doi:10.6041/j.issn.1000-1298.2020.09.039

食用油酸值与过氧化值近红外光谱模型转移研究

刘翠玲[1,2]　刘浩言[1,2]　孙晓荣[1,2]　吴静珠[1,2]　杨雨菲[1,2]

(1.北京工商大学计算机与信息工程学院,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:在使用近红外光谱技术进行食用油酸值与过氧化值检测时,仪器制造与检测环境的差异导致不同仪器建立的校正模型无法共享。为解决食用油酸值与过氧化值模型转移问题,使用 125 个食用油样本于主机建立偏最小二乘校正模型,采用光谱空间转换法进行模型转移,并与斜率/截距算法、直接标准化算法、分段直接标准化算法、极限学习机自编码器算法进行对比。结果表明,采用光谱空间转换法进行模型转移后,验证集酸值与过氧化值的预测均方根误差分别从 0.583 6 mg/g 和 15.801 0 mmol/kg 降低到了 0.167 0 mg/g 与 9.989 3 mmol/kg,说明光谱空间转换法可以有效应用于食用油酸值与过氧化值间的模型转移,使不同仪器之间实现模型共享,这对于近红外光谱应用于食用油品质快速检测具有实际意义。

关键词:食用油;近红外光谱;模型转移;光谱空间转换法

中图分类号:S123;TS227　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1000-1298(2020)09-0344-06　　**OSID**:

Transfer of Near-infrared Spectroscopy Model of Edible Oil Acid Value and Peroxidation Value

LIU Cuiling[1,2]　LIU Haoyan[1,2]　SUN Xiaorong[1,2]　WU Jingzhu[1,2]　YANG Yufei[1,2]

(1. *School of Computer and Information Engineering*, *Beijing Technology and Business University*, *Beijing* 100048, *China*
2. *Beijing Key Laboratory of Big Data Technology for Food Safety*, *Beijing Technology and Business University*, *Beijing* 100048, *China*)

Abstract: Near-infrared spectroscopy (NIRS) detection technology has been widely used in the field of edible oil quality detection due to its features of simple operation, no damage, fast detection and analysis. However, due to differences in manufacturing and testing environment, instrument aging, replacement of accessories and other factors, the spectral response of the same sample on different instruments was not completely consistent, resulting in the failure to share calibration models established by different instruments. To solve the problem of edible oil quality detection of acid value and peroxide value model transfer problem, transfer model was established by using the spectral space transformation method, which realized the calibration transfer of acid value and peroxide value between different instruments, and the slope/bias algorithm, direct standardized algorithm and piecewise direct standardization, extreme learning machine auto-encoder algorithm were compared. The VERTEX - 70 Fourier near infrared spectrometer and MATRIX - F on-line process analysis Fourier spectrometer were used. Totally 125 edible oil samples were used in the experiment, VERTEX - 70 was used as master instrument and MATRIX - F as slave instrument to establish the multivariate calibration model of acid value and peroxide value. The results showed that the prediction root-mean-square error of the validation set of acid value and peroxide value was reduced from 0.583 6 mg/g and 15.801 0 mmol/kg to 0.167 0 mg/g and 9.989 3 mmol/kg by using spectral space transformation method for model transfer. Obviously, spectral space transformation can be effectively applied to model transfer between edible oleic acid value and peroxidation value, so as to realize model sharing between different instruments. The problem of time and energy consumption caused by re-modeling can be avoided, which was of great significance for the application of NIRS in the rapid detection of edible oil quality.

Key words: edible oil; near-infrared spectroscopy; model transfer; spectral space transformation

收稿日期:2019-11-11　修回日期:2019-12-21

基金项目:北京市自然科学基金项目(4182017)和国家重点研发计划项目(2018YFD0101000)

