

近红外光谱技术用于酱香型白酒基酒关键成分的快速定量分析

王凡^{1,2}, 张文娟¹, 李国辉^{1,2*}, 卢君^{1,2*}, 李长文^{1,2}, 曾影¹, 王勇¹, 吴勇¹, 李军¹

(1. 贵州国台数智酒业集团股份有限公司, 贵州仁怀 564501) (2. 贵州国台酒业集团研究院, 天津 300410)

摘要: 为实现酱香型白酒基酒关键指标的快速检测, 该研究以气相色谱法、滴定法为参考方法, 利用近红外光谱技术结合偏最小二乘算法建立了酱香型白酒中 7 种关键成分的分析模型。通过间隔偏最小二乘法筛选出各物质的特征波段, 并在 12 种单一或组合的方法中筛选出最优谱图处理方式。优化后的乙酸、丙酸、乙酸乙酯、乳酸乙酯、糠醛、乙酸异戊酯、总酸模型交叉验证决定系数 R^2_{val} 为 0.854 2~0.963 8, 交叉验证均方根误差 RMSECV 为 0.003 8~0.515 8; 外部验证预测标准偏差 SEP 为 0.002 8~0.478 5; RPD 为 2.41~6.43, 模型预测准确性与稳健性良好。该研究表明近红外方法可快速检测酱香型白酒基酒中乙酸、丙酸、乙酸乙酯、乳酸乙酯、糠醛、乙酸异戊酯、总酸含量, 极大提升检测效率, 实现生产过程中的快速反馈, 并为在线近红外光谱技术在智能酿造中的应用提供了方法基础。

关键词: 酱香型白酒基酒; 近红外光谱; 化学计量学; 快速检测; 偏最小二乘

文章编号: 1673-9078(2026)2-322-330

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2026.2.1673

Rapid Quantitative Analysis of Key Components of Jiang-flavor Baijiu Base Liquor using Near Infrared Spectroscopy

WANG Fan^{1,2}, ZHANG Wenjuan¹, LI Guohui^{1,2*}, LU Jun^{1,2*}, LI Changwen^{1,2},

ZENG Ying¹, WANG Yong¹, WU Yong¹, LI Jun¹

(1. Guizhou Guotai Liquor Co. Ltd., Renhuai 564501, China)

(2. Guizhou Guotai Liquor Research Institute, Tianjin 300410, China)

Abstract: To achieve the rapid detection of key indicators of Jiang-flavor Baijiu (Chinese spirit) base liquor, analytical models of seven key components in Jiang-flavor Baijiu were established using near infrared (NIR) spectroscopy combined with a partial least squares (PLS) algorithm, with gas chromatography and titration used as reference methods. Characteristic bands of various substances were screened by the interval partial least squares (iPLS) method, and the optimal spectral preprocessing method was determined from twelve individual or combined approaches. The coefficients of determination of cross-validation (R^2_{val}) of optimized models for acetic acid, propionic acid, ethyl acetate, ethyl lactate, furfural, isoamyl acetate, and total acid were in the range of 0.854 2~0.963 8, and the root mean square errors of cross-validation (RMSECV) were in the range of 0.003 8~0.515 8. The

引文格式:

王凡, 张文娟, 李国辉, 等. 近红外光谱技术用于酱香型白酒基酒关键成分的快速定量分析[J]. 现代食品科技, 2026, 42(2): 322-330.

WANG Fan, ZHANG Wenjuan, LI Guohui, et al. Rapid quantitative analysis of key components of Jiang-flavor Baijiu base liquor using near infrared spectroscopy [J]. Modern Food Science and Technology, 2026, 42(2): 322-330.

收稿日期: 2024-11-10; 修回日期: 2024-12-28; 接受日期: 2025-01-08

基金项目: 贵州省科技计划项目(黔科合成果[2023]一般149, 黔科合成果[2023]一般150); 贵州省工信厅发展专项资金科技创新项目(202209)

作者简介: 王凡(1989-), 女, 硕士, 高级工程师, 研究方向: 酒类发酵技术和质量控制, E-mail: wangfan534@tasly.com

通讯作者: 李国辉(1986-), 男, 博士, 教授级高级工程师, 研究方向: 酒类发酵技术和质量控制, E-mail: liguohui193@163.com; 共同通

讯作者: 卢君(1985-), 男, 博士, 教授级高级工程师, 研究方向: 酒类发酵技术和质量控制, E-mail: lujun951@tasly.com

standard errors of prediction (SEP) for external validation were in the range of 0.002 8~0.478 5, and residual predictive deviations (RPD) were in the range of 2.41~6.43, indicating good model prediction accuracy and robustness. In summary, NIR spectroscopy achieved rapid detection of the acetic acid, propionic acid, ethyl acetate, ethyl lactate, furfural, isoamyl acetate, and total acid contents in Jiang-flavor Baijiu base liquor, improving the detection efficiency considerably and enabling rapid feedback in the production process. The results of this study support the application of online NIR spectroscopy in intelligent brewing.

