

透射光谱线性空间核学习建模求解多组分浓度

宋江婷, 金福江[†], 周丽春

(华侨大学 机电及自动化学院, 福建 厦门 361021)

摘要: 本文对求解多组分体系浓度的分光光度计同时测定法提供了一种建模方法. 通过对多组分体系的透射光谱建立光谱线性空间, 证明了多组分体系的分子势函数矩阵 V_M 可以转化为对角矩阵, 对角矩阵的对角元是单组分势函数的块矩阵 J_i . 多组分体系透射光谱空间是单组分分子透射光谱函数为基函数、分子数量占比为坐标的线性组合. 利用多核学习方法确定各单组分体系透射波的占比权重系数, 提出了用单组分浓度光量子隧穿软测量模型测定多组分浓度的测量方法. 实例验证表明此方法稳定可靠, 且能降低计算的复杂性.

关键词: 多组分; 浓度; 量子隧穿; 线性系统

引用格式: 宋江婷, 金福江, 周丽春. 透射光谱线性空间核学习建模求解多组分浓度. 控制理论与应用, 2024, 41(3): 468 – 473

DOI: 10.7641/CAT.2023.20863

Kernel learning modeling for solving multi-component concentrations with linear space of transmission spectra

SONG Jiang-ting, JIN Fu-jiang[†], ZHOU Li-chun

(College of Mechanical Engineering and Automation, Huaqiao University, Xiamen Fujian 361021, China)

Abstract: A modeling method is proposed in this paper for simultaneous spectrophotometric determination of multi-component system concentrations. A linear space of transmission spectra of the multi-component system was established, which proved that the potential function matrix V_M of the multi-component system can be transformed into a diagonal matrix, in which the diagonal elements are blocked matrix J_i of the single-component potential functions. The multi-component system transmission spectral space is a linear combination of the transmission spectral functions of each single-component molecule as the basis function and the proportion of molecular numbers as the coordinate. The weight coefficients of the transmission waves of each single-component system were determined using the multi-kernel learning method, and a measurement method for measuring multi-component concentration using a single-component concentration quantum tunneling soft measurement model was proposed. Example validation shows that this method is stable and reliable and can reduce computational complexity.

Key words: multi-component system; concentration; quantum Tunneling; linear systems

Citation: SONG Jiangting, JIN Fujiang, ZHOU Lichun. Kernel learning modeling for solving multi-component concentrations with linear space of transmission spectra. *Control Theory & Applications*, 2024, 41(3): 468 – 473

1 引言

溶液组分浓度的测量常采用基于 Lambert-Beer 定律的分光光度计法^[1–3], 此方法对于中低浓度、浅颜色的溶液有很好的测量效果, 但对于高浓度、深颜色的溶液有较大的测量误差^[4–6], 其原因为 Lambert-Beer 定律仅为经验公式, 缺乏相关的机理研究.

本文前期将入射光看作光量子, 假设单组分溶液

是由结构完全相同的大量的分子组成, 并将其视为分子势垒, 入射光透过单组分溶液视为光量子波函数在分子势垒作用下的演变的过程. 通过求解薛定谔方程得到透射光波函数及透射光的光谱函数, 最终得到了单组分溶液组分浓度的量子隧穿软测量模型^[7].

多组分溶液是指溶质是多种结构、不同数量的物质分子组成的体系, 多组分浓度同时测定需要同时测

收稿日期: 2022–09–30; 录用日期: 2023–06–04.

[†]通信作者. E-mail: jinfujiang@163.com; Tel.: +86 13905957105.

本文责任编辑: 周平.

福建省科技计划项目(2021H6028), 流程工业综合自动化国家重点实验室联合开放基金项目(2022–KF–21–04)资助.

Supported by the Science and Technology Program of Fujian Province (2021H6028) and the State Key Laboratory of Integrated Automation for Process Industry, Northeastern University (2022–KF–21–04).

量出溶液中每种组分的浓度. 多组分浓度测定通常采用基于经验或实验模型^[8-10], 依据Lambert-Beer定律建立线性方程组求解各组分的浓度. 为提高测量精度, 又采用一阶导数光谱法^[11]、偏最小二乘法^[12]、引入光谱峰面积^[13]等技术. 这些方法对单组分、低浓度溶液组分浓度的测量有较好的效果, 但对于提高多组分浓度同时测定的测量精度并不显著. 文献[14]提出了一个多组分染液染料浓度的二次型测量模型, 应用该模型大大提高了多组分染液染料浓度的测量精度, 但该模型仅对特定的几种活性染料有较好的测量结果, 且建模需大量的实验, 工作量大, 成本高, 建模周期长.

