

# 水泥生料成分的近红外光谱分析方法研究

王译那<sup>1</sup>, 郭迎庆<sup>1</sup>, 王一帆<sup>1</sup>, 肖航<sup>2</sup>, 赵志<sup>2</sup>, 张雷<sup>3</sup>

(1. 南京林业大学, 江苏 南京 210037; 2. 山东师范大学, 山东 济南 250358; 3. 山东大学, 山东 济南 250061)

**摘要:**水泥是一种重要的基础建筑材料,对社会生产有着重大的影响,实现水泥生料成分的快速检测对建筑行业的发展具有重大意义。本文基于近红外光谱分析方法研究了水泥生料中的 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 成分的含量检测,首先通过联合 $X-Y$ 距离划分法对样品集进行划分,然后对训练集采用不同光谱预处理方法进行处理,最后采用偏最小二乘回归和支持向量回归分别对近红外光谱数据建立预测模型,并对预测结果进行分析比较。研究表明,采用S-G平滑预处理和偏最小二乘回归建模的近红外光谱分析方法检测效果较佳, $\text{Al}_2\text{O}_3$ 检测模型的决定系数 $R^2$ 为0.895,预测均方根误差(RMSEP)为0.072; $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 检测模型的决定系数 $R^2$ 为0.732, RMSEP为0.023。研究结果为水泥生料成分的检测提供了有效的分析方法,促进了水泥行业的进一步发展。

**关键词:**近红外光谱;水泥生料;成分检测;光谱预处理;预测模型

中图分类号:TN219;O433 文献标识码:A DOI:10.3969/j.issn.1001-5078.2024.04.017

## Research on near infrared spectroscopy analysis method for cement raw material composition

WANG Yi-na<sup>1</sup>, GUO Ying-qing<sup>1</sup>, WANG Yi-fan<sup>1</sup>, XIAO Hang<sup>2</sup>,  
ZHAO Zhi<sup>2</sup>, ZHANG Lei<sup>3</sup>

(1. Nanjing Forestry University, Nanjing 210037, China; 2. Shandong Normal University, Jinan 250358, China;  
3. Shandong University, Jinan 250061, China)

**Abstract:** Cement is an important basic building material that has a significant impact on social production. The rapid detection of cement raw material composition is of great significance for the development of the construction industry. The content detection of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  in cement raw meal based on near-infrared spectral analysis method is performed. Firstly, the sample set is divided by the combined  $X-Y$  distance division method. And the training set is processed by different spectral pretreatment methods. Finally, PLS and SVM are utilized to establish prediction models for NIR data respectively. The predicted results are analyzed and compared and the results show that the NIR analysis method using S-G smoothing pretreatment and PLS modeling has a better detection results. The decision coefficient  $R^2$  of the  $\text{Al}_2\text{O}_3$  detection model is 0.895, and the RMSEP is 0.072; the decision coefficient  $R^2$  of the  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  detection model is 0.732, and the RMSEP is 0.023. The research results provide an effective analytical method for detecting the composition of cement raw materials, promoting the further development of the cement industry.

**Keywords:** near infrared spectroscopy; cement raw material; component detection; spectral pretreatment; prediction model

**基金项目:**江苏省双创博士项目(No. JSSCBS20220698);2023年度江苏省高等学校基础科学(自然科学)研究面上项目(No. 23KJB130007);山东省自然科学基金青年基金(No. ZR2021QF135)资助。

**作者简介:**王译那(1994-),女,博士,讲师,主要从事光谱检测及应用方面的研究。E-mail:wangyina@njfu.edu.cn

**收稿日期:**2023-07-20

## 1 引言

水泥是重要的建筑材料,广泛应用于基础设施建造。水泥生料中  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$  等成分的配比决定着水泥质量,水泥的质量直接决定了基础设施的质量<sup>[1]</sup>。若水泥生料配比不合理,会导致水泥品质不合格,造成资源浪费<sup>[2]</sup>。因此,研究一种简便、快速、有效的水泥成分检测方法十分关键。

目前常见的水泥成分检测方法有湿化学法、X射线荧光检测法、中子活化法、近红外(Near Infrared, NIR)光谱法等<sup>[3-6]</sup>。湿化学法对环境有害,不利于可持续发展;X射线荧光检测法在实际生产过程当中具有一定延迟,不能实时地对生产过程进行调控,难以保证水泥生料质量的稳定性;中子活化法具有放射性,会对人的身体健康造成不可逆的危害,且仪器成本较高。而近红外光谱技术具有快速、准确、无损、节约试剂和消耗成本低等优点,能够有效地检测物质成分<sup>[7-8]</sup>。

