

QK2046055

ISSN 1004-4957

CODEN: FCEXES  
CN 44-1318/TH

中文核心期刊



# 分析测试学报

FENXI CESHIXUEBAO

JOURNAL OF INSTRUMENTAL ANALYSIS

全国第八届近红外光谱学术会议  
专刊 (一)

Vol. 39 No. 10  
2020.10



ISSN 1004-4957



中国广州分析测试中心 主办  
中国分析测试协会

# 分析测试学报

第39卷 第10期  
2020年10月25日出版  
月刊, 1982年创刊

## 目次

特别策划: 第八届全国近红外光谱学术会议专刊

前言 ..... 褚小立, 肖雪

### 综述

- 1181 近红外光谱分析技术的最新进展与展望  
..... 褚小立, 陈瀑, 李敬岩, 刘丹, 许育鹏
- 1189 我国油料产品品质的近红外光谱快速检测技术研究进展  
..... 李雪,  
王督, 白艺珍, 喻理, 岳晓凤, 张文, 张良晓, 李培武
- 1196 近红外光谱分析中的化学计量学算法研究新进展  
..... 张进, 胡芸, 周罗雄, 李博岩
- 1204 水光谱探针及其在结构分析中的应用  
..... 孙岩, 蔡文生, 邵学广
- 1209 过程分析技术在结晶过程中的应用研究进展  
..... 吴思俊, 龙之祥, 彭祖仁, 仇萍, 李正, 李文龙
- 1218 烟草近红外光谱分析网络化及其应用进展  
..... 王家俊, 杨家红, 邵学广
- 1225 近红外光谱快检技术在口岸安全监管领域的应用展望  
..... 饶敏, 桂家祥, 王晓娟, 张岑, 乔宁

### 研究报告

- 1231 偏最小二乘近红外光谱模型中潜变量个数对模型传递性能的影响  
..... 李永琪, 洪士军, 黄变, 张立国, 葛炯, 梁绍嵘, 倪力军
- 1239 过程分析技术(PAT)在原料药生产中的应用  
..... 刘伟, 何勇, 吴斌, 蒋轲磊
- 1247 “动态”近红外光谱结合深度学习图像识别和迁移学习的模式识别方法研究  
..... 孙禧亭, 袁洪福, 宋春风
- 1254 基于局部加权偏最小二乘的近红外光谱分析方法研究  
..... 马力文, 郭拓, 马晋芳, 史庆龙, 肖环贤
- 1260 基于尺度不变特征变换筛选稳定特征波长的近红外光谱模型传递方法  
..... 洪士军, 黄变, 张立国, 葛炯, 倪力军, 梁绍嵘
- 1267 最小角回归结合核极限学习机的近红外光谱对柑橘黄龙病的鉴别  
..... 陈文丽, 王其滨, 路皓翔, 杨辉华, 刘彤, 许定舟, 杜文川

刊名题字: 启功

主办单位: 中国广州分析测试中心  
中国分析测试协会  
主管单位: 广东省科学院

主 编: 陈小明  
副主编: 庞国芳 江桂斌 吴惠勤(常务)  
郑建国 王海水  
编辑部主任: 黄晓兰

国际标准连续出版物号: ISSN 1004-4957  
国内统一连续出版物号: CN 44-1318/  
TH

CODEN: FCEXES

发行范围: 国内外公开发行  
总发行处: 广东省报刊发行局  
邮发代号: 46-104

订购处: 全国各地邮局

定价: 30.00元/册

国外总发行: 中国国际图书贸易总公司

国外发行代号: BM6013

广告经营许可证: 440000100186

编辑出版: 《分析测试学报》编辑部  
地址: 广州市先烈中路100号(510070)  
电话: 020-37656606, 87684776(传真)  
E-mail: fxcspb@china.com  
http://www.fxcspb.com  
印刷: 广州市新齐彩印刷有限公司

责任编辑: 龙秀芬 盛文彦  
丁岩 周启动

- \* 中文核心期刊
- \* 中国分析测试协会会刊
- \* 中国精品科技期刊
- \* 广东省品牌期刊
- \* 广东省优秀期刊
- \* 广东省优秀科技期刊
  
- \* 中国科技论文统计源期刊(中国科技核心期刊)
- \* 《中国科学引文数据库》来源期刊
- \* 《中国科技期刊数据库》来源期刊
- \* 《中国学术期刊(光盘版)》收录期刊
- \* 《中国期刊网》全文收录期刊
- \* 《中国科技期刊精品数据库》收录期刊
- \* 美国《化学文摘》(CA)收录期刊
- \* 俄罗斯《文摘杂志》收录期刊
- \* 日本科学技术社科学技术数据库收录期刊
- \* 英国皇家化学学会《分析文摘》(AA)及《质谱》(MBS)系统摘录期刊

