

基于无参数高效算法的近红外光谱模型传递研究

刘翠玲^{1,2} 徐金阳^{1,2} 孙晓荣^{1,2} 张善哲^{1,2} 咎佳睿^{1,2}

(1.北京工商大学人工智能学院,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: 模型传递可解决不同近红外光谱仪间多元校正模型无法共享的问题。以食用油为研究对象,对其酸值和过氧化值模型进行传递分析。在主机上建立偏最小二乘多元校正模型,利用无参数高效模型传递(PFCE)算法中NS-PFCE无标样算法和FS-PFCE有标样算法分别实现模型传递,探讨了标准化样品数量对模型传递效果的影响。并与经典的3种有标样传递算法和2种无标样传递算法进行对比。结果表明,经NS-PFCE无标样传递后,从机酸值与过氧化值预测集均方根误差分别从0.613 mg/g和16.153 mmol/kg下降到0.275 mg/g和9.523 mmol/kg;而经FS-PFCE有标样传递后,从机酸值与过氧化值预测集均方根误差分别下降到0.274 mg/g和8.945 mmol/kg。且随着标准化样品数量的增加,经PFCE算法传递后预测集均方根误差越低。无参数高效模型传递算法联合应用单一的无标样算法和有标样算法两种传递方式,增强了传递模型的适应性和包容性,同时有效地降低主机光谱与从机光谱之间的差异,实现了不同光谱仪间校正模型的共享。

关键词: 食用油; 近红外光谱; 模型传递; 无参数高效模型传递算法

中图分类号: S123; TS227 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2023)02-0396-07

OSID:



Near Infrared Spectroscopy Calibration Transfer Based on Parameter-free and Efficient Calibration Enhancement Algorithm

LIU Cuiling^{1,2} XU Jinyang^{1,2} SUN Xiaorong^{1,2} ZHANG Shanzhe^{1,2} ZAN Jiarui^{1,2}

(1. School of Artificial Intelligence, 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: Calibration transfer can solve the problem that multivariate calibration models cannot be shared among different near-infrared spectrometers. Taking edible oil as the research object, transfer analysis of its acid value and peroxide value model was conducted. The partial least squares multivariate correction model was established on the master spectrometers, and the calibration transfer was realized by using the parameter-free and efficient calibration enhancement (PFCE) calibration transfer algorithm in NS-PFCE without standard sample transfer and FS-PFCE with standard sample transfer, and the dependence of calibration transfer on the number of standardization samples was explored. In addition, it was compared with three calibration transfer algorithms with standard sample, which were slope/bias (S/B), direct standardization (DS) and piecewise direct standardization (PDS), and two calibration transfer algorithms without standard sample, which were finite impulse response (FIR) and stability competitive adaptive reweighted sampling (SCARS). The results suggested that after the NS-PFCE without standard sample algorithm was transferred, the root mean square error of prediction (RMSEP) of the acid value and peroxide value was decreased from 0.613 mg/g and 16.153 mmol/kg to 0.275 mg/g and 9.523 mmol/kg, respectively. Furthermore, after the FS-PFCE with standard sample algorithm was transferred, the root mean square error of prediction (RMSEP) of the acid value and peroxide value was dropped to 0.274 mg/g and 8.945 mmol/kg, respectively. Specifically, the increase of the number of standardized samples, the root mean square error of prediction (RMSEP) was lower. The parameter-free and efficient calibration enhancement (PFCE) algorithm combined a single transfer method without a standard sample

收稿日期: 2022-04-07 修回日期: 2022-04-30

基金项目: 北京市自然科学基金项目(4222043)、国家自然科学基金青年科学基金项目(61807001)、北京工商大学青年教师科研启动基金项目(QNJJ2022-41)和北京工商大学研究生科研能力提升计划项目

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: liuel@btbu.edu.cn

and a standard sample, which enhanced the adaptability and inclusiveness of the transfer model. And PFCE algorithm effectively reduced the difference between the master spectrum and the slave spectrum, and also realized the calibration model sharing between different spectrometers.

Key words: edible oil; near-infrared spectroscopy; calibration transfer; parameter-free and efficient calibration enhancement

0 引言

近红外(Near infrared,NIR)^[1-2]光谱技术因其快捷、无损、绿色等特点,目前已广泛应用于食品^[3-5]、医药^[6]和农业^[7]等领域。但是,随着近红外光谱仪发展的多样性,不同光谱仪间的多元校正模型无法实现共享,重新建立校正模型需要大量的人力和财力。解决这类问题的方法称为模型传递^[8](Calibration transfer),其核心思想是消除样本在不同光谱仪器间测量信号的差异,从而实现校正模型的共享。