Key words: Jiang-flavor Baijiu base liquor; near infrared spectroscopy; chemometrics; rapid detection; partial least squares

酱香型白酒以红缨子糯高粱为原料,采用独特的“四高两长”(高温制曲、高温堆积、高温发酵、高温馏酒、生产周期长、储存时间长)酿造工艺,经两次投料、九次蒸煮、八次发酵、七次馏酒,分别储存、精心勾调而成的具有典型酱香型风格的蒸馏白酒。其一个生产周期的第三到第九次蒸煮所取的酒分别被称为一至七轮次基酒,基酒生产后会根据品质被分别储存,后续通过酒体设计,将不同轮次、不同等级、不同典型体的基酒进行科学合理的组合从而得到全新风格的酒^[1]。

酱香型白酒含有丰富的风味化合物,主要包括酯类、酸类、醇类、醛类、酮类等^[2,3]。酯类物质是白酒的主要呈香物质,为白酒提供果香、花香、甜香和奶香,并可调节人的情绪^[4];乙酸乙酯具有菠萝香^[5],乳酸乙酯具有甜香、果香,乙酸异戊酯具有香蕉气味,在优级酒中含量较高^[6]。酸类物质可有效降低白酒的辛辣感和苦味,增加白酒的甜味,对白酒口感具有重要影响^[7];总酸含量是评定大曲酱香基酒优级、一级、二级、三级的重要指标之一^[8],乙酸也是质量等级的重要指标化合物^[6],丙酸贡献蜡香^[5]。糠醛是高温大曲美拉德反应的产物,具有烘烤香、花生香气,是酱香型白酒的代表化合物,对于酱香型白酒风格的形成起着决定性的作用^[9]。这些物质影响白酒的感官特性,进而影响白酒的质量和价值^[10],因此在生产酿造过程中需要被监测和控制。但这些关键指标的传统检测方法通常包括酸碱滴定法、气相色谱法及其联用等^[11,12],存在操作繁琐复杂、耗时长等问题,难以快速反馈数据并及时指导生产。

近红外光谱技术具有分析速度快、效率高、测试方便、分析成本低、绿色环保等特点,随着化学计量学与计算机科学的发展,近红外检测已广泛应用于食品及农产品检验、酒类分析等领域^[13-15]。偏最小二乘(Partial Least Squares, PLS)是光谱多元校正分析中最为广泛的应用方法,其对光谱阵和浓度阵同时进行分解,并在分解时考虑两者相互之间关系,从而获取最佳模型^[16,17]。酱香型白酒多种关键成分在近红外光谱上均有响应,且生产过程中样本极多,特别适合以近

红外方法作为快速分析手段。然而,目前的研究多集中在单指标定量分析上,基于近红外光谱技术进行多指标同时定量的研究尚不充分,其系统性和全面性仍有待提升。

因此,该研究基于近红外光谱技术结合偏最小二乘算法,对酱香型白酒基酒中7种关键指标建立了快速定量方法,分析时间仅需10 min左右。与实验室常规检测方法相比,在满足测定准确度需求的前提下,极大地提升了检测的时效性和反馈生产的及时性。

1 材料与方法

1.1 样品与试剂

酱香型白酒一至七轮次基酒,2022~2023年度4个车间生产,每轮次112个,共784个,贵州国台酒业集团股份有限公司提供;无水乙醇(色谱纯),天津市康科德科技有限公司;乙酸、丙酸、乙酸乙酯、乳酸乙酯、糠醛、乙酸异戊酯、辛酸乙酯、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸标准物质(均为色谱纯),天津市光复精细化工研究所;氢氧化钠、酚酞(均为分析纯),国药集团化学试剂有限公司。

1.2 主要仪器设备

MPA II 傅里叶变换近红外光谱仪(配透射采样模块),德国布鲁克公司;Trace 1310 气相色谱仪(氢火焰离子化检测器),美国赛默飞公司;ME204T 分析天平,瑞士梅特勒-托利多公司;HP-FFAP 气相色谱柱(19095F-123)(柱长30 m,直径0.53 mm,膜厚1.0 μm),美国安捷伦公司。

1.3 检测方法

1.3.1 近红外光谱检测

将样品倒入1 mm 光程比色皿至2/3处,在波数12 500~3 950 cm^{-1} 范围扫描近红外光谱,样品温度40 $^{\circ}\text{C}$,分辨率4 cm^{-1} ,扫描次数32。每个样品检测3次取平均光谱,每隔20 min重新测量一次背景。测试环境温度20~30 $^{\circ}\text{C}$,湿度40%~50%。

1.3.2 关键指标含量检测

乙酸、丙酸、乙酸乙酯、乳酸乙酯、糠醛、乙酸异戊酯按照王丽等^[18]研究中的气相色谱法检测,总酸按照 GB/T12456-2021《食品中总酸的测定》中酸碱指示滴定法测定。

