

基于中红外光谱的甲醇/乙醇柴油鉴别 与含量测定方法分析

欧阳爱国, 张宇, 唐天义, 刘燕德*

华东交通大学机电与车辆工程学院光机电技术及应用研究所, 江西 南昌 330013

摘要 为实现对醇类柴油的鉴别和含量的测定,在实验室制备了甲醇柴油和乙醇柴油。利用主成分分析方法将甲醇柴油和乙醇柴油分成两类,利用中红外光谱法对光谱数据进行平滑、基线校正、多元散射校正和归一化,得到预处理光谱图,使用最小二乘支持向量机(LSSVM)模型预测甲醇柴油的甲醇含量和乙醇柴油的乙醇含量,其模型误判率低于7.1%。结果表明,甲醇柴油甲醇含量 LSSVM 模型预测集相关系数和预测集均方误差分别为 0.9791 和 1.7201;乙醇柴油乙醇含量 LSSVM 模型预测集相关系数和预测集均方误差分别为 0.9802 和 2.9563。实验的结果表明最小二乘支持向量机模型能够预测甲醇乙醇柴油中的甲醇和乙醇含量,且是一种很有前途的方法。

关键词 光谱学; 中红外光谱; 主成分分析; 最小二乘支持向量机; 甲醇柴油; 乙醇柴油

中图分类号 TP394.1; TH691.9 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP54.093003

Analysis of Methanol/Ethanol Diesel Identification and Content Determination Based on the Mid-Infrared Spectra

Ouyang Aiguo, Zhang Yu, Tang Tianyi, Liu Yande

Institute of Optics-Mechanics-Electronics Technology and Application (OMETA),

School of Mechanotronics & Vehicle Engineering, East China Jiaotong University, Nanchang, Jiangxi 330013, China

Abstract In order to realize the identification and content determination of methanol/ethanol diesel, the methanol diesel and ethanol diesel are prepared in the laboratory and divided into two groups by principal component analysis. Based on the mid-infrared spectra method, the preprocessing spectra are produced by smoothing, baseline correction, multiplicative scatter correction and normalization of the spectral data. The least squares support vector machine (LSSVM) prediction model is used to predict methanol/ethanol content, and the error rate is lower than 7.1%. The simulated results show that the correlation coefficient and the mean square error of the LSSVM prediction for methanol content of methanol diesel are 0.9791 and 1.7201; the correlation coefficient and root mean square error are 0.9802 and 2.9563 for ethanol content of ethanol diesel, respectively. The experimental results show that the proposed model is a promising choice to identification and content determination of methanol/ethanol diesel.

Key words spectroscopy; mid-infrared spectra; principal component analysis; least squares support vector machine; methanol diesel; ethanol diesel

OCIS codes 300.6340; 300.6390

1 引言

随着世界经济的发展,对石油资源的需求急剧增加,寻找干净可再生能源,如生物燃料^[1]或太阳能^[2],已

收稿日期: 2017-05-16; 收到修改稿日期: 2017-06-15

基金项目: 国家自然科学基金(61640417)、南方山地果园智能化管理技术与装备协同创新中心(赣教高字[2014]60号)

作者简介: 欧阳爱国(1968—),男,学士,教授,硕士生导师,主要从事车辆性能检测方面的研究。

E-mail: ouyangaiguo1968711@163.com

* 通信联系人。E-mail: 353702431@qq.com

成为人类可持续发展面临的挑战。乙醇和甲醇是两种醇类生物燃料^[3],具有制备成本低、污染小等特点。在中国,甲醇/乙醇柴油常见的体积分数分别为 15%,10%,5%。从外观上看无法判断甲醇/乙醇柴油的种类及醇类含量,不同醇类的柴油以及甲醇和乙醇含量的多少决定了醇类柴油的品质,并且对发动机的性能有显著影响。因此,需要一种快速、准确的检测方法对甲醇柴油和乙醇柴油进行分类,确定醇类柴油混合物中甲醇和乙醇的比例。

