

DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20240201004

拉曼光谱与中红外光谱融合技术快速定量 食用酒精的乙醇浓度

孙晓荣^{1,2*}, 闫思宁^{1,2}, 刘翠玲^{1,2}, 张善哲^{1,2}, 胡毅然^{1,2}

(1. 北京工商大学计算机与人工智能学院, 北京 100048;

2. 北京工商大学食品安全大数据技术北京市重点实验室, 北京 100048)

摘要: **目的** 利用拉曼光谱与中红外光谱的数据融合技术实现对食用酒精乙醇浓度(酒精度)的快速定量检测。**方法** 首先, 分别采集不同浓度食用酒精水溶液的拉曼光谱与中红外光谱。其次, 采用多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、卷积平滑(Savitzky-Golay, S-G)、一阶求导的方法对原始数据进行预处理。然后, 基于自举软缩减法(bootstrapping soft shrinkage, BOSS)和无信息变量消除算法(uninformative variable elimination, UVE)分别对预处理后的光谱数据进行特征提取, 并利用 X-Y 距离样本集划分法(sample set partitioning based on joint X-Y distance, SPXY)将光谱数据划分为校正集和预测集。最后, 建立基于拉曼光谱-中红外光谱数据融合的偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)食用酒精乙醇浓度预测模型, 并利用麻雀搜寻算法优化的混合核极限学习机算法(sparrow search algorithm-optimized hybrid kernel extreme learning machine, SSA-HKELM)提升预测性能, 实现对不同浓度食用酒精的快速、准确定量检测。**结果** 与拉曼光谱数据、中红外光谱数据以及中红外与拉曼光谱的数据层融合构建的预测模型相比, 中红外光谱与拉曼光谱特征层融合数据构建的预测模型具有更好的预测性能。其中, 最优模型的校正集均方根误差(root mean squared error of calibration set, RMSEC)为 0.98314, 校正集决定系数(R_c^2)为 0.99634, 预测集均方根误差(root mean squared error of prediction set, RMSEP)为 1.03256, 预测集决定系数(R_p^2)为 0.99036。**结论** 中红外光谱与拉曼光谱特征层融合预测模型可以实现对不同浓度食用酒精的高效定量检测, 为食用酒精的质量检测提供了有效的理论支持与技术保障。

关键词: 拉曼光谱; 中红外光谱; 光谱数据融合; 乙醇溶液

Integration technology of Raman and mid-infrared spectroscopy for rapid quantification of ethanol concentration in edible alcohol

SUN Xiao-Rong^{1,2*}, YAN Si-Ning^{1,2}, LIU Cui-Ling^{1,2}, ZHANG Shan-Zhe^{1,2}, HU Yi-Ran^{1,2}

(1. School of Computer Science and Artificial Intelligence, Beijing Technology and Business University,

基金项目: 北京市自然科学基金资助项目(4222043)、2021年教育部高教司产学研合作协同育人项目(202102341023)、2022年北京工商大学研究生教育教学改革专项(19008022056)

Fund: Supported by the Beijing Natural Science Foundation (4222043), the 2021 Industry-university Cooperative Education Project of Higher Education Department of Ministry of Education (202102341023), and the 2022 Beijing Technology and Business University Postgraduate Education and Teaching Reform Project (19008022056)

***通信作者:** 孙晓荣, 教授, 主要研究方向为智能测量技术与数据处理、系统建模与仿真方法、智能控制方法。E-mail: sxrchy@sohu.com

***Corresponding author:** SUN Xiao-Rong, Professor, School of Artificial Intelligence, Beijing Technology and Business University, No.11, Fucheng Road, Haidian District, Beijing 100048, China. E-mail: sxrchy@sohu.com

Beijing 100048, China; 2. Beijing Key Laboratory of Big Data Technology for Food Safety, Beijing Technology and Business University, Beijing 100048, China)

ABSTRACT: Objective To achieve rapid quantitative detection of ethanol concentration (alcohol content) in edible alcohol by data fusion techniques in Raman and mid-infrared spectroscopy. **Methods** First, Raman and mid-infrared spectra of edible alcohol aqueous solutions with different concentrations were separately acquired. Subsequently, the original data were preprocessed using multiplicative scatter correction (MSC), Savitzky-Golay (S-G) convolution smoothing, and first-order derivative methods. Then, based on bootstrapping soft shrinkage (BOSS) and uninformative variable elimination (UVE), feature extraction was performed on the preprocessed spectral data. The spectral data were further partitioned into calibration and prediction sets using sample set partitioning based on joint X-Y distance (SPXY). Finally, a predictive model for ethanol concentration in edible alcohol was established by integrating Raman and mid-infrared spectra through partial least squares regression (PLSR). The sparrow search algorithm-optimized hybrid kernel extreme learning machine (SSA-HKELM) was employed to enhance predictive performance, enabling rapid and accurate quantification of ethanol concentration in edible alcohol at various concentrations. **Results** Compared to the predictive models constructed by fusing Raman spectral data, mid-infrared spectral data, and layered data from mid-infrared and Raman spectra, the predictive model based on the fusion of mid-infrared and Raman spectral feature layers demonstrated superior predictive performance. The optimal model exhibited a root mean squared error of calibration set (RMSEC) of 0.98314, a coefficient of determination of the calibration set (R_c^2) of 0.99634, a root mean squared error of prediction set (RMSEP) of 1.03256, and a coefficient of determination of the prediction set (R_p^2) of 0.99036. **Conclusion** The fusion predictive model of mid-infrared and Raman spectral feature layers enables efficient quantitative detection of different concentrations of edible alcohol, providing effective theoretical support and technological assurance for the quality assessment of edible alcohol.

KEY WORDS: Raman spectroscopy; mid-infrared spectroscopy; spectrum integration technology; ethanol solution

0 引言

白酒是我国的传统饮料酒,在国民经济中占有重要地位^[1-2],其品质检测对于酿造业、食品安全以及消费者健康具有重要的学术和实践价值^[3-4]。依据酿造工艺分类,白酒可分为固态法白酒、液态法白酒和固液法白酒^[5]。其中,固态法白酒以粮食为原料,以小麦和麸皮制作的曲药为糖化剂,在泥池或陶缸中自然发酵一定时间,后经高温蒸馏而成^[6-7]。固液法白酒采用固液勾兑工艺,使用一定比例固态优质白酒与稀释的食用酒精勾兑而成^[7-8]。液态法白酒又称为酒精勾兑酒,是使用食用酒精加上一定比例的水和调味酒勾兑而成的白酒饮品^[9]。纯粮固态发酵白酒生产工艺复杂、周期较长、成本较高,致使其出酒率偏低、供应弹性较差,无法有效以需定产,且受众限于高端消费群体。固液法白酒和液态法白酒的生产过程中均选用和添加了食用酒精,这种酿酒新工艺不仅使得固液法白酒和液态法白酒具有传统固态发酵白酒的基本口感与风味,且大大缩短了白酒生产周期,降低了生产成本。因此,食用酒精是液态法白酒和固液法白酒生产过程中的重要添加物质^[10]。食用酒精也称为食用酿造酒精,是一种以谷物、薯类、糖蜜或其他可食用农作物为主要原料、经发酵、蒸馏精制而成、

供食品工业使用的含水酒精。在酒体设计中,食用酒精的作用主要体现在调整酒体风味、降低原酒成本及区别酒体档次 3 个层面^[11-14]。除在酿酒过程中发挥作用以外,食用酒精作为一种多功能成分,还被广泛应用于不同的食品制备过程,为食品赋予独特的风味。在面包、蛋糕等烘焙食品中,酒精可以帮助面团发酵,提高酥脆度和口感。在食品调味中,酒精可以提高食品的香味和口感,使食品更加美味可口。此外,食用酒精还能够防止食品受到微生物的侵害,从而延长食品的保质期。

