

## 激光与光电子学进展

基于可见/近红外光谱的水性油墨助剂类型鉴别  
与浓度的定量分析白永利<sup>1</sup>, 黄新国<sup>1\*</sup>, 张姗姗<sup>1</sup>, 冷娴<sup>1</sup>, 钟云飞<sup>1</sup>, 瞿小阳<sup>2</sup>, 谢小春<sup>2</sup>, 彭楠<sup>1</sup><sup>1</sup>湖南工业大学包装与材料工程学院, 湖南 株洲 412007;<sup>2</sup>湖南福瑞印刷有限公司, 湖南 长沙 410100

**摘要** 针对目前水性油墨印刷适性难以准确检测和控制的问题, 提出一种基于可见/近红外光谱结合化学计量学方法, 准确检测水性油墨助剂的类型和浓度。首先, 采用微型光谱仪(波长范围 380~980 nm)获取水性油墨样本中含有不同浓度的乙醇、调色红和调色黄助剂的光谱数据, 通过主成分分析法提取可完全表征样本光谱信息的特征波段, 减少冗余信息, 实现助剂类型的准确鉴别。然后, 通过比较和讨论 6 种不同预处理方法结合偏最小二乘法、间隔偏最小二乘法(iPLS)构建的各助剂浓度预测模型。实验结果表明, 通过主成分分析法, 在 617~726 nm 光谱波段的前两个主成分累积贡献率高达 99.909%, 可实现对水性油墨助剂类型的准确判别。同时, 通过比较分析发现, 经过一阶导数和高斯窗平滑预处理后, 在 380~500 nm 范围内, 基于 iPLS 构建的各助剂浓度的预测模型, 均达到了较好的预测效果。其中, 乙醇助剂预测模型的决定系数和均方根误差分别为 0.9798、0.0223, 调色黄助剂的决定系数和均方根误差分别为 0.9870 和 0.0075, 调色红助剂的预测结果决定系数和均方根误差分别为 0.9948 和 0.0038。实验证明, 最优预处理方法结合 iPLS 建立的预测模型最优, 可以准确检测水性油墨助剂的类型和浓度, 满足水性油墨在印刷生产过程中检测与控制的应用需要, 为后期实现水性油墨在线智能检测提供了技术基础。

**关键词** 光谱学; 可见/近红外光谱; 水性油墨; 主成分分析; 间隔偏最小二乘法

中图分类号 O657.3

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP202259.2330003

## Type Identification and Concentration Quantitative Analysis of Water-Based Ink Additives Based on Visible/Near-Infrared Spectroscopy

Bai Yongli<sup>1</sup>, Huang Xinguo<sup>1\*</sup>, Zhang Shanshan<sup>1</sup>, Leng Xian<sup>1</sup>, Zhong Yunfei<sup>1</sup>, Peng Nan<sup>2</sup><sup>1</sup>School of Packaging and Materials Engineering, Hunan University of Technology,

Zhuzhou 412007, Hunan, China;

<sup>2</sup>Hunan Luck Printing Co., Ltd., Changsha 410100, Hunan, China

**Abstract** To address the current problem that the printability of water-based inks is difficult to detect and control accurately, a method based on visible/near-infrared spectroscopy combined with chemometrics is proposed to accurately detect the type and concentration of water-based ink additives. First, a micro-spectrometer (380–980 nm) was used to obtain spectral data of water-based ink samples containing different concentrations of alcohol, toning red, and toning yellow additives, and by extracting the characteristic bands that can completely characterize the spectral information of the samples through principal component analysis, redundant information is reduced and accurate identification of the auxiliary types is achieved. Then, the prediction models constructed by six different pretreatment methods combined with partial least squares (PLS) and interval partial least squares (iPLS) for each additive concentration were compared and discussed. The experimental results showed that the cumulative contribution rate of the first two principal components in the spectral band of 617–726 nm was as high as 99.909% by principal component analysis, and the accurate identification of water-based ink additives types was achieved. Among them, the determination coefficient and root mean square error of alcohol additive prediction model were 0.9798 and 0.0223, while the determination coefficient and root mean square error of toning yellow additive were 0.9870 and 0.0075, and the determination coefficient and root mean square error of the toning

