近红外光谱的苹果内部品质在线检测模型优化

郭志明[1,2]，黄文倩[2]，陈全胜[1]，彭彦昆[3]，赵杰文[1]
（1.江苏大学食品与生物工程学院，江苏镇江 212013）（2.国家农业智能装备工程技术研究中心，北京 100097）
（3.中国农业大学工学院，北京 100083）

摘要：利用近红外光谱技术在线检测水果内部品质的关键是获取精度高稳健性好的定量分析模型。研究开发了短波近红外光谱苹果品质在线检测系统，试验时苹果样本传输速度为 5 个/s，以漫反射方式采集，有效光谱范围为 500~1100 nm。经光谱强度标准化校正后，有比较的采用遗传算法、连续投影算法和蚁群优化算法等提取特征变量，分别建立偏最小二乘模型，同时分析了这三种方法提取光谱特征变量的搜索机制。特征变量提取方法建立的预测模型所用变量显著减少，预测效果均优于全光谱模型，且能提高运算速度，增强模型的稳健性；其中又以蚁群优化算法的模型预测能力最佳，预测集相关系数 R 为 0.9358，预测均方根误差 RMSEP 为 0.2619。研究结果表明，近红外光谱结合特征变量提取方法可以建立高效的苹果可溶性固形物含量在线检测模型，在产业化应用方面具有很大潜力。

关键词：近红外光谱；在线检测；特征提取；蚁群优化算法；遗传算法；连续投影算法
文章篇号：1673-9078(2016)9-147-153 DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2016.9.022

Model Optimization for the On-line Inspection of Internal Apple Quality by Shortwave Near-infrared Spectroscopy

GUO Zhi-ming[1,2], HUANG Wen-qian[2], CHEN Quan-sheng[1], PENG Yan-kun[3], ZHAO Jie-wen[1]
(1.School of Food and Biological Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013 China) (2. National Engineering Research Center of Intelligent Equipment for Agriculture, Beijing 100097 China) (3. College of Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083 China)

Abstract: The critical part in the application of near-infrared (NIR) spectroscopy for the on-line inspection of internal fruit quality is to build quantitative analysis models with good robustness and high accuracy. A system based on shortwave NIR spectroscopy for on-line inspection of apple quality was developed. The spectra were collected in diffusion reflectance mode within the wavelength range of 500~1100 nm, and the conveyor belt speed was fixed to five samples per second. After the band intensity was normalized, genetic, successive projection, and ant colony optimization (ACO) algorithms were employed to select characteristic variables, following which the respective corresponding partial least square (PLS) models were constructed, and the spectral variable search mechanisms of these three methods were analyzed. Compared with the full spectral model, the predictive models built on the variable selection methods all exhibited better predictive performance with fewer variables, improved computational speed, and enhanced robustness. The best predictive performance was found in the model built using ACO-PLS, where the correlation coefficient of the prediction set was 0.9358 and the root mean square error of prediction was 0.2619 °Bx. The results of this study demonstrate that NIR combined with variable selection methods can build an efficient model for the on-line determination of the apple soluble solid content, and has great potential for industrial application.

Key words: near-infrared spectroscopy; on-line inspection; feature selection; ant colony optimization; genetic algorithm; successive projection algorithm

收稿日期：2015-03-12
基金项目：国家自然科学基金项目（31501216）；国家科技支撑计划（2015BAD19B03）；江苏大学高级人才基金(15JDG169)；江苏省自然科学基金项目(BK20150502)
作者简介：郭志明(1982-)，男，博士，讲师，研究方向：食品品质与安全的光电检测技术与装备
通讯作者：陈全胜（1973-），男，教授，博士生导师，研究方向：食品、农产品快速无损检测技术与装备

近红外光谱是分子振动光谱的倍频和合频吸收谱，包含样品中有机分子含氢基团的特征信息，适于碳氢有机物成分和特性的分析评价。近红外光谱技术与传统分析方法相比，具有不破坏样品和一般不需预处理的显著优势，适合于现场快速分析和在线检测[1~3]，已在许多领域得到应用，产生了巨大的经济效益。

