**DOI:**10.16136/j.joel.2023.08.0389

# 基于偏最小二乘法的 CO2 加权组合测量研究

王一童<sup>1,2,3</sup>,李红莲<sup>1,2,3\*</sup>,李文铎<sup>1,2,3</sup>,李小亭<sup>1,2,3</sup>,许 旭<sup>4\*</sup>

(1.河北大学 质量技术监督学院,河北 保定 071000; 2. 计量仪器与系统国家地方联合工程研究中心,河北 保定 071000; 3. 河北省能源计量与安全检测技术重点实验室,河北 保定 071000; 4. 河北白沙烟草有限责任公司 保 定卷烟厂供应部,河北 保定 071000)

摘要:为了解决光谱之间相互干扰、建模速度慢等缺点,采用多波段加权组合模型与偏最小二乘(partial least squares, PLS)法结合进行定量分析提高测量精度。本文搭建了基于超连续谱激光吸收光谱(spectrum laser absorption spectrum, SCLAS)技术的气体检测系统,基于 PLS 对近红外不同波段二氧化碳(CO<sub>2</sub>)进行加权组合测量研究。在常温常压下对 1425—1443 nm、1565—1587 nm、1595—1616 nm 波段内不同浓度 CO<sub>2</sub> 的吸收光谱进行了测量,基于 PLS 建立了单一波段回归模型,得出的决定系数(coefficient of determination, R<sup>2</sup>)分别为 0.9897、0.9486、0.9497。通过 R<sup>2</sup>和均方根误差(root mean square error, RMSE)分别确定单一波段模型的权重,采用多波段加权组合模型算法建立了新的 PLS 组合模型,得出的 R<sup>2</sup>分别为 0.9852、0.9912。实验结果表明,基于 PLS 的加权组合模型能够提高 CO<sub>2</sub> 浓度的预测精度与稳定性,有效避免建模速度慢和干扰问题。 关键词:偏最小二乘(PLS);多波段加权组合;超连续谱激光;吸收光谱

# Research on CO<sub>2</sub> weighted combination measurement based on

文章编号:1005-0086(2023)08-0802-07

### partial least square method

文献标识码:A

**中图分类号:**O657.33

WANG Yitong<sup>1,2,3</sup>, LI Honglian<sup>1,2,3\*</sup>, LI Wenduo<sup>1,2,3</sup>, LI Xiaoting<sup>1,2,3</sup>, XU Xu<sup>4\*</sup>

College of Quality and Technical Supervision, Hebei University, Baoding, Hebei 071000, China; 2. National and Local Joint Engineering Research Center of Measuring Instruments and Systems, Baoding, Hebei 071000, China; 3. Hebei Key Laboratory of energy measurement and safety testing technology, Baoding, Hebei 071000, China;
 Supply Department, Baoding Cigarette Factory, Hebei Baisha Tobacco Co. Ltd., Baoding, Hebei 071000, China)

Abstract: In order to solve the shortcomings of mutual interference between spectra and slow modeling speed, a multi-band weighted combination model combined with the partial least squares (PLS) method was used for quantitative analysis to improve the measurement accuracy. In this paper, a gas detection system based on spectrum laser absorption spectrum (SCLAS) was built to perform a weighted combination measurement of  $CO_2$  in different wavelengths of the near-infrared based on PLS. The absorption spectra of different concentrations of  $CO_2$  in the bands of 1425—1443 nm,1565—1587 nm, and 1595—1616 nm were measured at room temperature and pressure. The single-band regression model based on PLS was established, and the coefficient of determination ( $R^2$ ) were 0, 9897, 0, 9486 and 0, 9497, respectively. The weights of the single band models are determined based on  $R^2$  and the root mean square error (RMSE). A new PLS combination model is established using the multi-band weighted combination model algorithm, and the obtained  $R^2$  are 0, 9852 and 0, 9912, respectively. The experimental results show that the PLS-based weighted combination model can improve the accuracy and stability of  $CO_2$  concentration prediction and effectively avoid the slow modeling speed and interference problems.

