

近红外光谱技术在水分无损检测领域的应用

蒋吉^{1,2}, 刘雯^{1,2}, 李虹雨^{1,2}, 马炜懿^{1,2}, 周杰³, 吴永忠³, 谭超^{1*}

¹宜宾学院过程分析与控制四川省高校重点实验室, 四川 宜宾

²宜宾学院材料与化学工程学院, 四川 宜宾

³宜宾天原集团股份有限公司, 四川 宜宾

收稿日期: 2025年11月30日; 录用日期: 2025年12月23日; 发布日期: 2025年12月29日

摘要

水分是物质的基础性关键指标, 其含量对多行业领域具有至关重要的影响。传统水分检测方法存在操作繁琐、耗时长且具有破坏性等问题, 难以满足现代复杂样品质量控制的快速、无损和大规模检测需求。本文系统综述了近红外光谱技术在多个领域的水分快速无损检测中的研究进展, 通过分析了该技术与偏最小二乘法、主成分回归、人工神经网络等化学计量学方法结合构建的水分分析模型。展示出近红外光谱技术在多个领域的水分检测中均表现出高效、准确与环保的优势, 尤其适用于复杂样品下的在线分析与发展应用, 可为后续各领域开展水分无损检测相关研究提供理论参考。

关键词

近红外光谱, 水分检测, 化学计量学, 发展应用

Application of Near-Infrared Spectroscopy in the Field of Non-Destructive Moisture Detection

Ji Jiang^{1,2*}, Wen Liu^{1,2}, Hongyu Li^{1,2}, Weiyi Ma^{1,2}, Jie Zhou³, Yongzhong Wu³, Chao Tan^{1*}

¹Key Laboratory of Process Analysis and Control of Sichuan Universities, Yibin University, Yibin Sichuan

²College of Materials and Chemical Engineering, Yibin University, Yibin Sichuan

³Yibin Tianyuan Group Co., Ltd., Yibin Sichuan

Received: November 30, 2025; accepted: December 23, 2025; published: December 29, 2025

*通讯作者。

文章引用: 蒋吉, 刘雯, 李虹雨, 马炜懿, 周杰, 吴永忠, 谭超. 近红外光谱技术在水分无损检测领域的应用[J]. 材料化学前沿, 2026, 14(1): 1-9. DOI: 10.12677/amc.2026.141001

Abstract

Moisture is a fundamental and critical parameter in substances, with its content exerting a profound influence across multiple industries. Traditional moisture detection methods suffer from drawbacks such as cumbersome procedures, time-consuming processes, and destructiveness, making it difficult to meet the demands for rapid, non-destructive, and large-scale detection in modern quality control of complex samples. This paper systematically reviews recent advances in the rapid and non-destructive detection of moisture using near-infrared (NIR) spectroscopy across various fields. By analyzing the integration of this technology with chemometric methods—such as partial least squares, principal component regression, and artificial neural networks—for constructing moisture analysis models, the study demonstrates that NIR spectroscopy offers significant advantages in efficiency, accuracy, and environmental friendliness for moisture detection. It proves particularly suitable for online analysis and practical deployment in complex sample scenarios, thereby providing a valuable theoretical reference for future research on non-destructive moisture detection in diverse fields.

Keywords

Near-Infrared Spectroscopy, Moisture Detection, Chemometrics, Development and Application

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

近红外光谱技术(Near-Infrared Spectroscopy, NIRS)是一种利用物质在近红外光区(780~2500 nm)的光学特性(吸收、反射与透射)进行快速、无损分析的方法。其原理在于探测含氢基团(如 C-H、O-H、N-H)的分子振动信号[1],通过分析物质的吸收光谱并与化学计量学方法结合,从而实现对样品成分的无损、快速定量与定性分析;当前,该技术已被广泛应用于农产品[2][3]、工业过程[4][5]、医疗诊断[6][7]以及科学研究[8][9]等多个领域,并正朝着与人工智能深度融合及仪器微型化、智能化的方向持续发展。而水(H₂O)分子中含有大量的-OH,在 1400~1550 nm 和 1900~2000 nm 附近有明显的吸收峰,通过检测这些特征吸收峰的强度和位置,分析检测样品在这些特征波长下对近红外光的吸收强度,并与已知水分含量的标准方法结合化学计量学,建立数学关联模型,即可实现对未知样品水分的快速、无损定量分析[10]。

2020 版《中国药典》规定传统的水分检测方法有烘干法[11];卡尔·费休法[12]、减压干燥法[13]、甲苯法[14]、气相色谱法[15]等,其中,烘干法适用于不含或少含挥发性成分的药品;卡尔·费休法中的卡尔费休液应遮光,密封,阴凉干燥处保存,临用前应标定滴定度;减压干燥法适用于含有挥发性成分的昂贵药品。虽然传统的检测方法具有一定的准确性,但存在着操作繁琐、检测时间长、需要消耗化学试剂等缺点。