食用酒精通常为乙醇的水溶液,其乙醇浓度(酒精度)通常是不确定的。在食品制备中,恰当的乙醇浓度可以确保产品达到理想的口感和风味,同时对防腐和防霉也有一定的作用^[15]。然而,过高或过低的乙醇浓度可能导致食品质量下降,影响产品的口感和外观,甚至对食品安全构成潜在威胁^[16]。综合考虑食用酒精的理化性质及其在生产实践中的应用范围,对食用酒精的浓度进行严格控制不仅有助于提高生产过程的稳定性,还能确保产品在使用中的安全性和有效性。因此,食用酒精乙醇浓度的检测方法对于白酒生产及食用酒精应用具有重要意义。测定食用酒精水溶液的浓度,传统方法主要包括重铬酸钾比色法、酒精计法、密度瓶法、碘量滴定法、莫尔氏盐法等,具有一定的

局限性,例如,重铬酸盐氧化法或比重法需要对样品进行蒸馏等处理,不仅费时烦琐、成本较高,还会对样品造成污染和破坏^[17-22]。鉴于食用酒精中的乙醇浓度这一参数在工业、医疗、食品等领域的特殊性与重要性,亟需更加高效的测量手段对其进行快速精确定量分析。

近年来,光谱技术快速、无损、高精度优势使其在药品鉴别、食品安全、半导体性能分析、医疗诊断等众多行业取得了丰富的研究与应用成果。在光谱检测方法中,拉曼光谱技术依据不同物质在特征光谱方面体现出的差异,以及同一物质对光散射特点的不同,可对物质进行定性判断及定量分析;中红外光谱技术可以对有机化合物、无机物以及混合物进行成分含量测定,其不仅可以对被测物体的成分进行定性判断,也可以对构成含量进行定量分析。张修兴^[23]采集了无水乙醇及 4 种不同品牌白酒的拉曼光谱,发现拉曼特征峰的峰值会随白酒酒精度的升高而增加;孙兰君等^[24]基于拉曼光谱技术研究了不同浓度乙醇溶液与其拉曼光谱特征峰峰值之间的关系,提出了一种适用于测量不同乙醇浓度的非线性回归分析方法;赵贤德等^[25]采集了葡萄酒与变质葡萄酒的中红外光谱数据,并建立了分类模型,正确识别率达到 94%;胡军等^[26]采集了甲醇汽油和乙醇汽油的中红外光谱,分别建立定性判别与定量分析模型,精确测定汽油中对应的醇及其含量。以上研究成果表明,利用拉曼光谱及中红外光谱技术可以实现对溶液中醇的类别及含量的鉴别与测量。从原理角度来看,中红外光谱是通过测量分子在中红外区域的振动能级转换而得到的,拉曼光谱则是通过测量分子在散射光谱中产生的频率变化而得到的,两种光谱在分子信息表达、样品适用性以及环境适应性等方面均具有互补性。具体来说,拉曼光谱和中红外光谱各自提供了不同的分子信息,其中,拉曼光谱具有分子结构指纹特征,而中红外光谱则更能提供分子功能基团及化学键信息。同时,拉曼光谱测试的样品制备过程简单且对水的吸收带不敏感,适宜测试各类样品,但容易受到荧光和自发性拉曼散射等干扰的影响;中红外光谱不会受到荧光影响,也不会热分解样品,但由于水会强烈吸收中红外辐射,其强烈吸收峰可能掩盖或扭曲样品中其他组分的光谱特征。通过拉曼光谱和中红外光谱的数据融合,不仅可以发挥它们在不同检测领域中的优势,还可以利用两种光谱的互补性提高对噪声干扰的抗性,提升拉曼光谱与中红外光谱对于物质检测分析的全面性、准确性和灵敏度^[27-28]。

综上,本研究采集浓度为 15%~90%食用酒精水溶液的拉曼光谱与中红外光谱,经归一化、光谱预处理、样本集划分及特征筛选后,分别基于拉曼光谱矩阵、中红外光谱矩阵、拉曼光谱与中红外光谱数据层融合矩阵以及特征层融合矩阵构建偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)校正模型,并采用麻雀搜寻算法优化的混合核极限学习机算法(sparrow search algorithm-optimized

hybrid kernel extreme learning machine, SSA-HKELM)模型进一步提升预测性能,实现对食用酒精中乙醇浓度的快速、高精度定量检测,以期为食用酒精的检测分析与质量控制提供新的研究思路。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

去离子水(北京伊诺凯公司);食用酒精(分析纯,龙糖酒精公司)。

DXR 激光共焦显微拉曼光谱仪(美国 Thermo Fisher Scientific 公司);BRUKER VERTEX70 傅里叶红外光谱仪(德国布鲁克公司)。

1.2 样品制备与光谱采集

1.2.1 样品制备

使用去离子水稀释食用酒精,配制具有不同乙醇浓度的食用酒精溶液(体积分数范围为 15%~90%),共计 75 份。

1.2.2 拉曼光谱的采集

DXR 激光共焦显微拉曼光谱仪的各项参数设置为:有效探测范围 0~3500 cm^{-1} ,奥林巴斯 BX51 研究级显微镜,10X 目镜聚焦,激光波长 532 nm,激光能量 24 mW,光栅 400 lines/mm,光阑 50,估计分辨率 4.7~8.7 cm^{-1} ,采集曝光时间 5 s,选择荧光修正,采用点扫描模式。实验前用聚乙烯对拉曼光谱仪进行峰位校准。实验过程中,取上述 75 份系列浓度食用酒精样品各 2 mL,分别滴在液体池中,进行拉曼光谱点扫描。每份样品只测量 1 次。在光谱测量过程中,每个样品选择 5 个不同的测量点,并以 5 个测量点的平均值作为单个样品的最终测量结果。

1.2.3 中红外光谱的采集

傅里叶红外光谱仪的各项参数设置为:波数范围 400~4000 cm^{-1} ,分辨率 16 cm^{-1} ,扫描次数 32 次。实验过程中,使用一次性塑料吸管移取适量不同浓度的食用酒精水溶液,缓慢滴在光谱仪的衰减全反射(attenuated total reflection, ATR)附件的检测孔上。每一样品的中红外光谱采集完毕后,均使用干燥的棉球将检测台擦拭干净,待检测区域自然干燥后,再使用新的塑料吸管移取下一组样品,避免交叉污染,提升测试结果的精度与准确性。

1.3 光谱数据预处理

在光谱实验系统中,收集的信号常伴随一定的噪声干扰。为了提高光谱数据的质量,消除由于仪器噪声、基线漂移以及光散射等对模型预测结果造成的不利影响,本研究采用了多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、卷积平滑(Savitzky-Golay, S-G)和一阶求导的方法进行光谱预处理。

MSC 可以消除光谱中由于多元散射引起的干扰。多元散射通常导致光谱形状的变形,而 MSC 通过对每个光

谱点进行数学校正, 调整光谱的整体形状, 从而减少多元散射的影响, 提高光谱的可比性和解释性。S-G 采用滑动窗口和多项式拟合的方法对光谱曲线进行平滑处理。S-G 方法在每个窗口上应用多项式拟合, 有效去除噪声和突发性波动, 使光谱更加平滑, 提高信噪比。这有助于保留光谱特征的同时减少细微噪声, 使得光谱更具可读性。一阶求导被用于突出光谱数据中的梯度信息, 有助于检测光谱中的斜率变化和峰值位置。这些预处理步骤能够有效地提升光谱数据的准确性和可解释性, 为后续分析提供更可靠的基础^[29-30]。与此同时, 由于拉曼光谱数据与中红外光谱数据在光谱强度上差异较大, 为了实现光谱信息的有效融合, 在对原始光谱信息进行预处理前, 首先对两种不同的光谱数据进行归一化操作。本研究中, 采用均值—标准差归一化方法, 即将每个光谱数据点的数值减去该条光谱数据的平均值, 然后再除以该条光谱数据的标准差。通过归一化操作, 消除不同类型光谱数据之间的量纲和幅度差异, 使它们具有相似分布范围, 从而更容易实现它们之间的有效融合。将二者的光谱强度等比缩放到一个量级后, 再应用上述方法对光谱进行进一步的预处理。

1.4 算法原理

1.4.1 光谱特征筛选

为了提高模型的预测精度和稳定性, 克服原始光谱中包括噪声在内的冗余信息对于建模结果的影响, 本研究选用自举软缩减法(bootstrapping soft shrinkage, BOSS)和无信息变量消除法(uninformative variable elimination, UVE)两种特征选择算法对原始光谱进行特征筛选^[31-33]。