1.4 分析方法

1.4.1 样本检查与分组

采用 Hotelling T^2 检验检查光谱数据,剔除 99.9% 置信区间之外的样本点,将剩余样品点以 SPXY (Sample set Partitioning based on joint X-Y distance) 法按 4:1 划分为校正集与预测集。

1.4.2 模型建立

对校正集样本建立模型,以近红外光谱各波数上的吸光度值为自变量,以关键指标的含数据作为响应值,采用交叉验证方式建立 PLS 定量模型,考察各个主成分上的均方根误差,选取数值最低的均方根误差的主成分作为最佳主成分,在此主成分上建立模型,考察模型校正集 (Calibration Set) 决定系数 R^2_{Cal} 、交叉验证 (Cross-Validation) 决定系数 R^2_{Val} 、校正集均方根误差 (Root Mean Square Error of Calibration, RMSEC)、交叉验证均方根误差 (Root Mean Square Error of Cross-Validation, RMSECV)。 R^2_{Cal} 、 R^2_{Val} 越高越好, RMSEC、RMSECV 越低越好。

1.4.3 模型优化

1.4.3.1 波段选择

在近红外全波段数据上进行波段筛选,以消除不相关变量的影响,简化模型,提高稳定性和准确性。以间隔偏最小二乘法 (Interval PLS, iPLS) 对近红外波段进行筛选,将全波段分为 25 个子区间,选择 RMSECV 低于全波段的区间作为特征波段用以建模。

1.4.3.2 谱图处理

对近红外数据进行谱图预处理以改善杂散光、仪器噪音、基线漂移等因素的影响,提高谱图质量,提升建模效果。因此,在原始谱图 (Raw Spectra, RS) 上以移动平均平滑 (Moving Average) 减少光谱噪音;以一阶导数 (First Derivative, FD)、二阶导数 (Second Derivative, SD) 分别消除光谱中基线的平移和漂移,消除背景干扰,分辨重叠峰,提高分辨率和灵敏度;以单位矢量归一化 (Unit Vector Normalization, UVN) 消除样品变化带来的随机噪音;以标准正态变量校正 (Standard Normal Variate Correction, SNV) 消除样本表面散射的影响;以多元散射校正 (Multiplicative Scatter Correction, MSC) 消除线性散射影响;以去趋势校正

(Detrend) 消除光谱中的基线漂移,消除不同样品和批次对 NIR 谱图的影响;以基线校正 (Baseline)、降低分辨率 (Deresolve)、光谱转换 (Spectroscopic) 等方法及其组合对光谱数据进行预处理^[19,20]。考察各种处理方式下的模型效果,将 R^2_{Val} 最高、RMSECV 最低的谱图处理方式确定为最优处理方式。

1.4.4 模型验证

以优化后模型预测验证集样本关键指标含量,并与参考方法所测数据相比对,考察预测集相关系数 R 、预测标准偏差 (Standard Error of Prediction, SEP) 以及 RPD (Ratio of Standard Error of Prediction to Standard Deviation),并对预测值与参考值进行配对 t 检验。

1.5 数据处理

应用 OPUS 8.7 对近红外光谱进行数据采集,使用 Origin 2019b 进行光谱图绘制,运用 The Unscrambler 10.4 进行谱图处理与模型建立,采用 matlab 2023a 进行波段筛选,利用 IBM SPSS Statistics 26 进行配对 t 检验。

2 结果与讨论

2.1 近红外光谱

近红外谱区主要体现白酒成分中 O-H、N-H、C-H 等含氢基团的倍频和合频吸收^[21]近红外光谱如图 1。从图 1 可以看出,样品在近红外区域有明显的吸收峰,由于基酒组分含量不同,造成了吸收峰的强度和面积也不尽相同,这为近红外定量提供了依据。但白酒主要成分为水和乙醇 (占 98% 以上),这使得不同样品的近红外光谱极其相似,6 865、5 173 cm^{-1} 附近是水的特征吸收区域,为水分子 O-H 的伸缩振动;5 882、4 337 cm^{-1} 附近是乙醇的特征吸收区域,5 917~5 617 cm^{-1} 是 C-H 一级倍频的伸缩振动以及 O-H 弯曲振动,4 405~4 225 cm^{-1} 是 C-H 和 O-H 的弯曲振动和伸缩振动^[22]。风味物质含量少但成分极多且复杂,加之近红外光谱信号弱,峰重叠严重,因此进一步借助化学计量学手段挖掘成分含量信息,建立定量模型。

2.2 数据检查与分组

2.2.1 异常样本检查

异常值 (Outliers) 的判别和处理是提高近红外分析质量的重要步骤。环境或仪器自身不稳定等因素可能会引起光谱异常,进而导致模型的预测准确性与稳健性降低。异常样品光谱与全部样品的平均光谱

表 2 不同波段下基酒关键指标定量模型
Table 2 Quantitative models of key indicators of base liquor at different wavelengths

