

近红外光谱技术结合 iPLS_SPA 波段筛选在黄水酒精度预测模型中的应用

罗琪¹, 庾先国^{1*}, 张贵宇^{1,2*}, 罗林¹, 翟双¹, 曾祥林¹

(1. 四川轻化工大学自动化与信息工程学院, 人工智能四川省重点实验室, 四川宜宾 644000)

(2. 西南科技大学信息工程学院, 四川绵阳 621010)

摘要: 为实现白酒发酵过程中黄水酒精度的快速检测, 研究采用傅里叶近红外光谱 (FT-NIR) 技术对黄水进行光谱采集, 并且采用偏最小二乘回归 (PLSR) 法建立酒精度预测模型。为减少全光谱的数据冗余降低复杂度, 提升建模准确率, 将连续投影算法 (SPA) 与间隔偏最小二乘法 (iPLS) 联用, 对整个谱区进行特征波段筛选, 并用决定系数 R^2 与预测均方根误差 (RMSEP) 评价预测模型。结果表明: 与原始数据集相比, 经过异常样品剔除、预处理、特征光谱筛选后预测模型, 预测集 R^2 也从最开始的 0.702 变为 0.952, 提升 35.61%; 预测 RMSEP 从 3.812 变为 1.367, 降低 64.14%; 变量数也从 2,203 逐步下降到 99, 降低了 95.51%。说明在减少非相关信息与噪声的同时, 模型的复杂度也得到极大改善, 并且模型的稳定性与准确度得到了有效提升, 最终实现黄水酒精度的快速无损检测, 以期在白酒发酵领域提供一种新的可能性, 为近红外在白酒发酵副产物中的检验提供理论基础。

关键词: 黄水; 酒精度; 傅里叶近红外光谱; 间隔偏最小二乘法; 连续投影算法

文章编号: 1673-9078(2023)04-311-317

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2023.4.0607

Application of Near-infrared Spectroscopy Combined with iPLS_SPA

Band Screening in the Prediction Model of Yellow Water Alcohol Content

LUO Qi¹, TUO Xianguo^{1*}, ZHANG Guiyu^{1,2*}, LUO Lin¹, ZHAI Shuang¹, ZENG Xianglin¹

(1.School of Automation & Information Engineering, Artificial Intelligence Key Laboratory of Sichuan Province, Sichuan University of Science & Engineering, Yibin 644000, China)

(2.School of Information Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

Abstract: In order to realize the rapid detection of the alcohol content of yellow water in the process of liquor fermentation, Fourier near-infrared spectroscopy (FT-NIR) technique was used to collect the spectrum of yellow water, and the partial least squares regression (PLSR) method was used to establish the alcohol content prediction model. In order to reduce the data redundancy of the full spectrum, reduce the complexity, and improve the modeling accuracy, the continuous projection algorithm (SPA) and the interval partial least squares (iPLS) method were used to screen the characteristic bands of the entire spectral region, and the coefficient of determination R^2 and root mean squared error of prediction (RMSEP) were used to evaluate the predictive models. The results showed that compared with the original data set, the prediction model after abnormal sample removal, preprocessing and characteristic spectrum screening, the prediction set R^2 also changed from initial 0.702 to 0.952 (an increase of 35.61%); the predicted RMSEP changed from 3.812 to 1.367 (a decrease of 64.14%); the number of variables also

引文格式:

罗琪, 庾先国, 张贵宇, 等. 近红外光谱技术结合 iPLS_SPA 波段筛选在黄水酒精度预测模型中的应用[J]. 现代食品科技, 2023, 39(4): 311-317.

LUO Qi, TUO Xianguo, ZHANG Guiyu, et al. Application of near-infrared spectroscopy combined with iPLS_SPA band screening in the prediction model of yellow water alcohol content [J]. Modern Food Science and Technology, 2023, 39(4): 311-317.