BOSS 算法是基于模型集群分析策略(model population analysis, MPA)的变量选择方法^[34]。MPA 策略是化学计量学算法开发的基本框架, 首先依据不同采样方法得到不同的子数据集, 再利用多种建模方法建立多个预测子模型, 最后通过对所有子模型重点参数的分析评价, 实现对原始数据集的特征选择。BOSS 算法通过在多个不同 PLS 子模型的回归系数上应用 MPA 策略来获得可变权重, 变量空间在可变权重的更新过程中实现软性收缩, 通过从子模型集中搜寻具有最小预测误差的最优子模型来确定最佳的特征变量组合。

UVE 算法是基于一次性建模分析的变量选择方法。在选取特征变量时, UVE 主动生成一组与原始变量维度相同的噪声矩阵。噪声矩阵与光谱矩阵合并后, 再联合浓度矩阵进行回归预测。UVE 将 PLSR 系数作为特征重要性衡量指标, 首先计算每个变量回归系数的稳定值与标准差之比, 再与噪声矩阵的最大值对比, 消除与随机变量类似对模型预测结果无效的特征变量。

1.4.2 X-Y 距离样本集划分法

X-Y 距离样本集划分法(sample set partitioning based

on joint X-Y distance, SPXY)是一种基于变量之间的欧氏距离在特征空间中均匀选取样本的方法, 不仅考虑样本集光谱测量值之间的欧氏距离, 同时也考虑各样本质量浓度之间的欧氏距离, 使划分的训练集和测试集更有代表性^[35-36]。具体而言, SPXY 法同时考虑了光谱测量值 X 和样本组分真值 Y , 计算其共生距离作为参考依据进行样本划分, 共生距离的计算公式如式(1)~(3)所示:

$$d_x(p, q) = \sqrt{\sum_{j=1}^m [x_p(j) - x_q(j)]^2}, p, q \in [1, N] \quad (1)$$

$$d_y(p, q) = \sqrt{(y_p - y_q)^2} = |y_p - y_q|, p, q \in [1, N] \quad (2)$$

$$d_{xy}(p, q) = \frac{d_x(p, q)}{\max_{p, q \in [1, N]} d_x(p, q)} + \frac{d_y(p, q)}{\max_{p, q \in [1, N]} d_y(p, q)}, p, q \in [1, N] \quad (3)$$

式中, $x_p(j)$ 和 $x_q(j)$ 分别代表样本 p 和样本 q 在波长 j 上的光谱测量值, m 为波长总数, N 为样本总数, $d_x(p, q)$ 表示样本 p 和 q 在 X 空间(以光谱为特征参数构成的空间)上的欧氏距离; y_p 和 y_q 分别为样本 p 和 q 的理化参照值, $d_y(p, q)$ 为样本 p 和 q 在 Y 空间(以理化参照值为特征参数构成的空间)上的欧氏距离; $d_{xy}(p, q)$ 为两个空间的欧氏距离, $\max_{p, q \in [1, N]} d_x(p, q)$ 、 $\max_{p, q \in [1, N]} d_y(p, q)$ 分别为样本 p 和 q 在 X 空间、 Y 空间上的欧氏距离最大值。

1.4.3 偏最小二乘回归

PLSR 是广泛应用于光谱定量分析的多变量线性回归分析方法。以光谱特征变量作为自变量, 样本浓度作为因变量, PLSR 分别拆分自变量矩阵和因变量矩阵, 确保拆分结果接可能多包含自变量矩阵与因变量矩阵中的变异信息, 最终将自变量与因变量之间的关系简化为主成分因子的变量集, 实现变量间的协方差最大化, 达到最佳的预测性能。

1.4.4 麻雀搜寻算法优化的混合核极限学习机

核极限学习机 KELM 模型是在极限学习机 ELM 模型上的一种改进, 通过将低维空间中的非线性不可分数据转化为线性可分数据, 达到提升鲁棒性与泛化能力的效果^[37]。对于给定的输入样本, KELM 的预测输出表示为公式(4):

$$f(x) = \begin{bmatrix} K(x, x_1) \\ \vdots \\ K(x, x_n) \end{bmatrix} \left(K_{\text{ELM}} + \frac{I}{C} \right)^{-1} T \quad (4)$$

式中, C 是正则化系数, I 和 T 分别是对角矩阵和目标向量矩阵, $K(x, x_i)$ 是核函数, K_{ELM} 是核矩阵。

核函数包含多种类型, 例如径向基函数(radial basis function, RBF)为典型的局部型核函数, 学习能力强泛化能力弱; 多项式核函数(polynomial kernel, Poly)为典型的全局型核函数, 学习能力强泛化能力强。不同的核函数选择导致了不同的模型预测性能, 单一核函数的核极限学习机 KELM 通常难以适应多特征样本。为了综合提升核极限学

习机的学习和性能与泛化性能, 本研究结合 RBF 与 Poly 的优点, 组成混合核函数, 构造混合核极限学习机 HKELM 预测模型。混合核函数的计算方法表示为式(5)~(7):

$$K_{\text{RBF}}(x, x_i) = \exp\left(-\frac{|x - x_i|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5)$$

$$K_{\text{Poly}}(x, x_i) = (xx_i^T + \mu)^V \quad (6)$$

$$K_{\text{HK}}(x, x_i) = \lambda K_{\text{RBF}} + (1 - \lambda) K_{\text{Poly}} \quad (7)$$

式中, σ 为 RBF 核的核参数; μ 和 v 为 Poly 核的核参数; λ 为两核间的权重系数, $\lambda \in (0, 1)$ 。

由于 HKELM 模型中涉及众多参数, 为避免人工参数选择造成的效率低下以及回归精度难以最优的缺点, 本研究中利用 SSA 对 HKELM 模型的正则化系数 C 、混合核函数参数 σ 、 μ 、 v 以及权重系数 λ 进行自动优化。麻雀搜寻算法是 2020 年由 XUE 等^[38]受麻雀捕食行为启发而提出的一种新型智能优化算法, 麻雀在觅食过程中, 搜索者的麻雀为种群提供搜索方向和安全区域, 追随者的麻雀依据搜索者的指导进行搜索, 警戒者麻雀依据反捕食行为摆脱了种群陷入局部最优的状况。与传统优化算法相比, 麻雀搜寻算法的收敛速度更快。在本研究中, SSA 对 HKELM 的优化流程如图 1 所示。

1.4.5 光谱数据融合策略

数据融合技术可以在数据层面对模型性能做出提升, 而融合方式的选择是数据融合技术的关键, 合适的数据融合方式可以实现信息互补, 提高检测精度。本研究中, 对拉曼光谱数据与中红外光谱数据分别进行数据层及特征层的融合尝试, 探索不同的融合方式对于多元校正模型预测结果的影响。为了减少随机噪声及光谱冗余信息对于光谱融合结果的不利影响, 本研究中, 光谱信息融合均基于经预处理后的光谱数据进行。

(1) 数据层融合

数据层融合是最简单、最直接的融合策略, 将来源不同的光谱数据按照一定顺序拼接成一个矩阵, 然后在此基础上构建定量预测模型(本研究中采用 PLSR 及 SSA-HKELM 构建

定量模型), 以达到提升模型预测性能的目的。

(2) 特征层融合

特征层融合基于原始光谱的特征变量进行。本研究中, 特征层融合是指对样本的拉曼光谱数据与中红外光谱数据分别应用特征筛选后, 将筛选出的特征变量按照一定顺序拼接成新的矩阵, 然后在此基础上构建定量预测模型。

1.5 模型评价指标

本研究中, 采用校正集决定系数 R_c^2 、预测集决定系数 R_p^2 (决定系数取值范围为 0~1)、校正均方根误差(root mean squared error of calibration set, RMSEC)、预测均方根误差(root mean squared error of prediction set, RMSEP)来评价模型的预测性能。各项指标的计算公式如式(8)~式(10)所示。通常认为一个理想的分析模型, 其决定系数越大且越接近 1, 回归性越好; 同时还需满足, RMSEC 和 RMSEP 的值越小且 RMSEC 小于 RMSEP, 建模结果和模型实用性越理想。此外, 对于定量模型, 预测值与偏差值的比值(relative percent difference, RPD)是标准偏差(standard deviation, SD)与 RMSEP 的比值, 如式(11)所示。一般认为, $RPD \geq 3$ 表明该模型具有较高的稳定性、准确性和精密性。此外, RPD 值在 2~3 之间是可行的筛选, 小于 2 表示预测不可靠。

$$RMSEC = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{i,a} - y_{i,p})^2}{n-1}} \quad (8)$$

