

基于近红外光谱法快速评价功能香基质量稳定性研究

杨季朋¹, 赵俊俊², 冯剑³, 文卓³, 巩笑楠³, 张峻松², 李瑞丽^{*2}

(1.河南中烟工业有限责任公司 黄金叶生产制造中心,河南 郑州 450000;

2.郑州轻工业大学 烟草科学与工程学院,河南 郑州 450001;

3.河南金瑞香精香料有限公司,河南 郑州 450000)

摘要:为提高功能香基质量稳定性评价的时效性,基于近红外光谱数据建立功能香基的质量稳定性监控模型,并对监控模型的预测性能进行检验。结果表明:(1)利用方差光谱法优选出一阶导数和 Norris 平滑为功能香基 GNA 近红外光谱预处理方法;4 000~4 296、4 443~5 098、5 268~7 247 cm^{-1} 为近红外特征光谱范围,经预处理后光谱信噪比增强。(2)功能香基 GNA 各合格样品与标准品的欧氏距离、全成分斜率相似度指标值分别服从正态分布 $N(0.755, 0.114)$ 、 $N(0.921, 0.001)$ 。(3)根据 3σ 控制原则,建立基于欧氏距离、全成分斜率相似度的近红外监控模型,监控模型对未知样品的判别结果与实际结果一致,对稀释、掺杂等不良样品的识别准确率达到 100%。(4)相比较而言,全成分斜率相似度评价指标对稀释程度和掺杂比例的反映更加灵敏。基于近红外光谱的功能香基质量稳定性监控模型能够快速、准确地判别合格样品及稀释或掺杂的不良样品,适于大批量香基样品的快速监测。

关键词:功能香基;近红外光谱;相似度评价;质量稳定性;快速识别

中图分类号:TQ657 **文献标识码:**A **文章编号:**0258-3283(2024)08-0072-06

DOI:10.13822/j.cnki.hxsj.2024.0037

Study on Rapid Evaluation of Quality Stability of Functional Fragrance Base by Near Infrared Spectroscopy YANG Jipeng¹, ZHAO Jun-jun², FENG Jian³, WEN Zhuo³, GONG Xiao-nan³, ZHANG Jun-song², LI Rui-li^{*2} (1. Golden Leaf Production and Manufacturing Center, China Tobacco Henan Industry Co., Ltd., Zhengzhou 450000, China; 2. College of Tobacco Science and Engineering, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou 450001, China; 3. Henan Jinrui Flavoring and Essence Co., Ltd., Zhengzhou 450000, China)

Abstract: In order to improve the timeliness of the quality stability evaluation of functional fragrance base, a quality stability monitoring model of functional fragrance base was established based on near-infrared (NIR) spectral data, and the predictive performance of the monitoring model was examined. The results showed that: (1) The first derivative and Norris smoothing were optimized by variance spectroscopy as the NIR spectral pretreatment method for functional GNA; 4 000~4 296 cm^{-1} , 4 443~5 098 cm^{-1} and 5 268~7 247 cm^{-1} were the characteristic spectral ranges of NIR, and the spectral signal-to-noise ratio was enhanced after pretreatment. (2) The euclidean distance and full-component slope similarity index values of each qualified sample of functional fragrance base GNA and the standard obeyed the normal distribution $N(0.755, 0.114)$ and $N(0.921, 0.001)$, respectively. (3) According to the 3σ control principle, the NIR monitoring model based on euclidean distance and full-component slope similarity was established, and the discrimination results of the monitoring model on the unknown samples were consistent with that of the actual results, and the identification accuracy rates of dilute, doped and other undesirable samples were 100%. (4) In comparison, the similarity evaluation index of full-component slope value was more sensitive to dilution degree and doping ratio. The functional fragrance base quality stability monitoring model based on NIR spectroscopy can quickly and accurately discriminate qualified samples and diluted or adulterated defective samples, and is suitable for rapid monitoring of large quantities of functional fragrance base samples.