近年来,报道了用光学如近红外(NIR)和拉曼光谱^[4-8]方法确定甲醇汽油与乙醇汽油中甲醇和乙醇的含量。Fernandes 等^[6]利用近红外光谱技术结合偏最小二乘回归(PLS)法建立了回归定量模型,同时检测了汽油中甲醇和乙醇含量,在光谱范围为 1105~1682 nm 内建立了 PLS 模型,均方根预测的均方根误差为 0.28%和 0.32%。Li 等^[9]利用拉曼光谱技术结合本地加权最小二乘支持向量机(LSSVM)算法对三个不同的炼油厂提供的三种不同品牌(90 号、93 号和 97 号)128 个汽油样品进行分类。实验结果表明,拉曼光谱是测量汽油品牌和产地分类的有效手段,本地加权 LSSVM 算法可以有效提高定性分类的精度。目前对于检测甲醇/乙醇柴油中甲醇含量和乙醇含量常见的方法为气相色谱法,但此方法操作复杂耗时,检测成本高。中红外(MIR)光谱技术在汽油、柴油、喷气燃料等燃料性能指标的检测方面应用广泛,且待检测样品无需做预处理,操作简单,可以实时响应,能实现无损快速的检测。Souza 等^[10]利用中红外光谱技术对柴油中掺入的残余汽车润滑油含量进行了检测,同时结合 PLS 法建立了预测模型,结果表明 MIR-PLS 方法是一种作为量化柴油中掺假物含量很有潜力的方法,并且可用于燃料的质量控制。因此,本文采用中红外光谱技术,结合化学计量学方法,建立了甲醇乙醇柴油的判别模型以及甲醇柴油中甲醇含量和乙醇柴油中乙醇含量的定量分析模型。该方法不仅可以对甲醇柴油和乙醇柴油进行分类,而且可以检测乙醇甲醇柴油混合物中的乙醇甲醇比例。

2 材料与方法

2.1 样品

实验样品由 56 种含有甲醇的甲醇柴油和含有乙醇的乙醇柴油组成。目前我国市场上常见的甲醇/乙醇柴油醇类体积分数有 5%,10%,15%,所以本实验配制的样品中甲醇和乙醇体积分数范围均为 0.6%~17.4%,具体含量见表 1,涵盖常见醇类柴油,其中 *N* 为配置样品标号。甲醇/乙醇柴油均在实验室制备,由于柴油的牌号由其凝点确定,所以本实验的基础柴油选择 0 号柴油,0 号柴油从当地的加油站购买。甲醇柴油的配制是将甲醇(分析纯度大于 99.5%)和油酸按大约 1:1 的体积比例加入 50 mL 容量瓶中,摇晃均匀后加入柴油滴定至 50 mL;乙醇柴油的配制是将乙醇(分析纯度大于 99.7%)、正丁醇按 5:2 的体积比例加入 50 mL 容量瓶中,摇晃均匀后加入柴油滴定至 50 mL。将配置好的样品放置在环境温度为 20 °C 上下,静置一段时间使其充分互溶。

表 1 28 种甲醇/乙醇柴油的醇类体积分数

Table 1 Alcohol volume fractions of 28 kinds of methanol/ethanol diesels

<i>N</i>	Volume fraction /%	<i>N</i>	Volume fraction /%	<i>N</i>	Volume fraction /%	<i>N</i>	Volume fraction /%
1	0.6	8	5.0	15	9.2	22	13.6
2	1.2	9	5.6	16	10.0	23	14.2
3	1.8	10	6.2	17	10.6	24	15.0
4	2.4	11	6.8	18	11.2	25	15.6
5	3.0	12	7.4	19	11.8	26	16.2
6	3.6	13	8.0	20	12.4	27	16.8
7	4.2	14	8.6	21	13.0	28	17.4

2.2 光谱采集

实验使用由北京北分瑞利分析仪器公司生产的 WQF-510A 傅里叶变换红外光谱仪,测量波数范围为 350~7800 cm^{-1} ,分辨率优于 0.85 cm^{-1} 。仪器开机后预热 30 min 后使用。采集光谱时,将室温控制在 20 °C,相对湿度在 50%以下,将扫描时间设定为 32 s。样品测定采用水平衰减全反射(ATR)附件(包括硒化锌晶片),如图 1 所示,每次采集光谱时,取 1 mL 甲醇/乙醇柴油溶液均匀涂抹在硒化锌晶片上,完成