随着近红外光谱技术研究的不断深入，如在农产品无损检测方面，特别是水果品质检测[4~6]，研究已从实验室研究型近红外光谱仪到便携式光谱仪的水果内部品质的建模方法研究；从建模的鲁棒性和泛化能力评价到影响因素分析；从产中检测以确定最佳的采摘期和货架期到采后品质检测及在线品质检测。以技术的实际应用为导向，提高检测的速度，提升检测结果的稳定性和适用性成为当前研究的热点。

随着人们生活水平的提高，水果选择已从注重外观转向口感、营养和功能。水果的可溶性固形物含量(soluble solids content，SSC)，是水果最重要的内部品质指标。依据水果的内部品质分级，可提高水果行业的竞争力和盈利能力，并确保消费者满意度[7]。为满足水果生产、加工和消费需求，研究水果内部品质的快速在线检测具有重要意义。国内外许多学者开展近红外光谱的苹果可溶性固形物含量检测，但以静态检测方法研究为主[8~11]，在线检测的研究不多[12,13]。Steinmetz 等[14]利用近红外光谱和图像融合技术在线预测苹果的可溶性固形物含量，将苹果分成甜和不甜两个类别的准确率为 72%。McGlone 等[15]采用两种光谱系统分别获取运动速度 500 mm/s 苹果的透射光谱，建立干物质含量的预测模型，结果表明透射模式进行运动水果测量是可行的。Mendoza 等[16]在线获取苹果的可见短波近红外高光谱散射数据，融合光谱的连续小波变换和图像统计量建立的苹果可溶性固形物含量和硬度模型比单独光谱建立的模型有所提高。孙旭东等[17]研究发现选择合适的样品运动速度和光谱仪可提高苹果可溶性固形物在线检测的精度，建立的最优预测模型的相关系数为 0.814。欧阳爱国等[18]采用移动窗口偏最小二乘法和遗传算法相结合优选光谱变量建立了苹果可溶性固形物含量校正模型，模型的预测均方根误差为 0.70 °Brix。

综合已有研究报道发现，苹果可溶性固形物含量的在线检测模型预测效果不佳；采用全谱建模或变量筛选方法，但选择机制和结果比较分析较少。获取精度高稳健性好的定量分析模型成为当前近红外光谱技术在线检测水果内部品质的关键。随着光谱获取技术和化学计量学的快速发展，光谱特征变量选择方法应用不断拓宽，新方法不断涌现[19]。在线获取的光谱信息常含有噪声信息或无关信息，非常有必要提取光谱的特征变量以简化模型。本文以苹果为研究对象，拟通过对遗传算法、连续投影算法和蚁群优化算法等特征变量提取方法性能的比较研究，建立具有稳健性好、检测速度快的短波近红外光谱苹果品质在线检测系统，推进苹果品质的近红外在线检测应用。

1 材料与方法

1.1 实验材料

试验用苹果为烟台红富士，所选苹果无外部缺陷和污染物，果形正常，着色较理想，果径 75~80 mm，符合 GB/T 10651-2008 优等品标准。苹果样本分 3 批选于当地水果市场，共计样本 380 个，从中随机选取 200 个样本作为校正集，其余 180 个样本作为预测集。试验前，将苹果样品依次编号，置于实验室内（20 ℃，相对湿度 50%）12 h，使苹果样本整体温度与环境温度一致，并在试验过程保持实验室温湿度基本不变。

