DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20260325005
引用格式: 甄宇涛, 汪慧慧, 李庆腾, 等. 中红外光谱法测定基酒中关键风味物质含量[J]. 食品安全质量检测学报, 2026, 17(17): 113–122.
Zhen Yutao, Wang Huihui, Li Qingteng, et al. Determination of key flavor substances content in base wine by mid-infrared spectroscopy [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2026, 17(17): 113–122. (in Chinese with English abstract).

中红外光谱法测定基酒中关键风味物质含量

甄宇涛[1], 汪慧慧[2], 李庆腾[2], 李子文[1*], 习小红[2], 孙 冲[1], 候光昊[1], 李 锐[1]
(1. 中国食品发酵工业研究院有限公司, 北京 100016; 2. 山东百脉泉酒业股份有限公司, 济南 250200)

摘 要: 目的 建立中红外光谱法快速检测白酒基酒中的关键风味物质的方法。**方法** 使用偏最小二乘法, 基于中红外光谱振动吸收强度与有机分子官能团含量之间的线性关系, 建立基酒的中红外光谱与各主要风味物质浓度的定量模型, 采用标准正态变换和均值中心化对光谱进行预处理, 并通过 RReliefF 算法选择最优的波段范围和主成分数。**结果** 经过优化的模型效果稳定、准确, 各指标乙酸乙酯、乳酸乙酯、己酸乙酯、甲醇、正丁醇、乙酸的决定系数(R^2)分别达到了 0.998、0.978、0.996、0.927、0.904、0.771, 盲样测试的相对误差绝大部分控制在 5%以内, 各指标平均相对误差均低于 4%。**结论** 中红外光谱与基酒中风味物质含量具有较强的相关性, 该方法为白酒基酒快速检测提供了可靠技术手段。

关键词: 中红外光谱法; 模型优化; 基酒; 关键风味物质
中图分类号: TS262.3 **文献识别码:** A **文章编号:** 2095–0381(2026)17–0113–10

Determination of key flavor substances content in base wine by mid-infrared spectroscopy

ZHEN Yu-Tao[1], WANG Hui-Hui[2], LI Qing-Teng[2], LI Zi-Wen[1*], XI Xiao-Hong[2], SUN Chong[1], HOU Guang-Hao[1], LI Rui[1]
(1. *China National Research Institute of Food & Fermentation Industries Co., Ltd., Beijing* 100016, *China*; 2. *Shandong Baimai Spring Liquor Industry Co., Ltd., Ji'nan* 250200, *China*)

ABSTRACT: Objective To establish a method for the rapid detection of key flavor substances in Baijiu base wine by mid-infrared spectroscopy. **Methods** Based on the linear relationship between the vibrational absorption intensity of mid-infrared spectroscopy and the content of functional groups in organic molecules, partial least squares regression was used to build quantitative models between mid-infrared spectroscopy of base wine and the concentrations of main flavor substances. Standard normal variate transformation and mean centering were applied for spectral preprocessing, and the RReliefF algorithm was employed to select the optimal wavenumber ranges and the number of principal components. **Results** The optimized models exhibited stable and accurate performance. The coefficients of determination (R^2) for ethyl acetate, ethyl lactate, ethyl hexanoate, methanol, n-butanol and acetic acid reached 0.998, 0.978, 0.996, 0.927,

收稿日期: 2026-03-25
基金项目: 国家重点研发计划项目(国研发 23-标准-113-1-1)
第一作者: 甄宇涛(2000—), 男, 助理工程师, 主要研究方向为酒类红外快速检测。E-mail: 790625771@qq.com
***通信作者:** 李子文(1992—), 男, 硕士, 高级工程师, 主要研究方向为食品及农产品无损检测。E-mail: 1339299142@qq.com

0.904 and 0.771, respectively. In blind sample tests, most relative errors were controlled within 5%, and the average relative error of each index was below 4%. **Conclusion** There is a strong correlation between mid-infrared spectra and the content of flavor compounds in base wine. This method provides a reliable technical tool for the rapid detection of Chinese liquor base wine.

KEY WORDS: mid-infrared spectroscopy; model optimization; base wine; key flavor substances

0 引 言

白酒在中国具有悠久的历史，同时在食品轻工业领域占据重要的地位[1–3]。而基酒是酒醅经过发酵、蒸馏等工艺后得到的半成品酒，其品质在很大程度上决定了成品酒的质量[4–6]。因此，需要对每一批基酒中的重要指标进行检测。近年来随着各白酒企业规模扩大，产量持续提升，基酒检测量也在不断增长[7–8]。

目前基酒中重要风味指标的检测方法为气相色谱法[9]。但该方法存在明显局限：样品前处理复杂、试剂消耗大、成本高，且依赖专业人员操作与数据分析[10]；在生产现场实时监测中存在明显滞后性，难以满足酿造过程动态调控、基酒快速分级的实际需求[11]。

近年来，快速检测技术在酒类分析中得到了广泛探索。中红外光谱技术凭借官能团特征吸收信息丰富、检测无损高效、可多指标同步分析等优势，在酒类质量快速检测领域得到了国内外学者的广泛关注。国外研究较早将中红外光谱法结合多元回归模型应用于葡萄酒、清酒等酒类乙醇、有机酸及酯类定量分析，证实其在液态食品成分快速预测的可行性[12–14]；国内学者多聚焦中红外光谱法开展白酒风味物质建模研究。宋艳等[15]采用中红外光谱法对浓香型白酒基酒中的乙酸乙酯进行建模，R^2 达到了 0.991，验证了中红外光谱在白酒基酒风味成分分析方面的可行性。其他现有研究也证实中红外光谱可用于白酒主要成分的快速分析[16–17]。但仍存在以下不足：现有研究多采用单一预处理方式，难以有效消除基线漂移、杂散光干扰，且多采用全谱或经验波段建模，冗余信息易引发模型过拟合，波段智能筛选算法应用较少，预测误差较大，模型稳定性与泛化能力有待提升[18–21]。

鉴于此，本研究基于中红外光谱法建立基酒中关键风味物质含量的定量分析数学模型，采用标准正态变换(standard normal variate transform, SNV)和均值中心化(mean centered, MC)[22]进行光谱预处理，利用 RReliefF 算法进行特征波段优化选择，结合偏最小二乘法(partial least squares regression, PLSR)建立线性回归模型，并用所建模型对独立预测集基酒样品进行预测验证，以此评价模型的可靠性及分析准确度，为实际生产过程中基酒的实时质量监测需求提供检测方案。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

