

基于近红外光谱与 Transformer 的烟叶感官指标预测方法

张云伟¹ 张健涛¹ 张海² 周渭皓² 李斌² 陶成金²

(1. 昆明理工大学信息工程与自动化学院, 昆明 650504; 2. 云南省烟草烟叶公司, 昆明 650271)

摘要: 为克服传统卷烟配方设计与维护过程中存在的主观性强、过度依赖人工经验及感官评吸等技术瓶颈,利用“近红外光谱-化学成分-感官指标”的间接关联,提出了一种基于近红外光谱与 Transformer 架构的端到端烟叶感官质量指标预测方法。首先采用 Savitzky-Golay 卷积平滑法(SG)、一阶导数法(D1)、多元散射校正(MSC)3种光谱预处理技术有效消除基线漂移和散射干扰;进而设计了一种面向光谱数据特征的 Transformer 预测模型,实现了烟叶感官质量三维评价体系(风格特征:清香、甜香、焦香;烟气特征:浓度、劲头;质量特征:香气质、香气量、杂气、刺激、余味)的精准预测,并采用了 SHAP 方法对模型进行分析,增强了模型的可解释性。结果表明,模型对各感官指标测试集预测的平均绝对误差均不高于 0.56,具有较好可用性;针对不同感官指标,模型表现出对不同光谱特征波段的捕捉,有效挖掘了光谱特征的协同作用机制,具有较好可解释性。在此基础上,进一步结合多维相似度分析设计了一种辅助烟叶替代方法,可为烟叶替代与配方优化提供量化决策支持。

关键词: 烟叶感官指标; 近红外光谱; Transformer; 预测模型; 烟叶替代

中图分类号: TS452

文献标识码: A

文章编号: 1000-1298(2026)01-0386-11

OSID:



Prediction Method of Tobacco Sensory Indicators Based on Near Infrared Spectroscopy and Transformer

ZHANG Yunwei¹ ZHANG Jiantao¹ ZHANG Hai² ZHOU Weihao² LI Bin² TAO Chengjin²

(1. Faculty of Information Engineering and Automation, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650504, China

2. Yunnan Tobacco and Leaf Company, Kunming 650271, China)

Abstract: In order to overcome the technical bottlenecks of strong subjectivity, over-reliance on manual experience and sensory evaluation in the process of traditional cigarette formula design and maintenance, an indirect correlation model of “near infrared spectroscopy-chemical composition-sensory indicators” was constructed, and an end-to-end tobacco sensory quality indicators prediction method was proposed based on near infrared spectroscopy and Transformer architecture. Firstly, three spectral preprocessing techniques, Savitzky-Golay convolution smoothing method (SG), first derivative method (D1), and multivariate scattering correction (MSC), were used to effectively eliminate baseline drift and scattering interference; then a Transformer prediction model oriented to spectral data features was designed to achieve accurate prediction of the three-dimensional evaluation system of tobacco sensory quality (style characteristics: freshness, sweet, and burnt; smoke characteristics: concentration and strength; quality characteristics: quality of aroma, volume of aroma, offensive taste, irritating, and pleasant aftertaste). The model was analyzed by using the SHAP method to enhance its interpretability. Results showed that the model’s mean absolute error for each sensory indicators test set was no more than 0.56, demonstrating good usability. For different sensory indicators, the model demonstrated strong capture of distinct spectral feature bands, effectively exploring the synergistic mechanism of spectral features and demonstrating good interpretability. Furthermore, a method for assisting tobacco leaf substitution was designed by combining

收稿日期: 2025-05-06 修回日期: 2025-07-31

基金项目: 中国烟草总公司云南省公司科技计划重点项目(2022530000241026)、云南省高校工业智能与系统重点实验室建设项目(KKPH202403003)和国家自然科学基金项目(51365019)

作者简介: 张云伟(1972—),男,教授,博士,主要从事机器人技术、计算机视觉和机器学习研究,E-mail: zhangyunwei72@qq.com

通信作者: 陶成金(1971—),男,高级工程师,主要从事企业数字化管理与数字化转型研究,E-mail: taocjin@qq.com

multidimensional similarity analysis, providing quantitative decision support for tobacco leaf substitution and blend optimization.

Key words: tobacco sensory indicators; near infrared spectroscopy; Transformer; prediction model; tobacco leaf substitute

0 引言

烟叶作为重要的经济作物,其化学组成、感官品质和物理特性受到产地环境和栽培管理的影响^[1],这导致不同年份生产的同配方卷烟难以保持稳定的感官质量,并且在原料短缺时也加大了替代烟叶筛选的难度^[2-3]。由于烟叶感官质量指标缺乏定量检测技术手段,目前主要依赖人工评吸和经验判断,存在主观性强、工作量大、对人员素养要求高等问题^[4-5]。因此,建立客观、高效的烟叶感官质量预测方法,对实现配方科学维护 and 产品质量稳定具有重要意义。

现有研究主要通过质谱法^[6]、色谱分析^[7-9]或近红外光谱技术^[3]对烟叶化学成分进行定量表征,进而指导配方设计^[3,10-13]。质谱法具有较高的准确度,但存在成本高、效率低的问题^[14]。色谱分析方法虽能准确测定化学成分及致香物质含量,但不能定量测定烟叶感官质量指标,且存在检测周期长、成本高等局限性^[8-9]。近红外光谱结合化学计量学、机器学习等方法虽能快速分析烟叶常规化学成分、部位、产地等特征^[15-18],但其预测指标与感官品质的关联性不足,常出现化学组成相似而感官特性差异显著的现象^[5]。这种“化学成分-感官品质”的非线性关系使得现有方法难以满足配方维护的精准需求。

近红外光谱分析技术能够实现快速、无损检测,由于光谱中包含大量化学组分信息,而烟叶感官表现与化学成分存在紧密关联,因此从近红外传感器获取的光谱具有提取烟叶感官特征信息的潜力。目前已有通过近红外光谱进行烟叶感官质量分析的相关研究^[3,11,19-20]。然而这些研究对烟叶感官质量的分析维度较窄,且使用深度学习技术结合近红外光谱对烟叶感官质量建模研究不够充分。

近年来,Transformer 模型^[21]在语言处理^[22]、图像识别^[23-24]、光谱建模^[25-28]等领域表现出强大的特征提取与建模能力。与传统的 PCA^[29]、PLS^[30]、FR^[31]等方法相比,Transformer 基于自注意力机制,能够自动捕捉输入数据中的关键特征,具备同时建模局部与全局信息的能力,且无需依赖人工筛选特征区间^[25-26]。这种结构特别适用于高维、冗余性强的近红外光谱数据,有望更准确地挖掘光谱信号与烟叶感官品质之间复杂的非线性关系,从而提升感

官质量评价的准确性与稳定性。

针对上述问题,本文提出一种基于 Transformer 模型和近红外光谱的烟叶感官指标预测方法。依托“光谱-化学成分-感官评分”的间接关联机制,设计一种面向光谱数据的 Transformer 模型,用于预测烟叶的感官质量指标,通过光谱预处理与烟叶感官指标预测模型相结合的方式,利用烟叶近红外光谱分别对各感官指标进行训练建模,以实现 对烟叶 10 个感官指标(清香、甜香、焦香、浓度、劲头、香气质、香气量、杂气、刺激、余味)进行快速、有效的数字化表征。在此基础上,提出一种烟叶感官质量相似度综合评价算法,并将其与预测模型结合,在不依赖人工评吸的前提下,评估出烟叶样本间的感官相似程度,筛选出与目标烟叶感官质量相近的替代品。

