

黄清霞,付国勇,陈黎萍.成品白酒中酸酯总量的近红外检测 [J].食品工业科技,2022,43(5):310-314. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2021070116

HUANG Qingxia, FU Guoyong, CHEN Liping. Detection of Acid Ester Content in Baijiu (Chinese Liquor) Based on Near Infrared Spectroscopy[J]. Science and Technology of Food Industry, 2022, 43(5): 310-314. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2021070116

· 分析检测 ·

成品白酒中酸酯总量的近红外检测

黄清霞,付国勇,陈黎萍
(四川水井坊股份有限公司,四川成都 610000)

摘要:为了建立成品白酒中酸酯总量的近红外模型,以达到快速检测酸酯总量的目的,本文采用回流及酸碱滴定法测定成品白酒中酸酯总量的化学值,与成品白酒在1 mm及8 mm光程比色池的近红外光谱图相结合,采用内部交叉检验法及外部独立验证建立了成品白酒中酸酯总量的近红外模型。结果表明:成品白酒中的酸类和酯类物质在近红外区有特异性吸收,1 mm光程比色池的最佳处理方法与最优波段分别为:一阶导数、谱区选择9400~5448 cm⁻¹;8 mm光程比色池的最佳处理方法与最优波段分别为:一阶导数、谱区选择9400~7500 cm⁻¹和6100~5448 cm⁻¹。1、8 mm光程比色池的酸酯总量的近红外模型预测值与化学真值拟合的决定系数(R^2)分别为99.18%、96.62%,内部交叉检验均方差根(RMSECV)分别为0.989、1.980 mmol/L。1 mm光程比色池的外部独立验证模型预测值与化学真值拟合的决定系数(R^2)为99.45%,外部检验标准偏差(RMSEP)为0.819 mmol/L。结果表明,用1 mm光程比色池所建立的近红外模型具有很好的预测能力,能够满足成品白酒中酸酯总量的快速检测要求。

关键词:成品白酒,酸酯总量,傅立叶变换近红外光谱,交叉检验法

中图分类号:TS207.3 文献标识码:A 文章编号:1002-0306(2022)05-0310-05

DOI: [10.13386/j.issn1002-0306.2021070116](https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2021070116)

本文网刊: 

Detection of Acid Ester Content in Baijiu (Chinese Liquor) Based on Near Infrared Spectroscopy

HUANG Qingxia, FU Guoyong, CHEN Liping

(Sichuan Swellfun Co., Ltd., Chengdu 610000, China)

Abstract: To construct the near infrared spectrum model of acid ester content in Baijiu (Chinese Liquor) and detect rapidly the acid ester content in Baijiu. The chemical value of acid ester content in Baijiu was determined by reflux and acid-base titration, which was combined with the near-infrared spectra of 1 mm and 8 mm optical path colorimetric cell of Baijiu, and the near-infrared spectrum model of acid ester content in Baijiu was established by internal cross test and external independent verification test. The results showed that acid ester content in Baijiu had special absorption to near infrared spectroscopy (NIR). The processing method and the best band of 1 mm optical path colorimetric cell were first derivative and 9400~5448 cm⁻¹, and the processing method and the best band of 8 mm optical path cell were first derivative and 9400~7500 cm⁻¹ and 6100~5448 cm⁻¹. The coefficient of determination (R^2) between the NIR predicted values and the chemical true values of acid ester content in 1 mm and 8 mm optical path colorimetric cells were 99.18% and 96.62%, and the correction standard deviation (RMSECV) were 0.989 mmol/L and 1.980 mmol/L. The coefficient of determination (R^2) of external independent verification model between the predicted values and the chemical true values was 99.45%, and the prediction standard deviation (RMSEP) was 0.819 mmol/L. The results showed that the NIR model built by 1 mm optical path colorimeter cell had good prediction ability and could meet the requirements of rapid detection of acid ester content in Baijiu.

