

激光与光电子学进展

近红外光谱快速测定电子烟油中烟碱含量的 波段优选研究

李明¹, 刘维涓¹, 朱艳梅², 卫青¹, 徐天养², 杨艳梅¹, 许孟操¹, 李长昱^{1*}

¹云南瑞升烟草技术(集团)有限公司, 云南 昆明 650106;

²云南省烟草公司文山州公司, 云南 文山 663000

摘要 围绕电子烟油中烟碱含量的近红外测量模型,采用 63 个不同烟碱含量和不同口味的电子烟油样品进行光谱数据的采集,利用蒙特卡罗交互验证法剔除异常样本后,采用区间偏最小二乘法(iPLS)、组合区间偏最小二乘法(SiPLS)选择最佳波长并建立校正模型。结果表明,iPLS 算法识别出的近红外测量电子烟油中烟碱含量的特征波段分布在 1090~1228 nm 和 1370~1508 nm 这两个波段附近,SiPLS 算法通过对不同波段进行组合,进一步确定了最佳波段为 1126~1240 nm, 1358~1414 nm, 1474~1530 nm 这一波段组合,SiPLS-PLS 模型与全谱-PLS 模型相比,所采用的变量数降低了 2/3,预测均方误差值从 1.188 降低到了 0.963,模型预测的准确性得到了提高。

关键词 光谱学; 电子烟油; 烟碱; 近红外; 波段优选; 区间偏最小二乘法; 组合区间偏最小二乘法

中图分类号 O657.33

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202259.0730001

Rapid Determination of Nicotine in E-Liquid by Near Infrared Spectroscopy Based on Wavelength Optimization

Li Ming¹, Liu Weijuan¹, Zhu Yanmei², Wei Qing¹, Xu Tianyang², Yang Yanmei¹,
Xu Mengcao¹, Li Changyu^{1*}

¹Yunnan Reascend Tobacco Technology(Group)Co., Ltd., Kunming, Yunnan 650106, China;

²Wenshan Branch of Yunnan Tobacco Company, Wenshan, Yunnan 663000, China

Abstract To establish the near infrared measurement model of nicotine content in e-liquid, 63 samples with different nicotine contents and tastes were collected. After eliminating the abnormal samples via Monte Carlo cross validation, the interval partial least squares (iPLS), and synergy interval partial least squares (SiPLS) methods were used to select the optimal wavelength, and subsequently, the correction model was established. The results show that iPLS identified the characteristic wavelength bands of 1090–1228 nm and 1370–1508 nm. By combining the different bands, SiPLS determined the optimal bands as 1126–1240 nm, 1358–1414 nm, and 1474–1530 nm. When compared with the full-spectrum PLS model, the variables used in the SiPLS-PLS model reduced by two-thirds and the mean square error of prediction value reduced from 1.188 to 0.963; thus, improving the accuracy of the model.

Key words spectroscopy; e-liquid; nicotine; near infrared; wavelength optimization; interval partial least squares; synergy interval partial least squares

收稿日期: 2021-06-07; 修回日期: 2021-06-30; 录用日期: 2021-07-09

基金项目: 云南省重点研发计划(2017IB023)、云南瑞升烟草技术(集团)有限公司内部项目(RS2019003)

通信作者: lichangyu@reascend.com

1 引言

烟油型电子烟作为一种新型烟草制品,在全球范围内受到越来越多的关注^[1-2]。电子烟抽吸时所使用的烟油主要由溶剂、烟碱和香味物质三部分构成,其中溶剂一般为1,2-丙二醇和丙三醇,总含量在90%以上;香味物质主要是根据消费者对不同口味的需求,添加如烟草、薄荷、咖啡、水果等的香味成分;烟碱作为电子烟油的关键成分之一,其含量一般为0~3%,可以给消费者提供生理满足感^[3]。目前,电子烟油中烟碱含量的检测方法采用气相色谱法、液相色谱法、紫外分光光度法、原子吸收光谱法、极谱分析法等^[4],这些方法存在检测时间长、样品预处理繁琐、费用高等缺点^[5],因此,需要提出一种便捷的测量电子烟油中烟碱含量的方法。

