

李阳阳,彭黔荣,刘娜,等.微波干燥技术在卷烟近红外快速预测中的应用[J].江苏农业科学,2019,47(7):214-219.
doi:10.15889/j.issn.1002-1302.2019.07.051

微波干燥技术在卷烟近红外快速预测中的应用

李阳阳¹,彭黔荣^{1,2},刘娜²,杨敏^{1,3},李剑¹,胡芸²,邓葵²,张文²

(1. 贵州大学化学与化工学院,贵州贵阳 550025; 2. 贵州中烟工业责任有限公司技术中心,贵州贵阳 550009;
3. 贵州大学药学院,贵州贵阳 550025)

摘要:为探究一种快速、高效的卷烟近红外干燥方法,试验采用贵州地区不同品牌卷烟烟丝、烟末样品,利用微波炉和烘箱对样品进行干燥处理,探究传统烘箱法和微波法在卷烟近红外应用过程中的差异。结果表明,(1)微波法在干燥效率方面要优于传统烘箱法,经微波和烘箱干燥后的卷烟烟丝、烟末样品在近红外光谱图和主成分空间分布上有明显的差异,说明水分含量对卷烟样品的性质有较大影响;(2)微波和烘箱干燥后的样品经近红外模型预测后发现,卷烟烟末样品的预测结果稳定性整体优于烟丝样品,微波干燥 1、2 min 后的预测结果能达到甚至优于传统烘箱 40 ℃ 干燥 2 h 的模型预测结果。综合来看,将微波快速干燥技术应用于卷烟烟末样品的近红外快速预测是可行的,但对于卷烟烟丝样品不适宜。

关键词:近红外光谱;微波;烘箱;干燥;含水率

中图分类号: O657.33 **文献标志码:** A **文章编号:** 1002-1302(2019)07-0214-06

近红外(NIR)作为一种简捷、快速、无损的光谱分析技术,已经被越来越广泛地应用于食品、化学、制药、烟草等行业^[1-3]。特别是化学计量学的发展对近红外技术的应用起到了巨大的推动作用,使其变得越来越稳定、可靠。据报道,烟草中含水量的变化不仅会影响近红外光谱的吸收,同时也会对烟叶常规化学成分的检测造成影响^[4]。因此,烟草样品在采用近红外快速预测前,要对样品进行干燥或水分平衡,以降低水分含量对模型预测造成的误差。通常,烟草行业采用烘箱干燥法将样品置于 40 ℃ 条件干燥约 2 h,以降低样品的含水率,这种方法不仅干燥效率低,同时也不利于样品的快速预测。

微波干燥技术作为一种新兴的干燥技术,不仅干燥速率

高、耗能少,同时还可以防止物质中有效化学成分的破坏和流失,在烟草行业中有较广泛的应用^[5-6]。秦西云等曾创新性地将微波快速干燥技术应用于烟草样品的前处理过程,使微波在烟草近红外分析中的应用成为了可能^[7],但是国内外的研究中尚未发现将微波快速干燥技术应用于卷烟不同物理状态的近红外分析。本研究通过将烘箱和微波干燥法应用于卷烟样品近红外常规化学成分分析和预测,发现微波快速干燥技术不仅能快速提高样品的干燥效率,同时也可提升近红外卷烟分析的效率和模型预测的准确度,可为卷烟样品的快速干燥和精准分析提供新的方法。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

近红外成品卷烟烟丝、烟末建模样品来源于贵烟不同品牌卷烟的 240 个左右的成品卷烟;微波、烘箱试验样品采用 2016 年 12 月份 8 种不同品牌的贵烟卷烟样品。

Antaris II 傅里叶近红外分析仪(美国 Thermo 公司); Futura 型 8 通道连续流动化学分析仪(法国 Alliance 公司); FZ102 微型植物粉碎机(天津市泰斯特仪器有限公司);

收稿日期:2017-10-26

基金项目:国家自然科学基金(编号:21562014);贵州中烟科技项目(编号:GZZY/KJ/JS/2014-Y005-1)。

作者简介:李阳阳(1989—),男,河南三门峡人,硕士研究生,研究方向为烟草化学。E-mail:kaopuyangyang@126.com。

通信作者:彭黔荣,博士,副教授,主要从事烟草化学与工程研究,E-mail:3435391@qq.com;杨敏,博士,教授,主要从事活性化合物分析方法研究,E-mail:ce.myang@gzu.edu.cn。

[30] Serrano - Martínez A, Fortea M I, del Amor F M, et al. Kinetic characterisation and thermal inactivation study of partially purified red pepper (*Capsicum annuum* L.) peroxidase [J]. Food Chemistry, 2008, 107(1): 193-199.

[31] Serrano - martinez A, Venkatachalam K, Mee N M. Changes in physiochemical quality and browning related enzyme activity of longkong fruit during four different weeks of on - tree maturation [J]. Food Chemisty, 2012, 131: 1437-1442.