收稿日期: 2022-08-25; 修回日期: 2022-09-21; 录用日期: 2022-10-09

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(52004087)、湖南省自然科学基金(2021JJ30218)

通信作者: \*huangxinguo@hut.edu.cn

red additive were 0.9948 and 0.0038. Experimental results prove that the model established by the optimal pretreatment method combined with the iPLS method is generally better than the single PLS model, which can accurately detect the type and concentration of water-based ink additives, meet the application needs of water-based ink detection and control in the printing production process, and provide a technical basis for the later realization of online detection of water-based ink.

**Key words** spectroscopy; visible/near-infrared spectroscopy; water-based ink; principal component analysis; interval partial least squares

## 1 引言

水性油墨(简称水墨)<sup>[1]</sup>是以水为主要溶剂或分散剂,由水基连结料与颜料及相关助剂经复配研磨加工而成的一种无溶剂挥发、无溶剂残留的绿色环保型印刷油墨,具有黏度低、流动性好、不使用有机溶剂、节约资源、有利于保护环境、制造成本低廉等优点。目前水性油墨在印刷过程中的黏度、颜色等性能调节一般通过人工加注乙醇、调色墨等助剂来控制,存在主观性强、难以精确控制、耗时长、效率低,且无法保证印刷一致性等问题。实现水性油墨助剂类型和浓度检测是解决上述问题的关键。

近红外(NIR)光谱分析技术具有准确、无损、高效、操作简便、设备成本低等优点<sup>[2]</sup>,在食品、医疗、石油化工等领域得到了广泛应用。金垚等<sup>[3]</sup>对来自不同品牌、不同种类的牛奶采用主成分分析(PCA)方法建立定性判别模型,对不同种类的牛奶识别率达到98.98%。刘陵玉等<sup>[4]</sup>对黄芩苷混合物进行了光谱检测,基于人工支持向量机(SVM)和偏最小二乘法(PLS)建立了定量分析模型,其中,基于SVM模型对混合物中黄芩苷含量的检测优于PLS模型,对药物质量检测具有重要意义。王其等<sup>[5]</sup>利用主成分分析结合随机森林算法,对食源性致病菌拉曼光谱进行鉴定分析,为食源性致病菌的检测提供了新的参考方法。Chen等<sup>[6]</sup>对牛奶中非法添加的三聚氰胺进行快速识别,实现了不同掺假量的准确检测。盛晓慧等<sup>[7]</sup>通过近红外光谱技术结合多种波段提取算法对菠萝啤中果汁含量进行快速无损检测,结果表明,采用组合间隔偏最小二乘法提取特征波长建立PLS模型,不仅简化了模型,也为准确检测菠萝啤中果汁含量提供了快速高效的方法。王琼雅等<sup>[8]</sup>采用向后、组合间隔偏最小二乘法及改进的优化算法优选特征波段,建立植物蛋白饮料中脂肪和可溶性固形物定量分析模型,4种方法均取得了较好的预测效果。戎念慈等<sup>[9]</sup>采用以多种算法为基模型的融合模型准确分析并预测了血迹年龄。陈颖等<sup>[10]</sup>通过建立灰狼优化(GWO)算法的支持向量回归(SVR)校正预测模型,为土壤含水率和其他重金属含量的预测提供了有效的参考。然而目前在印刷生产过程中,对水性油墨助剂类型和含量的检测主要通过人工操作来完成,存在主观性强、难以保证印刷一致性、严重影响印刷质量等问题。上述研究为光谱分析技术应用于印刷领域实现水性油墨助剂快速无损检测

提供了技术参考。本文基于可见/近红外光谱分析技术结合化学计量学方法检测水性油墨助剂类型和浓度,该研究为后期实现水性油墨助剂类型和浓度在线精确检测提供了技术方法。

## 2 实验部分

### 2.1 实验材料

本文以WZ01系列黄色水性油墨为研究对象,购于珠海市乐通化工有限公司,细度小于20 μm,初干性为10~30 mm,着色力为95%~105%,医用乙醇体积分数为75%±5%,购于河南华阳药业有限公司。