近红外光谱技术作为一种无损、快速、非侵入性的分析手段,在快速检测、在线分析以及实时监测等方面拥有巨大的应用潜力,通过近红外光谱结合化学计量学来建立水分模型,定量分析和定性识别水分和其他物质含水量的能力,使近红外光谱技术在水分及其他理化性质检测等方面得到广泛运用[16]-[18]。本文以近红外光谱技术为基础,结合化学计量学方法[19][20],为检测中药材水分技术的发展提供参考。

2. 近红外光谱法在食品水分快速检测中的应用

近红外光谱技术作为一种无损快速检测的方法,在食品安全检测[21][22]、食品成分评估[23][24]、食品质量检测等[25][26]方面展现出巨大潜力。相比于传统的化学分析方法,近红外光谱技术不仅提高了检测效率,还降低了样品破坏性和环境污染,为食品行业的质量控制提供了更加经济和可持续的解决方案。该技术有望在食品生产、储存、流通及消费端得到更广泛的应用,为食品安全与质量保障提供更智能化和精准化的技术支持。

如表 1,曲正义等[27]基于近红外光谱结合 PLS 算法对大力参中水分含量进行快速无损测定同时建立定量模型,以烘干法测定 267 份样品水分含量作为参考值,随机选择 194 份样品作为校正样品集,73 份样品作为验证集,建立 PLS 模型的校正集相关系数 R^2 为 0.7643, RMSECV 为 0.516, RMSEC 为 0.49;以 PLS 法建立的校正模型对 73 份验证集样品进行分析,水分的 NIR 预测值与实测值的相关系数 R^2 为 0.8326, RMSEP 为 0.508,分析结果为:在 95%的置信区间, $P(0.605)$ 大于 0.05,说明近红外光谱法能够快速准确地测定大力参样品中的水分含量。张会梅等[28]利用 NIRS 对麦门冬药材中水分的含量进行了测定,以烘干法测定 90 批麦门冬的水分含量作为参考值,利用近红外光谱仪采集麦门冬漫反射光谱并结合 PLS 建立定量校正模型。建立的定量模型内部交叉验证相关系数 R 为 0.9811,交叉验证误差均方差(RMSECV)为 0.131,12 批验证集样品的参考值与预测值经统计学 t 检验, P 为 0.95 大于 0.05,说明所建立的麦门冬水分定量模型可快速预测其水分值,该方法快速、简便,结果准确,为中药材质量的实时监测提供数据支持。曾海松等[29]采集 60 批次不同香橼药材的近红外光谱图,以高效液相色谱法测定香橼中柚皮苷含量、甲苯法测定香橼药材含水量,结合 PLS 选择 9 个样品作为验证集,结果表明:柚皮苷含量的校正集的相关系数大于 0.9,且 RMSEC、RMSECV、RMSEP 值较小,且相互接近,RSEP 值小于 15%;香橼药材含水量的校正集的相关系数 R 为 0.9182,其 RMSEC、RMSECV、RMSEP 值较小且相互接近,RSEP 值小于 10%,说明香橼中柚皮苷近红外模型有待提高,而含水量的近红外模型比较可靠,且具有较好的预测能力,可以满足中药生产过程分析要求。周文婷等[30]建立了巴戟天药材中水分含量的近红外定量模型,可快速测定巴戟天中水分含量,采集物质的近红外光谱数据后,结合偏最小二乘法建立近红外水分定量分析模型,所建立的校正模型的内部交叉验证决定系数 R 为 0.9855,内部交叉验证均方差 RMSEC 为 0.4027, RMSECV 校正均方差为 0.169, RMSEP 预测均方差为 0.180。表明所建立的定量分析模型稳定、准确,可快速进行巴戟天药材中水分含量的测定。何锦漪等[31]基于近红外光谱检测在复杂环境下挂面生产过程水分,根据不同外界环境下近光谱的波动探究近红外检测面片与挂面水分的影响因素,用线性回归与偏最小二乘法 2 种方法建模并比较模型性能,所建立最佳模型预测误差为 0.0116,相关系数 R 为 0.9992。采用多元线性回归和支持向量回归 2 种方法分别建立温度补偿模型,所建立的补偿模型误差为 0.0878,相关系数 R 为 0.9895,证明了在挂面生产过程中利用近红外光谱技术进行水分快速检测的可行性。为食品样品在复杂条件下的成分检测提供一种方法。