1 材料与方法

1.1 实验材料

实验材料选自 2018—2022 年用于卷烟配方模块生产的复烤片烟,包含全云南省 13 个产区(昆明、大理、楚雄、玉溪、曲靖、红河、保山、文山、普洱、昭通、临沧、丽江、德宏)共 98 个植烟县,涵盖 B1F、B2F、B3F、C1F、C2F、C3F、C4F、X2F、X3F 共 9 个等级的烟叶感官质量评吸样本,样本数量总计 829 个,且每个样本均包含 10 个感官指标(清香、甜香、焦香、浓度、劲头、香气质、香气量、杂气、刺激、余味)的评吸打分信息(由云南省烟草烟叶公司烟叶技术中心提供)。烟叶样本产区分布如图 1 所示,烟叶样本等级分布如图 2 所示。

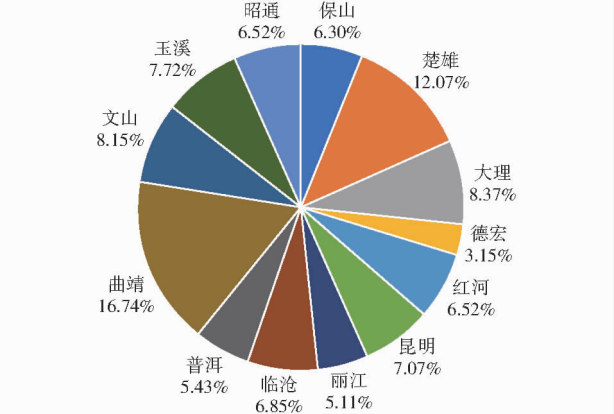


图 1 烟叶样本产地分布图

Fig. 1 Distribution map of tobacco leaf samples

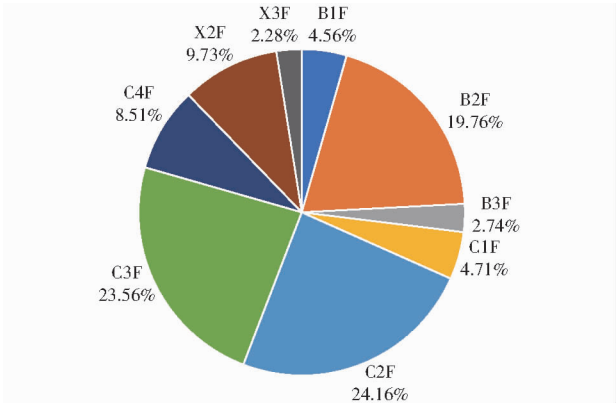


图 2 烟叶样本等级分布图

Fig. 2 Tobacco leaf samples grade distribution map

1.2 测定方法

1.2.1 烟叶近红外光谱数据采集

本文参考相关研究样本处理流程,采用标准化的样品前处理流程以确保实验数据的可靠性^[3,5,15]。具体而言,片烟样本取样后 60℃ 恒温烘干。随后使用 FossCysokes 1093 型旋风式研磨机将干燥样品研磨并过 60 目筛。取适量研磨后样品(高度约占样品杯总高度的 1/3)放入样品杯中,取 150 g 的砝码放置在样品上方,经自然压实后进行近红外光谱扫描。其中,近红外光谱由德国 BRUKER 公司 MPA 型傅里叶变换近红外光谱仪采集,光谱仪采集范围为 12 000 ~ 3 800 cm⁻¹,光谱分辨率为 8 cm⁻¹;扫描次数为 64 次。

1.2.2 烟叶感官质量评价指标

本文参考国标和行业标准^[32-35],并结合实际生产业务需求采用云南省烟草烟叶公司的烟叶感官质量评价标准^[36]。烟叶感官质量评价指标涵盖风格特征(清香、甜香、焦香)、烟气特征(浓度、劲头)以及质量特征(香气质、香气量、杂气、刺激、余味)3 大类共 10 项指标。由 6 名具有丰富经验的卷烟原料与配方专业人员对每片烟样进行评吸,并对 10 项感官指标进行打分。每项指标的评分结果取 6 位评吸人员的平均值,作为该烟样在相应感官维度上的最终评价^[37]。

为保证感官评价的可信度和后续建模的可用性,本文对感官指标标签进行了一致性评估。具体地,计算 6 位专家对每个样本感官指标评分的方差,然后取所有样本方差的平均值作为一致性度量,方差均值越小一致性越高。结果如表 1 所示。

由表 1 可以看出,各感官评分专家对各指标的评分具有较强的一致性,其中甜香方差相对偏高,但仍具有相当的可用性。整体上看,该感官评分数据能够作为后续建模的基础。

表 1 感官评分一致性分析

Tab. 1 Consistency analysis of sensory scores

感官指标	方差均值
清香	0.092 0
甜香	0.155 2
焦香	0.046 0
浓度	0.023 0
劲头	0.037 4
香气质	0.068 2
香气量	0.089 8
杂气	0.065 4
刺激	0.043 8
余味	0.037 4

1.3 近红外光谱数据预处理

由于近红外光谱采集时受仪器本身及环境因素影响,近红外光谱会出现噪声干扰、基线漂移和散射等问题,因此在使用近红外光谱建模前需要进行适当的预处理,消除干扰因素的影响,使光谱特征更明显,利于模型对光谱特征的提取,提高所建立模型的性能^[38-40]。本文采用 Savitzky - Golay 卷积平滑法(SG)^[20]、一阶导数法(First derivative, D1)^[41]、多元散射校正(Multiplicative scatter correction, MSC)^[42]对原始光谱进行预处理,减少干扰,提高烟叶感官质量预测模型的效果^[19,43]。

1.4 基于近红外光谱的数字化烟叶感官指标表征模型

1.4.1 SpectraTrans 模型架构

如图 3 所示,本文所设计的 SpectraTrans 模型主要包括 3 个部分,特征嵌入、特征提取和特征预测。设输入为一批次的烟叶近红外光谱数据,记为张量 $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{B \times N \times L}$,其中, B 是输入的同一批次的大小; N 是吸光度通道数,大小为 1; L 是光谱波数点数,大小为 2 125。该输入数据首先经过特征嵌入,将每个光谱片段映射至固定维度的嵌入向量空间,形成 Transformer 可处理的序列表示。随后,该序列输入至由 8 个自注意力机制和前馈网络堆叠而成的 Transformer 编码器中,提取全局相关特征,建立各特征之间协同作用联系。最后,通过多层感知机进行特征预测。

(1) 特征嵌入

为了将烟叶光谱数据输入到特征编码器模块,需要将输入光谱切分为若干个 patch 谱段,并对每个 patch 谱段做一次线性变换。为实现该过程,采用一维卷积(1D Convolution)操作来代替传统的线性投影方式。相比直接平铺后乘以线性变换矩阵,1D 卷积不仅可以完成光谱局部特征提取嵌入,还能保留局部波长间的顺序相关性与波形特征。具体表

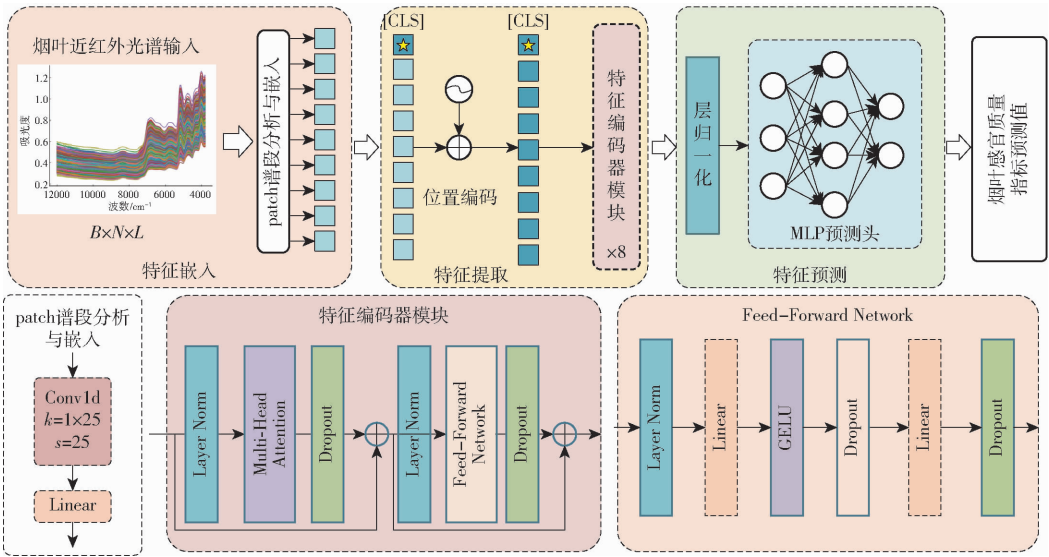


图 3 SpectraTrans 模型整体结构图

Fig. 3 SpectraTrans model overall structure diagram

达为

$$\mathbf{Z}_p = \text{Conv1D}(\mathbf{X}) \quad (1)$$

$$\mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{Z}_p \mathbf{W}_e + \mathbf{b}_e \quad (2)$$

