改进的 SVM 在矿井气体定量分析中的应用

郭天太1,洪 博1,潘增荣2,孔 明1

(1. 中国计量大学 计量测试工程学院,浙江 杭州 310018;
 2. 福建出入境检验检疫局,福建 福州 350000)

摘 要:自行搭建了气体采集系统,根据井下的气体情况,采集了包括甲烷、乙烷、丙烷、正丁烷和二 氧化碳五种气体的中红外光谱数据共 236 组,其中校正集 186 组,验证集 50 组。在对光谱数据进行预 处理之后,利用主成分分析技术将得到的主吸收峰区域的红外光谱数据进行降维处理,通过特征提取 得到 3 个特征值作为矿井气体光谱数据的输入量。该方法有效减少了模型的计算量,加快了模型的收 敛速度。然后,利用改进支持向量机分别对这五种气体建立了定量分析模型。为提高该算法的预测精 度,利用遗传算法和粒子群优化算法分别对 SVM 参数进行参数寻优。最后,选择优化效果更好的粒 子群算法,并通过验证集对这五种气体进行了浓度预测分析。实验结果表明:五种气体浓度预测结果 的平均误差均小于 1.78%,最大误差均小于 4.98%,且对于 50 组的气体预测耗时均小于 103 s。表明所 提出的改进的 SVM 算法能够准确、快速地预测矿井气体浓度,对实现矿井气体检测有着积极的意 义。

关键词:矿井气体; 红外光谱; 定量分析; 粒子群优化算法; 改进的支持向量机 中图分类号:O657.33 文献标志码:A DOI:10.3788/IRLA201645.0617011

Application of improved SVM in quantitative analysis of mine gas concentration

Guo Tiantai¹, Hong Bo¹, Pan Zengrong², Kong Ming¹

Department of College of Metrological Technology and Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China;
 Entry-exit Inspection and Quarantine Bureau of Fujian Province, Fuzhou 350000, China)

Abstract: A quantitative analysis model of mine gas concentration based on improved support vector machine(SVM) was adopted. Five mine gases were used for experiment, which included methane, ethane, propane, n-butane and carbon dioxide. Mid-infrared spectral data of these five gases and mixed gases were collected with Fourier infrared spectrometer. 236 groups of these mixed gases were divided into 186 groups for calibration set and 50 groups for validation set. Principal component analysis (PCA) was used to reduce the dimensionality of the infrared spectral data, and 3 eigenvalues were extracted as input, which helped to improve convergence speed and reduce calculation time. Particle swarm optimization (PSO) and genetic algorithm (GA) were used to optimize parameters of support vector machine (SVM) method respectively, and PSO was adopted for its better optimization effect over GA. The mixed gases

收稿日期:2015-10-10; 修订日期:2015-11-18

基金项目:国家自然科学基金(51476154;51404223)

作者简介:郭天太(1968-), 男, 副教授, 硕士生导师, 主要从事自校正技术与红外光谱分析技术方面的研究。Email: guotiantai@163.com

were detected through this algorithm, and experiment results show that the average errors of concentration predictions of five gases are all less than 1.78%, and the maximum errors of concentration predictions of five gases are all less than 4.98%. The time cost for concentration prediction is all less than 103 s for the 50 groups. This suggested that the improved SVM method based on PSO can be used to predict the gas concentration accurately, and can meet the requirement of real-time detection of mine gases, which has great value in the study of concentration prediction of mine gases.