近红外光谱技术作为一种高效、快速且无损的现代分析检测技术,在食品领域,近红外光谱技术已成功应用于多种药材和加工食品的水分检测。从建模方法来看,偏最小二乘法(PLS)是使用最广泛的算法,结合多种光谱预处理方法(如 MSC、SNV、导数处理等),能有效消除基线漂移和散射干扰。不同研究中模型的决定系数 R^2 多高于 0.8,显示出模型具有较强的预测能力。值得注意的是,光谱预处理方法的选择对模型性能影响显著,例如在麦门冬和巴戟天研究中,采用 SNV 结合导数处理能进一步提升模型的稳定性和精度。此外,样本的代表性与数量也是模型泛化能力的关键,如大力参与研究中使用 267 份样品,模型表现稳健。未来可进一步探索深度学习算法在复杂食品体系中的适用性,以提升模型的非线性拟合能力。

该技术凭借其无需复杂前处理、可实现多组分同时分析、便于集成于生产线实现在线检测等突出优势,近红外光谱技术正持续推动食品分析向智能化、绿色化方向发展,成为保障食品品质与安全、提升

产业效能的重要工具。

Table 1. Rapid determination of moisture in food products by near-infrared spectroscopy
表 1. 近红外光谱技术在食品水分的快速检测

应用	波数与波长范围	数据处理与建模方法	准确性	参考文献
大力参水分含量快速无损测定	12,500~4000 cm ⁻¹	PLS、MSC First Derivative	R ² = 0.8326	[27]
麦门冬药材水分含量测定	12,000~4000 cm ⁻¹	PLS、SNV + First Derivative + Norris	R = 0.9811	[28]
香橼药材中水分含量检测	4000~12,000 cm ⁻¹	MD、FD、 FD + MSC、PLS	R = 0.9182	[29]
巴戟天药材水分含量检测	10,000~4000 cm ⁻¹	MSC + Second derivative、PLS	R = 0.9855	[30]
复杂环境下挂面生产过程水分 测定	1000~1799 nm	CARS、PLS	R = 0.9992	[31]

3. 近红外光谱法在农业水分快速检测中的应用

中国作为全球最重要的农业国家之一，在农产品总产量和农业总产值上位居世界第一，粮食安全作为农业的核心支柱，面临着日益严峻的挑战，包括土壤质量退化、农作物品质的波动、霉菌毒素污染等。传统农业检测手段往往依赖于色谱等实验室分析技术，这些方法的结果尽管精确，但存在操作复杂和时间消耗大等问题。因此，近红外光谱技术实现快速、无损和精准的农业检测成为当前农业科学研究的重要方向[32]。

如表 2，王梅等[33]对 5 个品种 138 份新鲜红辣椒进行光谱采集，将预处理后的光谱数据与水分含量进行 PLS 建模，水分含量检验集、校正集和预测集模型的相关系数 R 均大于 0.9，决定系数 R² 分别为 0.9187、0.9774 和 0.8621，且残留预测偏差都在 2 以上，说明模型拟合效果较好，预测性和准确度高。说明基于近红外光谱模型快速检测新鲜红辣椒中水分含量和辣椒素含量的方法可行，为其他食品的水分检测提供一种新方法。宾金荣等[34]基于近红外光谱技术对发酵饲料中水分进行快速检测，采用改进最小二乘法(MPLC)回归分析建立预测模型，发酵饲料水分的验证相关系数 R 为 0.967，预测标准误差(SEP)为 0.342，说明该模型预测结果良好，能用于发酵饲料水分的检测。张静等[35]利用便携式近红外检测水稻水分含量，以 SPA-PLSR 模型预测效果更好，预测集相关系数 R_p² 和预测集均方根误差 RMSEP 分别为 0.8103、0.412。本研究验证了便携式近红外快速、无损检测水稻中水分含量的可行性，为水稻收获、贮藏等过程水分含量的测定提供技术支持，为后续便携式光谱仪的开发提供参考。姚力等[36]运用偏最小二乘法(PLS)分析建立槟榔水分含量定量模型，校正集决定系数 R² 为 0.9942，校正误差均方根(RMSEC)为 0.50；验证集决定系数 R² 为 0.9867，预测误差均方根(RMSEP)为 0.68。结果表明，该方法简便、快速、安全、实用、准确，适用于含高纤维素、木质素物料的水分含量的快速测定。张莘莘等[37]采用手持式近红外光谱仪建立了一种快速检测水飞蓟籽中水分的快速检测方法，依据偏最小二乘法(PLS)结合交叉验证建立定量模型，建立相关的水分模型，校正集相关系数 R² 为 0.8118，RMSECV 为 0.5926，RMSEC 为 0.5278，结果表明建立的水分定量分析模型，各模型的参数较优，预测效果较好，精密度较高。利用模型可对水飞蓟籽的水分进行快速测定，为水飞蓟籽样品采购提供了一定的技术参考。