**《分析测试学报》  
第六届编委会成员**

顾问(以姓氏笔划排序):

计亮年 张玉奎 汪尔康  
陈洪渊 俞汝勤 姚守拙

主编: 陈小明

副主编: 庞国芳 江桂斌

吴惠勤(常务) 郑建国 王海水

编委(以姓氏笔划排序):

王 晓 王升富 王建秀 王峥涛  
王晓春 王海水 邓志威 冯建跃  
再帕尔·阿不力孜 刘 倩 刘买利  
刘虎威 孙会敏 师彦平 朱炳辉  
毕树平 江元宝 江桂斌 牟德海  
许国旺 严秀平 吴惠勤 张学敏  
张晓兵 张维冰 张新荣 李红梅  
李攻科 杨培慧 杨朝勇 汪正范  
汪国权 邵 兵 陈 义 陈小明  
陈江韩 陈纘光 麦碧娴 庞国芳  
林金明 郑建国 段太成 胡继明  
赵 睿 党 志 栾天罡 袁 若  
郭寅龙 郭鹏然 钱小红 崔 华  
梁鑫森 黄业茹 黄承志 黄晓兰  
谢剑炜 蒲巧生 褚小立 赖家平  
谭蔚泓 樊春海 薛 巍 鞠焯先  
Myeong Hee Moon Ozaki Yukihito

## 目 次

- 1274 土壤速效磷近红外迁移学习预测方法研究  
..... 郑文瑞, 李绍稳, 韩亚鲁, 石胜群, 朱先志, 金 秀
- 1282 仪器噪声在近红外光谱偏最小二乘模型内的传播效应  
..... 张若秋, 杜一平
- 1288 基于灰狼算法的近红外光谱变量选择方法研究  
..... 武新燕, 卞希慧, 杨 盛, 徐 沛, 王海涛
- 1293 结合拉普拉斯特征映射的权重朴素贝叶斯高光谱分类算法  
..... 李 响, 吕 勇
- 1299 高温傅里叶变换红外气体分析仪研制与应用 ... 周新奇, 马 帅,  
刘 妍, 慎石磊, 郭中原, 俞晓峰, 刘立鹏, 韩双来, 张晓丹
- 1305 近红外光谱技术结合竞争自适应重加权采样变量选择算法快速测定土壤水解性氮含量 ..... 彭海根, 金 楹,  
詹菽国, 陈雅琼, 封幸兵, 钱发聪, 黄 果, 黄天杰, 李 杰

其他信息

◇ 《分析测试学报》2021年征订启事(1246)

广告目录

分析测试学报(封二) 南京昆磊泓锐仪器技术有限公司(插页1正面)  
广州仪通兴化器仪表有限公司(插页1背面) 中国广州分析测试中心  
(插页2) 华南标准物质网 广州分析测试中心科力技术开发公司(插  
页3) 北京海光仪器有限公司(封三) 上海兰博贸易有限公司(封底)

# Journal of Instrumental Analysis

Vol. 39, No. 10

Oct. 25, 2020

Sponsored by China National Analysis Center, Guangzhou  
and China Association for Instrumental Analysis

Editor-in-chief: CHEN Xiao-ming

Edited & published by the editorial office of Journal of Instrumental Analysis

(E-mail: fxcspb@china.com, http://www.fxcspb.com)