国外很多学者已开展了相关研究。2015年, Rochelle 等人通过可见光谱和近红外光谱对硅酸盐水泥制备的水泥净浆和砂浆质量进行检测,实现了快速、无损地评估检测样品质量<sup>[9]</sup>。2018年, Sangpongpitthaya 等人使用近红外光谱分析技术对混凝土样品和水泥中氢氧化钙的含量进行测量,证明了该方法可用于检测样品中的氢氧化钙含量<sup>[10]</sup>。2019年, Watanab 等人制备了不同湿度和氯离子浓度的水泥浆体样品,利用近红外光谱仪采集了样品的近红外漫反射光谱,对样品中氯和水的含量进行了分析,证明了在混凝土构件损伤恶化之前,近红外光谱分析法可以对混凝土构件中的氯离子损伤进行检测<sup>[11]</sup>。国外的水泥原材料种类少、成分稳定,因此利用定量校正模型进行水泥成分检测效果良好。但是,国外的检测模型不适合国内的水泥生料成分检测。因此,研究一种适合检测国内水泥生料的检测方法,对国内水泥检测行业的发展具有重大意义。

近年来,国内学者开始开展水泥成分的近红外光谱检测技术研究,并取得一定成就。2019年, Xiao 等人使用多元散射校正(Multiple Scattering Correction, MSC)对水泥生料的近红外光谱进行处理与分析<sup>[12]</sup>。2020年,胡荣等人利用傅里叶变换红外(Fourier Transform Infrared, FTIR)光谱结合偏最小二乘(Partial Least Squares, PLS)对水泥生料进行成分检测,为水泥检测行业提供了一种快速安全

的分析方法<sup>[13]</sup>。2022年,黄冰等人利用波段挑选法对水泥生料近红外光谱进行波段挑选,提高了模型预测的准确度<sup>[14]</sup>。综上所述,国内关于近红外光谱进行水泥生料成分检测的研究尚处于起步阶段,模型预测准确度仍需提高。

本文利用水泥生料的近红外光谱数据,研究多元散射校正、S-G平滑等光谱预处理方法和PLS、SVM等建模方法,对水泥生料中  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$  成分开展分析检测,从而得到适合水泥成分检测的近红外光谱预处理方法和检测模型,及时、准确地获得水泥生料中关键成分含量。

## 2 近红外光谱检测原理与实验

### 2.1 近红外光谱检测原理

近红外光谱分析法进行水泥生料成分检测时,主要利用材料分子的光谱特征进行成分判别,不同分子产生能级跃迁需要吸收不同的能量,即其吸收的近红外波长不同,因此不同材料分子吸收近红外光会产生不同的光谱特征;近红外光谱分析法对物质进行定量检测时,通常利用化学计量学工具提取光谱中的有效信息,分析得出待检测成分含量。

在近红外光谱检测过程中,水泥生料与检测光之间主要发生漫反射。在漫反射过程中,光源发出的光与水泥生料接触,一部分光会在物质表面发生反射直接回到检测器;另一部分光会进入物质内部,在其内部发生多次反射、折射、散射和吸收后返回物质表面。漫反射光的强度会受到样品含量、颗粒物大小、温湿度等多种因素影响,其遵守 Kubelka-Munk 方程:

$$R_{\infty} = 1 + \frac{K}{S} - \left[ \left( \frac{K}{S} \right)^2 + 2 \left( \frac{K}{S} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

其中,  $R_{\infty}$  表示近红外光的绝对漫反射率;  $S$  表示样品的散射系数,散射系数与样品的温度、样品颗粒物大小和紧实度等物理性质有关;  $K$  表示样品的吸收系数。通过 Kubelka-Munk 方程可求出水泥中近红外光的绝对漫反射率。样品的漫反射吸光度  $A$  可以通过下式计算得出:

$$A = \log \frac{1}{R_{\infty}} = -\log \left\{ 1 + \frac{K}{S} - \left[ \left( \frac{K}{S} \right)^2 + 2 \left( \frac{K}{S} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (2)$$

从上式可以看出,水泥生料的漫反射吸光度与  $K/S$  之间的关系能够通过一条经过原点的对数曲线进行表示。

## 2.2 近红外光谱检测实验

水泥生料中的主要成分包括碳酸钙、二氧化硅、氧化铝、氧化铁等,这四种氧化物在水泥生料中含量所占百分比分别为40%、13%、3.5%、2%。如图1所示,利用ABB公司MB3600型傅里叶近红外光谱仪采集96份水泥生料样品的原始光谱,波段范围为 $4000 \sim 10000 \text{ cm}^{-1}$ 。将氧化铝和氧化铁的近红外光谱图与水泥生料近红外光谱图进行比较分析,可以得知:在 $7200 \text{ cm}^{-1}$ 和 $5200 \text{ cm}^{-1}$ 附近 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 分子振动产生吸收峰,在 $4500 \text{ cm}^{-1}$ 处 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 分子和 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 分子振动产生了较弱的叠加吸收峰。