	指标	波数/cm ⁻¹	变量数	主因子数	R^2_{Cal}	RMSEC	R^2_{Val}	RMSECV
1	乙酸	12 500~3 950	6 000	8	0.953 3	0.282 3	0.950 3	0.291 8
		6 001~5 659, 4 633~4 291	482	8	0.966 0	0.240 7	0.962 2	0.254 6
2	丙酸	12 500~3 950	6 000	5	0.927 0	0.017 7	0.923 9	0.018 1
		6 001~5 317	481	4	0.933 4	0.016 9	0.932 2	0.017 1
3	乙酸乙酯	12 500~3 950	6 000	12	0.912 7	0.587 8	0.900 4	0.629 4
		6 343~5 659, 4 975~4 291	962	10	0.922 0	0.555 7	0.917 3	0.573 3
4	乳酸乙酯	12 500~3 950	6 000	10	0.947 9	0.366 6	0.942 2	0.386 6
		6 001~5 659	241	7	0.962 3	0.311 9	0.961 0	0.317 8
5	糠醛	12 500~3 950	6 000	19	0.917 9	0.029 3	0.855 1	0.039 0
		6 343~6 001, 4 633~4 291	482	11	0.949 1	0.023 1	0.943 6	0.024 3
6	乙酸异戊酯	12 500~3 950	6 000	8	0.852 3	0.003 8	0.841 4	0.003 9
		6 001~5 659	241	6	0.855 1	0.003 7	0.847 0	0.003 9
7	总酸	12 500~3 950	6 000	5	0.942 4	0.307 5	0.941 6	0.310 4
		6 343~5 317, 4 633~4 291	962	6	0.956 5	0.267 1	0.953 6	0.276 2

2.3.2 谱图处理

建立 PLS 定量模型时，对近红外光谱数据进行预处理或可提升模型性能，合适的预处理方法可有效过滤近红外光谱中的噪声信息，保留有效信息，从而降低近红外定量模型的复杂度，提高近红外模型的稳健性^[23]。因此，对近红外数据进行预处理，后在筛选出的特征波段上建立 PLS 定量模型，不同预处理方式下的模型 R^2_{Val} 与 RMSECV 见图 3， R^2_{Val} 与预测准确性正相关，而 RMSECV 则与预测准确性负相关。结果表明，各指标 R^2_{Val} 最高的谱图处理方式，乙酸为“MovingAverage”，丙酸、糠醛为“Spectroscopic”，乙酸乙酯为“Deresolve+Spectroscopic”，乳酸乙酯为“FD”，乙酸异戊酯为“Detrend”，总酸为不处理。经波段筛选及谱图处理两步优化后，乙酸、丙酸、乙酸乙酯、乳酸乙酯、糠醛、总酸 PLS 模型 R^2_{Val} 均达到 0.90，分别为 0.963 0、0.933 7、0.933 0、0.963 8、0.956 5、0.953 6；乙酸异戊酯 PLS 模型 R^2_{Val} 达 0.85，为 0.854 2；以上各指标的 RMSECV 分别为 0.251 7、0.016 9、0.515 8、0.306 0、0.021 3、0.276 2、0.003 8。基酒关键指标最优定量模型见表 3、图 4。

刘建学等^[24]以近红外光谱技术对浓香型白酒基酒建立了乙酸、己酸定量模型，乙酸模型 R^2_{Val} 为 0.956 3；杨国迪^[25]采用近红外光谱技术对杜康白酒基酒建立了 5 种成分的定量模型，其中糠醛模型 R^2_{Val} 为 0.949；买书魁等^[26]以近红外光谱对白酒原酒乙酸乙酯与乳酸乙

酯建立了快检方法， R^2 分别为 0.989 7 及 0.991 0；均可实现白酒基酒关键指标的快速检测。周军等^[27]、唐云容等^[28]则以中红外光谱技术对白酒基酒总酸含量建立了检测模型，但与中红外相比，近红外光谱仪可外接多条较长光纤，实现“一台主机检测多个接酒罐”的数据采集模式，因此在产业化在线应用中更具有价格优势。而白酒中丙酸、乙酸异戊酯的近红外检测方法尚未见到文献报道。本文以成分最为复杂的酱香型白酒基酒为研究对象，以近红外光谱技术为检测手段，对 7 种关键指标建立了同时定量模型，在满足检测准确性要求的前提下，丰富了检测指标，提高了实用性。