农业样品成分复杂、形态多样，对近红外建模提出更高要求。本研究所述案例中，便携式近红外设备的使用显著提升了现场检测的可行性，如水稻、水飞蓟籽等研究。在建模策略上，MSC 结合 PLS 仍是

主流，但在高纤维素、木质素物料(如槟榔)中，多元散射校正(MSC)与导数处理联合使用能更有效地提取光谱信息。值得注意的是，样本状态(如新鲜红辣椒)与干燥程度会显著影响光谱响应，因此在建模时需充分考虑样本的物理状态差异。未来建议加强跨品种、跨产地的通用模型研究，以提升农业近红外检测的普适性。

近红外光谱技术在农业领域的应用已取得显著成效，涵盖了土壤成分快速分析、农作物质量评估及农产品溯源等多个方面。其无损检测、高效分析及环境友好的特性，使其为农业安全和农业发展提供了关键作用。此外，便携式近红外仪设备的发展，使得该技术在农业生产中的应用前景更加广阔。

Table 2. Rapid determination of moisture in agricultural materials by near-infrared spectroscopy
表 2. 近红外光谱技术在农业水分的快速检测

应用	波数与波长范围	数据处理与建模方法	准确性	参考文献
新鲜红辣椒中水分含量检测	4000~11,000 cm ⁻¹	MSC、PLS	R ² = 0.8621	[33]
发酵饲料中水分快速检测	1100~2500 nm	MSC、PLS	R = 0.967	[34]
快速检测水稻中水分含量	901~1650 nm	MC-PLS、MSC、PLSR	R _p ² = 0.8103	[35]
高纤维素、木质素中水分含量检测	12,000~4000 cm ⁻¹	Mf、Dbl、PLS	R ² = 0.9867	[36]
水飞蓟籽中水分含量检测	950~1650 nm	1st+SNV+DTD、PLS	R ² = 0.8118	[37]

4. 近红外光谱法在化工水分快速检测中的应用

在原油及其副产物的加工过程中，目标物质经常进行色谱或质谱等传统检测[38] [39]，虽能保持较高的检测精度，但难以满足实际生产过程中产品理化性质的实时监测及工艺参数的实时调控等关键需求。相较于传统方法等离线检测技术产生的时间滞后性，制约了生产过程中最优控制技术发展的原因，近红外光谱技术可快速获取待测物质的光谱数据，并建立化学计量学模型，能够快速且准确地测定原油理化特性等关键指标，为炼化过程的实时优化控制提供数据支撑。

如表 3，杜传斌等[40]基于近红外光谱对液压油水分含量检测，建立 PLS 模型，预处理采用二阶微分结合均值中心化方法，通过交互验证，确定主因子数为 6，模型 R_c 为 0.989，SEC 为 4.655，SEP 为 5.332，经验证，模型达到精度的要求，结果表明，模型通过验证，预测精度较高，符合水分检测相关标准的要求。近红外光谱技术在化工领域内将会得到进一步的应用与发展。贾浩等[41]通过小波分解重建算法提高近红外煤质水分检测精度，采用小波分解重建算法对 1300~2400 nm 光谱区间进行降噪及去基线预处理，对重建光谱进行偏最小二乘建模，其建模结果明显优于其他方法，RMSEC 达到 0.06%，RMSEP 达到 0.27%，相关性系数 R 达到 0.995，且证明模型稳定性较好，显著提高了近红外煤质水分的检测精度，为检测煤质水分提出一种新的方法。杨晓丽等[42]将竞争自适应重加权采样(CARS)与区间偏最小二乘回归(iPLS)相结合的变量筛选建模方法 CARSiPLS，用于烟煤中水分与挥发分的近红外光谱测定，结果表明 CARSiPLS 可以显著减少变量数，挥发分建模变量从 1557 个减少至 15 个，水分建模变量从 1557 个减少至 317 个，模型预测 MAPE、RMSEP 减小，误差也减小，进而提高模型预测精度。周义游[43]对收集的煤样进行水分含量定标值的测定，并进行 O、M 两通道的近红外光谱数据的采集，结果表明，确定 O、M 通道最优模型均为原始光谱建模，O 通道相关系数 R_p 为 0.9723，RMSEP 为 3.0556；M 通道相关系数 R_p 为 0.9652，RMSEP 为 3.3458。结果表明 NIRS 分析技术在煤中水分检测比传统的方法有着独有的优势。但是，由于不同煤质的物理、化学特性差异较大，对煤中水分的回归建模和预测精度带来了一定的难度。程欲晓等[44]基于近红外光谱技术用偏最小二乘回归法(PLS)交叉验证建立分析模型水分模型，水分模型决定系数 R_c² 为 0.9899，校正标准偏差(RMSEC)为 0.0842，说明其预测效果较好，可用于原油中水