### 2.2 仪器和设备

光谱测量系统主要由光纤光谱仪、光源、比色皿、反射光谱测量支架、标准反射白板、比色皿、适配器和计算机等构成。光谱分析仪,型号为USB6500 Pro,购于广州景颐光电科技有限公司,波长范围为380~980 nm;卤素灯光源,型号为JYL200,输入功率为100 W,购于广州景颐科技有限公司;电子分析天平仪,型号为凯丰集团有限公司克拉秤,最大量程为1500 g,精度为0.01 g;塑料比色皿,购于江苏宜兴谱析光学元件有限公司,光程为10 mm,容量为4.5 mL。采集光谱数据之前,对光谱设备预热30 min并进行仪器校正,仪器的主要参数设置包括系统的积分时间为2.5 ms,经参数优化扫描平均次数为6次。

### 2.3 样品制备

将水性油墨样品称取30份,每份20 g,向每份水性油墨样品中分别加入一定比例的乙醇、调色黄、调色红三种助剂,充分搅拌,使助剂与水性油墨混合均匀,共制得30个浓度(质量分数,下同)梯度的样品,密封贮存在20~25 °C室温中待测,各助剂浓度如表1所示。

### 2.4 光谱数据采集

为了避免仪器噪声、人员操作等对光谱数据的影响,每次采集前将光源、光谱仪探头、标准白板、油墨样品四者的位置保持固定不变,同时对同一目标连续采集10条光谱,取10条光谱数据平均后的光谱作为样本的原始光谱数据。采集到的三种助剂的原始水性油墨光谱数据及归一化后得到的反射率光谱如图1所示。其中三种助剂的水性油墨光谱具有高度的相似性,不同助剂的光谱数据存在重叠现象,无法直接通过原始光谱数据鉴别助剂类型和浓度的定量检测。因此,需要进一步对原始光谱数据进行分析处理,实现对水性油墨助剂类型的准确判别和浓度的定量分析。

表 1 油墨中添加的各助剂的质量分数  
Table 1 Mass fraction of additives added in ink

No.	Mass fraction of alcohol /%	No.	Mass fraction of toning yellow /%	No.	Mass fraction of toning red /%
B1	0	C1	0	D1	0
B2	5.36	C2	1.75	D2	2.37
B3	10.21	C3	3.91	D3	4.10
B4	15.37	C4	6.02	D4	5.94
B5	22.03	C5	7.82	D5	7.81
B6	24.93	C6	9.93	D6	9.57
B7	30.54	C7	12.53	D7	11.19
B8	35.20	C8	14.36	D8	12.21
B9	40.64	C9	16.13	D9	14.20
B10	44.94	C10	18.03	D10	15.49

Note: B means alcohol. C means toning yellow. D means toning red.

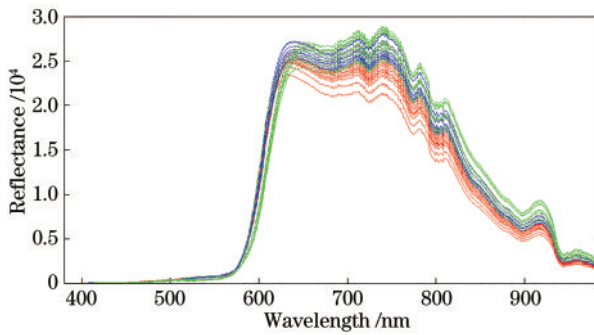


图 1 实验样品的归一化反射率光谱

Fig. 1 Normalized reflectance spectra of experimental samples

### 3 水性油墨助剂类型鉴别

#### 3.1 数据处理

光谱数据代表了被测物质的组成成分、结构和性质等重要信息,所以选择最佳波段是建模的关键所在。如果所选取的波长范围过宽,则会引入不必要的变量,对建立的模型造成干扰,进而影响模型的预测能力。如果选择的波长范围过窄,又可能会人为丢失一些重要变量,导致预测误差变大,预测不精准<sup>[11]</sup>。因此,为了去掉受到噪声干扰及冗余的光谱数据,本文采用