Key words: functional fragrance base; near infrared spectroscopy; similarity evaluation; quality stability; fast recognition

烟用香精是一类重要的烟草添加剂,在赋予卷烟风格特征、改善卷烟抽吸品质方面具有独特

作用^[1],但其化学成分具有多样性、复杂性及不确定性,易引起香精香料质量的波动,进而直接影

收稿日期:2024-01-15;网络首发日期:2024-05-15

基金项目:河南中烟工业有限责任公司科技项目(AW2022014)。

作者简介:杨季朋(1990-),男,河南郑州人,硕士,工程师,主要研究方向为香精香料质量控制研究。

通讯作者:李瑞丽, E-mail: lily03091@126.com。

引用本文:杨季朋,赵俊俊,冯剑,等.基于近红外光谱法快速评价功能香基质量稳定性研究[J].化学试剂,2024,46(8):72-77。

响卷烟产品质量和风格特征的稳定性。传统的香精香料质量检测方法通常是通过折光指数、相对密度、酸度值、挥发性成分总量等理化指标及嗅香和感官指标进行综合评价^[2,3],该方法只能反映样品的某些特性,难以准确地反映烟用香精香料的质量波动。目前,指纹图谱法也是分析烟用香精香料质量稳定性的热点^[4-8],但色谱分析技术大都需要经过复杂的前处理,这使得整个检测过程更加复杂、耗时,难以满足香精质量稳定性评价的时效性需求。

近红外光谱技术蕴含丰富的组成和结构信息,能够反映样品组分整体变化,以快速、高效、无损、绿色等突出优势,被广泛应用于食品、中草药、石油、茶叶、烟草等产地鉴别、质量控制、掺假鉴别等方面^[9-16]。相关系数、夹角余弦、欧氏距离等是评价两个变量之间相似性的重要方法^[17,18],全成分斜率相似度作为一种新的相似性计算方法,最先应用到中药复方制剂的相似度评价中,有很好的识别作用和可行性^[19]。因此,利用近红外光谱信息丰富、时效性强的优势,结合相似性度量指标灵敏性,建立功能香基质量稳定性监控模型,为提升功能香基质量稳定性监测的时效性和准确性提供新思路。

1 实验部分

1.1 主要仪器与试剂

Antaris II 型傅里叶变换近红外光谱仪(美国 Thermo Fisher Scientific 公司);G-102 型比色皿(宜兴晶科光学仪器有限公司);PL203 型电子天平(梅特勒-托利多仪器(上海)有限公司)。

功能香基 GNA,随机抽取 80 个合格样品,涵盖批次间和批次内样品,功能香基 GNA-标准品、功能香基 GNB、功能香基 GNC、天然香料 TRD、天然香料 TRE 样品,均由河南中烟工业有限责任公司提供。以功能香基合格样品为基础,自制稀释样品和掺杂样品共 18 个。

1.2 实验方法

1.2.1 近红外光谱采集

近红外光谱仪开机预热 30 min 后,按仪器操作规程进行准直校验,待仪器状态稳定后,取适量呈均相液态的功能香基样品装入 2 mm 光程的低羟基石英玻璃比色皿中,利用透射采样系统采集样品 NIR 光谱信息。样品 NIR 光谱信息采集条件:扫描范围:10 000 ~ 4 000 cm⁻¹,分辨率:

8 cm⁻¹,扫描次数:64 次,每个样品重复装样采集 3 次,取平均值作为该样品的 NIR 光谱数据。

1.2.2 近红外光谱预处理方法

采用标准正态变换(Standard Normal Variate, SNV)、一阶导数(First Derivative, 1FD)、Norris 平滑(Norris Derivative Filter)等方法对功能香基样品的 NIR 光谱进行预处理,以增强或凸显光谱信号,减弱或消除光谱噪声,提高光谱信噪比。

1.2.3 近红外光谱特征波长选择

特征波长选择可去除噪音和干扰信息,基于特征波长的光谱区域构建模型会更稳健。方差光谱能反映不同波长点的离散程度,不同样品的方差光谱越大的谱段,说明光谱特征信息越强;同一样品的方差光谱越小,说明光谱稳定性和可重复性越好。每个波长点吸光度的标准偏差为:

$$SS_j = \sqrt{\left[1/(n-1)\right] \sum_{i=1}^n (X_{ji} - \bar{X}_j)^2} \quad (1)$$

