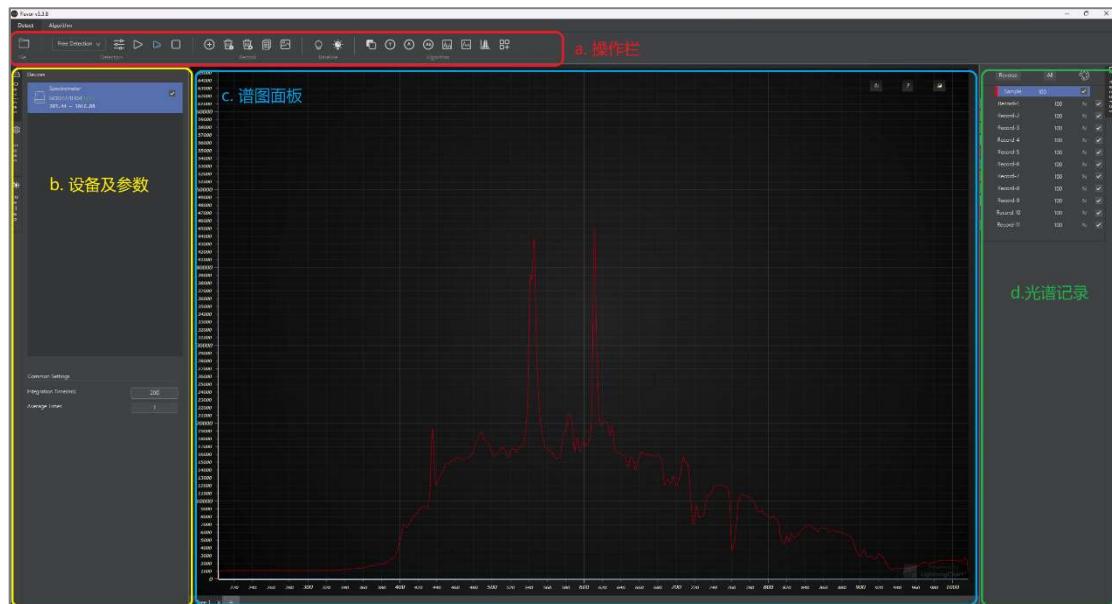


图 3.1 界面结构

### 三、模块简介

a	操作栏	这部分是软件的核心，包括对光谱仪的控制、对光谱数据的储存、处理、以及多种光谱图展示形式的切换和设置都在这里进行。
b	设备及参数	这里显示已连接的设备信息。同时，对设备的基本参数的设置调节也在那里进行。
c	谱图面板	这是光谱图的显示区域，可以通过简单的操作智能缩放谱图，查看光谱细节。
d	光谱记录	在这里会显示已保存的光谱数据，可以快速切换或叠加想要显示的光谱数据。



# 第四章 操作栏

## 一、操作栏基本介绍

操作栏的内容分为两个选项卡，检测 Detect 选项卡和算法 Algorithm 选项卡。

- 当您选择检测 Detect 选项卡时，可执行跟检测相关的所有设置，包括但不限于对光谱仪和光源的控制、数据的储存和导入、测量模式的切换和对活动光谱的数据处理等。
- 当您选择算法 Algorithm 选项卡时，可对已经保存的光谱记录进行复杂的数据处理。

当鼠标悬停于任意按键上方时，会出现该按键的功能简介，如图 4.1 所示。

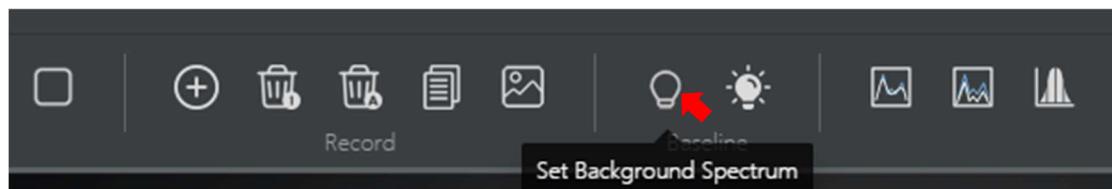


图 4.1 鼠标悬停效果

## 二、Detect 检测选项卡操作栏功能详细介绍

Detect 检测选项卡的操作栏分为以下 5 个部分：



图 4.2 操作栏

a	文件	包含光谱数据导入导出功能，以及刷新设备和软件调试等功能。
b	检测	包含光谱采样模式、采样设置和采样操作。
c	记录	包含增加、删除记录，以及复制光谱数据、保存 Chart 图片等功能。

d	基线	包含设置背景光谱（暗光谱）和设置参考光谱等功能。
e	算法	包含常用的光谱测量模式的切换：透过率、反射率模式，吸光度模式，绝对辐射光谱等模式；同时包含常用的光谱数据处理算法：如扣除背景、消除荧光（拉曼专用）、高级平滑、归一化、寻峰等功能（部分功能在 Algorithm 菜单栏中显示）。

## 1. 文件

a) 导出文件 

将光谱记录栏中勾选的光谱数据导出到文件（如图 4.3 所示），支持 excel、txt 格式。

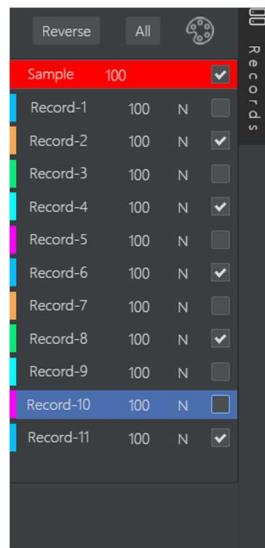


图 4.3 勾选的光谱数据

b) 导入文件 

导入光谱数据文件，支持 excel、txt 格式。

 注意：导入的文件格式需和导出文件的格式一致。

c) 刷新设备 

当连接到计算机上的光谱仪设备没有自动识别时，可以点击此按键手动刷新设备。



点击该按键后，右侧会出现调试界面，显示软件运行日志、页面结构等功能。

## 2. 检测

### a) 采样模式

flavor 提供四种主要的采样模式，每一种采样模式都有其优势，选择适合的采样模式往往能发挥出光谱仪的最佳性能。

a	Free Detection	最常用的模式，可以查看单次测量的光谱图，也可以刷新显示连续测量的光谱图。
b	Sequence Detection	时序测量模式。当需要监控某一个波长（或某一段波长）的光谱强度随时间变化的趋势时，可选用该模式。
c	High-speed Detection	高速采集模式。若需要使用极短的积分时间连续采集光谱数据时，选用该模式可以避免丢帧现象。
d	Concentration Detection	浓度检测模式。根据比尔-朗博定律，建立物质浓度 vs 吸光度的模型，从而便于检测未知样品的浓度。

**注意：**在完成采样模式的选择后，“检测”区域的功能按键及谱图面板也会自动切换。

### b) 采样设置

当完成采样模式的选择后，点击该按键，可以进行详细的设置。这些设置功能将在下方详细说明。

#### 2.1 Free Detection 自由检测

- 使用场景：最常用的模式，可以查看单次测量的光谱图，也可以刷新显示连续测量的光谱图。
- 采样设置：采样设置分为参数设置和设置明细两部分（见图 4.4），参数设置包含常用的检测前参数（积分时间、激光功率等）和检测后参数（消荧光、平滑等）的设置，具体内容如下：

