合肥研究院发展新算法可有效改善近红外模型在仪器间的转移效果

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8646.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院合肥物质科学研究院技术生物与农业工程研究所研究员吴跃进课题组发展了一种近红外光谱技术方向的新算法，该算法可有效改善近红外模型在仪器间的转移效果。相关工作已被光谱学期刊*Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*接收并在线发表。

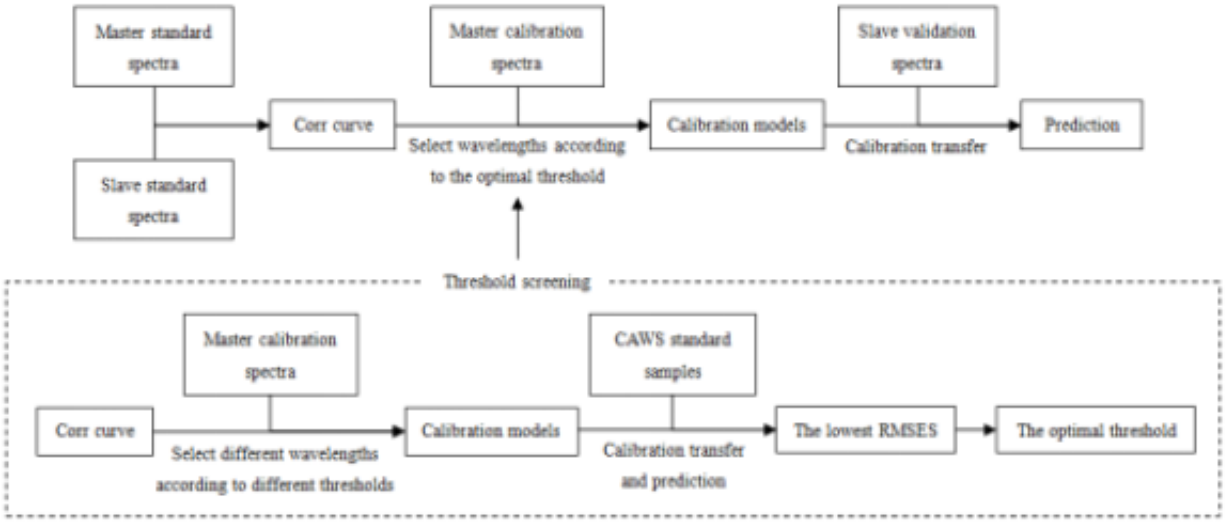
近红外光谱技术由于快速环保、不损伤样品和同时检测多组分的优点，大量应用于各个行业的产品品质分析中。优化构建适合的模型十分重要，然而，当检测条件发生改变时，分析模型可能会失效，导致结果偏差甚至可能无法使用，上述问题限制了近红外光谱技术的推广应用。因而需要依靠系统的校正方法修正这些误差，使得模型在新的条件下同样适用，避免建模重新，即所谓模型转移。

传统的模型转移过程聚焦于用更准确、更复杂的算法描述检测条件变化前后整组光谱信号间的关系。然而，整组光谱中只有一部分是有效的，而其余部分会对转移的结果造成干扰。因此，合理的波段选择对于模型转移十分重要，这些波段需要在检测条件改变前后具有一致的响应，同时还包含有效的待测组分信息。

课题组科研人员提出了一种基于相关分析的波长选择方法（CAWS），旨在选择最适合模型转移的光谱波段。他们通过设计一系列系统方法，使得所选择的波段具有高的仪器间相关性，并保证在提高这种相关性的同时，光谱中仍然具有足够待测组分相关的信息。课题组以一组玉米公开数据集和一组米糠真实数据集为例，并与多种其他算法进行了对比，验证了方法的优越性。该研究改善了近红外光谱模型转移结果适应性，对于技术的推广应用打下基础。

该工作得到安徽省科技重大专项、中科院战略性先导科技专项、中科院科技服务网络计划（STS计划）以及安徽省重点研究与开发计划等项目的支持。

论文链接



采用CAWS优化模型转移的流程图

研究团队单位：合肥物质科学研究院

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发