近年来,近红外光谱技术以其独特的优势在多个领域得到了日益广泛的应用^[6],在国内烟草行业,近红外光谱分析技术已成为重要的烟草质检质控手段之一^[7],但在电子烟油领域的应用还鲜有报道,杨双艳等^[8]采用极限学习机回归建立了电子烟油烟碱含量的定量预测模型,但采用的设备为傅里叶变换近红外光谱仪,并没有对特征波段进行系统分

析。本研究采用的设备为便携式近红外光谱仪,具有体积小、成本低、易推广等优势^[6],通过采集不同烟碱含量的电子烟油光谱数据,采用区间偏最小二乘法(iPLS)、组合区间偏最小二乘法(SiPLS)进行波长的选择,确定最佳的特征波长范围,尽可能地将干扰波段剔除,以期得到预测能力强、稳健性好的电子烟油烟碱含量预测模型。

2 实验方法

2.1 光谱数据采集

本研究采用的电子烟油样品来源于云南拓宝科技有限公司,烟碱含量分布范围在1~56 mg/g之间,口味包含烟草、咖啡、芒果、苹果、巧克力等,样品数量共有63个。采用的仪器为台湾中强光电子公司生产的便携式穿透型近红外光谱仪(型号:NIR-M-T1),扫描模式为Column,输出数据为Absorbance,扫描时将烟油装入光程为1 mm的比色皿进行光谱数据的采集,每个样本采集3条光谱,平均光谱作为该样品的代表光谱。光谱有效波长范围为950~1650 nm,波长间隔为2 nm,波点数为349个,63个样本的原始光谱和一阶求导光谱如图1所示。

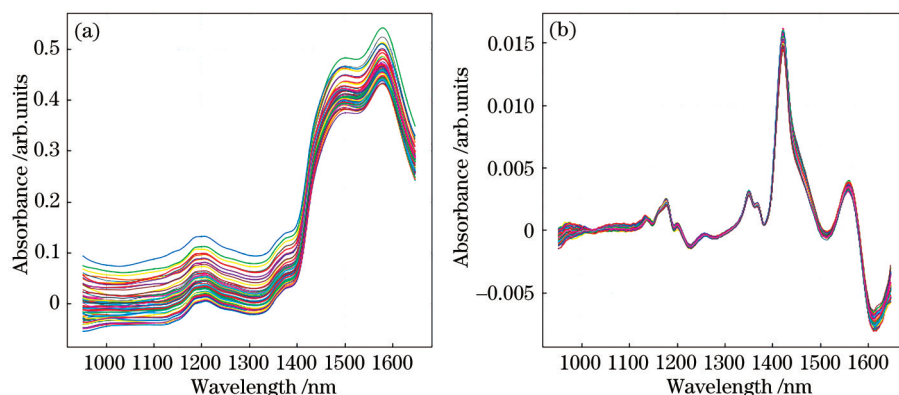


图1 电子烟油光谱图。(a)原始光谱;(b)一阶求导光谱

Fig. 1 Spectra of e-liquid. (a) Original spectrum; (b) first derivative spectrum

2.2 异常样本识别方法

异常样本参与建模会误导近红外光谱变量的选择,还会影响模型的参数估计,降低模型的准确度^[9]。本研究采用蒙特卡罗交互验证法进行异常样本的识别,蒙特卡罗交互验证算法(MCCV)又称为统计模拟方法^[10],其原理是采用随机的方式将样本集划分为校正集和预测集,用校正集建模并对没参与建模的预测集进行误差的计算,通过几千次甚至上万次随机采集后,每个样本都可以得到一个预测

误差的分布。正常样本的预测误差和均方差较小,一般都会分布在零点附近,而异常样本的预测误差或方差较大,会远离零点。与传统方法相比,蒙特卡罗交互验证法具有较高的识别奇异样本的能力^[10-11]。

2.3 特征波长选择算法

电子烟油的光谱中除含有反映烟碱含量的特征信息外,还含有大量反映其他组分的无用信息。采用全谱建模不仅模型的复杂度高,而且冗余波段会影响校正模型的准确度,在建模前先进行特征波

长的选择,可以有效降低模型的复杂度,提高模型的预测能力和稳健性^[12-13]。iPLS是由Nørgaard等^[14]在2000年提出的,其原理是将整个光谱划分为 n 个等宽的子区间,然后在每个子区间用偏最小二乘法(PLS)进行回归,通过交叉验证均方根误差(RMSECV)进行最优区间的判断,选择误差最小的区间作为特征波段;SiPLS是在iPLS基础上优化形成的波长选择方法,该方法在iPLS子区间划分的基础上,通过计算所有可能的 j 个子区间的组合模型,得到性能最好的一个组合区间^[15-17]。