2.4 模型验证

为考察模型预测性能，以优化后的关键指标定量模型预测验证集样本，考察预测结果 R 、SEP、RPD 等指标。 R 为 NIR 预测值与参考方法测量值之间的相关系数，表征两组数据的相关程度，越接近 1 越好；SEP 为预测标准偏差，表征 NIR 预测结果与参考方法差异的标准差，越小越好；RPD 为验证集样本参考方法测量值的标准偏差与 SEP 的比值，反映 NIR 定量模型的准确性，越大越好。通常认为， $RPD \geq 3$ 时，模型预测能力优秀； $RPD \geq 2.5$ 时，模型预测能力良好； $2 \leq RPD < 2.5$ 时，模型可近似定量； $1.5 \leq RPD < 2$ 时，模型可区分高水平与低水平^[29,30]。另外，校正标准差与验证标准差的比值（SEP/SEC）不应超过 1.2，否则表示模型稳健性不够^[21]。

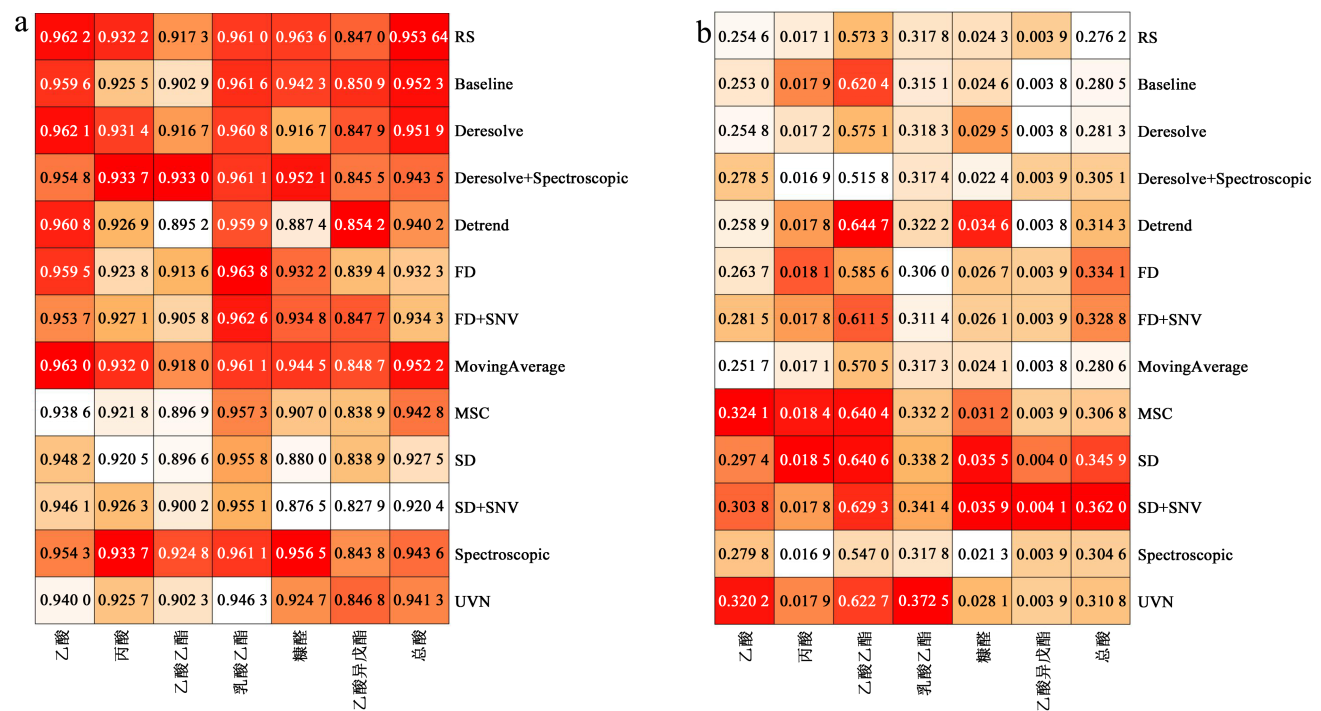


图 3 近红外不同预处理方式下 PLS 模型 R^2_{Val} 及 RMSECV

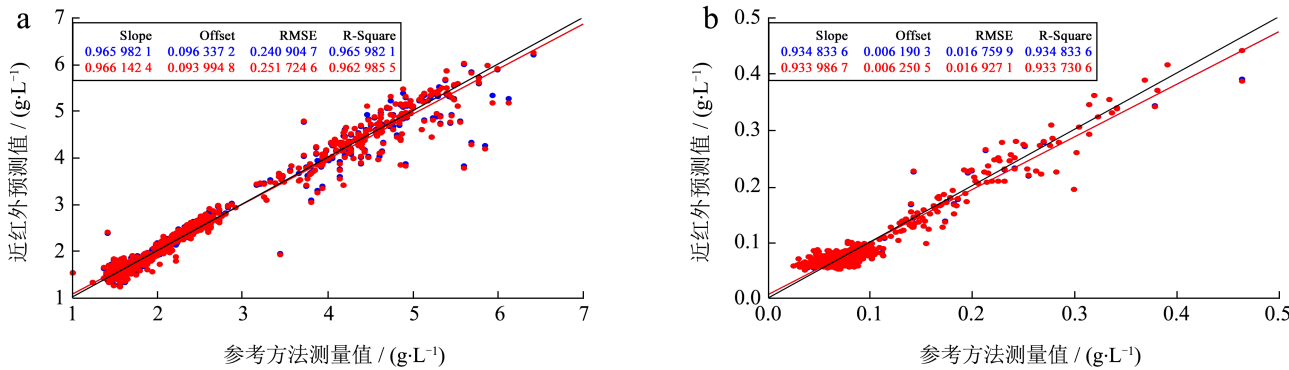
Fig.3 R^2_{Val} and RMSECV of models under different pretreatments