后关闭仪器盖,避免杂光进入。为减少实验的误差,将每个体积分数梯度的样品分成3份,每份测3次,然后取平均光谱。图2为不同甲醇含量和乙醇含量对应的甲醇/乙醇柴油中红外光谱图。从图2中可以看出,在波数范围为 $600\sim 2000\text{ cm}^{-1}$ 内出现了密集而且锐利的特征峰,这是由于甲醇和乙醇在这一范围内表现出强烈的特征吸收线^[11]。为排除光谱两端无效信号的干扰,可以选择波数范围为 $650\sim 2000\text{ cm}^{-1}$ 内的光谱数据作为本研究的甲醇/乙醇柴油的光谱。

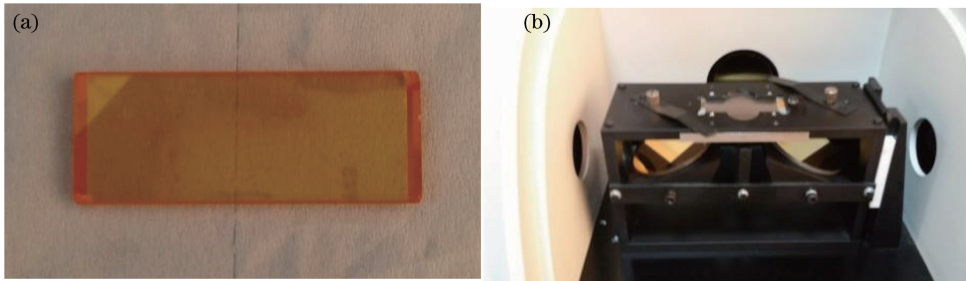


图1 实验仪器附件。(a)硒化锌晶体;(b)水平ATR

Fig. 1 Attachment of experimental apparatus. (a) ZnSe crystal; (b) horizontal ATR

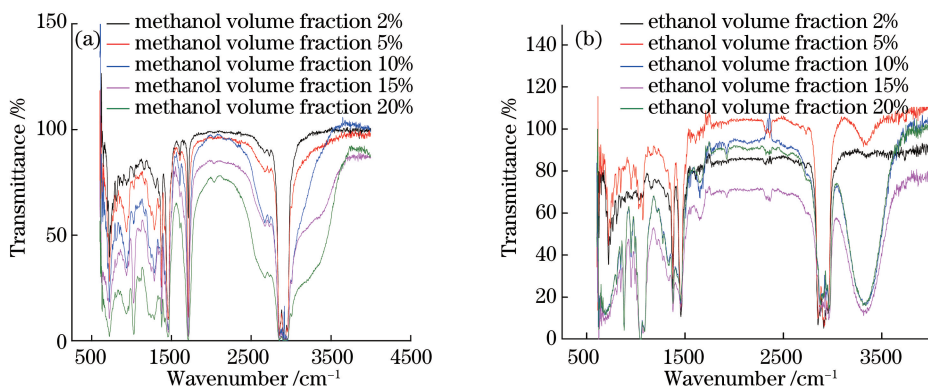


图2 (a)甲醇柴油中红外光谱图;(b)乙醇柴油中红外光谱图

Fig. 2 (a) Mid-infrared spectra of methanol diesel; (b) mid-infrared spectra of ethanol diesel

2.3 数据分析与软件

采用 Kennard-Stone(KS)算法进行建模,分别将甲醇柴油的28个样品以及乙醇柴油的28个样品分为校正集和预测集,由LSSVM算法将甲醇/乙醇柴油样品分为校正集(22个)和预测集(6个)。所有光谱数据在参与建模之前进行预处理,预处理主要采用基线校正、Savitzky-Golay平滑(SG)和二阶导数。主成分分析(PCA)在Unscrambler化学计量学分析软件中进行,KS和LSSVM算法程序均在MatlabR2014a(The MathWork, Inc, USA)中编辑与运行。