另外, 还可以应用量子隧穿的机理, 将入射光看作光子, 假设多组分溶液是由多种结构相同、大量的分子组成, 也将其势垒视为多个分子势垒组成, 入射光透过溶液视为光子波函数与多分子势垒作用下演变过程, 通过求解薛定谔方程组得到透射光波函数及光谱函数, 最终得到了多组分溶液组分浓度的量子隧穿测量模型. 但该方法随着分子种类及分子数量的增加, 薛定谔方程中的变量数、方程的个数也随之增多, 求解面临巨大困难.

本文将多组分溶液抽象成势垒线性空间, 多组分溶液的透射光谱看成是以单分子的透射光谱为基函数、单组分分子数量占比为坐标的线性组合, 得到透射光光谱函数向量空间, 把光子透过多组分势垒后光谱函数转化为单组分透射光谱函数的叠加, 建立以多组分透射光谱为输出, 以各单组分溶液组分浓度测量模型为核函数, 单组分浓度为权系数为输入的多组分浓度测量模型, 运用最小二乘法完成多组分浓度的求解.

2 多组分透射光谱线性空间

原子中的电子因能级分布而形成原子轨道, 原子轨道是波函数^[15], 由原子轨道叠加而成的分子轨道也同样是波函数, 一般称为势函数. 光束照射分子的过程可看作是光子波函数与分子势函数相互作用的過程.

2.1 多组分分子势函数矩阵

设多组分体系由 m 种、每种数量为 n 的单分子组成($m, n \in \mathbb{N}^+$), 各类分子随机分布于体系中, 多组分分子势函数 $\mathbf{V}_M$ 可用 m 行 n 列分子势函数组成的矩阵表示, m 行为 m 种分子, n 为每行有 n 个相同或不同种类的分子, 具体表示为

$$\mathbf{V}_M = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & V_{1n} \\ V_{21} & V_{22} & \cdots & V_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ V_{m1} & V_{m2} & \cdots & V_{mn} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

当 m, n 相等时, $\mathbf{V}_M$ 为 m 阶方阵.

2.2 多组分势函数矩阵的线性变换

定理 1 能够找到一个矩阵 $\mathbf{P}$, 使得多组分分子势函数矩阵 $\mathbf{V}_M$ 可以转化为各单组分分子势函数块矩阵 $\mathbf{J}_i$ 组成的对角阵.

证 对于 m 阶多组分分子势函数矩阵 $\mathbf{V}_M$, 存在一个Jordan标准形与之相似^[16-17], 这个Jordan标准形除去其中Jordan块的排列次序外, 是被 $\mathbf{V}_M$ 唯一确定的.

$$\mathbf{V}_M \simeq \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_1(V_1) & & & \\ & \mathbf{J}_2(V_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{J}_m(V_m) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

其中

$$\mathbf{J}_i(V_i) = \begin{bmatrix} V_i & 1 & & \\ & V_i & 1 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & V_i \end{bmatrix}, \quad i = 1, 2, \dots, r. \quad (3)$$

同种分子具有相同的特征值, $\mathbf{J}_i(i = 1, 2, \dots, r)$ 是由同种分子势函数组成的Jordan块. 在多组分溶液中, 每个分子的位置不同, 每个特征值对应的特征向量线性无关, 多组分分子势函数矩阵为满秩矩阵, 所以存在一个可逆矩阵 $\mathbf{P}$, 使得

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{V}_M \mathbf{P} = \mathbf{J}. \quad (4)$$

根据文献[18]中的方法可求出非奇异矩阵 $\mathbf{P}$, 由此多组分分子势函数矩阵可转换成各单组分分子势函数块矩阵 $\mathbf{J}_i$ 组成的对角阵 $\mathbf{J}$, 光子隧穿多组分体系势垒的薛定谔方程即可简化为光子隧穿各单组分体系势垒的薛定谔方程组, 即

$$\begin{cases} -n_1 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \mathbf{V}_{s1} \psi(x, t) = n_1 E \psi(x, t), \\ -n_2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \mathbf{V}_{s2} \psi(x, t) = n_2 E \psi(x, t), \\ \vdots \\ -n_m \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \mathbf{V}_{sm} \psi(x, t) = n_m E \psi(x, t), \end{cases} \quad (5)$$

其中: $n_i(i = 1, 2, \dots, m)$ 为每种单组分分子的数量, $\mathbf{V}_{si}(i = 1, 2, \dots, m)$ 为各单组分分子势函数.