作者简介:刘翠玲(1963—),女,教授,博士,主要从事智能测量技术与数据处理研究,E-mail:liucl@btbu.edu.cn

0　引言

酸值和过氧化值是检测食用油酸败的主要指标。通过检测酸值、过氧化值可以评价食用油品质的优劣，判断储藏期间食用油品质的变化情况[1-3]。近红外光谱法检测成本低、测试时间短、化学处理简单，甚至不需要对样本进行预处理，已被广泛应用于食品品质快速检测中[4-7]。由于仪器制造、测试环境的差异[8-9]，仪器老化[10]、附件更换[9]等因素的影响，同一样本在不同仪器上的光谱响应不完全一致，使得主机所建立的校正模型用于从机时，预测结果达不到要求。模型转移为这类问题的解决提供了可行途径，其本质是克服样本在不同仪器间测量信号的不一致性，使得主机建立的校正模型可以用于其他仪器上，可以有效避免模型重建所消耗的时间与物质成本[11-14]。

近年来，国内外学者对模型转移技术在各个领域的应用进行了大量研究。文献[15]采用斜率/截距算法(Slope/bias，S/B)对猕猴桃可溶性固形物含量进行了模型转移研究，有效地提高了主机的预测性能。文献[16]采用分段直接标准化算法(Piecewise direct standardized algorithm，PDS)、S/B 算法、正交投影算法实现了橄榄油脂肪、游离酸含量与含水率模型的转移。文献[17]使用直接标准化算法(Direct standardized，DS)进行了水稻土有机物含量、氮含量、pH 值的模型转移研究。然而，目前针对食用油酸值与过氧化值近红外光谱模型在不同仪器之间的传递问题研究较少，文献[18]使用 S/B 算法进行了食用油酸值与过氧化值的模型传递研究，获得结果仍与理想效果存在一定差距。光谱空间转换算法(Spectral space transformation，SST)是一种利用标准光谱构造差异光谱投影空间的模型转移算法，具有参数简单、对转换集样本个数不敏感等优点[19]。本文采用 SST 算法建立转移模型，实现食用油酸值与过氧化值校正模型在不同仪器之间的转移，并与 S/B 算法、DS 算法、PDS 算法、TEAM(Extreme learning machine auto-encoder，TEAM)算法[20]进行对比研究，以期将近红外光谱检测更好地应用于食用油品质检测领域。

1　材料与方法

1.1　材料

本次实验所用食用油种类包括玉米油、芝麻香油、大豆油、橄榄油、小磨香油 5 种。样本来自于市售的不同等级和品牌，其中玉米油样本 19 个，芝麻香油样本 25 个，大豆油样本 56 个，橄榄油样本 5 个，小磨香油样本 20 个，共计 125 个样本。依照 GB/T 5009.227—2016、GB/T 5530—2005 测定所有样本的过氧化值与酸值。

1.2　实验仪器

实验使用布鲁克公司生产的 VERTEX－70 型傅里叶近红外光谱仪和 MATRIX－F 型在线过程分析傅里叶光谱仪，使用液体光纤探头，光程 2 mm。

1.3　光谱数据的采集

VERTEX－70 型傅里叶近红外光谱仪为主机，MATRIX－F 型在线过程分析傅里叶光谱仪作为从机进行光谱采集。两台仪器的分辨率设置为 8 cm^{-1}，光谱采集范围为 4 000 ~ 12 000 cm^{-1}，每个样本重复扫描 16 次。5 种食用油样本在主仪器上采集的光谱如图 1 所示，可以看出 5 种食用油近红外光谱较为相似，这是由于食用油主要由脂肪酸组成，不同种类食用油之间的光谱信息比较接近，产生波峰的位置差距很小[21]。4 310 ~ 4 360 cm^{-1} 间谱峰处不同种类食用油平均光谱如图 2 所示，可以看出不同种类食用油在同一波峰处吸光度存在一定差异。主从仪器所采集的 5 种食用油样本的平均光谱如图 3 所示。