收稿日期: 2022-05-14

基金项目: 四川省科技计划项目 (2022YFS0554); 四川省科技成果转移转化示范项目 (2020ZHCG0040); 四川省重大科技专项项目 (2018GZDZX0045); 国家自然科学基金项目 (42074218)

作者简介: 罗琪 (1996-), 女, 硕士生在读, 研究方向: 智能酿造, E-mail: 652534710@qq.com

通讯作者: 庾先国 (1965-), 男, 博士, 教授, 研究方向: 核技术应用, E-mail: tuoxianguo@suse.edu.cn; 共同通讯作者: 张贵宇 (1987-), 男, 博士, 讲师,

研究方向: 白酒自动化、人工智能, E-mail: gyz_118@163.com

gradually decreased from 2,203 to 99 (a decrease of 95.51%). It showed that while reducing irrelevant information and noise, the complexity of the model has also been greatly improved, and the stability and accuracy of the model have been effectively increased, and finally, the rapid and non-destructive detection of the alcohol content in yellow water can be realized, in order to provide a new possibility in the liquor fermentation field, and provide a theoretical basis for the detection of near-infrared in liquor fermentation by-products.

Key words: yellow water; alcohol content; Fourier near-infrared spectroscopyserotype; interval partial least squares; continuous projection algorithm

固态发酵法作为白酒生产中的三大发酵方法之一，历史悠久，且成酒清新甘甜，品质上乘^[1]。酒精度是白酒的一项重要质量指标，是影响其等级、价值与口感的重要因素。由于发酵过程中酵母的无氧呼吸会产生酒精，故发酵期内酒醅的酒精度会不断升高，并随其他未被分解的成分及水分沉降为其特殊产物-黄水，而黄水中也存在发酵过程，故黄水的酒精度也会随发酵期变化而增长，即黄水酒精度与最终蒸馏出酒的基酒酒精度息息相关^[2]。

黄水又名黄浆水，富含丰富的呈香呈味物质，被广泛用于酿造食醋、制备防腐剂、培养人工窖泥、勾兑白酒及制曲等^[3,4]。目前对黄水理化性质的检测方式主要为传统检测方法，按照对应标准对其酸、还原糖等指标进行数据检测，但其过程费时费力，检验周期长^[5]。而相较于传统检测方法，近红外光谱分析技术(Near Infrared Spectrum Instrument, NIRS)具有高效无损、无需前处理且能多项指标同时检验等优势，已被广泛应用于酒类行业中原料、半成品及成品酒质量检测中，具有极大的应用前景^[6-8]。卢中明等^[9]使用光谱技术对酒醅浸取液进行光谱采集，结合PLSR建立酒醅中还原糖、酸度和酒精度的定量模型，模型 R^2 分别达0.968 6、0.995 0、0.980 7，实现酒醅理化性质的高精度预测；买书魁等^[10]使用光谱技术对白酒原酒进行光谱采集，并采用遗传算法结合组合间隔偏最小二乘算法(Genetic Algorithms-Synergy Interval Partial Least Squares, GA-SiPLS)进行波长筛选，最后利用偏最小二乘回归法实现白酒基酒中乙酸乙酯等预测模型的建立，且 R^2 分别达到0.989和0.991 0。所以，实现近红外对黄水酒精度的实时快速检测，能够为发酵酒醅理化、基酒酒精度及黄水再利用等方面提供有效参考。

本实验利用傅里叶近红外光谱仪采集黄水光谱数据，采用蒙特卡洛交叉验证法(Monte Carlo Cross Validation, MCCV)剔除谱图中的异常样本信息后，应用十余种预处理方法对余下大量的非相关信息与噪声进行减轻，最后选用iPLS-SPA方法对全光谱的特征波段进行选取，即先利用iPLS方法进行最优波段选择，再利用SPA算法对所选区间进行更精密的筛选，

从而实现酒精度PLSR预测模型的高精度低复杂度预测。结合光谱技术实现黄水酒精度高精度预测模型的建立，即实现对黄水酒精度的快速无损检测，以期在近红外对黄水的检测研究提供参考。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

黄水样品：本研究选取清香型白酒发酵时的黄水样品，总共选取14个发酵池进行2轮发酵实验，对黄水产生后的十天发酵期进行研究，并每隔两天采集一次样品，共计采集有效样品136个。