## Special Issue for The 8th Chinese Conference on Near Infrared Spectroscopy

### Contents

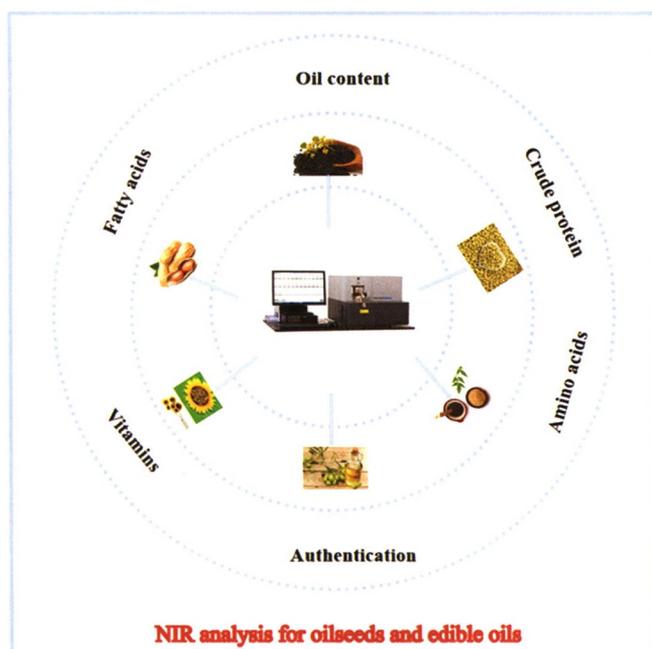
#### Reviews



#### Progresses and Perspectives of Near Infrared Spectroscopy Analytical Technology

CHU Xiao-li, CHEN Pu, LI Jing-yan, LIU Dan, XU Yu-peng

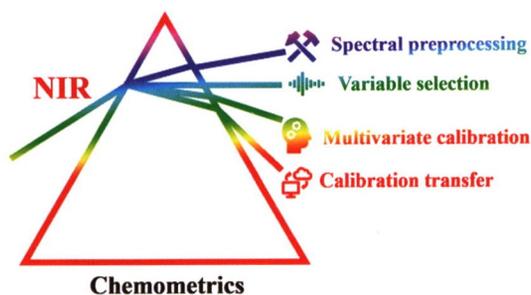
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1181–1188.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.001



#### Research Progress of Near Infrared Spectroscopy in Rapid Determination on Quality of Oilseed Products in China

LI Xue, WANG Du, BAI Yi-zhen, YU Li, YUE Xiao-feng, ZHANG Wen, ZHANG Liang-xiao, LI Pei-wu

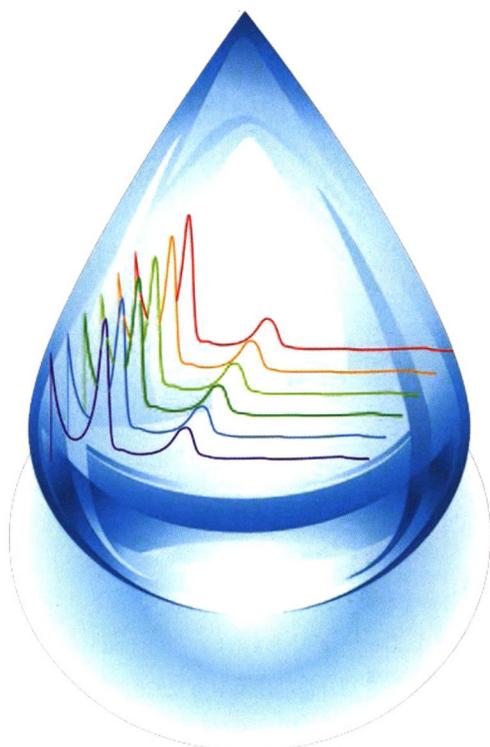
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1189–1195.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.002



### Progress of Chemometric Algorithms in Near-infrared Spectroscopic Analysis

ZHANG Jin, HU Yun, ZHOU Luo-xiong, LI Bo-yan

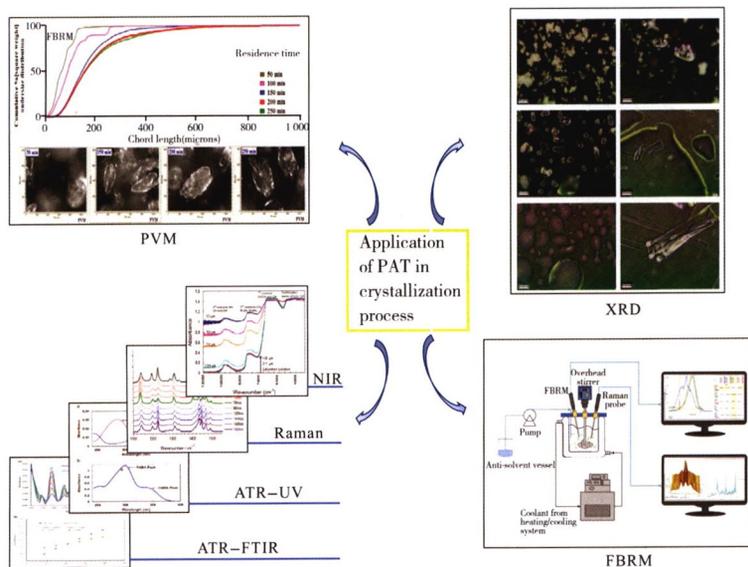
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1196 – 1203.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.003