Key words: baijiu; acid ester content; fourier transform near infrared spectroscopy; cross test

白酒作为世界著名的蒸馏酒之一, 因其特殊的风味和口感, 深受人们欢迎, 其品质也得到大家的广泛关注^[1-2]。白酒中的有机酸和酯是重要的呈香、呈味物质, 有机酸和酯与醇在自然条件下会发生可逆的转化反应, 这种反应在一定时间内, 有利于产品质量风格趋于稳定, 口感更加醇厚^[3], 其中的酸酯总量能够反应白酒在储藏过程中品质的变化, 是白酒检测中的关键指标。目前, 对白酒或烈酒中酸类、酯类、醇类等物质的检测主要采用气相色谱法或酸碱滴定法, 其存在分析周期长、操作繁琐、检测单一、环境污染等方面的不足^[4-5], 因此, 研究一种快速高效的分析技术, 对降低成本、提高效率、保护环境等方面具有重要的意义和作用^[6]。

白酒中的有机分子有如 O-H、N-H、C-H 等这样的含氢基团, 含氢基团的倍频和合频吸收区主要集中在近红外光谱区, 通过扫描样品的近红外光谱可以得到样品中含氢基团的特征信息, 因此, 通过仪器检测近红外线被吸收的情况可以得到物质的近红外吸收光谱^[7-8], 对光谱进行一定的预处理和优化, 则能消除或减弱各种非目标因素对光谱的影响^[9-10]。近年来, 红外光谱技术因具有操作方便、步骤简易、检测时间短、不损伤样品、没有化学试剂消耗、能同时测定多个组分等独特优势^[11-14]而被广泛应用研究, 其在酒类行业的研究应用在国内外均有报道^[15], DIRM^[16]利用中红外光谱技术对甲醇、乙酸乙酯等指标进行了监测研究; UMESH 等^[17]采用近红外光谱技术对烈酒中的有机酸进行了检测研究, 结果都具有非常好的效果。谭超等^[18]利用近红外光谱技术筛选出了白酒中乙酸乙酯含量的最优波段(2200~2400 nm); 刘建学等^[19-20]利用近红外技术构建了白酒基酒中典型醇及己酸、乙酸的近红外预测模型; 彭帮柱等^[21]基于近红外光谱建立了白酒中总酯的快速检测模型。

本文以近红外光谱分析技术为基础, 选取水井坊成品酒为研究对象, 分别用 1、8 mm 光程的比色池扫描得到 244 个样品的近红外光谱图, 并对光谱图进行分析, 选取特征谱区及最佳预处理方法, 比较不同光程比色池模型效果, 并对模型进行验证和评价, 建立了成品白酒中酸酯总量的近红外模型, 可为白酒中酸酯总量的快速测定提供依据。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

244 个成品白酒样品 四川水井坊股份有限公司; 10 个白酒盲样 市面随机购买; 0.1 mol/L 氢氧化钠标准溶液、0.05 mol/L 硫酸标准滴定溶液: 按 GB/T 601-2016《中华人民共和国国家标准化学试剂标准滴定溶液的制备》进行配制与标定^[22]; 10 g/L 酚酞指示剂: 按 GB/T 603-2002《中华人民共和国国家标准化学试剂试验方法中所用制剂及制品的制备》进行配制^[23]; 氢氧化钠、硫酸、酚酞 均为分析纯, 成都金山试剂厂。

Bruker MPAII 型近红外光谱仪 德国布鲁克(Bruker)公司; 水浴锅(温控 100 ℃) 江苏金怡仪器科技有限公司; 50 mL 碱式滴定管、50 mL 酸式滴定管 天津市天玻玻璃仪器有限公司; 500 mL 玻璃回流装置 天长市天沪分析仪器有限公司。