2.4 模型评价

采用交互验证均方误差(MSECV)对iPLS和SiPLS的波长选择模型进行评价,采用校正均方误差(MSEC)、预测均方误差(MSEP)和决定系数(R^2)对全谱-PLS、iPLS-PLS、SiPLS-PLS优选模型进行评价。其中, R^2 越大,MSEC和MSECV越小,模型的精度越高;MSEP越小,模型的预测能力越好^[18]。

3 实验结果

3.1 蒙特卡罗交互验证算法识别异常样本

利用蒙特卡罗交互验证算法随机将样本集中70%的数据划分为校正集,剩余30%作为预测集,将经过一阶求导预处理后的光谱数据5000次随机采样后,计算得到异常样本的分布如图2所示,横坐标为平均绝对误差,纵坐标为每个样本所有误差值的方差。从图中可以看出,经过5000次随机采样后识别得到的具有明显离群现象的异常样本序号为57、58、59、60、61这五个样本,进一步分析后发现,57号样本使用的溶剂为丙二醇和丙三醇,比例为6:4;58、59两个样本使用的溶剂为丙三醇,其余为

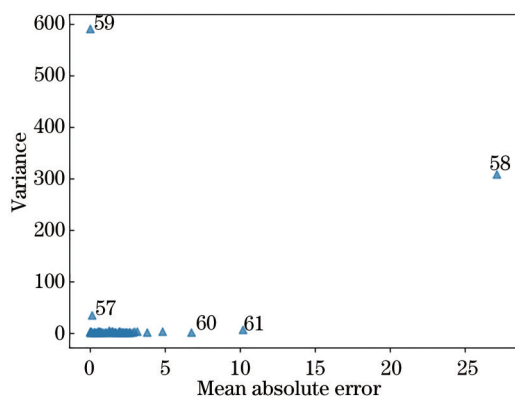


图2 5000次随机采样后异常样本分布情况

Fig. 2 Distribution of abnormal samples after 5000 random sampling

丙二醇;60、61两个样本添加的香精比例较高,为10%,其余香精添加比例在1%~5%之间。说明不同溶剂和不同香精添加比例会对模型效果产生影响,为提高模型质量,将这五个异常样本剔除后再进行后续分析工作。

3.2 iPLS特征波长选择

为消除外部环境的干扰,提高光谱的分辨率^[19],采用一阶求导对光谱数据进行预处理,并将预处理后的光谱变量分别划分为5、7、10、12个等宽的子区间,对各个子区间采用PLS建立回归模型,并计算每个子区间的交叉验证均方误差(MSECV)作为评价依据,如图3所示,对每一种子区间数的划分选择前4个MSECV最小波段进行对比分析,如表1所示。

根据图3并结合表1可以看出,近红外测量电子烟油中烟碱含量的特征波段分布在1090~1228 nm和1370~1508 nm这两个波段附近,用该位置的波段计算得到的MSECV值均较低。结合近红外吸收光谱与烟碱的分子结构($C_{10}H_{14}N_2$)进行分析,可发现烟碱中含有丰富的C—H键和少量N—H键,在近红外光谱区的主要吸收谱带位置上^[9],两个特征波段正好位于在C—H键的吸收谱带区域。其中,MSECV最低的是区间数为7时的1350~1448 nm波段,与区间数为5时的最优波段1370~1508 nm相比,该波段的范围得到了进一步压缩,波点数从70个降低到了50个,但随着区间数从7增加到10和12,每个区间的波点数也分别降低到了35和29,区间内光谱所蕴含的有效特征信息也开始逐步减少,计算得到的MSECV值逐渐变大。因此,采用iPLS算法时,将光谱划分为7个波段是较为理想的。

3.3 SiPLS特征波长选择

由于iPLS算法只能选择一个区间,为弥补单一区间选择可能造成的有效特征信息遗漏,在上述iPLS区间划分的基础上,再采用SiPLS算法分别建立组合2区间、3区间和4区间的组合区间偏最小二乘模型,每个组合按照MSECV值从小到大的顺序挑选前3个精度最高的模型进行对比分析,5、7、10、12个子区间划分的组合2区间、3区间和4区间偏最小二乘模型结果分别如表2~5所示。