其中,SS_j 为方差光谱第 j 个波长点的值,n 为光谱条数,X_{ji} 为第 i 条光谱第 j 个波长点的吸光度; $\bar{X}_j$ 为 n 条光谱第 j 个波长点的吸光度均值。

1.2.4 光谱相似性评价方法

Pearson 相关系数法^[20]、夹角余弦法^[21]及距离系数法^[22]是常用于比较两个样本相似度的经典方法。全成分斜率相似度包含全成分、斜率、大小峰权值 3 个重要信息,不仅可以比较趋势变化,更能够反映样品浓度变化,是一种新的相似度计算方法^[19]。两个样本间的 Pearson 相关系数、夹角余弦值、全成分斜率越接近于 1,则说明相似度越高;越接近于 0,则相似度越低。两个样本间的距离越小,则相似度越高;反之,距离越大,则说明两个样本相似度越低。假设两个样本点 X 和 Y 在 n 个属性上的值分别为 X_i(i=1,2,⋯,n)和 Y_i(i=1,2,⋯,n)。则两个样本点之间的 Pearson 相关系数、夹角余弦、欧氏距离及全成分斜率相似度可通过式(2)~(5)计算,并通过相关系数、夹角余弦、欧氏距离及全成分斜率相似度指标值的大小评价两个样本间的相似度。

$$R = \text{Cov}(X, Y) / \sqrt{\text{Var}[X] \text{Var}[Y]} \quad (2)$$

$$\text{Cos} = \left(\sum_{i=1}^n X_i Y_i \right) / \sqrt{\left(\sum_{i=1}^n X_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n Y_i^2 \right)} \quad (3)$$

$$ED(X, Y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2} \quad (4)$$

$$F_{CS} = 1 - \left| \sum_{i=1}^n \left[\left(|X_i - X_{i+1}| - |Y_i - Y_{i+1}| \right) / \sqrt{|X_i - X_{i+1}| + |Y_i - Y_{i+1}|} \right] \right|$$

$$\sqrt{n \left(\sum_{i=1}^n |X_i - X_{i+1}| + \sum_{i=1}^n |Y_i - Y_{i+1}| \right)} \quad (5)$$

其中, $\text{Cov}(X, Y)$ 表示两个样本的协方差, $\text{Var}[X]$ 表示样本 X 的方差, $\text{Var}[Y]$ 表示样本 Y 的方差。

1.2.5 相似性指标控制阈值

基于统计分析的 3σ 原则, 确定功能香基品质控制的阈值。针对相关系数、夹角余弦、全成分斜率等相似性指标, 以均值与 2σ 的差值作为预警下限, 以均值与 3σ 差值作为控制下限, 相似性指标值低于控制下限则认为样品不合格, 低于预警下限高于控制下限则提示需重点关注, 需及时纠偏。基于相似度越高则品质越稳定的原则, 用于品控的这些相似性指标值不设上限。针对距离相似性指标, 以均值与 2σ 的和作为预警上限, 以均值与 3σ 的和作为控制上限, 距离指标值高于控制上限则认为样品不合格, 高于预警上限低于控制上限则提示需重点关注, 基于距离越近则品质越稳定的原则, 用于品控的距离指标值不设下限。

1.2.6 功能香基质量稳定性监控模型构建与检验

以不同批次合格样品为校正集, 优选相似性评价指标, 确定相似性指标控制限、预警限, 构建功能香基质量稳定性监控模型。以稀释、掺杂等不合格的干扰样品为验证集, 检验监控模型的判别准确率, 为功能香基质量稳定性可视化评价提供基础支撑。

1.2.7 嗅香评价方法

香气评定参照行业标准方法 YC/T 145.6—1998^[3], 组织专业人员评价功能香基样品和标准样品香气质量的相似度, 涵盖香型、香气浓淡、强弱、持久性、杂气等指标。

1.2.8 数据处理

利用 TQ Analyst 光谱处理软件对近红外光谱信息进行预处理, 通过 SPSS 27 和 Excel 软件对数据进行统计分析, 采用 Origin 软件进行绘图。