所用的白酒基酒样品共 183 组，均来自国内某酒厂酿酒生产车间实际生产过程。

1.2 仪器与设备

FTB 傅里叶型中红外光谱仪(PerkinElmer 美国珀金埃尔默公司)。FTB 仪器光源为黑体空腔光源，配有内径为 36 μm 的透射样品池。仪器检测的光谱范围为 4000.07~397.31 cm^{-1}，分辨率为 8 cm^{-1}，本底光谱为空气。利用 FTB 配套软件 Result Plus 收集各组白酒基酒样品的中红外光谱。

1.3 实验方法

1.3.1 光谱数据的获取

采用透射模式采集白酒原酒样品的中红外光谱，光程固定为 0.1 mm，扫描波数范围为 4000.07~397.31 cm^{-1}。样品光谱采集前，先以空气为背景进行空白扫描，收集背景光谱。每个样品测量时，仪器会自动扣除背景光谱，获得样品的真实吸收光谱。背景扫描与样品扫描的间隔不超过 10 min，以控制环境波动对光谱的影响。每个样品测量前，用待测样品润洗液体池 2 次。每个样品扫描 3 次，取平均值作为该样品的最终图谱。由于温度对样品光谱测定影响明显，本研究的全部样品在扫描光谱前均先置于室内进行恒温 60 min，且所有光谱数据均在室内温度为(25±1) ℃下测定。

1.3.2 理化数据的获取

依据 GB/T 10345—2022《白酒分析方法》中的相应规定，采用气相色谱法对每组基酒样品中乙酸乙酯、乳酸乙酯、己酸乙酯、甲醇、正丁醇、乙酸共计 6 组指标进行检测，所得理化数据用于模型训练及实际效果盲样验证。

1.3.3 样品集的划分

在共计 183 组基酒样品中，随机选取出 18 组样品作为测试集，不参与模型建立，仅作为盲样验证使用。其余 165 组样品作为训练集，均参与 PLSR 交叉验证建模。

1.3.4 光谱的优化方法

中红外光谱仪所采集的光谱除样品的有效信息外，还包含了其他无关信息和噪声，如电噪声、样品背景和杂散光等。为了消除干扰，同时为校正样品间因散射现象对光谱引起的误差影响，对所扫描的原始光谱进行了 SNV 和 MC 预处理。

1.3.5　波段优化方法

为了优化光谱范围，确定最佳回归和预测光谱区间，本研究利用 RReliefF 算法对各指标建模时的波段进行了优化挑选。RReliefF 算法是一种适用于回归问题特征选择的算法，该算法通过计算特征与因变量之间的相关性来赋予特征不同的权重，从而选择出对回归贡献度高的特征[23]。其核心是通过局部近邻的目标值差异与特征差异的关联，量化特征对连续型因变量的预测重要性。通过该算法可以有效地挑选出各指标的特征吸收波长，同时减少冗余信息，增强模型的稳定性和预测能力。同时，因为使用 RReliefF 算法筛选后大幅减少了建模所使用的波点数，模型的运算效率也会得到大幅提升。本研究中，RReliefF 算法采用近邻数 k=10，迭代次数为 100 次。

1.4　数据处理

利用 Unscrambler X 10.3 光谱分析软件进行数据处理和 PLSR 模型的建立，利用 MATLAB R2018a (9.4.0.813654) 软件进行 RReliefF 波段优化选择。以决定系数 R^2、交叉验证均方根误差(root mean square error, RMSE)作为模型的优化评价指标。R^2 越接近 1，代表模型的拟合效果越好；RMSE 越小，代表模型的预测能力越强[24]。

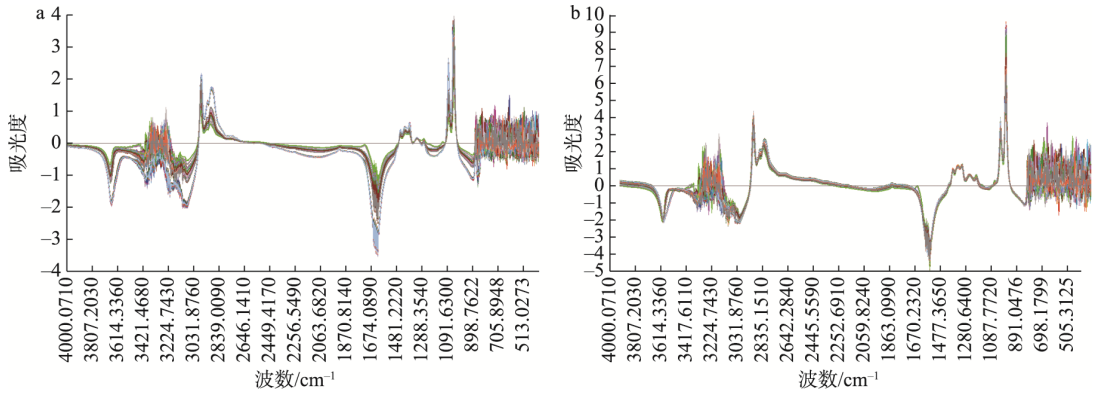
2　结果与分析

2.1　光谱优化结果

实验中收集的基酒原始光谱如图 1a 所示，存在明显噪声及基线漂移等现象。采用标准正态变换和均值中心化预处理后得到的光谱如图 1b 所示。可以明显看出，光谱经预处理后可有效地消除基线和其他背景的干扰，分辨重叠峰，提高分辨率和灵敏度。

2.2　样品集理化数据测定结果

根据 GB/T 10345—2022 中的相应规定，采用色谱法对每组基酒样品中乙酸乙酯、乳酸乙酯、己酸乙酯、甲醇、正丁醇、乙酸共计 6 组指标进行了检测，各指标样品集含量值统计如表 1 所示。本研究将 183 组基酒样品划分为 165 组训练集与 18 组测试集，6 项关键风味物质在两组样品集中的含量分布整体一致性良好。从数据分布来看，各指标训练集与测试集的平均值、最大值和最小值均十分接近，说明样品集划分随机合理，测试集可有效代表整体样品的含量分布特征。从数据范围来看，各指标测试集的数据范围均在训练集的范围之内，盲样验证时不会出现超出模型量程的问题。为后续模型验证的可靠性提供了基础。