分含量的预测。游晓辉等[45]对所收集到的 48 个样品的水分含量分别采用 NIR 法和卡尔费休法进行测定, 结合最小偏二乘法建立萃取剂中水分含量的定量校正模型, 内部交叉验证决定系数 R^2 为 0.9939, 内部交叉验证均方差为 0.0355。结果表明, 对萃取剂中水分含量的快速测定提供一种方法。

化工样品(如液压油、煤、原油)成分复杂、干扰因素多, 对模型的稳健性与抗干扰能力要求极高。本研究显示, 变量筛选方法(如 CARS、iPLS)能显著提升模型精度与效率, 如杨晓丽等通过 CARSiPLS 将变量数从 1557 个降至 15 个, 模型误差显著降低。此外, 小波分解(WD)、二阶微分等预处理方法在煤质和原油水分检测中表现出良好的去噪与基线校正效果。值得注意的是, 不同煤种、油品的物化性质差异仍是建模的主要挑战, 未来需进一步研究迁移学习或模型融合策略, 以增强模型在不同工况下的适应性。

随着在线分析技术的发展, 近红外光谱技术正在助力石油化工领域, 随着光纤探头式近红外光谱仪器的不断改进和完善, 构建更深度的学习模型, 该技术将在成品油质量抽检和管道运输油品的质量分析中得到广泛应用, 将进一步提升石油化工近红外光谱技术的可靠性。

Table 3. Rapid determination of moisture in chemical substances by near-infrared spectroscopy
表 3. 近红外光谱技术在化工水分的快速检测

应用	波数与波长范围	数据处理与建模方法	准确性	参考文献
液压油水分检测	12,500~4000 cm^{-1}	SD + MC、PLS	$R_c = 0.989$	[40]
煤质水分检测	1300~2400 nm	WD、ART、PLS	$R = 0.995$	[41]
烟煤水分近检测	4000~10,000 cm^{-1}	CARSiPLS	—	[42]
煤中水分检测	900~1700 nm	MD、BP、PLS	$R_P = 0.9723$	[43]
原油中水分检测	4000~12,000 cm^{-1}	MD、PCR、MLR、PLS	$R_c^2 = 0.9899$	[44]
萃取剂中水分检测	4000~10,000 cm^{-1}	Norris、PLS	$R^2 = 0.9939$	[45]

5. 近红外水分检测的挑战与展望

尽管近红外光谱技术在水分无损检测中展现出显著优势, 其在走向实际应用过程中仍面临一系列共性挑战。模型的稳健性受环境波动影响, 常导致同一模型在不同设备或时间下性能下降, 在一个特定条件下(如特定仪器、特定批次原料、固定环境)建立的校准模型, 极易因条件变化而失效。例如, 检测不同产地、不同品种的食品, 或因季节变化导致原料本身物理性状(如颗粒大小、颜色)改变时, 原有模型的预测精度会显著下降。为此研究者提出了模型传递算法(如 DS、PBS、SBC)以及标准化采样流程加以改进[46]。模型的传递性受仪器差异, 在一台光谱仪上建立的优质模型, 往往无法直接应用于另一台同型号甚至同批次的仪器上。这是由于仪器间存在难以避免的光学元件、检测器等差异, 导致采集的光谱产生“漂移”, 从而使模型预测产生系统性误差。这在需要多台设备协同作业的工业化场景中尤为致命。水在近红外区域的吸收峰虽然明显, 但其信息易被掩盖和干扰。水分可能以自由水、结合水、结晶水等多种形态存在, 它们在近红外区的吸收特征存在细微差别, 单一的校准模型难以覆盖所有形态。待测样本本身(如粮食中的淀粉、蛋白质、脂肪, 药品中的 API 和辅料, 化工材料中的高分子链等)构成了复杂的“基质”。这些成分的吸收峰与水的吸收峰相互重叠, 形成复杂的光谱背景, 极大地增加了从“混合物”信号中精准提取“水分”信息的难度。对于粉末或颗粒状样品, 水分分布可能并不均匀。用于建模的少量实验室样本能否代表生产线上海量的、动态变化的物料, 是一个巨大的挑战, 取样位置的微小差异可能导致光谱的巨大波动。近红外技术始终无法完全脱离传统基准方法。近红外是一种间接测量技术, 其模型必须依靠传统方法(如卡尔·费休法、烘干失重法)提供的“真值”进行校准。因此, 近红外模型的准确度上限直接受限于基准方法的精度和可靠性。与传统方法相比, 近红外的优势在于速度和在线能力, 但其