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (y_{i,a} - y_{i,p})^2}{m-1}} \quad (9)$$

$$R^2(r^2) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_{i,a} - y_{i,p})^2}{\sum_{i=1}^N (y_{i,a} - \bar{y}_a)^2} \quad (10)$$

$$RPD = \frac{SD}{RMSEP} \quad (11)$$

式中, $y_{i,a}$ 为第 i 个样本的浓度真实值; $y_{i,p}$ 为第 i 个样本的模型计算值; \bar{y} 为灭草松水溶液浓度真实值的均值; n 为校正集的样本数; m 为预测集的样本数。当求 R 时 $N=n$ 、求 r 时 $N=m$ 。

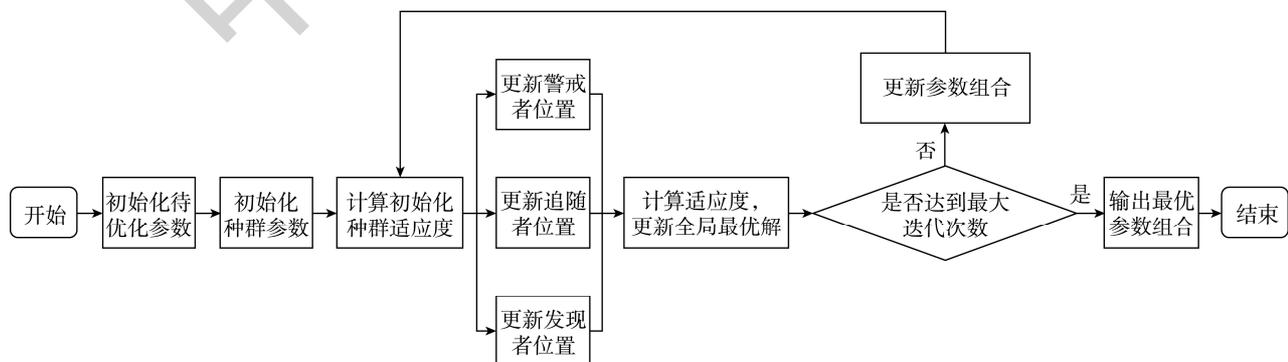


图 1 SSA 对 HKELM 的优化过程
Fig.1 Optimization process of SSA for HKELM

2 结果与分析

2.1 原始光谱数据分析

不同浓度食用酒精水溶液的拉曼光谱如图 2A 所示^[39]。图谱中主要的峰分别在 750~1500 cm^{-1} 、2750~3000 cm^{-1} 拉曼位移段。其中 702 cm^{-1} 附近表示脂肪族 C-H 伸缩振动; 875 cm^{-1} 、920 cm^{-1} 处分别为 C-O 的反对称和对称拉伸振动峰; 1114 cm^{-1} 为 C-OH 伸缩振动; 1298 cm^{-1} 处归因于 C-C 弯曲振动峰; 2778、2830、2877 cm^{-1} 处分别为 -CH₂ 的对称伸缩振动、C-H 伸缩振动以及 -CH₃ 反对称伸缩振动。不同浓度食用酒精水溶液的中红外光谱如图 2B 所示^[40]。其中 879 cm^{-1} 处的吸收峰为 C-OH 的弯曲振动; 1045 cm^{-1} 、1087 cm^{-1} 处的吸收峰为 C-O 的伸缩振动, 存在多个吸收峰, 是由于醇存在旋转异构体; 1274 cm^{-1} 处的吸收峰为亚甲基的面外摇摆振动; 1328 cm^{-1} 处的吸收峰为 -OH 的面内变形振动; 1381 cm^{-1} 、1455 cm^{-1} 处的吸收峰为甲基的对称和反对称弯曲振动; 1651 cm^{-1} 处的吸收峰为水 H-O-H 的面内弯曲振动; 2888、2930、2974 cm^{-1} 处的吸收峰为亚甲基的伸缩振动; 3339 cm^{-1} 处的吸收峰为 -OH 的伸缩振动。

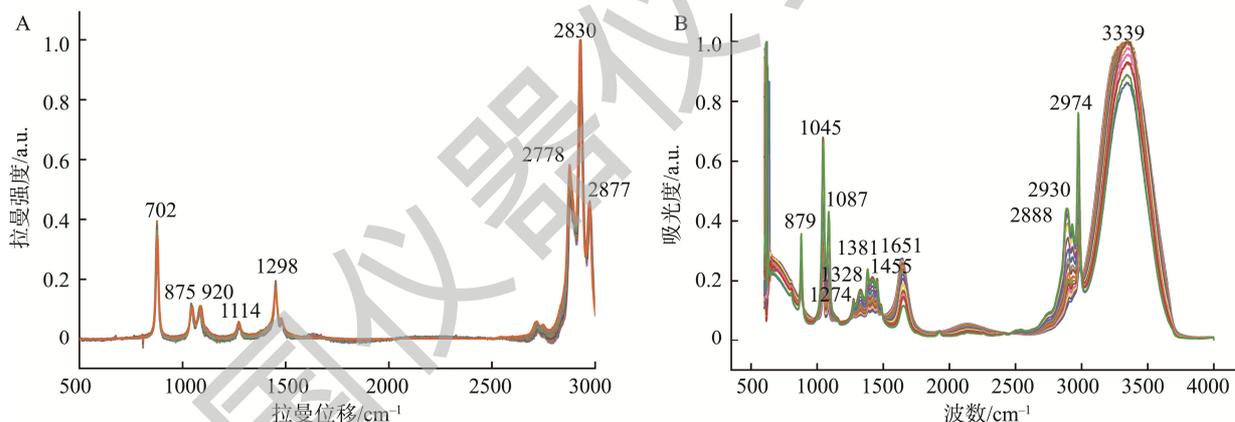


图 2 不同浓度食用酒精水溶液的拉曼光谱和中红外光谱

Fig.2 Raman spectra and mid-infrared spectra of edible alcohol aqueous solutions at different concentrations

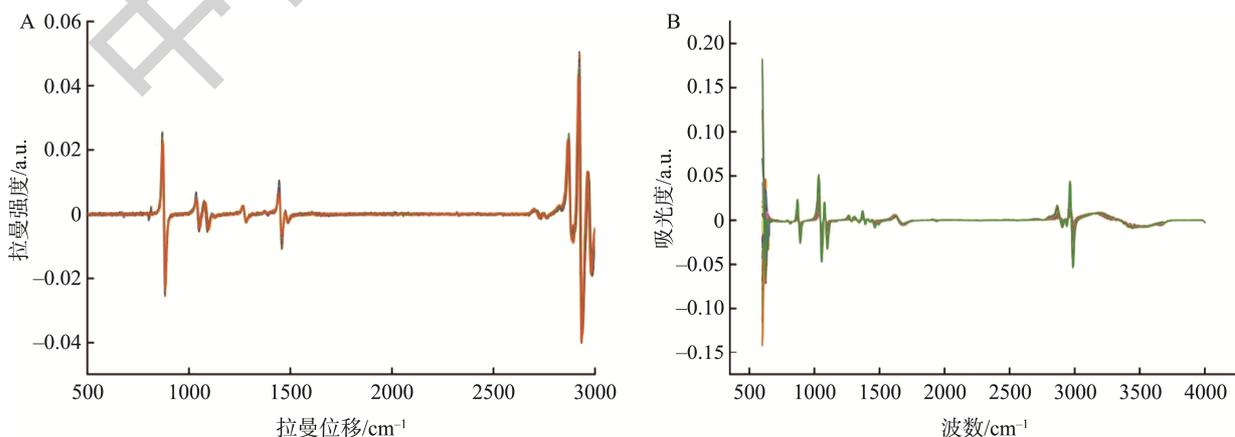


图 3 预处理后不同浓度食用酒精水溶液的拉曼光谱和中红外光谱

Fig.3 Preprocessed Raman spectra and mid-infrared spectra of edible alcohol aqueous solutions at different concentrations