[32] Hu J Q, Yang L Z, Wu W J, et al. Slicing increases antioxidant capacity of fresh - cut lotus root (*Nelumbo nucifera* G.) slices by accumulating total phenols [J]. International Journal of Food Science & Technology, 2014, 49(11): 2418-2424.

[33] 许传俊,李玲.蝴蝶兰外植体褐变发生与总酚含量、PPO、POD 和 PAL 的关系[J].园艺学报,2006,33(3):671-674.

[34] Yingsanga P, Sritlaong V, Kanlayanarat S, et al. Relationship between browning and related enzymes (PAL, PPO and POD) in rambutan fruit (*Nephelium lappaceum* Linn.) cvs. Rongrien and See - Chompoo [J]. Postharvest Biology and Technology, 2008, 50(2/3): 164-168.

[35] 常艳,刘晓峰,金青,等.砀山酥梨多酚氧化酶基因(*PbPPO*)的原核表达及优化研究[J].亚热带植物科学,2017,46(3):209-214.

[36] 韩艳文,廉双秋,韩云云,等.鸭梨 *POD* 基因的原核表达及成熟度和降温方法对其表达量的影响[J].食品科学,2017,38(9):40-45.

FED115 型烘箱(德国 Binder 公司);AE100 型电子分析天平(瑞士 Mettler-Toledo 公司);HY-6 型双层调速多用振荡器(江苏金坛荣华仪器制造有限公司);格兰仕 800 W 家用平板微波炉(广东格兰仕微波炉电器制造有限公司)。

1.2 试验方法

1.2.1 卷烟样品的制备 从贵州中烟工业有限责任公司 2016 年 12 月份的成品卷烟中,分别挑选 8 个不同品牌的卷烟样品,剥开取烟丝混合均匀后挑选 4 个作为烟丝样品,其余 4 个样品参考行业标准 YC/T 31—1996《烟草及烟草制品 试样的制备和水分测定 烘箱法》^[8],将卷烟烟丝样品先经 40 ℃烘箱干燥 2 h 左右,直至用手轻轻可以捏碎为止,然后冷却至室温,采用植物粉碎机进行粉碎,并过 40 目筛。待样品冷却至室温后,装入一次性密封袋中低温、避光保存备用。

1.2.2 微波炉和烘箱的参数选择 试验为探究微波法和传统烘箱法干燥效果的差异,参照传统的干燥方法将烘箱的干燥温度设置为 40 ℃。在进行微波档位选择时,发现采用 800 W 功率的快速加热档进行干燥后在干燥 2~3 min 后局部已经开始变质,当选用解冻档干燥时,样品性质较为稳定,因此以下试验中选用微波炉解冻档对样品进行干燥。

1.2.3 光谱采集和化学成分检测 试验过程中光谱的采集参考 GB/T 29858—2013《分子光谱多元校正定量分析通则》^[9]并结合实际情况,将光谱采集条件设置如下:光谱采集范围为 4 000~10 000 cm⁻¹;分辨率为 8.0 cm⁻¹;扫描次数为 64 次。据报道,烟草样品在高温和含水量偏低的情况下,具有较强的吸水能力^[10]。因此为了消除温度和采集光谱过程中由于高温而发生的迅速吸湿现象,样品在不同的干燥试验后,要先放置到硅胶干燥器中冷却 30 min 左右,待样品冷却至室

温,再采集样品光谱。试验过程中为了避免样品不均匀对结果的影响,每个样品平行测 3 次,取平均光谱;卷烟中水分测定参考烟草行业标准 YC/T 31—1996《烟草及烟草制品 试样的制备和水分测定 烘箱法》^[8];卷烟 6 种常规化学指标烟碱、总糖、还原糖、总氮、钾和氯含量的检测参考行业标准^[11-15]进行。

1.3 数据分析

建模过程中光谱平均、光谱数据的预处理[如一阶求导、二阶求导、多元散射校正(MSC)和平滑滤波等]均采用 Matlab R2014a 进行编程处理,然后采用 Antaris II 傅里叶近红外分析仪器自带的 TQ Analyst 9.0 光谱分析软件建立卷烟烟丝、烟末的偏最小二乘(PLS)模型,最后在对模型进行评价时,采用 SPSS 14 统计分析软件对模型的实用性进行评价。

2 结果与分析

2.1 微波烘箱干燥效率分析

2.1.1 微波场均匀性研究 采用微波干燥时常常会存在加热不均匀的问题^[16],因此本试验参考国家标准^[17]对家用平板微波炉内的微波场均匀性进行探究。将样品平均分成 5 份,分别置于微波炉腔内的 A、B、C、D 和 E 5 个不同位置(如图 1-a 所示),在相同的时间梯度下干燥 4 min,得到如图 1-b 所示的结果。说明无论是卷烟烟丝样品还是烟末样品,当样品放置的位置不同时,样品的干燥结果存在较大差异,表明家用微波炉内的微波场的确存在加热不均匀现象。因此,为消除微波场的不均匀性对试验结果稳定性的影响,以下在进行微波干燥时统一将样品置于 E 点位置。