当已知各单组分分子势函数 $\mathbf{V}_{si}(i = 1, 2, \dots, m)$ 时, 由式

$$\mathbf{V}_M = \mathbf{P} \mathbf{J} \mathbf{P}^{-1} \quad (6)$$

可得到多组分分子势函数矩阵 $\mathbf{V}_M$. 式(4)(6)说明, 多组分分子势函数是单组分分子势函数为基函数, 以分

子位置为坐标的线性空间.

2.3 多组分分子透射光谱线性空间

由式(5)得到 m 个单组分透射波函数的解 $\psi_{Ti}(i = 1, 2, \dots, m)$, 利用可逆矩阵 $\mathbf{P}$ 及式(6)可得到多组分透射波矩阵 ψ_T , 即

$$\psi_T \simeq \mathbf{P} \begin{bmatrix} \psi_{T1} & & & \\ & \psi_{T2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \psi_{Tm} \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} n_1 & & & \\ & n_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & n_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{t1} \\ \psi_{t2} \\ \vdots \\ \psi_{tm} \end{bmatrix} \mathbf{P}^{-1}, \quad (7)$$

其中 $\psi_{ti}(i = 1, 2, \dots, m)$ 是每种单分子的透射波函数, 单组分中每个单分子透射波函数 $\psi_{ti}(i = 1, 2, \dots, m)$ 相同, 由此得到定理2.

定理2 若单波长的透射光按波长大小依次排列则形成透射光谱, 光谱函数表示为 $\psi_T(\lambda)$. 多组分透射光谱空间是由各个单组分的分子光谱为基函数, 每个组分所占比例为坐标的线性组合.

由透射光谱可得到溶液的吸光度, 多组分溶液的吸光度 $A(\lambda)$ 与各单组分吸光度 $A_{si}(\lambda)$ 、各单分子吸光度 $A_i(\lambda)(i = 1, 2, \dots, m)$ 之间的关系为

$$A(\lambda) = \langle \alpha_i | A_i(\lambda) \rangle = \alpha_1 A_1(\lambda) + \dots + \alpha_m A_m(\lambda), \quad (8)$$

其中 $\alpha_i = \frac{c_i}{c_1 + \dots + c_m}$, $c_i(i = 1, 2, \dots, m)$ 为各单组分分子的摩尔浓度.

3 多组分透射光线性空间的组分浓度模型的核学习建模

多核学习(multiple kernel learning)可以看作是任务学习(multi-task learning), 也可以看作是迁移学习(transfer learning), 每个核函数表示一个子任务, 多核学习能够针对场景来组合各个核函数以获取更好的结果^[19-21], 各子任务对当前学习任务的贡献由其权重表示. 在多核学习问题中, 实际上就是对基核函数与核函数组合系数的选择问题, 如何学习出一个合适的核函数组合系数, 便是多核学习方法的本质所在.

利用核函数可以大大简化计算, 但如何针对具体的问题设计出最适当的核函数却是一个难点. 实际上, 经常采用的方法是直接定义核函数, 从而隐含地定义了特征空间. 在多核学习中, 比较常用的是多个单核函数的凸组合. 在本文中, 定义单组分体系的量子隧穿吸光度模型为核函数, 因各单组分体系的权重均为非负数, 所以多组分体系吸光度是多个单核函数的凸组合, 即

$$A(\lambda) = \sum_{i=1}^m \alpha_i A_i(\lambda, K_i \omega_i) + \varepsilon = \sum_{i=1}^m \alpha_i \lg \left\{ 1 + \frac{(\lambda K_i \omega_i)^2}{616 - 50 \lambda K_i \omega_i} \right\} + \varepsilon, \quad (9)$$

$$\alpha_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1,$$

其中: $i(i = 1, 2, \dots, m)$ 为基核数目; α_i 为第 i 个基核函数对应的权值; $A_i(\lambda)$ 为基核; ε 为模型噪声, 服从正态分布 $(0, \sigma^2)$. 本文使用多核最小二乘法方法将求解式(9)转化为求解以下最小值优化问题, 即

$$\min \sum_{j=1}^n (A(\lambda_j) - \varepsilon - \alpha_1 A_1 - \alpha_2 A_2 - \dots - \alpha_m A_m)^2, \quad (10)$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geq 0, \quad \forall i.$$

光波 λ 从400 nm开始测量至700 nm, 可得到 n 组数据 $A(\lambda_j)(j = 1, 2, \dots, n)$.