2.4 预处理方法

为了减少杂散光及噪声的影响,通过预处理方法剔除与本检测无关的信息。采用平滑、基线校正、多元散射校正、归一化4种预处理方法,比较它们对甲醇/乙醇含量的LSSVM模型效果的影响。

3 结果与讨论

3.1 主成分分析

选用波数范围为 $600\sim 4000\text{ cm}^{-1}$ 的光谱数据进行分析,将实验所采集的光谱信息压缩为若干个主成分的线性组合,前3个主成分因子的得分散点图如图3所示,图中红色代表甲醇柴油,蓝色代表乙醇柴油,其中第一个主成分累积的贡献率达到了54%,但是第二个主成分累积的贡献率仅有35%,到了第三个主成分累积的贡献率仅为7%,前三个主成分贡献率累计占到了96%,通过主成分分析能够将56个未知样品分为甲醇柴油和乙醇柴油两类。

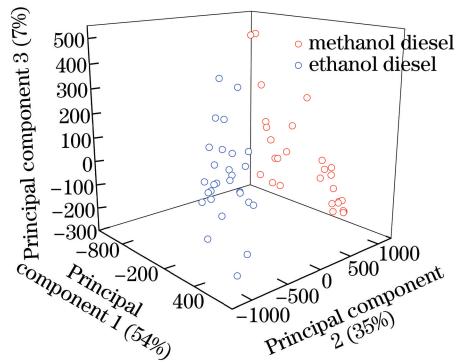


图3 主成分得分散点图

Fig. 3 Scores plot of principal component

3.2 偏最小二乘判别分析

偏最小二乘判别分析(PLS-DA)方法是在PLS法的基础上建立的样本分类模型^[12-16]。选用波数范围为 $4000\sim 600\text{ cm}^{-1}$ 的光谱,人为设定甲醇柴油样品真值为1,乙醇柴油样品真值为2,域值设置为0.5,建立PLS-DA模型,其建模结果如图4(a)所示,模型识别样品甲醇/乙醇的体积分数在 $0.6\%\sim 17.4\%$ 的相关系数 R_c 为0.97,建模的标准偏差(RMSEC, R_{MSEC})为0.083,由图4(a)可得模型的误判率低于7.1%,能够将甲醇柴油和乙醇柴油分开。图4(b)为PLS-DA预测模型,相关系数 R_c 为0.96,预测模型的标准偏差 R_{MSEC} 为0.099,误判率为0。图5为模型的预测集均方根误差(RMSEP, R_{MSEP})随主成分因子变化的图,由图可知,主成分因子小于4时,随着主成分因子的增加,预测集均方根误差呈下降趋势;预测集均方根误差达到最小值时对应的主成分因子为7;当主成分因子大于10时,预测集的均方根误差变化很小。当主成分因子选择过小时会出现欠拟合现象,光谱有效信息损失较多,导致模型建模效果变差,反之会出现过拟合现象,引入了较多的噪声等干扰信息。模型效果的回归系数如图6所示,所用的光谱变量与回归系数的加权求和再加上截距 $b=0.97$,即为PLS-DA模型预测的类别值,再通过与阈值的比较,实现甲醇柴油和乙醇柴油样品的预测。