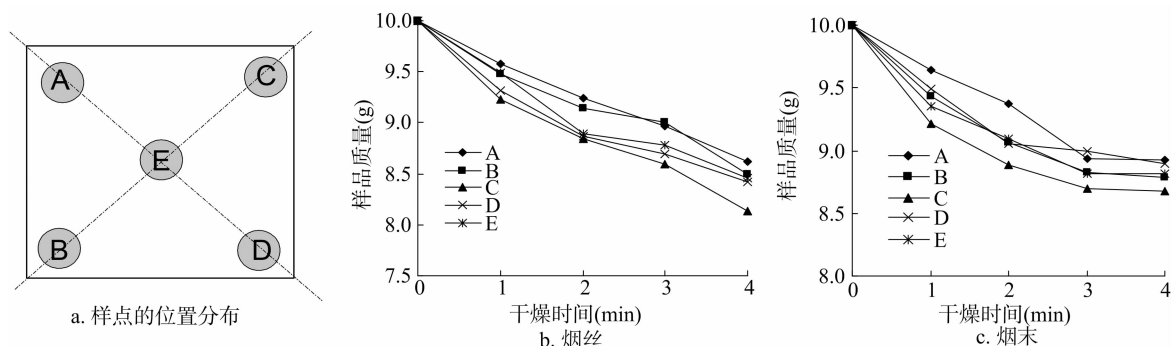


图1 样品的位置分布(a)及不同位置下卷烟样品干燥结果(b、c)

2.1.2 微波和烘箱干燥效率研究 选取初始水分含量为 10% 的 3 个卷烟烟末样品,分别将 3 个样品置于室温、相对湿度(RH)为(40±5)%、(60±5)%和(70±5)%的条件下平衡 24 h,测定样品含水率结果如下:1 号样品为 8%,2 号样品为 11%,3 号样品为 14%。然后将每个样品分别在 40 ℃烘箱和 800 W 微波炉解冻档条件下干燥,最后检测干燥后的样品水分含量。结果发现,采用微波干燥样品的干燥效率明显优于烘箱,且微波干燥 2~3 min 左右样品含水量减少量接近甚至可以达到烘箱 40 ℃干燥 2 h 的水分干燥效果。但是微波和烘箱在卷烟近红外应用过程中是否会对卷烟样品的近红外谱图和主成分分布产生影响需要作深入研究。因此,接下来研究了不同干燥条件下(即不同水分含量条件下)样品谱图和主成分分布的变化。

2.2 水分含量对卷烟近红外谱图和主成分的影响

2.2.1 水分含量对卷烟近红外谱图的影响 为探究水分含量对卷烟烟丝、烟末样品近红外谱图和主成分信息的影响。本研究选取了初始水分含量为 13.5% 的卷烟烟末样品,将样品一分为二。一份用于烘箱干燥试验,一份用于微波干燥试验,得到如图 2 所示的近红外光谱图。由图 2-a 和图 2-b 可以看出,在近红外全谱图上的 5 155 cm⁻¹和 6 944 cm⁻¹附近,样品有非常明显的吸收变化,随着干燥时间的增加,样品水分含量不断降低,光谱在相应区间的吸收强度逐渐降低。这是由于水中的 O—H 伸缩振动的较强和频吸收峰和一级倍频吸收峰分别出现在 5 155 cm⁻¹和 6 944 cm⁻¹,水分含量越高,样品在 5 155 cm⁻¹和 6 944 cm⁻¹处的吸收强度也越强^[18];另外,由图 2-c 可知,卷烟样品经一阶求导预处理后