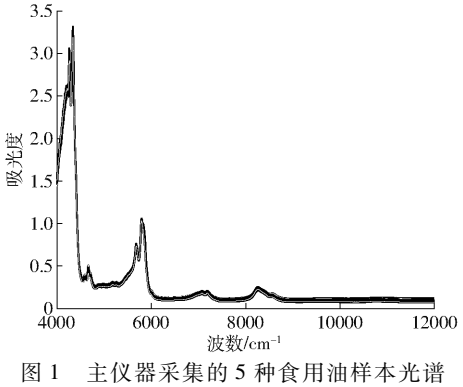


图 1　主仪器采集的 5 种食用油样本光谱

Fig. 1　Main instrument collects spectra of five edible oil samples

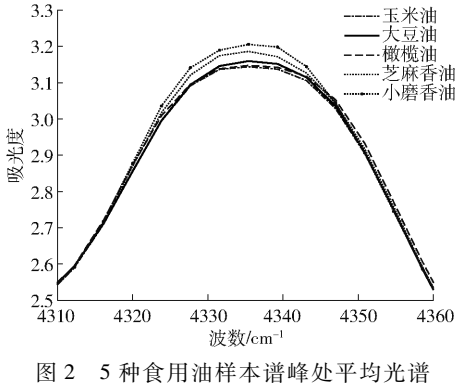


图 2　5 种食用油样本谱峰处平均光谱

Fig. 2　Average spectrum at peak of five edible oil samples

1.4　数据预处理

标准正态变量变换(Standard normal variate transformation，SNV)主要是用来消除固体颗粒大小、

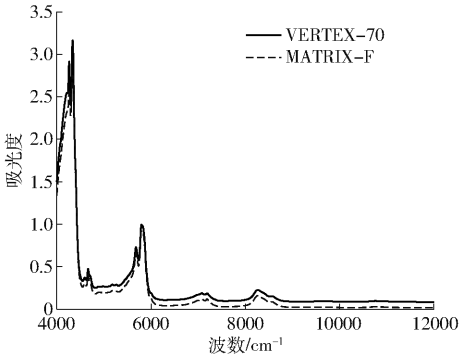


图 3 主从仪器采集的样本平均光谱

Fig. 3 Average spectrum of samples collected by master and slave instruments

表面散射以及光程变化对近红外漫反射光谱的影响[22],对每个样本光谱 x 进行 SNV 变换获得变换后光谱 x_{SNV},计算公式为

$$x_{SNV}=\frac{x-\bar{x}}{\sqrt{\dfrac{\sum_{k=1}^{m}(x_k-\bar{x}_k)^2}{m-1}}} \tag{1}$$

式中 m——波长点总数

$\bar{x}$——样本平均光谱

x_k——样品光谱 k 波长点处吸光度

$\bar{x}_k$——平均光谱 k 波长点处吸光度

1.5 光谱空间转换法

设主、从仪器上采集的样品光谱矩阵分别为 $\boldsymbol{X}_1$ 与 $\boldsymbol{X}_2$,光谱矩阵的每一行代表同一样品的对应光谱。拼接 $\boldsymbol{X}_1$ 与 $\boldsymbol{X}_2$ 矩阵得到联合矩阵 $\boldsymbol{X}_{comb}$,对联合矩阵进行主成分分析,即

$$\boldsymbol{X}_{comb}=[\boldsymbol{X}_1\quad\boldsymbol{X}_2]=\boldsymbol{T}[\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}\quad\boldsymbol{P}_2^{\mathrm{T}}] \tag{2}$$

式中 $\boldsymbol{T}$——得分矩阵

$\boldsymbol{P}_1$——主机载荷矩阵

$\boldsymbol{P}_2$——从机载荷矩阵

$\boldsymbol{X}_{comb}$的朗伯-比尔定律形式满足公式

$$\boldsymbol{X}_{comb}=[\boldsymbol{X}_1\quad\boldsymbol{X}_2]=\boldsymbol{C}[\boldsymbol{S}_1^{\mathrm{T}}\quad\boldsymbol{S}_2^{\mathrm{T}}] \tag{3}$$

式中 $\boldsymbol{C}$——样本目标值浓度矩阵

$\boldsymbol{S}_1$——主机测量条件下纯物质光谱

$\boldsymbol{S}_2$——从机测量条件下纯物质光谱

通过对 $\boldsymbol{X}_{comb}$的主成分分析形式与朗伯-比尔定律形式进行联立计算得到 $\boldsymbol{S}_1^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{S}_2^{\mathrm{T}}$,计算公式为

$$\begin{cases}\boldsymbol{S}_1^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C})^{-1}\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{S}_2^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C})^{-1}\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}\boldsymbol{P}_2^{\mathrm{T}}\end{cases} \tag{4}$$