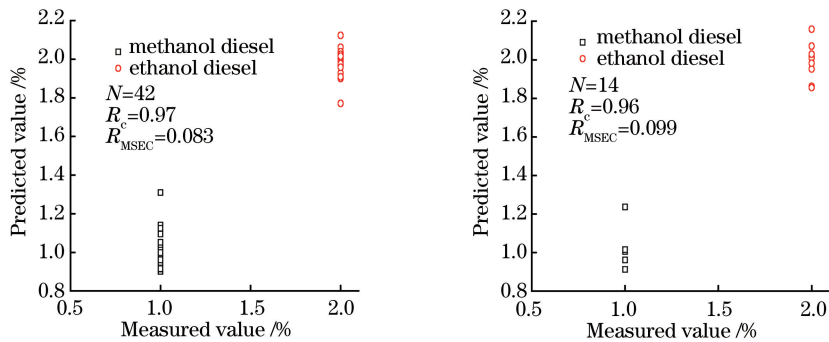


图4 (a)偏最小二乘判别建模模型;(b)偏最小二乘判别预测模型

Fig. 4 (a) PLS-DA calibration model; (b) PLS-DA prediction model

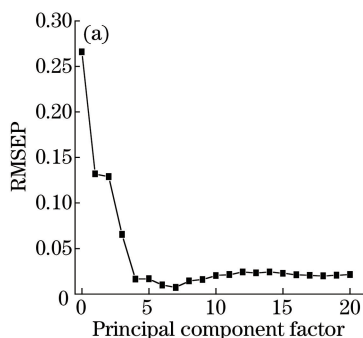


图5 主成分因子

Fig. 5 Principal component factor

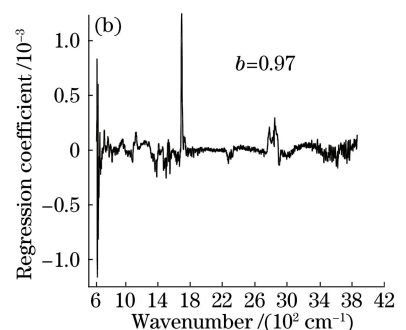


图6 回归系数

Fig. 6 Regression coefficient

3.3 甲醇柴油甲醇含量定量分析

LSSVM 模型核函数分别采用了 Lin 函数和径向基(RBF)函数^[17-25],然后需要确定两个重要参数:正则化参数 γ 和核参数 σ^2 ,这个两个参数会直接影响模型的预测能力。表 2 将两种核函数对应的各种预处理方法以及两个参数的具体数值列举了出来,比较了两者的建模效果。可以看出,采用 Lin 函数的 5 种预处理方法中,经多元散射校正处理后的 LSSVM 模型建模效果是最好的。Lin 函数的参数 γ 为 0.0005,预测集相关系数 R_p 达到了 0.9667,预测集均方根误差 R_{MSEP} 为 1.5228。采用 RBF 函数的 5 种预处理方法中,经多元散射校正处理后的 LSSVM 模型建模效果是最好的。RBF 函数的参数 γ 为 19, σ^2 为 3810,预测集相关系数 R_p 达到了 0.9791,预测集均方根误差 R_{MSEP} 为 1.7201,反应出模型预测精度较高,且 RBF 函数的参数 γ 和 σ^2 相比其他预处理方法均是最低的。综合考虑选择 RBF 为核函数其模型的效果较好,预处理方法按建模效果从优到劣依次排列为:多元散射校正、归一化、基线校正、平滑。因此,今后甲醇含量回归模型建立采用的输入光谱均采用多元散射校正处理后的数据。LSSVM 模型下甲醇含量预测值与真实值相关图,如图 7 所示。

表 2 不同预处理甲醇柴油甲醇含量的 LSSVM 模型

Table 2 LSSVM model for the methanol volume fraction of methanol diesel under different pretreatment methods

Kernel	Kernel formula	Parameter	Pretreatment	R_p	R_{MSEP}
Lin	$K(x_i, x_j) = x_i \cdot x_j$	$\gamma=0.9543$	Smoothing	0.9543	1.6162
		$\gamma=0.0036$	Baseline correction	0.9598	1.4966
		$\gamma=0.0040$	Normalization	0.9624	1.6629
		$\gamma=0.0005$	Multiplicative scatter correction	0.9667	1.5288
		$\gamma=477, \sigma^2=42805$	Smoothing	0.9619	1.6800
RBF	$K(x, x) = \exp(-\ x - x_i\ ^2 / 2\sigma^2)$	$\gamma=203, \sigma^2=21265$	Baseline correction	0.9644	1.6545
		$\gamma=22, \sigma^2=5418$	Normalization	0.9760	1.4181
		$\gamma=19, \sigma^2=3810$	Multiplicative scatter correction	0.9791	1.7201