其中

$$\mathbf{W}_e \in \mathbf{R}^{C \times d} \quad \mathbf{b}_e \in \mathbf{R}^d$$

式中

$\mathbf{Z}^{(0)}$ ——嵌入序列
 $\mathbf{Z}_p$ ——patch 处理后的序列
 $\mathbf{W}_e$ ——线性嵌入层的权重
 $\mathbf{b}_e$ ——线性嵌入层的偏置

最终得到的嵌入表示为： $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbf{R}^{B \times P \times d}$ 。

(2) 特征提取

在将嵌入序列 $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbf{R}^{B \times P \times d}$ 输入到特征编码器模块之前，为了捕获光谱全局特征，在 patch 序列前引入了一个可学习全局向量的 $\mathbf{z}_{\text{cls}} \in \mathbf{R}^{B \times 1 \times d}$ ，并添加可学习的位置编码 E_{pos} ，以保留输入序列中各 patch 谱段的空间位置信息。具体处理过程为

$$\tilde{\mathbf{Z}}^{(0)} = \text{Concat}(\mathbf{z}_{\text{cls}}, \mathbf{Z}^{(0)}) \quad (3)$$

$$\hat{\mathbf{Z}}^{(0)} = \tilde{\mathbf{Z}}^{(0)} + E_{\text{pos}} \quad (4)$$

在完成嵌入序列构建后，输入序列 $\hat{\mathbf{Z}}^{(0)}$ 将被送入由多个层堆叠而成的特征编码器模块。特征编码器的每一层由多头自注意力机制 (Multi-head self-attention, MHSA) 和前馈神经网络 (Feed forward network, FFN) 组成，每个子层均配有残差连接与层归一化操作，以增强模型稳定性与表达能力。第 l 层特征编码器模块的处理过程可形式化为

$$\hat{\mathbf{Z}}^{(l)} = \text{LayerNorm}(\mathbf{Z}^{(l-1)} + \text{MHSA}(\mathbf{Z}^{(l-1)})) \quad (5)$$

$$\mathbf{Z}^{(l)} = \text{LayerNorm}(\hat{\mathbf{Z}}^{(l)} + \text{FFN}(\hat{\mathbf{Z}}^{(l)})) \quad (6)$$

其中

$$\mathbf{Z}^{(l-1)} \in \mathbf{R}^{B \times (P+1) \times d}$$

式中 $\mathbf{Z}^{(l-1)}$ ——第 $l-1$ 层的输出

LayerNorm——层归一化，用于稳定训练

MHSA($\cdot$)——多头自注意力模块，用于建模光谱序列中不同位置之间的关系，捕获化学组分协同作用的同时，抑制噪声和无关信息

FFN($\cdot$)——前馈神经网络，通常由 2 个线性层和 1 个非线性激活函数构成

经过 l 层编码器处理后，最终输出为 $\mathbf{Z}^{(l)} \in \mathbf{R}^{B \times (P+1) \times d}$ 。

(3) 特征预测

在完成特征编码器的处理后，模型从最终输出的序列中提取对应的全局向量表示 $\mathbf{z}_{\text{cls}} \in \mathbf{R}^{B \times 1 \times d}$ 作为整个输入样本的全局特征表示。随后，将该特征送入一个多层感知机进行预测。该过程可表示为

$$\hat{y} = \text{MLP}(\mathbf{z}_{\text{cls}}) = \sigma(\mathbf{z}_{\text{cls}} \mathbf{W}_o + \mathbf{b}_o) \quad (7)$$

其中

$$\mathbf{W}_o \in \mathbf{R}^{d \times c} \quad \mathbf{b}_o \in \mathbf{R}^c$$

式中

$\mathbf{W}_o$ ——多层感知机的权重

$\mathbf{b}_o$ ——多层感知机的偏置

$\sigma(\cdot)$ ——激活函数

$\hat{y}$ ——烟叶感官质量预测值

1.4.2 模型评价指标

为了评估模型性能，直观展示模型可用性，本文采用平均绝对百分比误差 (MAPE) 和平均绝对误差 (MAE) 作为模型评价指标。

1.5 辅助烟叶替代方法

1.5.1 烟叶感官质量相似度综合评价方法

两烟叶样本的感官质量相似应同时满足：多维感官质量在向量方向上的一致性与各指标评分上的趋同性。因此，需要建立一种满足上述两个条件的烟叶感官质量相似度综合评价指标以衡量烟叶间的

感官质量相似度。具体而言,利用余弦相似度和欧氏距离进行综合评判,来衡量两个烟叶样本在多维感官质量上的相似度。

为满足感官相似要求,融合以上两种方法建立了一种烟叶感官质量相似度综合评价指标。具体如下:

首先对感官质量分指标进行最小-最大归一化,消除量纲影响。该过程可表示为

$$S'_{i,j} = \frac{S_{i,j} - \max(S_{i,j})}{\max(S_{i,j}) - \min(S_{i,j})}$$

(8)

式中 $S_{i,j}$ ——第 i 个烟叶样本的第 j 个指标

随后,将 $S'_{i,j}$ 用于后续计算,烟叶感官质量相似度计算可以表示为

$$S_s(A,B) = \text{Euclidean}(A,B)(1 - \text{Cosine}(A,B))$$

(9)

其中, $S_s(A,B)$ 表示烟叶样本 A 和 B 之间的感官质量相似度。 S_s 值越小,烟叶样本间的感官质量在方向和距离上的趋同性越强。

1.5.2 辅助烟叶替代流程

利用烟叶感官质量指标预测模型以及感官质量相似度综合评价方法,辅助进行烟叶替代的流程如图 4 所示。

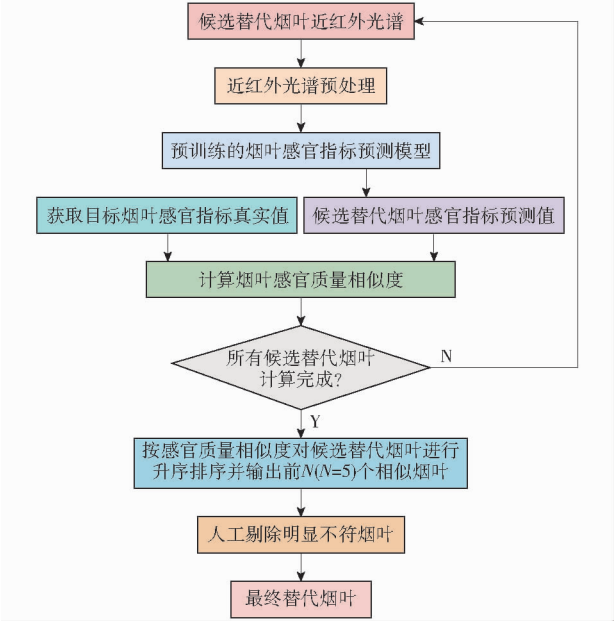


图 4 辅助烟叶替代流程图

Fig. 4 Auxiliary tobacco leaf substitution flowchart

(1) 利用烟叶感官质量预测模型 SpectraTrans 与烟叶近红外光谱数据及其对应感官质量数据对 10 个烟叶感官质量指标(清香、甜香、焦香、浓度、劲头、香气质、香气量、杂气、刺激、余味)分别建立预测模型。