从机测得的验证集光谱矩阵 $\boldsymbol{X}_{test}$与主机验证集光谱 $\boldsymbol{X}_{trans}$之间的差异可以表示为

$$\boldsymbol{X}_{test}-\boldsymbol{X}_{trans}=\boldsymbol{C}(\boldsymbol{S}_2^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{S}_1^{\mathrm{T}}) \tag{5}$$

通过式(4)与式(5)可以得到从机测得的验证集光谱矩阵 $\boldsymbol{X}_{test}$向主机验证集光谱进行转换的计算公式

$$\boldsymbol{X}_{trans}=\boldsymbol{X}_{test}(\boldsymbol{P}_2^{\mathrm{T}})^{+}\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{X}_{test}-\boldsymbol{X}_{test}(\boldsymbol{P}_2^{\mathrm{T}})^{+}\boldsymbol{P}_2^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

式中上角标“+”表示 Moore-Penrose 广义逆。经过转换后的光谱 $\boldsymbol{X}_{trans}$可以通过主机建立的多元校正模型进行目标成分浓度预测。光谱空间转换法通过在两个光谱空间之间进行转换来消除由仪器或测量条件的变化引起的光谱差异,光谱空间转换法对所研究的光谱无特殊要求,其可以适用于任何类型的光谱。

1.6 模型评价指标

使用校正集相关系数 R_c、校正集均方根误差(RMSEC)、交互验证均方根误差(RMSECV)、预测相关系数 R_v与预测均方根误差(RMSEP)对模型在校正集表现与验证集表现进行综合评价。

2 结果与分析

利用 125 个食用油样本在主从仪器上测得的平均光谱求出主从仪器之间的差谱,如图 4 所示,可以看出主从仪器光谱间存在明显的非线性差异。利用主机上测得的 125 个食用油样本,通过 SPXY 算法[23-24]选择 100 个样本作为校正集,25 个样本作为验证集,使用 SNV 算法校正因散射引起的光谱误差,建立食用油酸值与过氧化值偏最小二乘多元校正模型。酸值与过氧化值建模结果如表 1 所示,其中通过五折交叉验证可以得到酸值模型的最佳因子

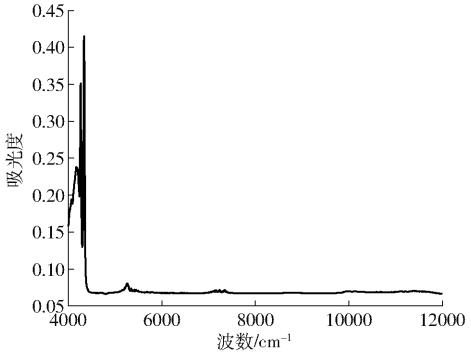


图 4 主机与从机样本平均光谱相减所得差谱图

Fig. 4 Subtracted spectrum for average spectrum collected by master and slave instruments

表 1 主机酸值与过氧化值建模及预测结果

Tab. 1 Modeling and prediction results of acid and peroxide value of master instrument

参数	RMSECV	R_c	RMSEC	RMSEP	R_v
酸值	0.234 4 mg/g	0.995 7	0.040 7 mg/g	0.108 5 mg/g	0.975 9
过氧化值	6.357 5 mmol/kg	0.972 0	4.387 8 mmol/kg	6.692 7 mmol/kg	0.958 1

数为 17，过氧化值模型的最佳因子数为 6。从表中可以看到食用油酸值模型与过氧化值模型预测集相关系数均大于 0.95，且与校正集相关系数相差较小，所建模型较为成功。