由表2~5可知,随着区间量和组合区间数的不断增加,组合量迅速增长,从最低的5种组合量增加到了最高的495种组合量,所带来的计算压力和数据

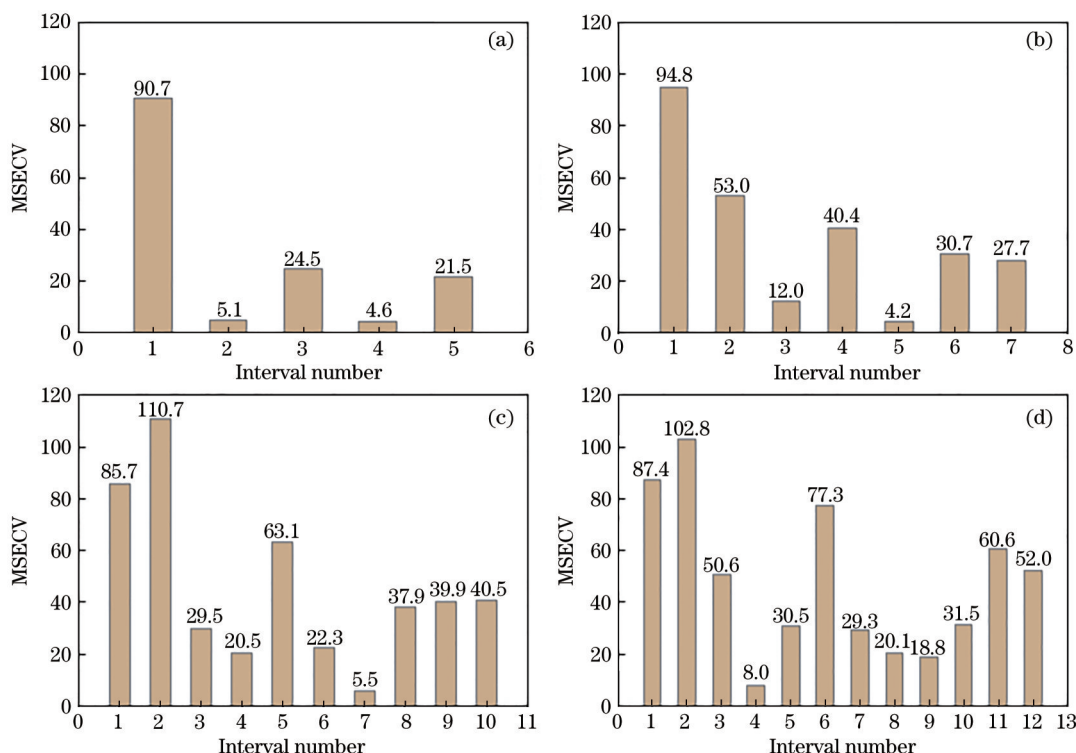


图 3 iPLS 波段选择。(a) 5 个子区间; (b) 7 个子区间; (c) 10 个子区间; (d) 12 个子区间

Fig. 3 iPLS wavelength selection. (a) 5 sub-interval; (b) 7 sub-interval; (c) 10 sub-interval; (d) 12 sub-interval

表 1 5, 7, 10, 12 个子区间 iPLS 建模结果对比

Table 1 Comparison of 5, 7, 10, and 12 sub-interval iPLS modeling results

Interval number	Order number	Waveband /nm	Number of wavelengths	Principal component	MSECV
5	2	1090-1228	70	9	5.05
	3	1230-1368	70	8	24.48
	4	1370-1508	70	7	4.57
	5	1510-1648	70	6	21.49
7	3	1150-1248	50	9	12.02
	5	1350-1448	50	9	4.16
	6	1450-1548	50	5	30.73
10	7	1550-1648	50	6	27.68
	3	1090-1158	35	5	29.51
	4	1160-1228	35	7	20.49
	6	1300-1368	35	7	22.29
12	7	1370-1438	35	8	5.48
	4	1126-1182	29	6	7.97
	5	1184-1240	29	6	30.50
	8	1358-1414	29	6	20.06
	9	1416-1472	29	5	18.77