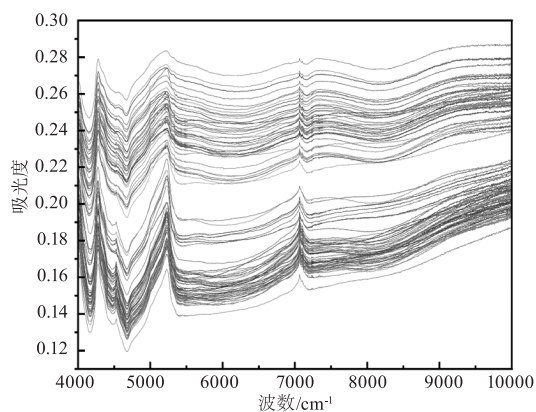


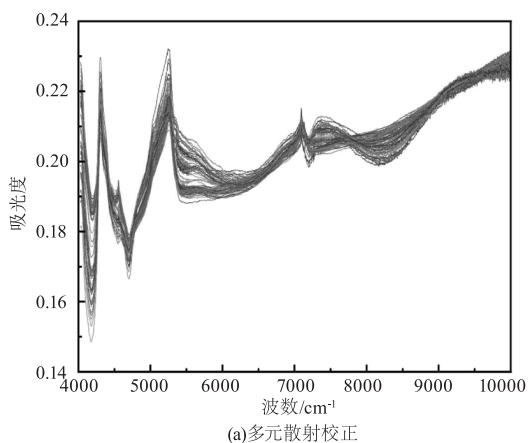
图1 未进行预处理的水泥生料近红外光谱图

Fig. 1 Near infrared spectra of cement raw meal without pretreatment

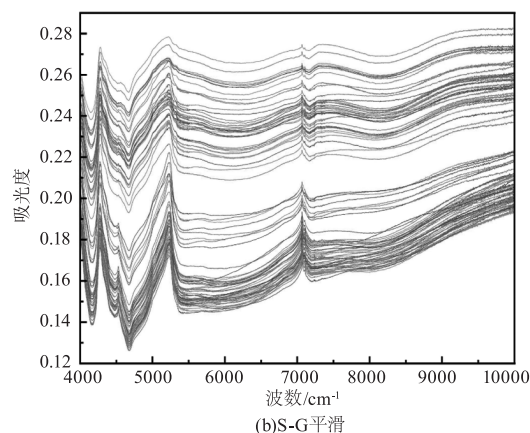
## 3 结果与讨论

### 3.1 光谱预处理

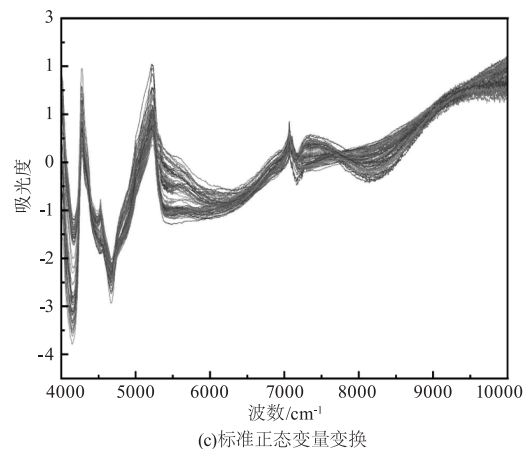
为了去除原始光谱数据中的噪声和冗余信息,本文首先针对水泥生料中的 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 和 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 的近红外原始光谱进行预处理,分别采用多元散射校正、标准正态变量变换(Standard Normal Variate, SNV)、S-G平滑以及S-G平滑和多元散射校正相结合等方法对水泥生料的近红外光谱数据进行预处理,预处理后的光谱图如图2所示



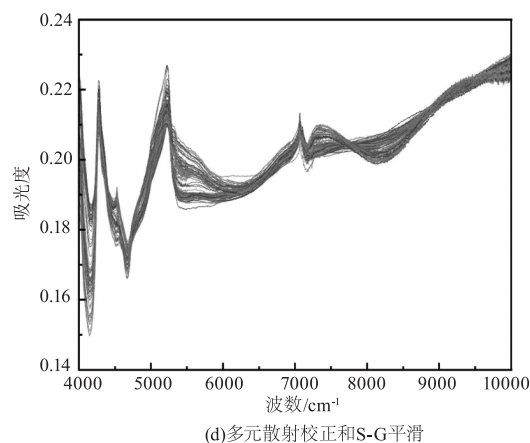
(a)多元散射校正



(b)S-G平滑



(c)标准正态变量变换



(d)多元散射校正和S-G平滑

图2 不同预处理的水泥生料近红外光谱图

Fig. 2 NIR of cement raw meal after different pretreatments

如图2(a)所示,经过多元散射校正后,水泥生料近红外光谱中基线偏差得到了校正,减弱了散射效应造成的影响;从图2(b)可以发现,经过S-G平滑后,原始光谱被去除了一部分噪声,减少了无用信息的干扰;标准正态变量变换(图2(c))对光谱数据进行了中心化和标准化处理,使得不同波长的光谱信号具有相同的方差和均值,同时消除了基线偏差,提高光谱数据的可比性;如图2(d)所示,利用多元散射校正和S-G平滑对光谱数据进行综合预处理

后的光谱图曲线更加集中,基线偏移得到了进一步校正,且消除了部分原光谱数据中的噪声。

### 3.2 样品集划分

采用联合  $X$ - $Y$  距离划分法将水泥生料的近红外光谱数据进行划分,如表 1 所示,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  和  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  样品集被分别划分为训练集和测试集两部分,其中训练集样本数为 80 个,测试集样本数为 16 个。