利用主机所建立的酸值与过氧化值模型对主从机验证集进行预测，预测结果如表 2 所示，预测散点图如图 5、6 所示。对比表 1、2 可以发现，主机建模结果较好，酸值模型主机验证集 R_v 为 0.975 9，主机验证集 RMSEP 为 0.108 5 mg/g，过氧化值模型主机验证集 R_v 为 0.958 1，主机验证集 RMSEP 为 6.692 7 mmol/kg。而当使用从机测得的验证集光谱直接进行预测时酸值模型的验证集 R_v 下降为 0.303 1，验证集 RMSEP 提高到 0.583 6 mg/g，过氧化值模型的验证集预测相关系数下降到 0.766 3，验证集 RMSEP 提高到 15.801 0 mmol/kg。在浓度范围相同的前提下，预测相关系数 R_v 越接近 1 表示模型预测效果越好，RMSEP 越小表明所建模型的预测能力越强。由图 5、6 可以看出，当从机验证集光谱直接应用于主机模型时，相较于主机验证集光谱存在较大的预测误差，其中从机酸值预测结果存在方向性误差。主机建立的酸值与过氧化值校正模型无法直接应用于从机扫描的光谱，需要进行模型转移改善预测效果。

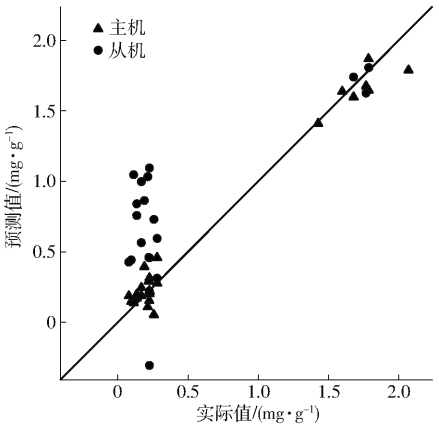


图 5　模型转移前食用油酸值预测散点图

Fig. 5　Predicted scatter diagram of edible oleic acid value before calibration

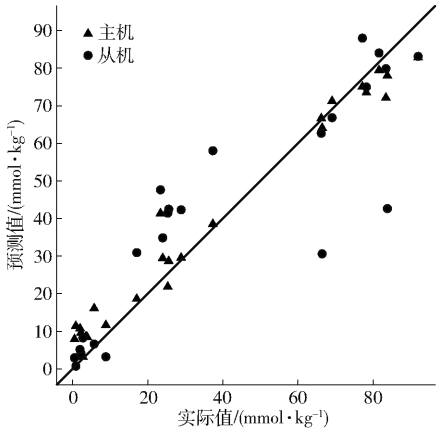


图 6　模型转移前食用油过氧化值预测散点图

Fig. 6　Predicted scatter diagram of edible oleic peroxide value before calibration

表 2　模型转移前从机样本预测结果

Tab. 2　Prediction results of slave samples before calibration

参数	RMSEP	R_v
酸值	0.583 6 mg/g	0.303 1
过氧化值	15.801 0 mmol/kg	0.766 3

为评估 SST 算法的模型转移性能，采用 S/B、DS、PDS 和 TEAM 算法进行对比测试。S/B 算法是一种目标值校正方法，通过建立主机与从机目标值间的数学关系对未知样本从机目标值进行校正。DS 和 PDS 算法通过使用主机样本集光谱对从机光谱进行校正，使得校正后的从机光谱与主机光谱达到最大相似度进而利用主机模型对其进行目标浓度预测。TEAM 算法将主机光谱作为学习目标，选择隐含层中权重与偏差正交的节点，利用极限学习机的快速逼近能力与泛化性能建立主从机光谱之间的关系，大大减少校准后的预测误差。

S/B、DS、PDS、TEAM 与 SST 算法属于有标样算法，需要主机和从机的建模集中选出样本作为转换集，且转换集的数目对于模型传递的效果具有重要影响[25-26]。为了对比转换集样本数对不同模型转移方法的影响，使用 SPXY 算法从主机与从机的校正集样本中分别选取 20、40、60、80、100 个样本作为模型转移的转换集，然后使用 5 种算法通过转换集样本建立转移模型。最后使用校正模型来预测目标浓度并计算 RMSEP 以评估转移模型的性能，其中由于 PDS 算法的结果受到窗口尺寸 W 的影响，所以选择窗口尺寸 W 为 1、3、5、7 分别建模，建模结果如表 3、4 所示。

表 3　不同模型转移方法下的酸值模型 RMSEP

Tab. 3　RMSEP results of acid value model by different calibration transfer methods　　mg/g

