基于近红外光谱检测不同产地石榴的糖度

刘燕德*,张雨,徐海,姜小刚,王军政

华东交通大学机电与车辆工程学院水果智能光电检测技术与装备国家地方联合工程研究中心, 江西 南昌 330013

摘要 基于可见/近红外漫透射光谱技术,探讨了对不同产地石榴的品质进行快速无损检测的可行性。首先,利用 能够有效抑制杂散光影响的动态在线检测装置采集石榴的近红外光谱,测试石榴糖度的真值;然后结合主成分分 析法对不同产地的石榴进行聚类分析,大致将样品分为两类;最后建立不同产地石榴的偏最小二乘判别分析模型, 模型的判别准确率为97%以上。采用多种预处理方法(S-G 平滑、归一化、基线校正、MSC 等)建立了两类石榴的 单一模型,结果表明:基线校正的效果明显优于其他方法,所建立的四川石榴模型的预测集相关系数 R_p为0.82,预 测集均方根误差(RMSEP)为0.37,建模集相关系数 R_c为0.90,建模集均方根误差(RMSEC)为0.31;云南石榴模型 的 R_p为0.81,RMSEP 为0.33,R_c为0.87,RMSEC 为0.27。在后期采用未参与建模的样品的分选验证实验中,两 个产地石榴的判别率为95%,糖度的分选准确率可达92.5%。结果表明,近红外光谱在石榴产地的判别和糖度的 分选上具有重要意义,可为以后的石榴在线分选研究提供依据。

关键词 光谱学;可见/近红外光谱;漫透射;在线检测;产地判别;糖度 中图分类号 O657.3 **文献标志码** A

doi: 10.3788/LOP57.013002

Detection of Sugar Content of Pomegranates from Different Producing Areas Based on Near-Infrared Spectroscopy

Liu Yande*, Zhang Yu, Xu Hai, Jiang Xiaogang, Wang Junzheng

National and Local Joint Engineering Research Center of Fruit Intelligent Photoelectric Detection Technology and Equipment, School of Mechatronics & Vehicle Engineering, East China Jiaotong University, Nanchang, Jiangxi 330013, China

Abstract In this study, the feasibility of the rapid non-destructive testing method for the pomegranate quality in the Sichuan and Yunnan Provinces is investigated based on the visible/near-infrared diffuse transmission spectroscopy technique. First, the near-infrared spectra of pomegranates are obtained using a dynamic online detection device which can effectively suppress the effect of stray light, and the actual sugar content value is measured. In combination with the principal component analysis method, the cluster analysis of pomegranates from different producing areas can approximately divide the samples into two categories. Further, a partial least squares discrimination analysis model is developed for the pomegranates from two distinct producing areas, which exhibits an accuracy greater than 97%. Meanwhile, multiple pretreatment methods, such as Savitzky-Golay smoothing, normalization, baseline correction, and multiplicative signal correction, are employed to establish a single model for two pomegranate types. Based on the obtained results, the baseline correction method is observed to be better than the other examined methods. In particular, the correlation coefficient of the prediction set $(R_{\rm p})$ of the established Sichuan pomegranate model is 0.82, the root mean square error of prediction set (RMSEP) is 0.37, the correlation coefficient of the calibration set (R_c) is 0.90, and the root mean square error of calibration set (RMSEC) is 0.31. However, for the Yunnan pomegranate model, the R_p is 0.81, the RMSEP is 0.33, the R_c is 0.87, and the RMSEC is 0.27. In the post-sorting verification experiment for samples not involved in modeling, the discriminating rate of pomegranates in both the producing areas is 95%, whereas the sugar content sorting accuracy is 92.5%. Thus, the near-infrared spectroscopy is of considerable significance with respect to the discrimination of the

收稿日期: 2019-05-21;修回日期: 2019-06-12;录用日期: 2019-07-01

基金项目:国家自然科学基金(31760344)、水果光电检测技术能力提升项目(S2016-90)

pomegranate producing area and the sorting of its sugar content and may form the basis for future pomegranate online sorting research.