1.2 主要仪器设备

Matrix-F的傅里叶变换近红外光谱仪：德国Bruker公司。

酒精计：DE-120ET型酒精度测试仪。

1.3 实验方法

1.3.1 黄水理化性质数据采集

黄水酒精度采用安徽省地方标准DB34/T 1728-2012《白酒固态发酵黄水中常规指标的分析方法》中的蒸馏法测定。黄水测定各发酵阶段酒精度平均值变化见图1。

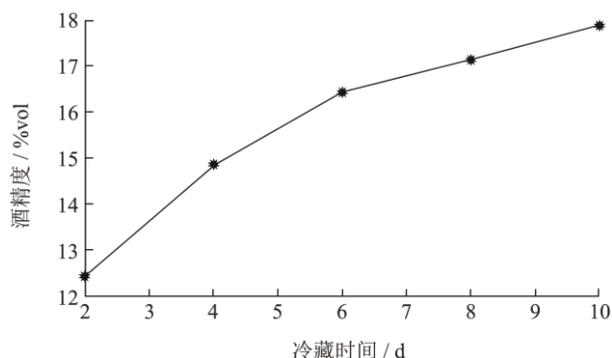


图1 黄水酒精度含量变化图

Fig.1 Changes in the alcohol content of yellow water

由图1知，黄水酒精度整体呈上升趋势，这是由于酒醅在发酵过程中，粮谷里的淀粉逐渐变为酒精和水，未被分解的谷物随着水分下沉继续发酵，故黄水

中酒精度也在不断升高。随着发酵时间增加,酒精度含量整体趋势变缓,考虑与淀粉浓度、温度以及酵母发酵力等相关,且黄酒酒精度最终均值稳定在 18%vol 左右。

1.3.2 近红外光谱采集

先用已预热 1 h 的近红外采集空烧杯中的背景,再倒入 10 mL 黄水样品(能淹没数据采集端口),并启动傅里叶变换近红外光谱仪对黄水进行光谱采集,电脑作为光谱信号采集软件 OPUS7.8 波形的输出端。设置光谱仪光谱扫描范围:4 000~12 000 cm^{-1} ;分辨率:8 cm^{-1} 。

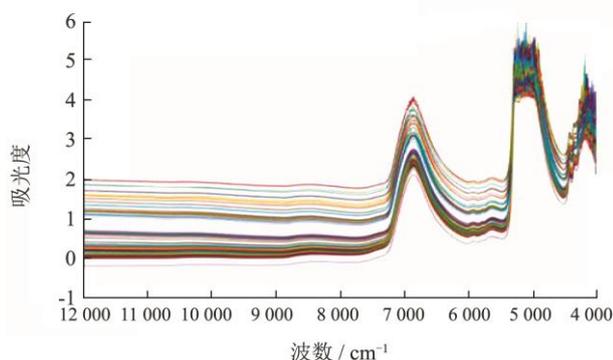


图2 原始光谱数据

Fig.2 Raw spectral data

1.3.3 校正集与验证集划分

SPXY 划分算法是根据联合距离对样本集进行数据划分,相较其他划分法,可以更有效地覆盖多维空间,且划分结果稳定。采用 SPXY 划分算法对剩余 136 个黄水样品,按照 3:1 比例进行划分。最终分别选择了校正集及验证集样本 102 个、34 个。

表 1 SPXY 数据划分

Table 1 SPXY data division

统计参数	最大值	最小值	平均值	标准偏差
校正集	27.65	9.45	16.34	3.56
预测集	27.60	12.16	17.62	3.44

后续建模依据划分后的数据集进行,模型的精确度与稳定性依据 R^2 、 $RMSEC$ 及 $RMSEP$ 来评价。

1.3.4 模型评价

在预测模型的建立过程中,数据集需要经过多步骤处理以使模型达到最优,故本研究利用校正集可决系数 (R^2)、校正集均方根误差 ($RMSEC$)、预测集可决系数 (R^2)、预测集均方根误差 ($RMSEP$) 对模型精度与稳定性进行评价。由于原理相似,下面主要对预测集评价标准的原理进行总结。

(1) 预测集可决系数

预测集 R^2 可用于衡量预测集中真实值和拟合值的拟合优度,同时也是二者之间相关性的衡量指标。

预测集可决系数越接近 1 表明预测集中模型预测值与预测集实测值相关性强度越高,模型效果越好。预测集可决系数计算公式如公式 1 所示。

$$R_p^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{P,i} - \hat{y}_{P,i})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{P,i} - \bar{y}_{P,i})^2} \quad (1)$$

式中:

R_p^2 ——预测集可决系数;