模型传递分为有标样传递与无标样传递^[9]。近年来,国内外学者对有标样模型传递算法应用进行了研究。温晓燕等^[10]利用直接标准化(Direct standardization,DS)和分段直接标准化(Piecewise direct standardization,PDS)算法对甲醇汽油进行模型传递研究;BROUCKAERT等^[11]采用斜率偏差校正法(Slope/bias,S/B)对工业液体洗涤剂的成分进行模型传递研究。其次,国内外学者也对无标样模型传递算法的应用进行了研究。宋海燕等^[12]将有限脉冲响应(Finite impulse response,FIR)算法应用到土壤有机质的模型传递研究;WANG等^[13]将稳定竞争自适应重加权采样(Stability competitive adaptive reweighted sampling,SCARS)算法应用在树叶叶绿素浓度模型传递的研究。以上算法均实现模型传递,但方式相对单一且独立,只能选择有标样传递或无标样传递的其中一种方式实现,无法将两种方式联合应用,导致传递模型的适用范围较小。

无参数高效模型传递算法(Parameter-free and efficient calibration enhancement,PFCE)^[14]根据有无标准样品分为无标样传递 PFCE(Non-supervised PFCE,NS-PFCE)算法和有标样传递 PFCE(Full-supervised,FS-PFCE)算法。PFCE 算法将两种传递方式联合应用,具有效率高、设置简单的优点,并成功应用于药品^[14]、植物叶片^[15]、水果^[16]模型传递的研究。

本文采用 PFCE 算法结合偏最小二乘回归(Partial least squares,PLS)建立传递模型,分别实现食用油酸值与过氧化值的有标样与无标样传递。并与经典的 3 种有标样传递算法和 2 种无标样传递算法进行对比,以期将模型传递更好地应用于近红外

光谱检测。

1 材料与方法

1.1 实验仪器

实验在北京工商大学光谱技术与品质检测实验室完成,光谱检测仪器为 Bruker 公司的 VERTEX-70 型傅里叶红外光谱仪和 MATRIX-F 型傅里叶红外光谱仪。仪器参数见表 1。

表 1 光谱仪器和参数

Tab.1 Spectroscopic instruments and parameters			
光谱仪型号	主/从机类型	分辨率/cm ⁻¹	波数/cm ⁻¹
MATRIX-F	主	2	12 800 ~ 4 000
VERTEX-70	从	4	25 000 ~ 20

主机和从机分别对同一样品进行光谱采集,采集范围为 9 000 ~ 5 000 cm⁻¹;光谱采集参数设置:样本扫描次数为 32;背景扫描次数为 32;光阑 6 mm;扫描频率 10 kHz。

1.2 实验材料

为了构建食用油通用模型,选取北京古船食品有限公司的 5 种食用油样品,共计 129 个,其中包含 19 个玉米油、25 个芝麻香油、56 个大豆油、5 个橄榄油、24 个小磨香油样本。并依据文献[17-18]测定所有食用油样本酸值与过氧化值。

1.3 样品划分

在近红外光谱模型传递分析中,通常把样本划分成训练集和预测集。光谱-理化值共生距离(Sample set partitioning based on joint x-y distances,SPXY)^[19]是一种有效的样品集划分方法,原理是分别采用光谱数据和样本理化值作为参数特征计算样品间距离,以保证最大程度表征样本分布,增加样本间差异性和代表性,并提高模型稳定性和准确性。

1.4 PFCE 模型传递算法

根据使用场景不同,无参数高效模型传递算法(PFCE)分为 NS-PFCE 无标样模型传递算法和 FS-PFCE 有标样模型传递算法。NS-PFCE 仅使用食用油样本光谱信息实现模型传递,而 FS-PFCE 则需要食用油样本的光谱信息与理化值信息共同作用实现模型传递。

1.4.1 主机 PLS 多元校正模型建立

偏最小二乘回归(PLS)^[20]是一种经典的统计

学方法,已经成为衡量校正模型效果的最佳标准。采用 PLS 方法建立食用油的多元校正模型,并通过选择最佳潜在变量的数量来优化模型。

主机光谱仪采集的样品光谱数据记为 X_{master} 并与样本理化值 y 建立主机的线性回归模型,并得到预测值 $\hat{y}$,即

$$y = \begin{bmatrix} 1 & X_{master} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{0, master} \\ b_{master} \end{bmatrix} + e = \hat{y} + e \tag{1}$$