Key words spectroscopy; visible/near infrared spectroscopy; diffuse transmission; online detection; discrimination of producing area; sugar content

OCIS codes 300.6340; 230.0040; 200.3050

1 引 言

石榴是营养最丰富的水果之一,能够补充人体 所需要的多种微量元素及维生素^[1]。石榴的主要种 植区分布在云南、四川、安徽、陕西、山东等地。各地 石榴的品质不尽相同,单凭肉眼难以判断,并且目前 对各地石榴品质进行判别的研究还较少,导致石榴 的在线分选成为一大难点。对石榴品质进行判别的 传统方法大多是观察石榴的色泽、大小等,存在不准 确等问题。此外,有人利用有损的方法对石榴进行 了内部指标的检测,但过程繁琐且复杂。可见/近红 外光谱技术能够快速、无损地检测水果的内部品 质^[2-3],具有分析成本低、速度快和样品无需预处理 等优点^[4-6]。利用可见/近红外光谱技术对石榴产地 进行判别并对其内部糖度进行研究具有实际意义。

目前,应用近红外光谱技术测量水果品质的报 道有很多,如:王琼^[7]利用近红外漫反射技术对不同 品种的石榴进行了判别,并且对石榴的糖度进行了 检测;吴习宇等^[8]采用近红外光谱技术对掺假花椒 进行了定性鉴别;刘燕德等^[9]采用近红外漫透射 和漫反射技术同时检测了苹果的可溶性固形物和 糖酸比,通过比较得到了漫透射优于漫反射的结 论,这主要是因为漫透射能够消除杂散光的影响。 在已有的漫透射研究报道中,对不同产地石榴的 品质进行研究的文献还比较少。本文实验所使用 的装置配备有弹性垫圈和透光孔,依靠自重即可 实现密封,可以有效地抑制杂散光的影响^[10]。本 文采用近红外漫透射光谱结合偏最小二乘法 (PLS)对不同产地的石榴建立定性及定量分析模 型,该模型能同时对不同产地的石榴进行判别,并 能检测其糖度,与以往使用单一模型研究水果糖 度相比,所建模型的准确性更高。

2 材料与方法

2.1 实验材料

实验所使用的石榴样本来自四川、云南,依据表 面光滑且无畸形的原则挑选出 100 个实验样品(60 个四川石榴,40 个云南石榴),将样品表面擦拭干 净,以降低样品表面粗糙度对漫透射光的影响。然 后,将样品放于常温下保存,存放 12 h之后,依次称 量石榴的质量、横纵径等物理指标,结果如表 1 所 示。在每个石榴的4 个赤道部位进行标号,可以得 到4×100 个样品数据。利用 100 个样品建立糖度 的混合模型和各产地的单一模型,基于光谱变量的 Kennard-Stone(K-S)选择方法^[11]将样品分成建模 集和预测集。此外,使用另一批样品中挑出的 8 个 四川石榴验证单一模型的准确性。测试得到的石榴 的糖度如表 1 所示。

表1 石榴的相关参数

	Т	able 1 Relat	ed parameters	of pomegrana	te	
s	Number (N)	RD /mm	LD /mm	Mass $/g$	RS /Brix	Mea

Pomegranate species	Number (N)	RD / mm	LD /mm	Mass /g	RS /Brix	Mean RS	SD
Sichuan	60	63-87	63-80	198-334	12.7-16.3	14.32	0.711
Yunnan	40	79-96	67-94	246.2-443.8	12.9-15.7	14.22	0.570
Test	8	74-82	68-79	228-306.5	12.2-16	13.76	0.638

Note: RD and LD represent transverse and longitudinal diameters; RS represents range of sugar content; SD represents standard deviation.