2 结果与讨论

2.1 光谱预处理方法

原始光谱和经标准正态变换 (Standard Normal Variate, SNV)、一阶导、SNV+一阶导、一阶导+Norris 平滑预处理后光谱的方差光谱见图 1。由图 1 可知, 经预处理后, 同一样品的方差光谱在各波数点明显低于原始光谱, 说明经预处理后光

谱数据的无关信息和噪声减少或消除, 光谱一致性增强, 光谱信噪比提高。原始光谱和经不同方法预处理光谱的方差光谱均值统计结果见表 1。由表 1 可知, 经一阶导+Norris 平滑处理后的方差光谱相对最小, 因此, 选用一阶导+Norris 平滑作为功能香基光谱预处理的方法。

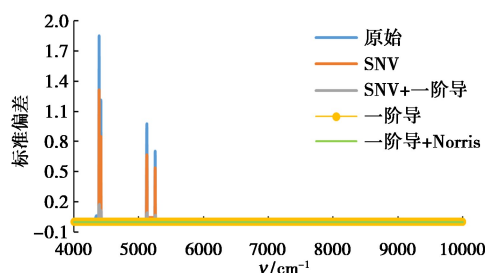


图 1 同一功能香基样品经不同方法预处理的方差光谱图

Fig.1 Variance spectra of the same functional fragrance base sample pretreated by different methods

表 1 同一功能香基样品经不同方法预处理的方差光谱均值

Tab.1 Means of variance spectra of the same functional fragrance base sample pretreated by different methods

指标	方差均值
原始光谱	8.66E-03
SNV	6.68E-03
SNV+一阶导	7.19E-04
一阶导	8.17E-20
一阶导+Norris	6.73E-20

2.2 光谱特征波长范围

相同功能香基样品近红外光谱的方差光谱见图 2。由图 2 可知, 相同样品近红外光谱在 4 300~4 440、5 100~5 150、5 245~5 265 cm^{-1} 光谱范围内的波动较大, 说明这些谱段光谱信息的可重复性较差, 干扰信息较强, 为保证模型的预测性能, 这 3 个波段的光谱信息不参与建模。不同功能香基样品近红外光谱的方差光谱见图 3。由图 3 可

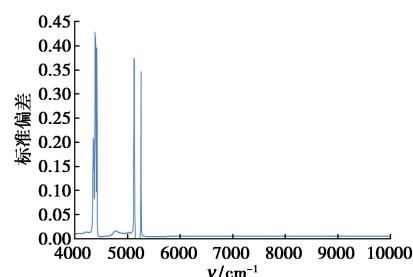


图 2 相同功能香基样品的方差光谱图

Fig.2 Variance spectra of the same functional fragrance base samples

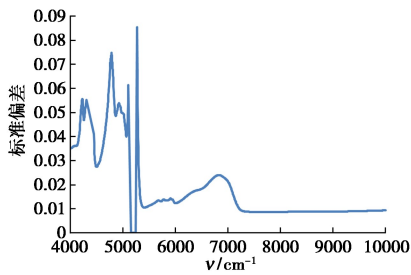


图 3 不同功能香基样品的方差光谱图
Fig.3 Variance spectra of different functional fragrance base samples

知,在 7 250~10 000 cm^{-1} 光谱范围内标准偏差相对较小,说明此谱段内信号较弱;不同样品近红外光谱在 5 150~5 250 cm^{-1} 光谱范围内各波数点的吸光度值标准偏差几乎为零,说明此谱段内没有信号,只有噪声。综合考虑,剔除干扰性较强、信号较弱或零信号的光谱谱段,保留 4 000~4 296、4 443~5 098、5 268~7 247 cm^{-1} 作为功能香基 GNA 的特征光谱。

2.3 光谱相似性评价

基于经预处理后的特征光谱范围内的近红外光谱数据,计算功能香基 GNA 各合格样品与标准品的相似度,相似性评价指标值统计结果及单样本 Kolmogorov-Smirnov 检验见表 2。由表 2 可知,不同合格样品与标准样品的相关系数、夹角余弦指标数据分布非常集中,且不服从正态分布 ($P < 0.05$)。不同合格样品与标准样品的欧氏距离、全成分斜率相似度指标值相对较为分散,且均服从正态分布 ($N(0.755, 0.114)$ 、 $N(0.921, 0.001)$)。