$y_{P,i}$ ——预测集中理化成分实测值;

$\hat{y}_{P,i}$ ——预测集中理化成分模型预测值;

$\bar{y}_{P,i}$ ——预测集中理化成分平均值。

(2) 预测集均方根误差

$RMSEP$ 可对预测集中预测值与实际值的偏差进行度量,由预测集中真实值与预测值的误差平方和的平均数开方求得,预测集均方根误差越小,说明该模型在预测集中的预测性能越稳定,预测集均方根误差越大,则预测集中各数据点的预测性能差异较大,稳定性较弱。预测集均方根误差计算公式如公式 2 所示。

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_{P,i} - \hat{y}_{P,i})^2}{N}} \quad (2)$$

式中:

$RMSEP$ ——预测集均方根误差;

N ——预测集中理化成分样本数。

1.3.5 特征波段筛选算法

(1) 间隔偏最小二乘回归法 (iPLS)

其原理为:首先对全光谱进行等宽区间划分,并逐个运用 PLS 回归处理,而后计算出全光谱模型中每个所划分区间模型的交互验证均方根误差,若当区间值高于全光谱的交互验证均方根误差值时,因影响建模精度予以剔除化,最终选出误差较小区间^[11-12]。

(2) 无信息变量消除法 (UVE)

通过人为加入随机噪声的方式判断 PLSR 模型中各变量回归系数的稳定性,将稳定性较低的变量进行剔除,从而实现数据降维度,提高模型预测效率。

(3) 连续投影算法 (SPA)

其为一种前向循环选择方法,能够通过单向循环有效消除光谱数据中的共线性问题,降低复杂度,提升模型精度^[13,14]。其借助波长向量之间的投影,选择出与各个波长向量无关性最小的向量组,将 $RMSE$ 值最小的向量组作为最终筛选出的特征波长变量。由于该算法在运行过程中需要不断的加入单个波长向量来对前一个波长向量进行投影,且本研究中黄水全光谱变量数较多,故算法运行时间相较其余波长筛选算法要长。

2 结果与讨论

2.1 异常样品剔除

在建模过程中，若存在异常样品，必须从校正集中剔除才能保证模型准确度与精度^[15,16]。本实验采用蒙特卡洛交叉验证法对所采集样本中的异常值进行剔除，它是利用集群分析思维来识别异常点的方法，通过调整其均值标准差的大小，识别出异常点。

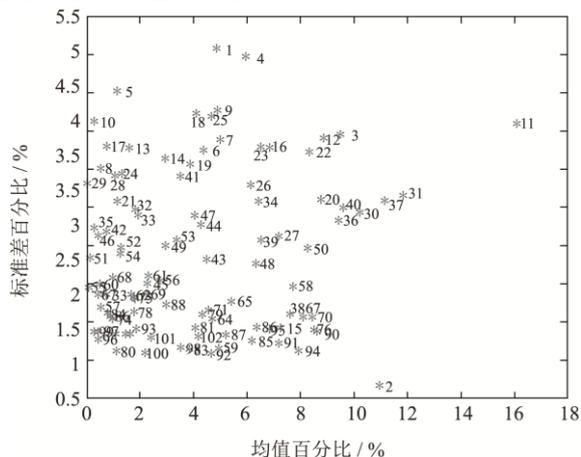


图3 MCCV异常样品剔除效果图

Fig.3 MCCV abnormal sample removal renderings

由图3可知黄水酒精度的校正集中数据点分布较离散，改变MCCV的阈值，以其对 R^2 与 $RMSEP$ 的影响进行评价，确定最佳阈值为14、5，此时剔除样本号为1、11号。

表2 异常样本剔除对模型精度的影响

Table 2 The effect of removing abnormal samples on model accuracy

异常样本剔除	建模方法	R^2	$RMSEP$
无	PLSR	0.702	3.812
剔除	PLSR	0.753	3.402

由表2数据可知，相较于无任何处理的原模型，现检验 R^2 从0.702增加到0.753， $RMSEP$ 从3.812减小到3.402，即剔除异常样本对PLSR模型精度有提升作用，且能有效地减少风险造成的掩蔽效应。但因光谱中仍存在大量无用干扰信息，仍存在很大提高空间。