分析量也越来越大,但由此产生的模型性能提升效果也较为显著,MSCV 值从 iPLS 中最低的 4.16 降低到了 0.97,相应的波点数也有一定的增加,说明单一区间选择存在明显的有效特征信息遗漏,通过 SiPLS 算法对不同波段进行组合可进一步提高模型的预测

精度。其中,MSECV 值最低的为 12 子区间中 4 区间组合计算得到的 1126~1240 nm, 1358~1414 nm, 1474~1530 nm 这一波段组合,其在光谱图上的位置如图 4 所示,该波段组合同样分布在 iPLS 算法识别出的 1090~1228 nm 和 1370~1508 nm 这一特征波段

表 2 5 个子区间的 SiPLS 组合建模结果
Table 2 Combination modeling results of SiPLS in 5 sub-interval

Combination interval	Combinations	Order number	Waveband /nm	Number of wavelengths	Principal component	MSECV
2	10	2,4	1090-1228,1370-1508	140	13	2.09
		3,4	1230-1368,1370-1508	140	14	3.73
		2,3	1090-1228,1230-1368	140	10	3.94
3	10	2,3,4	1090-1228, 1230-1368, 1370-1508	210	10	2.00
		1,2,4	952-1088,1090-1228,1370-1508	209	11	2.66
		2,4,5	1090-1228,1370-1508,1510-1648	210	10	2.72
4	5	1,2,3,4	952-1088,1090-1228,1230-1368,1370-1508	279	11	2.48
		2,3,4,5	1090-1228,1230-1368,1370-1508,1510-1648	280	10	2.69
		1,2,4,5	952,1088,1090,1228,1370,1508,1510,1648	279	11	3.07

表 3 7 个子区间的 SiPLS 组合建模结果
Table 3 Combination modeling results of SiPLS in 7 sub-interval

Combination interval	Combinations	Order number	Waveband /nm	Number of wavelengths	Principal component	MSECV
2	21	3,5	1150-1248,1350-1448	100	12	1.28
		5,6	1350-1448,1450-1548	100	14	2.72
		4,5	1250-1348,1350-1448	100	10	3.09
3	35	3,4,5	1150-1248, 1250-1348, 1350-1448	150	11	1.08
		1,3,5	952-1048,1150-1248,1350-1448	149	14	1.44
		2,3,5	1050-1148,1150-1248,1350-1448	150	11	1.55
4	35	2,3,4,5	1050-1148,1150-1248,1250-1348,1350-1448	200	12	1.31
		1,3,4,5	952-1048,1150-1248,1250-1348,1350-1448	199	14	1.35
		3,4,5,6	1150-1248,1250-1348,1350-1448,1450-1548	200	9	1.74

表 4 10 个子区间的 SiPLS 组合建模结果
Table 4 Combination modeling results of SiPLS in 10 sub-interval

Combination interval	Combinations	Order number	Waveband /nm	Number of wavelengths	Principal component	MSECV
2	45	4,7	1160-1228,1370-1438	70	10	1.97
		4,9	1160-1228,1510-1578	70	12	2.71
		6,7	1300-1368,1370-1438	70	9	3.09
3	120	4,7,9	1160-1228, 1370-1438, 1510-1578	105	14	1.38
		4,6,7	1160-1228,1300-1368,1370-1438	105	10	1.46
		4,5,7	1160-1228,1230-1298,1370,1438	105	12	1.60

续表

Combination interval	Combinations	Order number	Waveband /nm	Number of wavelengths	Principal component	MSECV
4	210	4, 6, 7, 9	1160-1228, 1300-1368, 1370-1438, 1510-1578	140	14	1.43
		3, 4, 5, 7	1090-1158, 1160-1228, 1230-1298, 1370-1438	140	13	1.52
		3, 4, 6, 7	1090-1158, 1160-1228, 1300-1368, 1370-1438	140	11	1.53

表 5 12 个子区间的 SiPLS 组合建模结果

Table 5 Combination modeling results of SiPLS in 12 sub-interval

Combination interval	Combinations	Order number	Waveband /nm	Number of wavelengths	Principal component	MSECV
2	66	8, 10	1358-1414, 1474-1530	58	9	2.60
		4, 10	1126-1182, 1474-1530	58	8	3.24
		8, 9	1358-1414, 1416-1472	58	12	3.59
3	220	4, 8, 10	1126-1182, 1358-1414, 1474-1530	87	10	1.22
		4, 7, 10	1126-1182, 1300-1356, 1474-1530	87	10	1.64
		4, 8, 9	1126-1182, 1358-1414, 1416-1472	87	10	1.94
4	495	4, 5, 8, 10	1126-1182, 1184-1240, 1358-1414, 1474-1530	116	13	0.97
		4, 7, 8, 10	1126-1182, 1300-1356, 1358-1414, 1474-1530	116	10	1.31
		4, 8, 10, 11	1126-1182, 1358-1414, 1474-1530, 1532-1588	116	13	1.32