绝对精度通常难以超越经典的实验室方法。在需要极高精度的法定检验或仲裁分析中,传统方法仍是“金标准”。这种依存关系要求我们在构建近红外模型时,必须对基准方法有深刻理解,并确保其数据质量。

面对检测挑战,研究人员发展出了多种前沿策略,旨在提升模型的智能化、自适应和鲁棒性。使用先进的光谱预处理算法能有效消除因样本物理性质(如颗粒度、表面散射)引起的光谱差异,从而“提纯”出与化学成分相关的吸收信息。与传统化学计量学方法相比,使用卷积神经网络等深度学习模型能够自动从原始光谱中学习并提取更深层次、更稳健的特征,对背景干扰和噪声具有更强的抵抗能力[47]。在建模初期,尽可能纳入不同批次、不同产地、不同季节、不同工艺条件下的样本,构建一个覆盖范围更广的“全局模型”[48]。同时将其与过程参数(如温度、湿度、压力、流量)进行融合建模。例如,将温度作为一个变量输入到模型中,让模型学习温度与光谱响应、水分含量之间的耦合关系,从而自动补偿温度带来的影响[49]。其次,将水分在近红外区的已知物理吸收特性(如特定吸收波段)作为先验知识,嵌入到数据驱动的机器学习模型中,约束模型的解空间。这种“白盒”与“黑盒”的结合,能有效提升模型的物理意义和外推预测能力,特别是在处理样本基质变化时表现更优。建立严格的基准方法操作规范,对用于建模的“真值”数据进行多重复测,评估其不确定度,从源头上保证校准数据的可靠性。

近红外光谱水分检测技术正从一种“可用”的工具,向“可靠”、“智能”的方向演进。其所面临的挑战根植于其间接测量的本质和复杂的应用环境。未来的发展趋势将不再是单纯追求算法的复杂,而是深度融合物理化学机理、高性能硬件(如稳定性更强的仪器)、智能算法以及严谨的化学计量学实践,形成一个闭环的、自适应的检测系统。唯有通过这种系统性的解决方案,近红外光谱技术才能在严苛的工业生产中真正发挥其巨大潜力,成为过程分析与质量控制的中流砥柱。展望未来,随着深度学习、联邦学习与边缘计算等技术的不断成熟,近红外水分检测正朝着更智能、便携与鲁棒的方向发展,有望为工业4.0与智慧农业提供更加坚实的技术支撑。

6. 结果与讨论

近红外光谱技术作为一种无需复杂样品前处理、操作便捷的无损分析技术,已广泛应用于石油化工、农业、食品、环境监测及医药等多个领域。在食品质量评价中,水分含量是影响其贮存稳定性、加工品质及药效成分保留的关键参数。水分变异系数过高易导致投料不准,进而影响制剂质量与临床疗效。为此,本研究系统综述近红外光谱技术结合化学计量学方法,系统构建了基于主成分回归(PCR)、偏最小二乘法(PLS)和人工神经网络(ANN)的水分含量定量分析模型,以实现对水分的快速、准确检测的研究进展。此外,多源数据融合策略正逐渐成为提升近红外光谱分析性能的重要发展方向。该技术通过整合拉曼光谱、荧光光谱、质谱等其他分析平台的信息,可在特征层或决策层进行有效互补,从而突破单一光谱在复杂体系识别中的局限性。结合人工智能与深度学习算法,可进一步优化特征筛选与模型参数,增强模型的泛化能力,为复杂样本的高精度、高效率分析提供新的解决路径。

基金项目

2025 年省级大学生创新创业训练计划项目(S202510641044)。

参考文献

- [1] 冯明春,刘文清,徐亮,等.傅里叶变换红外光谱仪的性能分析研究[J/OL].激光与光电子学进展,2025:1-22.
<https://link.cnki.net/urlid/31.1690.tn.20250923.1338.084>,2025-10-13.
- [2] Farouk, F., Essam, S., Abdel-Motaleb, A., El-Shimy, R., Fritzsche, W. and Azzazy, H.M.E. (2022) Fast Detection of Bacterial Contamination in Fresh Produce Using FTIR and Spectral Classification. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **277**, 121248. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121248>