2.2 光谱预处理

预处理作为对黄水光谱进行处理的重要步骤，能够剔除其中大量的非相关信息与噪声，帮助后续建模预测^[17-18]。由原始光谱图可知，整个光谱图可能存在基线漂移、散色效应以及噪声等，本文采用一阶导

Derivative，SecFD）、卷积平滑（Convolution Smoothing, SG）、标准正态变量变换（SNV）等10种方法对原光谱的干扰信息进行消除及减弱，并依据 R^2 与 $RMSEP$ 对其建模精度进行分析。

表3 光谱变换对模型精度的影响

Table 3 Influence of spectral transformation on model accuracy

预处理方法	主因子数	R^2	$RMSEP$
FD	16	0.887	2.294
SecFD	5	0.837	2.621
SG(7)	12	0.813	2.875
MSC	9	0.783	3.192
MSC+FD	18	0.809	2.795
SG(11)+FD	17	0.882	2.309
MSC+SecFD	13	0.858	2.495
SG(7)+SecFD	12	0.865	2.464
SG(11)+FD+MSC	17	0.866	2.436
SG(7)+SecFD+MSC	13	0.878	2.351

由表格数据可知，预处理效果最好的是一阶导处理法，预测集精度提升17.80%，达0.887，预测均方根误差降低32.57%，为2.294。FD处理法比其他方法提效果最好，正是因为它能够降低重叠谱带的干扰，消除基线漂移的干扰放大信号，所以吸收峰明显。考虑最佳预处理方法不一定能使特征筛选算法达到最优效果，选取FD、SG+FD及SG+SecFD+MSC三种方法与后处理方法结合。

2.3 特征波段筛选

变量数过多会增加预测模型复杂度，过少则易遗漏细节信息，因此采用特征波长提取能够提高其准确度与精度^[19-20]。结合最优的三种预处理方法，本实验选取iPLS、UVE、SPA三种特征筛选方法对酒精度预测模型进行进一步优化，得各特征筛选算法最优的筛选图如图4~6。