Key words: mine gases; infrared spectrum; quantitative analysis; particle swarm optimization (PSO); improved support vector machine

0 引 言

矿井中的瓦斯气体和有毒有害气体是严重威胁 我国煤矿安全生产的主要自然因素之一。每年的矿 井灾害都会造成大量的人员伤亡和巨大的财产损 失。对矿井中的气体浓度进行准确检测是预防矿井 事故的关键,对保障井下作业人员的生命安全和煤 炭工业的发展具有重要意义四。目前,分析混合气体 时采用的方法包括气相色谱法[2]、电化学传感器检 测法^[3]和一般光学法^[4-5]。其中,气相色谱法在使用过 程中进行色谱分离需较长时间,氢火焰检测器不能 在煤矿现场应用,不适合煤矿日常气体分析和事故 发生时抢险救灾现场应用。电化学传感器的检测系 统采用液体电解质,因此在现场应用时很不方便。一 般光学法的缺点是检测精度较低,但该缺点可通过 算法模型予以补偿。而一般光学法中的红外光谱法 以其非破坏性、扫描速度快、稳定性好、信噪比高等 诸多优点在气体检测中得到了广泛的应用[6-7]。所以, 将红外光谱法应用于煤矿井下气体的分析, 以实现 矿井气体准确、快速的检测,对于煤矿的安全生产和 井下作业人员的人身安全都具有积极的意义[8]。

矿井有害气体主要包括:甲烷(CH₄)、乙烷(C₂H₆)、 丙烷(C₃H₈)、正丁烷(n-C₄H₁₀)和二氧化碳(CO₂)等。 在利用红外光谱对气体进行定量检测时,这五种气 体在中红外波段都有明显的特征吸收区域,利用化 学计量学方法可以建立混合气体定量分析模型。现 有的常用方法包括多元线性回归法^[9]、偏最小二 乘法^[10]、人工神经网络法^[11]、支持向量机法^[12-13]等。 由于矿井气体浓度变化范围较大,气体浓度与光谱 吸光度之间已非简单的线性关系,且烃类气体的谱 峰重叠严重,增加了建立气体浓度定量检测模型的 难度,常规的线性分析方法已无法满足研究需要。支 持向量机(SVM)可以满足非线性分析的需求,且其 在算法的收敛速度与准确度上相较其他方法都有一 定的优势^[14]。

文中自行搭建了气体采集系统,并利用 Nicolet-Nexus870 傅里叶变换红外光谱仪对所需的气体光谱 数据进行了采集。根据矿井中的气体浓度变化范围, 对 CH4、C2H6、C3H8、n-C4H10、CO2 五种气体建立了单组 份气体和混合气体样本。由于光谱数据较大,在对得 到的光谱数据进行预处理之后,利用主成分分析法 对其进行了降维处理。然后分别采用遗传算法和粒 子群优化算法对 SVM 的参数进行了优化,通过比较 两种算法的优化结果和运算速度,采用优化更好、收 敛速度更快的粒子群优化算法。最后,建立了气体定 量分析模型,并通过验证集对所建立模型进行验证。

1 支持向量机原理

1.1 支持向量机回归预测的基本原理

SVM¹¹⁵是在统计学习理论的基础上发展起来的, 具有通用性好、鲁棒性强、计算简单、理论完善等优 点。设有训练数据为 (x_i, y_i) ,其中 $i=1,2,3, \cdots, l, x_i \in R^{o}, y_i \in R, x_i$ 为输入量, y_i 为相应的输出量,则有拟合 函数:

$$f(x) = w \cdot x + b \tag{1}$$

式中:w为空间的超平面;b为偏置量。

根据结构风险最小原则,可以将该优化问题等 效为:

$$\min \frac{1}{2} ||w||^2 + C \sum_{i=1}^{l} (\xi_i + \xi_i^*)$$

s.t.
$$\begin{cases} y_i - w \cdot x_i - b \leq \varepsilon + \xi_i \\ w \cdot x_i + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^* \\ \xi_i + \xi_i^* \geq 0 (i=1, 2, \cdots, l) \end{cases}$$
(2)

式中:n为样本个数;c为惩罚因子;ξ为松弛因子;ε 为不灵敏参数,用来反映模型对误差的容忍度。

通过引入 Lagrange 乘子,可以得到上述问题的 对偶问题:

$$\max\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{l} (\alpha_{i}-\alpha_{i}^{*})(\alpha_{j}-\alpha_{j}^{*})(x_{i}\cdot x_{j})-\sum_{i=1}^{l} \alpha_{i}(\varepsilon-y_{i})-\sum_{i=1}^{l} \alpha_{i}^{*}(\varepsilon+y_{i})\right]$$

s.t.
$$\left\{\frac{\sum (\alpha_{i}-\alpha_{i}^{*})=0}{0 \le \alpha_{i}, \alpha_{i}^{*} \le C \ (i=1,2,\cdots,l)}\right\}$$
(3)