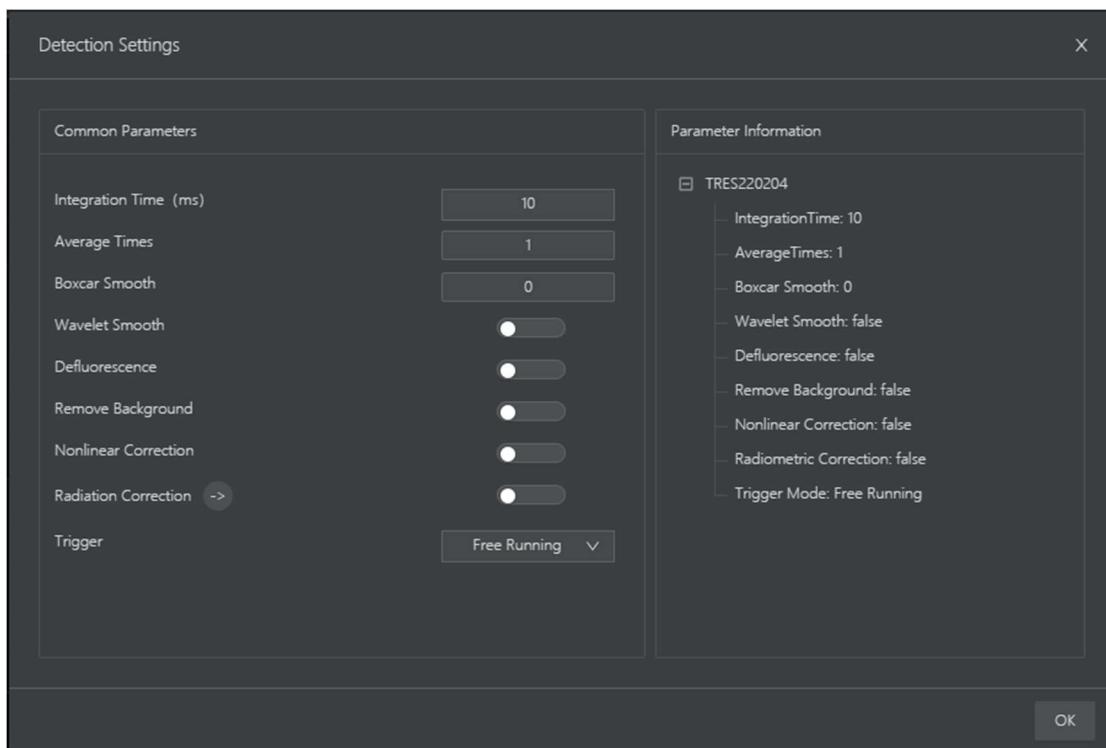


图 4.4 Free Detection 采样设置

- Integration Time (ms)：积分时间。指光谱仪单次采集的时间。积分时间越长，光谱仪采集到的光谱信号就越强，但所花费的时间也越多，同时也会导致噪声更高；
- Average Times：平均次数。指您希望将几张连续采集的光谱数据进行平均处理。平均次数越多，经处理后的光谱图的信噪比越高，但所花费的时间也越多；
- Boxcar Smooth：Boxcar 平滑或称邻域平均。其原理是用某个数据点相邻数据的平均值来替代该数据点的原始值，从而起到减小噪声的作用。但该方法也会降低光谱数据的细节，使其变得模糊；
- Wavelet Smooth：小波平滑。这是一种高级的平滑处理方式，在降低噪声的同时，不会损失光谱细节。但小波平滑需要占用比较多的计算资源，可能会影响计算机卡顿或操作变慢（取决于计算机配置）；
- Defluorescence：扣荧光。该功能主要用于拉曼光谱的数据处理。其原理为：相对于拉曼信号而言，荧光信号属于慢变信号，扣荧光的功能会将慢变信号识别为荧光信号而扣除，从而留下相对快变的拉曼信号；

- Remove Background: 扣除背景。在大部分光谱应用中，都需要扣除暗噪声、环境光等背景信号，点击该按键后，在谱图面板上显示的光谱将自动扣除预存的背景光谱；（可通过点击操作栏上基线功能区的  来储存背景光谱。）
- Nonlinear Correction: 非线性校正。由于 CCD 等感光元件的物理缺陷，导致其在整个检测量程中（即光强、Y 轴方向）并非线性。LQ Optics 生产的每一台光谱仪，均会进行非线性校正，以提高光谱仪的信号强度的测量准确性和线性度。因此在任何情况下，建议开启非线性校正功能；
- Radiation Correction: 辐射校准。当您需要进行辐照度检测时，可以打开该开关，并点击箭头选择对应的辐射校准文件；
- Trigger: 触发模式。在这里可以选择多种光谱仪的触发模式。关于触发模式的介绍，请向 LQ Optics 的工程师索要《光谱仪触发模式说明文档》。

c) 采样操作 

- Start  : 单次采集。点击一次，光谱仪将以现有的参数设置采集一张光谱，并显示在谱图面板上；
- Continue  : 连续采集。点击该按键，光谱仪将以现有的参数设置连续采集光谱，并不断在谱图面板上刷新显示；
- Stop  : 停止采集。点击该按键，光谱仪将停止采集，谱图面板上将显示最近的一张光谱图，且不再更新。

d) 谱图显示：显示当前采集样本光谱和添加的记录光谱（见图 4.5）。

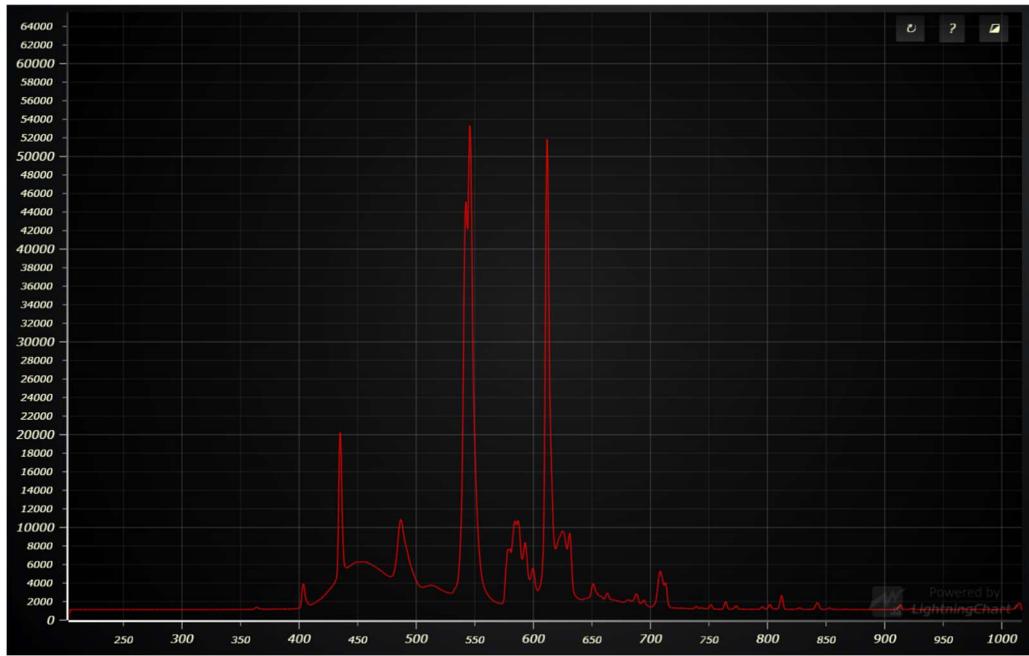
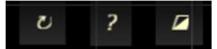


图 4.5 谱图显示

在谱图界面的右上角有三个快捷按键  分别代表：

- ：恢复默认显示范围；
- ：谱图界面操作方式指南（在下文中会详细说明）；
- ：切换谱图界面底色为黑色/白色。

## 2.2 Sequence Detection 时序检测

- a) 使用场景：当需要监控某一个波长（或某一段波长）的光谱强度随时间变化的趋势时，可选用该模式。
- b) 采样设置：包含 Detection Settings 采样设置和 Sequence 时序设置两部分，请先完成 Detection Settings 采样设置，界面如图 4.6 所示，具体参数说明如下：

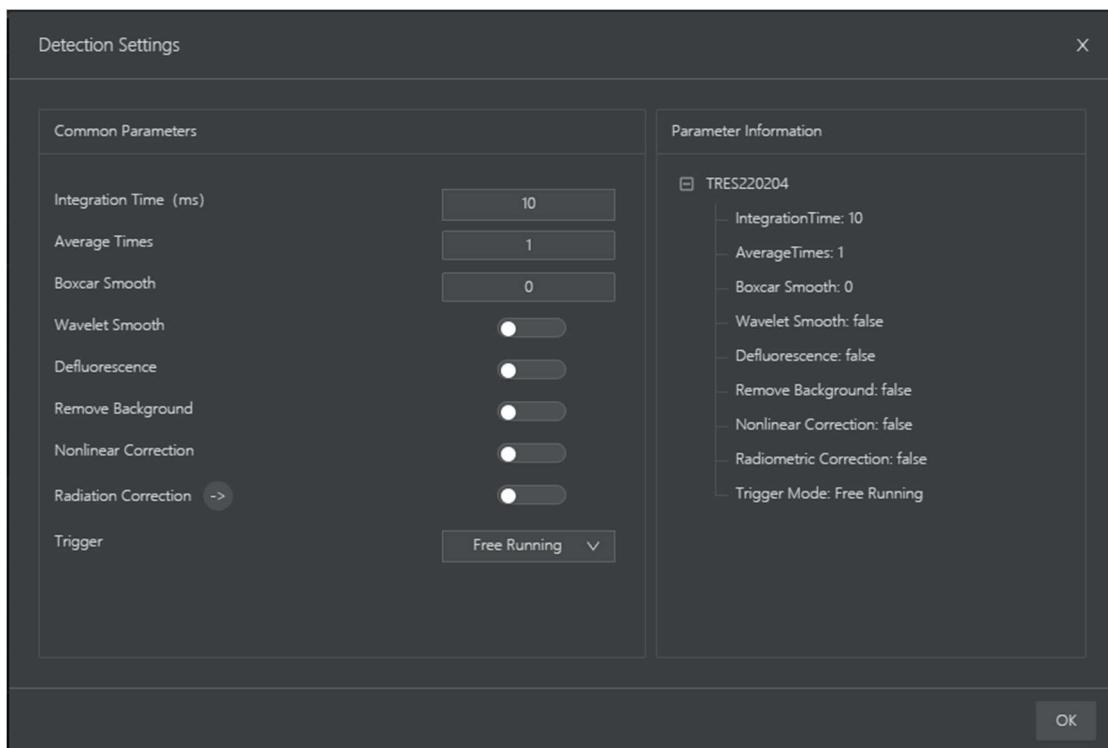


图 4.6 Sequence Detection 采样设置

- Integration Time (ms)：积分时间。指光谱仪单次采集的时间。积分时间越长，光谱仪采集到的光谱信号就越强，但所花费的时间也越多，同时也会导致噪声更高；
- Average Times：平均次数。指您希望将几张连续采集的光谱数据进行平均处理。平均次数越多，经处理后的光谱图的信噪比越高，但所花费的时间也越多；
- Boxcar Smooth：Boxcar 平滑或称邻域平均。其原理是用某个数据点相邻数据的平均值来替代该数据点的原始值，从而起到减小噪声的作用。但该方法也会降低光谱数据的细节，使其变得模糊；
- Wavelet Smooth：小波平滑。这是一种高级的平滑处理方式，在降低噪声的同时，不会损失光谱细节。但小波平滑需要占用比较多的计算资源，可能会影响到计算机卡顿或操作变慢（取决于计算机配置）；
- Defluorescence：扣荧光。该功能主要用于拉曼光谱的数据处理。其原理为：相对于拉曼信号而言，荧光信号属于慢变信号，扣荧光的功能会将慢变信号识别为荧光信号而扣除，从而留下相对快变的拉曼信号；