注: (a) 不同处理方式下模型 R^2_{Val} , (b) 不同处理方式下模型 RMSECV。

表 3 基酒关键指标定量模型结果

Table 3 The results of quantitative models for key indicators of base liquor

指标	建模波段	光谱预处理方式	主成分数	校正集		内部交叉验证	
				R^2_{Cal}	RMSEC	R^2_{Val}	RMSECV
1 乙酸	6 001~5 659, 4 633~4 291	Moving Average	8	0.966 0	0.240 9	0.963 0	0.251 7
2 丙酸	6 001~5 317	Spectroscopic	4	0.934 8	0.016 8	0.933 7	0.016 9
3 乙酸乙酯	6 343~5 659, 4 975~4 291	Deresolve+Spectroscopic	9	0.936 4	0.502 0	0.933 0	0.515 8
4 乳酸乙酯	6 001~5 659	FD	5	0.964 9	0.301 0	0.963 8	0.306 0
5 糠醛	6 343~6 001, 4 633~4 291	Spectroscopic	9	0.958 7	0.020 8	0.956 5	0.021 3
6 乙酸异戊酯	6 001~5 659	Detrend	6	0.860 1	0.003 7	0.854 2	0.003 8
7 总酸	6 343~5 317, 4 633~4 291	none	6	0.956 5	0.267 1	0.953 6	0.276 2