1.2 光谱采集系统

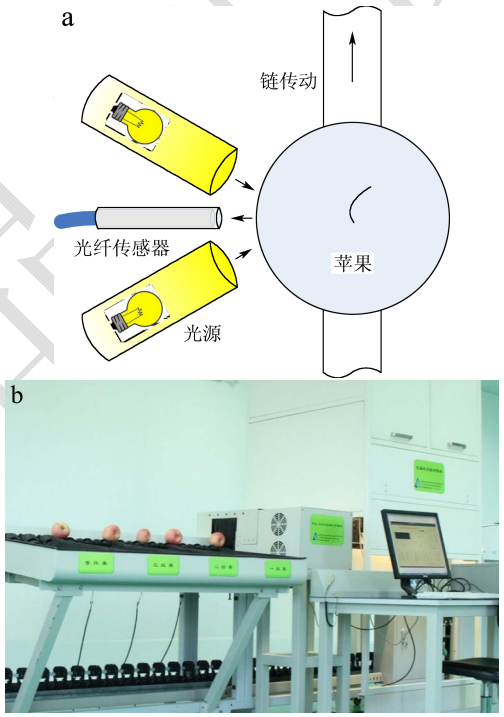


图 1 苹果品质在线检测系统的示意图(a)和实物图(b)

Fig.1 Schematic diagram (a) and image (b) of the spectral on-line measurement system

针对苹果皮薄多汁的特性，设计了短波近红外光谱苹果品质在线检测系统，图 1 为检测模块示意图和检测系统实物图。近红外光谱苹果品质在线检测系统包括输送装置、光谱检测模块和分级机构、检测软件及工控机等。其中光谱检测模块包括（1）商业化、低成本、小型化、无移动部件的光纤光谱仪（Ocean Optics Inc.，USA），为 2048 像素线阵硅探测器，光栅为 14#，有效光谱范围为 500~1100 nm，光纤选用芯径 600 μm 石英光纤，SMA 905 标准接口；（2）两个 12 V 50 W 卤钨灯（Philips，上海），定制光源遮光筒，以消除苹果表面镜面反射光的干扰；光源位于输送线的同侧，

夹角 90 °，探测光纤位于两光源的中间，如图 1(A)所示；（3）光电传感器（Omron，上海），用于触发 CCD 光纤光谱仪自动采集苹果样本的漫反射光谱。试验时光谱仪积分时间设为 60 ms，平滑点数 11；苹果样本传输速度为 5 个/s，由变频器和异步电动机调制实现。光谱采集过程，当苹果样本传输到触发控制点时，触发光谱仪开始采集，光谱采集的范围为在积分时间内行进的苹果条带状区域，在积分时间完毕时，停止光谱采集。为尽量消除杂散光的影响，光谱检测模块封装在内部为哑光材料的箱体内，避免外界光的干扰，同时消除箱体内强的反射光。近红外光谱水果品质检测软件采用 Visual C++自行编写，实现光谱的自动采集、数据处理、存储、可溶性固形物含量预测和分级指令输出等功能。

1.3 可溶性固形物含量测定

苹果样本的可溶性固形物采用 ARIAS 500 型半自动阿贝折光仪(Reichert Inc.，USA)测定，方法参照 GB10651-2008 执行。用水果刀削取赤道部位果肉，厚度控制在 5 mm 左右，然后用双层纱布挤滤出汁液 2 滴用于检测，测定时温度自动补偿为 20 ℃的可溶性固形物含量值（Brix°），作为近红外光谱在线检测苹果样本可溶性固形物的标准值。表 1 列出了苹果可溶性固形物测定的各统计量。

表 1 校正集和预测集苹果糖度的统计结果

Table 1 Statistics of the sugar content (°Bx) for the calibration and prediction sets

样本集	样本数	糖度区间	均值	标准偏差
校正集	200	12.39~15.73	13.78	0.77
预测集	180	12.53~15.46	13.80	0.69

1.4 数据处理与模型评价

采用 Matlab 进行数据处理，分别选用遗传算法、连续投影算法和蚁群优化算法等特征变量选择工具包在 Matlab 环境下完成；校正模型建立与预测由 PLS_toolbox 工具箱完成。模型的评价使用相关系数（R）、校正均方根误差（RMSEC）和预测均方根误差（RMSEP）。模型的相关系数越高，误差越小，表明校正模型的性能越好。