收稿日期:2022-05-25 修订日期:2022-07-21

<sup>\*</sup> E-mail:lihonglian@hbu.edu.cn;739734434@qq.com

**基金项目:**国家自然科学基金(62173122)、河北省自然科学重点项目(F2021201031)和河北省引进留学人员(C20210312)资助 项目

Key words: partial least squares (PLS); multi-band weighted combination; spectrum laser; absorption spectrum

## 0 引 言

二氧化碳(CO<sub>2</sub>)是一种重要的温室气体,近 年来,大气中 CO<sub>2</sub> 的浓度增长使得大气、海洋和陆 地变暖,导致全球平均气温不断上升、极端天气频 发、气候系统各圈层发生巨大的变化[1]。此外,吸 人过量的 CO<sub>2</sub> 会导致人窒息死亡。因此,及时检 测 CO<sub>2</sub> 含量对环境保护及人身安全具有重要的意 义。常见的气体检测方法有气相色谱法、催化燃 烧法、电化学法和吸收光谱法等[2]。吸收光谱法 直接研究光与气体作用的结果,可以检测气体的 成分和浓度,具有寿命长、探测范围广、实时在线 监测等优点,在气体检测领域得到了广泛的应 用<sup>[3]</sup>。超连续谱激光吸收光谱(spectrum laser absorption spectrum, SCLAS) 技术是一种新型的光 谱检测技术,光谱范围较宽,可以实现多种气体的 同时测量<sup>[4]</sup>。2020年, ADAMU等<sup>[5]</sup>基于超连续 谱激光器建立了用于检测 NH<sub>3</sub>和 CH<sub>4</sub>的检测系 统,系统的响应度、选择性、性能都具有较高的可 靠性。2021年,ABBAS等<sup>[6]</sup>设计了一种结合高重 复频率中红外超连续谱光源的快速扫描傅里叶变 换光谱仪,其波长范围为 2-10.5 µm,并对比了两 种光源,提高了测量光谱的信噪比。

对测量结果进行定量分析通常采用建立单一 模型的方法,但单一模型受很多因素的影响难以 实现高精度测量。组合模型可以很好地弥补单一 模型的缺点,能够精准地提取各个模型中的有用 信息,去除冗余信息,有效地提高预测精度。2020 年宋大勇等<sup>[7]</sup>选取 CO<sub>2</sub> 在 2003 nm 处的谱线,用 高斯函数和洛伦兹函数直接加权,测量气体的压 力、温度等参数,温度的误差可在3%以内,有效 降低了测量误差。2021年, PARK等<sup>[8]</sup>针对样本 的分类问题,研究了漫反射光谱和激光诱导击穿 光谱在提高分类精度方面的互补效应,采用不同 的加权因子构建了 DORS-LIBS 融合模型, 与单一 模型相比,最优融合模型具有更高的分类精度。 2021年,LIU等<sup>[9]</sup>提出了一种光滑样条回归变权 加权组合模型,对非平稳、非线性数据进行处理, 组合模型误差为1.16,比单一模型减小0.56,平均 绝对百分误差为0.04,比单一模型减少0.02,能够 有效准确地预测周期注水量。2022年, WANG 等[10] 为提高瓦斯浓度预测精度,建立了基于 LSTM-LightGBM 变权重的气体浓度预测组合模 型,得到的变权重组合模型的平均相对误差为 1.94%,准确率优于其他模型。本课题组之前研

究了采用多波段加权融合模型方法对 CO<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub> 进行了测量,建立了不同波段 CO<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub> 浓度的测 量模型,获得的加权组合模型有效提高了气体反 演精度<sup>[11,12]</sup>。很多学者采用偏最小二乘(partial least squares, PLS)进行定量分析提高测量精度。 2020年, ZIFARELLI 等<sup>[13]</sup>提出了一种基于 PLS 回归的统计工具,在中红外范围内检测了 N<sub>2</sub> 稀释 的  $CO_{N_2}O$  混合物和  $C_2H_2$ 、 $CH_4$ 、 $N_2O$  混合物的 吸收光谱,与标准多元线性回归相比,PLS回归预 测气体浓度的校准误差降低了5倍。2021年,张 锋等[14]测量烷烃类气体的傅里叶变换红外光谱, 采用加权自举采样技术区分变量,通过 PLS 对变 量空间建立模型,提高了分析模型的预测精度与 运行效率。2022年,王刚等[15]提出了一种基于 PLS回归算法的低成本多参数空气质量监测系 统,测量  $CO_x NO_2_x SO_2$  和  $O_3$  的结果与预测结果 的均方根误差(root mean square error, RMSE)分 别为 0.11 mg/m<sup>3</sup>、15.67  $\mu$ g/m<sup>3</sup>、2.77  $\mu$ g/m<sup>3</sup> 和 28.83 μg/m<sup>3</sup>,降低了测量误差。2022年,LI等<sup>[16]</sup> 设计了一种新型的基于自适应逐步滑动 PLS 的快 速红外光谱定量分析方法。通过在 400 个烷烃样 品的红外光谱数据集上的实验,得出该算法的性 能比3种典型的定量分析方法建模速度快,分析 精度高,稳定性好。