### Water as a Spectroscopic Probe for Detection of Structural Analysis

SUN Yan, CAI Wen-sheng, SHAO Xue-guang

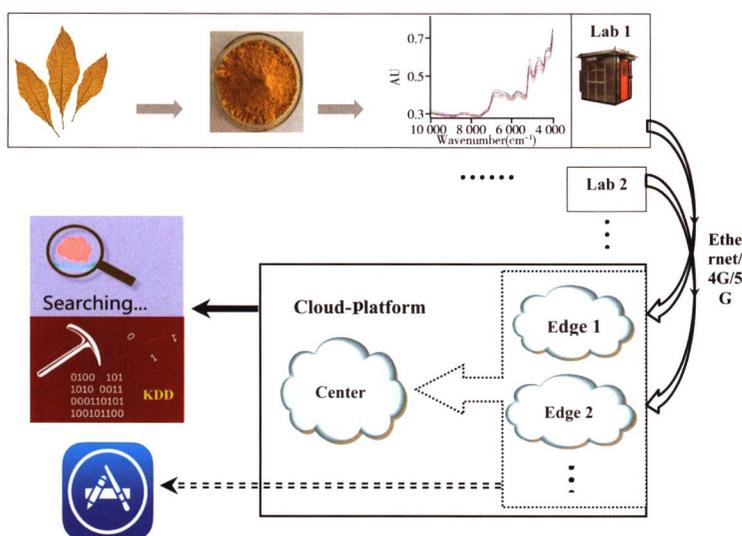
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1204 – 1208.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.004



### Progress on Application of Process Analytical Technology in Crystallization Process

WU Si-jun, LONG Zhi-xiang, PENG Zu-ren, QIU Ping, LI Zheng, LI Wen-long

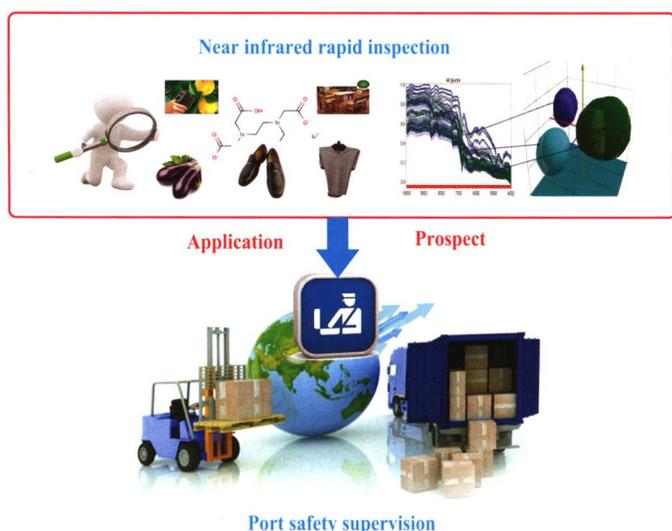
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1209 – 1217.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.005



### Networking of Near Infrared Spectroscopy for Tobacco and Its Application Perspective

WANG Jia-jun, YANG Jia-hong, SHAO Xue-guang

*J. Instrum. Anal.* , 2020, 39(10) : 1218 – 1224.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.006

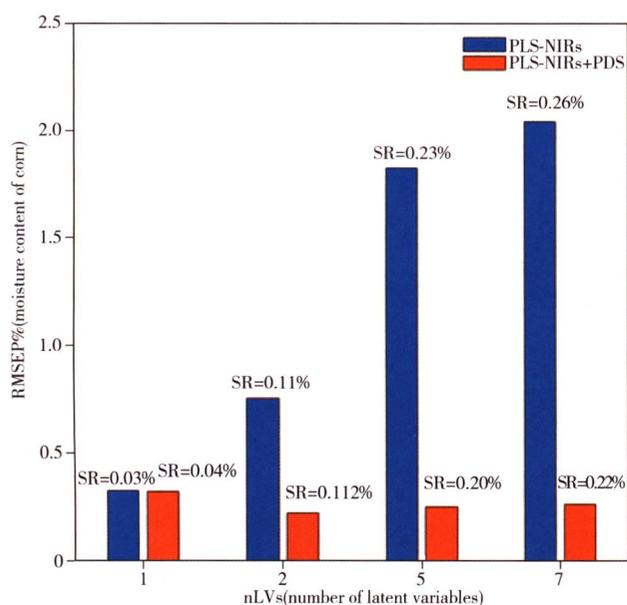


### Application Prospect of Near Infrared Spectroscopy Rapid Detection in Port Safety Supervision

RAO Min, GUI Jia-xiang, WANG Xiao-juan, ZHANG Cen, QIAO Ning

*J. Instrum. Anal.* , 2020, 39(10) : 1225 – 1230.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.007