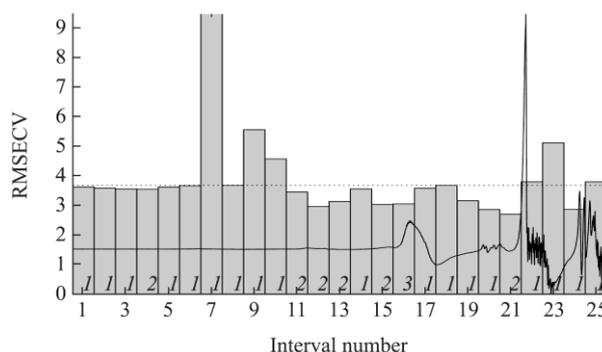


图4 FD+iPLS特征波段筛选图

Fig.4 FD+iPLS feature band screening map

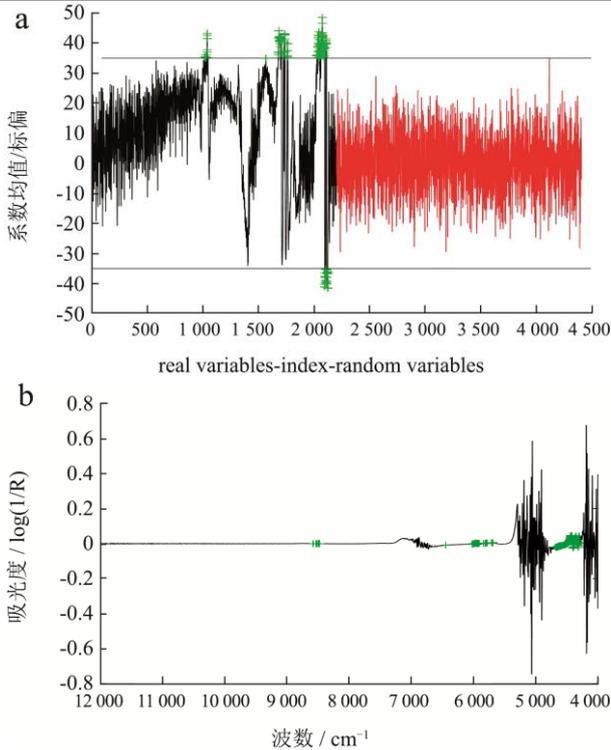


图 5 FD+UVE 特征波段筛选图

Fig.5 FD+UVE feature band screening map

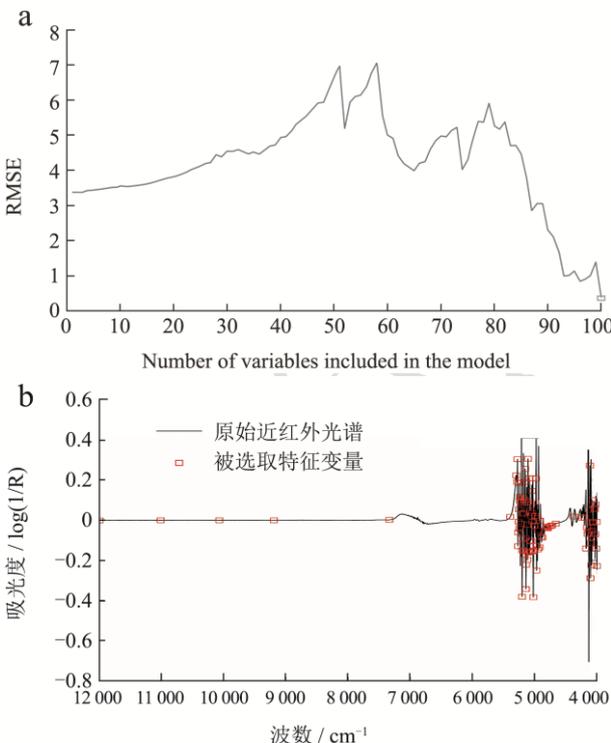


图 6 FD+SPA 特征波段筛选图

Fig.6 FD+SPA feature band screening map

由图4~6、表4可知，iPLS 筛选波段时，因区间的 *RMSECV* 值高于平均值时，剔除区间 7、9、10、22、23、25，虽酒精度预测模型精度最高，但存在筛选变量数较多的缺陷；UVE 算法运算效率较高，变量数减少较多，但筛选所得变量建模精度较另两种方法

都低很多，可靠性较低；SPA 筛选波段时，变量大多分布于 5 400~4 500 cm^{-1} 、4 460~4 000 cm^{-1} 两个光谱区间之内，其能够有效剔除光谱中的冗余变量，但建模精度不够高。综上，为提升建模精度，消除共线性，选用 iPLS-SPA 方法进行特征波段筛选，即在 iPLS 方法筛选出的光谱区间内，利用 SPA 算法进行更精密的筛选。

表 4 特征波长提取对模型精度的影响

Table 4 Influence of feature wavelength extraction on model accuracy

特征筛选方法	运行时间/s	变量数	accuracy		
			主因子数	R^2	<i>RMSEP</i>
iPLS	1 561.81	1 578	16	0.927	1.636
UVE	3.47	133	13	0.773	3.251
SPA	18.52	100	7	0.837	2.571

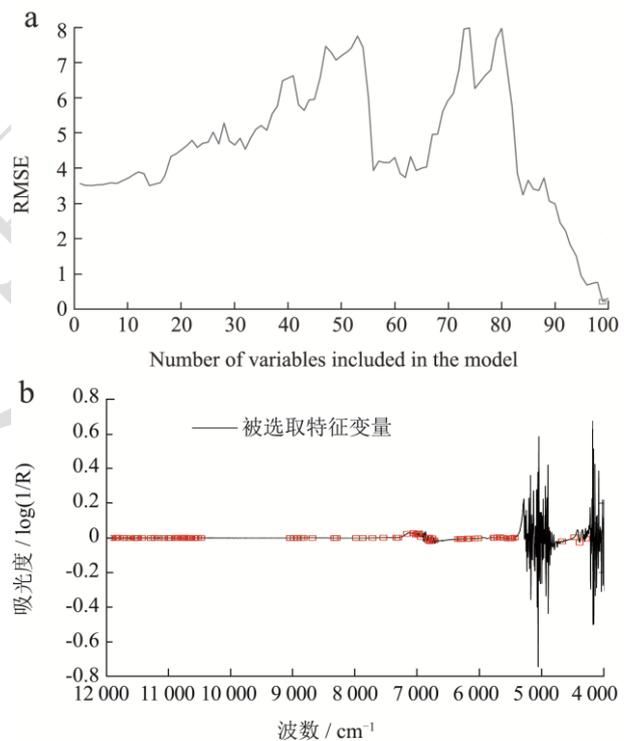


图 7 酒精度一阶导+iPLS+SPA 波段筛选情况图

Fig.7 Screening of alcohol first-order conductivity + iPLS + SPA band

表 5 酒精度一阶导+iPLS+SPA 波段筛选效率表

Table 5 Screening efficiency of alcohol first-order conductivity + iPLS + spa band