利用最优化理论中的二次规划求解上述优化问题,得到参数 α_i, α^{*}, 然后利用 KKT 条件, 计算得到:

$$b = \frac{1}{N_s} \sum_{S} \left[t_s - \varepsilon - \sum_{m \in S}^{l} (\alpha_m - \alpha_m^*) (x_m \cdot x_s) \right]$$
(4)

最后计算得到的预测输出为:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{l} (\alpha_i - \alpha_i^*)(x_i \cdot x) + b$$
 (5)

支持向量机的算法的基本结构如图 1 所示。其中,*X* 为输入变量,*K* 为核函数,*Y* 为输出,*b* 为偏置量。



图 1 支持向量机的结构 Fig.1 Structure of SVM

1.2 核函数的选择

核函数 k(x_i,x_j)是满足Mercer 理论的任意对称函数。选用不同的核函数,可以构造不同的支持向量机。由于基于红外光谱法的矿井气体定量分析属于 非线性建模问题,所以选用非线性拟合效果最好的 RBF(径向基)核函数作为 SVM 建模的核函数,其表 达式为:

$$k(x, x_i) = \exp(g||x - x_i||^2)$$
 (6)

式中:g为核函数的参数,且g>0。

1.3 支持向量机回归模型的改进

由于文中研究的矿井气体中 CH₄ 气体和 CO₂ 气体的浓度较高,而 C₂H₆、C₃H₈、C₄H₁₀ 三种气体的浓度较低。当 CH₄和 CO₂ 气体的浓度偏差较大时,可以容忍较大的预测偏差,但其相对误差仍较小。所以在支持向量回归中引入一个动态变化的不敏感区域,即 用一个动态变化的不敏感函数 $\epsilon(y_i)$ 代替原固定不变的不敏感参数 ϵ 。于是,公式(3)变为:

$$\max\left[-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{l} (\alpha_{i} - \alpha_{i}^{*})(\alpha_{j} - \alpha_{j}^{*})(x_{i} \cdot x_{j}) - \sum_{i=1}^{l} \alpha_{i}(\varepsilon(y_{i}) - y_{i}) - \sum_{i=1}^{l} \alpha_{i}^{*}(\varepsilon(y_{i}) + y_{i})\right]$$
s.t.
$$\left\{\sum_{0 \leq \alpha_{i}, \alpha_{i}^{*} \leq C \ (i=1,2,\cdots,l)\right\}$$

$$(7)$$

公式(4)变为:

$$b = \frac{1}{N_s} \sum_{S} \left[t_s - \varepsilon(\mathbf{y}_i) - \sum_{m \in S}^{l} (\alpha_m - \alpha_m^*) (\mathbf{x}_m \cdot \mathbf{x}_s) \right]$$
(8)

动态不敏感函数 $\varepsilon(y_i)$ 的引入可以防止校正模型的过学习,增加模型预测精度和稳定性。根据矿井气体浓度变化情况,不敏感动态变化函数 $\varepsilon(y_i)$ 为 y_i 的单调递增函数,即 $\varepsilon(y_i)=0.005y_i$ 。

2 气体光谱数据的采集

为了采集矿井气体的红外光谱数据,自行搭建 了气体采集系统。该系统如图2所示,主要由气体调 节器、质量流量计、压力表、温度控制器、红外光谱 仪、气体池、计算机等组成。