2 结果与讨论

2.1 光谱标准化处理

近红外光谱在线检测线上，苹果的大小和姿态直接影响光谱采集的光程。在各采集参数确定的条件下，光程的变化必然引起光谱强度的较大波动，影响测定精度。在线检测过程，以聚四氟乙烯白板为固定标准参比的方式计算光谱反射率会产生计算偏差。前期研究发现，光纤光谱仪稳定状态下，光谱的响应强度与积分时间成正比，与光程成反比，积分时间与光程之间线性负相关。研究采用光谱强度标准化校正（Intensity normalization correction，INC）[20,21]以消除样本与光纤传感器间距离变化的影响。首先去掉光谱暗噪声 $I_0=I_{sample,\lambda}-I_{dark,\lambda}$，然后做标准化变换 $I_{norm}=[I_{0,\lambda}-\min(I_0)]/[\max(I_0)-\min(I_0)]$，并调整光谱强度在一定范围内，最后以吸光度光谱 $A=\log(1/I_{norm})$的形式表示，如图 2 所示。图中可以看出在 600~750 nm 波段范围存在一些波峰和波谷，750~900 nm 波段范围样本间光谱差异不大。在建模前对样本的异常值进行检验。另外，对光谱进行了预处理，包括 Savitzky-Golay 平滑，多元散射校正（MSC）、标准变量变换（SNV）和导数处理，用于消除基线漂移、背景干扰或增强信号，研究发现对模型的预测效果提高很微弱或降低预测效果。因光谱两端信噪比较低，选取 500~100nm 共 1840 个变量，以 INC 变换的光谱用于后期处理。

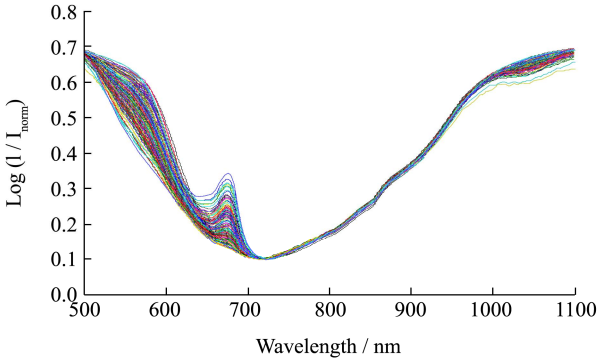


图 2 强度校正后的可见近红外光谱图

Fig.2 Vis/NIR diffuse reflectance spectra after intensity normalization

2.2 特征变量选取

2.2.1 遗传算法

遗传算法（Genetic Algorithm，GA）是模拟生物进化过程遗传选择和自然淘汰的优化计算模型。遗传算法包括遗传编码、适用度函数设计、产生初始群体、选择、交叉、变异等[22]。研究采用遗传算法选择光谱的特征变量，结合偏最小二乘法（Partial Least Squares，PLS）使用，以 PLS 交互验证中因变量的预测值和实际值间均方根误差作为遗传算法的适应度函数。GA 运算时各参数设置为：初始群体大小为 50，每 5 个变量作为一个染色体，交叉概率为 0.5，变异概率为 0.01，后向逐步迭代次数为 100 次，迭代终止后将被选变量

频数由高向低逐一顺序加入 PLS 模型中，以最小的校正均方根误差 RMSEC 值确定最佳的建模变量数。

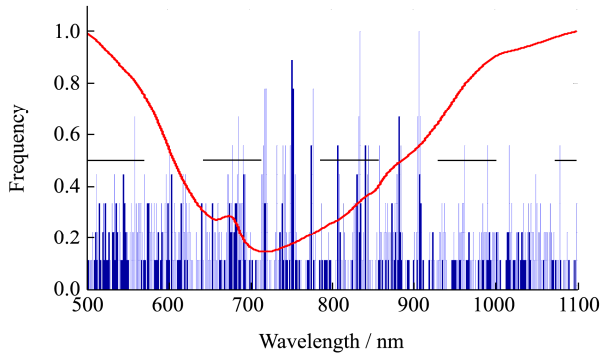


图 3 遗传算法选择的特征光谱变量

Fig.3 Characteristic spectral variables selected by the genetic algorithm

遗传算法在执行过程中，因初始群体的选取和遗传算子的选择、交叉及变异过程具有一定的随机性，研究进行了多次运算，发现高频选择的点具有一定的一致性。图3所示为其中一次运算过程各波长点被选择的频次，本研究频次超过0.5的变量的入选最终模型。GA-PLS最优模型的校正集的相关系数R_c和校正均方根误差*RMSEC*分别为0.9256和0.3082，预测集的相关系数R_p和预测均方根误差*RMSEP*分别为0.9146和0.3175。与全光谱模型相比，该模型采用的变量数由1840减少到了39个，在保证精度的前提下大大简化了模型，说明GA选择的变量与苹果可溶性固形物含量相关性较高，可以表征苹果可溶性固形物的含量。