运行时间/s	变量数	主因子数	R^2	<i>RMSEP</i>
1 252.816	99	16	0.952	1.367

由表 5 数据可知，联用后虽变量的剔除力度与单独使用 SPA 相近，但建模精度与模型运行效率却得到提升。从理论数据看，筛选后变量数由 2 203 降至 99 个；酒精度预测模型精度达 0.952，较单独使用 iPLS

时提升 2.70%；*RMSEP* 为 1.367，降低 16.44%。正是因为经过 *iPLS* 法对无关变量区间进行剔除后，应用 *SPA* 算法在剩余区间内选择的特征点更具有代表性，由图可知这些特征点主要位于 5 400~9 100 cm^{-1} 与 10 400~12 000 cm^{-1} 这两个区间，主要对应的是近红外对水分子中的氢氧键（O-H）与乙醇中的氢氧键（O-H）、碳氢键（C-H）键的特征值吸收峰，相对来说这两个区间对判断黄水的酒精度更具有理论价值，所以建模精度更高。综上，选用 *iPLS* 与 *SPA* 算法联用进行特征波段筛选，能够将两算法优势互补，实现高精度预测的同时，减少全光谱的数据冗余，提升建模效率和分类识别准确率。即 *iPLS-SPA* 算法对 *PLSR* 预测模型精度有提升作用。

2.4 偏最小二乘回归法模型的建立与评价

在剔除异常样本、*FD* 预处理以及 *iPLS-SPA* 筛选特征光谱的基础上，采用偏最小二乘回归法对黄水酒精度进行预测模型建立。

模型校正集预测集精度如表 6。

由表格数据可知，采用 *PLSR* 模型具有较高精度，

表 6 *PLSR* 模型精度评价

Table 6 *PLSR* model accuracy evaluation

预处理方法	变量数	主成分数	校正集		预测集	
			R^2	<i>RMSEC</i>	R^2	<i>RMSEP</i>
<i>FD</i>	99	16	0.977	0.150	0.952	1.367

3 结论

本文采用近红外光谱技术结合偏最小二乘回归法（*PLSR*），成功实现对黄水酒精度预测模型的建立，且最终决定系数达 0.952，*RMSEC* 达 1.367。经过三个步骤处理后的光谱数据，预测精度逐步上升，证明三种优化方法都对模型稳定性与精度提升有促进作用。且与单一波段筛选时精度最高的 *iPLS* 法相比，采用 *iPLS-SPA* 方法，模型的决定系数 R^2 提升 2.70%，*RMSEP* 降低 16.44%，变量数更是从 1 578 降为 99，降低 93.73%，证明联合使用的两特征提取算法的确能够在提升模型精度的同时，大量降低数据冗余，具有更好的应用优势。以期在近红外在白酒发酵副产物中的检验提供理论基础，考虑黄水与发酵酒醅息息相关，后续更是可以用于白酒发酵过程的实时在线监测。

参考文献

[1] 高畅,张宇飞,辛颖,等.近红外光谱技术结合波段筛选用于白酒基酒总酯定量分析[J].中国酿造,2021,40(4):155-158.
 [2] 冯兴垚,邓杰,谢军,等.白酒酿造副产物黄水综合利用现状

并且其校正集 R^2 达 0.977，校正 *RMSEC* 也降低至 0.150；预测集 R^2 也从最开始的 0.702 变为 0.952，提升 35.61%；预测 *RMSEP* 从 3.812 变为 1.371，降低 64.14%；变量数也从 2 203 逐步下降到 99，降低了 95.51%。故本线性模型具有较好的预测能力。说明一定程度上优化了黄水建模指标，即实现关键信息的保留，又一定程度地降低运算复杂度，且提升了模型预测效果。