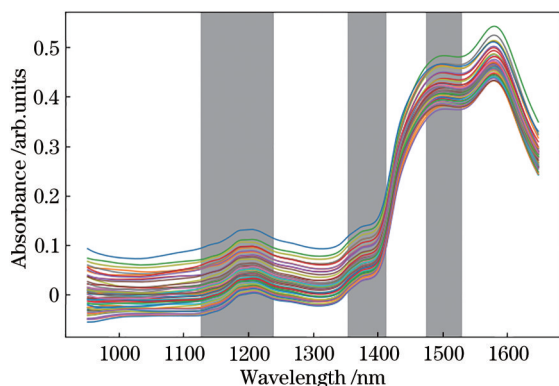


图 4 12 个子区间 SiPLS 组合建模最佳波段

Fig. 4 Best band of SiPLS combination modeling in 12 sub-interval

附近,但与之相比,波段选择的精细程度更高。在近红外光谱区的主要吸收谱带位置上^[20], 1126~1240 nm 和 1358~1414 nm 位于 C—H 键的吸收谱带区域, 1474~1530 nm 位于 N—H 键的吸收谱带区域, 因此,采用该波段组合能更全面地反映烟碱的分子结构特征。

3.4 波段优选建模验证

为进一步验证不同波段选择条件下的模型效果,采用一阶求导后的全谱、iPLS 中 MSECV 值最小的 1350~1448 nm 波段、SiPLS 中 MSECV 值最小的 1126~1240 nm, 1358~1414 nm, 1474~1530 nm 波段组合进行建模分析,建模时 70% 的数据为校正集,剩下 30% 的数据为预测集,采用 PLS 建立回归模型,全谱、iPLS、SiPLS 不同优选波段的建模效果如表 6 所示。

可以看出 MSECV 和 MSECP 最小的建模方法为 SiPLS-PLS,不仅模型的精度最高,而且所使用的波点数仅为全谱的 1/3,其次是全谱-PLS,而 iPLS-PLS 由于所采用的波点数较少,部分有效特征信息存在遗漏的情况,其模型效果还没有全谱-PLS 的好。因此,在构建电子烟油中烟碱含量的近红外测量模型时,利用 SiPLS 算法选择得到的特征波段进行建模,能有效剔除干扰波段,所构建的模型与全谱模型相比,模型的复杂度更低、预测能力和稳健性更高, SiPLS 波长选择模型预测值与实际值散点图如图 5 所示。

表 6 全谱、iPLS、SiPLS 波段优选建模比较

Table 6 Modeling comparison of full-spectrum, iPLS, and SiPLS wavelength selection

Method	Waveband /nm	Number of wavelengths	Principal component	MSEC	MSEP	R^2
Full-spectrum-PLS	952-1648	349	10	0.683	1.188	0.997
iPLS-PLS	1350-1448	50	8	1.122	2.909	0.993
SiPLS-PLS	1126-1240, 1358-1414, 1474-1530	116	9	0.500	0.963	0.997

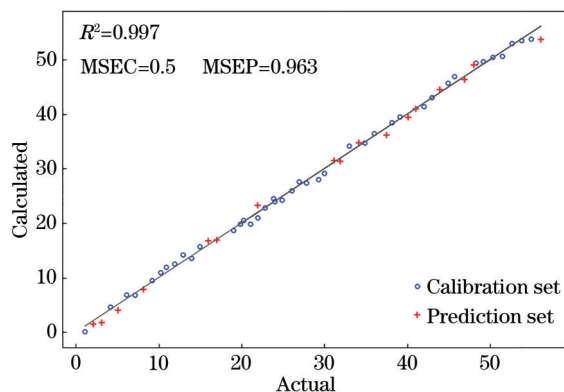


图 5 SiPLS 波长选择模型预测值与实际值散点图

Fig. 5 Scatter plot of predicted and actual values of SiPLS wavelength selection modeling