注：a. 原始光谱；b. 预处理后的光谱。

图 1　预处理前后的光谱对比

Fig.1　Spectral comparison before and after pretreatment

表 1　各指标样品集理化数据测定结果

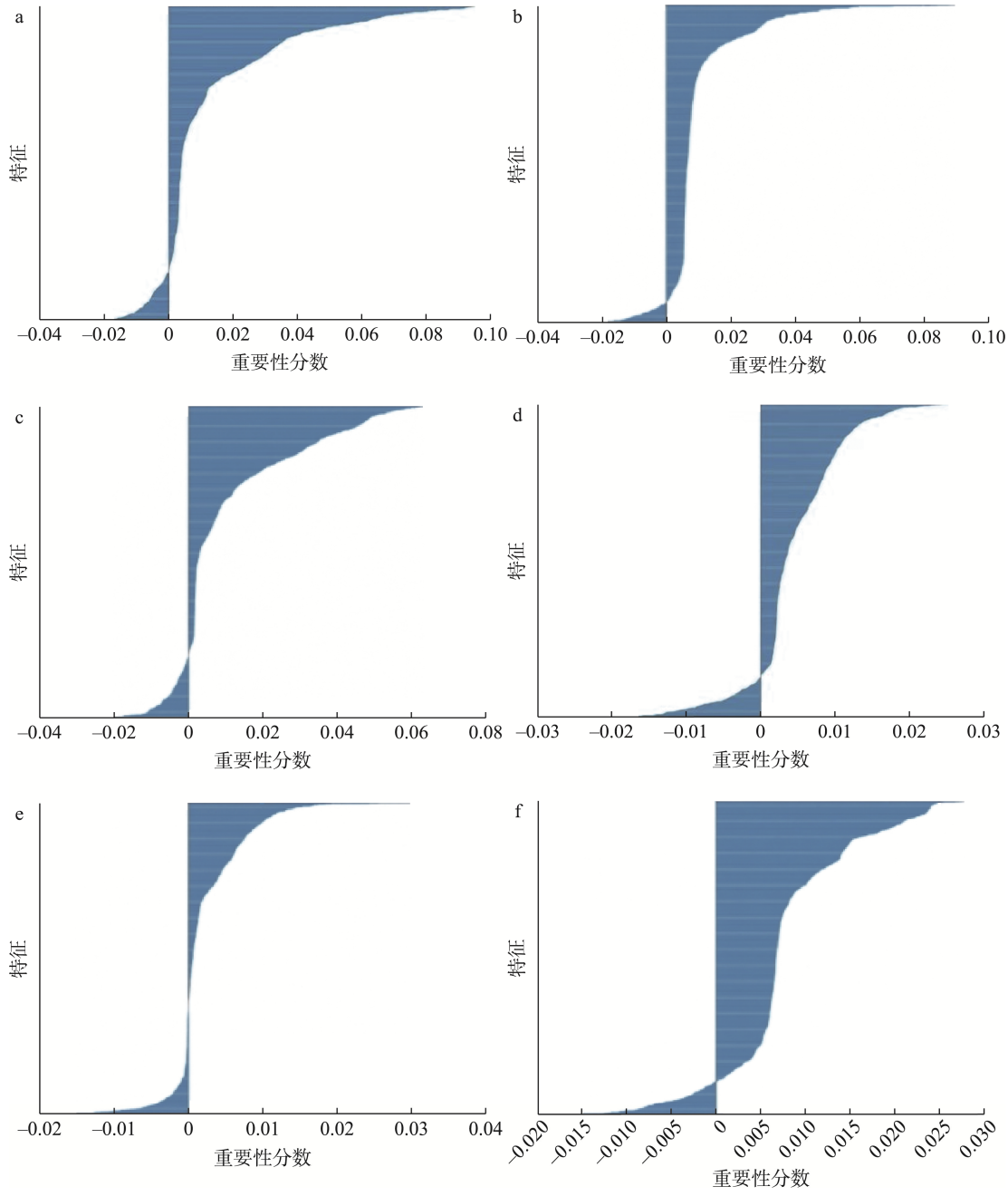
Table 1　Determination results of physicochemical data of each index sample set

指标	样品集	样品数	平均值/(mg/100 mL)	最大值/(mg/100 mL)	最小值/(mg/100 mL)
乙酸乙酯	训练集	165	452.1	809.9	138.3
	测试集	18	451.4	805.9	139.7
乳酸乙酯	训练集	165	121.6	186.6	65.5
	测试集	18	120.7	183.2	66.6
己酸乙酯	训练集	165	547.4	911.2	179.7
	测试集	18	546.3	909.1	185.8
甲醇	训练集	165	15.2	23.5	9.3
	测试集	18	15.3	23.5	10.5
正丁醇	训练集	165	69.4	92.7	48.7
	测试集	18	68.9	91.9	51.5
乙酸	训练集	165	95.6	114.8	80.5
	测试集	18	96.0	112.8	82.6

2.3 波段优化结果

本研究采用 RReliefF 算法基于 Matlab R2018a (9.4.0.813654)软件进行波段筛选。RReliefF 算法会对同一响应值的相邻样本给出不同值的特征给出较低权重，并对不同响应值的相邻样本提供不同值的特征给出较高权重[25]。本研究使用 RReliefF 挑出较高权重的波点，并根据 RMSE 选择效果最好的结果作为优化波段进行最终的建模。

各指标使用 RReliefF 算法排序的特征重要性分数如下图 2 所示；各指标所选优化波段如下表 2 所示。各指标乙酸乙酯、乳酸乙酯、己酸乙酯、甲醇、正丁醇、乙酸分别减少到 148、101、147、187、121、88 个变量点，分别仅占全谱的 15.8%、10.8%、15.7%、20.0%、12.9%、9.4%。由表 2 可知，通过 RReliefF 算法的波段筛选，未选择明显属于噪声区域的波点，在优化模型效果的同时，减少建模所使用的波点数还可以有效预防其他物质对模型预测效果的干扰，并显著提高模型的运算速度。



注: a. 乙酸乙酯; b. 乳酸乙酯; c. 己酸乙酯; d. 甲醇; e. 正丁醇; f. 乙酸。

图 2 各指标使用 RReliefF 算法排序的特征重要性分数

Fig.2 Feature importance scores sorted by the RReliefF algorithm for each indicator