2.2 石榴样品的光谱采集及糖度测量

实验选用的光谱仪型号为 QE65000(Ocean Optics, USA),该光谱仪采集的光谱为近红外光谱,波长范围为 350~1150 nm。通过搭载着光谱仪的动态检测装置触发光谱仪,自动采集样品的光谱数据;光源为 6 个 12 V、100 W 的卤钨灯,积分时间为 100 ms。本实验采用漫透射方式,在每个样品的

赤道位置采集4个光谱数据。采集装备具体如图1 所示,该装置由光谱仪、光源控制系统、果杯、传送 链、可编程逻辑控制器(PLC)等组成。在图1中,1 为光源,2为样品,3为遮光圈,4为果杯,5为传送 链,6为透光孔,7为探头,8为果核,9为弹跳爪。采 集光谱时,提前预热装置20~30 min,待装置稳定 之后,采用人工上果的方式,按标号依次进行采集。



图 1 近红外漫透射动态检测装置。(a)光路图;(b)光源分布图 Fig. 1 Dynamic detection device for near-infrared diffuse transmission. (a) Schematic of light path; (b) arrangement of light source

测量石榴糖度的仪器为 PAL-1 型折射式数字糖度 计。测量前,需要先用清水将糖度计校正为0 Brix,然 后擦拭干净。测量时,依据 GB/T 12295—1990,剥去石 榴的表皮,取光谱采样点处的适量石榴籽粒,挤汁于糖 度计测试窗口中,连续测量 3 次,取 3 次测量的平均值 作为最终的测量值。每次测量之后,须将糖度计测试 窗口清洗干净并擦干,以免影响下次测量的准确性。

2.3 数据处理及建模方法

石榴样品的光谱采用 SpectraSuite 软件采集, 采用主成分分析(PCA)对采集的光谱数据进行聚类 分析,主成分分析能够有效压缩光谱数据和提取光 谱特征信息^[12-14],公式为

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{t}_1 \cdot \boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{t}_2 \cdot \boldsymbol{p}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{t}_n \cdot \boldsymbol{p}_n^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{E} = \boldsymbol{T} \boldsymbol{P}^{\mathrm{T}},$$
(1)

式中:Y为样品的光谱矩阵;n 为主成分个数;T 为得 分矩阵;P 为载荷矩阵;p 为载荷向量,或称为主成分 或主因子,反映光谱能量之间的差距;t 为得分向量, 既可反映矩阵Y 在对应 p 方向上的覆盖程度,又可反 映样本之间的相互关系;E 为残差矩阵^[15]。

使用软件 Unscrambler 9.7 对数据进行进一步分 析处理。基于光谱数据,采用偏最小二乘判别分析 (PLS-DA)法建立定性判别模型,将四川石榴光谱数 据对应的因变量设为 2,云南石榴光谱数据对应的因 变量设为-2,根据模型识别的正确率评价偏最小二 乘判别模型的效果。然后,采用偏最小二乘法^[16-17]建 立糖度的定量模型,同时对光谱矩阵和浓度矩阵进行 分解,用以消除噪声,加强了浓度信息在光谱分解时 的作用,以提取出与样本类别最相关的光谱信息。与 主成分分析相比,偏最小二乘法具有更好的识别效 果。利用相关系数与均方根误差来评价偏最小二乘 法模型的建模效果。

3 结果与讨论

3.1 石榴近红外光谱特性分析

两种石榴样品的典型光谱的如图 2 所示,两条光



图 2 两种石榴的典型光谱

Fig. 2 Typical spectra of two types of pomegranates

谱有明显的差异,光谱的强度有很大差异,其中四川石榴的光谱强度最高可达 2500 s⁻¹,而云南石榴的光谱强度仅为 700 s⁻¹。这可能是因为两种石榴的内部结构不同,影响了光的透过能力。相对来说,四川石榴的透光性比较强。另外,四川石榴的波峰则在 724 nm和 809 nm附近,而两者的波谷均在 738 nm附近。第一个波峰主要是色素以及 C—H的倍频吸收峰,第二个波峰主要是 C—H、N—H、O—H 等官能团的倍频吸收或组合频吸收引起的。光谱的有效信息主要集中在 600~950 nm,故选用 600~950 nm 的波段范围,共 470 个波长点进行建模。在此基础上,挑选出具有粗糙和光滑表面的样品的两条光谱,发现两条光谱差别不大,特征信息峰基本相同,如图 3 所示,说明表面粗糙度对漫透射光基本无影响。