式中 $b_{0, master}$ ——主机模型截距
 b_{master} ——主机模型回归系数
 e —— $\hat{y}$ 和 y 之间的预测误差

1.4.2 NS-PFCE 无标样模型传递算法

从机光谱仪采集的样品光谱数据记为 X_{slave} ,将主机模型截距 $b_{0, master}$ 和回归系数 b_{master} 代入 NS-PFCE 算法的成本函数,使从机模型尽可能接近主机模型,即:主机模型预测值与从机模型预测值误差最小,从而寻找最优的从机模型截距 $b_{0, slave}$ 和回归系数 b_{slave} ,即

$$\begin{cases} \min_{b_{0, slave}, b_{slave}} \left(\left\| \begin{bmatrix} 1 & X_{master} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{0, master} \\ b_{master} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & X_{slave} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{0, slave} \\ b_{slave} \end{bmatrix} \right\|^2 \right) \\ \text{s. t. } \text{corr}(b_{master}, b_{slave}) > r_{thres} \end{cases} \tag{2}$$

式中 $\text{corr}(\cdot)$ —— b_{master} 和 b_{slave} 间的相关系数运算函数
 r_{thres} ——约束阈值

为了加快函数收敛速度并减少搜寻空间,在主机模型与从机模型的回归系数间施加相关系数的约束阈值 r_{thres} ,且为了防止出现欠拟合与过拟合的情况,将 r_{thres} 设置为 0.98。

1.4.3 FS-PFCE 有标样模型传递算法

相比 NS-PFCE 无标样模型传递算法,FS-PFCE 有标样模型传递算法不仅需要主机光谱数据 X_{master} 与从机光谱数据 X_{slave} ,还要食用油样本理化值真实值 y 。相似地,通过 FS-PFCE 算法的成本函数得到最优的从机模型的截距 $b_{0, slave}$ 和回归系数 b_{slave} ,即

$$\begin{cases} \min_{b_{0, slave}, b_{slave}} \left(\left\| y - \begin{bmatrix} 1 & X_{slave} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{0, slave} \\ b_{slave} \end{bmatrix} \right\|^2 + \right. \\ \left. \left\| \begin{bmatrix} 1 & X_{master} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{0, master} \\ b_{master} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & X_{slave} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{0, slave} \\ b_{slave} \end{bmatrix} \right\|^2 \right) \\ \text{s. t. } \text{corr}(b_{master}, b_{slave}) > r_{thres} \end{cases} \tag{3}$$

FS-PFCE 算法的成本函数不仅计算了主机光谱与从机光谱的预测误差,还计算了真实值与从机预测值的误差。同样,防止出现欠拟合与过拟合的

情况,将 r_{thres} 设置为 0.98。

1.5 模型传递评价指标

模型的评价指标选择决定系数 (Correlation coefficient of cross-validation, R^2)、训练集均方根误差 (Root mean square error of calibration, RMSEC) 和预测集均方根误差 (Root mean square error of prediction, RMSEP)。 R^2 越接近 1 且 RMSEC 与 RMSEP 越小,表明模型传递效果越好。

2 结果与分析

如图 1 所示,主机和从机所采集的食用油样品的平均吸光度在波段 9 000 ~ 5 000 cm^{-1} 之间,共 2 074 个波数点。可以看出主机光谱和从机光谱存在明显的非线性差异,吸光度差值在波段 9 000 ~ 8 750 cm^{-1} 存在较大偏差。

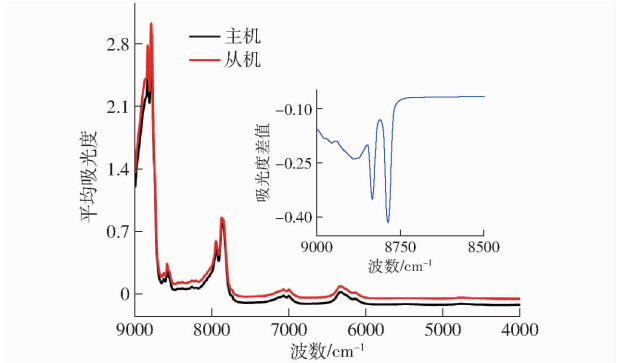


图 1 主、从机的食用油平均吸光度及光谱差值
Fig. 1 Mean absorbance of edible oil from master and slave and spectral difference

2.1 样本划分

采用 SPXY 算法按照比例 3:1 选取 97 个食用油样本作为训练集,32 个样本食用油作为验证集,用于建立酸值和过氧化值定量分析模型。食用油样本酸值和过氧化值的数据集划分如表 2 所示,其中预测集的数值范围均在训练集之内,表明预测集可以对模型的性能进行验证。

表 2 食用油样品数据集划分
Tab.2 Data set division of edible oil

数据集	数量	参数	数值	平均 值	标准 偏差
训练集	97	酸值/($\text{mg} \cdot \text{g}^{-1}$)	0.08 ~ 2.12	0.58	0.62
		过氧化值/($\text{mmol} \cdot \text{kg}^{-1}$)	0.33 ~ 92.03	27.82	26.96
验证集	32	酸值/($\text{mg} \cdot \text{g}^{-1}$)	0.09 ~ 1.82	0.80	0.82
		过氧化值/($\text{mmol} \cdot \text{kg}^{-1}$)	0.52 ~ 91.99	33.21	31.82