表 1 水泥生料样本划分

Tab. 1 Cement raw meal sample division

成分	样本集	数量	Max	Min
$\text{Al}_2\text{O}_3$	训练集	80	3.44	2.50
	测试集	16	3.34	2.66
$\text{Fe}_2\text{O}_3$	训练集	80	2.12	1.78
	测试集	16	2.10	1.94

### 3.3 偏最小二乘回归(PLS)建模

本文首先对水泥生料中  $\text{Al}_2\text{O}_3$  成分利用 PLS 进行建模,分别采用未预处理、多元散射校正、S-G 平滑以及多元散射校正和 S-G 平滑相结合进行近红外光谱预处理,得到测试集中预测值和真实值的对比结果如图 3 所示。

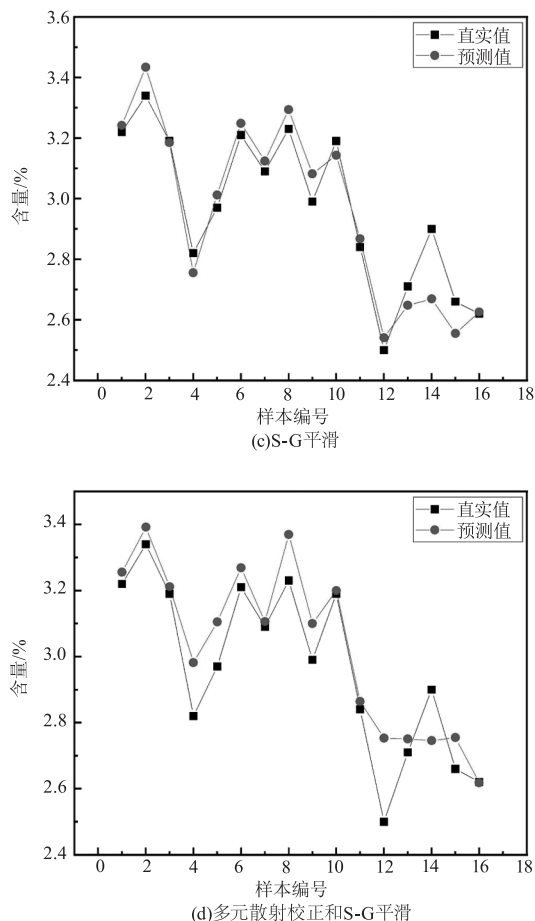
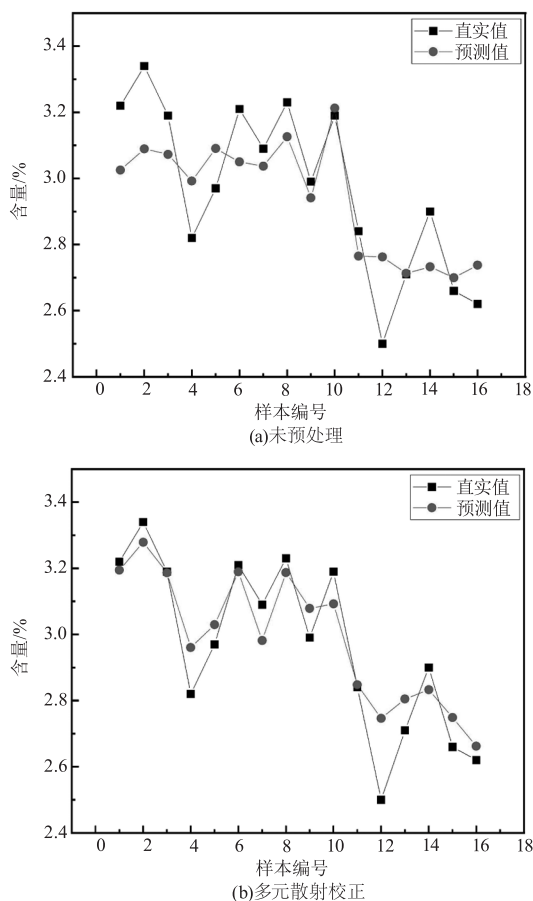


图 3  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的 PLS 建模预测值与真实值对比图

Fig. 3 Comparison between  $\text{Al}_2\text{O}_3$  predicted values by PLS and real values

从图 3 (a) 可以看出,由于原光谱数据未经预处理,水泥生料颗粒造成的散射效应、光谱干扰和噪声导致预测结果与真实值结果拟合程度较差,预测结果与真实值之间有一定差距,其中预测结果的平均误差为 0.12%,最大误差为 0.26%,最小误差为 0.0027%;经多元散射校正预处理后预测结果的平均误差为 0.075%,最大误差为 0.246%,最小误差为 0.004%,如图 3 (b) 所示;经 S-G 预处理后预测结果的平均误差为 0.061%,最大误差为 0.231%,最小误差为 0.004%,如图 3 (c) 所示;经 MSC 和 S-G 平滑综合预处理后预测结果的平均误差为 0.079%,最大误差为 0.272%,最小误差为 0.008%,如图 3 (d) 所示。

表 2 展示了不同预处理方法下采用偏最小二乘回归建模的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  预测结果。经过 MSC 预处理后预测结果的  $R^2$  提高了 26.3%,RMSECV 减小了 58.4%;经过 MSC 和 S-G 平滑后的预测结果比未进行预处理的预测结果  $R^2$  提高了