- Remove Background: 扣除背景。在大部分光谱应用中，都需要扣除暗噪声、环境光等背景信号，点击该按键后，在谱图面板上显示的光谱将自动扣除预存的背景光谱；（可通过点击操作栏上基线功能区的  来储存背景光谱。）
- Nonlinear Correction: 非线性校正。由于 CCD 等感光元件的物理缺陷，导致其在整个检测量程中（即光强、Y 轴方向）并非线性。LQ Optics 生产的每一台光谱仪，均会进行非线性校正，以提高光谱仪的信号强度的测量准确性和线性度。因此在任何情况下，建议开启非线性校正功能；
- Radiation Correction: 辐射校准。当您需要进行辐照度检测时，可以打开该开关，并点击箭头选择对应的辐射校准文件；
- Trigger: 触发模式。在这里可以选择多种光谱仪的触发模式。关于触发模式的介绍，请向 LQ Optics 的工程师索要《光谱仪触发模式说明文档》。

设置完成后，点击“Next”，进入 Sequence 时序设置部分。时序设置界面如图 4.7 所示，详细设置说明如下：

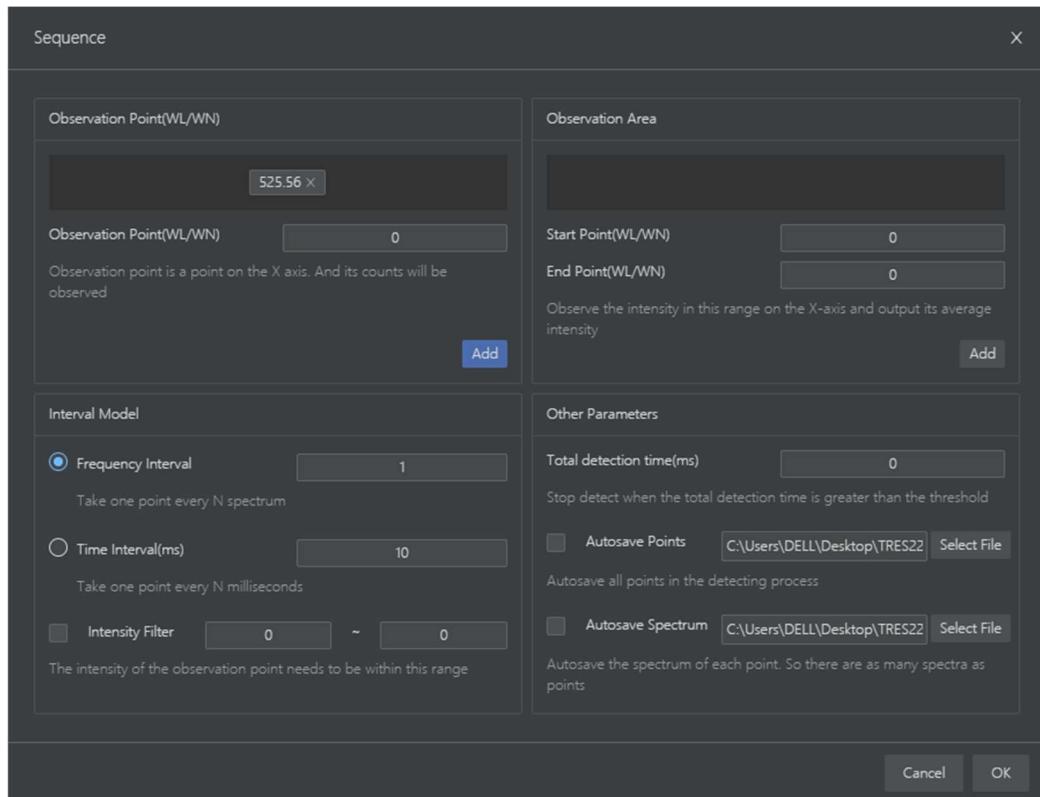


图 4.7 Sequence Detection 时序设置

- Observation Point (WL/WN) : 单个波长/波数点光强监控。当您希望监控某个波长/波数点（或多个波长/波数点）的光强随时间的变化趋势时，可在 Observation Point (WL/WN) 处输入对应的波长/波数值，然后点击“Add”按键，软件会自动匹配与输入数值最接近的某个像素的准确波长/波数值。可以采用此方法添加多个监控点，也可点击已添加监控点旁的“X”删除该数据点；

 **注意：**系统会根据当前谱图界面的横坐标单位判断波长或波数。您可以在设备及操作栏的“Raman”选项卡中进行波长和波数的切换。

- Observation Area (WL/WN) : 一段波长/波数内光强平均值监控。当您希望监控某段波长/波数的光强随时间的变化趋势时，可在 Start Point (WL/WN) 和 End Point (WL/WN) 处分别输入起始和截止波长（波数），然后点击“Add”按键，软件会自动匹配与输入数值最接近的某段像素的准确波长/波数值。可以采用此方法添加多个监控范围，也可点击已添加监控范围旁的“X”删除该数据段；

 **注意：**系统会根据当前谱图界面的横坐标单位判断波长或波数。您可以在设备及操作栏的“Raman”选项卡中进行波长和波数的切换。

- Interval Model 间隔模式：当完成了监控点或监控范围的设置后，需要在此处设置监控模式和频率：
  - 选择 Frequency Interval，并在后方输入相应的数值 N，表示软件将每隔 N 次光谱采集，记录一次监控点或监控范围的强度值；
  - 选择 Time Interval (ms)，并在后方输入相应的数值 N，表示软件将每隔 N 毫秒，记录一次监控点或监控范围的强度值；
  - Intensity Filter 强度过滤，当您只关心某个强度范围内的数据变化时，可以勾选该按键并输入强度范围，则在监控执行时，软件会判断监控点的数据是否在设置范围内，只有落入范围内的数据才会被记录。
- Other Parameters 其他参数：在这里，您可以设置监控停止的条件，以及监控数据和光谱数据的保存路径；

- Total Detection Time 检测总时间：当检测总时间达到设置的时间时会停止监控任务；
- Autosave Points 自动保存时序：勾选后，会自动保存监控点或段的时序数据至指定路径；
- Autosave Spectrum 自动保存光谱：勾选后，会自动保存每一个时序点对应的整幅光谱数据至指定路径。

c) 采样操作

- Start  启动时序监测。点击该按键，按键会变成蓝色，此时时序监测开始启动，您可以在谱图界面看到光谱和数据更新；
- Pause  暂停时序监测。当时序监测正在执行时，点击该按键，时序监测将会暂停，此时该按键会变成蓝色，当再次按下 Start 按键后，可恢复时序监测；
- Stop  停止时序监测。点击该按键后，时序采集将会停止，且该按键会变成蓝色。当再次按下 Start 按键后，将重新开始时序监测，**当前的监测数据将被清空**。

d) 图谱显示

时序监测的图谱界面分为三个部分，如图 4.8 所示。

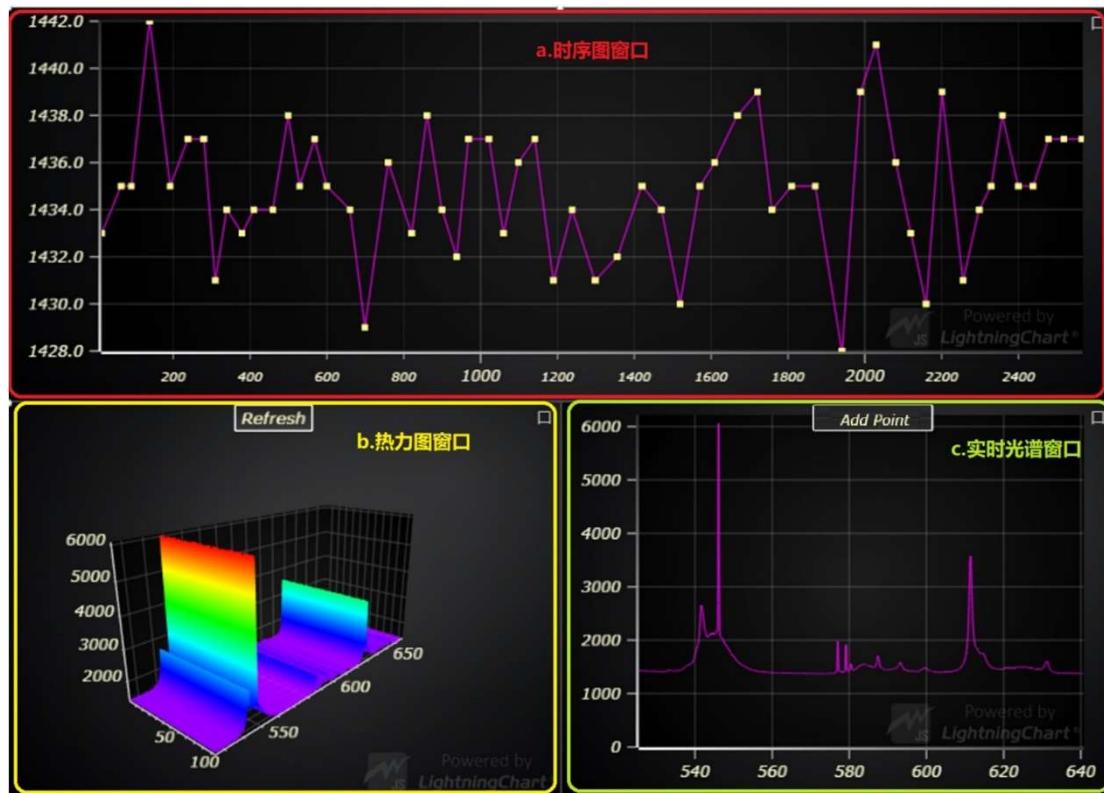


图 4.8 Sequence Detection 图谱显示界面

a	时序图窗口	这里显示您配置的波长点或波长段的光强随时间的变化趋势。右上角跳动的数字代表当前记录的时序点的数量。
b	热力图窗口	这里显示每个时序点对应的光谱图，其三轴分辨代表波长、时间和光强。由于热力图的生成和显示需要消耗较多的资源，因此需要手动点击“Refresh”按键进行刷新，并建议在时序监测停止后点击。
c	实时光谱窗口	这里显示当前时刻的完整光谱。您可以采用快捷手势进行缩放。点击“Add Point”后，实时光谱窗口上会出现一条竖直方向的光标，您可以拖动该竖线到合适的位置，并点击“OK”以快速增加一个监控点。