2.2 主机模型预测结果

为了消除噪声干扰等因素对建模效果的影响,分别采用 Savitzky-Golay (S-G) 平滑卷积^[21]、多元散射校正 (Multiplicative scatter correction, MSC)^[22]、

标准正态变量变换 (Standard normalized variate, SNV)^[23]、一阶导数和二阶导数^[24]共 5 种预处理算法处理光谱数据。选择最优预处理算法后建立主机酸值与过氧化值偏最小二乘校正模型,不同预处理条件下主机 PLS 校正模型预测结果如表 3、4 所示。

表 3 不同预处理条件下主机 PLS 校正模型酸值
预测结果

Tab.3 Prediction results of acid value of master PLS
model with different preprocessing

预处理	训练集		预测集	
	R^2	RMSEC/ ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$)	R^2	RMSEP/ ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$)
原始光谱	0.859	0.291	0.826	0.301
MSC	0.959	0.238	0.948	0.249
SNV	0.930	0.275	0.915	0.288
S-G 平滑	0.942	0.232	0.922	0.250
一阶导数	0.936	0.242	0.925	0.261
二阶导数	0.912	0.283	0.902	0.298

表 4 不同预处理条件下主机 PLS 校正模型过氧化值
预测结果

Tab.4 Prediction results of peroxide value of master
PLS model with different preprocessing

预处理	训练集		预测集	
	R^2	RMSEC/ ($\text{mmol}\cdot\text{kg}^{-1}$)	R^2	RMSEP/ ($\text{mmol}\cdot\text{kg}^{-1}$)
原始光谱	0.850	10.104	0.839	10.615
MSC	0.941	8.381	0.928	8.698
SNV	0.968	7.501	0.954	7.749
S-G 平滑	0.949	7.961	0.933	8.254
一阶导数	0.939	8.004	0.923	8.478
二阶导数	0.925	9.210	0.914	9.589

从表 3、4 可看出,采用 5 种不同预处理算法处理食用油光谱的建模效果比直接使用原始光谱的建模效果均有提升。其中,主机酸值模型 MSC 算法预处理效果最优,预测集决定系数 R^2 达 0.948,预测值均方根误差 RMSEP 为 0.249 mg/g。主机过氧化值模型 SNV 算法预处理效果最优,预测集决定系数 R^2 达 0.954,预测值均方根误差 RMSEP 为 7.749 mmol/kg。

MSC 和 SNV 算法的本质是消除样品表面散射和光程变化等因素对光谱产生的影响,故二者算法不同程度地消除了食用油因液体表面张力引起的散射,所以预测效果优于其他算法,也有效提高了模型预测精度。

2.3 PFCE 算法模型传递及预测结果

按照 PFCE 算法分类进行 NS-PFCE 无标样模

型传递算法与 FS-PFCE 有标样模型传递算法。利用 NS-PFCE 与 FS-PFCE 算法得到的最优截距和回归系数分别构建从机预测模型,并将从机的 32 个食用油样本分别代入以上两种模型进行预测,预测的食用油酸值散点图如图 2、3 所示,预测的食用油过氧化值散点图如图 4、5 所示。

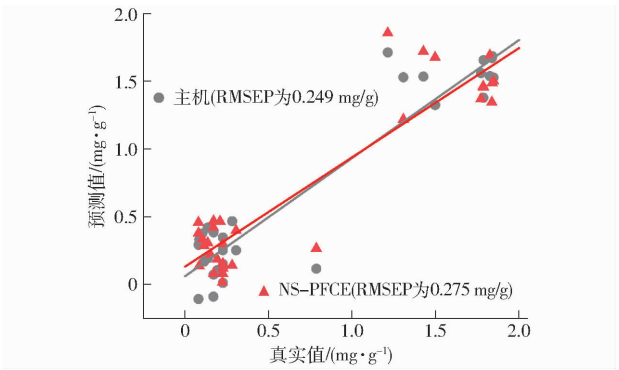


图 2 主机与 NS-PFCE 算法预测食用油酸值散点图
Fig.2 Predicted scatter plot of edible oil acid value by master and NS-PFCE

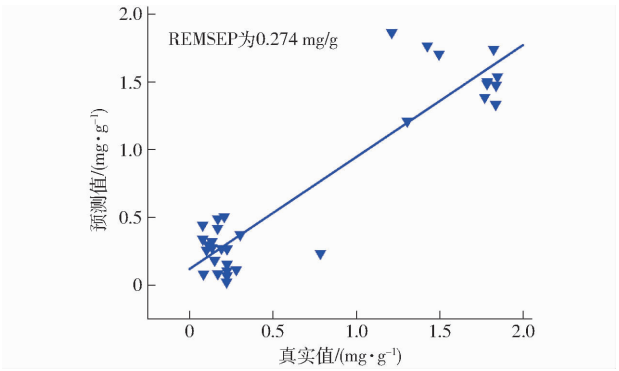


图 3 FS-PFCE 算法预测食用油酸值散点图
Fig.3 Predicted scatter plot of edible oil acid value by FS-PFCE