表 2　各指标优化波点结果

Table 2　Optimization wave point results of each indicator

指标	波点选择	对应优化波数范围/cm^{-1}
乙酸乙酯	128~155, 263~264, 307~351, 377~382, 582~598, 657~658, 661, 665~674, 680~686, 688~735, 749~750	3510.187~3406.039, 2989.445~2985.588, 2819.722~2649.999, 2549.708~2530.421, 1758.951~1697.233, 1469.65~1465.792, 1454.22, 1438.791~1404.075, 1380.931~1357.787, 1350.072~1168.777, 1114.774~1110.916
乳酸乙酯	22, 124~127, 150, 153~154, 156~162, 164~166, 168, 171~172, 180, 187, 192~193, 199, 201~209, 211~216, 218	3919.066, 3525.617~3514.045, 3425.326, 3413.754~3409.896, 3402.182~3379.037, 3371.323~3363.608, 3355.893, 3344.321~3340.464, 3309.605, 3282.604, 3263.317~3259.459, 3236.315, 3228.601~3197.742, 3190.027~3170.741, 3163.026
己酸乙酯	132~155, 263~264, 312~332, 334~349, 379~380, 584~598, 657~658, 661, 665~674, 681~685, 690~694, 696~736, 748~750	3487.043~3398.324, 2981.730~2977.873, 2792.720~2715.573, 2707.859~2649.999, 2534.278~2530.421, 1743.521~1689.519, 1461.935~1458.078, 1446.506, 1431.076~1396.360, 1369.359~1353.929, 1334.643~1319.213, 1311.499~1157.205, 1110.916~1103.202
甲醇	124~125, 136~140, 144, 147, 149~154, 156~162, 164, 168, 187, 193, 201~208, 210~216, 220, 222, 224~225, 230, 233~234, 263~264, 340~386, 421~439, 608, 610~616, 656~658, 661, 669~674, 686, 691~700, 720~735, 741~749, 771~772, 806, 808, 812~818, 833~834, 847, 855, 872	3525.617~3521.759, 3479.329~3463.899, 3448.470, 3436.898, 3429.183~3409.896, 3402.182~3379.037, 3371.323, 3355.893, 3282.604, 3259.459, 3228.601~3201.599, 3193.885~3170.741, 3155.311, 3147.596, 3139.882~3136.024, 3116.738, 3105.166~3101.308, 2989.445~2985.588, 2692.429~2514.991, 2379.984~2310.552, 1658.660, 1650.945~1627.801, 1473.507~1465.792, 1454.220, 1423.362~1404.075, 1357.787, 1338.5~1303.784, 1226.637~1168.777, 1145.633~1114.774, 1029.912~1026.055, 894.9048, 887.1902, 871.761~848.6167, 790.7563~786.8989, 736.7537, 705.8948, 640.3198
正丁醇	136~137, 143~154, 164~165, 179~180, 188~191, 199~200, 205, 263~267, 592~595, 657~658, 667~674, 727~735, 749~750, 769, 808, 816~817, 820, 838, 840~841, 853, 857~860, 862, 864, 866, 886, 889~891, 903, 906~909, 913, 916~917, 921, 924~925, 929, 931	3471.614~3467.756, 3444.612~3402.182, 3363.608~3359.751, 3305.748~3301.890, 3271.032~3259.459, 3228.601~3224.743, 3205.457, 2981.73, 1712.663~1701.091, 1461.935~1458.078, 1423.362~1396.360, 1191.921~1161.062, 1107.059~1103.202, 1029.912, 879.4756, 848.6167~844.7593, 833.1873, 763.7549, 756.0403~752.1829, 705.8948, 690.4653~678.8933, 671.1787, 663.4641, 655.7493, 578.6021, 567.03~559.3154, 513.0273, 501.4551~489.8833, 474.4539, 462.8818~459.0244, 443.5952, 432.0229~428.1655, 412.7363, 405.0215
乙酸	132~133, 135~149, 152~155, 264, 319~323, 345~348, 581~599, 656~658, 661~662, 665~674, 681~686, 691~694, 697~736, 748~750, 830, 906, 918	3487.043~3483.186, 3475.471~3421.468, 3409.896~3398.324, 2977.873, 2765.719~2750.29, 2665.428~2653.856, 1755.094~1685.661, 1465.792~1458.078, 1446.506~1442.648, 1431.076~1396.36, 1369.359~1350.072, 1330.785~1319.213, 1307.641~1157.205, 1110.916~1103.202, 794.614, 501.4551

2.4　PLSR 校正模型的建立

使用经过预处理优化后的光谱, 并采用 RReliefF 算法得到的波段, 建立基酒各关键风味物质的 PLSR 定量分析模型。由图 1 所示的光谱图中可见, 波点数 105~247, 603~619, 754~768, 800~935 属于明显的噪声区域, 分析出现噪声的原因可能是白酒基酒中水和乙醇含量极高, 吸收极强, 信号趋于饱和, 导致上述区域信噪比降低, 呈现噪声放大现象[26–28]。已在建立模型时对上述噪声波段予以删除。表 3 对比了使用 RReliefF 算法优化波段建模与使用仅剔除

明显噪声区域后的波段建立模型的评价指标对比, 可以看出, 白酒基酒主要风味指标在采用中红外光谱法仅去除明显噪声区域后的波段建立校正模型时, 效果均不理想。使用优化波段建模时, 各指标的模型效果都有明显提升, RMSE 有不同程度的下降, 各指标乙酸乙酯、乳酸乙酯、己酸乙酯、甲醇、正丁醇、乙酸经波段优化后 RMSE 分别下降了 36.4%、57.2%、37.8%、34.7%、16.2%、11.0%; 各指标的 R^2 也有明显的提升, 模型效果图见图 3。其中乙酸乙酯、乳酸乙酯、己酸乙酯、甲醇、正丁醇的 R^2 经波段优化后均高于 0.9, 乙酸的 R^2 高于 0.75。

表 3　优化波段建模与剔除了噪声的全波段建模效果对比

Table 3　Comparison of modeling effects between optimized band modeling and full-band modeling with noise removed

指标	优化波段		全波段剔除噪声	
	RMSE/(mg/100 mL)	R^2	RMSE/(mg/100 mL)	R^2
乙酸乙酯	8.388	0.998	13.274	0.877
乳酸乙酯	4.232	0.978	9.878	0.863
己酸乙酯	11.812	0.996	18.977	0.855
甲醇	0.814	0.927	1.246	0.765
正丁醇	2.894	0.904	3.452	0.734
乙酸	3.870	0.771	4.347	0.686