- 另外，在上述这三个窗口的右上角，分别有一个最大化按键 ，点击该按键可以将对应的窗口最大化。此时点击右上方的恢复按键  可以恢复窗口到默认布局；
- 时序图窗口和实时光谱窗口支持切换背景色，点击  可在黑色和白色之间切换。

### 2.3 High-speed Detection 高速采集模式

- 使用场景：若需要使用极短的积分时间连续采集光谱数据时，选用该模式可以避免丢帧现象。
- 采样设置：采样设置分为常规参数设置 Common Parameters，高速采集参数设置 High-Speed Parameters 和设置明细三个部分（见图 4.9）。常规参数包含常用的检测前参数（积分时间、平均次数等）和检测后参数（消荧光、平滑等）的设置，具体内容如下：

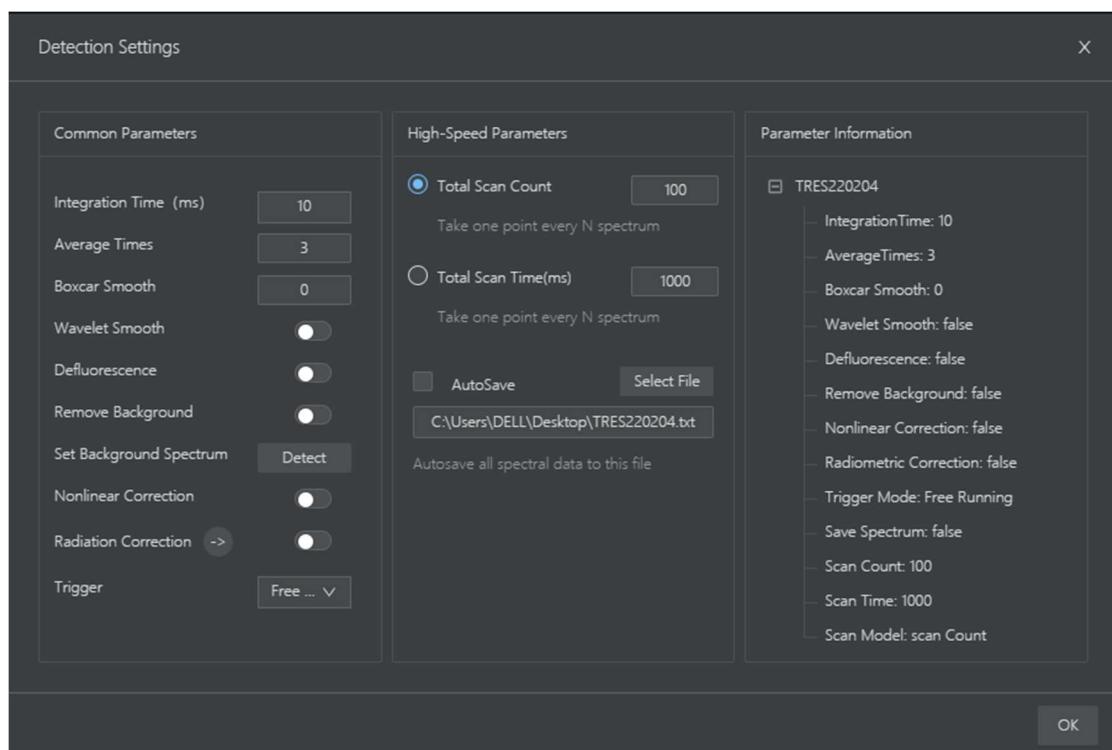


图 4.9 高速采集模式设置窗口

- Integration Time (ms)：积分时间。指光谱仪单次采集的时间。积分时间越长，光谱仪采集到的光谱信号就越强，但所花费的时间也越多，同时也会导致噪声更高；

- Average Times: 平均次数。指您希望将几张连续采集的光谱数据进行平均处理。平均次数越多，经处理后的光谱图的信噪比越高，但所花费的时间也越多；
- Boxcar Smooth: Boxcar 平滑或称邻域平均。其原理是用某个数据点相邻数据的平均值来替代该数据点的原始值，从而起到减小噪声的作用。但该方法也会降低光谱数据的细节，使其变得模糊；
- Wavelet Smooth: 小波平滑。这是一种高级的平滑处理方式，在降低噪声的同时，不会损失光谱细节。但小波平滑需要占用比较多的计算资源，可能会导致计算机卡顿或操作变慢（取决于计算机配置）；
- Defluorescence: 扣荧光。该功能主要用于拉曼光谱的数据处理。其原理为：相对于拉曼信号而言，荧光信号属于慢变信号，扣荧光的功能会将慢变信号识别为荧光信号而扣除，从而留下相对快变的拉曼信号；
- Remove Background: 扣除背景。在大部分光谱应用中，都需要扣除暗噪声、环境光等背景信号，点击该按键后，在谱图面板上显示的光谱将自动扣除预存的背景光谱；（可通过点击操作栏上基线功能区的  来储存背景光谱。）
- Set Background Spectrum: 设置背景光谱。与 Remove Background 功能配合使用。点击“Detect”时，系统会将当前的光谱储存为背景光谱，在高速采集过程中，每一张采集到的光谱都会扣除这张背景光谱；
- Nonlinear Correction: 非线性校正。由于 CCD 等感光元件的物理缺陷，导致其在整个检测量程中（即光强、Y 轴方向）并非线性。LQ Optics 生产的每一台光谱仪，均会进行非线性校正，以提高光谱仪的信号强度的测量准确性和线性度。因此在任何情况下，建议开启非线性校正功能；
- Radiation Correction: 辐射校准。当您需要进行辐照度检测时，可以打开该开关，并点击箭头选择对应的辐射校准文件；
- Trigger: 触发模式。在这里可以选择多种光谱仪的触发模式。关于触发模式的介绍，请向 LQ Optics 的工程师索要《光谱仪触发模式说明文档》。

高速采集设置部分的具体内容如下：

- Total Scan Count：采集光谱总数。在这里，可以设置连续采集多少条光谱数据后停止；
- Total Scan Time：采集时间总长。在这里，可以设置连续采集多久后停止；
- Auto Save：自动保存。勾选该选项，并点击“Select File”，可以指定数据保存的路径。当完成高速采集后，所有数据会自动保存到指定的文件中。

当所有设置完成后，点击“OK”按键，关闭设置对话框。

c) 采样操作

- Start ：启动高速采集。点击该按键，下方 Detection 进度条开始移动，显示高速采集的进度。直到进度条达到 100% 后，所有的数据将会显示在右侧的光谱记录模块中。若勾选了“Auto Save”并设置了路径，所有数据也将同时保存到指定路径的.txt 文件中。

 **注意：一旦点击“Start”，在整个采集过程中，进程将无法暂停或停止。**

- d) 谱图显示：在一次高速采集任务完成后，所有的光谱数据将叠加显示在谱图界面中，您可以通过操作右侧的光谱记录模块对数据进行控制和筛选。

## 2.4 Concentration Detection 浓度检测

- a) 使用场景：浓度检测是光谱仪的重要功能之一。根据比尔-朗博定律，您可建立物质浓度 vs 吸光度的模型，从而便于检测未知样品的浓度。
- b) 采样设置：采样设置分为模型参数 Model Parameters, 特征峰管理 Characteristic Peak 和模型列表 Model List 等三部分组成（见图 4.10）。

模型参数 Model Parameters 的具体参数如下：

- Integration Time (ms)：积分时间。指光谱仪单次采集的时间。积分时间越长，光谱仪采集到的光谱信号就越强，但所花费的时间也越多，同时也会导致噪声更高；
- Average Times：平均次数。指您希望将几张连续采集的光谱数据进行平均处理。平均次数越多，经处理后的光谱图的信噪比越高，但所花费的时