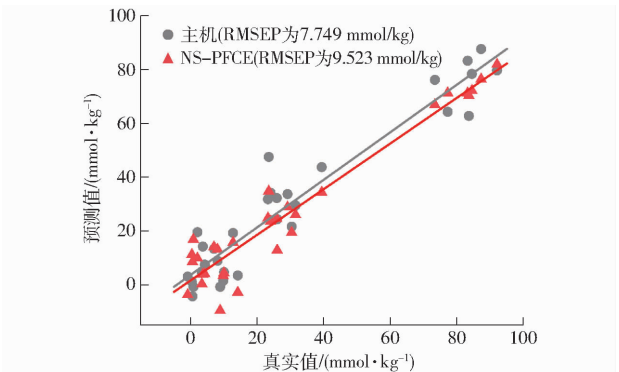


图 4 主机与 NS-PFCE 算法预测食用油过氧化值
散点图
Fig.4 Predicted scatter plot of edible oil peroxide value by master and NS-PFCE

食用油酸值与过氧化值建模及预测结果见表 5。由表 5 可知,当从机样品集未进行模型传递直接代入主机模型进行预测时,酸值预测集均方根误差从

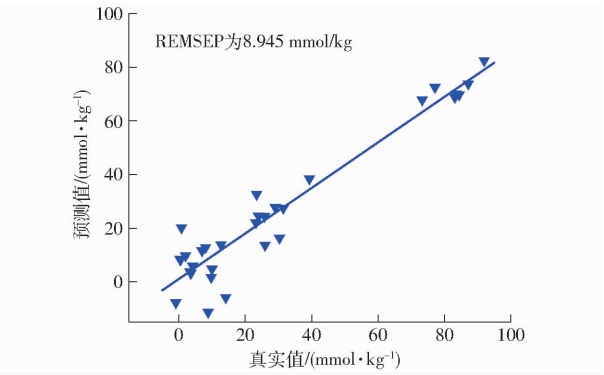


图5 FS - PFCE 算法预测食用油过氧化值散点图
Fig.5 Predicted scatter plot of edible oil peroxide value by FS - PFCE

表5 食用油酸值与过氧化值建模及预测结果
Tab.5 Modeling and prediction results of edible oleic acid value and peroxide value

模型类型	预测集均方根误差	
	酸值/($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$)	过氧化值/($\text{mmol}\cdot\text{kg}^{-1}$)
未模型传递	0.613	16.153
NS - PFCE	0.275	9.523
FS - PFCE	0.274	8.945
主机模型	0.249	7.749

原先的0.249 mg/g 上升到0.613 mg/g, 过氧化值预测集均方根误差从原先的7.749 mmol/kg 上升到16.153 mmol/kg, 预测结果偏差较大, 表明从机样本不能直接应用于主机模型, 需要对从机样本进行模型传递。

分别采用 NS - PFCE 无标样模型传递算法与 FS - PFCE 有标样模型传递算法进行传递后, 模型预测效果均有明显提升。NS - PFCE 算法传递后, 酸值的 RMSEP 下降到 0.275 mg/g, 过氧化值的 RMSEP 下降到 9.523 mmol/kg。而 FS - PFCE 算法传递后, 酸值的 RMSEP 下降到 0.274 mg/g, 过氧化值的 RMSEP 下降到 8.945 mmol/kg。经两种算法传递后的模型预测效果均有所改善, 说明 PFCE 算法使得从机样本能更好地适用于主机模型。且相比之下, FS - PFCE 有标样模型传递算法的传递效果优于 NS - PFCE 无标样模型传递算法, 说明有无标准样品成为 PFCE 算法传递效果的关键。

2.4 标准化样品数目对模型传递的影响

为了进一步探究标准化样品数目对 PFCE 算法模型传递效果的影响, 采用 SPXY 算法依次从原批次食用油样本的训练集中选取 20、40、60、80、100 个标准化样品集, 食用油酸值与过氧化值建模效果与预测均方根误差如图 6 所示。

从图 6a 可知, 经 NS - PFCE 和 FS - PFCE 算法传递后的酸值预测均方根误差均与训练集标准化样

品数目有关, 且随着标准化样本数目的增加, 预测集均方根误差越小。当标准化样品个数为 100 时, 预测均方根误差达到最小值, 经 NS - PFCE 算法和 FS - PFCE 算法传递后酸值的 RMSEP 分别下降到 0.283、0.276 mg/g。由图 6b 可知, 经以上两种算法传递后过氧化值预测均方根误差与训练集标准化样品数目呈相同规律, 且当标准化样品个数为 100 时, 预测均方根误差也达到最小值, 传递后过氧化值 RMSEP 分别下降到 9.498、8.945 mmol/kg。