(2) 对所有候选替代烟叶近红外光谱进行光谱预处理。随后,将预处理后的光谱数据分别送

入上一步骤中训练完成的各烟叶感官指标预测模型,对 10 个烟叶感官质量指标(清香、甜香、焦香、浓度、劲头、香气质、香气量、杂气、刺激、余味)分别进行预测,得到各候选替代烟叶的 10 个感官指标预测值。

(3) 利用式(9)、候选替代烟叶的 10 个感官指标预测值和目标烟叶的 10 个感官指标实际值计算所有候选替代烟叶与目标烟叶的感官质量相似度 S_s 。

(4) 按照感官质量相似度 S_s 对各候选替代烟叶进行升序排序,并输出前 $N(N=5)$ 个相似烟叶。

(5) 由配方工作人员对前 N 个相似烟叶进行一定的判断与验证,剔除与目标烟叶感官差异较大(或在其他条件上明显不符合要求)的烟叶,最终得到合适的替代烟叶。

2 结果与分析

2.1 近红外光谱预处理

为消除近红外光谱中噪声干扰、基线漂移和散射效应的影响,需要进行光谱预处理。目前,近红外光谱预处理效果较为明显的方法主要有 SG、D1、MSC 等方法。为了获得最佳的光谱预处理效果,分别组合使用了 SG、D1、MSC、D1 + MSC、SG + D1、SG + MSC、SG + D1 + MSC 共 7 种预处理方法对烟叶近红外光谱进行了预处理,展示了不同组合下的光谱分析结果,如图 5 所示。并以 MAPE 作为评价指标,结果如表 2 所示。

由表 2 的结果可以得到,各感官指标的较好预处理算法分别为:清香、甜香、焦香采用 SG + D1 + MSC;浓度、劲头采用 D1;香气质直接采用原始光谱;香气量、余味采用 SG + MSC;杂气采用 SG + D1;刺激采用 D1 + MSC。因此,本文以各指标对应最佳预处理后的光谱作为后续建模的基础数据。

2.2 烟叶感官质量各指标预测模型建立

2.2.1 建模结果与算法性能比较

由于目前缺乏可以直接对比的文献,为了验证 SpectraTrans 模型效果,分别利用 SpectraTrans 模型、其他常用的深度学习模型和机器学习方法对 10 个感官指标进行建模对比。其中,深度学习模型损失函数下降使用 Adam 优化器,迭代次数为 200 次,学习率为 0.001,采用均方误差损失函数并以 MAPE 和 MAE 作为模型评价指标。各种模型对各感官指标的建模结果如表 3 所示。

由表 3 可知,SpectraTrans 模型在各感官指标上效果均优于 MobileNet_1D、ResNet34_1D、ShuffleNet_1D、SqueezeNet_1D、PCR、PLSR,其测试集 MAPE 在风格特征上分别为 12.71%、26.65%、12.46%,烟

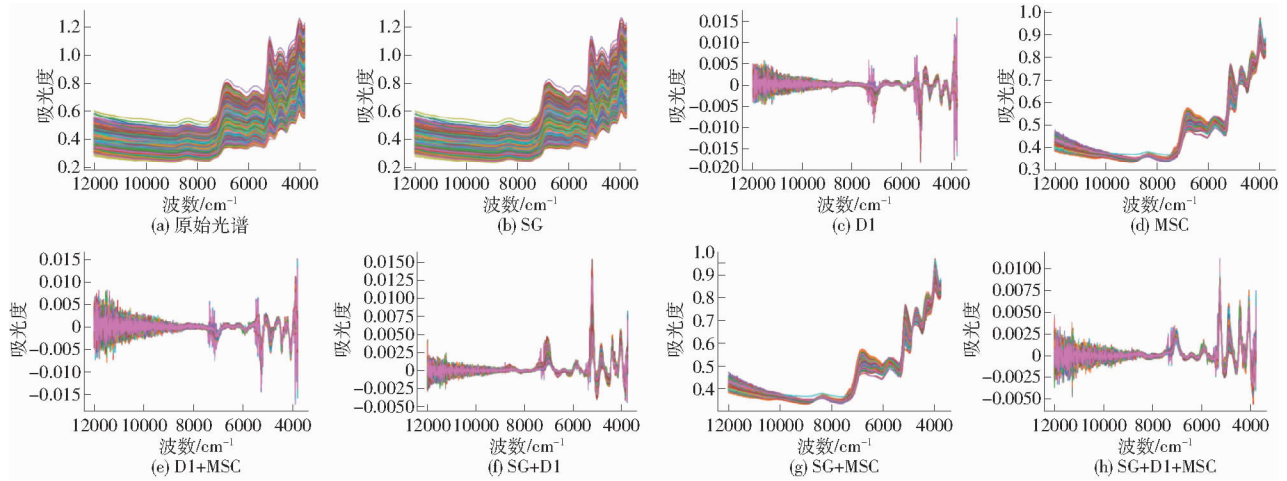


图 5 烟叶样本原始近红外光谱和预处理后近红外光谱

Fig. 5 Original near infrared spectra and near infrared spectra after pretreatment of tobacco leaf samples

表 2 不同预处理算法下各感官指标预测模型 MAPE

Tab. 2 MAPE of various sensory indicators prediction models by different preprocessing algorithms										%
预处理方法	清香	甜香	焦香	浓度	劲头	香气质	香气量	杂气	刺激	余味
原始光谱	13. 77	35. 34	31. 56	5. 21	5. 30	2. 82	3. 31	5. 02	4. 61	3. 51
SG	13. 59	34. 96	49. 52	5. 13	5. 48	2. 84	3. 22	5. 16	4. 07	3. 49
D1	13. 76	28. 12	15. 88	4. 29	4. 06	2. 88	2. 89	5. 18	4. 20	3. 33
MSC	14. 75	30. 18	36. 30	5. 39	4. 88	2. 92	3. 23	6. 01	4. 39	3. 67
D1 + MSC	13. 57	31. 55	12. 61	4. 47	4. 35	3. 16	3. 46	4. 82	3. 73	3. 58
SG + D1	13. 49	27. 17	15. 65	4. 35	4. 36	3. 22	3. 28	4. 78	3. 80	3. 69
SG + MSC	13. 90	31. 74	43. 58	5. 30	5. 36	3. 25	2. 86	5. 71	4. 18	3. 25
SG + D1 + MSC	12. 71	26. 65	12. 46	4. 31	4. 72	3. 49	3. 55	5. 45	3. 95	3. 49

表 3 各感官指标建模结果与算法性能比较

Tab. 3 Comparison of modeling results and algorithm performance of each sensory indicators											
模型	评价指标	清香	甜香	焦香	浓度	劲头	香气质	香气量	杂气	刺激	余味
PLSR	MAPE/%	19. 38	39. 00	37. 28	4. 77	5. 15	4. 56	4. 65	6. 01	5. 15	4. 75
	MAE	0. 74	0. 73	0. 41	0. 34	0. 27	0. 93	0. 95	0. 64	0. 55	0. 71
PCR	MAPE/%	16. 03	27. 19	56. 97	4. 42	5. 08	3. 57	3. 75	4. 96	4. 42	3. 92
	MAE	0. 60	0. 54	0. 59	0. 27	0. 26	0. 73	0. 76	0. 52	0. 47	0. 85
SqueezeNet_1D	MAPE/%	17. 81	32. 02	23. 39	5. 94	6. 06	3. 16	3. 07	5. 97	4. 77	3. 54
	MAE	0. 69	0. 67	0. 33	0. 42	0. 32	0. 65	0. 63	0. 62	0. 52	0. 54
ShuffleNet_1D	MAPE/%	13. 31	28. 65	18. 78	4. 59	5. 18	3. 29	3. 18	5. 43	3. 87	3. 51
	MAE	0. 57	0. 58	0. 25	0. 31	0. 27	0. 69	0. 65	0. 46	0. 45	0. 49
ResNet34_1D	MAPE/%	15. 15	30. 03	16. 45	4. 37	4. 46	2. 98	3. 74	5. 16	3. 94	3. 35
	MAE	0. 53	0. 54	0. 29	0. 29	0. 26	0. 61	0. 65	0. 56	0. 42	0. 46
MobileNet_1D	MAPE/%	13. 97	27. 63	20. 98	4. 86	4. 30	2. 96	3. 26	5. 59	3. 99	3. 50
	MAE	0. 56	0. 57	0. 31	0. 28	0. 26	0. 62	0. 62	0. 46	0. 42	0. 49
SpectraTrans	MAPE/%	12. 71	26. 65	12. 46	4. 29	4. 06	2. 82	2. 86	4. 78	3. 73	3. 25
	MAE	0. 49	0. 51	0. 18	0. 27	0. 21	0. 56	0. 53	0. 42	0. 39	0. 45