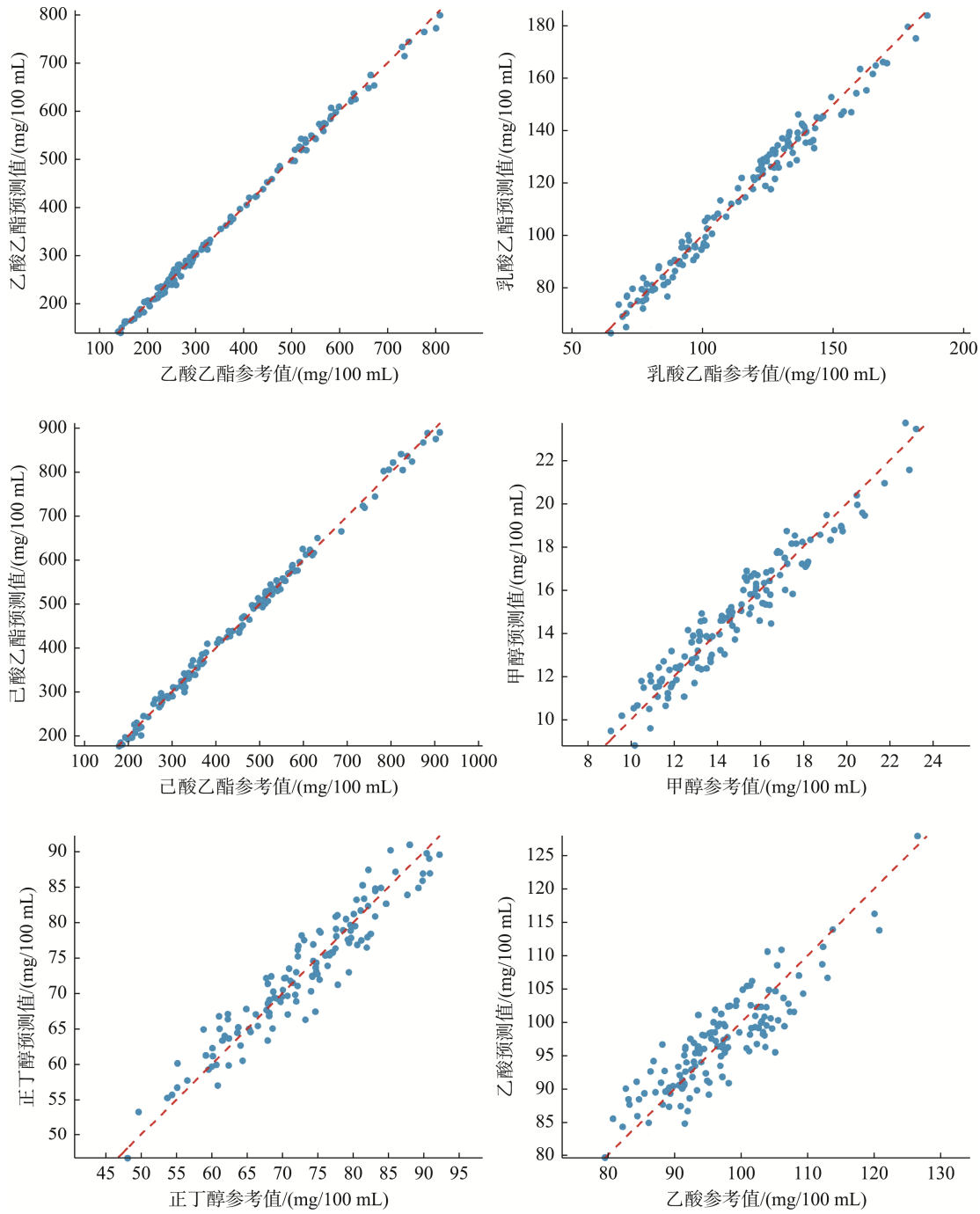


图 3 各指标的模型效果

Fig.3 Model effects of each indicator

2.5 预测效果的验证结果

采用最终优化模型对 18 个盲样进行外部验证，以国标方法测定值为真实值，以中红外光谱法计算值为预测值，计算相对误差，结果见表 4 和表 5。同时计算各指标的平均相对误差情况，结果见表 6。可以看出，各指标的预测值与测定值接近，绝大部分样品的相对误差基本可控制在 5%以内，模型的准确度较高，稳定性较强。

从整体预测性能来看，6 种指标的平均相对误差介于 2.31%~3.61%，均低于 4%，表明模型具有良好的预测精度和稳定性。绝大部分样品的预测值与真实值接近，模型准确度较高，且未出现系统性偏高或偏低的趋势。

进一步分析各指标预测误差与样品含量水平之间的关系可以发现，高含量区间的预测相对误差普遍较小。以乙酸乙酯为例，含量在 300~550 mg/100 mL 范围内的 8 个样品(1、5、9、12、13、14、15、16)，平均相对误差仅为

1.85%; 而含量低于 250 mg/100 mL 的 7 个样品(样品 2、3、4、6、7、11、17), 平均相对误差为 2.58%, 存在一定程度的精度下降。类似趋势在其他指标中也有体现, 这与红外光谱定量分析中“吸光度与浓度线性关系的偏离在低浓度区更为敏感”的规律一致[29−31], 同时也提示训练集中低含量区间样品的代表性可能需要进一步加强。

表 4　测试集样品 1~9 的误差情况

Table 4　Error situation of test set samples 1–9

样品	指标	1	2	3	4	5	6	7	8	9
乙酸乙酯	真实值/(mg/100 mL)	328.2	235.5	155.3	236.1	316.1	228.2	241.3	262.3	320.1
	预测值/(mg/100 mL)	325.5	222.1	162.2	231.4	321.6	234.5	240.2	262.8	315.0
	误差/%	0.83	5.70	4.40	1.97	1.74	2.77	0.49	0.15	1.59
乳酸乙酯	真实值/(mg/100 mL)	133.3	141.2	142.3	153.0	181.5	158.7	156.8	162.6	126.0
	预测值/(mg/100 mL)	127.0	135.5	136.2	146.1	175.2	154.3	147.0	155.4	117.5
	误差/%	4.76	4.05	4.27	4.50	3.49	2.81	6.27	4.44	6.76
己酸乙酯	真实值/(mg/100 mL)	453.4	326.1	377.8	338.3	328.1	278.8	403.3	425.5	325.5
	预测值/(mg/100 mL)	435.4	324.6	389.7	342.5	341.4	287.6	411.3	425.1	310.4
	误差/%	3.99	0.47	3.16	1.24	4.07	3.16	2.00	0.10	4.62
甲醇	真实值/(mg/100 mL)	16.41	19.73	20.49	19.42	14.45	16.50	17.44	22.72	19.76
	预测值/(mg/100 mL)	16.28	18.91	19.93	18.76	14.7	16.88	18.12	21.72	18.89
	误差/%	0.81	4.17	2.71	3.37	1.76	2.32	3.90	2.40	4.39
正丁醇	真实值/(mg/100 mL)	69.75	65.49	84.69	62.28	60.00	70.75	60.16	72.76	67.91
	预测值/(mg/100 mL)	68.79	64.57	82.67	67.10	59.67	69.66	61.15	78.21	68.57
	误差/%	1.37	1.40	2.39	7.74	0.55	1.54	1.64	7.49	0.97
乙酸	真实值/(mg/100 mL)	90.64	91.46	97.58	91.44	103.27	92.24	96.48	91.61	79.53
	预测值/(mg/100 mL)	90.54	90.75	99.43	90.56	98.23	88.57	99.42	96.30	76.60
	误差/%	0.12	0.77	1.89	0.97	4.88	3.99	3.06	5.12	3.77