2.2.2 连续投影算法

连续投影算法（Successive Projections Algorithm，SPA）是一种使矢量空间共线性最小化的前向变量选择算法，能够有效消除光谱中众多变量间的共线性影响，从严重重叠的光谱信息中提取有效信息，减少建模所用变量的个数，降低模型的复杂度，提高建模效率和速度[23]。采用 SPA 对在线获取的苹果短波近红外光谱数据进行特征变量选取，以 PLS 建立模型并交叉验证。SPA 运行时设定最小特征变量数为 15，最大特征变量数为 30，根据交互验证均方根误差 RMSECV 值确定最佳的建模变量数。应用 SPA 方法，从 1840 个光谱中筛选出 24 个变量，建立了 SPA-PLS 模型。SPA 变量选择结果如图 4 所示，可以发现，选择的变量大多处于短波近红外区域，说明苹果可溶性固形物含量的测定该波段起到了比较大的作用。SPA-PLS 最优模型的校正集的相关系数 R_c 和校正均方根误差 *RMSEC* 分别为 0.9244 和 0.3105，预测集的相关系数 R_p 和预测均方根误差 *RMSEP* 分别为 0.9175 和 0.3123。特征变量优选后大大减少参与建模变量数，说明光谱信息得到了充分的利用，同时克服了光谱数据与成分含量的多重线性关系的影响。

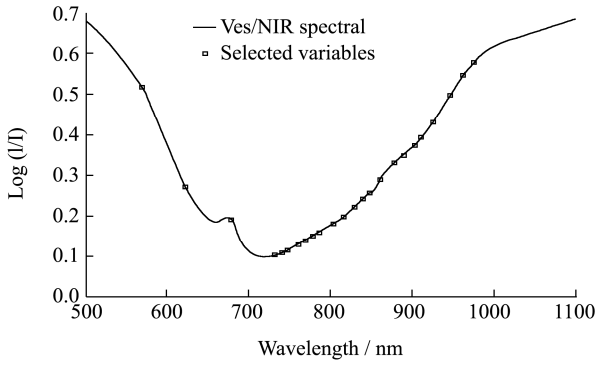


图 4 连续投影算法选择的特征光谱变量

Fig.4 Characteristic spectral variables selected by the successive projection algorithm

2.2.3 蚁群优化算法

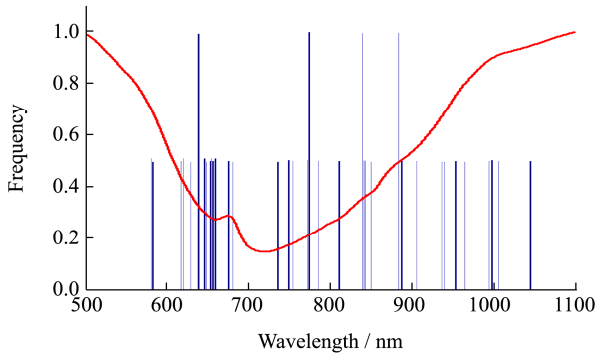


图 5 蚁群优化算法选择的特征变量

Fig.5 Characteristic spectral variables selected by the ant colony optimization algorithm