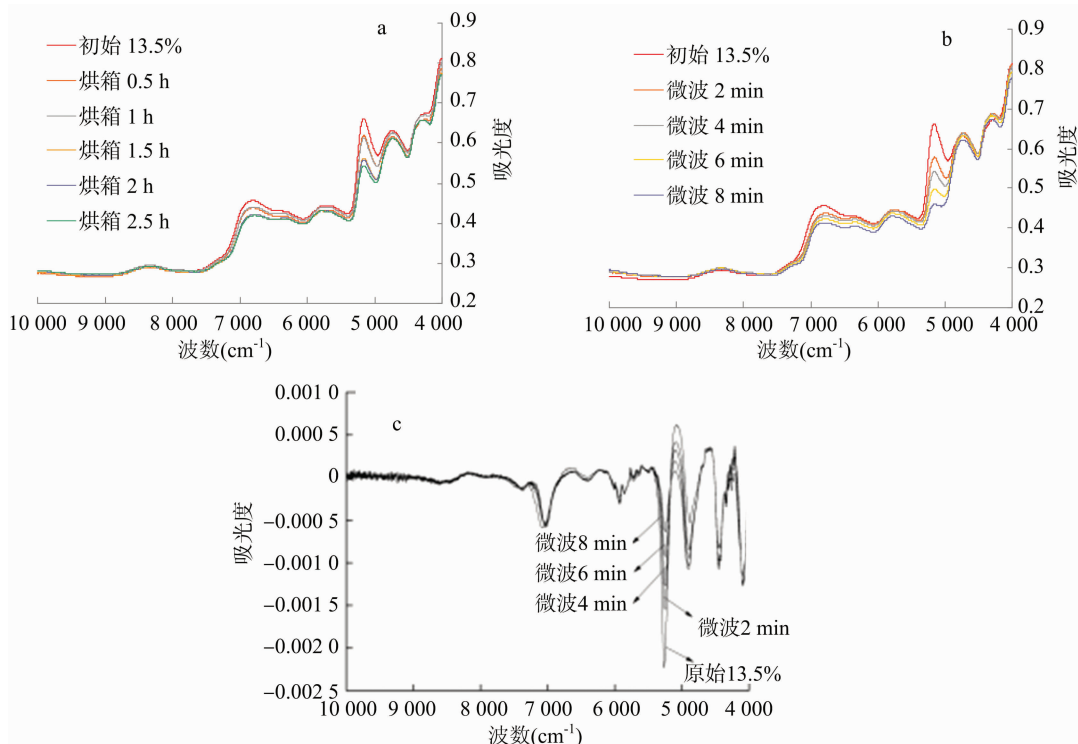


图2 卷烟样品经烘箱(a)、微波干燥(b)后的光谱图和一阶求导光谱图(c)

并不能有效地消除水分差异对光谱造成的影响。

2.2.2 水分含量对卷烟主成分的影响 主成分分析是近红外分析中常用的一种多元统计分析技术,其目的是在最大程度地减少信息损失的情况下,将数据进行降维处理,用少数几个新独立变量来尽可能表达原变量的信息,从而消除原始数据中存在的相关性和信息冗余。因此,主成分分析技术在光谱信息压缩、抽提等领域得到了广泛的应用。利用主成分得分可以更加直观、形象地对样品进行判别分析等^[19]。为了探究水分含量对卷烟主成分的影响,试验选取了8个不同品牌、不同水分含量卷烟样品(4个烟丝样品,4个烟末样品),在微

波1、2、3 min和烘箱2 h共4种干燥条件下进行试验,得到经过微波、烘箱干燥后的卷烟烟丝、烟末的近红外光谱图,利用Matlab R2014a软件制得如图3所示的样品主成分得分图。结果表明,对于不同品牌的卷烟烟丝、烟末样品,经微波和烘箱干燥后,随着卷烟样品的水分含量不断降低,在不同干燥条件下样品的主成分空间分布整体不断向右偏移;对于同一卷烟烟丝、烟末样品,当水分含量差异越来越大时,样品的空间分布距离也越来越远。因此,卷烟样品的水分含量会对样品的主成分空间分布产生影响。

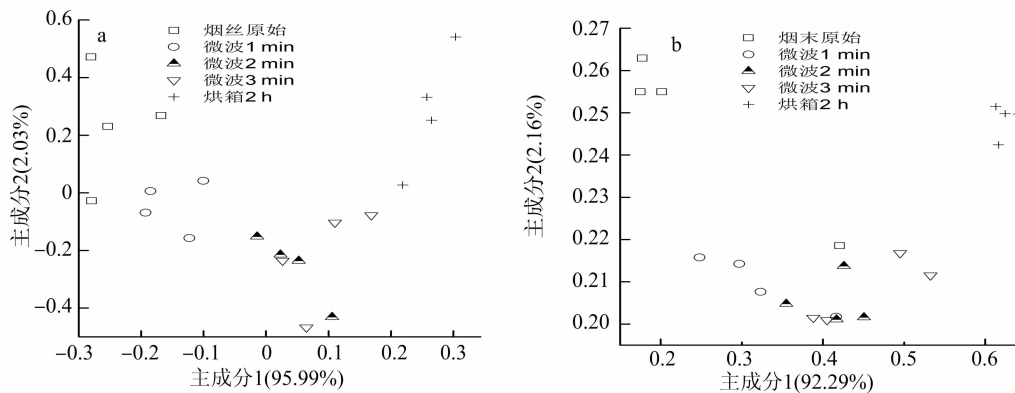


图3 卷烟烟丝(a)、烟末(b)经微波干燥条件后的主成分得分

2.3 微波、烘箱干燥后的近红外预测误差分析

2.3.1 卷烟烟丝、烟末模型的建立 首先,采集2016年240个卷烟烟丝样品光谱,然后将烟丝进行打磨、过筛制成烟末,接着再采集烟末样品光谱。采用蒙特卡洛交互检验法(MCCV)对奇异样品进行筛选^[20],并利用Kennard-Stone算法挑选出建模样品集,然后将挑选出的样品经不同的预处理