2.2 光谱预处理

原始光谱不仅包含有用的样本信息, 还包含一定的噪声信息, 甚至在某些位置处发生溢出。为了消除这些不利因素的影响, 本研究采用 MSC 方法对原始光谱进行预处理, 来消除物质表面的散射影响, 使得组分信息或组分含量在光谱中的峰值信息更加明显。并对 MSC 预处理后的光谱进行 S-G 平滑与求一阶导数处理, 进一步提升信噪比。预处理后不同浓度食用酒精水溶液的拉曼光谱与中红外光谱如图 3 所示。

2.3 光谱特征筛选

2.3.1 基于 BOSS 算法筛选特征变量

利用 BOSS 算法筛选食用酒精水溶液的光谱特征, 筛选过程遵循软收缩规律, 即在优化迭代过程中不直接删除贡献较少的变量, 而是给予其较小的权重, 使得贡献较小的变量可以与其他变量相结合, 从而获取特征信息。这在很大程度上保留了有用的信息。BOSS 对食用酒精水溶液拉曼光谱的特征筛选过程如图 4 所示。子模型的交叉验证均方差 (root mean square error of cross validation, RMSECV) 值在 1~10 次迭代中稳定降低, 由 0.73435 减小为 0.407876。

在第 10~20 次迭代有持续上升趋势,由 0.417273 升为 0.836284,随后增长趋势明显。在第 10 次迭代时有唯一最小的 RMSECV 值 0.407876。提取第 10 次迭代中变量赋予权重的值,如图 4B 所示。在 500~800 cm^{-1} 、2000~2500 cm^{-1} 有多个权重波峰,但赋予权重不高。在 900~1900 cm^{-1} 、2600~2800 cm^{-1} 频段,有非常明显且密集的权重波峰,权重最高的位置在 880 cm^{-1} 附近。同理,对食用酒精水溶液

中红外光谱应用 BOSS 算法进行特征筛选,结果如图 5 所示。可知 RMSECV 值在 1~11 次迭代中稳定降低,因此,提取第 11 次迭代中变量赋予权重的值。

2.3.2 基于 UVE 算法筛选特征变量

分别对食用酒精水溶液的拉曼光谱与中红外光谱应用 UVE 方法进行特征提取,结果如图 6 所示。参考分界线左侧为食用酒精水溶液的光谱变量矩阵,右侧为随机产生

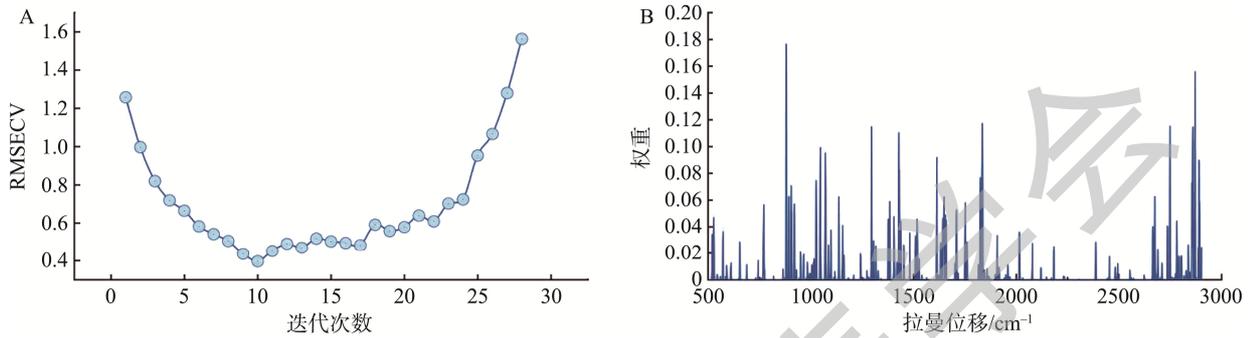


图 4 BOSS 算法提取拉曼光谱特征变量过程

Fig.4 Process of extracting Raman spectral feature variables using the BOSS algorithm

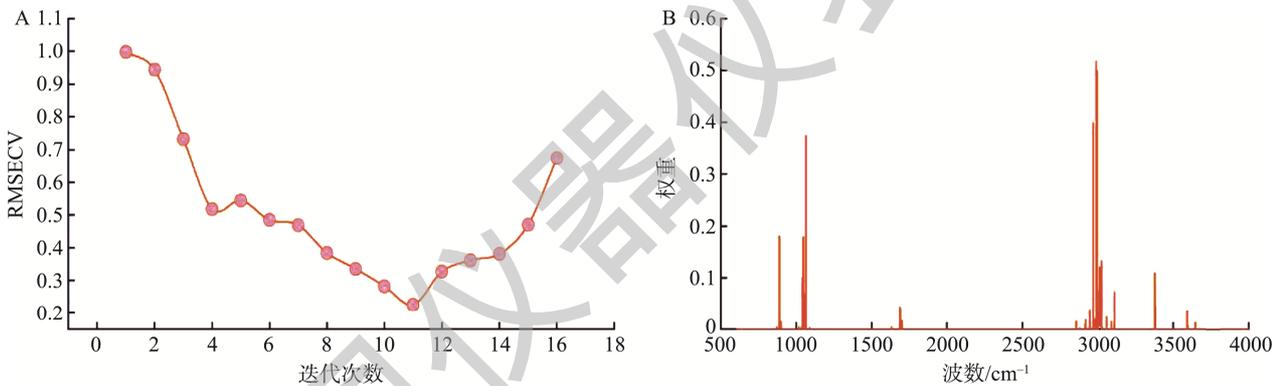


图 5 BOSS 算法提取中红外光谱特征变量过程

Fig.5 Process of extracting mid-infrared spectral feature variables using the BOSS algorithm

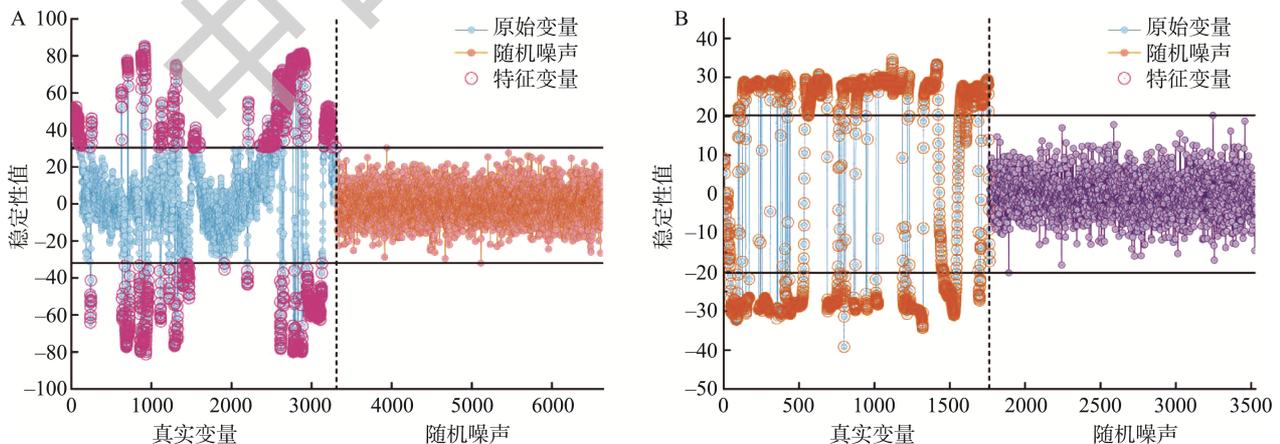


图 6 UVE 算法提取拉曼光谱和中红外光谱特征变量过程

Fig.6 Process of extracting Raman and mid-infrared spectral feature variables using the UVE algorithm