3.2 主成分分析

使用全谱进行主成分分析,将实验中采集的光 谱信息压缩成若干个主成分的线性组合,用几个主 成分代表所有的光谱信息,可以减少工作量^[12-13]。

本实验使用的样品为 60 个四川石榴和 40 个云 南石榴样品,前两个主成分因子的得分散点图如图 4 所示,可以看出:两个产地的石榴存在聚类现象, 并且由主成分分析可以得出第一个主成分(PC1)的 得分贡献率为 97.6%,第二个主成分(PC2)的贡献 率为2%,前两个主成分基本就能够代表所有的光









图 4 主成分得分散点图

Fig. 4 Score scattered plot of principal component analysis

Sichuan

Yunnan

-2

N: 75

0

True value

 $R_{:}: 0.85$

RMSEC: 1.04

2

4

 $\frac{5}{(a)}$

4

3

2 1

0

-1

-2

-3∟ -4

Predicted value

谱信息,且通过主成分分析能够大致将100个石榴 样品分为两类。图4中的数值代表的是两个主成分 的横纵坐标值,即原始光谱数据在这两个主成分构 成的坐标系中的投影。

3.3 基于偏最小二乘的石榴产地判别模型

本文建立判别模型所使用的方法是 PLS-DA,这 种方法是在偏最小二乘法的基础上建立样本的分类 模型,需要按照样本的类别特性,赋予样本分类的变 量值^[18-20]。选用 600~950 nm 范围内的光谱数据建 立模型,结果如图 5 所示(R。为建模集相关系数,R。 为预测集相关系数,RMSEP 为预测集均方根误差, RMSEC 为建模集均方根误差)。人为设定四川石榴 样品光谱数据对应的因变量为 2,云南石榴光谱数据 对应的因变量为一2,阈值为0。使用75个样品建模, 其中包含 46 个四川石榴,29 个云南石榴,得到 PLS-DA 建模集模型,误判数为5个样品点,误判率为 1.6%。另外,使用 25个样品建模,其中包含 14个四 川石榴,11个云南石榴,可以得到 PLS-DA 预测集模 型,误判数为3个样品点,误判率为3%,如表2所示。 建立判别模型所使用的主成分数为7,此主成分数下 具有较好的建模效果,两个判别模型的识别率都为 97%以上,能够较好地将两个产地的石榴进行分类。



图 5 偏最小二乘判别分析模型。(a)偏最小二乘判别建模集模型;(b)偏最小二乘判别预测集模型 Fig. 5 PLS-DA models. (a) PLS-DA model for calibration set; (b) PLS-DA model for prediction set

表 2 PLS-DA 模型的建模结果

Table 2 Reconstructed results of PLS-DA model

Data set	N	$R_{ m p}$	RMSEP	$R_{\rm c}$	RMSEC	Misjudgment rate / ½
Calibration set	75	_	—	0.85	1.04	1.6
Prediction set	25	0.82	1.16	—	_	3

3.4 石榴糖度预测模型的构建及优化

本文采用偏最小二乘法建立石榴的糖度模型^[21-24]。首先对两种石榴进行混合建模,使用100 个石榴样品进行建模,建模结果如表3所示,混合 模型的相关系数较低,仅为0.49,可见建立两种石 榴的混合模型并不可行。因此,对两个产地的石 榴分别建立糖度预测模型,两个产地石榴的糖度 预测模型如图 6 所示。利用偏最小二乘建模时, 由于有异常值存在,因此建模前使用软件 Unscrambler 9.7 对样本光谱进行了剔点,分部在 四川和云南石榴样品中剔除了 8 个和 2 个样本异 常点。使用 60 个四川石榴样品进行建模,由

表 3 不同处理方法对模型进行优化后的结果

图 6(a)可以看出,预测集的相关系数为 0.82,建模 集的相关系数为 0.89;图 6(b)是使用 40 个云南石 榴建立的模型,其中预测集的相关系数为 0.80,建 模集的为 0.89。两种模型的相关系数并不是特别 高,但文献[7]中石榴糖度模型的相关系数也不 高,最高仅有 0.90,基本在 0.85 左右。本实验使用 的是动态检测装置,即石榴的光谱是在动态情况 下采集的,而在实际生产中,石榴的分选检测是在 动态情况下进行的,所以本实验更符合实际生产 的要求。