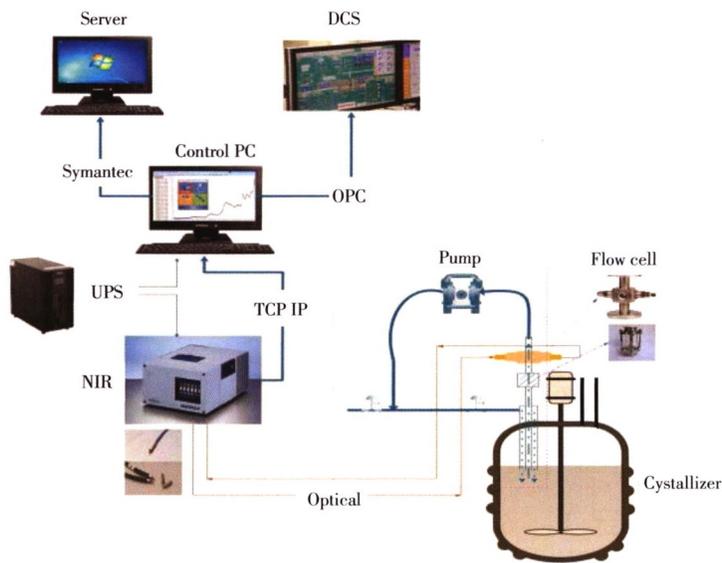
## Scientific Papers



### Effect of Number of Latent Variables for Partial Least Square Model Based on Near Infrared Spectroscopy on Models Transfer Performance

LI Yong-qi, HONG Shi-jun, HUANG Wen, ZHANG Li-guo, GE Jiong, LUAN Shao-rong, NI Li-jun

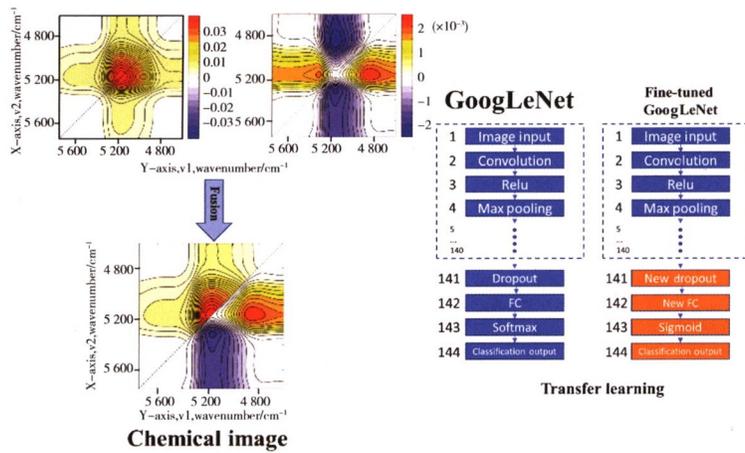
*J. Instrum. Anal.* , 2020, 39(10) : 1231 – 1238.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.008



### Application of Process Analytical Technology in Active Pharmaceutical Ingredient Production

LIU Wei, HE Yong, WU Bin, JIANG Ke-lei

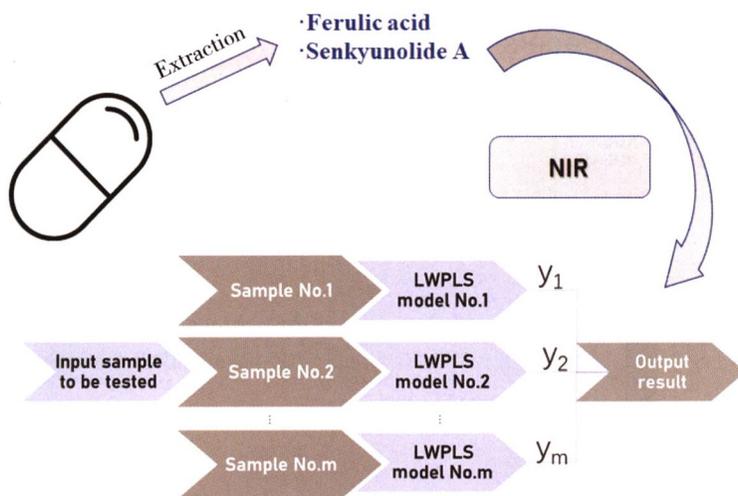
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1239 – 1246.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.009



### Study on Pattern Recognition Method Using ‘Dynamic’ NIR Spectroscopy with Deep Learning-based Image Identification and Transfer Learning

SUN Xi-ting, YUAN Hong-fu, SONG Chun-feng

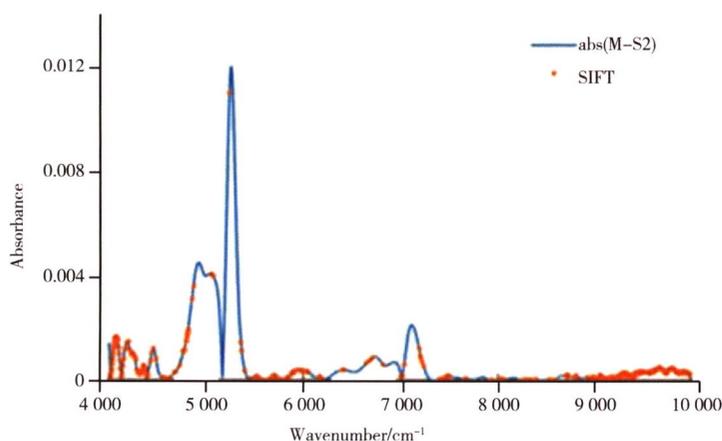
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1247 – 1253.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.010