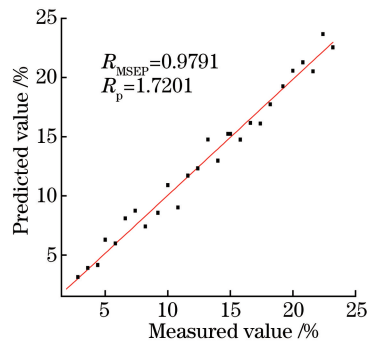


图 7 LSSVM 模型下甲醇含量预测值与真实值相关图

Fig. 7 Correlation of predicted values and measured values of the methanol volume fraction in LSSVM prediction model

3.4 乙醇柴油乙醇含量定量分析

LSSVM 模型核函数分别采用了 Lin 函数和 RBF 函数,两者对应不同预处理方法的建模效果如表 3 所示。可以看出,采用 Lin 函数的 5 种预处理方法中,经二阶五点平滑处理后的 LSSVM 模型建模效果是最好的,此时 Lin 函数的参数 γ 为 0.9543,预测集相关系数 R_p 为 0.9870,预测集均方根误差 R_{MSEP} 为 2.7373;采用 RBF 函数的 5 种预处理方法中,经二阶五点平滑处理后模型的效果不是最好,而经基线校正处理后的 LSSVM 模型建模效果最佳,此时 RBF 函数的参数 γ 为 203, σ^2 为 21265,模型的预测集相关系数 R_p 为 0.9802,预测集均方根误差 R_{MSEP} 为 2.9563,其模型预测精度较高。比较发现使用两种核函数建立的模型效果发现,选择 RBF 作为核函数,模型的整体效果较优。预处理方法按建模效果从优到劣依次排列为:平滑、基线校正、多元散射校正、归一化。因此,之后乙醇含量回归模型建立采用的输入光谱均采用平滑处理后的数据。LSSVM 模型下乙醇含量预测值与真实值相关图如图 8 所示。

表 3 不同预处理乙醇柴油乙醇含量的 LSSVM 模型

Table 3 LSSVM model for the ethanol volume fraction of ethanol diesel under different pretreatment methods

Kernel	Kernel formula	Parameter	Pretreatment	R_p	R_{MSEP}
Lin	$K(x_i, x_j) = x_i \cdot x_j$	$\gamma=0.9543$	Smoothing	0.9870	2.7373
		$\gamma=0.0036$	Baseline correction	0.9755	3.0113
		$\gamma=0.0040$	Normalization	0.9395	3.0596
		$\gamma=0.0005$	Multiplicative scatter correction	0.9535	2.9296
RBF	$K(x, x) = \exp(-\ x - x_i\ ^2 / 2\sigma^2)$	$\gamma=477, \sigma^2=42805$	Smoothing	0.9760	2.6047
		$\gamma=203, \sigma^2=21265$	Baseline correction	0.9802	2.9563
		$\gamma=22, \sigma^2=5418$	Normalization	0.9390	3.0559
		$\gamma=19, \sigma^2=3810$	Multiplicative scatter correction	0.9537	2.9265

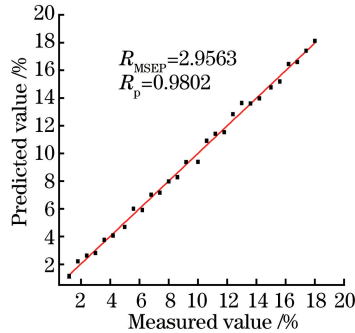


图 8 LSSVM 模型下乙醇含量预测值与真实值相关图

Fig. 8 Correlation of predicted values and measured values of the ethanol volume fraction in LSSVM prediction model

4 结 论

利用中红外光谱技术,实现了甲醇柴油和乙醇柴油的分类,建立了 PLS-DA 模型,其模型误判率低于 7.1%,能够将甲醇柴油和乙醇柴油分别开来。另外,在此基础上,分别建立了甲醇柴油甲醇含量的 LSSVM 模型和乙醇柴油乙醇含量的 LSSVM 模型。检测甲醇柴油甲醇含量的 LSSVM 模型的预测集相关系数 R_p 为 0.9791,预测集均方根误差 R_{MSEP} 为 1.7201。乙醇柴油 LSSVM 模型的预测集相关系数 R_p 为 0.9802,预测集均方根误差 R_{MSEP} 为 2.9563。其模型的效果较好,在日后的甲醇、乙醇类柴油的识别和醇类含量检测方面具有很好的参考价值。