算法进行处理,最后建立卷烟不同物理状态下(烟丝、烟末)的偏最小二乘回归模型。采用SPSS 14.0软件对模型的预测结果进行统计分析,发现预测值和参考值之间不存在显著差异,具有较高的实用性。烟丝6种常规化学成分的模型指标见表1,模型参考值与预测值见图4。烟末6种常规化学成分的模型指标见表2,模型参考值与预测值见图5。

表 1 卷烟烟丝 6 种常规化学成分的模型指标

化学成分	预处理方法	R	RMSEC	PLS 因子数(个)	RMSEP
总糖	MSC + 一阶导数 + S - G 平滑	0.952	0.780	8	0.981
还原糖	MSC + 一阶导数 + S - G 平滑	0.961	0.717	7	0.891
氯	Constant + 一阶导数 + S - G 平滑	0.955	0.050	7	0.053
总植物碱	MSC + 一阶导数 + Norris 平滑	0.931	0.053	10	0.065
总氮	Constant + 一阶导数 + Norris 平滑	0.902	0.048	8	0.068
钾	Constant + 一阶导数 + S - G 平滑	0.958	0.106	8	0.137

注:RMSEC 表示校正均方根误差,PLS 表示偏最小二乘,RMSEP 表示预测均方根误差。

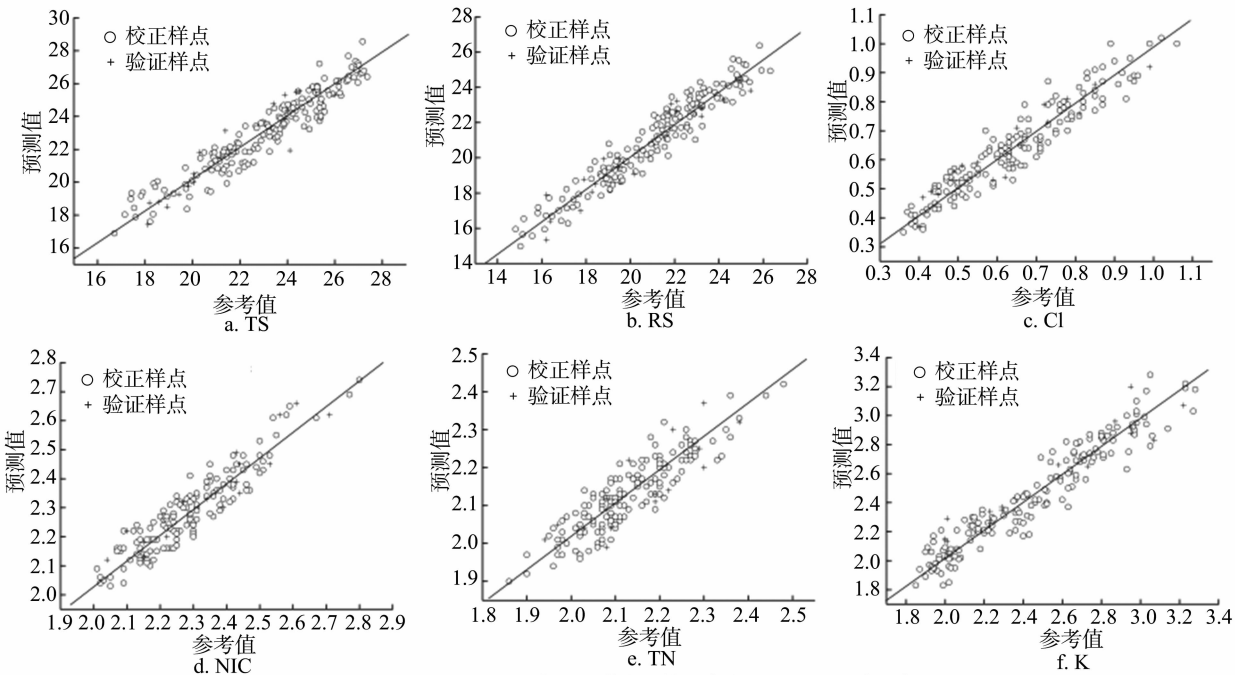


图 4 卷烟烟丝 6 种常规化学成分模型参考值与预测值的散点图

表 2 卷烟烟末 6 种常规化学成分的模型指标

化学成分	预处理方法	R	RMSEC	PLS 因子数(个)	RMSEP
总糖	Constant + 一阶 + S - G	0.993	0.363	7	0.981
还原糖	Constant + 一阶 + Norris	0.994	0.314	10	0.891
氯	Constant + 一阶 + Norris	0.988	0.032	10	0.053
总植物碱	MSC + 一阶 + Norris	0.960	0.047	10	0.065
总氮	SNV + 二阶 + S - G	0.970	0.043	5	0.068
钾	Constant + 一阶 + Norris	0.987	0.061	10	0.137