间也越多；

- Laser Power: 激光功率。对于采用拉曼光谱进行浓度检测的用户，可以在这里设置激光功率；
- Boxcar Smooth: Boxcar 平滑或称邻域平均。其原理是用某个数据点相邻数据的平均值来替代该数据点的原始值，从而起到减小噪声的作用。但该方法也会降低光谱数据的细节，使其变得模糊；
- Wavelet Smooth: 小波平滑。这是一种高级的平滑处理方式，在降低噪声的同时，不会损失光谱细节。但小波平滑需要占用比较多的计算资源，可能会导致计算机卡顿或操作变慢（取决于计算机配置）；
- Defluorescence: 扣荧光。该功能主要用于拉曼光谱的数据处理。其原理为：相对于拉曼信号而言，荧光信号属于慢变信号，扣荧光的功能会将慢变信号识别为荧光信号而扣除，从而留下相对快变的拉曼信号；
- Remove Background: 扣除背景。在大部分光谱应用中，都需要扣除暗噪声、环境光等背景信号，点击该按键后，在谱图面板上显示的光谱将自动扣除预存的背景光谱；（可通过点击操作栏上基线功能区的  来储存背景光谱。）
- Nonlinear Correction: 非线性校正。由于 CCD 等感光元件的物理缺陷，导致其在整个检测量程中（即光强、Y 轴方向）并非线性。LQ Optics 生产的每一台光谱仪，均会进行非线性校正，以提高光谱仪的信号强度的测量准确性和线性度。因此在任何情况下，建议开启非线性校正功能；
- Model Name: 模型名称。输入模型名称，模型名称不能重复；
- Description: 模型描述。描述模型的功能、用途，或备注信息等；
- Total detection time: 检测总时间。浓度监测时长，到时自动停止；
- AutoSave: 自动保存。自动保存时序光谱至指定目录；
- Frequency Interval: 采样频率。选择 Frequency Interval，并在后方输入相应的数值 N，表示软件将每间隔 N 次光谱采集，记录一次监控点或监控

范围的强度值；

- Time Interval：采样时间间隔。选择 Time Interval (ms)，并在后方输入相应的数值 N，表示软件将每隔 N 毫秒，记录一次监控点或监控范围的强度值。

特征峰管理 Characteristic Peak 的具体参数如下：

- Peak Position：峰值位置。当您希望监控某个波长/波数点（或多个波长/波数点）的光强随时间的变化趋势时，可在 Peak Position 处输入对应的波长/波数值，然后点击“Add”按键，软件会自动匹配与输入数值最接近的某个像素的准确波长/波数值。可以采用此方法添加多个监控点，也可点击已添加监控点旁的“X”删除该数据点；
- Peak Position 或 Peak Area 单选，指的是用峰值计算方式还是用峰面积计算方式。

模型列表，显示当前已建立的模型，支持增删改模型：

- Submit：如果数据库不存在则添加模型，如果存在则更新模型；
- Delete：删除当前选中模型；
- OK：设置完成，

 注意，点击“OK”不会保存数据库，点击“submit”才会保存数据库。

所以，模型列表就相当于标准库，模型就相当于标准库的一条标准物质

c) 检测操作：单次检测、连续检测、停止检测。

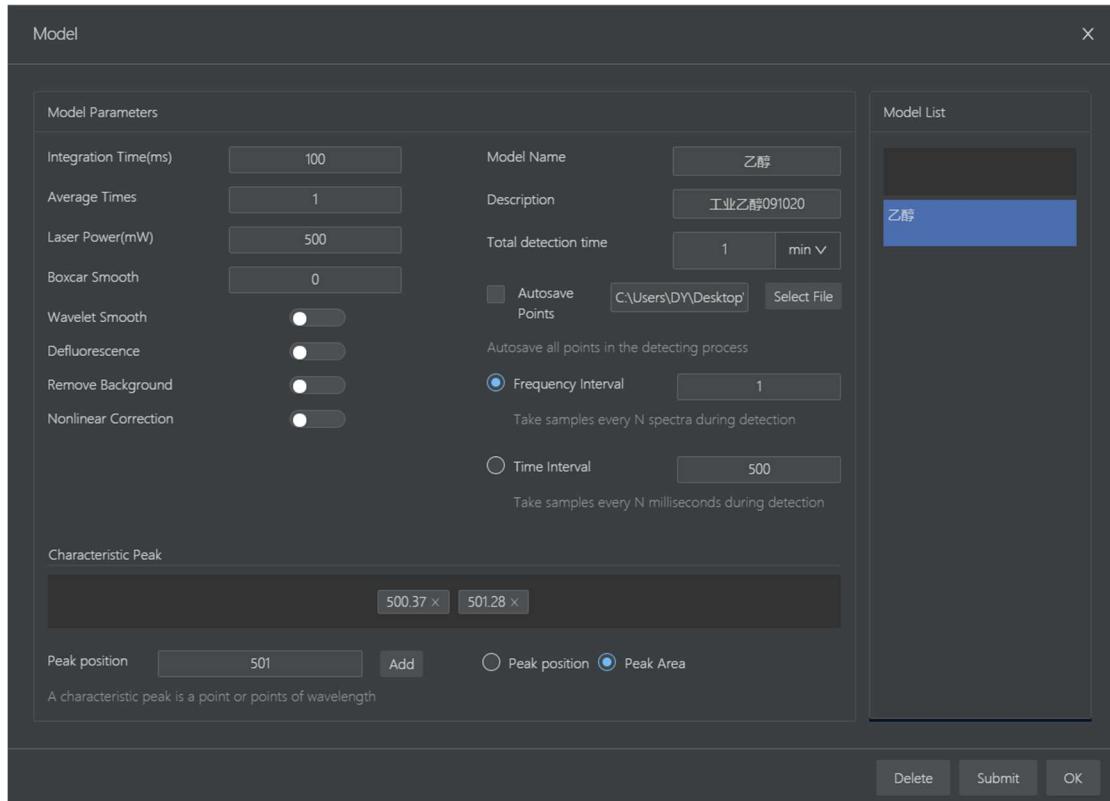


图 4.10 浓度检测设置

d) 谱图显示：包含 4 个窗口：时序窗口，样本&记录窗口、模型窗口、热力图窗口，每个窗口都可以点击右上角的按键最大化。

- 模型转换：通过已知模型，对未知浓度的样品，进行强度-浓度转换，得出浓度值；
- 检测设置：浓度检测设置分为模型参数和模型列表。模型参数是一个模型的属性，模型列表是模型的集合，所有模型都保存在本地数据库中。模型参数分为常用检测参数和浓度业务参数，常用检测参数和自由检测中的一样，浓度业务参数具体如下：

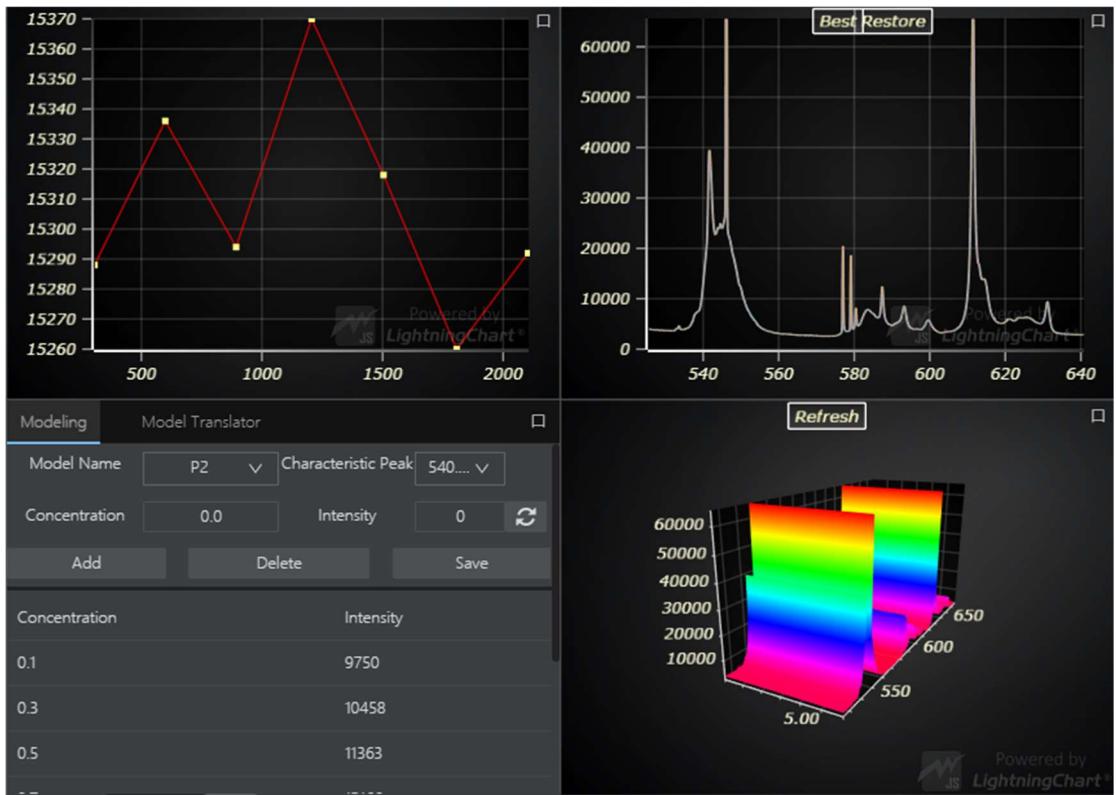


图 4.11 浓度检测谱图界面

- 时序窗口：显示当前观察特征峰位的值/面积的变化；
- 样本&记录窗口：显示样本光谱和添加的记录光谱；
- 热力图窗口：显示每个时序点的光谱热力图，可以点击“刷新”按键，刷新所有数据；
- 模型窗口：模型窗口分为模型建立页面和模型转换页面。

模型建立页面包含 Chart, 建模表单, 建模样本数据、模型系数:



图 4.12 模型建立页面

- Chart: 显示建模样本数据，默认不显示，最大化窗口显示；

- 建模表单：列出模型名称、特征峰、浓度、强度，点击“Add”按键可以添加样本数据，如果该浓度的样本已经存在，则更新强度。点击“Delete”可以删除样本数据，点击“Save”可以保存当前样本数据和生成的系数。

模型转换页面包含模型转换和模型列表：

The screenshot shows the 'Model Translator' tab selected in the top navigation bar. Below it, there are two sections: 'Model Translator' and 'Model List'.