为了提高模型的相关系数及减小均方根误差, 使用多种预处理方法[S-G 平滑、归一化、多元散射 校正(MSC)、基线校正等]对模型进行优化,得到的 结果如表3所示。从表3中可以看出,S-G 平滑、归 一化、MSC等方法并不能对模型有所优化,且平滑 窗口宽度的变化对模型效果也影响不大。另外,笔 者也曾尝试使用多种预处理方法的组合进行优化, 但效果都不明显,只有基线校正能够改善模型,减小 模型的均方根误差。



Table 3 Results of models optimized by different pretreatment methods

Pretreatment	Origin	D	DMSEC	D	RMSEI	
method	Origin	Λ p	RWISEC	Λ _c		
Hybrid Sichuan		0.40	0.66	0.40	0.61	
modeling	and Yunnan	0.49	0.00	0.40	0.01	
Original	Sichuan	0.82	0.37	0.89	0.33	
spectra	Yunnan	0.80	0.34	0.85	0.29	
S-G	Sichuan	0.74	0.44	0.68	0.52	
smoothing $+3*$	Yunnan	0.80	0.34	0.80	0.33	
S-G	Sichuan	0.74	0.44	0.67	0.53	
smoothing $+7*$	Yunnan	0.77	0.35	0.71	0.39	
N 1: i	Sichuan	0.64	0.50	0.67	0.53	
Normalization	Yunnan	0.69	0.41	0.78	0.34	
MSC	Sichuan	0.63	0.50	0.63	0.56	
MSC	Yunnan	0.71	0.41	0.77	0.35	
D 1:	Sichuan	0.82	0.37	0.90	0.31	
Daseline	Yunnan	0.81	0.33	0.87	0.27	
Baseline+S-G	Sichuan	0.74	0.44	0.67	0.53	
smoothing $+3*$	Yunnan	0.78	0.34	0.82	0.31	

Note: * represents smooth window width.





Fig. 6 PLS-DA models of sugar content of pomegranates from two different producing areas. (a) Sichuan pomegranate; (b) Yunnan pomegranate

3.5 模型验证及评价

利用 K-S 样本选择方法选出在相同条件下采 集的另一批样品中的 8 个四川石榴(共 32 个样本 点),对四川石榴糖度模型进行预测,验证的效果较 好,其中预测集的相关系数 R_p为 0.79, RMSEP 为 0.44,建模集的相关系数 R_p为 0.84, RMSEC 为 0.38。另外,利用未应用到建模中的 20 个样品(12 个四川石榴和 8 个云南石榴)对建立的模型进行进 一步预测。首先将建立的 PLS-DA 模型及糖度的 偏最小二乘模型导入到在线检测软件中,结合定性 和定量分析的方法,先将不同产地的石榴分开,再进 行糖度的分选。在定性判别中,采用动态在线检测 装置触发光谱仪采集样品的光谱信息,通过建立的 PLS-DA 模型进行判别,将样品推入分选前所规定 的分级口。之后再把 20 个样品进行糖度分选,因为 石榴之间的糖度差异约为 4 Brix,因而将糖度分级 口设定为 13 Brix 以下、13~14 Brix、14~16 Brix、 16 Brix 以上。将 20 个样品进行标号,标记在赤道 附近的两个表面上,并按次序将样品放置到分选装 置上,放置方式与实验时的方式相同,每个面测量 4 次,共计 160 次。在定性判别时,模型能够较好地分 开两种石榴,只有 1 个石榴出现错误,准确率可以达 到 95%;在糖度分选中,石榴误分入相邻的分级口 中 12 次,在线分选准确率达到 92.5%。