2.3.2 微波、烘箱干燥后的近红外预测结果分析 试验选用 8 个不同品牌的卷烟样品(1、2、3、4 为烟丝样品,5、6、7、8 为烟末样品),水分含量区间为 8% ~ 14%,经不同的微波和烘箱条件干燥后,采用卷烟烟丝、烟末模型对卷烟的常规化学成分(总糖、还原糖、烟碱、总氮、钾和氯)含量进行预测,得到烟丝、烟末样品在不同干燥条件下的近红外预测值。为了更好地表征样品在不同干燥条件下的预测结果,本研究引入平均相对偏差(ARD)和预测标准偏差(SEP)2 个指标对预测结果进行分析、评价,其中 ARD 和 SEP 越小,表明模型的预测误差越小,模型的预测准确度就越高,SEP 和 AED 的计算公式如下:

$$ARD = \frac{\sum_{i=1}^n \left| \frac{Y_i - X_i}{X_i} \right|}{n}; \tag{1}$$

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - X_i)^2}{n}}. \tag{2}$$

式中: X_i 为第 i 个样品的参考值; Y_i 为第 i 个样品的近红外预测值; n 为样品数量。

根据烟丝、烟末在微波和烘箱干燥条件下的预测值,利用式(1)、式(2)计算得到卷烟烟丝、烟末样品在不同干燥条件下的 ARD (其中氯采用平均绝对偏差 AAD) 和 SEP。采用 Origin 9.0 作图得到卷烟烟丝、烟末在不同干燥条件下的平均相对误差图(图 6 - a)和预测标准偏差图(图 6 - b)。

通过对比分析卷烟样品经烘箱和微波快速干燥后的 2 个评价指标 ARD 和 SEP 发现,首先,卷烟烟末样品常规化学成分的 ARD 和 SEP 整体要优于烟丝样品,水分含量的变化会造成烟丝样品的预测结果产生较大的波动,即烟丝样品的常规

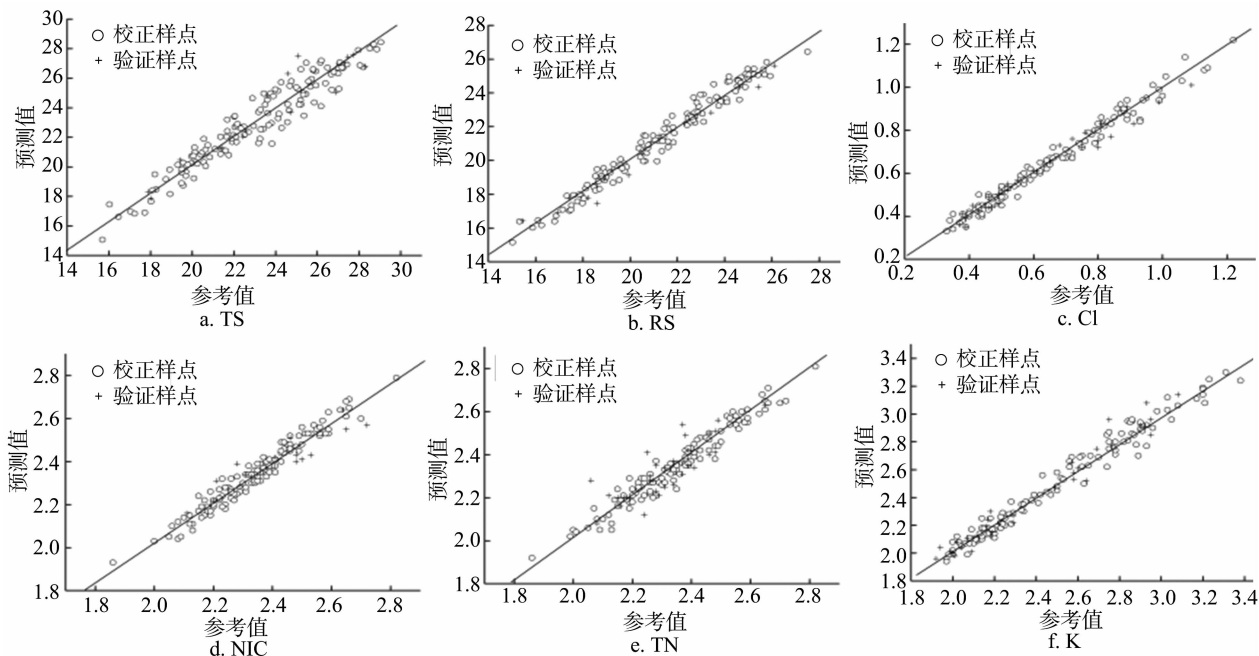
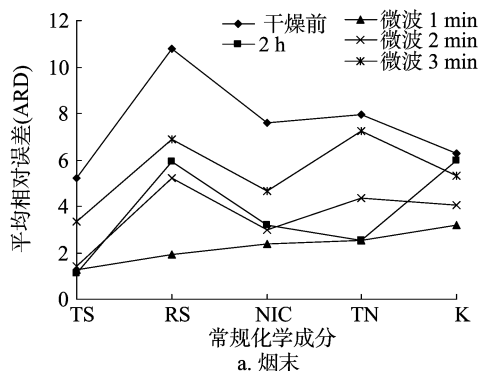