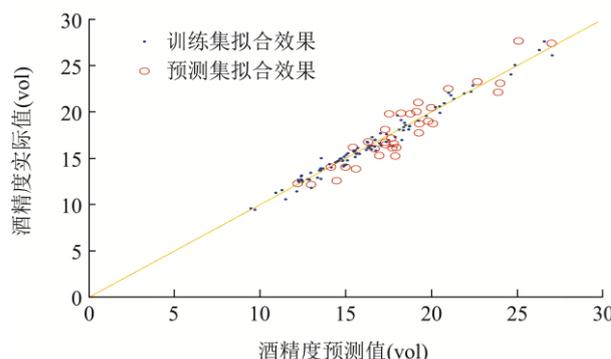


图 8 *PLSR* 黄水酒精度预测模型图

Fig.8 *PLSR* yellow water alcohol content prediction model diagram

浅析[J].中国酿造,2017,36(2):6-9.

[3] 徐亚超.白酒发酵副产物黄水在广式腊肠中的应用研究[D].天津:天津科技大学,2017.
 [4] 陈雪玲.基于黄水生香麸曲的制备与应用研究[D].昆明:云南师范大学,2016.
 [5] 卢中明,范昌明,杜礼泉,等.利用酿酒副产物黄水、酒尾开发调酒液的研究[J].酿酒,2022,49(1):92-97.
 [6] 李杨华,赵东,练顺才,等.近红外光谱技术快速检测酿酒原料粮食理化指标方法的研究[J].酿酒科技,2014,6:47-49.
 [7] 翟双,虞先国,张贵宇,等.基于 FT-NIR 光谱技术结合 KPCA-MD-SVM 对白酒基酒的快速判别[J].现代食品科技,2022,38(4):248-253.
 [8] Zeng J, Guo Y, Han Y, et al. A review of the discriminant analysis methods for food quality based on near-infrared spectroscopy and pattern recognition [J]. Molecules, 2021, 26(3): 749.
 [9] 卢中明,郑敏,刘艳,等.基于液体样品近红外模型在白酒酒醅分析中的应用[J].酿酒,2019,46(6):35-39.
 [10] 买书魁,吴镇君,陈红光,等.基于近红外光谱技术的白酒原酒中关键成分的定量分析[J].食品与发酵工业,2018,44(11):

- 280-285.
- [11] Miao X, Miao Y, Gong H, et al. NIR spectroscopy coupled with chemometric algorithms for the prediction of cadmium content in rice samples [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2021, 257: 119700.
- [12] 胡建,冯耀泽,王益健,等.基于近红外光谱的鲜味物质与鲜味强度检测[J].*光学学报*,2022,42(1):265-272.
- [13] Wang Y J, Li T H, Li L Q, et al. Evaluating taste-related attributes of black tea by micro-NIRS [J]. *Journal of Food Engineering*, 2021, 290: 110181.
- [14] Gong A, Qi W, Shao Y. Study on the quality classification of sausage with hyperspectral infrared band [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2017, 37(8): 2556.
- [15] Ye D, Sun L, Zou B, et al. Non-destructive prediction of protein content in wheat using NIRS [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2018, 189: 463-472.
- [16] Wang N, Li L, Liu J, et al. Rapid detection of cellulose and hemicellulose contents of corn stover based on near-infrared spectroscopy combined with chemometrics [J]. *Applied Optics*, 2021, 60(15): 4282-4290.
- [17] Zhang X, Gao Z, Yang Y, et al. Rapid identification of the storage age of dried tangerine peel using a hand-held near infrared spectrometer and machine learning [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2022, 30(1): 31-39.
- [18] Xu Z, Tian-gang Z, Wei-song M U, et al. Prediction of soluble solids content for wine grapes during maturing based on visible and near-infrared spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2021, 41(1): 229.
- [19] 张丙芳,王玉林,刘成海,等.压榨及浸出工艺对大豆油稳定性影响及 IPLS-SPA 特征波段选择方法应用[J].*食品科学*, 2020,41(10):8-13.
- [20] 孔庆明,苏中滨,沈维政,等.IPLS-SPA 波长选择方法在近红外秸秆生物量中的应用研究[J].*光谱学与光谱分析*,2015, 35(5):1233-1238.