针对单一模型预测精度低、适应性差等问题, 本课题组采用组合模型方法进行了研究,虽然获 得了较好的效果,但是仍然存在光谱之间相互干 扰、建模速度慢、易受噪声干扰等缺点,因此,针对 以上述问题,采用 PLS 进行定量分析进一步提高 测量精度。本文测量了 CO<sub>2</sub> 在不同波段的吸收光 谱,基于决定系数(coefficient of determination, *R*<sup>2</sup>) 和 *RMSE* 的权重系数确定方法确定了组合模型的 权重,采用 PLS 建立模型,比较两种加权组合模型 和单一模型的测量精度,寻找最优的模型,这对提 高气体测量精度和稳定性具有重要意义。

### 1 理论基础

#### 1.1 多波段加权组合预测方法

组合预测模型能在一定程度上提高预测精度, 抗干扰性和稳定性也较好。权重代表了单一模型在 整体模型中的相对重要程度。权重越大,则说明该 单一模型的重要性越高,对整体的影响就越大。加 权组合模型最重要的一步就是确定各单一模型权重 系数,不同的权重确定方法构成了不同的组合模型, 最终也会得到不同的预测效果。本课题组之前进行 过相关研究[11,12]。

1) 基于 R<sup>2</sup>的赋权方法

通过 *n* 个单一模型的 *R*<sup>2</sup> 确定组合模型的权重 系数。该方法的计算式如下:

$$w_{i} = \frac{R_{i}^{2}}{\sum_{i=1}^{n} R_{i}^{2}} (i = 1, 2 \cdots, n)_{\circ}$$
(1)

2) 基于 RMSE 的赋权方法

通过 n 个单一模型的 RMSE 以求得组合模型的 权重系数。该方法的计算式如下:

$$w_i = \frac{1}{RMSE_i \times \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{RMSE_i}}$$
(2)

1.2 PLS 回归基本原理

1) 假设实验得到 q 个因变量和 p 自变量<sup>[17,18]</sup>, 观测 n 个样本点,建立质量变量标准化数据表  $X = [x_1, x_2, \dots, x_m] \in \mathbf{R}^{n \times m}$ ,建立过程变量标准化数据表  $Y = [y_1, y_2, \dots, y_m] \in \mathbf{R}^{n \times l}$ 。

2)提取它们之中的有效信息,尽可能包含所有 的异变信息,因此采用正交分解法。

$$\begin{cases} u_1 = \mathbf{X}\mathbf{p}_1 \\ \mathbf{v}_1 = \mathbf{Y}\mathbf{q}_1 \end{cases}, \tag{3}$$

式中, $p_1$ 、 $q_1$ 分别是 X和 Y协方差矩阵的特征向量, $u_1$ 、 $v_1$ 分别是  $p_1$ 和  $q_1$ 在新形成的正交子空间上的投影。 $u_1$ 、 $v_1$ 的协方差最大时  $p_1$ 、 $q_1$ 相关性最大。

3)为了使 
$$X$$
 映射到  $Y \perp$ ,建立回归方程:  
 $(X = u_1 c_1^T + E)$ 

$$\begin{cases} \mathbf{Y} = v_1 \mathbf{d}_1^{\mathrm{T}} + \mathbf{G} \\ \mathbf{Y} = v_1 \mathbf{d}_1^{\mathrm{T}} + \mathbf{G} \end{cases}$$
(4)

用 
$$u_1$$
 对 Y 建立回归万程:

 $Y=u_1r_1^T+F,$ 

式中,E、G、F为残差矩阵, $c_1$ 、 $d_1$ 、 $r_1$ 与X、Y有关。

$$c_1 = \frac{X^1 u_1}{\|u_1\|^2}, \qquad (6)$$

$$\boldsymbol{d}_{1} = \frac{\boldsymbol{Y}^{1} \, \boldsymbol{v}_{1}}{\parallel \boldsymbol{v}_{1} \parallel^{2}} \,, \tag{7}$$

$$\boldsymbol{r}_1 = \frac{\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_1}{\|\|\boldsymbol{u}_1\|\|^2} \,. \tag{8}$$

4) 将剩余的 *E*、*F*分别当作新的 *X*、*Y*,重复以上步骤,如模型达到需求,则停止重复,最终得:

$$\begin{cases} \boldsymbol{X} = u_1 \boldsymbol{c}_1^{\mathrm{T}} + u_2 \boldsymbol{c}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + u_n \boldsymbol{c}_n^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{E} \\ \boldsymbol{Y} = u_1 \boldsymbol{r}_1^{\mathrm{T}} + u_2 \boldsymbol{r}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + u_n \boldsymbol{r}_n^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{F} \end{cases}, \qquad (9)$$

化简得:  $V = UD^T + E = VDD^T + E$ 

# $Y = UR^{\mathrm{T}} + F = XPR^{\mathrm{T}} + F \,. \tag{10}$

#### 1.3 吸收光谱技术

朗伯-比尔(Lambert-Beer)定律是吸收光谱法的 核心原理。当光强为 I。的入射光照射气体池中气体 时,气体会与光发生反应,当光的频率和气体跃迁线 一致时,气体会吸收光的一部分能量从而产生能级 跃迁,入射光在被气体吸收能量后会产生一定的衰减,衰减后的光为出射光 $I_t$ ,L为激光在待测气体中经过的光程, $\sigma(\lambda)$ 为待测气体的吸收截面(cm<sup>2</sup>/molecule),C为待测气体的平均浓度,根据 Lambert-Beer 可知:

$$I(\lambda) = I_0 \exp\left[-\sigma(\lambda)CL\right].$$
(11)

#### 1.4 吸收谱线的选择

待测气体的吸收谱线一般选择谱线强度较强的 位置,选择高的谱线强度可以提高信噪比,降低检测 限。在对被测气体进行测量时,其他干扰气体会对 测量结果造成影响,因此需要考虑待测气体吸收谱 线附近是否存在干扰问题。本实验选用超连续谱激 光器型号是 SC400-4,光谱范围为 400—2 400 nm, LLTF 滤波器滤波后的波长范围为 1000—1700 nm, 因此本实验选择近红外波段 1000—1700 nm 对 CO<sub>2</sub> 和 CH<sub>4</sub> 的吸收光谱进行研究。

图 1 所示是几种常见气体在 1000—1700 nm 波 长范围内的谱线强度,从图中可以看出:CO<sub>2</sub> 谱线强 度较强的波段范围是 1420—1450 nm、1560—1590 nm、1590—1620 nm 3 个波段范围。为避免其他气 体的较强吸收谱线对 CO<sub>2</sub> 产生干扰,最终选取 1425—1443 nm、1565—1587 nm、1595—1616 nm 3 个波段范围对 CO<sub>2</sub> 进行多波段浓度测量研究。





#### 2 实 验

(5)