图 2 气体采集系统 Fig.2 Experimental system for gas collection

在采集气体光谱前,需要用氮气将系统中的其 他气体排空,然后通过真空泵将系统抽真空,保持整 个气体采集系统处于真空状态 10 min 以上。在采集 待检测的气体时,主要通过调节器和质量流量计对 输入的高浓度的单一气体进行混合,并通过氮气对 其他气体进行稀释,从而在气体池中定量地得到所 需的单一组份的气体或者多组份的混合气体。然后, 用傅里叶变换红外光谱仪对气体池中的气体进行测 试,得到实验所需的光谱数据。

文中使用的光谱仪器是 Nicolet-Nexus870 型傅 里叶变换红外光谱仪。光谱仪的扫描范围设定为 1000~4000 cm⁻¹,扫描的分辨率为 4 cm⁻¹,扫描次数 为 32 次。考虑到矿井下气体的实际组成情况,将 CH₄、C₂H₆、C₃H₈、n-C₄H₁₀、CO₂ 作为研究对象,并确定 了混合气体各组份的浓度范围,如表 1 所示。文中共 采集了 236 组样本,其中单组份气体 126 组,混合气 体 110 组。取其中的 186 组作为校正集样本,50 组作 为测试集样本。

表1每种气体的浓度范围

Tab.1 Concentration range of each kind of gases

Serial number	Components name	Concentration range
1	CH_4	0-20%
2	C_2H_6	0-1%
3	C_2H_4	0-1%
4	$n-C_4H_{10}$	0-1%
5	CO_2	0-20%

3 矿井气体的定量分析

3.1 光谱预处理

由于测量得到的红外光谱数据含有其他噪声, 在建立模型前,需要对得到的光谱数据进行预处理。 但过多的光谱预处理反而会破坏原始的光谱数据, 降低定量分析气体的预测精度。所以,文中对采集得 到的 236 组样本数据都采用了比较常用和基本的预 处理方法,包括基线校正、去噪、归一化等处理。

其中,首先采用人工基线校正方法,使得得到的 光谱图的基线在0位置,减少了FTIR光谱仪本身的 性能和其他系统干扰因素的影响。然后对光谱数据 进行过滤,把光谱数据中吸光度值低于0.005的均 作为噪声,将其赋值为0进行处理。最后,对光谱数 据进行归一化处理,所用的归一化如下:

$$y = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \tag{9}$$

式中: $(x, y) \in \mathbb{R}^n, x_{\min} = \min(x), x_{\max} = \max(x)_\circ$

归一化的效果是使得原始数据被规整到[0,1] 的范围之内,消除噪声和漂移等对光谱数据检测的 影响,从而提高数据分析的准确性和稳定性。

3.2 主成分降维处理

为了保留所得到光谱数据尽可能全面的信息, 最终选择的光谱区域为(2200~2400) cm⁻¹U(2800~ 3200) cm⁻¹,该区间包括了所有五种气体组份的特征 光谱吸收信息。光谱仪采用的分辨率为 4 cm⁻¹, 故该 区间内共包含150个数据。将所有气体的光谱数据 进行预处理后写成矩阵的形式,则光谱数据矩阵 X 的维度为186×150,浓度数据C的矩阵维数为186×5。 由于每一维的光谱数据较多,会影响定量分析模型 的建模速度和准确度。为加快 SVM 的建模速度,需 要对光谱数据矩阵 X 进行降维处理。文中利用主成 分分析(PCA)技术对得到的数据进行降维处理,其降 维结果如图 3 所示。可以看出,到第三个主成分后, 主成分的总贡献值达到了 99.99%,可以完全代替原 有的矩阵,所以得到的得分矩阵 T_{min} 的维度为 186× 3,利用 T_{min} 训练 SVM 模型,通过 SVM 算法建立其 与输出矩阵之间的非线性映射关系。



3.3 改进 SVM 定量分析过程

由于 SVM 的输出只能是一维输出,所以对五种 气体要分别进行建模。另外,需要对 SVM 中的惩罚 因子 *c* 及径向基核函数参数 *g* 进行合理选择。目前 对于 SVM 参数的优化算法研究主要有交叉验证法 (CV)、遗传算法(GA)、粒子群算法(PSO)等几种,针 对不同的研究对象,所采用的算法所达到的效果也 不同。由于 CV 法的寻优时间过长,文中不考虑这种 算法的寻优效果,只对 GA 和 PSO 算法的 SVM 参数 寻优效果进行比较分析。