PCA 法对光谱数据进行降维,提取可表征水性油墨助剂类型及浓度的特征光谱信息。

#### 3.2 波段选择

选择特征光谱区间是建模分析的重要手段。采用区间偏最小二乘法将全光谱划分为 380~500 nm、501~616 nm、617~726 nm 和 727~831 nm 等间距的 4 个特征光谱区间,并对全光谱区间和每个子区间进行光谱特征分析。其中,每个子区间包含 263 个波长点。

#### 3.3 主成分分析

首先,采用 PCA 法对各区间的光谱数据进行主成分分析,剔除相互重叠的冗余信息。各光谱区间的主成分累积贡献率,如表 2 所示。在 380~980 nm 光谱区间前三个主成分的累积贡献率仅达到 98.88%,而各光谱子区间的主成分累积率均高于全光谱区间。因此,有必要对光谱区间进行划分,并采用主成分分析法提取可准确表征水性油墨助剂类型的特征光谱信息。如表 2 所示,在子区间 617~726 nm 和 727~831 nm 特征光谱波段范围内的主成分效果更好,前两个主成分的累积贡献率均达到 99.909% 以上,同时数据集从 263×30 减少到 2×30,大大减少了冗余变量,有效提取了特征光谱信息。各子区间的得分散点图如图 2 所示,其中,在 300~500 nm 和 501~626 nm 区间内,经过

表 2 主成分分析累积方差贡献率

Table 2 Principal component analysis cumulative variance contribution rate

Feature interval /nm	Principal component factor	Variance contribution rate /%	Cumulative variance contribution rate /%
380-980	PC1	61.542	61.542
	PC2	27.871	89.413
	PC3	9.388	98.801
380-500	PC1	93.856	93.799
	PC2	2.827	96.626
501-616	PC1	94.657	94.657
	PC2	4.683	99.340
617-726	PC1	85.717	85.717
	PC2	14.192	99.909
727-831	PC1	99.574	99.574
	PC2	0.224	99.798



主成分分析后,各助剂之间堆积严重,区分不明显,如图 2(a)、(b)所示。相比于其他光谱子区间,在 617~726 nm 特征光谱区间内,同类助剂聚集更加明显,不同助剂之间区分更清楚。同时,当三种助剂浓度均为

0%时,所测样品的光谱信息相同,会发生交替叠加现象。因此,在 617~726 nm 光谱子区间内进行主成分分析,可以有效提取线性无关的光谱主成分,降低光谱信息的冗余度,准确鉴别了助剂类型。

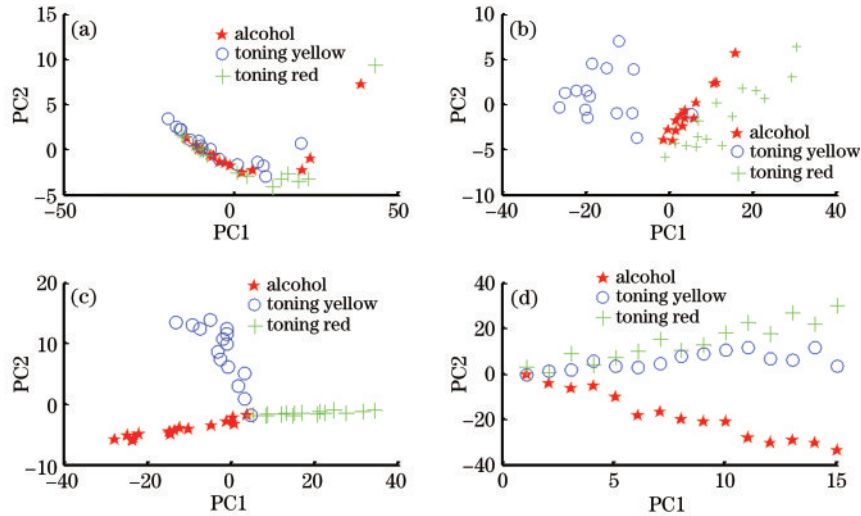


图 2 不同助剂各光谱区间的主成分得分分布。(a) 380~500 nm; (b) 501~616 nm; (c) 617~726 nm; (d) 727~831 nm  
Fig. 2 Principal component score distributions of each spectrum interval of different additives. (a) 380~500 nm; (b) 501~616 nm; (c) 617~726 nm; (d) 727~831 nm