气特征和质量特征均低于 5%；MAE 均不高于 0. 56,模型预测较为准确。PLSR 模型性能最差,其 MAPE 相较 SpectraTrans 模型分别高 6. 67、12. 35、24. 82、0. 48、1. 09、1. 74、1. 79、1. 23、1. 42、1. 50 个百分点,SpectraTrans 模型总体上表现出更高的精度和对不同风格、烟气、质量特征更强的映射能力。

为直观展示 SpectraTrans 模型预测性能,绘制了各感官指标的测试集预测相对误差箱线图,如图 6 所示。

由图 6 可见,模型对各感官指标的预测均较为准确,能够为卷烟配方维护中的烟叶感官评价提供较好的辅助作用。其中,焦香、烟气特征和质量特征均表

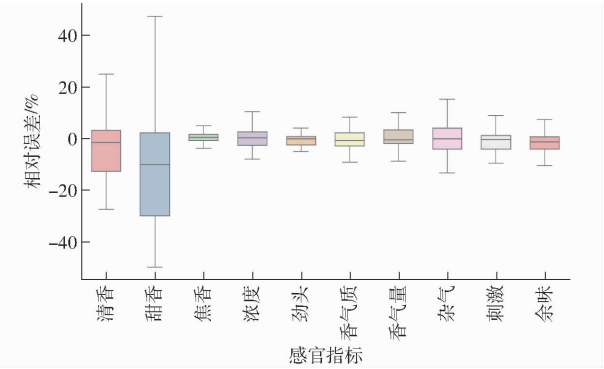


图 6 各感官指标预测相对误差箱线图

Fig.6 Box plot of relative error of sensory indicators prediction

表 4 5 折交叉验证 MAPE 结果										
Tab.4 Five-fold cross-validation MAPE results										
折数	清香	甜香	焦香	浓度	劲头	香气质	香气量	杂气	刺激	余味
1-Fold	14.16	27.12	13.38	3.50	3.92	3.19	2.90	4.89	3.90	3.39
2-Fold	12.53	25.91	12.04	4.16	3.12	3.27	2.91	4.58	3.71	3.37
3-Fold	12.79	22.65	10.21	3.26	3.85	3.00	2.66	4.72	3.36	3.10
4-Fold	12.07	22.24	12.75	3.75	3.22	2.71	2.38	4.78	3.25	3.15
5-Fold	11.32	24.92	10.45	3.24	3.06	2.56	2.62	4.62	2.74	3.05

实验结果表明,各感官指标虽存在有限波动,但 MAPE 相对于各感官指标数据均较低,证明模型预测效果较好,针对任务具有较强的可用性。其中清香、甜香指标的波动较大现象也与其在感官评吸中容易混淆有关,这也与上文结果相印证,但其整体依然处于可用范围。

2.2.3 SHAP 分析

为增强模型可解释性,探究模型是否能够捕捉不同光谱特征之间的协同作用,采用 SHAP 方法对模型进行分析。各感官指标预测模型的全波段 SHAP 分析结果如图 7 所示。

由图 7 可以看出,不同感官指标预测模型所关注的特征波段不同,显著特征贡献波段不同且具有多个区域,这些区域对应不同的烟叶感官相关化学组分的吸收峰。其中,香型(清香、焦香、甜香)、浓度、劲头涉及的特征波段更为宽泛,覆盖了整个光谱特征波段,但各自的显著特征贡献波段又有差异,说明对于这些感官指标,参与作用的化学物质成分更为复杂。该结果与烟草化学研究领域得到的基本认识相吻合:烟叶感官品质的形成本质上源于多组分的动态平衡,当组分比例变化时,烟叶感官表现也会随之产生变化^[44-45]。这种表现解释了模型能从全局范围学习捕捉与感官质量密切相关的光谱特征,能够有效挖掘光谱特征的协同作用机制。对于不同感官指标,模型表现出对不同光谱特征波段的捕捉,进一步证实了模型的有效性。

现较强的预测效果;清香、甜香指标在感官评吸中容易混淆,要准确分辨有一定难度(这也与表 1 中甜香评分方差均值较大相印证),导致评吸数据本身存在一定的偏差,这可能是模型对部分样本预测准确性不足的原因,也反映出风格特征与近红外光谱数据之间具有更为复杂重叠的间接关系,模式特征提取难度大,但其预测结果依然具有一定可用性。

2.2.2 5 折交叉验证

采用 5 折交叉验证(5-fold cross-validation)的方法对数据集进行训练与验证。避免因数据划分带来的偶然性,确保实验结果的稳定性和可用性。各感官指标在 5 折上的 MAPE 表现如表 4 所示。

2.3 配方烟叶替代

为确保烟叶感官指标预测模型和辅助烟叶替代技术的有效性,通过实验对其进行工艺验证。对某省中烟工业客户所需配方模块进行库存测算后,以其中 3 种需要替代的片烟为例。利用图 4 所示辅助烟叶替代流程对于每个目标烟叶进行烟叶替代。

通过设定一个经验相似度阈值,可以筛选出一定数量的相似烟叶。经验表明,前 5 个相似烟叶基本能满足烟叶替代要求,故将替代流程中 N 设定为 5,为了验证该烟叶替代方法的有效性,卷烟配方工作人员对各替代烟叶进行了感官评吸,实验结果如表 5~7 所示(表中“P”为预测值,“R”为实际值)。

由表 5~7 可得, S_s 值越小,替代烟叶与目标烟叶的感官质量在方向和距离上的趋同性越强。这表明烟叶感官质量相似度综合评价指标能够良好地衡量烟叶间感官质量方向和距离上的相似程度,实现烟叶的最优替代;替代烟叶实际感官质量与目标烟叶无显著差异。其中,相似程度最大的几种候选烟叶在烟叶的风格特征和烟气特征上与目标烟叶几乎完全吻合,而质量特征中的部分不吻合指标也仅存在较小差异。目标烟叶与替代烟叶的差异均在感官质量管控的范围内。这表明辅助烟叶替代方法能够高效、客观地实现烟叶的有效替代,辅助卷烟配方维护中的烟叶替代工作。