23.8 % ,RMSECV 增加了 59.4 % ;经过 S-G 平滑后预测结果,  $R^2$  提高了 32.2 % ,但 RMSECV 和 RMSEP 均有所增加。综上所述,采用 S-G 平滑预处理后的光谱数据进行偏最小二乘建模时,模型预测性能最佳。

表 2 不同预处理方法下采用 PLS 建模的  $Al_2O_3$  预测结果

Tab.2 Prediction results of  $Al_2O_3$  under different pretreatment methods using PLS

处理方法	RMSECV	RMSEP	$R^2$	因子数
None	0.202	0.126	0.677	7
MSC	0.084	0.156	0.855	7
MSC + S - G 平滑	0.322	0.089	0.838	9
S-G 平滑	0.312	0.072	0.895	10

同理,分别采用未预处理、多元散射校正、S-G 平滑以及多元散射校正和 S-G 平滑相结合的预处理方法对水泥生料中的  $Fe_2O_3$  成分进行 PLS 建模。图 4 展示了模型预测值和真实值的对比图。

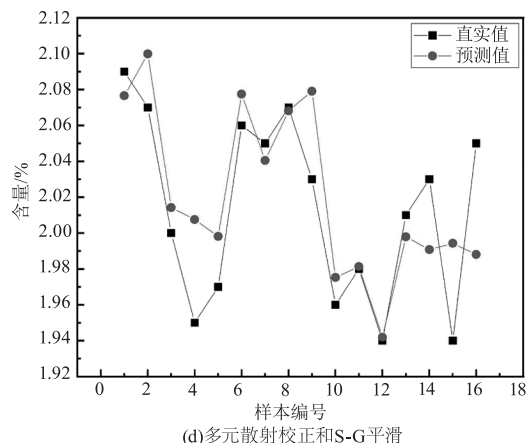
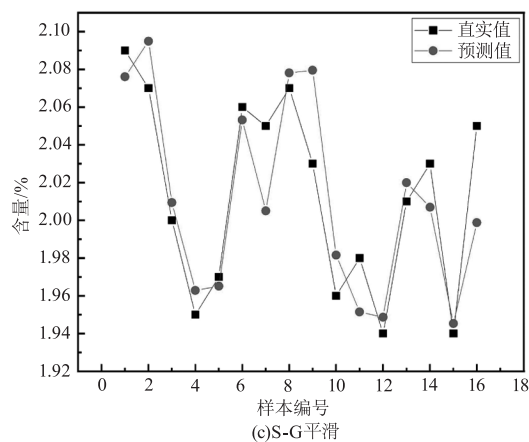
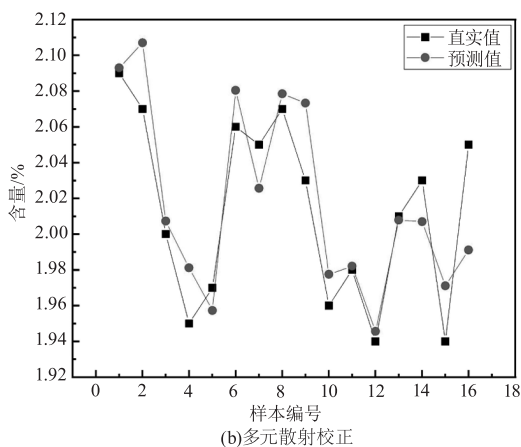
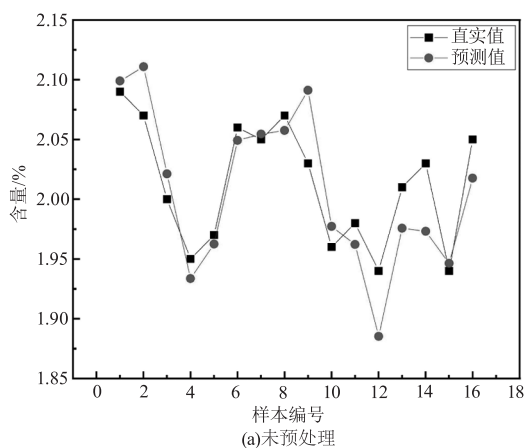


图 4  $Fe_2O_3$  的 PLS 建模预测值与真实值对比图  
Fig. 4 Comparison between  $Fe_2O_3$  predicted values by PLS and real values

从图 4(a)可以看出,样本未预处理的部分预测值和真实值比较接近,但其余样本的预测值与真实值有较大差距,整体拟合程度较差,其中预测结果的平均误差为 0.025 % ,最大误差为 0.061 % ,最小误差为 0.004 % 。从图 4(b) ~ (d)可以看出,预处理后的  $Fe_2O_3$  光谱数据所建立的 PLS 预测模型,虽然预测结果与真实值之间有一定差距,但整体效果优于未经预处理的光谱数据。其中,经 MSC 预处理后预测结果的平均误差为 0.021 % ,最大误差为 0.059 % ,最小误差为 0.002 % ;经 S-G 平滑预处理后预测结果的平均误差为 0.020 % ,最大误差为 0.051 % ,最小误差为 0.005 % ;经 MSC 和 S-G 平滑综合预处理后预测结果的平均误差为 0.025 % ,最大误差为 0.062 % ,最小误差为 0.001 % 。