### Study on A Near Infrared Spectroscopy Modeling Method Based on Local Weighted Partial Least Squares

MA Li-wen, GUO Tuo, MA Jin-fang, SHI Qing-long, XIAO Huan-xian

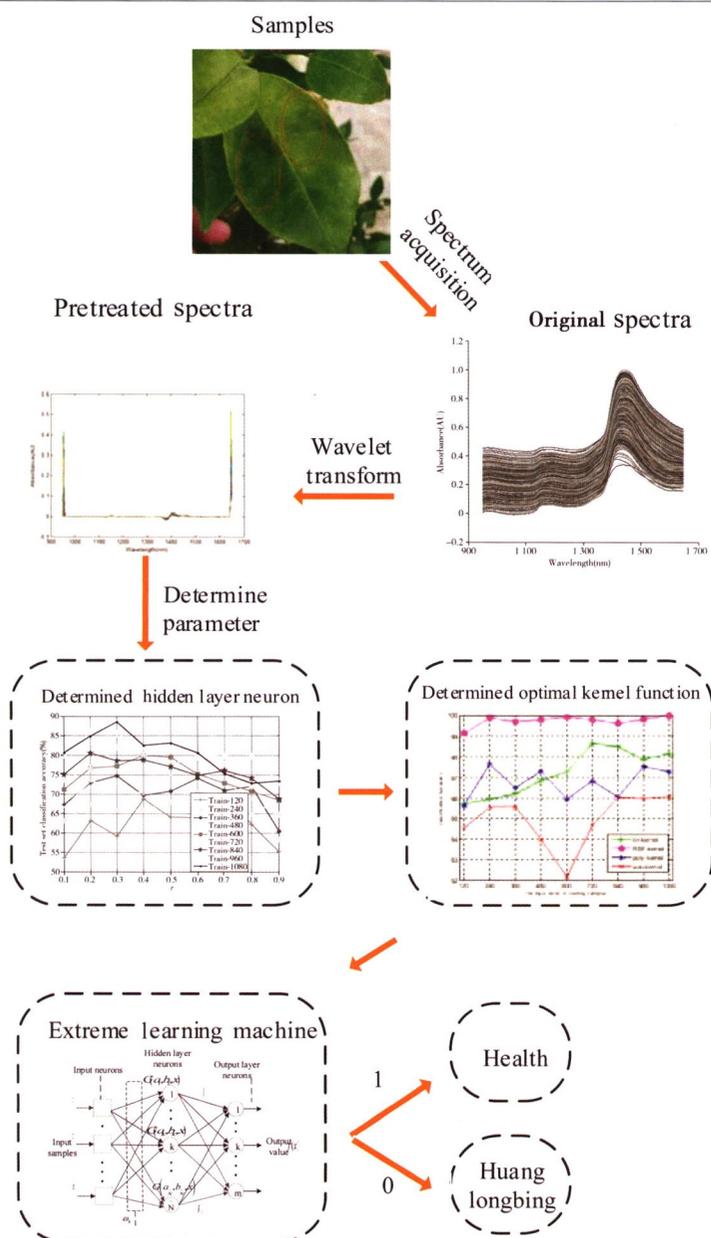
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1254 – 1259.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.011



### A Near Infrared Spectroscopy Calibration Model Transfer Method Based on Scale Invariant Feature Transform to Select Stable Characteristic Wavelengths

HONG Shi-jun, HUANG Wen, ZHANG Li-guo, GE Jiong, NI Li-jun, LUAN Shao-rong

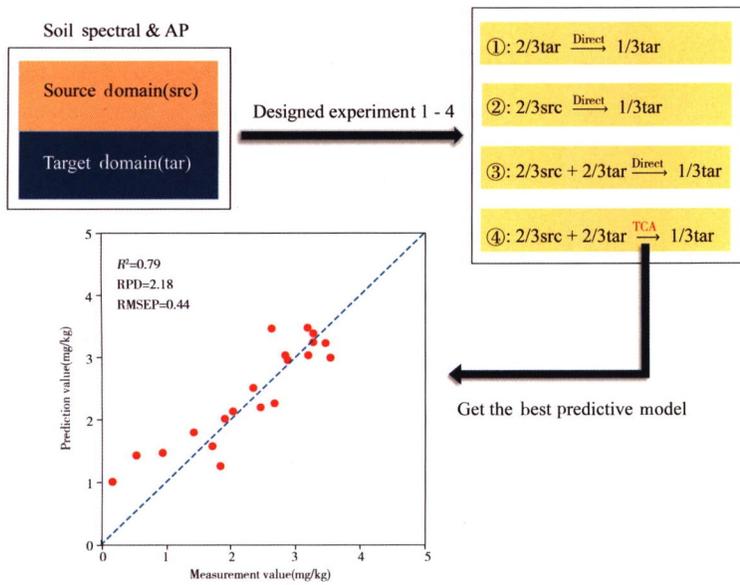
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1260 – 1266.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.012