4 结 论

本文采用近红外光谱中的漫透射技术,建立了 四川和云南石榴的偏最小二乘判别分析模型和石榴 糖度的偏最小二乘回归模型,建立的模型能够同时 对石榴的产地和糖度进行检测。利用主成分分析对 两个产地的石榴进行分析时,能够较好地将同一产 地的石榴进行聚类,并与另一产地的石榴分开。同 时,采用建立的 PLS-DA 模型能够很好地判别两个 产地的石榴,判别精度可达到 97%,对未参与建模 的样品进行验证时,也能够很好地将样品推入相应 的分级口,准确率可以达到 95%。采用多种预处理 方法对基于偏最小二乘法建立的糖度模型进行优化 后发现,基线校正能够提高模型的相关系数,使得在 之后的模型验证中,在线分选的准确率高达 91.3%。 由于本实验采用的是动态在线检测装置,因此建模 的相关系数不是很高,但动态检测符合实际生产的 要求,对石榴的分选具有一定的实际意义。

为使模型的效果更佳,还需要在后续的研究中 不断地对模型进行优化,提高模型的精度。

参考文献

 Bu R G D, Na B Q. Briefly describe the medicinal and health benefits of pomegranate [J]. Journal of Medicine & Pharmacy of Chinese Minorities, 2014, 20(5): 66-68.
 布日古德,娜布其. 简述石榴的药用及保健功效[J].

中国民族医药杂志, 2014, 20(5): 66-68.

- [2] Wang A C, Xie L J. Technology using near infrared spectroscopic and multivariate analysis to determine the soluble solids content of citrus fruit[J]. Journal of Food Engineering, 2014, 143: 17-24.
- [3] Sinelli N, Cerretani L, Egidio V D, et al. Application of near (NIR) infrared and mid (MIR) infrared spectroscopy as a rapid tool to classify extra virgin olive oil on the basis of fruity attribute intensity [J]. Food Research International, 2010, 43(1): 369-375.
- [4] Lee C, Polari J J, Kramer K E, et al. Near-infrared (NIR) spectrometry as a fast and reliable tool for fat and moisture analyses in olives [J]. ACS Omega, 2018, 3(11): 16081-16088.
- [5] Khurnpoon L, Sirisomboon P. Rapid evaluation of the texture properties of melon (*Cucumis melo* L. Var. reticulata cv. Green net) using near infrared spectroscopy[J]. Journal of Texture Studies, 2018, 49(4): 387-394.
- [6] Pasquini C. Near infrared spectroscopy: a mature analytical technique with new perspectives—a review [J]. Analytica Chimica Acta, 2018, 1026: 8-36.

- [7] Wang Q. Variety discrimination and non-destructive detection of quality of pomegranate by near-infrared spectroscopy [D]. Xianyang: Northwest A & F University, 2017.
 王琼.近红外光谱对石榴品种的判别及品质的无损 检测[D].咸阳:西北农林科技大学, 2017.
- [8] Wu X Y, Zhu S P, Wang Q, et al. Qualitative identification of adulterated huajiao powder using near infrared spectroscopy based on DPLS and SVM[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(8): 2369-2373.
 吴习宇,祝诗平,王谦,等. DPLS和SVM的掺假花 椒粉近红外光谱定性鉴别[J].光谱学与光谱分析,

2018, 38(8): 2369-2373.

- [9] Liu Y D, Wu M M, Li Y F, et al. Comparison of reflection and diffuse transmission for detecting solid soluble contents and ratio of sugar and acid in apples by on-line vis/NIR spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2017, 37(8): 2424-2429. 刘燕德, 吴明明, 李轶凡, 等. 苹果可溶性固形物和 糖酸比可见/近红外漫反射与漫透射在线检测对比研 究[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(8): 2424-2429.
- [10] Liu Y D, Wu M M, Sun X D, et al. Simultaneous detection of surface deficiency and soluble solids content for *Amygdalus persica* by online visible-near infrared transmittance spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2016, 32(6): 289-295.
 刘燕德, 吴明明, 孙旭东, 等. 黄桃表面缺陷和可溶

性固形物光谱同时在线检测[J].农业工程学报, 2016,32(6):289-295.