- [3] 刘广志. 近红外光谱技术在农产品品质快速检测中的应用研究[J]. 食品安全导刊, 2025(11): 84-87.
- [4] 刘晓营, 米琨, 周蕴宇, 等. 近红外在线监测对次氯酸钠生产质量的提升[J]. 中国氯碱, 2025(7): 22-26+63.
- [5] 王育华. 近红外等离激元纳米激光器的设计与制备[D]: [硕士学位论文]. 广州: 广东工业大学, 2025.
- [6] Iskra, S. and Paravlić, A. (2025) Assessing the Feasibility of Near-Infrared Spectroscopy for Evaluating Physiological Exercise Thresholds. *Scientific Reports*, **15**, Article No. 33349. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-14920-1>
- [7] Qu, X., Ji, B., Gong, H., Wang, G., Gao, L., Zhang, J., *et al.* (2025) Dual-Emissive Near-Infrared Fluorogenic Probe with Enhanced Cellular Uptake Capability for Sensitive Tracking of Cellular Polarity. *Chinese Chemical Letters*, **36**, Article 110766. <https://doi.org/10.1016/j.cclet.2024.110766>
- [8] 陈世超. 基于红外光谱技术的甲烷检测系统研究[D]: [硕士学位论文]. 淮南: 安徽理工大学, 2025.
- [9] Zhang, X., Zhang, Z., Shao, Y., Song, D., Yan, W., Li, K., *et al.* (2025) Robust Open-Set Drug Identification Model Using Near-Infrared Spectroscopy with Interval Synergistic Feature Information Selection. *Microchemical Journal*, **217**, Article 114920. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2025.114920>
- [10] 游晓辉, 金孟悦, 张盼, 等. 近红外光谱技术在聚醚产品水分表征中的应用[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2025(5): 71-75.
- [11] 邱伟. 烘干法水分测定仪的系统设计与优化[D]: [硕士学位论文]. 长沙: 湖南大学, 2017.
- [12] 汪婷. 卡尔·费休库仑法测量天然气水分的研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 中国石油大学(北京), 2018.
- [13] 唐欣. 甘草浸膏减压干燥行为与质量研究[D]: [硕士学位论文]. 南昌: 江西中医药大学, 2023.
- [14] 杨月, 田树兴, 邹兰, 等. 甲苯法测定香附药材水分的不确定度评定[J]. 品牌与标准化, 2025(4): 262-264.
- [15] 胡昆. 基于气相色谱法结合化学计量学识别微量植物油的研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 中国人民公安大学, 2023.
- [16] 白钢, 侯媛媛, 丁国钰, 姜民, 高洁, 张铁军, 刘昌孝. 基于中药质量标志物构建中药材品质的近红外智能评价体系[J]. 药学学报, 2019, 54(2): 197-203.
- [17] Kang, R., Ma, T., Tsuchikawa, S., Inagaki, T., Chen, J., Zhao, J., *et al.* (2024) Non-Destructive Near-Infrared Moisture Detection of Dried Goji (*Lycium barbarum* L.) Berry. *Horticulturae*, **10**, Article 302. <https://doi.org/10.3390/horticulturae10030302>
- [18] Wang, Y., Li, M., Xu, L., Gao, C., Wang, C., Xu, L., *et al.* (2025) Monitoring of the Physicochemical Properties and Aflatoxin of *Aspergillus Flavus*-Contaminated Peanut Kernels Based on Near-Infrared Spectroscopy Combined with Machine Learning. *Foods*, **14**, Article 32186. <https://doi.org/10.3390/foods14132186>
- [19] Anggraeni, A.S., Windarsih, A., Warmiko, H.D., *et al.* (2026) Non-Targeted Metabolomics Analysis of Curcuma Rhizomes Species from Different Origins Using Lc-Orbitrap HRMS Combined with Chemometrics. *Biochemical Systematics and Ecology*, **124**, Article 105140. <https://doi.org/10.1016/j.bse.2025.105140>
- [20] 赵玉霞. 基于紫外-近红外光谱结合化学计量学对青稞酒的鉴别研究[D]: [硕士学位论文]. 西宁: 青海师范大学, 2025.
- [21] 李梅, 智丽慧. 近红外光谱技术快速检测奶酪及其制品的核心质量指标[J]. 食品安全质量检测学报, 2025, 16(15): 51-56.
- [22] Qi, W., Jiang, Q. and Erihemu, E. (2025) Research Progress on the Application of Near-Infrared Spectroscopy in Liquid Food Quality Testing. *Beni-Suef University Journal of Basic and Applied Sciences*, **14**, Article No. 75. <https://doi.org/10.1186/s43088-025-00660-8>
- [23] Casarin, P., Giopato Viell, F.L., Good Kitzberger, C.S., dos Santos, L.D., Melquiades, F. and Bona, E. (2025) Determination of the Proximate Composition and Detection of Adulterations in Teff Flours Using Near-Infrared Spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **334**, Article 125955. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2025.125955>
- [24] 罗浪琴. 基于近红外光谱技术对核桃仁可溶性蛋白、脂肪和单宁含量检测研究[D]: [硕士学位论文]. 阿拉尔: 塔里木大学, 2023.
- [25] 杜洁. 基于红外光谱技术的三七粉品质快速检测研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 南京林业大学, 2024.
- [26] 杨新娅. 近红外光谱技术在血府逐瘀口服液君药质量评价中的应用[D]: [硕士学位论文]. 济南: 山东大学, 2024.
- [27] 曲正义, 逢世峰, 王兆森, 等. 基于近红外光谱技术的大力参含水量快速无损检测[J]. 时珍国医国药, 2020, 31(11): 2653-2655.
- [28] 张会梅, 刘雪, 李德坤, 等. 近红外光谱技术快速测定麦门冬药材中水分的含量[J]. 天津中医药大学学报, 2018,