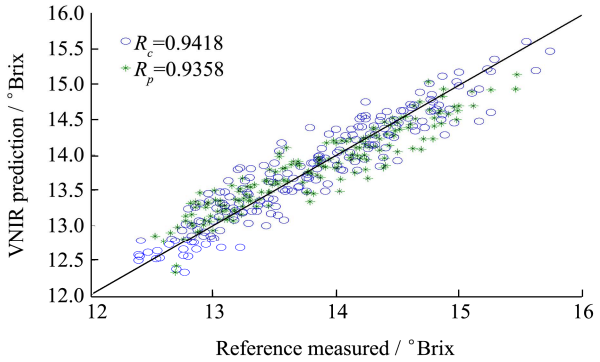


图 6 蚁群优化算法建立模型的散点图

Fig.6 Comparison of predicted and measured SSC values by the ACO-PLS models

蚁群优化算法（Ant Colony Optimization，ACO）是模拟自然界中蚁群觅食行为的一种进化算法。蚂蚁在觅食路径上能释放一种称为信息素（Pheromone）的特有分泌物，蚂蚁个体间正是通过信息素传递信息，从而相互协作，完成觅食过程路径最优的复杂任务。蚁群优化算法根据蚂蚁间的这种信息交互更新路径上

信息素含量，从而实现智能搜索和参数优化。蚁群优化算法具有分布计算、信息正反馈、全局寻优和贪婪启发式搜索的特征，在求解多种组合优化问题中得到广泛应用。近红外光谱特征变量中含有冗余信息和无关信息，光谱特征变量的选择组合也是一组合优化问题[24]。采用 ACO 对在线获取的苹果短波近红外光谱数据进行特征变量选取，以PLS 建立模型并交叉验证。

ACO-PLS 算法中的更新协作机制、目标函数选取同文献[25]。以在线获取的苹果可见近红外光谱全部波长点作为选择对象，利用 ACO 选择特征波长组合，算法的各参数经多次试验确定。ACO 运算时初始群体大小、迭代次数、循环次数分别设置为 50、50 和 20，波长选择概率阈值为 0.4，目标函数中显著性因子为 0.01。另外，信息素衰减系数 ρ 取为 0.65，因信息素衰减系数 ρ 直接影响着算法收敛的速度，太大或太小都不利于信息的有效传递。蚁群优化算法运行的波长点选择频次如图 5 所示，高频被选的波长点主要有 638 nm、772 nm、839 nm 和 882 nm 等 37 个变量，可解释为这些波长点与可溶性固形物相关程度较高。

利用蚁群优化算法提取了37个特征变量，建立PLS模型的校正集相关系数Rc为0.9418，校正均方根误差*RMSEC*为0.2585，预测集相关系数R_p为0.9358，预测均方根误差*RMSEP*为0.2619。可见分析模型的*RMSEC*和*RMSEP*比较接近，且相关系数较高，表明分析模型具有较好的适用性。图6为ACO-PLS模型校正集和预测集的预测值与参考值之间的散点图。ACO-PLS模型采用的变量数仅为全谱变量的2.01%，说明蚁群优化算法适用于可见近红外光谱特征变量选取，解决苹果可溶性固形物含量与光谱变量间的组合优化问题。

2.3 模型结果比较

表 2 不同苹果糖度预测模型的结果比较

Table 2 Calibration and prediction results for the sugar content in apple by different methods

建模方法	变量数	R_c	*RMSEC* /(°Brix)	R_p	*RMSEP* /(°Bx)
PLS	1840	0.8453	0.5009	0.8262	0.5020
GA-PLS	39	0.9256	0.3082	0.9146	0.3175
SPA-PLS	24	0.9244	0.3105	0.9175	0.3123
AOC-PLS	37	0.9418	0.2585	0.9358	0.2619

光谱特征变量的选择组合是一组合优化问题，优化过程中存在一些变量，单独与对应组分或品质相关性很小，但组合在一起时可以很好的解释对应组分或品质，使得到的模型预测能力更好，但光谱特征波长选择从光谱解析上较难解释。三种特征变量选择方法和全光谱建立的苹果可溶性固形物含量模型见表 2。比较发现，全光谱的偏最小二乘模型预测苹果可溶性固形物含量的精度不高，且模型的计算量较大；采用特征变量选择方法对光谱进行筛选和优化，可以消除噪声过大区域和不相关或非线性的光谱变量的影响，选用较少变量的同时能有效地提高苹果可溶性固形物模型的预测能力，使模型更简洁、更稳健。