**Model Translator:** A table with columns: Name, Peak Position, Peak Intensity, Concentration, and Action. One row is shown for 'P2' with values: Peak Position 540.06, Peak Intensity 11103, Concentration 0.4432188845864715, and Action buttons for Delete and Copy.

**Model List:** A table with columns: Name, Peak Position, Description, and Action. One row is shown for 'P2' with values: Peak Position 540.06, Description 爱运动天道苑, and Action button for Add.

图 4.13 模型转换页面

- 模型转换：点击模型列表中的“Add”按键，添加模型到模型转换列表，点击“Start”或“Continue”按键开始检测，可以看见模型转换列表中的模型在当前样本下的浓度；
- 模型列表：显示所有已经建模，生成转换系数的模型，通过 Add 按键可以添加到转换列表中。

### 3. 记录

a) 添加记录

点击该按键，会把当前的活动光谱记录为一条光谱记录，在右侧的光谱记录模块中显示，同时，会在谱图显示界面叠加显示一条不同颜色的光谱。



**注意：**如果当前的活动光谱记录已包含参考光谱信息（Light）和暗光谱信息（Background，简称 BK），则添加记录时也会同时记录 Light 和 BK 光谱。（该问题在下文中会详细说明）

b)

删除当前选中记录



您可以在右侧的光谱记录列表中选择一条记录（无需勾选），然后点击该按键，删除这条记录。



**注意：**当前活动的光谱记录，即最上方的红色记录，不能删除。

c)

删除所有勾选记录



您可在右侧勾选多条光谱记录，然后点击该按键，删除所有勾选记录。

d)

复制记录数据



您可在右侧勾选多条光谱记录，然后点击该按键，所有被勾选的记录和当前活动光谱记录将一起被复制到内存中，可以粘贴到 Excel 等数据处理软件中进行处理。

e)

保存光谱图和时序图



点击该按键，会弹出保存设置对话框，可将当前谱图面板上的光谱显示内容以图片的形式保存到指定路径。

#### 4. 基线

a)

设置背景光谱



把当前设备的活动光谱设置为背景光谱。无论在辐射测量、荧光测量、拉曼测量还是吸光度、反射率等测量时，都需要采集背景光谱并扣除。由于背景光谱的强度除了和环境光有关外，还与光谱仪设置的积分时间有关，因此建议采集背景光谱时确保使用的积分时间和采集样品光谱时的积分时间相同。



**注意：**在采集完背景光谱后，系统会自动开启扣除背景光谱功能。您可以在算法模块中观察到“扣除背景光谱”按键显示为蓝色：。您也可以

点击该按键关闭或再次开启“扣除背景光谱”功能。

- b) 设置参考光谱 

把当前设备的活动光谱设置为参考光谱。在吸光度、反射率、透过率等光谱应用中，需要记录参考光谱。此时，通常会将标准品（参考白板或溶剂等）置于被测位置，开启光源。此时点击该按键可以将当前光谱储存为参考光谱，参与对应的光谱测量。与背景光谱一样，建议采集参考光谱使用的积分时间和采集样品光谱时的积分时间相同。

## 5. 算法

 注意：此处的算法仅对当前的活动光谱有效。若要对光谱记录进行算法操作，可以点击“Algorithm”选项卡，进行操作。

- a) 扣除背景光谱 

点击该按键后，谱图界面上显示的光谱将自动减去已储存的背景光谱。当该按键显示为蓝色时，代表自动扣除背景功能已经开启。您在点击“采集背景光谱”时 ，该功能会自动打开。

- b) 透过率/反射率 

当您完成参考光谱和背景光谱的设置后，可以点击该按键，将谱图转换为透过率/反射率光谱，光谱的计算公式如下：

$$\text{透过率 (或反射率)} = (\text{样本光谱} - \text{背景光谱}) / (\text{参考光谱} - \text{背景光谱})$$

再次点击该按键，谱图将转换回原始光谱模式。

- c) 吸光率 

当您完成参考光谱和背景光谱的设置后，可以点击该按键，将谱图转换为吸光率光谱，光谱的计算公式如下：

$$\text{吸光率} = 1 - \text{透过率 (或反射率)}$$

再次点击该按键，谱图将转换回原始光谱模式。

- d) 吸光度 

当您完成参考光谱和背景光谱的设置后，可以点击该按键，将谱图转换为

吸光度光谱，光谱的计算公式如下：

$$\text{吸光度} = -\lg \text{透过率 (或反射率)}$$

e) 消荧光 

点击该按键，可对当前活动光谱进行消荧光处理。该方法通常仅用于拉曼光谱。其核心原理为：相对于拉曼信号而言，荧光信号通常是慢变信号，即光谱包络较宽。消荧光算法可以识别光谱中哪些是荧光信号，将其拟合后消除，留下拉曼信号。

f) 小波平滑 

点击该按键，可对当前活动光谱进行小波平滑处理。这是一种高级的平滑处理方式，在降低噪声的同时，不会损失光谱细节。但小波平滑需要占用比较多的计算资源，可能会导致计算机卡顿或操作变慢（取决于计算机配置）。

g) 归一化 

点击该按键，可对当前活动光谱进行归一化处理。即将光谱的强度范围转化成从 0 到 1 之间的数据。

h) 更多算法 

点击该按键，等同于点击上方的“Algorithm”选项卡，切换至算法选项卡界面。在这里，您可以对已经保存的光谱记录进行更多的数据操作。

### 三、Algorithm 算法选项卡操作栏功能详细介绍

在 Algorithm 选项卡中，您可以对所有的已保存的光谱记录进行单条或批量处理。详细功能如下：



图 4.14 Algorithm 算法选项卡操作栏

a) 光谱信息 

点击此按键，左侧参数栏会显示当前选中的光谱记录的基本信息，包括名

称、波长范围、强度范围、峰值波长、中心波长、质心波长、半峰宽(FWHM)等参数。

b) 光谱裁剪 

点击此按键，左侧参数栏会显示裁剪参数，包括：

- Start Position：起始波长位置。
- Stop Position：截止波长位置。
- Treat All Spectra：是否对所有光谱记录进行此操作。

设置完成后，点击“OK”完成裁剪，被裁剪的光谱数据将只保留设置的范围。

c) 计算和变型 

点击此按键，可将选中的光谱记录进行加减乘除等初级运算。具体操作如下：

- 选择+、-、×或÷中的一种运算
- 如果运算过程是具体数字，例如整张光谱所有数据 $\times 5$ ，则勾选 Factor 选项，并在后方输入数字。点击“OK”后，被选中的这条光谱上的所有数据点将会进行响应的计算，计算后的光谱将替换原来的光谱记录。
- 如果您希望对两条光谱记录进行相互计算，例如希望将 1 号光谱减去 2 号光谱，则勾选“Transform by”选项，并在后方选择想要参与计算的另一条光谱记录。例如，您希望获得 1 号光谱除以 2 号光谱的结果，则首先在右侧选择 1 号光谱记录，然后在左侧参数栏最上方选择 $\div$ 号，并勾选 Transform by 选项，同时在后方选择 2 号光谱，最后点击“OK”，此时 1 号光谱将被更新为“1 号除以 2 号”的结果。

d) 光谱平移 

点击此按键，可将选中的光谱记录进行左右平移。

- 在 Shift 后输入想要平移的距离（单位是 nm 或 cm<sup>-1</sup>，取决于当前的光谱记录的横轴单位），正数代表向右侧移动，负数代表向左侧移动。

- Treat All Spectra: 对所有光谱记录进行同样的操作。

点击“OK”后，完成平移操作。平移后的光谱将替换被选中的光谱记录。

- e) 设置暗光谱 

在上文中我们提到，在记录光谱数据时，如果当前的活动光谱记录已包含参考光谱信息（Light）和暗光谱信息（Background，简称 BK），则添加记录时也会同时记录 Light 和 BK 光谱。详细信息见下文。

当该条记录为 N 时，可通过该按键，将该条记录设置为暗光谱。

- f) 设置参考光谱 

当该条记录为 N 时，可通过该按键，将该条记录设置为参考光谱。

- i) 扣除背景光谱 

点击该按键后，被选中的光谱将自动减去已储存的背景光谱。当该按键显示为蓝色时，代表自动扣除背景功能已经开启。您在点击“采集背景光谱”时 ，该功能会自动打开。

- j) 透过率/反射率 

当您完成参考光谱和背景光谱的设置后，可以点击该按键，将谱图转换为透过率/反射率光谱，光谱的计算公式如下：

$$\text{透过率 (或反射率)} = (\text{样本光谱} - \text{背景光谱}) / (\text{参考光谱} - \text{背景光谱})$$