## 4 水性油墨助剂浓度定量分析

### 4.1 光谱数据预处理

采集到的光谱除样品本身包含的化学信息外,还包括温度、湿度、光照度、噪声和闲散光等其他无关信息,会影响对未知样品的预测能力。因此,在构建定量分析模型时,通过对光谱数据进行预处理消除数据中的无关信息和噪声,进而提高模型的准确性和可靠性变得十分关键和必要。常用的光谱数据预处理方法有均值中心化、标准化、归一化、平滑、导数(1,2st)、标准正态变换(SNV)、多元散射校正(MSC)、傅里叶变换等<sup>[12]</sup>。本文采用 Smoothts 高斯窗平滑(Smoothts-g)、1,2st、Savitzky-Golay (SG)卷积平滑和 SNV 等数据增强算法旨在消除受基线漂移等干扰因素影响的光谱数据,提高信噪比。通过比较校正集及预测集的相关系数和均方根误差等评价指标进一步验证不同光谱预处理方法对模型准确性、稳健性的影响。

采用浓度梯度法划分数据集,分别选取各水性油墨助剂样本中的 6 个样品作为校正集,4 个样品作为预测集。建立乙醇溶剂浓度梯度的 PLS 定量校正模型,并通过预测集,检验模型的预测能力和稳健性。模型的交互验证指标参数如表 3 所示。其中, $R_c^2$ 和 $R_p^2$ 分别代表校正集和预测集的决定系数, $R_{MSEC}$ 和 $R_{MSEP}$ 为校正集和预测集的对应的均方根误差。由比较可知,乙醇和调色红助剂样本采用的 Smoothts-g 预处理建立的 PLS 模型其 $R_c^2$ 、 $R_p^2$ 、 $R_{MSEC}$ 和 $R_{MSEP}$ 分别为 0.924、0.979、

0.054 和 0.022,以及 0.973、0.998、0.011 和 0.002,预测效果比其他预处理方法建立的模型好。调色黄助剂样本采用 1st 预处理后建立 PLS 模型得到的 $R_c^2$ 和 $R_p^2$ 为 0.972、0.987 更接近 1, $R_{MSEC}$ 和 $R_{MSEP}$ 指标值最低,分别为 0.013 和 0.013。由实验结果可得,最优预处理结合 PLS,可有效预测水性油墨中各助剂的浓度值。

### 4.2 区间偏最小二乘法建模

随着对 PLS 的深入研究,通过选择特征光谱波段构建模型具有更好的预测能力。同时特征波段的选择,一方面可以简化模型,提高有效信息率,另一方面可以提高模型的预测能力和稳健性<sup>[13]</sup>。在建立多元校正分析模型中,目前常用的波长选择方法主要分为单个波长的选择和区间波长的选择,如遗传算法、粒子群优化算法和间隔偏最小二乘法、间隔变量迭代空间收缩法等一些改进的优化算法<sup>[14]</sup>。iPLS 是将全段光谱划分为若干个等间隔的子区间,然后在各子区间构建相应的 PLS 回归模型,通过构建的模型预测结果选择特征波长变量<sup>[15]</sup>。

本文采用间隔偏最小二乘法将可见-近红外全光谱划分为 380~500 nm、501~616 nm、617~726 nm 和 727~831 nm 这 4 个等宽子区间,然后建立各子区间及全光谱区间与各助剂浓度值模型。以决定系数( $R^2$ )和均方根误差( $R_{MSE}$ )为评价指标对全光谱模型和局部光谱模型进行验证,比较全光谱模型和各局部模型 $R_{MSE}$ 的值,选择 $R_{MSE}$ 值最小的区间建立最优 PLS 模型。如表 4 所示。