样本数量	PDS 算法				S/B 算法	DS 算法	TEAM 算法	SST 算法
	$W=1$	$W=3$	$W=5$	$W=7$				
20	0.742 1	0.751 3	0.779 5	0.780 7	0.394 7	0.341 2	0.272 3	0.222 2
40	0.672 0	0.678 8	0.680 8	0.680 1	0.424 4	0.345 4	0.345 2	0.193 3
60	0.602 0	0.606 9	0.607 2	0.607 7	0.425 9	0.401 2	0.426 0	0.204 6
80	0.557 5	0.558 5	0.558 9	0.558 5	0.427 1	0.318 8	0.290 1	0.183 8
100	0.543 1	0.543 3	0.543 0	0.546 1	0.432 5	0.233 7	0.205 1	0.167 0

表 4 不同模型转移方法下的过氧化值模型 RMSEP

Tab. 4 RMSEP results of peroxide value model by different calibration transfer methods mmol/kg

样本数量	PDS 算法				S/B 算法	DS 算法	TEAM 算法	SST 算法
	$W=1$	$W=3$	$W=5$	$W=7$				
20	29.809 7	29.694 2	29.677 9	29.654 5	16.131 7	20.783 8	20.433 4	14.923 0
40	31.323 1	31.307 4	31.285 7	31.160 8	16.150 2	18.989 3	19.524 6	12.720 0
60	31.317 0	31.323 5	31.330 9	31.336 3	15.926 5	13.562 1	13.491 7	10.876 3
80	31.125 4	31.131 2	31.091 1	30.977 4	15.996 0	11.986 8	11.824 9	10.781 9
100	31.161 4	31.160 1	31.154 6	31.125 1	15.761 6	11.918 1	10.420 9	9.989 3

从表 3 可以明显看出在对食用油酸值进行模型转移的过程中,PDS、DS、TEAM 与 SST 算法的性能随着转换集样本数的增加而呈现提高的趋势。对于食用油酸值模型 PDS 与 S/B 算法转移性能较差,DS、TEAM、SST 算法能够明显提高预测精度,其中 SST 算法使验证集样本 RMSEP 下降最快,预测效果最好,RMSEP 从未使用模型转移前的 0.583 6 mg/g 下降到了 0.167 0 mg/g,表明 SST 算法可以有效应用于食用油酸值模型的转移。从表 4 中结果可以看出,在食用油过氧化值模型的传递过程中 DS、TEAM、SST 算法的性能随着转换集样本数的增多而提高,PDS 算法与 S/B 算法结果并不理想,在转换集数量较少时 SST 算法的转移效果更好,在转换集数量只有 40 个时 RMSEP 已经下降到 12.720 0 mmol/kg,当转换集数量达到 100 个时相较于未传递前的预测结果 RMSEP 从 15.801 0 mmol/kg 下降到了 9.989 3 mmol/kg,效果优于 TEAM 与 DS 算法。在实际应用中,转换集样本的数量增多需要的分析时间与相关成本也随之增加,且有时由于条件限制难以获得充足的转换集样本,因此在转移效果相近时使用较少的转换集样本的方法更具有实际应用价值。另外,SST 算法参数设置简单,只需设置主成分数,而与之效果相近的 TEAM 算法需要设置隐含层神经元数量、正则项系数等超参数且不同的激活函数也会对结果造成影响,在实际应用中较为繁琐且需要的训练样本较多。

3 结束语

针对食用油酸值与过氧化值模型采用 SST 算法进行模型转移,经过模型转移后,酸值模型 RMSEP 从 0.583 6 mg/g 下降到了 0.167 0 mg/g,过氧化值模型 RMSEP 从 15.801 0 mg/g 下降到了 9.989 3 mmol/kg。通过与 PDS、S/B、DS、TEAM 算法对比发现,SST 算法仅需较少转换集样本就能得到较好结果,且所需参数较少、模型简单。实验结果表明,使用 SST 算法可以有效校正不同仪器测量光谱的系统误差,提高食用油酸值与过氧化值模型的预测结果,这对于光谱技术应用于食用油检测具有实际意义。