图5 卷烟烟末 6 种常规化学成分模型参考值与预测值的散点图

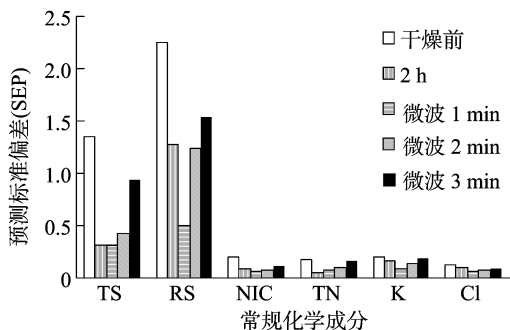
化学成分的预测稳定性较烟末差。但考虑到烟丝样品少了打磨、过筛等制样环节,所以在快速预测方面烟丝样品要优于烟末样品。其次,从图 6 也可以看出,对于不同水分含量的烟末样品,经微波和烘箱干燥后,样品的 *ARD* 和 *SEP* 整体上较干燥前有所下降,表明水分含量的降低确实可以提高近红外模型预测的精确度,但经微波干燥 3 min 时,水分含量降低到 5% 以下,近红外的预测误差反而会升高,这与段焰青等的研究结果^[4] 基本一致。因此卷烟烟末样品在经近红外预测时的水分含量不宜太低也不宜太高。而对于卷烟烟丝样品,经

烘箱和微波干燥后,样品的 *ARD* 和 *SEP* 整体上较干燥前有较大升高(尤其是总糖和还原糖),说明卷烟烟丝样品在干燥后会增大样品的预测误差。一方面是由于经微波和烘箱干燥后,样品的紧密度较干燥前发生了变化,另一方面是由于经干燥后的烟丝样品水分含量和建模样品的水分含量差异较大。因此,卷烟烟丝样品进行预测时不宜进行干燥处理,以建模时样品的水分含量为宜。

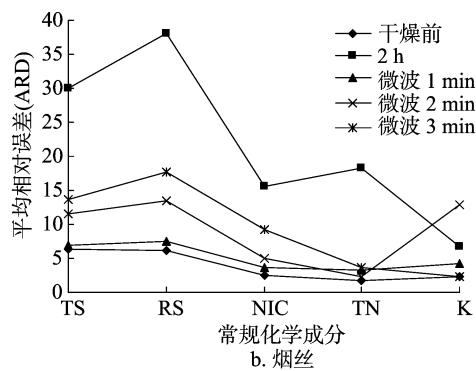
经微波干燥 1、2 min 后,卷烟样品的 *ARD* 和 *SEP* 整体上要小于传统烘箱 40 °C 干燥 2 h 的结果,即卷烟样品经微波干



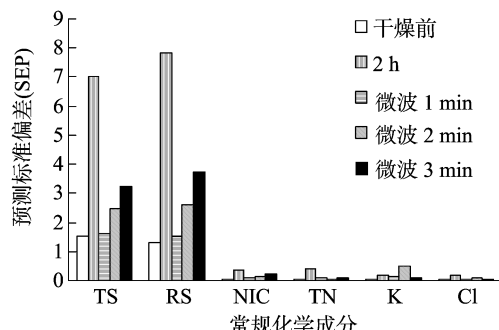
a. 烟末



c. 烟末



b. 烟丝



d. 烟丝

图6 卷烟烟丝、烟末经微波和烘箱干燥条件后的 *ARD* 和 *SEP*

燥 1、2 min 对样品预测精确度的提升要优于传统烘箱 40 ℃ 干燥 2 h 的结果。微波法不仅在干燥效率上优于传统烘箱,同时对样品预测精确度的提升方面也优于传统的烘箱干燥法。

3 结论

本研究利用近红外技术建立了卷烟不同物理状态下的定量分析模型,并将微波和烘箱应用于卷烟近红外的分析过程中。结果表明:水分含量对卷烟烟丝、烟末样品的近红外光谱吸收强度和主成分分布有较大影响。随着水分含量的升高,在谱图区间的 6 944、5 155 cm^{-1} 附近的吸收强度也越大,通过一阶求导等预处理方法不能有效地消除水分含量带来的光谱差异;通过对比传统的烘箱干燥法和微波干燥法的卷烟近红外预测结果发现,经微波干燥后的样品预测准确度整体要优于传统烘箱干燥的结果,采用微波干燥 1、2 min 后样品的预测准确度要优于烘箱 40 ℃ 干燥 2 h 的结果,但对于烟丝样品不适宜进行干燥处理。微波干燥法不仅在干燥效率上优于烘箱法,同时对提高样品预测准确度起到了积极的作用,是一种快速、精确的卷烟近红外干燥方法。此外,微波加热不均匀性一直是行业研究的热点和难点,严重影响了微波干燥技术在工业化应用中的推广。本研究仅通过固定样品位置来降低微波场的不均匀性影响,如何从根本上克服微波加热的不均匀性问题,需要在接下来的工作中进行深化研究。