#### 2.1 实验过程

实验所采用的超连续谱激光检测系统同课题组 的前期成果<sup>[11,12]</sup>,由光路系统、气路系统和数据接收 与处理系统构成,图2是实验系统原理图。

实验在室温 298 K、压力为 1 atm(1 atm=1.013 ×10<sup>5</sup> Pa)的条件下进行,实验开始前先调整光路,保

证激光能够顺利地从吸收池入射口进入、出射口射出,激光在吸收池中可来回多次反射,产生 21 个光点,光程达到 26.4 m。

实验中的高纯 N<sub>2</sub> 既做稀释剂,又做背景气体, 选择 N2 是因为它是大气中含量最丰富的气体,而且 在测量的光谱区域内几乎没有吸收。利用动态稀释 校准仪配比出待测气体的浓度,将配比好的 CO2 和 N2 的混合气通入怀特型长光程吸收池中,超连续谱 激光器发出的激光,经LLTF 滤波器滤波,计 算机设置扫描的波长在1425-1443 nm、1565-1587 nm、1595-1616 nm 波段范围内,激光通过光 阑滤除杂光后入射吸收池,气体吸收后出射至光电 探测器,光电探测器将信号转化后传输到数据采集 卡,并显示在计算机上。当吸收池内气体浓度稳定 后开始采集吸收信号,每进行一个浓度的测量都要 将吸收池用 N<sub>2</sub> 吹扫,再通入下一被测的气体,以保 证测量的准确性。实验最后采集到纯 N<sub>2</sub> 背景信号 强度 I 。、浓度为 4.9%、5.4%、6.0%、6.4%、6.8%、 7.4%、8.0%、8.4%、8.9%、9.5%、9.9%的 CO<sub>2</sub> 信 号强度 L、得到不同浓度的吸光度。



2.2 实验结果

图 3(a)、(b)、(c)显示了在1425—1443 nm、 1565—1587 nm、1595—1616 nm波段下不同浓度







CO<sub>2</sub>的吸收光谱图。实验结果显示,3个波段吸光度 峰值分别在1432 nm、1572 nm 和1603 nm 附近,并 且随着4.9%—9.9%浓度范围内气体浓度的增加,
CO<sub>2</sub>吸光度曲线峰值逐渐增加。

### 3 建模与分析

#### 3.1 单一波段 PLS 模型

采用 PLS 建立模型时,一般采用交叉验证的方法确定主成分因子数,通过观察预测残差平方和 (predicted residual sum of squares, *PRESS*)随主成 分因子数的变化趋势图,确定最佳主成分数。

计算在1425—1443 nm、1565—1587 nm、 1595—1616 nm 波段选取不同因子个数时的 PRESS, 根据 PRESS 值的增减趋势确定最佳因子个数并建立 PLS 模型。一般情况下, PRESS 值最低时即为最佳因 子个数。图4分别是在1425—1443 nm、1565— 1587 nm、1595—1616 nm 波段内 PRESS 随因子数变化 的趋势图。

从图 4 中可以看出:1425 nm—1443 nm 波段的 PRESS 在因子数为 0—3 时迅速下降,当因子数为 7 时,PRESS 值达到最低,但因子数越大,最终建立的 模型越复杂。因此,根据最佳因子个数的选取原则 确定最佳因子个数为3,这样既能保证模型的预测精 度,又能避免模型的复杂化。利用线性回归和 PLS 回归建立因子数为3时的模型  $Y_1$ 。1565—1587 nm 波段的 PRESS 在因子数为0—3时迅速下降,当因 子数为3时,PRESS 值达到最低;当因子数大于3 时,PRESS 值开始逐渐增加,因此确定最佳因子个 数为3。利用线性回归和 PLS 建立因子数为3时的 模型  $Y_2$ 。1595—1616 nm 波段的 PRESS 在因子数 为0—2 时迅速下降;当因子数大于等于2时, PRESS 值呈现小幅度波动,因子数在4以后 PRESS 逐渐变小但是变化不大,因此确定最佳因子 个数为2。利用线性回归和 PLS 建立因子数为2时的





利用 1 425—1 443 nm、1 565—1 587 nm、1 595— 1 616 nm 波段的吸光度、预测值、浓度数据进行建 模,建模结果分别如图 5(a)、(b)、(c)所示。

#### 3.2 CO2 加权组合模型

针对 CO<sub>2</sub> 在 1 425—1 443 nm、1 565—1 587 nm、 1 595—1 616 nm 波段范围内建立的单一模型  $Y_1$ 、 $Y_2$ 和  $Y_3$ ,采用权重系数分配方法进行权重计算,实现多 波段加权组合预测。通过线性回归模型和 PLS 模型 的  $R^2$  以及 RMSE 对 3 个模型分别进行了权重分配, 表 1 为权重分配结果。

组合模型结果如图 6 所示,图 6(a)是基于  $R^2$  确 定权重得到的组合模型  $P_1$ ,图 6(b)是基于 RMSE 确 定权重得到的组合模型  $P_2$ 。