参 考 文 献

[1] 蒋晓杰,周旭. 食用油酸值、过氧化值安全测定方法探讨[J]. 粮食与饲料工业,2017(6):54 - 56.
JIANG Xiaojie, ZHOU Xu. Discussion on safe determination method of edible oil acid value and peroxide value[J]. Cereal & Feed Industry, 2017(6):54 - 56. (in Chinese)

[2] 李娟,梁漱玉. 近红外快速无损检测食用油品质的研究进展[J]. 食品与机械,2016,32(11):225 - 228.
LI Juan, LIANG Shuyu. The research progress on near infrared spectroscopic in the non-destructive detection of the quality of edible oil[J]. Food & Machinery, 2016,32(11):225 - 228. (in Chinese)

[3] 何雅雯,李孟俊,于修烛,等. 不同食用油氧化稳定性比较研究[J]. 中国油脂,2018,43(3):44 - 49.
HE Yawen, LI Mengjun, YU Xiuzhu, et al. Comparison of oxidative stabilities of different edible oils[J]. China Oils and Fats, 2018,43(3):44 - 49. (in Chinese)

[4] 程宁宁,贾颖萍,尹静梅. 现代分析仪器检测油脂过氧化值的研究进展[J]. 食品工业,2017,38(6):266 - 269.
CHENG Ningning, JIA Yingping, YIN Jingmei. Progress on determination of peroxide value in edible oils by modern analytical techniques[J]. The Food Industry, 2017,38(6):266 - 269. (in Chinese)

[5] 陈佳,于修烛,刘晓丽,等. 基于傅里叶变换红外光谱的食用油质量安全检测技术研究进展[J]. 食品科学,2018,39(7):270 - 277.
CHEN Jia, YU Xiuzhu, LIU Xiaoli, et al. A review of the application of Fourier transform infrared spectroscopy for quality and safety analysis of edible oils[J]. Food Science, 2018,39(7):270 - 277. (in Chinese)

[6] 马文强,张漫,李源,等. 核桃仁脂肪含量的近红外光谱无损检测[J/OL]. 农业机械学报,2019,50(增刊):374 - 379.
MA Wenqiang, ZHANG Man, LI Yuan, et al. Non-destructive detection for fat content of walnut kernels by near infrared spectroscopy[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2019,50(Supp.): 374 - 379. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx? file_no = 2019s057&flag = 1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2019.s0.057. (in Chinese)

[7] 田潇瑜,黄星奕,白竣文,等. 基于近红外光谱技术的紫薯贮藏期间花青素含量检测[J/OL]. 农业机械学报,2019,

50(2):350 – 355.
TIAN Xiaoyu, HUANG Xingyi, BAI Junwen, et al. Detection of anthocyanin content of purple sweet potato during storage period based on near infrared spectroscopy[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2019,50(2): 350 – 355. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx? file_no = 20190240&flag = 1. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2019.02.040. (in Chinese)

[8] 倪力军,韩明月,张立国,等.基于稳定一致波长筛选的无标样近红外光谱模型传递方法[J].分析化学,2018,46(10):1660 – 1668.
NI Lijun, HAN Mingyue, ZHANG Liguo, et al. A novel calibration transfer method of near infrared spectral model without standard samples based on screening stable and consistent wavelengths[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2018,46(10):1660 – 1668. (in Chinese)

[9] LIU X, HUANG C J, HAN L J. Calibration transfer of near-infrared spectrometric model for calorific value prediction of straw using different scanning temperatures and accessories[J]. Energy & Fuels, 2015,29(10):6450 – 6455.

[10] LEION H, FOLESTAD S, JOSEFSON M, et al. Evaluation of basic algorithms for transferring quantitative multivariate calibrations between scanning grating and FT NIR spectrometers[J]. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2005,37(1): 47 – 55.

[11] 张进,蔡文生,邵学广.近红外光谱模型转移新算法[J].化学进展,2017,29(8):902 – 910.
ZHANG Jin, CAI Wensheng, SHAO Xueguang. New algorithms for calibration transfer in near infrared spectroscopy[J]. Progress in Chemistry, 2017,29(8):902 – 910. (in Chinese)

[12] WORKMAN J J. A review of calibration transfer practices and instrument differences in spectroscopy[J]. Applied Spectroscopy, 2018,72(3):340 – 365.