的与样本变量数目相同的噪声矩阵, 纵坐标代表每个波长对应的稳定性值。两条水平虚线是设置的稳定性阈值, 位于两条阈值线中间及外部的稳定性值所对应的波长分别为无信息变量和基于 UVE 算法筛选出的特征波长。最终, 对于食用酒精水溶液的拉曼光谱, UVE 筛选出 1161 个特征变量, 筛选过程如图 6A 所示; 对于食用酒精水溶液的中红外光谱, UVE 筛选出 1603 个特征变量, 筛选过程如图 6B 所示。

2.3.3 特征变量的对比分析

在研究过程中, 对每种特征选择方法进行了 50 次重复计算。特征选择算法对于特征变量的计算结果基本一致。两种特征变量选择算法筛选出的变量分布情况如图 7 所示。最终, 对于食用酒精水溶液的拉曼光谱(图 7A), BOSS 筛选出 53 个特征变量, 为原始光谱的 1.6%; UVE 筛选出 1161 个特征变量, 为原始光谱的 35%。对于食用酒精水溶液的中红外光谱(图 7B), BOSS 筛选出 11 个特征变量, 为原始光谱的 0.6%; UVE 筛选出 1603 个特征变量, 为原始光谱的 90%。

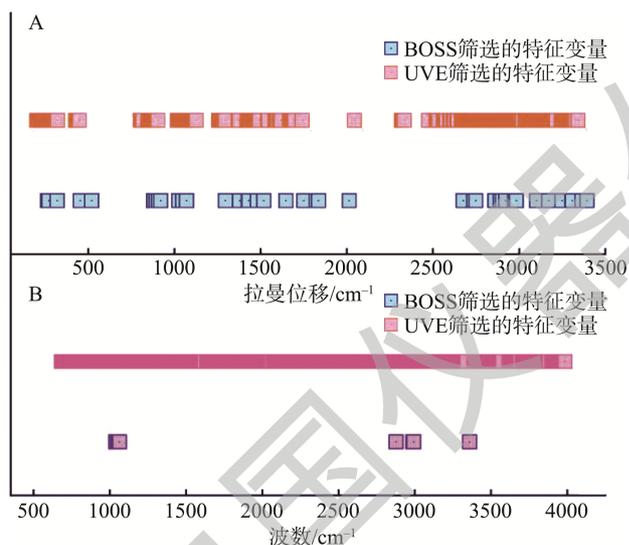


图 7 两种特征变量选择算法筛选出的特征变量分布

Fig.7 Distribution of feature variables selected by 2 kinds of feature variable selection algorithms

2.4 定量分析模型的建立与优化

2.4.1 食用酒精的 PLSR 预测模型分析

基于拉曼光谱矩阵、中红外光谱矩阵、拉曼与中红外光谱数据层融合矩阵以及拉曼与中红外光谱特征层融合矩阵分别构建 PLSR 多元校正模型检测食用酒精水溶液的浓度。PLSR 建模过程中, 模型参数均设置为 5 折交叉验证, 采样次数为 500 次, 最大潜在变量的数量为 10 个, 迭代次数为 50 次。模型预测结果如表 1 所示, 仅依据拉曼光谱数据或中红外光谱数据预测食用酒精的浓度, 模型的定量效果不佳, 误差较大, 校正集与预测集的决定系数偏小。将未经特征筛选的拉曼光谱与中红外光谱数据直接融合, 虽然实现了数据层面的信息互补, 但受到大量冗余信息的不利影响, 导致数据层融合预测模型的预测效果不佳, 不及单一光谱建模的预测效果。拉曼光谱与中红外光谱经特征层融合后, 模型的预测效果显著提升, 校正集与预测集决定系数均有显著提升, 且均方根误差显著降低, 预测模型的 RPD 值也更高。与此同时, 不难注意到, 基于 UVE 的特征层融合与基于 BOSS 的特征层融合预测结果十分接近, 而基于 BOSS 的预测模型依赖的特征变量数目仅为基于 UVE 的预测模型的 4.2%, 充分体现了 BOSS 方法在食用酒精水溶液拉曼光谱与中红外光谱特征提取中的适用性与优越性。BOSS 算法在优化迭代过程中不直接删除贡献较小的变量, 而是给予其较小的权重, 使得贡献较小的变量可以与其他变量相结合, 从而获取特征信息, 最终达到以少量、部分的特征变量来表征数据整体情况的目标。然而, 相比于单一光谱预测模型和数据层融合预测模型, 基于特征层融合建立的 PLSR 预测模型虽然已经取得了更好的预测结果, 但其预测均方根误差依然较大, 难以满足复杂、实际场景下的测试需求。为了减小模型误差, 本研究采用麻雀搜索算法优化的混合核极限学习机提高模型精度。

2.4.2 食用酒精的 SSA-HKELM 预测模型分析

为了进一步提升食用酒精乙醇浓度光谱预测模型的准确度, 分别基于两个特征层融合光谱矩阵, 采用非线性建模算法 SSA-HKELM 对食用酒精水溶液光谱数据进行二次建模分析。在基于 BOSS 算法的特征层融合建模实验中,

表 1 PLSR 模型对食用酒精中的乙醇浓度定量结果

Table 1 Quantitative results of ethanol concentration in edible alcohol using the PLSR models

方法	潜在变量数	特征数量	校正集		预测集		RPD
			R_c^2	RMSEC	R_p^2	RMSEP	
拉曼全光谱	9	3320	0.96850	3.4622	0.88471	4.1073	3.1676
中红外全光谱	8	1765	0.93532	5.825	0.91954	4.9933	4.0269
拉曼与中红外光谱直接融合	7	5085	0.92435	5.8819	0.88743	5.1935	3.6359
基于 UVE 的拉曼与中红外光谱特征层融合	9	2871	0.99457	1.5753	0.97919	2.2330	7.1196
基于 BOSS 的拉曼与中红外光谱特征层融合	7	121	0.98803	2.3401	0.97239	2.5719	6.5496

经过 64 次迭代后, SSA 搜寻到了 HKELM 的最优参数组合, 其中, 正则化系数 $C=4.6456$, RBF 核函数的核系数 $\sigma=2.759$, 多项式核函数的核系数 $\mu=4.6673$, $\nu=3.889$ 。在基于 UVE 算法的特征层融合建模实验中, 经过 89 次迭代后, SSA 搜寻到了 HKELM 的最优参数组合, 其中, 正则化系数 $C=2.8217$, RBF 核函数的核系数 $\sigma=2.3089$, 多项式核函数的核系数 $\mu=2.3059$, $\nu=3.7871$ 。在 SSA 搜寻到的最优参数组合下, 特征层融合光谱数据对于食用酒精乙醇浓度的预测准确性具有显著提升, 如图 8 所示, 基于 BOSS 算法的特征层预测模型, $R_c^2=0.98059$, RMSEC=1.19282, $R_p^2=0.98197$, RMSEP=1.22386; 基于 UVE 算法的特征层预测模型, $R_c^2=0.99634$, RMSEC=0.98314, $R_p^2=0.99036$, RMSEP=1.03256。与 PLSR 建模预测结果相比, SSA-HKELM 的预测结果使得决定系数 R_c^2 及 R_p^2 维持在较高水平, 同时 RMSEC 值与 RMSEP 值均有所降低, 达到了预期的优化效果。