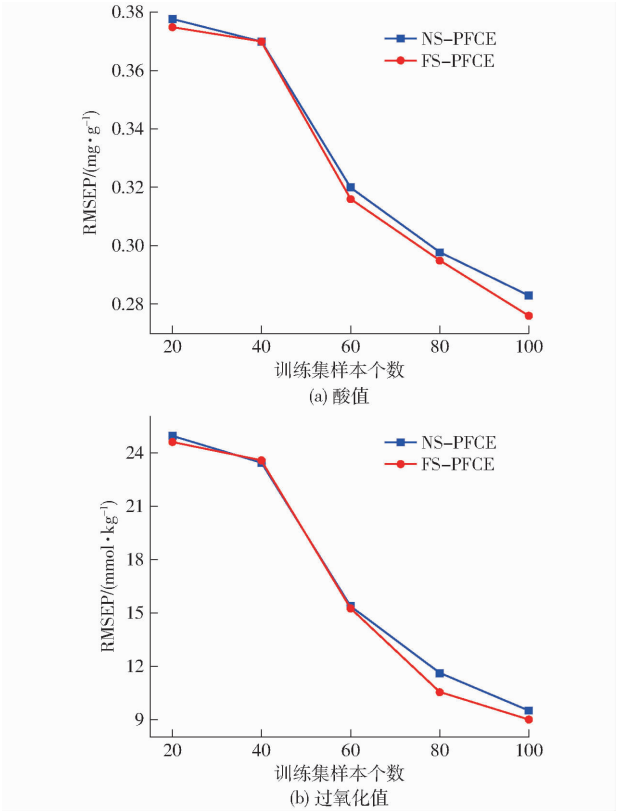


图6 不同标准化样品数目预测均方根误差
Fig.6 RMSEP with different numbers of standardization samples

相比之下, 经 FS - PFCE 算法传递后的预测集均方根误差均小于 NS - PFCE 算法, 说明 FS - PFCE 有标样模型传递算法的传递效果优于 NS - PFCE 无标样模型传递算法。

2.5 PFCE 算法传递效果比较

为了评估 PFCE 算法的模型传递效果, 研究比较 S/B、DS 和 PDS 有标样模型传递算法, 同时也比较 FIR 和 SCARS 无标样模型传递算法。将从机 32 个样本集分别代入以上经不同算法传递后的校正模型进行预测, 4 种有标样模型传递算法与 3 种无标样模型传递算法预测结果如表 6、7 所示。

对比 4 种有标样模型传递算法, 均有效地降低酸值和过氧化值预测集均方根误差, 提升从机样本对主机模型的适应能力。其中 NS - PFCE 算法传

表 6 4 种有标样模型传递算法酸值与过氧化值模型
预测结果

Tab.6 Model prediction results of acid value and
peroxide value of four calibration transfer algorithms
with standard sample

有标样模型传递算法	酸值 RMSEP/ ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$)	过氧化值 RMSEP/ ($\text{mmol}\cdot\text{kg}^{-1}$)
S/B	0.394	14.761
DS	0.318	11.918
PDS	0.557	12.065
NS-PFCE	0.275	7.749

表 7 3 种无标样模型传递算法酸值与过氧化值模型
预测结果

Tab.7 Model prediction results of acid value and
peroxide value of three calibration transfer algorithms
without standard sample

无标样模型传递算法	酸值 RMSEP/ ($\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$)	过氧化值 RMSEP/ ($\text{mmol}\cdot\text{kg}^{-1}$)
FIR	0.491	13.952
SCARS	0.554	14.206
FS-PFCE	0.274	8.945

递效果最优,对比 3 种无标样模型传递算法,也都有效地降低了酸值和过氧化值预测集均方根误差。FS-PFCE 算法传递效果仍是最优。

2.6 讨论

PFCE 算法包含无标样模型传递算法和有标样模型传递算法,其传递效果均优于经典有标样和无标样算法,使模型传递算法不再局限于其中一种传

递方式,提高了模型传递适用性和包容性。且相比之下,有标样模型传递算法的传递效果优于无标样模型传递算法,说明有无标准样品成为模型传递算法效果的关键。另外,PFCE 算法无参数,只需设置相关系数的阈值,模型传递效率高,使得从机样本更接近于主机模型,从而实现了不同仪器间多元校正模型的共享。