[13] BOUCHER T, DYAR D, MAHADEVAN S. Proximal methods for calibration transfer[J]. Journal of Chemometrics, 2017,31(4): e2877.

[14] GUO S, HEINKE R, STOCKEL S, et al. Model transfer for Raman-spectroscopy-based bacterial classification[J]. Journal of Raman Spectroscopy, 2018,48(4):627 – 637.

[15] 李倩倩,刘大洋,杨彪,等.斜率/截距算法在猕猴桃可溶性固形物含量便携式检测中的应用[J].食品科学,2018,39(14):257 – 262.
LI Qianqian, LIU Dayang, YANG Biao, et al. Application of slope/bias algorithm in portable detection of contents of soluble solids of kiwifruit[J]. Food Science, 2018,39(14):257 – 262. (in Chinese)

[16] SALGUERO-CHAPARRO L, PALAGOS B, PENA-RODRIGUEZ F, et al. Calibration transfer of intact olive NIR spectra between a pre-dispersive instrument and a portable spectrometer[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2013,96: 202 – 208.

[17] JI W J, LI S, CHEN S C, et al. Prediction of soil attributes using the Chinese soil spectral library and standardized spectra recorded at field conditions[J]. Soil and Tillage Research, 2016,155:492 – 500.

[18] 李天瑞,刘翠玲,位丽娜,等.斜率截距校正算法在食用油酸值和过氧化值上的近红外光谱模型转移的研究[J].中国粮油学报,2018,33(1):118 – 124,139.
LI Tianrui, LIU Cuiling, WEI Li'na, et al. Near-infrared spectral model transfer of acid value and peroxide value of edible oil by slope intercept correction algorithm[J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2018,33(1):118 – 124,139. (in Chinese)

[19] DU W, CHEN Z P, ZHONG L J, et al. Maintaining the predictive abilities of multivariate calibration models by spectral space transformation[J]. Analytica Chimica Acta, 2011,690(1):64 – 70.

[20] CHEN W, BIN J, LU H, et al. Calibration transfer via extreme learning machine auto-encoder[J]. Analyst, 2016,141(6):1973 – 1980.

[21] 张静亚,张建新,于修烛,等.基于近红外透射光谱的食用油氧化定性分析[J].食品科学,2012,33(4):200 – 203.
ZHANG Jingya, ZHANG Jianxin, YU Xiuzhu, et al. Qualitative analysis of edible oil oxidation by near infrared transmission spectroscopy[J]. Food Science, 2012,33(4):200 – 203. (in Chinese)

[22] 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,2011:106 – 108.

[23] GALVAO R, ARAUJO M, JOSE G, et al. A method for calibration and validation subset partitioning[J]. Talanta, 2005,67(4):736 – 740.

[24] 毛博慧,孙红,刘豪杰,等.基于正交变换与 SPXY 样本划分的冬小麦叶绿素诊断[J/OL].农业机械学报,2017,48(增刊):160 – 165.
MAO Bohui, SUN Hong, LIU Haojie, et al. Prediction of winter wheat chlorophyll content based on gram-schmidt and SPXY algorithm[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017,48(Supp.):160 – 165. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx? flag = 1&file_no = 2017s026&journal_id = jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2017.S0.026. (in Chinese)

[25] 杨浩,熊智新,陈通.苹果可溶性固形物含量的近红外模型传递研究[J].分析试验室,2018,37(2):163 – 167.
YANG Hao, XIONG Zhixin, CHEN Tong. Study on near-infrared calibration model transfer for soluble solid content in apple[J]. Chinese Journal of Analysis Laboratory, 2018,37(2):163 – 167. (in Chinese)

[26] 刘耀瑶,熊智新,王勇,等.不同型号便携式光谱仪间木质素近红外光谱分析模型传递研究[J].林业工程学报,2019,4(4):93 – 98.
LIU Yaoyao, XIONG Zhixin, WANG Yong, et al. Study on the transform of near-infrared calibration models for lignin determination between different types of portable near-infrared spectrometers[J]. Journal of Forestry Engineer, 2019,4(4):93 – 98. (in Chinese)