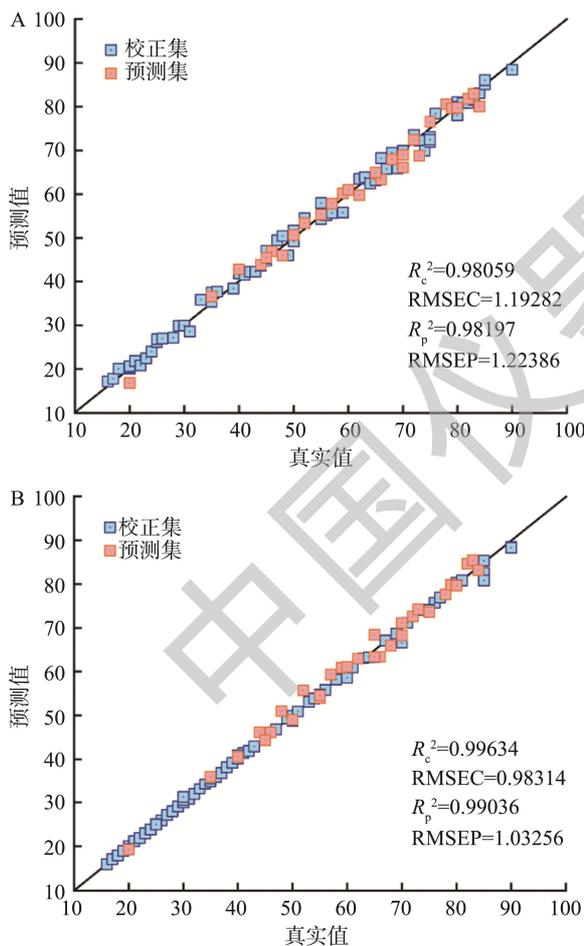


图 8 基于 BOSS 算法(A)和 UVE 算法(B)特征融合的 SSA-HKELM 模型预测结果

Fig.8 Prediction results of the SSA-HKELM model based on feature fusion using the BOSS algorithm (A) and UVE algorithm (B)

3 结论

本研究提出了一种基于拉曼光谱与中红外光谱的数据融合技术构建食用酒精乙醇浓度快速、高精度预测模型的方法。与拉曼光谱、中红外光谱以及拉曼光谱与中红外光谱数据层融合构建的 PLSR 预测模型相比, 特征层融合光谱矩阵具有更好的预测性能。其中, 基于 BOSS 算法的特征层预测模型, $R_c^2=0.98803$, RMSEC=2.3401, $R_p^2=0.97239$, RMSEP=2.5719, RPD=6.5496; 基于 UVE 算法的特征层预测模型, $R_c^2=0.99457$, RMSEC=1.5753, $R_p^2=0.97919$, RMSEP=2.2330, RPD=7.1196。同时, 本研究采用 SSA-HKELM 方法优化预测性能, 进一步提升了特征层融合预测模型的精度, 降低预测误差。结果表明, 应用 SSA-HKELM 优化特征层融合光谱预测模型行之有效, 基于两种特征筛选算法的预测模型在 SSA-HKELM 的作用下均具有较高的相关系数, 且与 PLSR 模型相比, 校正集和预测集的均方根误差明显减小。其中, 基于 BOSS 算法的优化模型, RMSEC 及 RMSEP 分别下降了 49% 和 52%, 基于 UVE 算法的优化模型, RMSEC 及 RMSEP 分别下降了 37% 和 53%。综上, 本研究的实验结果验证了拉曼与中红外光谱数据融合技术的可行性与有效性, 实现了对于食用酒精乙醇浓度的高效检测。未来将通过增加样本数量、模型优化提升及复杂场景测试等方法手段改进和丰富现有研究成果, 不断提升预测模型的稳定性与精确度, 推动食用酒精乙醇浓度的光谱定量方法能够在实际生产及应用场景中发挥作用。

参考文献

- [1] 孙宝国, 黄明泉, 王娟. 白酒风味化学与健康功效研究进展[J]. 中国食品学报, 2021, 21(5): 1-13.
SUN BG, HUANG MQ, WANG J. Research progress on flavor chemistry and healthy function of baijiu [J]. J Chin Inst Food Sci Technol, 2021, 21(5): 1-13.
- [2] 孙宝国. 国酒[M]. 北京: 化学工业出版社, 2019.
SUN BG. Chinese liquors and wines [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2019.
- [3] 孙宝国, 黄明泉, 毛健, 等. 中国传统酿造食品行业技术与装备发展战略研究[M]. 北京: 科学出版社, 2020.
SUN BG, HUANG MQ, MAO J, et al. Research on technology and equipment development strategy of Chinese traditional brewing food industry [M]. Beijing: Science Press, 2020.
- [4] 工业和信息化部消费品工业司. 食品工业发展报告(2019 年度报告)[M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2020.
Department of Consumer Goods Industry, Ministry of Industry and Information Technology. Food industry development report (2019 annual report) [M]. Beijing: China Light Industry Press, 2020.
- [5] 李泽隆. 我国白酒工艺技术划分及技术特点分析[J]. 食品界, 2016, (8): 102.
LI ZL. Chinese liquor technology division and analysis of technical