不同预处理方法下采用偏最小二乘回归建模的  $Fe_2O_3$  的预测结果,如表 3 所示。从表 3 中可以看出,经过 MSC 预处理后预测结果的  $R^2$  提高了 21.1 % ,RMSECV 减小了 28.7 % ,RMSEP 减小了



17.9% ; 经过 S-G 平滑后预测结果的  $R^2$  提高了 23.4% , 但 RMSECV 增加了 23.3% ; 经过多元散射校正和 S-G 平滑后的预测结果  $R^2$  却降低了。整体来看,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  的预测结果  $R^2$  均在 0.8 以下, 低于  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的  $R^2$ , 这是因为  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  在水泥生料中的含量最低, 且变化范围最小, 因此  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  的偏最小二乘模型决定系数  $R^2$  较小, 并且预测结果的绝对误差仍在允许的区间范围内, 具有良好的预测结果。综合分析可以得出, 采用 S-G 平滑预处理后的光谱数据进行偏最小二乘建模, 得到的模型预测性能最佳。

表 3 采用偏最小二乘回归建模的不同预处理方法下的预测结果

Tab. 3 Prediction results of  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  under different pretreatment methods using PLS

处理方法	RMSECV	RMSEP	$R^2$	因子数
None	0.073	0.028	0.593	9
MSC	0.052	0.023	0.718	9
S-G 平滑	0.090	0.023	0.732	10
MSC + S-G 平滑	0.101	0.029	0.561	5

### 3.4 支持向量回归(SVM)建模

为确定水泥生料成分的最佳建模方法, 本文使用支持向量回归(SVM)对水泥生料的近红外光谱数据进行再一次建模。

如图 5 所示, 分别采用未预处理和 S-G 平滑后的近红外光谱数据对  $\text{Al}_2\text{O}_3$  成分进行 SVM 建模, 得到测试集中预测值和真实值的对比图。从图 5 可以看出, 光谱数据经 S-G 平滑处理后, 模型的预测结果和真实值之间具有更好的拟合效果。其中, 未经预处理得到预测结果的平均误差为 0.102% , 最大误差为 0.354% , 最小误差为 0.004% ; 经 S-G 平滑预

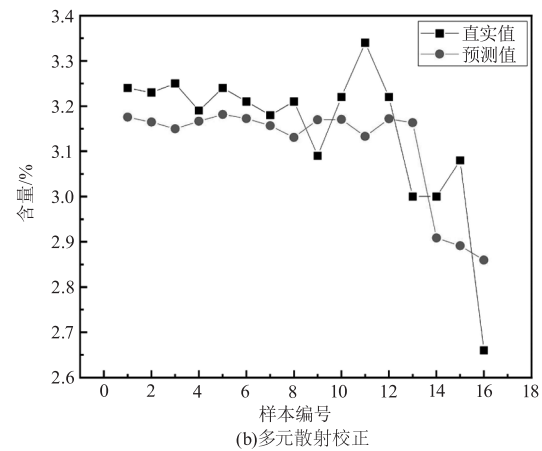
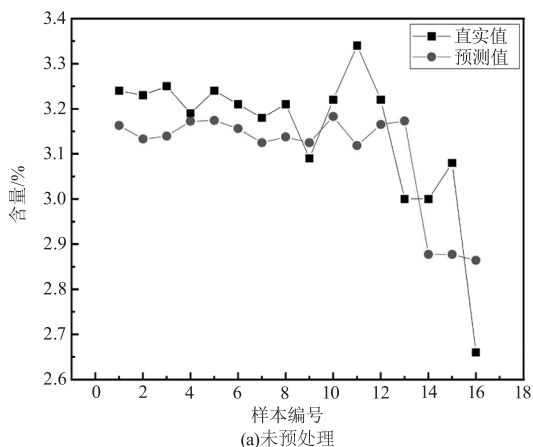


图 5  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的 SVM 建模预测值与真实值对比图

Fig. 5 Comparison between  $\text{Al}_2\text{O}_3$  predicted values by SVM and real values

处理得到预测结果的平均误差为 0.090% , 最大误差为 0.223% , 最小误差为 0.003% 。综合评价得出, S-G 平滑后模型预测结果更佳。

表 4 展示了不同预处理方法下采用 SVM 建模的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的预测结果。从表 4 中可以看出, 经 S-G 平滑处理后建立的 SVM 模型预测结果要优于未经预处理的模型预测结果。经 S-G 平滑后预测结果的  $R^2$  提高了 14.2% , RMSEP 降低了 21.8% 。因此, 相较于未进行预处理的近红外光谱, 采用 S-G 平滑预处理后的光谱数据进行支持向量回归建模得到的模型预测性能更好。

表 4 不同预处理方法下采用 SVM 建模的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  预测结果

Tab. 4 Prediction results of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  under different pretreatment methods using SVM