### Identification of Citrus Huanglongbing by Near Infrared Spectroscopy with Least Angle Regression and Kernel Extreme Learning Machine

CHEN Wen-li, WANG Qi-bin, LU Hao-xiang, YANG Hui-hua, LIU Tong, XU Ding-zhou, DU Wen-chuan

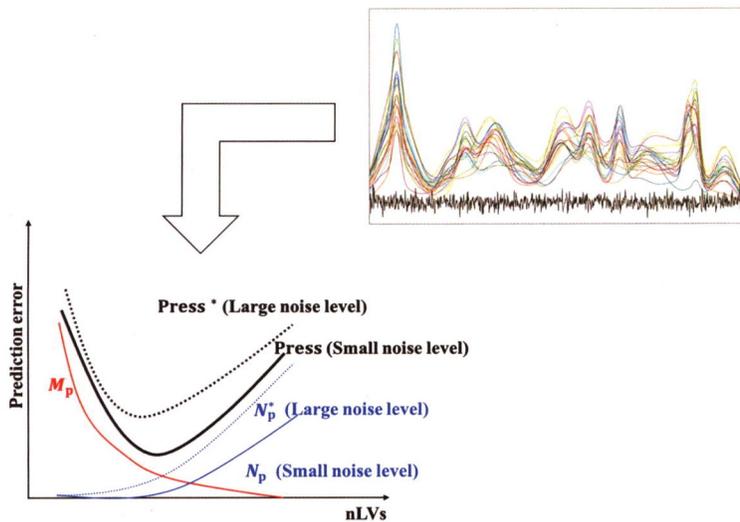
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1267 – 1273.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.013



### Study on Transfer Learning Prediction Methods for Soil Available Phosphorus NIR

ZHENG Wen-ru, LI Shao-wen, HAN Ya-lu, SHI Sheng-qun, ZHU Xian-zhi, JIN Xiu

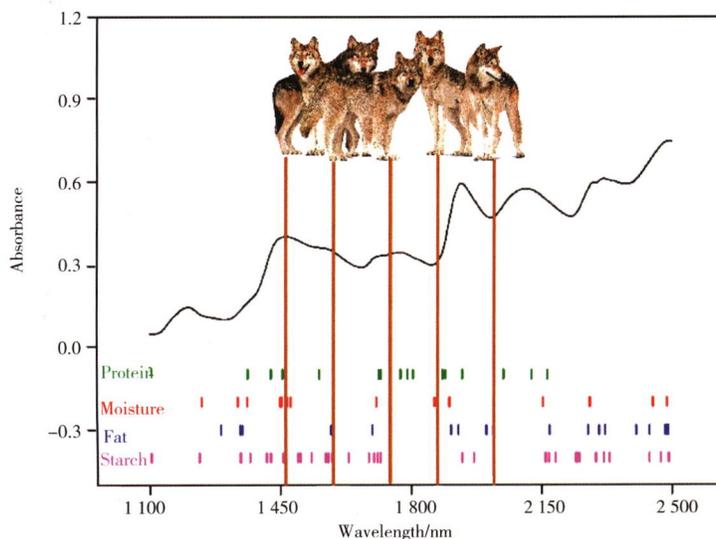
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1274 – 1281.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.014



### Propagation Effect of Instrument Noise in Partial Least Squares Models of Near-infrared Spectroscopy

ZHANG Ruo-qiu, DU Yi-ping

*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1282 – 1287.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.015



### A Variable Selection Method for Near Infrared Spectroscopy Based on Gray Wolf Optimizer Algorithm

WU Xin-yan, BIAN Xi-hui, YANG Sheng, XU Pei, WANG Hai-tao

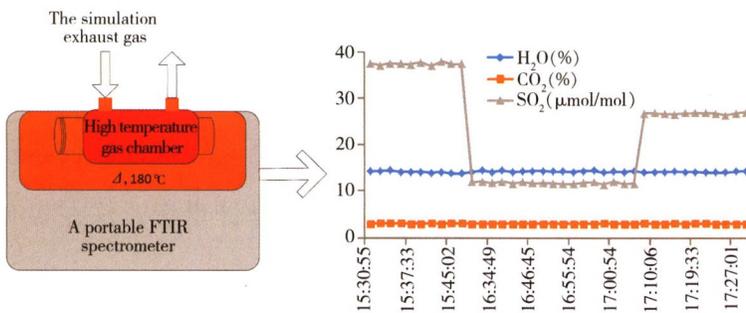
*J. Instrum. Anal.*, 2020, 39(10): 1288 – 1292.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.016