- characteristics [J]. *Food Circ*, 2016, (8): 102.
- [6] 杨江, 唐旭宇. 固态法白酒与白兰地风味差异的主要原因研究[J]. *中国食品*, 2023, (20): 125–127.
YANG J, TANG XY. Study on the main reasons of flavor difference between solid liquor and brandy [J]. *China Food*, 2023, (20): 125–127.
- [7] 刘鸿钢, 梁兆鑫, 刘嘉飞, 等. 气相非靶向检测技术在鉴别固态法白酒与液态法白酒中的应用研究[J]. *酿酒*, 2021, 48(5): 79–82.
LIU HG, LIANG ZN, LIU JF, *et al.* Investigation on the potential rules of solid liquor and liquid liquor industry and the application of true and false identification [J]. *Liquor Mak*, 2021, 48(5): 79–82.
- [8] 钟其顶, 王道兵, 熊正河. 固态法白酒与固液法白酒的同位素鉴别技术[J]. *质谱学报*, 2014, 35(1): 66–71.
ZHONG QD, WANG DB, XIONG ZH. Application of stable isotope technique on distinguish between Chinese spirit by traditional fermentation and chinese spirit made from traditional and liquid fermentation [J]. *J Chin Mass Spectrom Soc*, 2014, 35(1): 66–71.
- [9] 李根, 张军翔. 固态法蒸馏酒与液态法蒸馏酒产品风味研究进展——以中国白酒与葡萄酒白兰地为例[J]. *中国酿造*, 2020, 39(5): 13–16.
LI G, ZHANG JX. Research progress of distilled spirit with solid and liquid distillation technologies taking Baijiu and brandy for example [J]. *China Brew*, 2020, 39(5): 13–16.
- [10] 郭燕, 程铁轶. 现代检测技术在固态法白酒真实性中的应用[J]. *食品安全质量检测学报*, 2020, 11(14): 4693–4701.
GUO Y, CHENG TY. Application of modern detection technology in the authenticity of solid fermentation liquor [J]. *J Food Saf Qual*, 2020, 11(14): 4693–4701.
- [11] 赖桂中, 陈爱贤, 何贝, 等. 酒精气体与烘焙食品的防腐关系[J]. *食品安全导刊*, 2020, (32): 75–76.
LAI GZ, CHEN AIX, HE B, *et al.* The relationship between alcohol gas and the preservation of baked goods [J]. *Chin Food Saf Magaz*, 2020, (32): 75–76.
- [12] 赵凤琦. 我国白酒产业可持续发展研究[D]. 北京: 中国社会科学院研究生院, 2014.
ZHAO FQ. Research on sustainable development of Chinese liquor industry [D]. Beijing: Graduate School of Chinese Academy of Social Sciences, 2014.
- [13] 肖剑峰, 李文祥, 徐晗. 白酒生产企业许可的要求及常见问题剖析[J]. *食品安全质量检测学报*, 2017, 8(6): 2303–2306.
XIAO JF, LI WX, XU H. Requirements and common problems of liquor making enterprises licensing [J]. *J Food Saf Qual*, 2017, 8(6): 2303–2306.
- [14] 简轻松. 对提高贵州液态法白酒质量的看法[J]. *当代化工研究*, 2018, (7): 30–31.
JIAN QS. Opinions on improving the quality of guizhou liquor by liquid method [J]. *Mod Chem Res*, 2018, (7): 30–31.
- [15] 李良好, 孟士皓, 景思, 等. 基于 GC×GC/TOF MS 对不同等级食用酒精挥发性成分的判别分析[J]. *食品科学技术学报*, 2022, 40(5): 71–81.
LI LH, MENG SH, JING S, *et al.* Discriminant analysis of volatile components of different quality grades of edible alcohol based on GC×GC/TOF MS [J]. *J Food Sci Technol*, 2022, 40(5): 71–81.
- [16] 刘广文, 王立学. 食用酒精产业发展简要分析[J]. *食品安全导刊*, 2022, (9): 164–166.
LIU GW, WANG LX. Brief analysis of the development of edible alcohol industry [J]. *Chin Food Saf Magaz*, 2022, (9): 164–166.
- [17] 肖静文. 智能数显折光仪的研究与开发[D]. 上海: 上海工程技术大学, 2015.
XIAO JW. Research and development of intelligent digital display refractometer [D]. Shanghai: Shanghai University of Engineering Science, 2015.
- [18] MITSUSHIO M, HIGO M. Properties of a gold-deposited surface plasmon resonance-based glass rod sensor with various light-emitting diodes and its application to a refractometer [J]. *Opt Commun*, 2012, 285(18): 3714–3720.
- [19] TIPPARAT P, LAPANANTNOPPAKHUN S, JAKMUNEE J, *et al.* Determination of ethanol in liquor by near-infrared spectrophotometry with flow injection [J]. *Talanta*, 2001, 53(6): 1199–1204.
- [20] RHODES CN, HEATON K, GOODALL I, *et al.* Gas chromatography carbon isotope ratio mass spectrometry applied to the detection of neutral alcohol in Scotch whisky: An internal reference approach [J]. *Food Chem*, 2009, 114(2): 697–701.
- [21] 王开宇, 张露月, 都芸, 等. 密度瓶法测量白酒中酒精度的不确定度评定[J]. *酿酒科技*, 2019, (7): 104–109.
WANG KY, ZHANG LY, DU Y, *et al.* Evaluation of the uncertainties in the measurement of alcohol content in Baijiu by density bottle method [J]. *Liquor-Making Sci Technol*, 2019, (7): 104–109.
- [22] 王秋瑾, 章平. 白酒中乙醇含量检测方法的研究进展[J]. *现代食品*, 2020, (5): 14–17.
WANG QJ, ZHANG P. Advance of ethanol content detection methods in liquor [J]. *Mod Food*, 2020, (5): 14–17.
- [23] 张修兴. 不同品牌白酒的激光拉曼光谱研究[J]. *化工设计通讯*, 2018, 44(2): 255–256.
ZHANG XX. Study on laser Raman spectroscopy of different brand liquors [J]. *Chem Eng Des Commun*, 2018, 44(2): 255–256.
- [24] 孙兰君, 张延超, 任秀云, 等. 拉曼光谱定量分析乙醇含量的非线性回归方法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2016, 36(6): 1771–1774.
SUN LJ, ZHANG YC, REN XY, *et al.* Nonlinear regression methods of ethanol raman spectra quantitative analysis [J]. *Spectrosc Spectr Anal*, 2016, 36(6): 1771–1774.
- [25] 赵贤德, 董大明, 郑文刚, 等. 傅里叶变换红外光谱在葡萄酒品质劣变检测中的应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, 34: 2667–2672.
ZHAO XD, DONG DM, ZHENG WG, *et al.* Application of fourier transform infrared spectroscopy in identification of wine spoilage [J]. *Spectrosc Spectr Anal*, 2014, 34: 2667–2672.
- [26] 胡军, 刘燕德, 郝勇, 等. 甲醇汽油、乙醇汽油定性判别及其醇含量测定模型研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(5): 1640–1644.
HU J, LIU YD, HAO Y, *et al.* Qualitative discrimination and quantitative determination model research of methanol gasoline and ethanol gasoline [J]. *Spectrosc Spectr Anal*, 2020, 40(5): 1640–1644.
- [27] MÁRQUEZ C, LÓPEZ MI, RUISÁNCHEZ I, *et al.* FT-Raman and NIR spectroscopy data fusion strategy for multivariate qualitative analysis of food fraud [J]. *Talanta*, 2016, 161: 80–86.
- [28] 吴升德, 朱家骥, 钱昊, 等. 近红外与表面增强拉曼光谱融合技术快速检测花生油中黄曲霉毒素 B₁[J]. *食品安全质量检测学报*, 2023, 14(23): 70–79.
WU SD, ZHU JJ, QIAN H, *et al.* Rapid determination of aflatoxin B₁ in peanut oil by the fusion of near infrared spectroscopy and surface-enhanced Raman spectroscopy [J]. *J Food Saf Qual*, 2023, 14(23):

- 70–79.
- [29] DAI J, CHEN P, CHU X, *et al.* Comparison between NIR, FT-IR and Raman for quantitative analysis of the conversion of poly alpha oil (PAO) [J]. *Vib Spectrosc*, 2022, 123: 103452.
- [30] KOLAŠINAC S, PEČINAR I, DANOJEVIĆ D, *et al.* Raman spectroscopy coupled with chemometric modeling approaches for authentication of different paprika varieties at physiological maturity [J]. *LWT*, 2022, 162: 113402.
- [31] ZHANG F, CUI X, ZHANG C, *et al.* Rapid non-destructive identification of selenium-enriched millet based on hyperspectral imaging technology [J]. *Czech J Food Sci*, 2022, 40(6): 445–455.
- [32] OUYANG Q, LIU L, WANG L, *et al.* Rapid determination of free amino acids and caffeine in matcha using near-infrared spectroscopy: A comparison of portable and benchtop systems [J]. *J Food Compos Anal*, 2023, 115: 104868.
- [33] HARUNA SA, LI H, ZAREEF M, *et al.* Application of NIR spectroscopy for rapid quantification of acid and peroxide in crude peanut oil coupled multivariate analysis [J]. *Spectrochim Acta A*, 2022, 267: 120624.
- [34] 王明星. 基于高光谱的不同取样深度土壤有机质预测模型研究[D]. 南京: 南京农业大学, 2019.
- WANG MX. The research of prediction model of soil organic matter content based on hyperspectral data in different sampling depth [D]. Nanjing: Nanjing Agricultural University, 2019.
- [35] 魏丹萍, 郑光辉. 高光谱反射率的滨海地区土壤全磷含量反演[J]. *光谱学与光谱分析*, 2022, 42(2): 517–523.
- WEI DP, ZHENG GH. Estimation of soil total phosphorus content in coastal areas based on hyperspectral reflectance [J]. *Spectrosc Spectr Anal*, 2022, 42(2): 517–523.
- [36] 靳佳蕊, 孙晓荣, 郑冬钰, 等. 基于中红外光谱法检测煎炸油极性组分[J]. *食品安全质量检测学报*, 2023, 14(5): 45–52.
- JIN JR, SUN XR, ZHENG DY, *et al.* Detection of polar components in frying oil based on mid-infrared spectroscopy [J]. *J Food Saf Qual*, 2023, 14(5): 45–52.
- [37] 王瑞, 徐新超, 逯静. 基于麻雀搜索算法优化变分模态分解和混合核极限学习机的短期风电功率预测[J]. *信息与控制*, 2023, 52(4): 444–454.
- WANG R, XU XC, LU J. Short-term wind power prediction based on ssa optimized variational mode decomposition and hybrid kernel extreme learning machine [J]. *Inform Control*, 2023, 52(4): 444–454.
- [38] XUE J, SHEN B. A novel swarm intelligence optimization approach: Sparrow search algorithm [J]. *Syst Sci Control Eng*, 2020, 8(1): 22–34.
- [39] 王志强, 程妍昕, 张睿挺, 等. 拉曼光谱结合荧光背景对白酒品质快速检测分析[J]. *光谱学与光谱分析*, 2023, 43(12): 3770–3774.
- WANG ZQ, CHENG YX, ZHANG RT, *et al.* Rapid detection and analysis of Chinese liquor quality by raman spectroscopy combined with fluorescence background [J]. *Spectrosc Spectr Anal*, 2023, 43(12): 3770–3774.
- [40] 刘燕德, 叶灵玉, 唐天义, 等. 中红外光谱检测不同浓度乙醇柴油性能指标[J]. *光谱学与光谱分析*, 2018, 38(9): 2741–2748.
- LIU YD, YE LY, TANG TY, *et al.* Determination of performance of different concentration ethanol diesel oil based on mid infrared spectroscopy [J]. *Spectrosc Spectr Anal*, 2018, 38(9): 2741–2748.

(责任编辑: 韩晓红 张晓寒)

作者简介



孙晓荣, 教授, 主要研究方向为智能测量技术与数据处理、系统建模与仿真方法、智能控制方法。

E-mail: sxrchy@sohu.com