预处理方法	RMSECV	RMSEP	$R^2$
None	0.232	0.133	0.730
S-G 平滑	0.387	0.104	0.834

同理, 选用未预处理、多元散射校正、S-G 平滑和标准正态变量变换的方法分别对水泥生料  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  近红外光谱进行 SVM 建模。图 6 展示了 SVM 模型  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  的预测值和真实值的对比图。

由图 6(a) 和 6(b) 可以看出, S-G 平滑处理后模型整体性能要优于未经预处理前, 其中, 未经预处理得到预测结果的平均误差为 0.025% , 最大误差为 0.060% , 最小误差为 0.001% ; 经 S-G 平滑预处理得到的预测结果的平均误差为 0.025% , 最大误差为 0.051% , 最小误差为 0.002% 。从

图 6(c) 和 6(d) 可以看出, MSC 和 SNV 预处理后模型预测结果和真实值差距较大, 拟合程度较低, 其中, 经 MSC 预处理得到预测结果的平均误差为 0.033%, 最大误差为 0.1%, 最小误差为 0.002%; 经 SNV 平滑预处理得到的预测结果的平均误差为 0.041%, 最大误差为 0.12%, 最小误差为 0.003%。综上, MSC 和 SNV 两种预处理方法和 SVM 建模结合得到的预测结果较差, S-G 平滑后模型预测结果更佳。

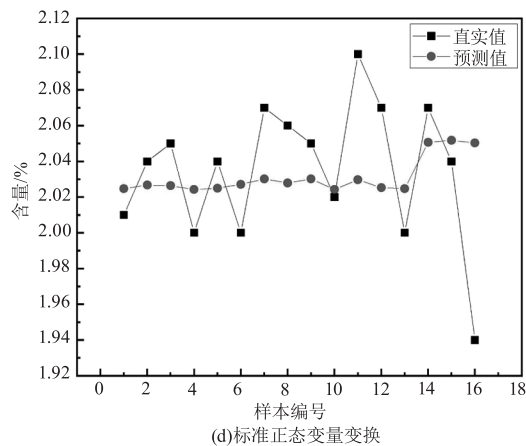
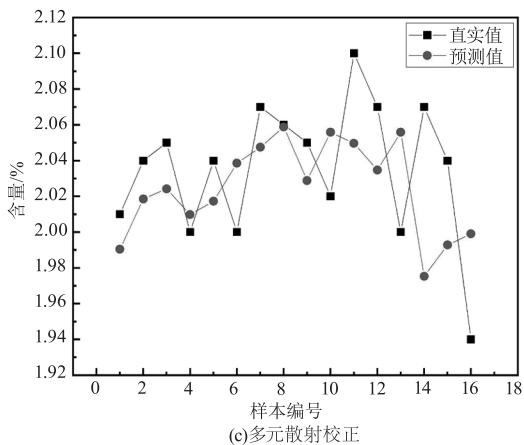
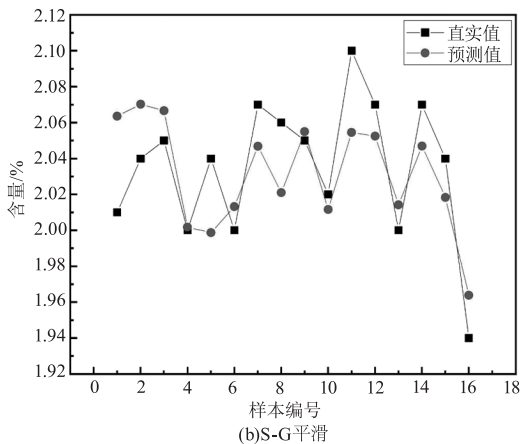
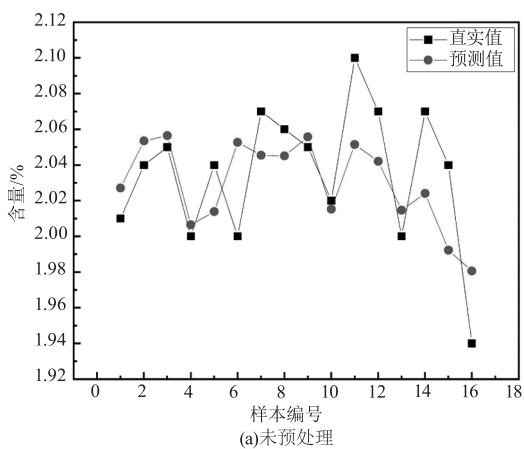


图 6 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的 SVM 建模预测值与真实值对比图

Fig.6 Comparison between Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> predicted values by SVM and real values

表 5 展示了不同预处理方法下采用 SVM 建模的 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 预测结果。从表 5 中可以看出, 利用 S-G 平滑处理和支持向量回归模型得到的预测结果要优于未经预处理的模型。经 S-G 平滑预处理后 R<sup>2</sup> 提高了 8.2%, RMSEP 基本不变, RMSECV 提高了 30.1%。MSC 预处理和 SNV 预处理后建立的支持向量回归模型的预测结果却不及未经预处理的近红外光谱数据所建立的模型预测结果, 其原因是 MSC 和 SNV 预处理虽然能减小水泥生料中颗粒物对散射效应的影响, 但同时也消去了一部分光谱数据中的重要特征部分, 导致建立数学模型训练效果变差, 预测结果变差。综上分析可以得出, 采用 S-G 平滑预处理后的光谱数据进行支持向量回归建模, 得到的模型预测性能最好。