3.3.1 遗传算法优化 SVM 的函数参数

用 GA 对支持向量机中的参数寻优运算流程图 如图 4 所示。



图 4 GA 优化 SVM 流程图

Fig.4 Flowchart of the optimization of SVM by GA

用遗传算法选择支持向量机参数的具体步骤为:

(1)随机产生一组支持向量机中需要优化的参数,并对其中的每个参数进行编码,从而构造得到初始群体;

(2) 构造出参数的适应度函数,进而求解适应度 函数值的最优解;

(3) 当求得的最优解没有达到设定值时,选择若 干适应度大的个体,直接遗传给下一代;

(4)利用交叉、变异等遗传操作算子对当前一代 群体进行处理,生成子代种群;

(5)返回步骤(2),使初始的支持向量机参数不断进化,直到寻找到的最优解满足条件;

以甲烷气体为例,利用 GA 优化 SVM 参数的结果如图 5 所示。



Fig.5 Results of the optimization of SVM by GA

3.3.2 粒子群算法优化 SVM 的函数参数

粒子群优化算法是一种启发式算法,该算法是 通过选择、较差和变异等操作来确定全局的最优解, 其优化的具体流程如图 6 所示。其中,选取的粒子群 的维数为 2,粒子数目为 30 个,优化代数为 300 代, 学习因子 k₁=1.5,k₂=1.7。以甲烷气体为例,PSO 算法 对 SVM 参数优化结果如图 7 所示。



图 6 PSO 优化 SVM 参数的流程图

Fig.6 Flowchart of the optimization of SVM by PSO



图 7 PSO 参数优化结果

Fig.7 Results of the optimization of SVM by PSO

GA 算法和 PSO 算法优化SVM 参数的结果如 表2 所示。可以看出,用 PSO 优化 SVM 的参数寻优 结果所得的均方差比 GA 小,且程序的运行速度要 快于 GA 算法,所以文中采用 PSO 算法对 SVM 中的 参数进行寻优。

表 2 GA 算法和 PSO 算法的参数寻优结果

Tab.2 Results of the optimization of SVM by GA

and	PSO
ana	100

Optimization method	С	g	MSE	Optimization time T/s
GA	93.67	0.23	0.00765	346
PSO	203.99	0.55	0.00520	233

文中通过 PSO 算法对五种气体的参数分别进行寻优,其结果如表 3 所示。从表中可以看出,所有的均方差 MSE 值均小于 0.006,建立模型耗时小于 300 s,可见模型对气体的预测精度高,建模速度快。

表 3 五种气体的 SVM 参数优化结果

Tab.3 Results of the optimization of SVM of five

gases

Types of gases	С	g	MSE	Optimization time T/s
CH_4	203.99	0.55	0.005 20	233
C_2H_6	443.25	0.090	0.000 46	144
C_3H_8	1 000.00	0.20	0.000 23	289
$n - C_4 H_{10}$	1 000.00	0.14	0.000 54	248
CO_2	18.09	0.0075	0.001 59	258

3.3.3 模型建立与检验

为了进一步验证所建立的 SVM 模型的性能,利 用验证集中的 50 组混合气体对模型进行测试,通过 结果验证定量分析模型的准确度。利用基于 PSO 优 化的 SVM 矿井气体定量分析模型对 CH₄、C₂H₆、 C₃H₈、n-C₄H₁₀ 和 CO₂ 五种气体的预测结果分别如 图8~图 12 所示。