表 5　测试集样品 10~18 的误差情况

Table 5　Error situation of test set samples 10–18

样品	指标	10	11	12	13	14	15	16	17	18
乙酸乙酯	真实值/(mg/100 mL)	269.2	227.6	324.6	322.1	316.2	440.3	520.2	185.6	253.0
	预测值/(mg/100 mL)	256.1	223.7	311.4	326.5	317.3	437.6	542.1	187.4	262.3
	误差/%	4.84	1.74	4.08	1.37	0.35	0.60	4.22	0.99	3.69
乳酸乙酯	真实值/(mg/100 mL)	142.6	154.0	166.2	136.0	131.1	133.4	165.1	136.4	136.3
	预测值/(mg/100 mL)	133.2	147.3	164.8	128.6	132.9	134.4	161.6	136.8	139.1
	误差/%	6.59	4.34	0.82	5.42	1.35	0.71	2.08	0.30	2.01
己酸乙酯	真实值/(mg/100 mL)	357.9	353.0	275.4	348.7	543.6	524.9	375.7	348.1	429.9
	预测值/(mg/100 mL)	354.7	338.4	296.8	339.7	544.6	545.1	388.0	348.6	438.9
	误差/%	0.88	4.13	7.79	2.56	0.18	3.84	3.29	0.14	2.08
甲醇	真实值/(mg/100 mL)	14.69	15.12	17.24	21.75	17.12	18.08	16.41	19.73	20.49
	预测值/(mg/100 mL)	14.95	15.31	18.19	20.93	17.46	17.05	16.28	18.91	19.93
	误差/%	1.77	1.25	5.51	3.75	1.98	5.70	0.81	4.17	2.71
正丁醇	真实值/(mg/100 mL)	55.17	70.79	68.61	65.28	64.08	68.17	63.63	81.95	74.24
	预测值/(mg/100 mL)	60.14	67.04	65.06	65.02	62.66	69.07	64.44	76.48	72.46
	误差/%	9.02	5.30	5.17	0.39	2.21	1.33	1.28	6.67	2.40
乙酸	真实值/(mg/100 mL)	87.11	91.46	112.35	102.41	83.06	87.95	90.54	94.15	95.25
	预测值/(mg/100 mL)	89.47	95.05	111.33	102.27	88.42	90.92	93.33	98.12	98.38
	误差/%	2.71	3.92	0.91	0.13	6.45	3.37	3.08	4.21	3.29

表 6 各指标的平均相对误差情况
Table 6 Average relative errors of each indicator

指标	平均相对误差/%	指标	平均相对误差/%
乙酸乙酯	2.31	乳酸乙酯	3.61
己酸乙酯	2.65	甲醇	2.97
正丁醇	3.27	乙酸	2.92

3 讨 论

本研究基于中红外光谱技术, 结合RReliefF算法优化PLSR 模型, 实现了基酒中 6 种关键风味物质(乙酸乙酯、乳酸乙酯、己酸乙酯、甲醇、正丁醇、乙酸)的快速定量检测, 各项指标 R^2 达到了 0.771~0.998。这一结果与近年来中红外光谱法在白酒快速检测领域的研究进展高度吻合, 同时进一步提升了检测精度。邓波等[32]在文献中指出, 中红外区域为有机物的基频吸收区域, 具有比近红外区域倍频及组合频吸收强数十倍的特点, 对于低含量风味成分的检测灵敏度更优。本研究中各指标模型的决定系数整体优于相关近红外研究报道, 进一步佐证了这一观点。王凡等[33]利用中红外光谱法结合 PLSR 建立了酱香型白酒中 7 种成分的分析模型, 交叉验证 R^2 为 0.8542~0.9638, 但其对关键脂类风味物质的预测精度明显低于本研究。本研究采用的 RReliefF 算法相较于传统方法具有独特优势: 该算法通过计算特征与连续型目标变量之间的相关性来赋予特征权重, 能够有效识别对预测贡献度高的波段, 优于仅依赖经验或单一统计指标的筛选策略。采用 RReliefF 算法筛选后, 特征波段仅占全谱的 9.4%~20.0%, 大幅减少了模型包含的冗余信息。经优化的模型 RMSE 较仅去除明显噪声区域的全谱建模分别下降了 36.4%、57.2%、37.8%、34.7%、16.2%和 11.0%, 各指标的 R^2 均有明显提升。此外, 经筛选后的波段与各指标主要官能团(如 C-O、O-H、C=O、O-C=O 等)的基频振动吸收峰位置高度吻合, 从分子光谱学机制层面验证了波段选择结果的科学性和可靠性。