3 结论

(1)经 NS-PFCE 算法传递后的从机样本酸值预测模型 RMSEP 从 0.613 mg/g 降低到 0.275 mg/g,过氧化值的 RMSEP 从 16.153 mmol/kg 降低到 9.523 mmol/kg;而 FS-PFCE 算法传递后的从机样本酸值预测模型的 RMSEP 降低到 0.274 mg/g,过氧化值的 RMSEP 降低到 8.945 mmol/kg。分别对比其余 4 种有标样模型传递与 3 种无标样模型传递,PFCE 算法的预测效果最优,且 FS-PFCE 算法均优于 NS-PFCE 算法。此外,PFCE 算法随着标准化样本数目的增加,预测集均方根误差减小。

(2)联合模型传递的有标样传递算法和无标样传递算法,采用 PFCE 中 NS-PFCE 无标样算法和 FS-PFCE 有标样算法分别实现了食用油的酸值与过氧化值在不同仪器间的传递。并与 DS、PDS、S/B 的有标样算法和 FIR、SCARS 无标样算法进行对比研究。PFCE 算法有效地降低主机与从机之间的光谱差异,提高了从机样本在主机模型的适应度,实现了不同光谱仪间的模型共享。

参 考 文 献

[1] 褚小立,陈瀑,李敬岩,等. 近红外光谱分析技术的最新进展与展望[J]. 分析测试学报,2020,39(10):1181-1188.
CHU Xiaoli, CHEN Pu, LI Jingyan, et al. The latest progress and prospect of near-infrared spectroscopy[J]. Journal of Analysis and Testing, 2020, 39(10): 1181-1188. (in Chinese)

[2] KENR Y, DUAN Y K, LIU B. Recent advances of optical imaging in the second near-infrared window[J]. Advanced Materials, 2018, 30(47):1802394.

[3] 高升,王巧华,施行,等. 便携式红提葡萄多品质可见/近红外检测仪设计与试验[J]. 农业机械学报,2021,52(2):308-319.
GAO Sheng, WANG Qiaohua, SHI Xing, et al. Design and test of portable red globe grape extraction multi-quality visible/near infrared detector[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2021,52(2):308-319. (in Chinese)

[4] 刘莉,陶红燕,方静,等. 基于近红外高光谱的梨叶片炭疽病与黑斑病识别[J]. 农业机械学报,2022,53(2):221-230.
LIU Li, TAO Hongyan, FANG Jing, et al. Identification of anthracnose and black spot on pear leaves based on near-infrared hyperspectral[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2022,53(2):221-230. (in Chinese)

[5] 邵志明,王怀彬,董志城,等. 基于近红外相机成像和阈值分割的苹果早期损伤检测[J]. 农业机械学报,2021,52(增刊):134-139.
SHAO Zhiming, WANG Huaibin, DONG Zhicheng, et al. Early damage detection of apples based on near-infrared camera imaging and threshold segmentation[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021, 52(Supp.): 134-139. (in Chinese)

[6] WU S, BUTT H J. Near-infrared-sensitive materials based on upconverting nanoparticles[J]. Advanced Materials, 2016, 28(6):1208-1226.

[7] 张东兴,刘江,杨丽,等. 基于 VIS-NIR 的播种沟内土壤水分测量传感器研究[J]. 农业机械学报,2021,52(2):218-226.
ZHANG Dongxing, LIU Jiang, YANG Li, et al. Research on soil moisture measurement sensor in sowing furrow based on VIS-NIR[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021, 52(2): 218-226. (in Chinese)

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

[9] 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. A new algorithm for calibration transfer in near infrared spectroscopy[J]. Progress in Chemistry, 2017, 29(8): 902–910. (in Chinese)

[10] 温晓燕,徐艳艳,李茂刚,等.分段直接校正模型转移结合近红外光谱技术的甲醇汽油中甲醇定量分析方法研究[J].分析化学,2021,49(10):1758–1765.
WEN Xiaoyan, XU Yanyan, LI Maogang, et al. Study on quantitative analysis method of methanol in methanol gasoline using segmented direct correction calibration transfer combined with near-infrared spectroscopy[J]. Analytical Chemistry, 2021, 49(10): 1758–1765. (in Chinese)

[11] BROUCKAERT D, UYTTERSROT J S, BROECKX W, et al. Calibration transfer of a Raman spectroscopic quantification method for the assessment of liquid detergent compositions from at-line laboratory to in-line industrial scale[J]. Talanta, 2018, 179: 386–392.

[12] 宋海燕,秦刚.土壤有机质近红外预测 FIR 模型传递算法研究[J].光谱学与光谱分析,2015,35(12):3360–3363.
SONG Haiyan, QIN Gang. Research on transfer algorithm of FIR model for near-infrared prediction of soil organic matter[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015,35(12):3360–3363. (in Chinese)

[13] WANG M, ZHENG K Y, YANG G J, et al. A robust near-infrared calibration model for the determination of chlorophyll concentration in tree leaves with a calibration transfer method[J]. Analytical Letters, 2015, 48(11):1707–1719.