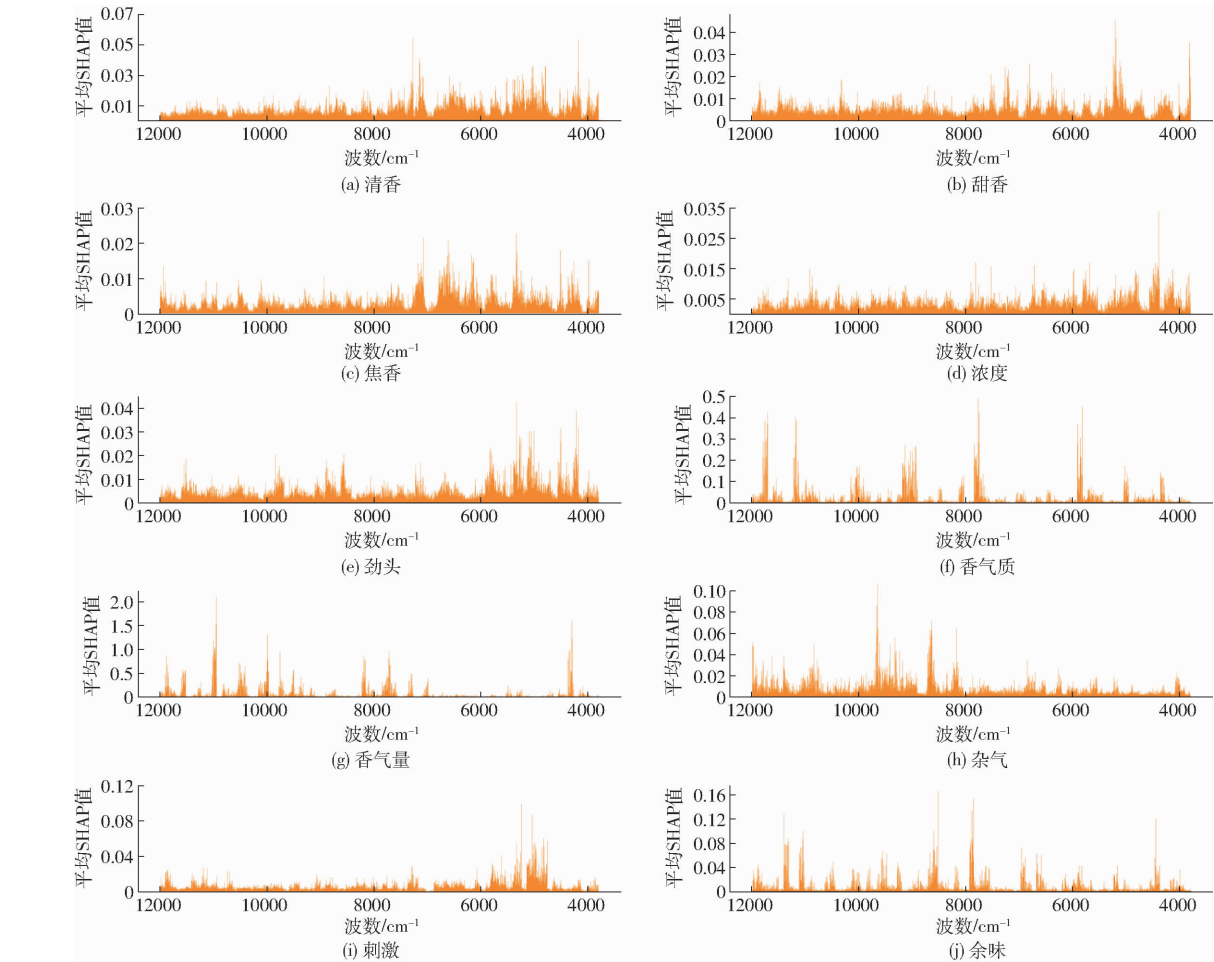


图 7 各感官指标预测模型的全谱段 SHAP 分析条形图

Fig. 7 Full spectrum SHAP analysis bar chart of each sensory indicators prediction model

表 5 目标烟叶 1 感官指标和其替代烟叶感官指标真实值与预测值

Tab. 5 Actual and predicted values of sensory indicators of target tobacco leaves 1 and alternative tobacco leaves																					
烟叶	清香		甜香		焦香		浓度		劲头		香气质		香气量		杂气		刺激		余味		S_s
	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	
目标烟叶 1	—	4.0	—	1.0	—	0	—	7.0	—	5.5	—	20.5	—	20.5	—	10.0	—	10.5	—	15.0	<0.000 1
Top5 相似替代烟叶	4.2	4.0	1.0	1.0	0	0	7.1	7.0	5.4	5.5	20.6	20.0	20.4	20.0	10.3	10.0	10.9	11.0	15.5	15.0	0.003 9
	4.0	4.0	1.0	1.0	0	0	7.1	7.0	5.5	5.5	21.3	20.0	21.1	21.0	10.5	11.0	10.9	11.0	15.4	15.0	0.007 2
	2.9	4.0	1.0	1.0	0	0	7.1	7.0	5.5	5.5	21.2	21.0	21.2	21.0	10.5	11.0	10.8	11.0	15.1	15.0	0.007 4
	4.1	4.0	1.0	1.0	0	0	7.1	7.0	5.4	5.5	21.0	21.0	21.2	21.0	10.6	10.5	10.9	10.5	15.4	15.5	0.007 6
	4.0	4.0	1.0	1.0	0	0	7.1	7.0	5.4	5.5	21.4	21.0	21.2	21.0	10.3	10.0	10.5	10.5	14.9	15.0	0.009 5

表 6 目标烟叶 2 感官指标和其替代烟叶感官指标真实值与预测值

Tab. 6 Actual and predicted values of sensory indicators of target tobacco leaves 2 and alternative tobacco leaves																					
烟叶	清香		甜香		焦香		浓度		劲头		香气质		香气量		杂气		刺激		余味		S_s
	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	
目标烟叶 2	—	3.0	—	1.0	—	0	—	6.5	—	4.5	—	20.0	—	19.0	—	10.5	—	11.0	—	15.0	<0.000 1
Top5 相似替代烟叶	3.0	3.0	1.0	1.0	0	0	6.5	6.5	4.9	4.5	20.0	20.0	19.1	19.0	10.2	10.0	10.9	11.0	15.0	15.0	0.010 6
	3.0	3.0	1.0	1.0	0	0	6.5	6.5	4.6	4.5	20.4	20.0	19.2	19.0	10.4	10.0	11.0	11.0	14.1	14.0	0.011 6
	3.0	3.0	1.0	1.0	0	0	6.5	6.5	4.5	4.5	20.5	20.0	19.9	19.0	10.8	11.0	10.9	11.0	15.2	15.0	0.014 2
	3.0	3.0	1.0	1.0	0	0	6.5	6.5	5.0	5.0	20.6	20.0	19.1	19.0	10.2	10.0	10.9	11.0	15.0	15.0	0.026 3
	3.0	3.0	1.0	1.0	0	0	6.5	6.5	5.0	5.0	20.6	20.5	19.6	20.0	10.7	10.5	10.9	11.0	15.2	15.0	0.027 8

表 7 目标烟叶 3 感官指标和其替代烟叶感官指标真实值与预测值

Tab.7 Actual and predicted values of sensory indicators of target tobacco leaves 3 and alternative tobacco leaves																					
烟叶	清香		甜香		焦香		浓度		劲头		香气质		香气量		杂气		刺激		余味		S _s
	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	
目标烟叶 3	—	5.0	—	2.0	—	0	—	7.5	—	5.5	—	22.0	—	22.0	—	11.0	—	11.0	—	16.0	<0.000 1
Top5 相似 替代烟叶	5.0	5.0	2.0	2.0	0	0	7.5	7.5	5.5	5.5	21.8	22.0	22.0	22.0	10.9	11.0	10.9	11.0	16.2	16.0	0.000 1
	4.6	4.0	2.0	2.0	0	0	7.4	7.5	5.5	5.5	21.2	21.0	21.0	21.0	10.8	11.0	11.0	11.0	15.8	16.0	0.004 6
	5.0	5.0	2.0	2.0	0	0	7.5	7.0	5.1	5.5	21.5	21.0	21.1	21.0	11.0	11.0	11.0	11.0	15.8	16.0	0.004 7
	5.0	5.0	2.0	2.0	0	0	7.5	8.0	5.1	5.5	21.5	22.0	21.1	21.5	11.0	12.0	11.0	11.5	15.8	17.5	0.004 7
	5.0	5.0	2.0	2.0	0	0	7.5	7.5	5.5	5.0	22.1	22.0	22.0	21.0	12.0	11.0	11.5	11.0	15.6	16.0	0.004 8