表 3 不同预处理方法下的 PLS 定量交互验证比较

Table 3 Comparison of quantitative cross-validation of PLS under different pretreatment methods

Types of additives	Preprocessing method	Number of main factors	Calibration set		Prediction set	
			$R_c^2$	$R_{MSEC}$	$R_p^2$	$R_{MSEP}$
Alcohol	Mapminmax	1	0.924	0.054	0.970	0.027
	Smoothts-g	1	0.924	0.054	0.979	0.022
	1st	1	0.909	0.059	0.993	0.013
	2st	1	0.706	0.106	0.939	0.039
	SG	1	0.924	0.054	0.970	0.027
	SNV	1	0.916	0.057	0.910	0.047
Toning yellow	Mapminmax	1	0.893	0.026	0.936	0.017
	Smoothts-g	1	0.923	0.022	0.977	0.010
	1st	1	0.972	0.013	0.987	0.008
	2st	1	0.733	0.041	0.763	0.026
	SG	1	0.897	0.023	0.950	0.012
	SNV	1	0.923	0.021	0.979	0.008
Toning red	Mapminmax	1	0.627	0.041	0.906	0.016
	Smoothts-g	1	0.973	0.011	0.998	0.002
	1st	1	0.537	0.046	0.799	0.024
	2st	1	0.929	0.018	0.901	0.017
	SG	1	0.569	0.044	0.787	0.024
	SNV	1	0.938	0.017	0.977	0.008

表 4 iPLS 不同波段建模结果比较

Table 4 Comparison of iPLS modeling results in different bands

Types of additives	Interval selection /nm	Preprocessing method	Calibration set		Prediction set	
			$R_c^2$	$R_{MSEC}$	$R_p^2$	$R_{MSEP}$
Alcohol	380-500	Smoothts-g	0.9223	0.0547	0.9798	0.0223
	501-616		0.9237	0.0542	0.9790	0.0227
	617-726		0.9242	0.0540	0.9785	0.0230
	727-831		0.9235	0.0565	0.9781	0.0237
Toning yellow	380-500	1st	0.9772	0.0119	0.9771	0.0010
	501-616		0.9785	0.0116	0.9843	0.0083
	617-726		0.8794	0.0275	0.9821	0.0089
	727-831		0.9722	0.0132	0.9870	0.0075
Toning red	380-500	Smoothts-g	0.9518	0.0148	0.9948	0.0038
	501-616		0.9510	0.0149	0.9929	0.0036
	617-726		0.9533	0.0145	0.9932	0.0043
	727-831		0.9518	0.0147	0.9946	0.0039

### 4.3 模型的验证结果

选择在高斯窗平滑和一阶导数的最优预处理方法的基础上结合特征光谱波段,建立各助剂浓度值的 PLS 数学模型。选取对应相关系数值最高、均方根误差值最小的模型。具体地,乙醇助剂在 380~500 nm 内建立的最优浓度预测模型的  $R_p^2$  为 0.9798,  $R_{MSEP}$  为 0.0223, 预测效果如图 3 所示。调色黄助剂在 380~500 nm 内建立的最优浓度校正模型的校正集  $R_p^2$  最大

为 0.9772,  $R_{MSEP}$  为最小为 0.0119, 预测集的  $R_p^2$  为 0.9771,  $R_{MSEP}$  为 0.0010, 预测效果如图 4 所示。调色红助剂在 380~500 nm 内建立的最优浓度预测模型的  $R_p^2$  为 0.9948,  $R_{MSEP}$  为 0.0038, 预测效果如图 5 所示。实验结果表明,最优预处理方法结合 iPLS 构建的数学模型,可以准确预测水性油墨助剂的浓度变化。

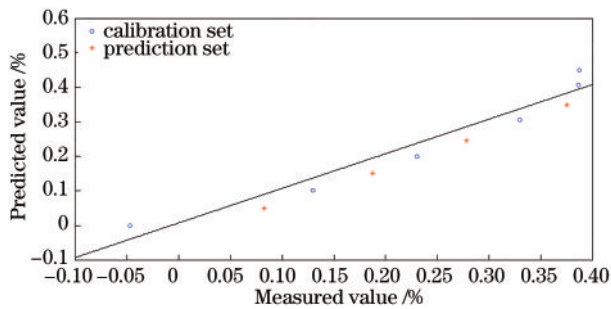


图 3 乙醇助剂浓度测量值与预测值的相关关系

Fig. 3 Correlation between measured value and predicted value of concentration of alcohol additives