将有约束的目标函数转换成无约束的拉格朗日目标函数, 有

$$L = \sum_{j=1}^n (A(\lambda_j) - \varepsilon - \alpha_1 A_1 - \dots - \alpha_m A_m)^2 + \beta \left(\sum_{i=1}^m \alpha_i - 1 \right), \quad (11)$$

其中 β 是受约束的拉格朗日乘子.

对式(11)的 α 和 β 分别求偏导, 有

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial \varepsilon} = 2 \sum_{j=1}^n (A(\lambda_j) - \varepsilon - \alpha_1 A_{1j} - \alpha_2 A_{2j} - \dots - \alpha_m A_{mj})(-1) = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = 2 \sum_{j=1}^n (A(\lambda_j) - \varepsilon - \alpha_1 A_{1j} - \alpha_2 A_{2j} - \dots - \alpha_i A_{ij} - \beta)(-A_{ij}) = 0, \\ \quad i = 1, 2, \dots, m, \\ \frac{\partial L}{\partial \beta} = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_m - 1 = 0, \end{cases} \quad (12)$$

进而得到联立的正规方程

$$\begin{cases} n\varepsilon + \alpha_1 \sum_{j=1}^n A_{1j} + \dots + \alpha_m \sum_{j=1}^n A_{mj} = \sum_{j=1}^n A_j, \\ \varepsilon \sum_{j=1}^n A_{1j} + \alpha_1 \sum_{j=1}^n A_{1j}^2 + \dots + \alpha_m \sum_{j=1}^n A_{1j} A_{mj} = \sum_{j=1}^n A_{1j} A_j - \frac{\beta}{2}, \\ \vdots \\ \varepsilon \sum_{j=1}^n A_{mj} + \alpha_1 \sum_{j=1}^n A_{1j} A_{mj} + \dots + \alpha_m \sum_{j=1}^n A_{mj}^2 = \sum_{j=1}^n A_{mj} A_j - \frac{\beta}{2}, \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_m - 1 = 0. \end{cases} \quad (13)$$

令

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & A_{400 \cdot 1} & \cdots & A_{400 \cdot m} \\ 1 & A_{405 \cdot 1} & \cdots & A_{405 \cdot m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & A_{700 \cdot 1} & \cdots & A_{700 \cdot m} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \varepsilon \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{bmatrix}_{(m+1) \times 1}$$

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \frac{\beta}{2} \\ \frac{\beta}{2} \\ \vdots \\ \frac{\beta}{2} \end{bmatrix}_{m \times 1}, \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} A_{400} \\ A_{405} \\ \vdots \\ A_{700} \end{bmatrix}.$$

$A_{400}, A_{405}, \cdots, A_{700}$ 是指波长为400 nm, 405 nm, $\cdots$, 700 nm处的吸光度测量值.

式(13)正规方程可以写为

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{X}^T \mathbf{Y} - \boldsymbol{\beta}, \quad (14a)$$

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_m - 1 = 0. \quad (14b)$$

因 $\mathbf{X}$ 矩阵是由不同种类的单组分体系吸收光谱组成, 所以矩阵为满秩矩阵, $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 为式(14a), 求解可有

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = [\hat{\alpha}_0 \quad \hat{\alpha}_1 \quad \cdots \quad \hat{\alpha}_m] = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} - \boldsymbol{\beta}. \quad (15)$$

将式(15)代入式(14b), 此时 $\alpha_i = \hat{\alpha}_i (i = 1, 2, \cdots, m)$ 即为各项最优值.

4 实例验证

本次验证选用3种单组分活性染料进行混合溶液的验证. 已知单组分活性染料红B-3BF的分子式为 $\text{C}_9\text{H}_{13}\text{O}_6\text{NS}_2$, 分子相对质量为295; 活性染料黄B-3RD的分子式为 $\text{C}_{28}\text{H}_{20}\text{O}_{16}\text{ClN}_9\text{Na}_4\text{S}_5$, 相对分子质量为1026; 活性染料深蓝B-2GLN的分子式为 $\text{C}_{33}\text{H}_9\text{ClNa}_5\text{O}_{19}\text{S}_6$, 分子相对质量1192.