[14] ZHANG J, LI B Y, HU Y, et al. A parameter-free framework for calibration enhancement of near-infrared spectroscopy based on correlation constraint[J]. Analytica Chimica Acta, 2020, 1142(1):169–178.

[15] MISHRA P, WOLTERING E. Handling batch-to-batch variability in portable spectroscopy of fresh fruit with minimal parameter adjustment[J]. Analytica Chimica Acta, 2021, 1177(1): 338771.

[16] MISHRA P. Chemometric approaches for calibrating high-throughput spectral imaging setups to support digital plant phenotyping by calibrating and transferring spectral models from a point spectrometer[J]. Analytica Chimica Acta, 2021, 1187(1): 339154.

[17] 国家粮食局.动植物油脂 酸值和酸度测定:GB/T 5530—2005[S].北京:中国标准出版社,2005.

[18] 中华人民共和国国家卫生和计划生育委员会.食品安全国家标准 食品中过氧化值的测定:GB 5009. 227—2016[S].北京:中国标准出版社,2017.

[19] ZHENG K Y, FENG T, ZHANG W, et al. Weighted SPXYE (WSPXYE) and its application to transfer set selection in near infrared spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021,41(3): 984–989.

[20] 王文秀,彭彦昆,王凡,等.局部偏最小二乘法结合可见-近红外光谱预测猪肉挥发性盐基氮[J].食品科学,2019,40(14):339–345.
WANG Wenxiu, PENG Yankun, WANG Fan, et al. Prediction of pork volatile basic nitrogen by local partial least squares combined with visible-near infrared spectroscopy[J]. Food Science, 2019, 40(14): 339–345. (in Chinese)

[21] 鲁一冰,刘文清,张玉钧,等.一种自适应层进式 Savitzky–Golay 光谱滤波算法及其应用[J].光谱学与光谱分析,2019,39(9):2657–2663.
LU Yibing, LIU Wenqing, ZHANG Yujun, et al. An adaptive hierarchical Savitzky–Golay spectral filtering algorithm and its application[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2019, 39(9): 2657–2663. (in Chinese)

[22] LEI F F, YANG Y H, ZHANG J, et al. Window optimisation PMSC–PLS with applications to NIR spectroscopic analyses [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2019, 191(1): 158–167.

[23] PU Y Y, SUN D W, RICCIOLI C, et al. Calibration transfer from micro NIR spectrometer to hyperspectral imaging: a case study on predicting soluble solids content of bananito fruit (*Musa acuminata*) [J]. Food Analytical Methods, 2018, 11(4): 1021–1033.

[24] 张伏,崔夏华,丁轲,等.不同预处理方法对多位置种蛋性别鉴定的影响研究[J].光谱学与光谱分析,2022,42(2):434–439.
ZHANG Fu, CUI Xiahua, DING Ke, et al. Effects of different pretreatment methods on sex identification of eggs in multi-location[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(2): 434–439. (in Chinese)

(上接第 385 页)

[26] PAN S J, QIANG Y. A survey on transfer learning[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2010, 22(10):1345–1359.

[27] 于营,杨婷婷,杨博雄.混淆矩阵分类性能评价及 Python 实现[J].现代计算机,2021,20(5):70–73.
YU Ying, YANG Tingting, YANG Boxiong. Performance evaluation and Python implementation of confusion matrix classification[J]. Modern Computer, 2021,20(5):70–73. (in Chinese)

[28] 汪传建,赵庆展,马永建,等.基于卷积神经网络的无人机遥感农作物分类[J].农业机械学报,2019,50(11):161–168.
WANG Chuanjian, ZHAO Qingzhan, MA Yongjian, et al. Crop identification of drone remote sensing based on convolutional neural network[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2019, 50(11):161–168. (in Chinese)

[29] 葛芸,马琳,叶发茂,等.基于多尺度池化和范数注意力机制的遥感图像检索[J].电子与信息学报,2022,44(2):543–551.
GE Yun, MA Lin, YE Famao, et al. Remote sensing image retrieval based on multi-scale pooling and norm attention mechanism[J]. Journal of Electronics & Information Technology, 2022,44(2):543–551. (in Chinese)

[30] 黄冬梅,王玥琦,胡安铎,等.融合多维度特征的绝缘子状态边缘识别方法[J].中国电力,2022,55(1):133–141.
HUANG Dongmei, WANG Yueqi, HU Anduo, et al. An edge recognition method for insulator state based on multi-dimension feature fusion[J]. Electric Power, 2022,55(1): 133–141. (in Chinese)

[31] BANAN A, NASIRI A, TAHERI-GARAVAND A. Deep learning-based appearance features extraction for automated carp species identification[J]. Aquacultural Engineering, 2020,89:134–139.