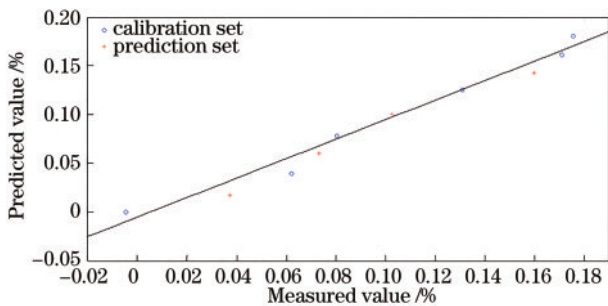


图 4 调色黄助剂浓度测量值与预测值的相关关系

Fig. 4 Correlation between measured value and predicted value of concentration of toning yellow additives

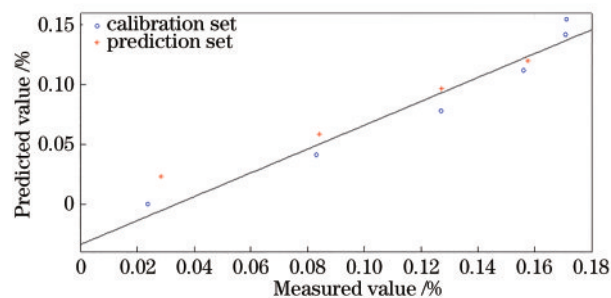


图 5 调色红助剂浓度测量值与预测值的相关关系

Fig. 5 Correlation between measured value and predicted value of concentration of toning red additive

## 5 结 论

本文应用可见/近红外光谱定性定量分析技术对水性油墨各助剂类型和浓度进行有效鉴别和准确预测分析。通过间隔波段选取法选择特征光谱波段,对特征波段范围内的光谱信息进行主成分分析,建立不同助剂类型的鉴别分析模型。实验结果表明,在 617~726 nm 特征波段内,采用主成分分析可以准确鉴别不同助剂的类型。然后,比较了不同预处理方法对模型精度的影响以及通过 PLS 和 iPLS 建立的定量分析模型的预测能力。实验结果表明,采用间隔偏最小二乘波段选取法选择特征光谱波段结合最佳预处理方法构建的水性油墨助剂浓度定量分析的 PLS 模型,通过减少冗余变量,提高模型的稳健性和预测能力。研究表

明,在 380~500 nm 光谱波段内,结合化学计量学方法建立定性定量预测模型可以检测水性油墨助剂的类型和浓度,为后续印刷生产过程中水性油墨在线检测与控制提供了新的技术方法。