在文献[22]中已完成活性染料红B-3BF、活性染料黄B-3RD、活性染料深蓝B-2GLN这3种单组分染料分子的光谱函数建模 $A_1(\lambda)$, $A_2(\lambda)$ 和 $A_3(\lambda)$.

3种染料组成的多组分染料染液的理论光谱函数模型为

$$A(\lambda) = \alpha_1 A_1(\lambda) + \alpha_2 A_2(\lambda) + \alpha_3 A_3(\lambda) + \varepsilon. \quad (16)$$

现用此3种单分子染料调配成质量浓度分别为0.003, 0.01, 0.045 (g/L), 摩尔浓度归一化后的配比系数 $\alpha_i (i = 1, 2, 3)$ 分别为0.179, 0.161, 0.66的多组分染料染液, 测得混合染料染液的光谱曲线为图1中的蓝色曲线; 将配比系数 $\alpha_i (i = 1, 2, 3)$ 代入理论光谱函数模型, 得到模型的预测曲线为图1中的橙色曲线. 观察两条曲线发现, 预测曲线与实验曲线贴合较好, 整体走势一致, 说明本理论模型具有可行性.

这3种染料继续调配成另外一组质量浓度分别为

0.015, 0.035, 0.001 (g/L), 摩尔浓度归一化后的配比系数 $\alpha_i (i = 1, 2, 3)$ 分别为0.557, 0.351, 0.092的多组分染料染液, 实验测量其吸收光谱曲线如图2中的橙色曲线.

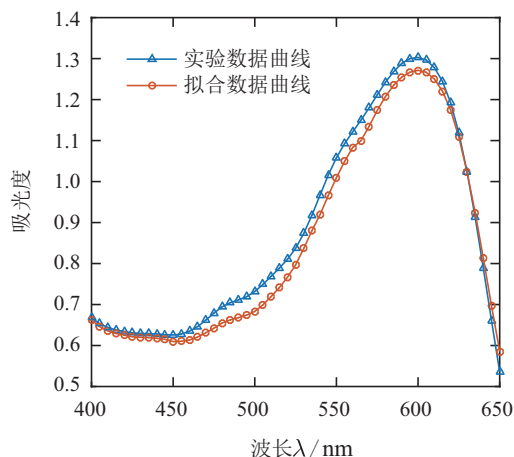


图1 多组分染料染液吸收光谱曲线

Fig. 1 Absorption spectrum of multicomponent dye solution

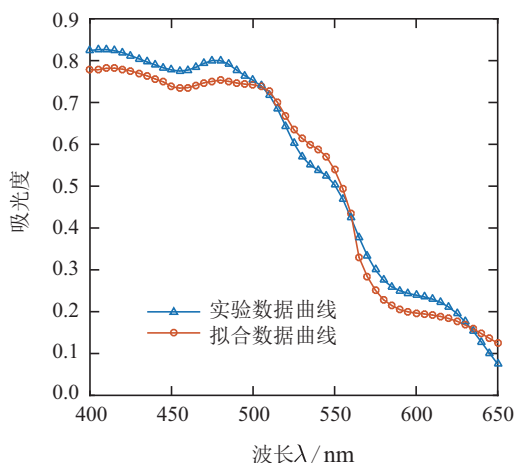


图2 多组分染料染液吸收光谱图

Fig. 2 Absorption spectrum of multicomponent dye solution

根据式(16)多组分染料染液的理论光谱函数模型及核学习方法得到3种染料的配比系数 $\hat{\alpha}_i (i = 1, 2, 3)$ 分别为0.586, 0.301, 0.113, 将 $\alpha_i (i = 1, 2, 3)$ 代入模型(16)中得到预测光谱曲线, 即图2中的蓝色曲线. 虽然实验曲线与预测曲线没有完全重合, 但整体趋势一致. 实际配比系数 $\alpha_i (i = 1, 2, 3)$ 和理论配比系数 $\hat{\alpha}_i (i = 1, 2, 3)$ 的总体标准差为

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\delta_i - \bar{\delta})^2} = 3.55. \quad (17)$$