1.2 实验方法

1.2.1 酸酯总量的化学值测定 依据 GB/T 10781.1-2021《中华人民共和国国家标准白酒质量要求第 1 部分: 浓香型白酒中白酒中酸酯总量的测定方法》测定建模集及验证集白酒样品中的酸酯总量。吸取酒样 50.0 mL 于 250 mL 三角瓶中, 加 2 滴 10 g/L 酚酞指示剂, 用 0.1 mol/L 氢氧化钠标准溶液(c_1)滴定至微红色, 记录消耗的氢氧化钠体积 V_1 (mL), 再准确加入 30 mL 0.1 mol/L 氢氧化钠标准溶液, 沸水浴回流 30 min, 然后用 0.05 mol/L 硫酸标准滴定溶液(c_2)滴定至微红色刚好完全消失, 记录消耗硫酸体积 V_2 (mL), 同时记录空白试验样品消耗硫酸体积 V_0 (mL)。样品中的酸酯总量(X)计算公式如下:

$$X = \frac{[c_1 \times V_1 + c_2 \times (V_0 - V_2)] \times 1000}{50}$$

1.2.2 酒样的近红外光谱采集 利用 Bruker MPAII 傅立叶变换近红外光谱仪采集白酒样品光谱, 测量前将仪器预热 30 min, 在不放比色池情况下, 以空气作参比, 选用光程为 1 mm 和 8 mm 的石英比色皿, 将白酒样品分别移至 1 mm 和 8 mm 的比色皿中, 使用 Bruker MPAII 傅立叶变换近红外光谱仪及 OPUS8.1 分析软件进行光谱采集。光谱扫描范围为 11550~3950 cm⁻¹, 仪器分辨率为 8 cm⁻¹, 扫描次数为 16 次, 每个样品采集 3 次, 用所得平均光谱进行分析^[24]。

1.2.3 光谱数据预处理及模型建立 样品在进行近红外测试过程中, 可能存在无关因素的干扰, 从而导致近红外光谱的基线漂移及光谱不重复, 因此, 为提高所采集近红外光谱的有效信息, 提高模型的可靠性和稳定性, 需要对原始光谱进行预处理, 以选择合适的谱区来建立模型^[25-26]。

本试验利用 Bruker MPAII 型傅立叶变换近红外光谱仪中的 OPUS8.1 分析软件的自动功能, 选择出检验模型的最优谱区、波段及最佳预处理方法。根据国标法测定的白酒中酸酯总量的化学值的分布情况, 将白酒样品划分为校正集样品和验证集样品, 选取 182 个样品作为校正集样品, 72(包含市面随机购买的 10 个白酒样品)个样品作为验证集样品, 对校正集样品进行交叉检验来建立模型, 用模型的预测值与化学真值的决定系数(R^2)和交叉检验标准偏差(RMSEV)来评价模型质量^[27]。最后用独立的验证集样品来对模型进行外部验证, 将模型计算的结果与国标法测定的化学值进行比较, 验证其可靠性^[28]。

1.3 数据处理

白酒中酸酯总量的化学值由两次独立重复测定

结果绝对差值不超过平均值的 2% 来确定, 取其平均值; 近红外模型的预处理方式及其相关系数和标准偏差的结果由布鲁克公司配套数据采集软件 OPUS8.1 中的自动功能及模型评价功能所得。

2 结果与分析

2.1 白酒样品选择

将 244 个白酒样品按国标法测定的酸酯总量的高低顺序进行排序, 为得到校正集及验证集样品分布均匀性结果, 用隔 3 选 1 的方法, 将样品分为校正集样品和验证集样品, 其中为验证模型适用性, 将市面随机购买的 10 个白酒样品也作为验证集样品, 测定结果如表 1 所示。

表 1 校正集样品与验证集样品的酸酯总量测定结果

Table 1 The results of total acid esters in calibration set and verification set

名称	校正集	验证集
样品数(个)	182	72
酸酯总量范围(mmol/L)	44.66~85.96	45.61~85.00
平均值(mmol/L)	61.49	62.45
极差(mmol/L)	41.30	39.39

由表 1 可知, 所选校正集样品中酸酯总量范围为 44.66~85.96 mmol/L, 验证集样品中酸酯总量范围为 45.61~85.00 mmol/L。所选建模校正集样品含量范围大于验证集样品含量范围, 且范围大具有代表性, 符合选择建模样品的原则。

2.2 成品白酒近红外光谱分析

按照上述的近红外光谱采集条件, 分别得到 254 个成品白酒样品的 1 mm 光程比色池的近红外光谱和 8 mm 光程比色池的近红外光谱, 如图 1 和图 2 所示。