3 结 论

(1)建立了一种基于近红外光谱与 Transformer 的烟叶感官指标预测模型 SpectraTrans,实现了对烟叶感官指标的有效预测。实验结果表明,模型对各感官指标预测的 MAE 均不高于 0.56,满足实际应用要求。为烟叶感官质量指标的定量检测提供了一种有效的软测量技术路径。

(2)利用 SHAP 方法对模型进行了可解释性分

析,进一步证实了模型的有效性。实验结果表明,模型能够从全谱段范围内学习捕捉与烟叶感官指标密切相关的光谱特征,有效挖掘各特征的协同作用机制,对感官指标进行预测。

(3)基于上述模型与多维相似度分析,设计了一种辅助烟叶替代方法。该方法能够快速、有效地搜寻替代烟叶且替代烟叶感官质量实际值与目标烟叶无显著差异,实现配方烟叶的最优替代,辅助卷烟配方维护中时常需要进行的烟叶替代工作。

参 考 文 献

[1] 郝贤伟,黄文勇,徐志强,等. 基于近红外光谱技术的云南片烟综合质量评价[J]. 中国烟草科学,2022,43(2):58-63.
HAO Xianwei,HUANG Wenyong,XU Zhiqiang,et al. Comprehensive quality evaluation of Yunnan tobacco strips based on near infrared spectroscopy[J]. Chinese Tobacco Science,2022,43(2):58-63. (in Chinese)

[2] 刘晓晖,刘敬珣,陈必春,等. 部分替代卷烟配方中津巴布韦烟叶研究[J]. 烟草科技,2009(3):13-18.
LIU Xiaohui,LIU Jingxun,CHEN Bichun,et al. Study on reducing proportion of Zimbabwean tobacco in cigarette blend[J]. Tobacco Science & Technology,2009(3):13-18. (in Chinese)

[3] 李石头,廖付,何文苗,等. 基于近红外光谱相似的烟叶替代与卷烟配方维护[J]. 烟草科技,2020,53(2):88-93.
LI Shitou,LIAO Fu,HE Wenmiao,et al. Tobacco substitution and cigarette blend maintenance based on near infrared spectral similarity[J]. Tobacco Science & Technology,2020,53(2):88-93. (in Chinese)

[4] 王楠,雒兴刚,张忠良,等. 基于非负矩阵分解的卷烟配方维护方法[J]. 烟草科技,2019,52(8):67-76.
WANG Nan,LUO Xinggang,ZHANG Zhongliang,et al. Cigarette blend maintenance based on non-negative matrix factorization[J]. Tobacco Science & Technology,2019,52(8):67-76. (in Chinese)

[5] 郝贤伟,帖金鑫,何文苗,等. 基于近红外光谱-感官评价的巴西烟叶风格模拟及替代[J]. 烟草科技,2018,51(10):83-89.
HAO Xianwei,TIE Jinxin,HE Wenmiao,et al. Style simulation and substitution of Brazilian tobacco based on near infrared spectrum and sensory evaluation[J]. Tobacco Science & Technology,2018,51(10):83-89. (in Chinese)

[6] 向海英,刘秀明,孔维松,等. 超高效液相色谱-串联质谱法快速分析烟叶中的 8 种生物碱[J]. 分析科学学报,2023,39(2):201-206.
XIANG Haiying,LIU Xiuming,KONG Weisong,et al. Rapid determination of eight alkaloids in tobacco leaves by ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry[J]. Journal of Analytical Science,2023,39(2):201-206. (in Chinese)

[7] 雒兴刚,王楠,张忠良,等. 关联规则挖掘方法在智能卷烟配方维护中的应用[J]. 中国烟草学报,2018,24(3):21-29.
LUO Xinggang,WANG Nan,ZHANG Zhongliang,et al. Application of association rule mining method to intelligent maintenance of tobacco blend of cigarette[J]. Acta Tabacaria Sinica,2018,24(3):21-29. (in Chinese)

[8] 潘首慧,李翔宇,白茂军,等. 烟叶致香物质研究进展[J]. 现代农业科技,2024(11):161-164.
PAN Shouhui,LI Xiangyu,BAI Maojun,et al. Research progress on tobacco aroma substances[J]. Modern Agricultural Science and Technology,2024(11):161-164. (in Chinese)

[9] 刘涛,曹建敏,郭存,等. 不同烤烟品种化学成分及致香物质差异分析[J]. 中国烟草科学,2023,44(2):74-82.
LIU Tao,CAO Jianmin,GUO Cun,et al. Difference analysis on chemical composition and aroma components of different flue-cured tobacco cultivars[J]. Chinese Tobacco Science,2023,44(2):74-82. (in Chinese)

[10] 郭科,薛源,胡丹,等. 基于组合优化的卷烟叶组配方设计[J]. 中国烟草学报,2007,13(2):21-23,32.
GUO Ke,XUE Yuan,HU Dan,et al. Designing cigarette blending formulation based on combined optimization[J]. Acta

Tabacaria Sinica,2007,13(2):21-23,32. (in Chinese)

[11] 郝贤伟,彭钰涵,杨泽会,等. 基于近红外光谱表征品质设计烟叶配方[J]. 湖南农业大学学报(自然科学版),2023,49(3):284-290.
HAO Xianwei,PENG Yuhan,YANG Zehui,et al. Design of tobacco formulation based on the quality characterization by near infrared spectroscopy[J]. Journal of Hunan Agricultural University(Natural Sciences),2023,49(3):284-290. (in Chinese)

[12] 李巧灵,陈昆焱,邓小华,等. 基于烟草热解差异度分析的烟叶替代方法[J]. 烟草科技,2018,51(8):77-84.
LI Qiaoling,CHEN Kunyan,DENG Xiaohua,et al. Method of tobacco substitution based on differential analysis of tobacco pyrolysis[J]. Tobacco Science & Technology,2018,51(8):77-84. (in Chinese)

[13] 杨超,万里兴,杨盛刚,等. 卷烟叶组化学成分分析及与配方维护的关系[J]. 烟草科技,2019,52(4):76-84.
YANG Chao,WAN Lixing,YANG Shenggang,et al. Analysis of chemical component in blended tobacco and relationship between chemical component and cigarette blend maintenance[J]. Tobacco Science & Technology,2019,52(4):76-84. (in Chinese)

[14] 赵颐翔,郭亚龙,王丁众,等. 烟草中赖氨酸苯并吡啶的分离鉴定及风味效应[J]. 烟草科技,2025,58(3):22-31.
ZHAO Yixiang,GUO Yalong,WANG Dingzhong,et al. Isolation and identification of lysine benzacridine in tobacco and its flavor effect[J]. Tobacco Science & Technology,2025,58(3):22-31. (in Chinese)

[15] 鲁梦瑶,杨凯,宋鹏飞,等. 基于卷积神经网络的烟叶近红外光谱分类建模方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2018,38(12):3724-3728.
LU Mengyao,YANG Kai,SONG Pengfei,et al. The study of classification modeling method for near infrared spectroscopy of tobacco leaves based on convolution neural network[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis,2018,38(12):3724-3728. (in Chinese)

[16] 王静,丁香乾,王晓东,等. 基于深度信念网络的烟叶部位近红外光谱分类方法研究[J]. 红外与激光工程,2019,48(4):31-37.
WANG Jing,DING Xiangqian,WANG Xiaodong,et al. Study of near infrared spectrum classification for tobacco leaf position based on deep belief network[J]. Infrared and Laser Engineering,2019,48(4):31-37. (in Chinese)

[17] 朱春晖,索卫国,黄卫东,等. 烟草及烟草制品中总氮测定方法研究进展[J]. 农业与技术,2020,40(2):16-18.
ZHU Chunhui,SUO Weiguo,HUANG Weidong,et al. Research progress on determination methods of total nitrogen in tobacco and tobacco products[J]. Agriculture and Technology,2020,40(2):16-18. (in Chinese)

[18] 陆伟,宋楠. 基于非线性 PLS 的烟叶中 K 和 Cl 近红外光谱建模研究[J]. 中国烟草学报,2016,22(3):67-71.
LU Wei,SONG Nan. Nonlinear PLS-based modeling of near-infrared spectra for potassium and chlorine in tobacco leaves[J]. Acta Tabacaria Sinica,2016,22(3):67-71. (in Chinese)

[19] 付博,杨永锋,刘向真,等. 基于近红外光谱的烤烟香型分类模型研究[J]. 河南农业科学,2023,52(7):163-171.
FU Bo,YANG Yongfeng,LIU Xiangzhen,et al. Study on aroma type classification model based on near infrared spectra of flue-cured tobacco[J]. Journal of Henan Agricultural Sciences,2023,52(7):163-171. (in Chinese)

[20] 沙云菲,黄雯,王亮,等. 中红外和近红外数据融合的风格型风格判别[J]. 光谱学与光谱分析,2021,41(2):473-477.
SHA Yunfei,HUANG Wen,WANG Liang,et al. Merging MIR and NIR spectral data for flavor style determination[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis,2021,41(2):473-477. (in Chinese)

[21] VASWANI A,SHAZEER N,PARMAR N,et al. Attention is all you need[J]. Advances in Neural Information Processing Systems,2017,30:5998-6008.