三种特征变量提取方法，连续投影算法选择的变量最少，遗传算法和连续投影算法建立的模型性能相当，蚁群优化算法建立的苹果在线检测模型最优。从变量搜索机制上，连续投影算法基于正交投影在光谱矩阵中寻找含有最低冗余信息的变量组合，使变量之间的共线性达到最小，但算法的实现属于寻求局部最优解；遗传算法利用概率转移规则，在整个解空间同时开始寻优搜索，因此可以有效避免陷入局部极小点，具有全局最优搜索性；蚁群优化算法是一种结合了分布计算、信息正反馈、全局寻优和贪婪启发式搜索的算法，能够快速的发现较优解，缩短搜索时间[26]。特征变量提取可剔除冗余、不相关或非线性的波长变量，提高模型的预测能力和稳定性，而且模型的结构也因变量的减少而得以简化。

3 结论

苹果在线近红外光谱经强度标准化校正后，采用遗传算法、连续投影算法和蚁群优化算法等特征变量提取方法分别优化可溶性固形物含量在线检测模型，建立了高效的短波近红外光谱苹果品质在线检测系统。该系统与基于全光谱模型的系统相比较，其采用的特征变量提取方法具有可以有效减少建模所用变量数、提高苹果在线可溶性固形物含量检测模型的预测能力和运算速度，增强模型的稳健性的优点。蚁群优化算法建立的苹果在线检测模型最优，模型的预测集相关系数 R_p 和预测均方根误差 *RMSEP* 分别为 0.9358 和 0.2619。研究结果表明，近红外光谱结合特征变量提取方法可以建立高效的苹果品质在线检测系统，在产业化应用方面具有很好的应用前景。

参考文献

[1] Nicolai B M, Beullens K, Bobelyn E, et al. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review [J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 46(2): 99-118

[2] Pieters S, Saeys W, Kerkhof T, et al. Robust calibrations on reduced sample sets for API content prediction in tablets: Definition of a cost-effective NIR model development

strategy [J]. Analytica Chimica Acta, 2013, 761:62-70

[3] Cen H, He Y. Theory and application of near infrared reflectance spectroscopy in determination of food quality [J]. Trends in Food Science & Technology, 2007, 18(2):72-83

[4] Zude M, Herold B, Roger J, et al. Predicting soluble solid content and firmness in apple fruit by means of laser light backscattering image analysis [J]. Journal of Food Engineering, 2006, 77(2):254-260

[5] 郭志明,黄文倩,彭彦昆,等.高光谱图像感兴趣区域对苹果糖度模型的影响[J].现代食品科技,2014,30(8):59-63
GUO Zhi-ming, HUANG Wen-qian, PENG Yan-kun, et al. Impact of region of interest selection for hyperspectral imaging and modeling of sugar content in apple [J]. Modern Food Science and Technology, 2014, 30(8):59-63

[6] Giovanelli G, Sinelli N, Beghi R, et al. NIR spectroscopy for the optimization of postharvest apple management [J]. Postharvest Biology and Technology, 2014, 87:13-20

[7] Zhang L, Xu H, Gu M. Use of signal to noise ratio and area change rate of spectra to evaluate the visible/NIR spectral system for fruit internal quality detection [J]. Journal of Food Engineering, 2014, 139: 19-23

[8] Fan G Q, Zha J W, Du R, et al. Determination of soluble solids and firmness of apples by vis/NIR transmittance [J]. Journal of Food Engineering, 2009, 93(4):416-420

[9] 迟茜,王转卫,杨婷婷,等.基于近红外高光谱成像的猕猴桃早期隐性损伤识别[J].农业机械学报,2015,46(3):235-241
CHI Qian, WANG Zhuan-wei, YANG Ting-ting, et al. Recognition of early hidden bruises on kiwifruits based on near-infrared hyperspectral imaging technology [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2015, 46(3): 235-241

[10] Mendoza F, Lu R, Cen H. Grading of apples based on firmness and soluble solids content using vis/SWNIR spectroscopy and spectral scattering techniques [J]. Journal of Food Engineering, 2014, 125: 59-68