参考文献:

- [1] Roggo Y, Chalou P, Maurer L, et al. A review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies[J]. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2007, 44 (3): 683 - 700.
- [2] Teye E, Huang X, Afoakwa N. Review on the potential use of near infrared spectroscopy (NIRS) for the measurement of chemical residues in food [J]. American Journal of Food Science and Technology, 2013, 1(1): 1 - 8.
- [3] 吴习宇, 赵国华, 祝诗平. 近红外光谱分析技术在肉类产品检测中的应用研究进展[J]. 食品工业科技, 2014, 35 (1): 371 - 374, 380.
- [4] 段焰青, 周红, 李青青, 等. 烟样水分质量分数对其常规化学成分近红外测定的影响[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2005, 27 (5): 424 - 428.
- [5] Liu H L, Jiaqiang E, Deng Y W, et al. Experimental study on pyrolysis characteristics of the tobacco stem based on microwave heating method[J]. Applied Thermal Engineering, 2016, 106 (5): 473 - 479.
- [6] Hesas R H, Daud W M, Sahu J N, et al. The effects of a microwave heating method on the production of activated carbon from agricultural waste: A review [J]. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2013, 100: 1 - 11.
- [7] 秦西云, 杨宇虹. 近红外分析的样品前处理新技术研究[J]. 中国农学通报, 2008, 24 (10): 150 - 152.
- [8] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品试样的制备和水分测定 烘箱法: YC/T 31—1996 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2001.
- [9] 全国仪器分析测试标准化技术委员会. 分子光谱多元校正定量分析通则: GB/T 29858—2013 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2014.
- [10] 黄锋, 陈清, 王乐, 等. 片烟增湿与干燥的薄层动力学模型[J]. 中国烟草学报, 2014, 20 (6): 34 - 40.
- [11] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品 总植物碱的测定 连续流动(硫氰酸钾)法: YC/T 468—2013 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2013.
- [12] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品 水溶性糖的测定 连续流动法: YC/T 159—2002 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2004.
- [13] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品 总氮的测定 连续流动法: YC/T 161—2002 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2004.
- [14] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品 钾的测定 连续流动法: YC/T 217—2007 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2007.
- [15] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品 氯的测定 连续流动法: YC/T 162—2011 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2011.
- [16] Vadiwambal R, Jayas D S. Non - uniform temperature distribution during microwave heating of food materials - a review [J]. Food and Bioprocess Technology, 2010, 3 (2): 161 - 171.
- [17] 国家家用电器标准化技术委员会. 家用微波炉性能试验方法: GB/T 18800—2008 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [18] Qin Y H, Gong H L. NIR models for predicting total sugar in tobacco for samples with different physical states [J]. Infrared Physics and Technology, 2016, 77: 239 - 243.
- [19] Jolliffe I T, Cadima J. Principal component analysis: a review and recent developments [J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2016, 374 (2065): 20150202.
- [20] Liu Z C, Cai W S, Shao X E. Outlier detection in near - infrared spectroscopic analysis by using monte carlo cross - validation [J]. Science in China Series B - chemistry, 2008, 51 (8): 751 - 759.
- [10] Yu B, Zeng F, Yang Y, et al. Torsional vibrational modes of tryptophan studied by terahertz time - domain spectroscopy [J]. Biophysical Journal, 2004, 86 (3): 1649 - 1654.
- [11] 赵永会, 顾丹丹, 冯俊霞, 等. 二维红外光谱法分析纤维素[J]. 理化检验(化学分册), 2015, 51 (11): 1497 - 1500.
- [12] 梁瑜. 基于吸光度的波长筛选方法用于近红外光谱定量模型的优化[J]. 电子测试, 2016 (21): 62 - 64.
- [13] 刘明博, 唐延林, 李晓利, 等. 水稻叶片氮含量光谱监测中使用连续投影算法的可行性[J]. 红外与激光工程, 2014, 43 (4): 1265 - 1271.
- [14] 马浩彩, 郝秀美. 使用美棉纺细号纱棉结的控制[J]. 棉纺织技术, 2011, 39 (3): 142 - 144.

(上接第 209 页)

- [6] 颜志刚. 基于太赫兹时域光谱技术的生物分子和农药分子的检测技术研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2008.
- [7] Yu W, Yang L, Zhang T L, et al. Crystal structure and geometry - optimization study of 4 - methyl - 3', 5' - dinitro - 4' - methyl benzylidene aniline [J]. Journal of Molecular Structure, 2006, 794 (1/2/3): 255 - 260.
- [8] 胡皆汉, 叶金星, 程国宝, 等. β - 榄香烯振动光谱的量子化学从头计算[J]. 光谱学与光谱分析, 2001, 21 (2): 163 - 168.
- [9] Fischer B M, Walther M, Uhd Jepsen P. Far - infrared vibrational modes of DNA components studied by terahertz time - domain spectroscopy [J]. Physics in Medicine and Biology, 2002, 47 (21): 3807 - 3814.