[22] YENDURI G,RAMALINGAM M,SELVI G C,et al. GPT(generative pre-trained transformer)—a comprehensive review on enabling technologies,potential applications,emerging challenges,and future directions[J]. IEEE Access,2024,12:54608-54649.

[23] DING J,LI X,ZHAO L. CDFormer:a hyperspectral image change detection method based on transformer encoders[J]. IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters,2022,19:1-5.

[24] ZHAO F,HUANG J,LIU Y,et al. A deep learning approach combining super-resolution and segmentation to identify weed and tobacco in UAV imagery[C]//2024 9th International Conference on Electronic Technology and Information Science(ICETIS),2024:594-597.

[25] LI You,SUN Hongwei,ZHENG Yurui,et al. Combined gramian angular difference field image coding and improved mobile vision transformer for determination of apple soluble solids content by Vis-NIR spectroscopy[J]. Journal of Food Composition and Analysis,2024,131:106200.

[26] NASEEB S,SIMARDEEP K,MITHRAA T,et al. ProTformer:Transformer-based model for superior prediction of protein content in lablab bean (*Lablab purpureus* L.) using near-infrared reflectance spectroscopy[J]. Food Research International,2024,197:115161.

[27] 李禧龙,韩亚芬,潘宇轩,等. 基于改进 ResNet 的马铃薯黑心病近红外光谱检测方法[J]. 农业机械学报,2024,55(12):470-479.
LI Xilong,HAN Yafen,PAN Yuxuan,et al. Detection on potato black heart disease by near infrared spectroscopy based on improved ResNet[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2024,55(12):470-479. (in Chinese)

- [28] 任广鑫,高钰敏,张雨茹,等. 基于电子舌与近红外光谱融合的滇红工夫红茶滋味品质评价[J]. 农业机械学报,2025,56(1):102–109.
REN Guangxin,GAO Yumin,ZHANG Yuru,et al. Evaluation of taste quality of Dianhong congou black tea based on fusion of electronic tongue and near-infrared spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2025,56(1):102–109. (in Chinese)
- [29] 王文俊,沙云菲,汪阳忠,等. 近红外和电子鼻数据融合识别不同香型风格[J]. 光谱学与光谱分析,2023,43(1):133–137.
WANG Wenjun,SHA Yunfei,WANG Yangzhong,et al. Discriminating flavor styles via data fusion of NIR and EN[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis,2023,43(1):133–137. (in Chinese)
- [30] 刘艺琳,张海燕,彭海根,等. 应用近红外光谱判别烟叶等级模型的可靠性及化学成分特征分析[J]. 光谱学与光谱分析,2020,40(10):3260–3264.
LIU Yilin,ZHANG Haiyan,PENG Haigen,et al. Reliability and chemical composition analysis of tobacco leaf grade model by near-infrared spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis,2020,40(10):3260–3264. (in Chinese)
- [31] 梁莹,马琨,张馨予,等. 基于近红外光谱和随机森林的烟叶病害种类识别[J]. 激光与光电子学进展,2024,61(15):362–359.
YING Liang,MA Kun,ZHANG Xinyu,et al. Identification of types of tobacco leaf diseases using near-infrared spectroscopy and random forest algorithm[J]. Laser & Optoelectronics Progress,2024,61(15):362–369. (in Chinese)
- [32] 全国烟草标准化技术委员会. 卷烟 第4部分:感官技术要求:GB 5606.4—2005[S]. 北京:中国标准出版社,2005.
- [33] 中华人民共和国农业部. 感官分析 术语:GB/T 10221—2012[S]. 北京:中国标准出版社,2012.
- [34] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品 调节和测试的大气环境:GB/T 16447—2004[S]. 北京:中国标准出版社,2004.
- [35] 全国烟草标准化技术委员会. 烟草及烟草制品 感官评价方法:YC/T 138—1998[S]. 北京:中国标准出版社,1998.
- [36] 云南省烟草烟叶公司. 烤烟烟叶单料烟感官特性评价规范:Q/YNYC(YY). J01.005—2023[S]. 北京:中国标准出版社,2023.
- [37] 全国烟草标准化技术委员会. 烤烟 烟叶质量风格特色感官评价方法:YC/T 530—2015[S]. 北京:中国标准出版社,2015.
- [38] BI Y,YUAN K,XIAO W,et al. A local pre-processing method for near-infrared spectra,combined with spectral segmentation and standard normal variate transformation[J]. Analytica Chimica Acta,2016,909:30–40.
- [39] ENGEL J,GERRETZEN J,SZYMANSKA E,et al. Breaking with trends in pre-processing? [J]. Trac-Trends in Analytical Chemistry,2013,50:96–106.
- [40] 赵娟,沈懋生,浦育歌,等. 基于近红外光谱与多品质指标的苹果出库评价模型研究[J]. 农业机械学报,2023,54(2):386–395.
ZHAO Juan,SHEN Maosheng,PU Yuge,et al. Out-of-warehouse evaluation and prediction model of apple based on near-infrared spectroscopy combined with multiple quality indexes [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2023,54(2):386–395. (in Chinese)
- [41] STEINIER J,TERMONIA Y,DELTOUR J. Smoothing and differentiation of data by simplified least square procedure[J]. Analytical Chemistry,1972,44(11):1906–1909.
- [42] GELADI P,MACDOUGALL D,MARTENS H. Linearization and scatter-correction for near-infrared reflectance spectra of meat [J]. Applied Spectroscopy,1985,39(3):491–500.
- [43] 刘文政,周雪健,平凤娇,等. 基于可见-近红外光谱的鲜食葡萄成熟品质关键指标检测[J]. 农业机械学报,2024,55(2):372–383.
LIU Wenzheng,ZHOU Xuejian,PING Fengjiao,et al. Detection of key indicators of ripening quality in table grapes based on visible-near-infrared spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2024,55(2):372–383. (in Chinese)
- [44] 刘扣珠,高真真,李建华,等. 豫中烤烟上六片烟叶叶长与主要化学成分及感官质量关系[J]. 中国烟草科学,2019,40(6):75–82,88.
LIU Kouzhu,GAO Zhenzhen,LI Jianhua,et al. Study on the relationship of leaf length with main chemical components and sensory quality of upper six leaves in yuzhong flue-cured tobacco[J]. Chinese Tobacco Science,2019,40(6):75–82,88. (in Chinese)
- [45] 任胜超,闫新甫,陈越立,等. 曲靖烤烟叶质重与主要化学成分及感官质量的关系分析[J]. 南方农业学报,2014,45(7):1258–1263.
REN Shengchao,YAN Xinfu,CHEN Yueli,et al. Relationship analysis between leaf density and main chemical components and sensory quality of flue-cured tobacco in Qujing prefecture[J]. Journal of Southern Agriculture,2014,45(7):1258–1263. (in Chinese)