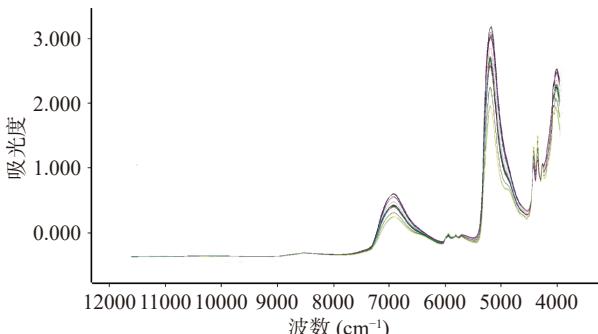


图 1 成品白酒 1 mm 光程比色池近红外光谱

Fig.1 The near-infrared spectra of 1 mm optical path colorimetric cell of Baijiu

由图 1 和图 2 可知, 样品在相同波数下, 使用 8 mm 光程比色皿的吸光度高于 1 mm 光程比色皿的吸光度, 8 mm 比色皿所得光谱图形较饱和平滑, 1 mm 比色皿所得光谱图形比较尖锐, 过大的谱图峰在建模中干扰因素较多, 应予以避免^[29]。白酒中含有大量的水和乙醇, 其中水分子的近红外特征吸收区域在 5128 cm⁻¹ 附近, 乙醇的吸收区域在 4347 cm⁻¹ 附

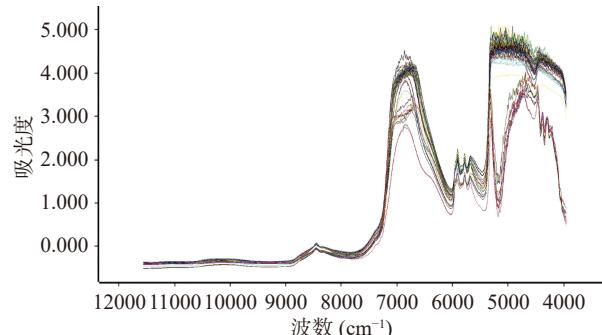


图 2 成品白酒 8 mm 光程比色池近红外光谱

Fig.2 The near-infrared spectra of 8 mm optical path colorimetric cell of Baijiu

近^[29~30], 选择建模谱区时应避开这些强吸收干扰区域^[24]。从图 1 可知, 在波数 9000~5300 cm⁻¹ 范围内, 样品吸光度适中, 适合建模波段的选择。从图 2 可知, 在波数 7300~6000 cm⁻¹ 范围内, 样品吸光度太高, 有较多非目标因素的影响, 不适合建模波段的选择, 其建模波段在 9000~7300 cm⁻¹ 和 6000~5300 cm⁻¹ 范围内选择较为合适。

2.3 模型建立

通过上述处理方式对校正集 182 个白酒样品进行校正集交叉检验建模分析处理, 建模结果如表 2 所示。

表 2 不同光程比色池近红外模型结果

Table 2 The results of near-infrared model in different optical path colorimetric cells

名称	1 mm 光程 比色池	8 mm 光程 比色池
建模波数(cm⁻¹)	9400~5448	9400~7500、 6100~5448
模型预处理方式	一阶导数	一阶导数
模型预测值与真值拟合决定系数(R^2 , %)	99.18	96.62
模型预测值与真值标准偏差(mmol/L)	0.989	1.980

由表 2 可知, 白酒酸酯总量 1 mm 光程比色池近红外模型的建模波数范围是 9400~5448 cm⁻¹, 模型预处理方式是一阶导数, 8 mm 光程比色池建模波数范围是 9400~7500 cm⁻¹ 和 6100~5448 cm⁻¹, 模型预处理方式是一阶导数, 与上述两种光谱特征性一致。1 mm 光程比色池和 8 mm 光程比色池近红外模型的预测值与真值拟合决定系数(R^2)分别为 99.18%、96.62%, 其校正集标准偏差(RMSECV)分别为 0.989、1.980 mmol/L, 由此可知, 选用 1 mm 光程的比色池对成品白酒样品中的酸酯总量进行近红外快速测试要优于 8 mm 光程的比色池。