表 2 相似性评价指标统计结果及单样本 Kolmogorov-Smirnov 正态检验

Tab.2 Statistical results of similarity evaluation index and Kolmogorov-Smirnov normal test of single sample

指标	R	Cos	ED	F_{CS}
均值	0.999 64	0.999 92	0.754 67	0.920 76
中值	0.999 80	0.999 95	0.721 91	0.926 16
标准差	0.000 39	0.000 08	0.337 19	0.030 98
极小值	0.998 31	0.999 67	0.118 99	0.831 44
极大值	0.999 99	1.000 00	1.656 12	0.969 97
K-S	1.797	1.786	0.727	0.947
P	0.003	0.003	0.665	0.332

2.4 功能香基质量稳定性的 NIR 监控模型构建

质量特性指标服从正态分布是适用 3σ 控制原则的前提条件。因此,选择欧氏距离、全成分斜率相似度作为构建功能香基质量稳定性近红外模

型的特征变量。根据 3σ 控制原则,由相似性指标值统计结果(表 2)可知,基于欧氏距离的近红外监控模型(图 4)的中心线为 0.755,控制上限为 1.766,预警上限为 1.429;由于距离越接近于 0,则样品与标准样品越接近,所以欧氏距离不设控制/预警下限。超出控制上限则判定为样品不合格;对于在控制限内但超出预警限的样品,虽判为合格,但需追溯过程,进一步提升质量水平。由图 4 可知,80 个不同批次的功能香基合格样品中,29#样品与标准样品之间的差异较大,接近控制限,其他样品的差异程度相对较小,基本均在警戒限内。基于欧氏距离的近红外监控模型对合格样品的判别结果均与实际结果一致。

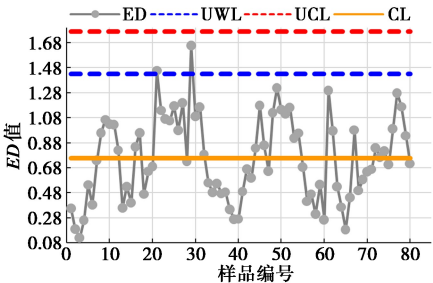


图 4 基于欧氏距离的功能香基质量稳定性近红外模型判别结果

Fig.4 Near-infrared discriminative model for mass stability of functional fragrance bases based on Euclidean distance

基于全成分斜率相似度的近红外监控模型(图 5)的中心线为 0.921,控制下限为 0.859,预警下限为 0.828;同样地,由于全成分斜率相似度越接近于 1.0,则样品与标准样品越接近,所以全成分斜率相似度不设控制/预警上限。超出控制下限则判定为样品不合格;对于在控制限内但超出预警限的样品,虽判为合格,但需重点关注。由

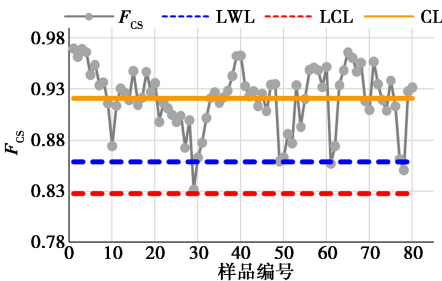


图 5 基于全成分斜率相似度的功能香基质量稳定性近红外模型判别结果

Fig.5 Near-infrared discriminative model for mass stability of functional fragrance bases based on full component slope method

图 5 可知,80 个不同批次的功能香基样品与标准样品之间的差异随机波动且均在允差范围内,29[#]样品与标准样品差异较大,接近警戒限。基于全成分斜率相似度的近红外监控模型对合格样品零误判。这与基于距离的近红外监控模型判别结果一致。

2.5 功能香基质量稳定性 NIR 监控模型的检验

采集不同批次合格样品、稀释和掺杂样品的近红外光谱,各样品与标准样品的光谱相似性及嗅香感官评价结果见表 3。由表 3 可知,功能香基 GNA 不同批次合格样品与标准样品之间的欧氏距离均在 1.0 以下,全成分斜率相似度均在 0.9 以上,均小于监控模型的预警限,说明功能香基 GNA 不同批次合格样品与标准样品的相似度高,质量稳定性好。