4 结 论

基于 iPLS 算法和 SiPLS 算法对近红外测量电子烟油的特征波段进行了筛选和验证,根据 iPLS 算法的波长选择计算结果可知,近红外测量电子烟油中烟碱含量的特征波段分布在 1090~1228 nm 和 1370~1508 nm 两个波段附近,再采用 SiPLS 算法对不同波段进行组合,确定了 MSEC 值最低的波段为 1126~1240 nm, 1358~1414 nm, 1474~1530 nm 这一波段组合。最后利用全谱、iPLS 和 SiPLS 的优选波段进行建模对比, SiPLS-PLS 的模型效果最佳,其次是全谱-PLS,最差是 iPLS-PLS,说明 SiPLS 算法能较好地解决 iPLS 算法中单一区间选择造成的有效特征信息遗漏问题, SiPLS-PLS 模型与全谱-PLS 模型相比,所采用的波点数降低了 2/3,模型预测的精度和稳健性都得到了进一步的提高。

参 考 文 献

- [1] Li D, Gao Y H, Li Z H, et al. Similarity experiment on temperature characteristics of e-cigarette and establishment of scaled-model experimental platform [J]. Acta Tabacaria Sinica, 2020, 26(5): 10-17.
李典, 高峰涵, 李志华, 等. 烟油型电子烟雾化温度特性的相似扩尺实验研究[J]. 中国烟草学报, 2020, 26(5): 10-17.
- [2] Hong Q Y, Zheng L, Liu Y L, et al. Technological analysis of patents related to e-cigarettes in China[J]. Tobacco Science & Technology, 2019, 52(3): 74-85.
洪群业, 郑路, 刘亚丽, 等. 国内电子烟专利技术分析[J]. 烟草科技, 2019, 52(3): 74-85.
- [3] Yang Y, Xu J, Liu J L, et al. Stability and release behavior of nicotine in e-liquids[J]. Acta Tabacaria Sinica, 2017, 23(6): 16-21, 30.
杨洋, 徐建, 刘金莉, 等. 电子烟液中烟碱稳定性及其释放行为分析[J]. 中国烟草学报, 2017, 23(6): 16-21, 30.
- [4] Wan J C, Li J Z, Guo W, et al. Determination of nicotine in electronic tobacco oil by ultra-high performance convergent chromatography[J]. Physical Testing and Chemical Analysis (Part B: Chemical Analysis), 2019, 55(6): 705-709.
万吉纯, 李剑政, 郭文, 等. 超高效合相色谱法测定电子烟油中尼古丁的含量[J]. 理化检验-化学分册, 2019, 55(6): 705-709.
- [5] Wang S X, Xiao H, Yang Z F, et al. Detection of flavor adulterated Pu'er tea by near-infrared spectroscopy[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(23): 233005.
王淑贤, 肖航, 杨振发, 等. 香精掺假普洱茶的近红外光谱检测[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(23): 233005.
- [6] Chu X L, Shi Y Y, Chen P, et al. Research and application progresses of near infrared spectroscopy analytical technique in China in past five years[J]. Journal of Instrumental Analysis, 2019, 38(5): 603-611.
褚小立, 史云颖, 陈瀑, 等. 近五年我国近红外光谱分析技术研究与应用进展[J]. 分析测试学报, 2019, 38(5): 603-611.
- [7] Wang J J, Yang J H, Shao X G. Networking of near infrared spectroscopy for tobacco and its application perspective[J]. Journal of Instrumental Analysis, 2020, 39(10): 1218-1224, 1230.
王家俊, 杨家红, 邵学广. 烟草近红外光谱分析网络化及其应用进展[J]. 分析测试学报, 2020, 39(10): 1218-1224, 1230.