2.4 酸酯总量 1 mm 光程比色池的近红外模型验证

通过对 1 mm 和 8 mm 两种光程比色池的近红外模型比较, 1 mm 光程的比色池具有明显优势, 将选择的 72 个验证集样品(包含市面随机购买的 10 个白酒样品)对 1 mm 光程比色池近红外模型进行独立性验证, 结果如图 3 所示。

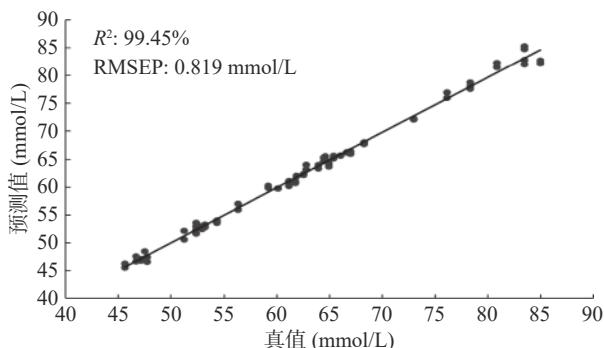


图 3 酸酯总量 1 mm 光程比色池验证集的预测值和真值关系图

Fig.3 The relationship between predicted value and true value of validation set in 1 mm optical path colorimetric cell

由图 3 可知, 酸酯总量 1 mm 光程比色池近红外模型验证集样品预测值与真值拟合的决定系数(R^2)为 99.45%, 验证集标准偏差(RMSEP)数值为 0.819 mmol/L, 说明该模型具有非常好的预测能力, 同时, 对市面随机购买的 10 个白酒样品也有较好的预测能力, 表明该模型可用于成品白酒酸酯总量的快速检测。

3 结论

本文通过两种光程的比色池对成品白酒进行近红外光谱扫描, 再结合国标法测得样品中酸酯总量的化学值, 建立了两种光程比色池的近红外光谱定量模型, 利用校正集样品中酸酯总量的预测值和真值的相关系数和标准偏差对模型进行评价, 结果表明: 使用 1 mm 光程的比色池建模效果更好, 同时使用独立的验证集样品对模型进行验证, 得到验证集样品中酸酯总量的预测值与真值拟合的决定系数(R^2)和标准偏差(RMSEP)分别是 99.45% 和 0.819 mmol/L, 说明所建模型具有非常好的预测能力, 能够用于快速测定成品白酒中的酸酯总量。后续需要不断补充优化近红外检测模型, 扩大模型分析范围, 利用近红外光谱仪在测试方面的诸多优势, 为白酒以及其他行业的快速分析提供新的思路。