表 3 合格、稀释、掺杂样品对 NIR 监控模型的检验结果
Tab.3 Test results of qualified, diluted and doped samples for NIR monitoring model

样品编号	添加物质	添加比例	ED	F _{CS}	嗅香评价
GNA-1	—	—	0.786	0.902	无差异
GNA-2	—	—	0.559	0.921	无差异
GNA-3	—	—	0.484	0.927	无差异
GNA-4	—	—	0.552	0.917	无差异
GNA-5	—	—	0.473	0.922	无差异
GNA-6	—	—	0.485	0.929	无差异
GNA-7	—	—	0.348	0.943	无差异
GNA-8	—	—	0.269	0.962	无差异
GNA-X1	乙醇	1%	18.976	0.747	无差异
GNA-X2	乙醇	3%	18.410	0.720	无差异
GNA-X3	乙醇	5%	19.055	0.717	微小差异
GNA-X4	乙醇	10%	17.765	0.656	略有差异
GNA-X5	乙醇	15%	16.395	0.572	有差异
GNA-X6	乙醇	20%	16.910	0.505	有差异
GNA-B1	GNB	2%	20.313	0.797	无差异
GNA-B2	GNB	5%	19.395	0.751	无差异
GNA-B3	GNB	10%	18.535	0.735	微小差异
GNA-C1	GNC	2%	18.177	0.791	无差异
GNA-C2	GNC	5%	21.390	0.691	微小差异
GNA-C3	GNC	10%	20.165	0.721	微小差异
GNA-D1	TRD	2%	20.442	0.730	无差异
GNA-D2	TRD	5%	19.367	0.719	微小差异
GNA-D3	TRD	10%	18.949	0.596	略有差异
GNA-E1	TRE	2%	19.700	0.819	无差异
GNA-E2	TRE	5%	18.601	0.787	微小差异
GNA-E3	TRE	10%	19.848	0.742	微小差异

稀释、掺杂样品与标准样品的欧氏距离均远超控制限(1.766),欧氏距离法监控模型对稀释、

掺杂等不合格样品的识别准确率达到 100%。稀释、掺杂样品与标准样品的全成分斜率相似度均低于控制限(0.859),全成分斜率相似度监控模型对稀释、掺杂等不合格样品的识别准确率达到 100%,基于欧氏距离法、全成分斜率相似度的监控模型均没有出现“拒真”或“取伪”的错判现象。

当稀释程度及掺杂比例较小时,嗅香感官评价结果不明显,无法准确识别样品间的差异。欧氏距离值对样品稀释及掺杂程度的反映并不敏感,没有随着样品稀释程度和掺杂比例的增加呈现逐渐增大的变化趋势。所有稀释样品全成分斜率相似度随样品稀释程度的增加呈现逐渐减小的变化趋势,掺杂样品 GNA-B、GNA-D、GNA-E 全成分斜率相似度依次减小,与未稀释掺杂样品的相似度(0.9 左右)有了较为明显的区别,即呈现出与标准样品的相似度逐渐变差的趋势。总而言之,与欧氏距离值相比,全成分斜率相似度评价方法更加灵敏,能更好地反映样品浓度的微小变化,适于评价功能香基 GNA 样品的质量波动。

3 结论

利用方差光谱法优选功能香基 GNA 近红外光谱预处理方法为一阶导数和 Norris 平滑;功能香基 GNA 的近红外特征光谱为 4 000~4 296、4 443~5 098、5 268~7 247 cm⁻¹。功能香基 GNA 各合格样品与标准品经预处理后的特征光谱范围内近红外光谱的相关系数、夹角余弦指标数据不服从正态分布($P<0.05$),欧氏距离、全成分斜率相似度指标值分别服从正态分布 $N(0.755, 0.114)$ 、 $N(0.921, 0.001)$ 。根据 3σ 控制原则,建立基于欧氏距离、全成分斜率相似度的近红外监控模型,自制干扰样品检验近红外监控模型预测性能,基于欧氏距离、全成分斜率相似度的近红外监控模型对香基样品的判别结果均与实际结果一致,“拒真”或“取伪”的错判率为零,对稀释、掺杂等不良样品的识别准确率达到 100%。相比较而言,全成分斜率相似度评价指标对稀释程度和掺杂比例的反映更加灵敏,适于功能香基 GNA 样品的质量稳定性评价。