CO<sub>2</sub> 在波段1425—1443 nm、1565—1587 nm、 1595—1616 nm 建立的3个单一PLS模型与基于





 $R^2$ 建立的组合模型、基于 RMSE 建立的组合模型预 测性能评价对比如表 2 所示。经过对比,组合模型  $P_1$ 的  $R^2$ 比单一模型  $Y_1$  要小,且 RMSE 和残差平方和 (error sum of squares, SSE)也比单一模型要大,因 此,模型  $P_1$ 对模型  $Y_1$  优化效果不明显。但是,相对于 单一模型  $Y_2$  和  $Y_3$ ,组合模型  $P_1$  的  $R^2$  要更大,而且 RMSE 和 SSE 也有降低。而组合模型  $P_2$  不管从  $R^2$  还是从 RMSE 和 SSE 的角度来看,都比 3 个单一模 型和组合模型Pl有明显的优化。无论是单一模型还 是组合模型,基于 PLS 模型的 R<sup>2</sup> 都更接近于1。综上

所示,两种组合模型都比单一模型有所优化,基于 RMSE 建立的组合模型的预测效果优于基于 $R^2$ 建立 的组合模型的预测效果,并且采用PLS可提高加权

Tab. 1   Weight assign results								
Band/nm	Linear regression/PLS							
	$R^2$	Assign weights based on $R^2$	RMSE	Assign weights based on <i>RMSE</i>				
1 425—1 443	0.9486/0.9897	0.3373/0.3427	0.001842/0.1774	0.1483/0.5213				
1565 - 1587	0.9348/0.9486	0.3325/0.3285	0.000397/0.3883	0.6882/0.2381				
1595 - 1616	0.9283/0.9497	0.3302/0.3288	0.001671/0.3843	0.1635/0.2406				





图 6 (a) 组合模型 P<sub>1</sub> 和(b) 组合模型 P<sub>2</sub> Fig. 6 (a) Combined model  $P_1$  and (b) combined model  $P_2$ 

组合模型的预测精度。

表 2 单一波段 PLS 模型与组合模型对比

Tab. 2	Comparison between single-band PLS
	model and combined model

Madal	Linear regression		PLS	
Wodel	$R^2$	$R^2$	RMSE	SSE
Single model $Y_1$	0.9486	0.9897	0.1774	0.28329
Single model $Y_2$	0.9348	0.9486	0.3883	1.35698
Single model $Y_3$	0.9283	0.9497	0.3843	1.32917
Combined model <i>F</i>	$P_1$ 0.9512	0.9852	0.2078	0.3886
Combined model <i>F</i>	<b>P</b> <sub>2</sub> 0.9510	0.9912	0.1622	0.2368

#### 结 论 4

本文基于 PLS 对 CO<sub>2</sub> 进行加权组合测量研究, 测量了 CO2 3 个波段的吸收光谱并建立了单一波段 PLS回归模型。利用基于 R<sup>2</sup> 和 RMSE 的赋权方法 确定单一PLS模型的权重,建立了两个加权组合模 型,将单一波段建立的 PLS 模型与基于 R<sup>2</sup> 和 RMSE 建立的两个组合模型进行预测性能评价。实验结果 显示,两种加权组合模型比单一波段模型均有优化, 模型的 R<sup>2</sup> 从单一波段模型的 0.9486 提升到加权组 合模型的 0.991 2, RMSE 和 SSE 也有明显降低, 基 于 RMSE 建立的组合模型预测效果优于基于 R<sup>2</sup> 建 立的组合模型的预测效果。结果表明,采用 PLS 可 提高多波段加权组合模型对 CO<sub>2</sub> 浓度预测的精度与 稳定性,有效提高建模速度和降低谱线干扰。

#### 参考文献:

[1] ZHOU X, LIU X, WU L, et al. Research on carbon dioxide measurement technology based on photoacoustic spectroscopy[J]. Journal of Optoelectronics • Laser, 2020, 31 (12):1306-1312.

周鑫,刘新,吴陆益,等.基于光声光谱的二氧化碳测量 技术研究[J].光电子·激光,2020,31(12):1306-1312.

 $\lceil 2 \rceil$ LI J, YANG S, DU Z, et al. Quantitative analysis of ammonia adsorption in Ag/Agl-coated hollow waveguide by mid-infrared laser absorption spectroscopy [J]. Optics and Lasers in Engineering, 2019, 121, 80-86.