参考文献

- [1] 陈育新, 韩珍, 郭庆东. 中国白酒中呈香呈味物质研究进展[J]. 食品研究与开发, 2015, 36(2): 140–142. [CHEN Y X, HAN Z, GUO Q D. Progress of research on the aroma and flavor-producing substances in liquor[J]. Food Research and Development, 2015, 36(2): 140–142.]
- [2] 郑福平, 马雅杰, 侯敏, 等. 世界 6 大蒸馏酒香气成分研究概括与前景展望[J]. 食品科学技术学报, 2017, 35(2): 1–12. [ZHENG F P, MA Y J, HOU M, et al. Progress and prospect in aroma components in top six distilled spirits[J]. Journal of Food Science and Technology, 2017, 35(2): 1–12.]
- [3] 国家市场监督管理总局, 国家标准化管理委员会. GB/T 10781.1-2021 白酒质量要求第 1 部分: 浓香型白酒 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2021. [State Administration for Market Regulation, Standardization Administration. GB/T 10781.1-2021 Quality requirements for Baijiu-Part 1: Nongxiangxing Baijiu[S]. Beijing: Standards Press of China, 2021.]
- [4] CHENG P, FAN W, XU Y. Determination of Chinese liquors from different geographic origins by combination of mass spectrometry and chemometric technique[J]. Food Control, 2014, 35(1): 153–158.
- [5] CHENG P, FAN W, XU Y. Quality grade discrimination of Chinese strong aroma type liquors using mass spectrometry and multivariate analysis[J]. Food Research International, 2013, 54(2): 1753–1760.
- [6] 田育红, 王凤仙, 吴青. 基于近红外光谱分析技术快速检测白酒中的关键指标[J]. 酿酒, 2019, 46(5): 93–96. [TIAN Y H, WANG F X, WU Q. Rapid detection of key indicators in liquor based on near infrared spectroscopy[J]. Liquor Making, 2019, 46(5): 93–96.]
- [7] 陈乃鹏. 傅立叶变换近红外光谱对酒的鉴定综述[J]. 当代化工研究, 2019(6): 22–24. [CHEN N P. Review on identification of wine by fourier transform infrared spectroscopy[J]. Modern Chemical Research, 2019(6): 22–24.]
- [8] 王海英, 杨玉珍, 任国军, 等. 利用近红外技术对河套原酒入库指标的检测研究[J]. 酿酒科技, 2017(1): 37–41. [WANG H Y, YANG Y Z, REN G J, et al. Rapid detection of warehousing indexes of Hetao base liquor by using near infrared technology[J]. Liquor-Making Science & Technology, 2017(1): 37–41.]
- [9] 陈霏, 度先国, 曾祥林, 等. 近红外检测技术在白酒生产中的应用研究进展[J]. 食品科技, 2021, 46(1): 280–284. [CHEN F, TUO X G, ZENG X L, et al. Research progress of near infrared detection technology in liquor production[J]. Food Science and Technology, 2021, 46(1): 280–284.]
- [10] MABOOD F, JABEEN F, HUSSAIN J, et al. FT-NIRS coupled with chemometric methods as a rapid alternative tool for the detection & quantification of cow milk adulteration in camel milk samples[J]. Vibrational Spectroscopy, 2017(7): 245–250.
- [11] YU H Y, NIU X Y, LIN H J, et al. A feasibility study on online determination of rice wine composition by Vis-NIR spectroscopy and least-squares support vector machines[J]. Food Chemistry, 2009, 113(1): 291–296.
- [12] YAO J, YANG Q, SUN C Y, et al. Qualitative analysis of methanol in the forged wine using spectrophotometer[J]. Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory, 2000, 17(1): 35–37.
- [13] 郭玉姗, 刘建学, 李璇, 等. 基于近红外光谱技术的白酒基酒中乳酸的快速检测[J]. 食品工业科技, 2018, 39(20): 212–216. [GUO Y S, LIU J X, LI X, et al. Rapid determination of lactic acid in base liquor based on near infrared spectroscopy[J]. Science and Technology of Food Industry, 2018, 39(20): 212–216.]
- [14] 杨增玲, 黄圆萍, 沈光辉, 等. 基于在线近红外光谱的堆肥全过程关键参数快速检测[J]. 农业机械学报, 2019, 50(5): 356–361, 384. [YANG Z L, HUANG Y P, SHEN G H, et al. Rapid detection of key parameters of composting process based on online near-infrared spectroscopy[J]. Trans Chin Soc Agric Mach, 2019, 50(5): 356–361, 384.]
- [15] 邓波, 沈才洪, 丁海龙, 等. 红外光谱分析技术在白酒行业中的应用进展[J]. 中国酿造, 2020, 39(9): 13–17. [DENG B, SHEN C H, DING H L, et al. Advances in the application of in-