参考文献:

- [1] 蔡洁云,李伟雪,顾丽莉,等.烟用香精香料来源与应用研究进展[J].现代化工,2023,43(S1):66-70.
- [2] 国家烟草专卖局.烟用香精:YC/T 164—2012[S].北

- 京:中国标准出版社,2012.
- [3] 国家烟草专卖局.烟用香精 香气质量通用评定方法:YC/T 145.6—1998[S].北京:中国标准出版社,1998.
- [4] 汤晓东,蒋佳磊,苏燕,等.硫酸-甲醇衍生化-GC-MS 指纹图谱在烟用液质量控制中的应用[J].烟草科技,2023,**56**(7):66-73;83.
- [5] 蒋成勇,杜国荣,王丽达,等.GC-MS/MS 法结合多元统计过程控制应用于烟用香精的质量监控[J].烟草科技,2019,**52**(8):44-51.
- [6] 刘秀明,王艳芳,李超,等.GC-MS 指纹图谱结合多元统计方法用于香精质量差异分析[J].中国测试,2018,**44**(6):42-47.
- [7] 邓宇,田耀伟,朱春晖,等.基于 HPLC-DAD 的多波长指纹图谱构建及其在烟用香精质量评价中的应用[J].烟草科技,2023,**56**(7):48-56.
- [8] 袁洁,朱亚雯,屯妮萨古丽·艾买提江,等.管花肉苁蓉饮片主要苯乙醇苷近红外快检技术的建立及应用[J].分析实验室,2023,**42**(6):767-774.
- [9] 陈瀑,戴嘉伟,李敬岩,等.近红外光谱分析中的化学计量学方法进展[J].化学试剂,2023,**45**(6):105-112.
- [10] LI Z M, SONG J H, MA Y X, et al. Identification of aged-rice adulteration based on near-infrared spectroscopy combined with partial least squares regression and characteristic wavelength variables[J].*Food Chem.*; X, 2023,**17**:100-539.
- [11] HOU Y Z, LIAN Y L, WU H G, et al. Quality control of *Notopterygii rhizoma et radix* using near infrared spectroscopy and chemometrics [J]. *Vib. Spectrosc.*, 2020, **111**:103-181.
- [12] 褚小立,陈瀑,许育鹏,等.化学计量学方法在石油分析中的研究与应用进展[J].石油学报(石油加工), 2017,**33**(6):1 029-1 038.
- [13] 王淑贤,肖航,杨振发,等.香精掺假普洱茶的近红外光谱检测[J].激光与光电子学进展,2020,**57**(23):392-397.
- [14] 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.
- [15] 胡子康,刘庭恺,饶艳敏,等.近红外光谱结合化学计量学的掺伪杜仲判别[J].化学试剂,2023,**45**(10):1-7.
- [16] 王巧,熊丰,王游游,等.红外光谱结合化学计量学鉴别西红花的产地[J].化学试剂,2023,**45**(3):112-119.
- [17] 叶亚军,李力群,纪旭东,等.基于 FT-NIR 技术的烟用香精香料品质控制技术研究[J].香料香精化妆品,2019,(5):6-12;20.
- [18] 郑健,邓发达,张晰祥,等.近红外光谱技术在烟用香精招标质量评价中的应用[J].烟草科技,2023,**56**(5):68-76.
- [19] 李世雄,张喜利,刘文龙,等.一种中药指纹图谱的定性定量研究新方法:全成分斜率相似度比较方法[J].时珍国医国药,2021,**32**(12):3 064-3 066.
- [20] 田润涛,谢培山.色谱指纹图谱相似度评价方法的规范化研究(一)[J].中药新药与临床药理,2006,(1):40-42;54.
- [21] 高铭遥,李翔宇,陈欢,等.基于香精香料指纹图谱的相似度评价进展[J].质量安全与检验检测,2023,**33**(2):32-41.
- [22] 戴元丰,代作晓,郭光智,等.不同产地稻米的二维相关近红外光谱鉴别[J].中国食品学报,2023,**23**(9):331-338.