**A Weighted Naive Bayes Hyperspectral Classification Algorithm Combined with Laplacian Eigen Mapping**

LI Xiang, LÜ Yong

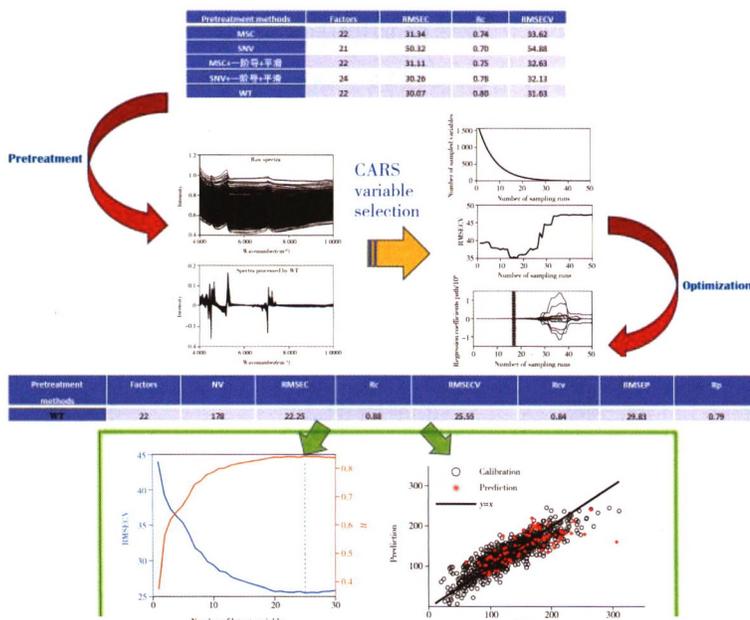
*J. Instrum. Anal.* , 2020, 39(10) : 1293 – 1298.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.017



**Development and Application of a High Temperature Gas Analyzer Based on Fourier Transform Infrared Spectroscopy**

ZHOU Xin-qi, MA Shuai, LIU Yan, SHEN Shi-lei, GUO Zhong-yuan, YU Xiao-feng, LIU Li-peng, HAN Shuang-lai, ZHANG Xiao-dan

*J. Instrum. Anal.* , 2020, 39(10) : 1299 – 1304.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.018



**Quantitative Determination of Hydrolytic Nitrogen Content in Soil by Near Infrared Spectroscopy Combined with Competitive Adaptive Reweighted Sampling Variable Selection Algorithm**

PENG Hai-gen, JIN Ying, ZHAN You-guo, CHEN Ya-qiong, FENG Xing-bing, QIAN Fa-cong, HUANG Guo, HUANG Tian-jie, LI Jie

*J. Instrum. Anal.* , 2020, 39(10) : 1305 – 1310.  
doi: 10.3969/j.issn.1004-4957.2020.10.019



# 全新 VENUS重量法 取代传统容量瓶方法

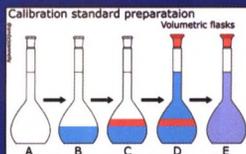
0 错误数据

极强溯源性

过程全自动化



传统容量瓶法步骤



Venus 重量法  
一键式完成



要点	Venus重量法	传统容量瓶法
数据溯源性	配液过程封闭式自动化完成, 溯源性极强	多环节手工操作, 人工记录, 溯源性弱
称量	自动完成, 数据自动记录到Venus系统中	手工完成
试剂转移的损失	无	母试剂转移到容量瓶过程中有损失的风险
定容体积判断	内置密度库, 重量与体积自动转换, 到目标值自动停止	人工眼睛判断, 误差风险较大
玻璃仪器的校准	不需要	需要
温度的影响	无	有
可能的交叉污染	一次性储液瓶无交叉污染	容量瓶重复使用的话存在交叉污染的风险
溶液混匀方式	涡旋或者震荡	手工摇匀, 静置
数据记录方式	自动保存并打印: 配制过程、配液人、浓度、配制时间、有效期等信息	手工记录
试剂用量	需要多少配制多少, 不受溶剂瓶体积限制	根据容量瓶体积要求配制, 多余的需要废液处理
保存体积	小	大
工时	一分钟	十五分钟



扫一扫

上海兰博贸易有限公司

咨询热线 / 021-60400583、60400592

地址: 上海市共和新路3737号共和国际广场B幢813室



公司网址: www.labhands.com

邮箱: sales@labhands.com