参 考 文 献

- [1] Hahn-Hägerdal B, Galbe M, Gorwa-Grauslund M F, *et al.* Bio-ethanol—the fuel of tomorrow from the residues of today[J]. Trends in Biotechnology, 2006, 24(12): 549-556.
- [2] Barnett A, Honsberg C, Kirkpatrick D, *et al.* 50% efficient solar cell architectures and designs[C]. Photovoltaic Energy Conversion, Conference Record of the 2006 IEEE 4th World Conference on, 2006: 9241110.
- [3] Zhao Hui, Zhao Kun, Tian Lu. Correlation between terahertz absorption spectra and cetane number of biodiesel and diesel[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2011, 48(11): 113001.
赵 卉, 赵 昆, 田 璐. 生物柴油与石化柴油太赫兹光谱与十六烷值相关性的研究[J]. 激光与光电子学进展, 2011, 48(11): 113001.
- [4] Ozanyan K B, Yeo T L, Hindle F P, *et al.* Fiber-based UV laser-diode fluorescence sensor for commercial gasolines [J]. IEEE Sensors Journal, 2004, 4(5): 681-690.
- [5] Frusteri F, Freni S. Bio-ethanol, a suitable fuel to produce hydrogen for a molten carbonate fuel cell[J]. Journal of Power Sources, 2007, 173(1): 200-209.
- [6] Fernandes H L, Raimundo I M, Jr, Pasquini C, *et al.* Simultaneous determination of methanol and ethanol in gasoline using NIR spectroscopy: effect of gasoline composition[J]. Talanta, 2008, 75(3): 804-810.