表 5 不同预处理方法下采用 SVM 建模的 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的预测结果

Tab.5 Prediction results of Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> under different pretreatment methods using SVM

预处理方法	RMSECV	RMSEP	R <sup>2</sup>
None	0.064	0.030	0.626
S-G 平滑	0.119	0.028	0.660
MSC	0.101	0.041	0.301
SNV	0.040	0.100	0.344

#### 4 结论

本文通过近红外光谱技术对水泥生料中 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的成分含量进行了有效检测, 采用联合 X-Y 距离划分法对收集到的水泥生料近红外光谱数据进行样品集划分, 利用多元散射校正

MSC、S-G 平滑等方法进行光谱预处理,对水泥生料的近红外光谱数据进行偏最小二乘回归建模和支持向量回归建模,建立了水泥生料中  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Fe}_2\text{O}_3$  成分的预测模型。研究发现经过 S-G 平滑预处理后,偏最小二乘回归建模得到的  $\text{Al}_2\text{O}_3$  和  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  预测模型检测精度较高, $\text{Al}_2\text{O}_3$  检测模型的决定系数  $R^2$  为 0.895,预测均方根误差 RMSEP 为 0.072; $\text{Fe}_2\text{O}_3$  检测模型的决定系数  $R^2$  为 0.732,预测均方根误差 RMSEP 为 0.023。该研究方案有效地实现了水泥生料成分的快速检测,发展了水泥行业的检测分析方法,促进了水泥生产质量的进一步提升。

#### 参考文献:

- [1] Ali M B, Saidur R, Hossain M S. A review on emission analysis in cement industries[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2011, 15(5): 2252 - 2261.
- [2] Elmrabet R, Hmidani Y, Mariouch R, et al. Influence of raw meal composition on clinker reactivity and cement properties[J]. *Materials Today: Proceedings*, 2021, 45: 7680 - 7684.
- [3] Ylmén R, Jäglid U. Carbonation of portland cement studied by diffuse reflection fourier transform infrared spectroscopy[J]. *International Journal of Concrete Structures and Materials*, 2013, 7(2): 119 - 125.
- [4] Rad S Z I, Peyvandi R G. An optimal experimental-monte carlo combined model for analyzing of the cement raw by prompt Gamma neutron activation[J]. *Russian Journal of Nondestructive Testing*, 2018, 54(6): 448 - 454.
- [5] Stutzman P, Heckert A, Tebbe A, et al. Uncertainty in bogue-calculated phase composition of hydraulic cements[J]. *Cement and Concrete Research*, 2014, 61 - 62: 40 - 48.
- [6] Casian T, Iurian S, Gavan A, et al. Near infrared spectroscopy for content uniformity of powder blends-focus on calibration set development, orthogonality transfer and robustness testing[J]. *Talanta*, 2018, 188: 404 - 416.
- [7] Rebouças J P, Rohwedder J J R, Pasquini C. Near infrared emission spectroscopy for rapid compositional analysis of Portland cements[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2018, 1024: 136 - 144.
- [8] Meer F V D. Near-infrared laboratory spectroscopy of mineral chemistry: a review[J]. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 2018, 65: 71 - 78.
- [9] Schneider Dos Santos R, Rolim S B A, HeppPulgati F. Application of visible and near infrared spectroscopy in non-destructive evaluation of cement materials[J]. *International Journal of Remote Sensing*, 2015, 36(3): 917 - 938.
- [10] Sangpongpitthaya T, Christy A A, Thorstensen R T. Quantitative determination of calcium hydroxide by using near-infrared spectroscopy[J]. *Key Engineering Materials*, 2018, 765: 300 - 304.
- [11] Watanabe A, Furukawa H, Miyamoto S, et al. Non-destructive chemical analysis of water and chlorine content in cement paste using near-infrared spectroscopy[J]. *Construction and Building Materials*, 2019, 196: 95 - 104.
- [12] Xiao H, Yang Z, Zhang L, et al. Compositional analysis of cement raw meal by near-infrared(NIR) spectroscopy[J]. *Analytical Letters*, 2019, 52(18): 2931 - 2937.
- [13] Hu Rong, Liu Wenqing, Xu Liang, et al. Online analysis method of cement raw materials based on Fourier transform infrared spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2020, 40(1): 41 - 47. (in Chinese)  
胡荣, 刘文清, 徐亮, 等. 傅里叶变换红外光谱的水泥生料在线分析[J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(1): 41 - 47.
- [14] Huang Bing, Wang Xiaohong, Jiang Ping. Research on detection of cement raw material content based on near-infrared spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2022, 42(3): 737 - 742. (in Chinese)  
黄冰, 王孝红, 蒋萍. 基于近红外光谱检测技术的水泥生料成分含量检测研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2022, 42(3): 737 - 742.