- [11] Chu X L. Near-infrared spectroscopy technology practical manual[M]. Beijing: China Machine Press, 2016:114-133.
 褚小立.近红外光谱分析技术实用手册[M].北京: 机械工业出版社, 2016:114-133.
- [12] Yang I C, Tsai C Y, Hsieh K W, et al. Integration of SIMCA and near-infrared spectroscopy for rapid and precise identification of herbal medicines [J]. Journal of Food and Drug Analysis, 2013, 21(3): 268-278.
- [13] Nejadgholi I, Bolic M. A comparative study of PCA, SIMCA and Cole model for classification of bioimpedance spectroscopy measurements [J]. Computers in Biology and Medicine, 2015, 63: 42-51.
- [14] Wang L J, Yang Y Y. Purification and noise

elimination of near infrared spectrum in rapid detection of milk components concentration by using principal component weight resetting [J]. Acta Optica Sinica, 2017, 37(10): 1030003.

王丽杰,杨羽翼.利用主成分权重重置实现牛奶成分浓度快速检测中近红外光谱的净化去嗓[J].光学学报,2017,37(10):1030003.

- [15] Chu X L. Molecular spectroscopy analytical technology combined with chemometrics and its applications [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2011: 55-57.
 褚小立.化学计量学方法与分子光谱分析技术 [M].北京:化学工业出版社, 2011: 55-57.
- [16] Hulland J. Use of partial least squares (PLS) in strategic management research: a review of four recent studies [J]. Strategic Management Journal, 1999, 20(2): 195-204.
- [17] de Assis M A D, de Fusco D O, Costa R C, et al.
 PLS, iPLS, GA-PLS models for soluble solids content, pH and acidity determination in intact *Dovyalis fruit* using near-infrared spectroscopy [J].
 Journal of the Science of Food and Agriculture, 2018, 98(15): 5750-5755.
- [18] Hao Y, Sun X D, Gao R J, et al. Application of visible and near infrared spectroscopy to identification of navel orange varieties using SIMCA and PLS-DA methods[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2010, 26(12): 373-377.
 郝勇,孙旭东,高荣杰,等.基于可见/近红外光谱 与 SIMCA 和 PLS-DA 的脐橙品种识别[J]. 农业工 程学报, 2010, 26(12): 373-377.
- [19] Ignat T, Schmilovitch Z, Fefoldi J, et al. Non-

destructive measurement of ascorbic acid content in bell peppers by VIS-NIR and SWIR spectrometry[J]. Postharvest Biology and Technology, 2012, 74: 91-99.

- [20] Wang Y J, Yuan X Q, Shi B, et al. Origins of nephrite by laser-induced breakdown spectroscopy using partial least squares discriminant analysis [J]. Chinese Journal of Lasers, 2016, 43(12): 1211001. 王亚军,袁心强,石斌,等.基于激光诱导击穿光谱 结合偏最小二乘判别分的软玉产地识别研究[J].中 国激光, 2016, 43(12): 1211001.
- [21] Yan W L, Ren S Y, Yue X X, et al. Rapid detection of cAMP content in red jujube using near-infrared spectroscopy[J]. Optoelectronics Letters, 2018, 14 (5): 380-383.
- [22] Zhu G Z, Tian C N. Determining sugar content and firmness of 'Fuji' apples by using portable nearinfrared spectrometer and diffuse transmittance spectroscopy [J]. Journal of Food Process Engineering, 2018, 41(6): e12810.
- [23] Fu B, Hu Y X, Liu R, et al. Near-infrared measurement with medium concentration sample as reference[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36 (2): 0230003.
 傅博, 胡永翔, 刘蓉, 等. 基于中等浓度样品参考测量的近红外光谱检测方法[J]. 光学学报, 2016, 36 (2): 0230003.
- [24] Rizvi T S, Mabood F, Ali L, et al. Application of NIR spectroscopy coupled with PLS regression for quantification of total polyphenol contents from the fruit and aerial parts of *Citrullus colocynthis* [J]. Phytochemical Analysis, 2018, 29(1): 16-22.