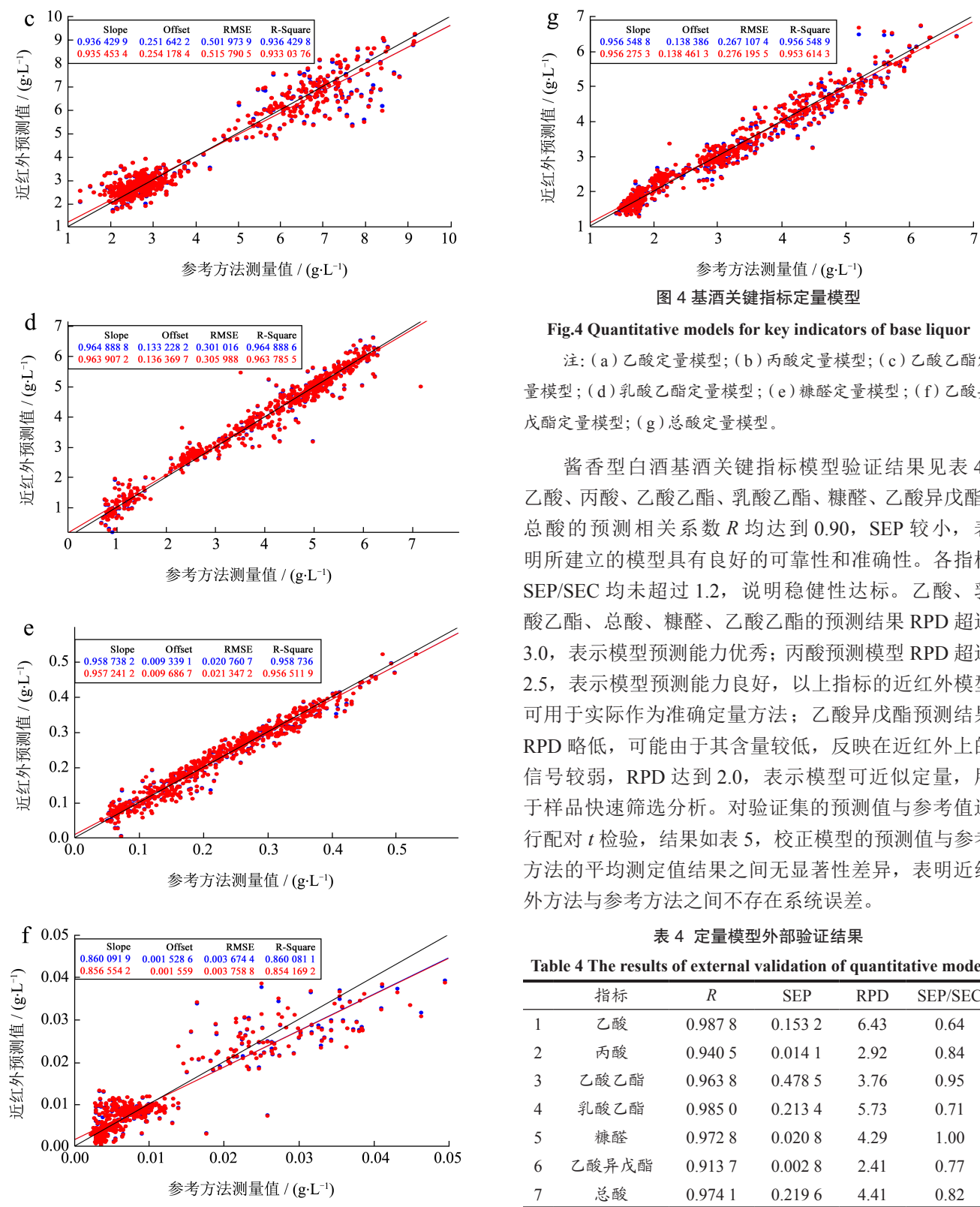


表 5 酱香型基酒关键指标近红外预测值与参考值配对 *t* 检验结果

Table 5 The results of paired *t*-test between NIR method and reference method of key indicators for Jiangxiangxing base liquor

指标	配对差值					<i>t</i>	自由度	Sig.（双尾）
	平均值	标准偏差	标准误差 平均值	差值 95% 置信区间				
				下限	上限			
乙酸	-0.004 2	0.153 6	0.012 3	-0.028 6	0.020 1	-0.344	154	0.731
丙酸	-0.001 0	0.014 1	0.001 1	-0.003 3	0.001 2	-0.921	154	0.358
乙酸乙酯	-0.008 5	0.480 0	0.038 6	-0.084 7	0.067 6	-0.221	154	0.825
乳酸乙酯	-0.032 7	0.211 5	0.017 0	-0.066 3	0.000 8	-1.926	154	0.056
糠醛	0.001 7	0.020 8	0.001 7	-0.001 6	0.005 0	0.995	154	0.321
乙酸异戊酯	-0.000 4	0.003 0	0.000 3	-0.001 0	0.000 1	-1.492	154	0.139
总酸	-0.012 1	0.219 9	0.017 7	-0.047 0	0.022 8	-0.683	154	0.495

3 结论

该研究利用近红外光谱技术结合 PLS 算法对酱香型基酒中 7 种关键成分建立了同时定量模型。采用 iPLS 法筛选出乙酸、丙酸、乙酸乙酯、乳酸乙酯、糠醛、乙酸异戊酯、总酸的特征波段，在特征波段上建立 PLS 模型可有效提升模型性能 (R^2 提高、RMSE 下降)，且大幅减少运算变量，提高了分析速度。以 12 种单独或组合的方式对光谱进行预处理，在特征波段上建立 PLS 模型，通过 R^2_{val} 与 RMSECV 确定了各指标的最佳处理方法，有效提升了模型预测准确性及稳健性。

优化后乳酸乙酯、乙酸、糠醛、总酸、丙酸、乙酸乙酯的定量模型 R^2_{val} 均达到 0.90，为 0.933 0~0.963 8；乙酸异戊酯 R^2_{val} 达 0.85，为 0.854 2；各物质 RMSECV 为 0.003 8~0.515 8。对以上模型进行外部验证，预测结果相关系数 R 均达到 0.90，为 0.913 7~0.987 8；SEP 较小，为 0.002 8~0.478 5；乙酸、乳酸乙酯、总酸、糠醛、乙酸乙酯、丙酸的 RPD 均超过 2.5，为 2.92~6.43，预测性能良好，可用于实际作为准确定量方法；乙酸异戊酯 RPD 达到 2.0，为 2.41，可用于近似定量预测。

该研究所建立的方法满足准确性要求，且简便快捷，可应用于酱香型白酒生产过程中作为质量控制手段。进一步，随着酱香型白酒智能制造水平的提升、数字孪生技术的发展以及生产大数据的实现，近红外光谱技术或将将以在线的形式被应用于自动摘酒、质量分析、安全控制、分级分型等环节，实现基酒数据快速反馈及工艺及时干预，进而科学、准确、高效地生产高品质酱香白酒。

参考文献

[1] NIU J, YANG S Q, SHEN Y, et al. What are the main factors that affect the flavor of Sauce-aroma Baijiu [J]. Foods, 2022, 11(21): 3534.

[2] HONG J X, ZHAO D R, SUN B G. Research progress on the profile of trace components in Baijiu [J]. Food Reviews International, 2023, 39(3): 1666-1693.

[3] TU W Y, CAO X N, CHENG J, et al. Chinese Baijiu: the perfect works of microorganisms [J]. Frontiers in Microbiology, 2022, 13 919044.

[4] XU Y Q, ZHAO J R, LIU X, et al. Flavor mystery of Chinese traditional fermented Baijiu: The great contribution of ester compounds [J]. Food Chemistry, 2022, 369: 130920.

[5] 易封萍,马宁,朱建才.基于GC-O、OAV及Feller加和模型对酱香型习酒特征香气成分的分析[J].食品科学,2022,43(2):242-256.