值得关注的是, 本研究中 6 个指标模型的 R^2 表现存在一定差异, 其中乙酸的 R^2 (0.771)明显低于乙酸乙酯(0.998)等指标。这一现象在中红外光谱定量分析中并不罕见。分析其原因, 可能与以下因素有关: (1)羧酸的 O-H 伸缩振动在 2500~2700 cm^{-1} 区域常因氢键二聚体作用而呈现弥散的弱吸收峰, 谱带特征不如酯类 C=O(约 1730~1750 cm^{-1})尖锐和稳定, 给模型的波段识别和回归带来了困难; (2)白酒基酒中乙酸的含量水平相对较低且波动范围有限, 训练集含量范围为 80.5~114.8 mg/100 mL, 变异性不足制约了模型的预测能力。类似的问题在相关文献中也有体现, 如王凡等[33]在近红外建模中乙酸的 R^2 同样低于其他酯类指标。这一现象提示, 对于弱吸收、低含量指标的建模, 可能需要: (1)扩大样品采集范围, 有意识地纳入乙酸含量差异更大的基酒样品, 以增强模型的变异性覆盖能力; (2)探索多元散射校正、导数等更精细的光谱预处理方法, 以增强弱吸收峰的分辨率; (3)尝试非线性建模方法(如支持向量回归、人工神经网络等), 以更好地拟合乙酸光谱响应与浓度之间可能存在的非严格线性关系。除此之外, 在 18 组盲样测试结果中, 正丁醇有 3 个样品(样品 4、8、10)的相对误差超过 5%, 分别为 7.74%、7.49%和 9.02%, 属于个别偏离较大的情况。分析其可能原因: 首先, 从含量水平来看, 这 3 个样品的正丁醇真实值分别为 62.28、72.76 和 55.17 mg/100 mL, 在训练集含量范围(48.7~92.7 mg/100 mL)中处于中低水平, 而中低浓度区域的光谱响应信号相对较弱, 信噪比较低, 容易受到基线波动和噪声干扰, 导致预测偏差增大。其次, 正丁醇的特征吸收主要来源于 C-OH 伸缩振动(1100~1000 cm^{-1} 区域), 该区域同时存在其他醇类物质(如甲醇、异丁醇、异戊醇等)的吸收重叠, 基体干扰较为复杂。当某些样品中其他醇类组分的相对含量发生波动时, 可能对正丁醇的特征波段信号产生不同程度的叠加或掩盖效应, 从而引入预测误差。尽管存在上述个别偏离情况, 正丁醇整体平均相对误差仍仅为 3.27%, 18 个盲样中有 15 个(占比 83.3%)的相对误差在 5%以内, 模型的整体预测性能仍然可靠。针对个别误差偏大的问题, 后续可通过增加训练集中正丁醇中低浓度区间(50~75 mg/100 mL)的样品代表性, 强化模型在该区域的校正能力。

4 结 论

本研究基于中红外光谱技术, 结合光谱预处理和 RReliefF 算法优化 PLSR 模型, 可以应用于白酒的实际生产过程检测。在盲样测试中, 各指标预测相对误差基本控制在 5%以内, 检测精度满足生产质量控制要求, 可应用于实际生产过程中的质量监测、基酒分级, 帮助企业提升生产效率、降低成本。后续研究可进一步扩大样品来源, 纳入不同香型、不同产区、不同工艺的基酒样品, 构建通用性更强、适用范围更广的快速检测模型。

参考文献

[1] 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(3): 764–768.
Zhou Jun, Yang Yang, Yao Yao, et al. Application of mid-infrared spectroscopy in the analysis of key indexes of strong flavour Chinese spirits base liquor [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(3): 764–768.

[2] Tian Lei, Xu Pei, Qin Ji, et al. Insights into the flavor profiles and key aroma-active compounds of Sichuan Xiaoqu Qingxiangxing *baijiu* across distilling stages [J]. Foods, 2025, 14(16): 2814.

[3] 廖丽, 彭厚博, 胥佳, 等. 基于中红外光谱技术构建浓香型原酒酯类指标定量模型[J]. 酿酒科技, 2025(11): 127–133.
Liao Li, Peng Houbo, Xu Jia, et al. Construction of quantitative model for

esters in Nongxiang crude liquor based on Fourier transform mid-infrared spectroscopy [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2025(11): 127–133.

[4] 郝保红, 雷振河, 郝海泳, 等. 大曲清香型新产原酒感官特征与理化指标分析研究[J]. 酿酒科技, 2024(10): 91–95, 100.
Hao Baohong, Lei Zhenhe, Hao Haiyong, et al. Study on sensory characteristics and physicochemical indexes of newly-produced daqu Qingxiang crude liquor [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2024(10): 91–95, 100.

[5] 翁诗甫, 徐怡庄. 傅里叶变换红外光谱分析[M]. 3 版. 北京: 化学工业出版社, 2016: 337–341, 348.
Weng Shifu, Xu Yizhuang. Fourier transform infrared spectrum analysis [M]. 3rd ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2016: 337–341, 348.

[6] Zhou Rui, Chen Xiaoming, Huang Min, et al. ATR-FTIR spectroscopy combined with chemometrics to assess the spectral markers of irradiated baijiu and their potential application in irradiation dose control [J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2023, 302: 123162.

[7] 丁力杰, 侯花宁, 李利荣, 等. 中红外光谱法快速检测浓香型原酒中的酯类含量[J]. 食品安全质量检测学报, 2025, 16(14): 105–112.
Ding Lijie, Hou Huaning, Li Lirong, et al. Rapid determination of ester content in Nongxiang crude Baijiu by mid-infrared spectroscopy [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2025, 16(14): 105–112.

[8] Chen Di, Yang Kangzhuo, He Zhanglan, et al. Extensive “heart-cut” 2D GC-MS/olfactometry, complementary to aroma extract dilution analysis, odor activity value evaluation, and aroma recombination study, to assess the contribution of “five-grain” derived compounds to Baijiu aroma [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2026, 74(8): 7000–7012.

[9] 马凤丽, 庞臻, 曾英, 等. 红外光谱在白酒检测中的应用研究进展[J]. 酿酒科技, 2022(5): 103–107.
Ma Fengli, Pang Zhen, Zeng Ying, et al. Research progress in the application of infrared spectroscopy in Baijiu detection [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2022(5): 103–107.

[10] 彭厚博, 廖丽, 甘巧, 等. 基于中红外光谱技术对浓香型原酒中酸类成分快检模型的构建[J]. 中国酿造, 2025, 44(3): 66–70.
Peng Houbo, Liao Li, Gan Qiao, et al. Construction of a model for the rapid detection of acids in strong-flavor original Baijiu based on mid-infrared spectroscopy technology [J]. China Brewing, 2025, 44(3): 66–70.

[11] Li Chao, Yang Fan, Han Ying, et al. Corrigendum to “Aldehyde metabolism in Maotai-flavor Baijiu: insights from integrated metagenomic and metaproteomic analyses” [Food Res. Int. 221(Part 3) (2025) 117518] [J]. Food Research International, 2026, 225: 117954.

[12] MIramontes E, Pérez-Martínez J, López-García M, et al. Mid-infrared spectroscopy combined with PLS-R for quantitative determination of volatile esters in wine [J]. Food Chemistry, 2019, 287: 220–226.