- frared spectroscopy in the Chinese Baijiu industry[J]. *China Brewing*, 2020, 39(9): 13–17.]
- [16] DIRK W. Rapid quality control of spirit drinks and beer using multivariate data analysis of Fourier transform infrared spectra [J]. *Food Chem*, 2007, 101(2): 825–832.
- [17] UMESH R, KRISHNA P, MIGUEL P. Determination of organic acids in wine and spirit drinks by Fourier transform infrared (FT-IR) spectroscopy[J]. *J Food Sci Technol Nepal*, 2012, 7: 36–43.
- [18] 谭超, 吴同, 李惟一, 等. 近红外光谱组合区间偏最小二乘法定量白酒中的乙酸乙酯[J]. 计算机与应用化学, 2014, 31(4): 540–512. [TAN C, WU T, LI W Y, et al. Quantitative analysis of ethyl acetate in Baijiu by near infrared spectroscopy combined with partial least squares[J]. *Computers and Applied Chemistry*, 2014, 31(4): 540–512.]
- [19] 刘建学, 杨国迪, 韩四海, 等. 白酒基酒中典型醇的近红外预测模型构建[J]. *食品科学*, 2018, 39(2): 281–286. [LIU J X, YANG G D, HAN S H, et al. Prediction model for typical alcohols in base liquor based on near infrared spectroscopy[J]. *Food Science*, 2018, 39(2): 281–286.]
- [20] 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. [LIU J X, ZHANG W W, HAN S H, et al. Rapid detection of caproic acid and acetic acid in liquor base based on Fourier transform near-infrared spectroscopy[J]. *Food Science*, 2016, 37(4): 181–185.]
- [21] 彭帮柱, 龙明华, 岳田利, 等. 傅里叶变换近红外光谱法检测白酒总酸和总酯[J]. *农业工程学报*, 2006, 22(12): 216–219.
- [22] PENG B Z, LONG M H, YUE T L, et al. Determination of TA and TE concentration in liquor based on Fourier transform near-infrared spectroscopy[J]. *Transactions of the CSAE*, 2006, 22(12): 216–219.]
- [23] 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局, 中国标准化管理委员会. GB/T601-2016 化学试剂标准滴定溶液的制备[S]. 北京: 中国标准出版社, 2016. [General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China, Standardization Administration of the People's Republic of China. GB/T601-2016 Chemical reagent: Preparations of reference titration solutions[S]. Beijing: Standards Press of China, 2016.]
- [24] 董新罗, 刘建学, 韩四海, 等. 白酒基酒中酮类物质的近红外光谱检测方法[J]. *分析测试学报*, 2020, 39(11): 1427–1432.
- [25] DONG X L, LIU J X, HAN S H, et al. Rapid detection of ketones in base liquor by near infrared spectroscopy[J]. *Journal of Instrumental Analysis*, 2020, 39(11): 1427–1432.]
- [26] HAITAO S, YAOGENG L, LUCIANA L P, et al. Evaluation of near-infrared (NIR) and Fourier transform mid-infrared (ATR-FT/MIR) spectroscopy techniques combined with chemometrics for the determination of crude protein and intestinal protein digestibility of wheat[J]. *Food Chem*, 2019, 272(9): 507–513.
- [27] GORDON R, CHAPMAN J, POWER A, et al. Unfrazzled by fizziness: Identification of beers using attenuated total reflectance mid-infrared spectroscopy and multivariate analysis[J]. *Food Anal Method*, 2018, 11(9): 2360–2367.
- [28] SUN Z, LI C, LI L, et al. Study on feasibility of determination of glucosamine content of fermentation process using a micro NIR spectrometer[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2018(8): 153–160.
- [29] 宗绪岩, 李骥, 邹永芳, 等. 基于化学计量学的近红外光谱法检测白酒中酯含量研究[J]. *农产品加工*, 2019, 2(2): 53–55, 59. [ZONG X Y, LI J, ZOU Y F, et al. Determination of ester contents in Baijiu by near infrared spectroscopy based on chemometrics[J]. *Farm Products Processing*, 2019, 2(2): 53–55, 59.]
- [30] 陆婉珍. 现代近红外光谱分析技术(第二版)[M]. 北京: 中国石化出版社, 2007. [LU W Z. Modern near infrared spectroscopy analytical technology (Second edition)[M]. Beijing: China Petrochemical Press, 2007.]
- [31] 李霞. 基于近红外光谱技术的赤霞珠干红葡萄酒品质指标检测方法研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2018. [LI X. Rapid detection of wusly index in cabernet sauvignon red wine based on near-infrared spectroscopy[D]. Yangling: Northwest A & F University, 2018.]