- 1218-1224, 1230.
- [8] Yang S Y, Zhou J, Shen Y W, et al. Rapid determination of nicotine content of e-cigarette liquid based on near-infrared spectroscopy technology[J]. *Journal of Instrumental Analysis*, 2020, 39(11): 1411-1415.
杨双艳, 周瑾, 沈彦文, 等. 基于近红外光谱技术的电子烟烟碱含量快速检测研究[J]. *分析测试学报*, 2020, 39(11): 1411-1415.
- [9] Chu X L, Liu H Y, Yan Z H. Technical manual of near infrared spectroscopy[M]. Beijing: China Machine Press, 2016.
褚小立, 刘慧颖, 燕泽程. 近红外光谱分析技术实用手册[M]. 北京: 机械工业出版社, 2016.
- [10] Wu S, Tu B, Chen Z, et al. Qualitative and quantitative analysis of olive oil adulteration by laser near infrared spectroscopy based on Monte Carlo cross validation[J]. *Food Science and Technology*, 2016, 41(10): 277-282.
吴双, 涂斌, 陈志, 等. 近红外光谱结合蒙特卡洛交互验证奇异样本筛选的橄榄油掺伪定性定量分析[J]. *食品科技*, 2016, 41(10): 277-282.
- [11] Li S F, Shan Y, Fan W, et al. Analysis of pH and acidity of honey by near infrared spectroscopy based on MCCV outlier detection and CARS variable selection[J]. *Food Science*, 2011, 32(8): 182-185.
李水芳, 单杨, 范伟, 等. 基于MCCV奇异样本筛选和CARS变量选择法对蜂蜜pH值和酸度的近红外光谱检测[J]. *食品科学*, 2011, 32(8): 182-185.
- [12] Jiang W W, Lu C H, Zhang Y J, et al. Research on maize component measurement of wavelength selection based on SiPLS and SPA[J]. *Journal of Electronic Measurement and Instrumentation*, 2017, 31(12): 1960-1966.
蒋薇薇, 鲁昌华, 张玉钧, 等. 基于SiPLS和SPA波长选择的玉米组分测量研究[J]. *电子测量与仪器学报*, 2017, 31(12): 1960-1966.
- [13] Kong Q M, Su Z B, Shen W Z, et al. Research of straw biomass based on NIR by wavelength selection of IPLS-SPA[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2015, 35(5): 1233-1238.
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.
- [14] Nørgaard L, Saudland A, Wagner J, et al. Interval partial least-squares regression (iPLS): a comparative chemometric study with an example from near-infrared spectroscopy[J]. *Applied Spectroscopy*, 2000, 54(3): 413-419.
- [15] Guo H X, Zhu S Q, Li Y P, et al. Visible-near infrared spectroscopy modeling on the contents of serum bilirubin based on iPLS and SiPLS[J]. *Journal of Optoelectronics·Laser*, 2016, 27(10): 1136-1144.
郭慧娴, 朱思祁, 黎远鹏, 等. 基于iPLS和SiPLS算法的人体血清胆红素含量的可见-近红外光谱建模[J]. *光电子·激光*, 2016, 27(10): 1136-1144.
- [16] Li W H, Xu L, Yang Y, et al. Near-infrared spectroscopy analysis of the intracellular glycogen content during the enhanced biological phosphorus removal process based on siPLS[J]. *Infrared Technology*, 2016, 38(12): 1053-1060.
李卫华, 徐玲, 杨英, 等. 基于siPLS的强化生物除磷污泥胞内糖原近红外分析[J]. *红外技术*, 2016, 38(12): 1053-1060.
- [17] Kong Q M, Gu J T, Gao R, et al. Study on detection of crude protein in ammonified and alkalized corn straw by spectrum characteristic band selection method based on synergy interval partial least squares[J]. *Journal of Instrumental Analysis*, 2020, 39(11): 1334-1343.
孔庆明, 谷俊涛, 高睿, 等. 基于组合偏最小二乘的特征波段优选方法在氨、碱化处理玉米秸秆粗蛋白检测中的研究[J]. *分析测试学报*, 2020, 39(11): 1334-1343.
- [18] Hao Y, Wu W H, Shang Q Y, et al. Analysis model of oleic and linoleic acids in camellia oil via near-infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2019, 39(9): 0930004.
郝勇, 吴文辉, 商庆园, 等. 山茶油中油酸和亚油酸近红外光谱分析模型[J]. *光学学报*, 2019, 39(9): 0930004.
- [19] Ran S, Ding J L, Ge X Y, et al. Estimation method of VIS-NIR spectroscopy for soil organic matter based on sparse networks[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(24): 242803.
冉思, 丁建丽, 葛翔宇, 等. 基于稀疏网络的可见光/近红外反射光谱土壤有机质含量估算[J]. *激光与光电子学进展*, 2020, 57(24): 242803.