[13] Ono T, Nakamura S, Tanaka T. Rapid quantification of organic acids in Japanese sake using mid-infrared attenuated total reflection spectroscopy [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2020, 91: 103528.

[14] Cozzolino D. Infrared spectroscopy for the quality control of alcoholic beverages: a review [J]. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2024, 64(12): 3702–3712.

[15] 宋艳, 杨洋, 张学平, 等. 中红外光谱技术结合竞争性自适应重加权算法快速分析白酒风味组分[J]. 中国酿造, 2022, 41(12): 230–234.
Song Yan, Yang Yang, Zhang Xueping, et al. Rapid analysis of flavor component of Baijiu by mid-infrared spectroscopy combined with CARS method [J]. China Brewing, 2022, 41(12): 230–234.

[16] 刘石雪, 王秀菊, 李静, 等. 中红外光谱技术在白酒检测中的应用[J]. 酿酒科技, 2020(3): 41–46, 51.
Liu Shixue, Wang Xiuju, Li Jing, et al. Application of mid-infrared spectroscopy in Baijiu detection [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2020(3): 41–46, 51.

[17] 唐苏冰, 袁奇, 杨亚娇, 等. 基于近红外光谱及定量建模技术分析浓香型白酒原酒酒精度[J]. 中国酿造, 2025, 44(11): 259–265.
Tang Subing, Yuan Qi, Yang Yajiao, et al. Analysis of alcohol content of original liquor of strong-flavor Baijiu based on near-infrared spectroscopy and quantitative modeling technology [J]. China Brewing, 2025, 44(11): 259–265.

[18] 张宇, 吴继红, 黄明泉, 等. 近红外光谱结合 PLS-DA 快速识别白酒基酒品质[J]. 食品科学, 2020, 41(18): 202–207.
Zhang Yu, Wu Jihong, Huang Mingquan, et al. Rapid identification of base liquor quality by near-infrared spectroscopy combined with PLS-DA [J]. Food Science, 2020, 41(18): 202–207.

[19] 李娟, 王莉, 胡小许, 等. 中红外光谱技术在白酒风味物质检测中的应用研究进展[J]. 食品与发酵工业, 2021, 47(12): 236–242.
Li Juan, Wang Li, Hu Xiaoxu, et al. Research progress on application of mid-infrared spectroscopy in detection of flavor substances in Baijiu [J]. Food and Fermentation Industries, 2021, 47(12): 236–242.

[20] 甄珍, 刘军, 张健. 光谱预处理方法对白酒中红外定量模型的影响[J]. 分析测试学报, 2022, 41(5): 689–695.
Zhen Zhen, Liu Jun, Zhang Jian. Effects of spectral preprocessing methods on mid-infrared quantitative model of Baijiu [J]. Journal of Instrumental Analysis, 2022, 41(5): 689–695.

[21] 陈雪, 杨晓波, 王鹏. RReliefF 特征选择结合光谱技术在食品成分检测中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2023, 43(3): 823–828.
Chen Xue, Yang Xiaobo, Wang Peng. Application of RReliefF feature selection combined with spectroscopy in food composition detection [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2023, 43(3): 823–828.

[22] 陈涛, 程凡, 骆业巧, 等. 基于全二维气相色谱-飞行时间质谱法解析不同年份余香型白酒风味物质组成[J]. 酿酒科技, 2026, 385(7): 65–73, 79.
Chen Tao, Cheng Fan, Luo Yeqiao, et al. Analysis of flavor compounds in yu-flavor Baijiu of different years based on comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2026, 385(7): 65–73, 79.

[23] 孙雍荣, 权志熙, 丁林志, 等. 基于三维荧光光谱的原酒品质评价模型建立[J]. 光谱学与光谱分析, 2024, 44(12): 3391–3398.
Sun Yongrong, Quan Zhixi, Ding Linzhi, et al. A model for evaluating the

quality of original liquor using three-dimensional fluorescence spectra [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2024, 44(12): 3391–3398.

[24] Xu Pei, Wu Yijiao, Tian Lei, et al. Application of fortified Daqu to optimize the core fermentation microbial flora and improve the ester profile of N ongxiangxing Baijiu [J]. LWT, 2025, 223: 117711.

[25] 廖丽, 文静, 邹永芳, 等. 中红外光谱快检技术在浓香型原酒风味分析中的应用研究[J]. 酿酒科技, 2024(4): 36–45.
Liao Li, Wen Jing, Zou Yongfang, et al. Application of mid-infrared spectroscopy rapid detection technology in the flavor analysis of Nongxiang Baijiu [J]. Liquor-Making Science & Technology, 2024(4): 36–45.

[26] Zhou Futao, Wu Youli, Zeng Xiaoyong, et al. Authenticity verification of alcoholic beverages in IoT environment through fluorescence hyperspectral technology and machine learning [J]. Journal of Circuits, Systems and Computers, 2024, 33(17): 2450314.

[27] Wu Yijiao, Xu Pei, Qiu Xianping, et al. Inoculation of *Zaopei* with biofortification: inducing variation in community structure and improving flavor compounds in *Nongxiangxing baijiu* [J]. Journal of Food Science, 2024, 89(8): 4730–4744.

[28] Li Xingyue, Wang Zi, Bai Jialin, et al. The composition and content of trace compounds in the aroma of Chinese liquor by Fourier transform infrared (FTIR) difference spectroscopy [J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2026, 351: 127462.

[29] 廖鸿. 标准化助推白酒泸州产区高质量发展的研究建议[J]. 标准科学, 2024(10): 82–87.
Liao Hong. Research and suggestions on standardization to promote the high-quality development of liquor producing areas in Luzhou [J]. Standard Science, 2024(10): 82–87.

[30] Ding Linzhi, Sun Yongrong, Wang Xin, et al. Establishment of original liquor discrimination using fluorescence spectroscopy combined with chemometric analysis and its application in Chinese mild-flavor liquors [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2023, 123: 105507.

[31] Berthouex P M, Gan D. A model for the precision of measurements at low concentrations [J]. Water Environment Research, 1993, 65(6): 620–629.

[32] 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 Bo, Shen Caihong, Ding Hailong, et al. Advances in the application of infrared spectroscopy in the Chinese Baijiu industry [J]. China Brewing, 2020, 39(9): 13–17.

[33] 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 & Technology, 2026, 42(2): 322–330.

(责任编辑: 韩晓红 蔡世佳)