[11] 傅霞萍,应义斌.基于NIR和Raman光谱的果蔬质量检测研究进展与展望[J].农业机械学报,2013,44(8):148-164
FU Xia-ping, YING Yi-bin. Application of NIR and Raman spectroscopy for quality and safety inspection of fruits and vegetables: a review [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(8): 148-164

[12] 孙通,徐惠荣,应义斌.近红外光谱分析技术在农产品/食品品质在线无损检测中的应用研究进展[J].光谱学与光谱分析,2009,29(1):122-126
SUN Tong, XU Hui-rong, YING Yi-bing. Progress in application of near infrared spectroscopy to nondestructive on-line detection of products/food quality [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(1):122-126

[13] Alfatni M S, Shariff A R, Abdullah M Z, et al. The application of internal grading system technologies for agricultural products-review [J]. Journal of Food Engineering, 2013, 116(3): 703-725

[14] Steinmetz V, Roger J M, Molto E, et a1. On-line fusion of colour camera and spectrophotometer for sugar content prediction of apples [J]. Journal of Agricultural Engineering Research, 1999, 73(2):207-216

[15] McGlone V A, Martinsen P J. Transmission measurements on intact apples moving at high speed [J]. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 2004, 12(1): 37-43

[16] Mendoza F, Lu R, Ariana D, et al. Integrated spectral and image analysis of hyperspectral scattering data for prediction of apple fruit firmness and soluble solids content [J]. Postharvest Biology and Technology, 2011, 62: 149-160

[17] 孙旭东,郝勇,刘燕德.苹果可溶性固形物近红外光谱在线检测影响因素研究[J].中国农机化学报,2013,34(1): 86-90
SUN Xu-dong, HAO Yong, LIU Yan-de. Study of factors for on-line detecting soluble solids by near infrared spectroscopy in intact apples [J]. Journal of Chinese Agricultural Mechanization, 2013, 34(1): 86-90

[18] 欧阳爱国,谢小强,刘燕德.苹果可溶性固形物近红外在线光谱变量优选[J].农业机械学报,2014,45(4):220-225
OU YANG Ai-guo, XIE Xiao-qiang, LIU Yan-de. Selection of NIR variables for online detecting soluble solids content of apple [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2014, 45(4):220-225

[19] Zou X, Zhao J, Malcolm J, et al. Variables selection methods in near-infrared spectroscopy [J]. Analytica Chimica Acta, 2010, 667(1): 14-32

[20] Czarnecki M A. Some comments on the application of two-dimensional correlation spectroscopy and normalization of the dynamic spectra [J]. Applied Spectroscopy, 2003, 57(1): 107

[21] Wang B, Goodpaster A M, Kennedy M. Coefficient of variation, signal-to-noise ratio, and effects of normalization in validation of biomarkers from NMR-based metabonomics studies [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2013, 128: 9-16

[22] Leardi R. Application of genetic algorithm-PLS for feature selection in spectral data sets [J]. Journal of Chemometrics, 2000, 14(5-6): 643-655

[23] Araujo M C U, Saldanha T C B, Galvao R K H, et al. The successive projections algorithm for variable selection in spectroscopic multicomponent analysis [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2001, 57(2): 65-73

[24] Allegrini F, Olivieri A C. A new and efficient variable selection algorithm based on ant colony optimization. Applications to near infrared spectroscopy/partial least-squares analysis [J]. Analytica Chimica Acta, 2011, 699(1): 18-25

[25] 郭志明,黄文倩,彭彦昆,等.自适应蚁群优化算法的近红外光谱特征波长选择方法[J].分析化学,2014,42(4):513-518
GUO Zhi-ming, HUANG Wen-qian, PENG Yan-kun, et al. Adaptive ant colony optimization approach to characteristic wavelength selection of NIR spectroscopy [J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2014, 42(4): 513-518

[26] Allegrini F, Olivieri A C. An integrated approach to the simultaneous selection of variables, mathematical pre-processing and calibration samples in partial least-squares multivariate calibration [J]. Talanta, 2013, 115: 755-760

现代食品科技