- 37(5): 416-419.
- [29] 曾海松, 李伟, 顾东华. 香橼药材水分和柚皮苷近红外快速定量分析模型的建立[J]. 中国药师, 2019, 22(9): 1753-1756.
- [30] 周文婷, 王海霞, 林萍, 卢慧娟, 姬生国. 近红外光谱法对巴戟天药材中水分含量的快速测定[J]. 湖北农业科学, 2014, 53(21): 5253-5255+5259.
- [31] 何锦漪, 林颢, 齐雅静, 等. 复杂环境下基于近红外光谱的挂面生产过程水分快速检测方法研究[J]. 中国粮油学报, 2024, 39(9): 205-212.
- [32] 陈巍, 王卫和. 近红外光谱检测技术在农业与食品分析中的应用分析[J]. 现代食品, 2023, 29(6): 143-145.
- [33] 王梅, 潘牧, 刘辉, 等. 近红外光谱技术快速检测新鲜红辣椒中水分含量和辣椒素含量的研究[J]. 保鲜与加工, 2024, 24(9): 134-138+146.
- [34] 宾金荣, 邢宏博, 肖小云, 等. 发酵饲料中水分、粗蛋白质、酸溶蛋白、乳酸近红外快速检测方法的建立[J]. 中国饲料, 2024(23): 170-175.
- [35] 张静, 郭榛, 王思花, 等. 便携式近红外和可见光光谱仪检测水稻水分含量方法比较研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2023, 43(7): 2059-2066.
- [36] 姚力, 李宗军, 朱门君, 等. 近红外漫反射光谱法快速检测高纤维素、木质素物料水分含量[J]. 食品与机械, 2024, 40(2): 69-73.
- [37] 张莘莘, 石文杰, 吉桂珍, 等. 手持式近红外光谱仪快速检测水飞蓟籽中水飞蓟素含量和水分[J]. 中国食品添加剂, 2022, 33(8): 202-207.
- [38] 张悦, 陈仕兵, 蒋文军. 气相色谱-质谱在石油行业的应用[J]. 精细石油化工, 2025, 42(1): 57-61.
- [39] 万伟, 袁蕙, 马苏甜, 等. 吹扫捕集/气相色谱-质谱法测定石油炼制工艺废催化剂浸出液中挥发性有机物[J]. 环境化学, 2022, 41(11): 3695-3704.
- [40] 杜传斌, 梁圣伟, 李健聪. 浅析近红外光谱在液压油水分含量分析中的应用[J]. 石油化工应用, 2016, 35(4): 137-140.
- [41] 贾浩, 付强, 韩婵娟, 等. 小波分解重建算法提高近红外煤质水分检测精度[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(11): 3010-3013.
- [42] 杨晓丽, 何琼. CARSiPLS 用于烟煤中水分与挥发分的近红外光谱测定[J]. 理化检验(化学分册), 2017, 53(6): 636-640.
- [43] 周义游. 基于近红外光谱的煤中水分测量研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 华北电力大学(北京), 2022.
- [44] 程欲晓, 张继东, 邵敏, 等. 近红外光谱分析原油中水分和硫含量模型的建立及验证[J]. 理化检验(化学分册), 2020, 56(6): 621-626.
- [45] 游晓辉, 初白凤, 何雯, 等. 近红外光谱法快速测定萃取剂中水分含量[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2019, 17(5): 78-82.
- [46] 王佳欣. 基于近红外光谱的猕猴桃可溶性固形物含量和硬度预测模型传递方法研究[D]: [硕士学位论文]. 咸阳: 西北农林科技大学, 2024.
- [47] 彭闻萍. 近红外光谱技术联合深度卷积神经网络的圣女果内部品质检测[D]: [硕士学位论文]. 南昌: 江西科技师范大学, 2024.
- [48] 王冠男. 基于近红外光谱技术的蓝莓产地鉴别方法研究[D]: [硕士学位论文]. 大庆: 黑龙江八一农垦大学, 2025.
- [49] 韦怡, 倪力伟, 许启跃, 等. FTIR 光谱结合 CNN 测定不同温度下的反应组分含量[J]. 化学研究与应用, 2025, 37(9): 2539-2546.