再次点击该按键，谱图将转换回原始光谱模式。

- k) 吸光率 

当您完成参考光谱和背景光谱的设置后，可以点击该按键，将谱图转换为吸光率光谱，光谱的计算公式如下：

$$\text{吸光率} = 1 - \text{透过率 (或反射率)}$$

再次点击该按键，谱图将转换回原始光谱模式。

- l) 吸光度 

当您完成参考光谱和背景光谱的设置后，可以点击该按键，将谱图转换为

吸光度光谱，光谱的计算公式如下：

$$\text{吸光度} = -\lg \text{透过率 (或反射率)}$$

m) 消荧光 

点击该按键，可对当前活动光谱进行消荧光处理。该方法通常仅用于拉曼光谱。其核心原理为：相对于拉曼信号而言，荧光信号通常是慢变信号，即光谱包络较宽。消荧光算法可以识别光谱中哪些是荧光信号，将其拟合后消除，留下拉曼信号。

n) 小波平滑 

点击该按键，可对被选中的光谱进行小波平滑处理。这是一种高级的平滑处理方式，在降低噪声的同时，不会损失光谱细节。但小波平滑需要占用比较多的计算资源，可能会导致计算机卡顿或操作变慢（取决于计算机配置）。

o) 归一化 

点击该按键，可对被选中的光谱进行归一化处理。即将光谱的强度范围转化成从 0 到 1 之间的数据。

p) 求导数 

点击该按键，可对被选中的光谱进行求导。

- 在左侧参数栏的 Order 后方输入导数的阶数，最高支持 4 阶；
- Treat All Spectrum：勾选后，可对所有光谱记录进行相同求导处理；
- 设置完成后，点击“OK”，变换后的光谱将替换现有光谱记录。

q) 波峰和半峰宽 

点击该按键，在左侧的参数栏会显示被选中的光谱记录的每个符合要求的峰值波长，以及对应的半峰宽（FWHM）。

- Baseline：基线。您可以在后方输入数值，点击“OK”后，系统只会显示高于基线的峰值信息；

- Results: 在此处将显示所有符合条件的波峰的参数，包括:

- Position: 波峰的峰值波长;
- Intensity: 波峰的强度;
- FWHM: 波峰的半峰宽。

r) CV 值 

在光谱学中，CV 值 (Coefficient of Variation) 通常能反应光谱质量，其公式为

$$CV = \frac{\text{标准差}}{\text{平均值}}$$

对于暗光谱而言，CV 值越小，则表示光谱的信噪比越高。点击该按键，左侧参数栏会显示被选中光谱的 CV 值相关信息：

- CV: 该条光谱记录的 CV 值;
- Standard deviation: 该条光谱记录的标准差。

s) 色度值 

点击该按键，可显示被选中的光谱数据的色度信息。包括：

- Chromaticity Coordinates: 色品坐标值[x,y,z]。
- Color Temperature: 相对色温值。

t) 删除当前选中记录 

您可以在右侧的光谱记录列表中选择一条记录（无需勾选），然后点击该按键，删除这条记录。

u) 重置光谱记录 

点击该按键，可将当前被选中的光谱记录进行重置。

观察光谱记录数据可以发现，每条记录数据后都有一个字母，这些字母的含义如下：

- N: None, 表示该条记录是一条单独的记录，并未包含参考光谱信息和暗光谱信息；
- S: Sample, 表示该条记录为样品光谱。在 flavor 软件中，样品光谱往往和参考光谱以及暗光谱捆绑在一起。您可以通过点击 S 后方的下拉箭头  将该条记录切换为参考光谱或暗光谱；
- L: Light, 表示该条记录为参考光谱信息。您可以通过点击 S 后方的下拉箭头  将该条记录切换为样品光谱或暗光谱；
- BK: Background, 表示该条记录为暗光谱信息。您可以通过点击 S 后方的下拉箭头  将该条记录切换为样品光谱或参考光谱。



# 第五章 设备与参数栏

## 一、设备与参数栏基本介绍

设备与参数栏分为两种型态，当您在操作栏选择“Detect”选项卡时，设备与参数栏显示为设备模式，包含 Devices 设备列表、Spec 参数设置和 Raman 拉曼等三部分；当您在操作栏选择“Algorithm”选项卡时，设备与参数栏显示为参数模式，将根据操作栏的选择显示对应的参数。

## 二、设备模式详细介绍

### 1. 设备列表

设备列表（Devices）分为设备列表和设备常用设置参数两部分。（见图 5.1）

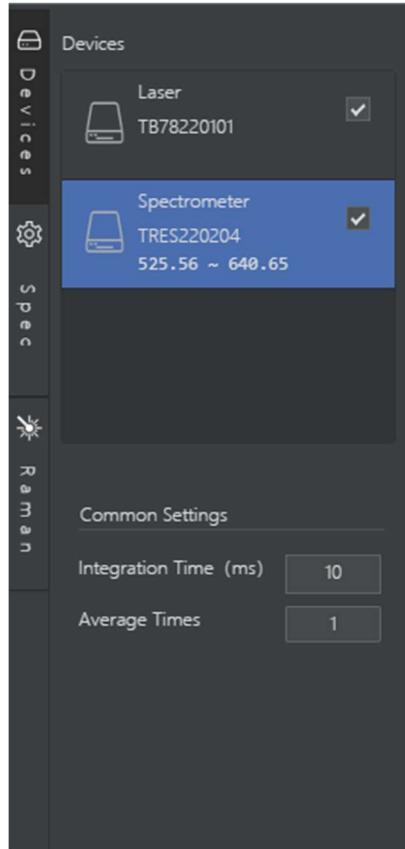


图 5.1 设备列表

这里会显示当前连接在计算机上的设备，包括光谱仪和激光器等。

- 勾选相应的设备即表示设备处于活动状态，取消勾选则代表设备处于禁用状态；
- 不同类型的设备常用设置参数不一样：
  - 光谱仪设备显示积分时间和平均次数；
  - 激光器设备显示激光功率、激光开关和制冷开关；
  - 拉曼光谱仪将显示光谱仪和激光器的所有参数。

## 2. 参数设置

参数设置（Spec）主要包含光谱仪的一些高级设置，如下图所示：

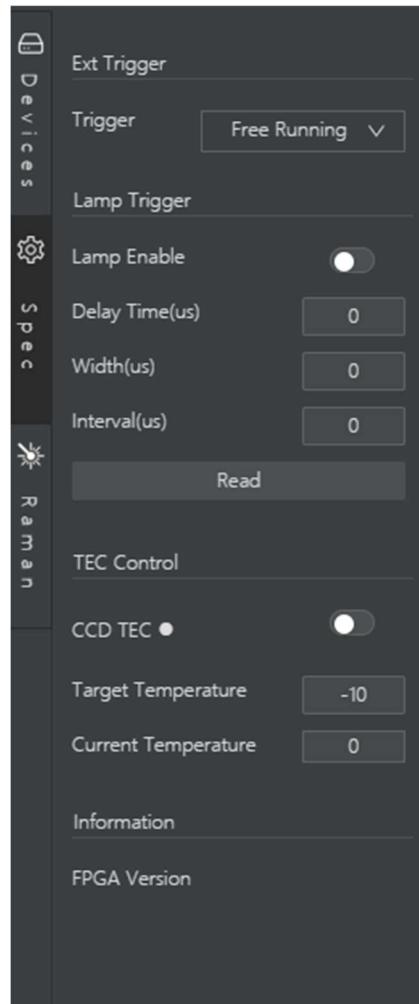


图 5.2 参数设置

- Ext Trigger

在这里，可以选择光谱仪的工作模式，包括：

- Free Running：自由采集模式。无触发控制；
- Hardware Level：高电平触发。当光谱仪收到高电平时，将以当前设置的积分时间进行连续采集，当外部触发信号转为低电平时，采集停止；
- Synchronous：同步触发。当光谱仪检测到上升沿信号时开始积分，检测到下降沿时停止积分，并输出光谱；
- Hardware Edge：上升沿触发。当光谱仪检测到上升沿信号时，以先前设定的积分时间开始积分，一次采集结束后输出光谱，并等待下一个上升沿信号；
- Edge And Free：上升沿触发后连续采集。当光谱仪检测到上升沿信号后，开始以先前设定的积分时间进行连续采集。

- Lamp Trigger

该部分主要用来控制光谱仪发出信号，以控制氘灯等其他外部设备。

- Lamp Enable：光源使能开关。开启后，光谱仪将连续发出脉冲信号，用以控制外部光源；
- Delay Time (us)：延迟时间。设置触发信号的延时；
- Width (us)：脉冲宽度。设置触发信号的脉宽；
- Interval (us)：脉冲间隔。设置触发信号的脉冲间隔。

- TEC Control

该部分主要用来控制光谱仪的热电制冷功能（只有带有热电致冷功能的光谱仪可控制此部分参数）；

- CCD TEC：探测器制冷开关。该开关可控制光谱仪的热电制冷功能。当打开该开关后，热电致冷功能开启，CCD 将制冷至您所设置的目标

温度。当当前温度和目标温度相差小于 1°C 时，CCD TEC 后的指示灯将由白变绿，代表热电制冷功能进入稳定状态；

- Target Temperature：目标温度。您可设定热电致冷的目标温度；
- Current Temperature：当前温度。这里显示光谱仪中 CCD 附近的实时温度。
- Information

该部分显示光谱仪的固件版本信息。

### 3. 拉曼设置

对于拉曼应用，您可以在这里进行快捷设置，如下图所示：

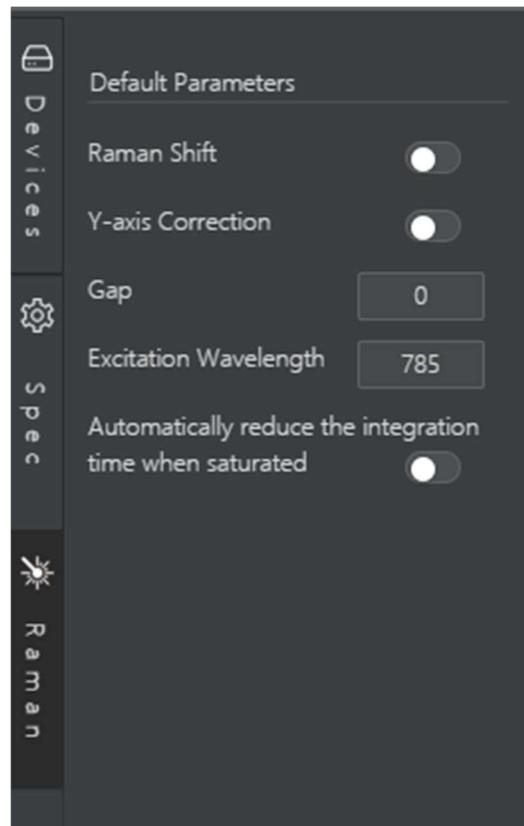


图 5.3 拉曼设置界面

- Raman Shift：波长/拉曼位移切换开关。开启后，会将当前显示的图谱的横坐标转换为拉曼位移；
- Y-Axis Correction：Y 轴校正。系统将自动进行 Y 轴校正（非线性校正）；