- [3] ZHANG B, YANG J, XIE X, et al. Analysis of CO<sub>2</sub> positive pressure measurement technology based on absorption spectroscopy[J]. Applied Optics, 2022, 43(1):106-110.
   张博涵,杨军,谢兴娟,等.基于吸收光谱法的 CO<sub>2</sub> 正压 测量技术分析[J].应用光学, 2022, 43(1):106-110.
- [4] LI H, JIA Y, DI S, et al. Comparative study on CO<sub>2</sub> measurement of tunable laser and supercontinuum laser[J]. Laser Journal, 2020,41(5):23-27.
  李红莲,贾雅情,邸帅,等.可调谐激光和超连续谱激光的 CO<sub>2</sub> 测量对比研究[J]. 激光杂志,2020,41(5):23-27.
- [5] ADAMU A I, DASA M K, BANG O, et al. Multi-species continuous gas detection with supercontinuum laser at telecommunication wavelength [J]. IEEE Sensors Journal, 2020,20(18):10591-10597.
- [6] ABBAS M A, JAHROMI K E, NEMATOLLAHI M, et al. Fourier transform spectrometer based on high-repetition-rate mid-infrared supercontinuum sources for trace gas detection[J]. Optics Express, 2021, 29(14):22315-22330.
- [7] SONG D, LIU W, ZHANG J. Single absorption line measurement of boiler combustion temperature [J]. Shanxi Chemical Industry, 2020, 40(6): 23-27.
  宋大勇,刘维岐,张家维.锅炉燃烧温度的单吸收谱线测量[J].山西化工, 2020, 40(6): 23-27.
- [8] PARK J,KUMAR S,HAN S H, et al. Combination of diffuse optical reflectance spectroscopy and laser-induced breakdown spectroscopy for accurate classification of edible salts[J]. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2021, 179:106088.
- [9] LIU Q Y,LIU X D,HAO D, et al. Prediction of comprehensive water cut in periodic waterflood reservoir based on variable weight combination model [J]. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2021, 791(1): 012158.
- [10] WANG X,XU N, MENG X, et al. Prediction of gas concentration based on LSTM-light GBM variable weight combination model[J]. Energies, 2022, 15(3): 827.
- [11] LI H, DI S, LI W, et al. Research on the measurement of  $CO_2$  concentration based on multi-band fusion model[J]. Applied Physics B,2021,127(1):1-7.

- [12] LI H, LI W, YAN X, et al. Research on the measurement of CH<sub>4</sub> concentration based on dual-band weighted combination model [J]. Optoelectronics Letters, 2021, 17 (12):763-768.
- [13] ZIFARELLI A, GIGLIO M, MENDUNI G, et al. Partial leastsquares regression as a tool to retrieve gas concentrations in mixtures detected using quartz-enhanced photoacoustic spectroscopy[J]. Analytical Chemistry, 2020, 92 (16):11035-11043.
- [14] ZHANG F, TANG X, TONG A, et al. Mid-infrared wavelength selection method combining variable influence value and cluster analysis[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41(6):1795-1799.
  张峰,汤晓君, 全昂鑫,等.变量影响值与集群分析相结合的中红外波长选择方法[J].光谱学与光谱分析, 2021, 41(6):1795-1799.
- [15] WANG G, ZHANG F, LI M, et al. Research on air quality monitoring system based on partial least squares regression algorithm [J]. Sensors and Microsystems, 2022, 41 (1):37-40+49.

王刚,张福印,李明辉,等.基于偏最小二乘回归算法的 空气质量监测系统研究[J].传感器与微系统,2022,41 (1):37-40+49.

- [16] LI Z,PANG W,LIANG H,et al. Fast quantitative modelling method for infrared spectrum gas logging based on adaptive step sliding partial least squares[J]. Energies, 2022, 15(4): 1325.
- [17] TORMENA C D, MARCHEAFAVE G G, PAULI E D, et al. Potential biomonitoring of atmospheric carbon dioxide in Coffea arabica leaves using near-infrared spectroscopy and partial least squares discriminant analysis[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2019, 26(29): 30356-30364.
- [18] LI X. Analysis of partial least squares modeling and multicollinearity ability[J]. Agro Food Industry Hi-tech, 2017, 28(1):885-889.

#### 作者简介:

**李红莲** (1979-),女,博士,副教授,硕士生导师,主要从事光谱检测 技术及其在气体以及固体测量中的应用和可调谐光纤激光器及应用 等方面的研究.

**许 旭** (1984-),男,本科,工程师,主要从事烟用辅料上机适用性的研究.