## 参 考 文 献

- [1] 王小芳,李昭,孙建明. 环保水性油墨制备技术与应用现状分析[J]. 科学技术与工程, 2017, 17(15): 167-175.  
Wang X F, Li Z, Sun J M. Research on synthesis technology and application of environment-friendly water-based ink[J]. Science Technology and Engineering, 2017, 17(15): 167-175.
- [2] 韩四海,郭玉姗,李璇,等. 基于近红外光谱技术检测白酒基酒中乙醇含量的研究[J]. 中国酿造, 2018, 37(9): 158-161.  
Han S H, Guo Y S, Li X, et al. Determination of ethanol in base liquor of Baijiu based on near infrared spectroscopy technology[J]. China Brewing, 2018, 37(9): 158-161.
- [3] 金焱,杜斌,智秀娟. NIR 技术快速鉴定牛奶品牌与掺假识别[J]. 食品研究与开发, 2016, 37(3): 178-181.  
Jin Y, Du B, Zhi X J. Fast recognition of adulterated milk and the brands of milk based on the NIR technology [J]. Food Research and Development, 2016, 37(3): 178-181.
- [4] 刘陵玉,常天英,李珂,等. 基于太赫兹辐射的黄芩苷光谱分析及定量检测[J]. 中国激光, 2020, 47(3): 0314001.  
Liu L Y, Chang T Y, Li K, et al. Spectral analysis and quantitative detection of baicalin based on terahertz radiation[J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(3): 0314001.
- [5] 王其,曾万鹏,夏志平,等. 基于随机森林算法的食源性致病菌拉曼光谱识别[J]. 中国激光, 2021, 48(3): 0311002.  
Wang Q, Zeng W D, Xia Z P, et al. Recognition of food-borne pathogenic bacteria by Raman spectroscopy based on random forest algorithm[J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(3): 0311002.
- [6] Chen H, Tan C, Lin Z, et al. Detection of melamine adulteration in milk by near-infrared spectroscopy and one-class partial least squares[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2017, 173: 832-836.
- [7] 盛晓慧,李宗朋,李子文,等. 近红外光谱技术定量检测果味啤中的果汁含量[J]. 食品与发酵工业, 2020, 46(4): 247-252.  
Sheng X H, Li Z P, Li Z W, et al. Quantification of fruit juice content in fruity beer by near-infrared spectroscopy [J]. Food and Fermentation Industries, 2020, 46(4): 247-252.
- [8] 王琼雅,夏君霞,吴镇君,等. 近红外光谱分析技术在植物蛋白饮料定量分析中的应用[J]. 中国酿造, 2017, 36(11): 143-148.  
Wang Q Y, Xia J X, Wu Z J, et al. Application of near infrared spectroscopy in quantitative analysis of vegetable protein drink[J]. China Brewing, 2017, 36(11): 143-148.

- [9] 戎念慈, 黄梅珍. 可见-近红外多光谱和多种算法模型融合的血迹年龄预测[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(1): 168-173.  
Rong N C, Huang M Z. Age estimation of bloodstains based on visible-near infrared multi-spectrum combined ensembling model[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(1): 168-173.
- [10] 陈颖, 张灿, 肖春艳, 等. 基于GWO-SVR的土壤镉元素含量含水率校正预测模型研究[J]. 光学学报, 2020, 40(10): 1030002.  
Chen Y, Zhang C, Xiao C Y, et al. Study on prediction model of soil cadmium content moisture content correction based on GWO-SVR[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(10): 1030002.
- [11] 白丽萍, 王伟, 王强, 等. 近红外光谱快速检测葡萄酒品质[J]. 浙江农业科学, 2021, 62(2): 389-391, 400.  
Bai L P, Wang W, Wang Q, et al. Rapid determination of quality of wine by near infrared spectroscopy[J]. Journal of Zhejiang Agricultural Sciences, 2021, 62(2): 389-391, 400.
- [12] 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.  
Chu X L. Molecular spectroscopy analytical technology combined with chemometrics and its applications[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2011.
- [13] 王立琦, 刘亚楠, 张青, 等. 食用油脂酸值近红外光谱特征波长优选[J]. 食品科学, 2016, 37(16): 205-210.  
Wang L Q, Liu Y N, Zhang Q, et al. Optimization of characteristic wavelength variables of near infrared spectroscopy for detecting edible oil acid value[J]. Food Science, 2016, 37(16): 205-210.
- [14] 汪恺, 杜文莉, 隆建. 在线自适应波长选择方法及其在汽油调和过程中的应用[J]. 化工学报, 2021, 72(2): 1059-1066.  
Wang K, Du W L, Long J. Online adaptive wavelength selection method and its application in gasoline blending process[J]. CIESC Journal, 2021, 72(2): 1059-1066.
- [15] 刘鑫, 冒智康, 张小鸣, 等. 基于改进遗传算法的区间光谱特征波长变量选择方法[J]. 江苏大学学报(自然科学版), 2020, 41(3): 321-327.  
Liu X, Mao Z K, Zhang X M, et al. Selection method of interval spectrum feature wavelength variables based on improved genetic algorithm[J]. Journal of Jiangsu University (Natural Science Edition), 2020, 41(3): 321-327.