- [7] Steers D, Gerrard C, Hirst B, *et al.* Gasoline analysis and brand identification using a static Fourier-transform ultraviolet spectrometer[J]. *Journal of Optics A: Pure & Applied Optics*, 1999, 1(6): 680.
- [8] Ortega Clavero V, Weber A, Schröder W, *et al.* Detailed spectral monitoring of different combustible blends based on gasoline, ethanol and methanol using FT-Raman spectroscopy[J]. *Environmental Biotechnology*, 2012, 8: 1-6.
- [9] Li Sheng, Dai Liankui. Fast recognition of gasoline brands based on the Raman spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2010, 30(11): 2993-2997.
李 晟, 戴连奎. 基于拉曼光谱的汽油牌号快速识别[J]. *光谱学与光谱分析*, 2010, 30(11): 2993-2997.
- [10] Souza L M D, Mitsutake H, Gontijo L C, *et al.* Quantification of residual automotive lubricant oil as an adulterant in Brazilian S-10 diesel using MIR spectroscopy and PLS[J]. *Fuel*, 2014, 130: 257-262.
- [11] Li Yanru. Determination of mid-infrared spectroscopy methanol content of methanol in gasoline[J]. *Shanxi Chemical Industry*, 2014, 34(4): 38-39.
李雁如. 中红外光谱法测定甲醇汽油中甲醇含量[J]. *山西化工*, 2014, 34(4): 38-39.
- [12] Wu Xiaohong, Sun Jun, Wu Bin, *et al.* Qualitative analysis model of near infrared spectra of pork based on synergy interval partial least squares discriminant analysis[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(4): 043003.
武小红, 孙 俊, 武 斌, 等. 基于联合区间偏最小二乘判别分析的猪肉近红外光谱定性建模分析[J]. *激光与光电子学进展*, 2015, 52(4): 043003.
- [13] Hao Yong, Sun Xudong, Gao Rongjie, *et al.* Application of visible and near infrared spectroscopy to identification of navel orange varieties using SIMCA and PLS-DA methods[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agriculture Engineering*, 2010, 26(12): 373-377.
郝 勇, 孙旭东, 高荣杰, 等. 基于可见/近红外光谱与 SIMCA 和 PLS-DA 的脐橙品种识别[J]. *农业工程学报*, 2010, 26(12): 373-377.
- [14] Xu H, Qi B, Sun T, *et al.* Variable selection in visible and near infrared spectra: application to on line determination of sugar content in pears[J]. *Journal of Food Engineering*, 2012, 109(1): 142-147.
- [15] Ignat T, Schmilovitch Z, Fefoldi J. Non-destructive measurement of ascorbic acid content in bell peppers by VIS-NIR and SWIR spectrometry[J]. *Postharvest Biology and Technology*, 2012, 74(6): 91-99.
- [16] Fu H Y, Huang D C, Yang T M, *et al.* Rapid recognition of Chinese herbal pieces of *Areca catechu* by different concocted processes using Fourier transform mid-infrared and near-infrared spectroscopy combined with partial least-squares discriminant analysis[J]. *Chinese Chemical Letters*, 2013, 24(7): 639-642.
- [17] LI S, DAI L K. Classification of gasoline brand and origin by Raman spectroscopy and a novel R-weighted LSSVM algorithm[J]. *Fuel*, 2012, 96(7): 146-152.
- [18] Liu Yande, Zhou Yanrui, Pan Yuanyuan. Based on least squares support chili soluble solids and vitamin C content of vector machine near infrared spectroscopy[J]. *Optics and Precision Engineering*, 2014, 22(2): 281-288.
刘燕德, 周延睿, 潘媛媛. 基于最小二乘支持向量机的辣椒可溶性固形物和维生素 C 含量近红外光谱检测[J]. *光学精密工程*, 2014, 22(2): 281-288.
- [19] Liu Yande, Zhou Yanrui. GA-LSSVM based near infrared spectroscopy detection of apple sugar content[J]. *Journal of Northwest A & F University (Natural Science Edition)*, 2013, 41(7): 229-234.
刘燕德, 周延睿. 基于 GA-LSSVM 的苹果糖度近红外光谱检测[J]. *西北农林科技大学学报(自然科学版)*, 2013, 41(7): 229-234.
- [20] Peng Xiuhui, Huang Changyi, Liu Fei, *et al.* Near infrared spectroscopy synergy interval wavelength selection method using the LSSVM model[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, 34(3): 668-672.
彭秀辉, 黄常毅, 刘 飞, 等. LSSVM 模型下的近红外光谱联合区间波长筛选方法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, 34(3): 668-672.
- [21] Wu Tiebin, Zhu Hongqiu, Sun Bei, *et al.* Application of PLS-LSSVM model in zinc purification[J]. *Computer Engineering*, 2012, 38(10): 212-214.
伍铁斌, 朱红求, 孙 备, 等. PLS-LSSVM 模型在锌净化中的应用[J]. *计算机工程*, 2012, 38(10): 212-214.
- [22] Liu Yande, Wu Mingming, Sun Xudong, *et al.* Simultaneous detection of surface deficiency and soluble solids content for *Amygdalus persica* by online visible-near infrared transmittance spectroscopy[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2016, 32(6): 289-295.

- 刘燕德, 吴明明, 孙旭东, 等. 黄桃表面缺陷和可溶性固形物光谱同时在线检测[J]. 农业工程学报, 2016, 32(6): 289-295.
- [23] Sun Tong, Wu Yiqing, Li Xiaozhen, *et al.* Discrimination of camellia oil adulteration by NIR spectra and subwindow permutation analysis[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(6): 0630005.
孙 通, 吴宜青, 李晓珍, 等. 基于近红外光谱和子窗口重排分析的山茶油掺假检测[J]. 光学学报, 2015, 35(6): 0630005.
- [24] Liu Fei, Feng Lei, Chai Rongyao, *et al.* Discrimination of rice canopy leaf blast based on spectroscopic techniques and direct orthogonal signal correction[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, 30(2): 585-589.
刘 飞, 冯 雷, 柴荣耀, 等. 基于直接正交信号校正的水稻冠层叶瘟光谱诊断[J]. 光学学报, 2010, 30(2): 585-589.
- [25] Luo Xia, Hong Tiansheng, Luo Kuo, *et al.* Application of hyperspectrum technology in non-destructive measurement of soluble solid content in pitaya[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(8): 083002.
罗 霞, 洪添胜, 罗 阔, 等. 高光谱技术在无损检测火龙果可溶性固形物中的应用[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(8): 083002.