预测的误差与现有方法的误差基本相同, 但本文主要目的是建立理论模型、验证模型的正确性, 因此验证结果证明了理论的正确性. 不仅如此, 将单组分染料的量子隧穿浓度测量模型看做核函数, 采用加权线性组合的方法将多个核融合建立多组分透射光线

性空间的组分浓度模型,解决了多组分分子量子隧穿浓度测量模型的复杂程度,简化了计算过程.融合后的核函数兼有各个核的特点,能够很好的适应多组分分子中的异构点.此外,因多核是由多个不同的核函数融合而成,在实际应用中,可以灵活选用或更换核函数以适应不同的需求,以此实现了无限配方问题,避免了传统方法建模时对所有组分进行的大量实验,大大节约了成本与时间.

5 结论

本文分析了基于Lambert-Beer定律的多组分浓度同时测定法误差的原因,提出了多组分透射光线性空间的组分浓度模型的核学习建模方法,并验证了模型的有效性,最终得出结论如下:

1) 理论上证明了光量子隧穿多组分分子的透射光波为各单组分透射光波的线性叠加,多组分透射光波函数是以单分子透射光波函数为基函数、单组分分子数量占比为坐标的波函数线性空间.

2) 首次将单组分的量子隧穿浓度模型看作是核函数,建立了多核学习的多组分浓度测定模型.模型融合了各个核的优点,有效地预测了多组分体系浓度,达到了最优预测值.

3) 多组分透射光线性空间是单组分体系透射光的线性叠加这一结论说明,若用光量子隧穿法同时测定多组分浓度,不必再求解复杂的薛定谔方程组,只需求解各单组分体系组成的薛定谔方程组即可,大大简化了计算过程;同时,此方法解决了文献[14]的问题,对于由多种单组分调配多组分溶液,不必全部重新建模,只需更改所需的单组分溶液即可,大大节约了工作量与实验成本,完全实现了无限配方问题.

参考文献:

- [1] PRIETO P, PINEDA M, AGUILAR M. Spectrophotometric quantitation of antioxidant capacity through the formation of a phosphomolybdenum complex: Specific application to the determination of vitamin E. *Analytical Biochemistry*, 1999, 269(2): 337 – 341.
- [2] YE Y, CAI S J, YN M, et al. Concentration detection of carbon nanotubes in electrophoretic suspension with UV-vis spectrophotometry for application in field emission devices. *Applied Surface Science*, 2013, 284(1): 107 – 112.
- [3] SANCHEZ-HACHAIR A, HOFMANN A. Hexavalent chromium quantification in solution: Comparing direct UV-visible spectrometry with 1,5-diphenylcarbazide colorimetry. *Comptes Rendus Chimie*, 2018, 21(9): 890 – 896.
- [4] LANGHALS, BTBRAUN A B, RIMMEL F, et al. Association of humic substances: Verification of Lambert-Beer law. *Acta Hydrochimica et Hydrobiologica*, 2010, 28(6): 329 – 332.
- [5] FANG Wenjie, TU Tianmin, ZHANG Qian, et al. Online monitoring of dye concentration. *Dyeing and Finishing*, 2011, 37(7): 12 – 15, 33. (房文杰, 屠天民, 张骞, 等. 染液浓度的在线监测初探. 印染, 2011, 37(7): 12 – 15, 33.)
- [6] PAN Zhongda, ZHAO Baodan, ZHOU Jin. Study on the nonlinearity between absorbance and concentration of dyes in aqueous solution. *Research and Exploration in Laboratory*, 2014, 33(2): 22 – 26. (潘中达, 赵保丹, 周进. 水溶液中染料吸光度与浓度的非线性关系. 实验室研究与探索, 2014, 33(2): 22 – 26.)
- [7] SONG Jiangting, JIN Fujiang, ZHOU Lichun. A study of soft sensor model of single-component dye concentration based on optical quantum tunneling penetration. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2021, 41(8): 238 – 248. (宋江婷, 金福江, 周丽春. 单组分染料浓度光量子隧穿软测量模型研究. 仪器仪表学报, 2021, 41(8): 238 – 248.)
- [8] HUANG Caihong, ZHANG Zhibin, JIN Fujiang. Determination of individual dye concentrations in mixed dye liquors by improved simultaneous determination method. *CIESC Journal*, 2012, 63(9): 2953 – 2957. (黄彩虹, 张志彬, 金福江. 改进的同时测定法测定混合染液各组分浓度. 化工学报, 2012, 63(9): 2953 – 2957.)
- [9] SPITHA N, DOOLITTLE P S, BUCHBERGER A R, et al. Simulation-based guided inquiry activity for deriving the Beer-Lambert law. *Journal of Chemical Education*, 2021, 98(5): 1705 – 1711.
- [10] BACHRI M, PERMATA Y M, SYAHPUTRA H. PLS calculation of ftir and spectrophotometry methods for determination simultaneous of dextromethorphan hbr and glyceryl guaiacolate in tablet mixture. *RASĀYAN Journal of Chemistry*, 2022, 15(1): 143 – 149.
- [11] MALHOTRA A, RMECI B. Detection and identification of a mixed cyanobacteria and microalgae culture using derivative spectrophotometry. *Journal of Photochemistry and Photobiology. B, Biology*, 2022, 238: 112616.
- [12] MORAIS P, SOUZA D M, MADARI B E. Multivariate analysis of images in spectrophotometric methods: Quantification of soil organic matter. *European Journal of Chemistry*, 2021, 12(4): 377 – 381.
- [13] LI Hongmei, SU Lihong, CHEN Ruizhan. Simultaneous determination of trace amounts of Iron(II), Copper(I) and Cobalt(II) in aloe by second derivative peak area spectrophotometry. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2004, 24(4): 463 – 465. (李红玫, 苏丽红, 陈瑞战. 二阶导数光谱-峰面积积分法同时测定芦荟中痕量的铁、铜、钴. 光谱学与光谱分析, 2004, 24(4): 463 – 465.)
- [14] TANG Yiping, JIN Fujiang, ZHANG Zhibin, et al. Determination of individual dye concentrations in mixed reactive dye liquors by particle filter. *CIESC Journal*, 2011, 62(8): 2265 – 2269. (汤仪平, 金福江, 张志彬, 等. 粒子滤波算法测定混合染液染料浓度. 化工学报, 2011, 62(8): 2265 – 2269.)
- [15] FENG Jikang. *Basic Principles and Applications of Quantum Chemistry*. Beijing: Higher Education Press, 2017: 34. (封继康. 量子化学基本原理与应用. 北京: 高等教育出版社, 2017: 34.)
- [16] KOCHETOV M, YASUMURA F Y. Group gradings on the Lie and Jordan algebras of block-triangular matrices. *Journal of Algebra*, 2019, 537: 147 – 172.
- [17] JIAO R, CHEN J, UNIVERSITY Y. Research on computation of the determinant relate to Jordan block. *Jiangsu Science & Technology Information*, 2019, 36(15): 53 – 56.
- [18] AFZAL A L, ASHARAF S. Deep multiple multilayer kernel learning in core vector machines. *Expert Systems with Application*, 2018, 96(4): 149 – 156.
- [19] WANG B, ZHANG X, XING S, et al. Sparse representation theory for support vector machine kernel function selection and its application in high-speed bearing fault diagnosis. *ISA Transactions*, 2021, 118(1): 207 – 218.

- [20] LIU Yi, YU Haiqing, GAO Zengliang, et al. Online adaptation of kernel learning adaptive predictive controller. *Control Theory & Applications*, 2011, 28(9): 1099 – 1104.
(刘毅, 喻海清, 高增梁, 等. 核学习自适应预测控制器的在线更新方法. 控制理论与应用, 2011, 28(9): 1099 – 1104.)
- [21] HINO H, REYHANI N, MURATA N. Multiple kernel learning by conditional entropy minimization. *Ninth International Conference on Machine Learning & Applications*. Washington, DC, USA: IEEE, 2010: 223 – 228.
- [22] SONG Jiangting. *Quantum tunneling mechanism and modeling method for simultaneous determination of multicomponent concentration in dye solution*. Xiamen: Huaqiao University, 2022.

(宋江婷. 染液多组分浓度同时测定的量子隧穿机理及建模方法. 厦门: 华侨大学, 2022.)

作者简介:

宋江婷 博士, 目前研究方向为复杂系统建模与控制等, E-mail: 21117760@qq.com;

金福江 教授, 博士, 目前研究方向为复杂系统建模与控制等, E-mail: jinfujian@163.com;

周丽春 副教授, 博士, 目前研究方向为复杂系统建模与控制等, E-mail: 13905958730@163.com.