- Gap: 光谱峰位偏移量。您可以在这里输入数字，从而让拉曼光谱进行横向平移；
- Excitation Wavelength: 激发波长。您可以在此处设置拉曼激光的激发波长，拉曼位移将会根据激发波长进行换算；
- Automatically reduce the integration time when saturated: 当光谱饱和时自动调整积分时间。

## 一、谱图面板的基本介绍

谱图面板主要包括谱图显示、显示控制和面板切换等三部分。（见图 6.1）

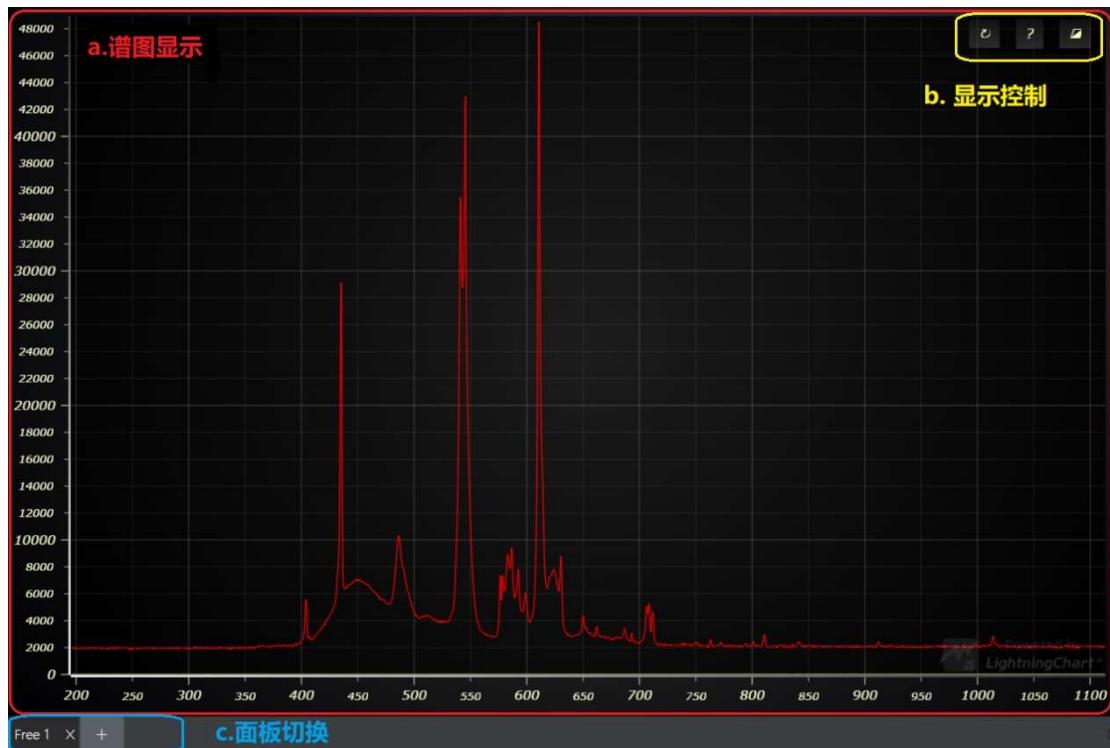


图 6.1 谱图面板

### 1. 谱图显示

在谱图显示界面，可以实时显示当前正在测量的光谱（通常为红色）。同时，也可以叠加显示您在右侧光谱记录栏中勾选的一条或多条光谱记录。

### 2. 显示控制

在谱图显示的右上方有三个按键

- 恢复默认显示：点击该按键后，谱图的横坐标和纵坐标都将恢复默认范围；
- 谱图显示操作指南：点击该按键，会显示谱图显示的操作指南；（见图

6.2) 再次点击该按键，关闭谱图显示操作指南。

	放大区域	按住鼠标左键，从左上往右下拉出一个覆盖要放大区域的矩形
	还原 (Best)	按住鼠标左键，从右上往左下拉出一个矩形
	拖动	按住鼠标右键移动
	全局缩放	滑动鼠标滚轮
	仅X轴缩放	鼠标焦点放到X轴上，再滑动鼠标滚轮
	仅Y轴缩放	鼠标焦点放到Y轴上，再滑动鼠标滚轮
	仅放大X轴	鼠标焦点放到X轴上，按住鼠标左键拖出一段距离
	仅放大Y轴	鼠标焦点放到Y轴上，按住鼠标左键拖出一段距离
	还原 (最值)	点击右上角的Restore按钮

图 6.2 谱图显示操作指南

- 谱图底色切换：点击该按键，可将谱图底色切换为白色，再次点击恢复黑色。

### 3. 面板切换

每个面板有独立的检测模式、参数、光谱记录，可以对面板进行如下操作：



图 6.3 面板切换

- 点击“+”，可以增加一个当前类型的空面板；
- 点击“x”，可以删除该面板；
- 点击名称，可以切换面板。

## 一、光谱记录区域的基本介绍

光谱记录区域会显示已经记录的光谱信息，可以通过勾选这里的数据记录进行光谱的叠加显示（见图 7.1），从而方便数据比对。同时也可以结合“Algorithm”的功能，对数据进行各种高级处理。

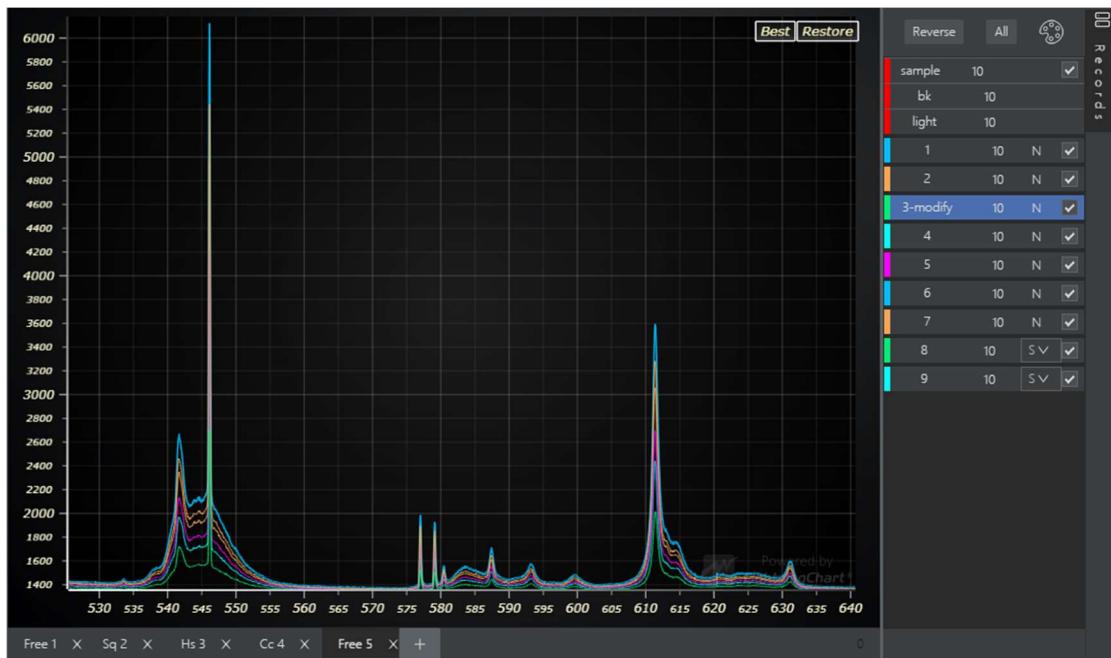


图 7.1 光谱记录区域

## 二、光谱记录

观察光谱记录数据可以发现，每条记录数据后都有一个字母，这些字母的含义如下：

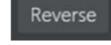
- N: None, 表示该条记录是一条单独的记录，并未包含参考光谱信息和暗光谱信息；
- S: Sample, 表示该条记录为样品光谱。在 flavor 软件中，样品光谱往往和参考光谱以及暗光谱捆绑在一起。您可以通过点击 S 后方的下拉箭头

将该条记录切换为参考光谱或暗光谱；

 注意：除了活动光谱的参考光谱和暗光谱为显性显示外，其他光谱记录的参考光谱和暗光谱均为隐性显示。

- L: Light, 表示该条记录为参考光谱信息。您可以通过点击 S 后方的下拉箭头  将该条记录切换为样品光谱或暗光谱；
- BK: Background, 表示该条记录为暗光谱信息。您可以通过点击 S 后方的下拉箭头  将该条记录切换为样品光谱或参考光谱。

在光谱记录区域的上方，有三个按键   ，具体功能如下：

-  反向选择：对所有光谱记录进行反向选择；
-  全选：对所有光谱记录进行全选；
-  修改光谱颜色：对所选的光谱记录，进行颜色更改。