这五种气体的最大相对误差、平均相对误差、均 方差和预测所耗用的时间如表 4 所示。

表 4 五种气体验证集的预测结果误差 Tab.4 Error of five gases of validation sets

Types of gases	Largest relative error	Average relative error	MSE	Prediction time T/s
CH_4	4.31%	1.25%	0.006 60	78
C_2H_6	-4.98%	1.78%	0.00051	49
C_3H_8	-3.37%	1.63%	0.001 85	103
$n - C_4 H_{10}$	3.69%	1.66%	0.00051	91
CO_2	2.43%	0.46%	0.000 28	86

从图8~图 12 和表 4 中的数据可以看出,每种气 体的最大相对误差的绝对值不超过 4.98%, 且平均 相对误差均小于1.78%。其中,CH4的均方差最大, 主要原因是 CH₄ 的气体浓度范围大导致绝对误差较 大,但其平均相对误差只有 1.25%,所以对 CH4 的气 体浓度预测精度还是相当高的。C₂H₆、C₃H₈和 n-C₄H₁₀三种气体的预测精度较低,主要原因是这三种 气体的光谱数据在(2800~3200) cm⁻¹ 这个波段内重 叠严重,另外的原因是这三种烃类气体均是低浓度 气体,系统在配气时存在着一定的误差,但其最大的 平均相对误差仍小于 1.78%。CO2 气体的光谱图与 其他气体的光谱特性相差较大,所以在预测时受到 的干扰也最小,其实验的预测效果也最好,平均相对 误差只有 0.46%。可见,基于 PSO 的改进 SVM 算法 模型对于矿井中的五种气体都有较好的预测效果。 另外,五种气体的 50 组测试时间均小于 103 s.满足 矿井气体的检测要求,可以实现矿井气体的快速检 测。

4 结 论

为了实现对矿井气体准确、快速的浓度预测,文 中利用傅里叶变换红外光谱仪采集了矿井气体的样 本数据,然后采用主成分分析法对光谱数据进行了 降维处理,并利用其中的 186 组气体光谱数据建立 了基于改进支持向量机的矿井气体浓度的定量分析 校正模型。利用粒子群优化算法对该模型的参数进 行优化,最后对 50 组测试集进行了浓度预测,并分 析了其预测结果的准确度。实验结果表明,基于 PSO 优化的改进 SVM 算法模型在检测矿井气体时,其浓 度检测的平均相对误差不超过 1.78%,50 组气体的 预测速度均小于 103 s。所以,建立的定量分析模型 可以满足矿井有害气体的实际测量要求。这对实现 矿井气体的准确检测具有积极的意义。

参考文献:

Zhang Liqing, Qin Yujin, Jiang Wenzhong, et al. State-of-the-art of the prediction method and prospect of mine gas emission in China[J]. *Coal Mine Safety*, 2007(8): 58-60. (in Chinese)

章立清,秦玉金,姜文忠,等.我国矿井瓦斯涌出量预测方法研究现状及展望[J].煤矿安全,2007(8):58-60.

- [2] Li Jingyu, Zhang Yingwei, Li Wenzhe, et al. Study on biogas content by gas chromatography [J]. Study on Agricultural Mechanization, 2015(6): 255–257. (in Chinese) 李晶宇, 张影微, 李文哲, 等. 气相色谱法测定沼气气体成 分及含量的研究[J]. 农机化研究, 2015(6): 255–257.
- [3] Wang Xiaozeng, Yang Jiuhong, Zeng Hui. Study of CH₄ electrochemical sensor non-linear self-correction in extended range[J]. *Coal Mine Safety*, 2010(9): 18–20. (in Chinese) 王小增,杨久红,曾辉. 瓦斯气体电化学传感器超量程段 的非线性自校正研究[J]. 煤矿安全, 2010(9): 18–20.
- [4] Chen Yuanyuan, Wang Zhibin, Wang Zhaoba, et al. Research on concentration retrieval of gas FTIR spectra by interval extreme learning machine and genetic algorithm [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, 34(5): 1244–1248. (in Chinese)
 陈媛媛, 王志斌, 王召巴, 等. 区间极限学习机结合遗传算

法用于红外光谱气体浓度反演的研究 [J]. 光谱学与光谱 分析, 2014, 34(5): 1244–1248.