[6] 林先丽,张晓娟,李晨,等.气相色谱-质谱和电子舌对不同质量等级酱香型白酒的判别分析[J].食品科学,2023,44(24):329-338.

[7] WU Y S, HOU Y X, CHEN H, et al. "Key factor" for Baijiu quality: research progress on acid substances in Baijiu [J]. Foods, 2022, 11(19): 2959.

[8] 仁怀酱香白酒研究所.贵州省产品质量监督检验院仁怀分院.仁怀产区大曲酱香酒技术标准体系[M].北京:中国标准出版社, 2020.

[9] BAI H J, LI H W, LI Y, et al. A fluorescence-enhanced method specific for furfural determination in Chinese Baijiu based on luminescent carbon dots and direct surface reaction [J]. Talanta, 2024, 279: 126660.

[10] JIN G Y, ZHU Y, XU Y. Mystery behind Chinese liquor fermentation [J]. Trends in Food Science & Technology, 2017, 63: 18-28.

[11] WANG G N, JING S, WANG X L, et al. Evaluation of the perceptual interaction among ester odorants and nonvolatile organic acids in Baijiu by GC-MS, GC-O, odor threshold, and sensory analysis. [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2022, 70 (43): 13987-13995.

[12] JIA W, FAN Z B, DU A, et al. Recent advances in Baijiu analysis by chromatography based technology-A review [J]. Food Chemistry, 2020, 324: 126899.

[13] CASTRO-REIGÍA D, GARCÍA I, SANLLORENTE S, et al. Bread

- fermentation monitoring through NIR spectroscopy and PLS-DA. Determining the optimal fermentation point in bread doughs [J]. Journal of Food Engineering, 2024, 361: 111738.
- [14] GENISHEVA Z, QUINTELAS C, MESQUITA D, et al. New PLS analysis approach to wine volatile compounds characterization by near infrared spectroscopy (NIR) [J]. Food Chemistry, 2018, 246: 172-178.
- [15] PENG Y J, TUO X G, LI X P, et al. Progress in near-infrared spectroscopy for baijiu quality and safety detection [C]// 2023 CAA Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes (SAFEPROCESS). IEEE, 2023: 1-6.
- [16] HUANG J H, HE H Y, WANG L J, et al. Assessment of total glycerol core aldehyde and monomer content based on NIR and PLS [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2023, 123: 105526.
- [17] ZHENG R Y, JIA Y Y, ULLAGADDI C, et al. Optimizing feature selection with gradient boosting machines in PLS regression for predicting moisture and protein in multi-country corn kernels via NIR spectroscopy [J]. Food Chemistry, 2024, 456: 140062.
- [18] 王丽,王凡,唐平,等.不同调味酒对酱香型白酒感官特征的作用[J].食品与发酵工业,2021,47(23):125-133.
- [19] 褚小立,袁洪福,陆婉珍.近红外分析中光谱预处理及波长选择方法进展与应用[J].化学进展,2004,4:528-542.
- [20] 尼珍,胡昌勤,冯芳.近红外光谱分析中光谱预处理方法的作用及其发展[J].药物分析杂志,2008,28(5):824-829.
- [21] 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.
- [22] 彭帮柱,龙明华,岳田利,等.用偏最小二乘法及傅立叶变换近红外光谱快速检测白酒酒精度[J].农业工程学报,2007,4:233-237.
- [23] YANG W Y, XIONG Y R, XU Z Z, et al. Piecewise preprocessing of near-infrared spectra for improving prediction ability of a PLS model [J]. Infrared Physics and Technology, 2022, 126: 104359.
- [24] 刘建学,张卫卫,韩四海,等.白酒基酒中己酸、乙酸的近红外快速检测[J].食品科学,2016,37(4):181-185.
- [25] 杨国迪.基于近红外光谱的白酒基酒分析模型的建立[D].洛阳:河南科技大学,2016.
- [26] 买书魁,吴镇君,陈红光,等.基于近红外光谱技术的白酒原酒中关键成分的定量分析[J].食品与发酵工业,2018,44(11):280-285.
- [27] 周军,杨洋,姚瑶,等.中红外光谱技术在浓香型白酒原酒关键指标分析中的应用[J].光谱学与光谱分析,2022,42:764-768.
- [28] 唐云容,庞臻,钟敏,等.中红外光谱分析技术结合化学计量学方法快速分析酱香型白酒酸酯含量[J].中国酿造,2024,43(1):244-249.
- [29] MARIANI N C T, HENRIQUE D A T G, LIMA K M G D, et al. NIRS and iSPA-PLS for predicting total anthocyanin content in jaboticaba fruit [J]. Food Chemistry, 2015, 174: 643-648.
- [30] 史艳丽,郭涛,李成海,等.牛羊全混合颗粒日粮养分含量NIRS定标模型构建[J/OL].草业科学, 1-16[2024-10-21].