- [5] Zheng Longjiang, Li Peng, Qin Ruifeng, et al. Research situation and developing tendency for optical measurement technology of gas density [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2008, 45(8): 24–32. (in Chinese)
 郑龙江,李鹏,秦瑞峰,等. 气体浓度检测光学技术的研究 现状和发展趋势 [J]. 激光与光电子学进展, 2008, 45(8): 24–32.
- [6] Richter D, Fried A. Development of a tunable mid –IR difference frequency laser source for highly sensitive airborne trace gas detection[J]. *Appl phys B*, 2002, (75): 281–288.
- [7] Liang Yuntao, Tang Xiaojun, Luo Haizhu, et al. Quantitative spectrum analysis of characteristic gases of spontaneous combustion coal [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis,

2011(9): 2480-2484. (in Chinese) 梁运涛, 汤晓君, 罗海珠, 等. 煤层自然发火特征气体的光 谱定量分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2011(9): 2480-2484.

[8] Li Li, Wang Yiding, Li Shuwei. Application of infrared gas detection technology to safe production and transportation in natural gas industry [J]. *Natural Gas Industry*, 2011, 31(1): 1–5. (in Chinese)

李黎, 王一丁, 李树维. 红外气体检测技术在天然气安全 生产中的应用[J]. 天然气工业, 2011, 31(1): 1-5.

- [9] Zhang Lin, Shao Shengyu, Yang Liu, et al. Progress of research on infrared spectrometry in gas quantitative analysis
 [J]. Analytical Instruments, 2009(2): 6–9. (in Chinese)
 张琳, 邵晟宇, 杨柳,等. 红外光谱法气体定量分析研究进展[J]. 分析仪器, 2009(2): 6–9.
- [10] Zhao Jianhua, Gao Mingliang, Wu Xiujuan. Study on the quantitative analysis of common fire toxic gases by PLS-BP model[J]. *Fire Safety Science*, 2010(3): 158-164. (in Chinese) 赵建华, 高明亮, 武秀娟. PLS-BP 法定量分析火灾中的常 见有毒有害气体[J]. 火灾科学, 2010(3): 158-164.
- [11] Tang Xiaojun, Hao Huimin, Li Yujun, et al. Analysis of mixed alkane gas based on tikhonov regularization spectra selection and optimal neural network parameters selection[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2011(6): 1673–1677. (in Chinese)

汤晓君,郝惠敏,李玉军,等.基于 Tikhonov 正则化特征

光谱选择与最优网络参数选择的轻烷烃气体分析 [J]. 光 谱学与光谱分析, 2011(6): 1673-1677.

 Bai Peng, Xie Wenjun, Liu Junhua. New method of mixed gas infrared spectrum analysis based on SVM [J].
 Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(7): 1323–1327. (in Chinese)

白鹏,谢文俊,刘君华. 混合气体红外光谱支持向量机分析的新方法[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(7): 1323-1327.

- [13] Wang Yuanbin. Infrared spectrum analysis of the gas in coal mine based on SVM [J]. *Intelligent Computing and Intelligent System*, 2009(1): 608–611.
- [14] Jin Ye, Yang Kai, Wu Yongjiang, et al. Application of particle swarm optimization based least square support vector machine in quantitative analysis of extraction solution of safflower using near-infrared spectroscopy [J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2012, 40(6): 925–931. (in Chinese)
 金叶,杨凯, 吴永江,等. 基于粒子群算法的最小二乘支持 向量机在红花提取液近红外定量分析中的应用 [J]. 分析
- [15] Gu Yanping, Zhao Wenjie, Wu Zhansong. Least squares support vector machine algorithm [J]. *J Tsinghua Univ (Sci & Tech)*, 2010, 50(7): 1063–1066. (in Chinese) 顾燕萍, 赵文杰, 吴占松. 最小二乘支持向量机的算法研究 [J]. 清华大学学报(自然科学版), 2010, 50(7): 1063–1066.

化学, 2012, 40(6): 925-931.