



Ôn tập

Đánh giá về học máy cho quang phổ cận hồng ngoại

Wenwen Zhang ^{1,†}, Liyanaarachchi Chamara Kasun ^{1,†}, Qi Jie Wang^{1,2} , Yuanjin Zheng ¹ và Chí Bình Lâm ^{1,*} ¹ Trường Kỹ thuật Điện và Điện tử, Đại học Công nghệ Nanyang, Singapore 639798, Trưởng Khoa học Vật lý và Toán học² Singapore, Đại học Công nghệ Nanyang, Singapore 637371, Singapore * Thư từ: ezplin@ntu.edu.sg † Các tác

giả này đã đóng góp như nhau cho công trình này.

Tóm tắt: Phân tích quang phổ hồng ngoại của các chất là một kỹ thuật đo không xâm lấn có thể sử dụng trong phân tích. Mặc dù mục tiêu chính của nghiên cứu này là cung cấp đánh giá về các thuật toán học máy (ML) đã được báo cáo để phân tích quang phổ cận hồng ngoại (NIR) từ các phương pháp học máy truyền thống đến kiến trúc mạng sâu, chúng tôi cũng cung cấp các chế độ đo NIR khác nhau, thiết bị, phương pháp tiền xử lý tín hiệu, v.v. Đầu tiên, bốn chế độ đo khác nhau có sẵn trong NIR được xem xét, các loại thiết bị NIR khác nhau được so sánh và cung cấp bản tóm tắt về các phương pháp phân tích dữ liệu NIR. Thứ hai, các bộ dữ liệu quang phổ NIR công khai sẽ được thảo luận ngắn gọn, kèm theo các liên kết được cung cấp. Thứ ba, trình bày các thuật toán tiền xử lý dữ liệu và lựa chọn tính năng được sử dụng rộng rãi đã được báo cáo cho quang phổ NIR. Sau đó, phần lớn các phương pháp học máy truyền thống và kiến trúc mạng sâu thường được sử dụng sẽ được đề cập. Cuối cùng, chúng tôi kết luận rằng việc phát triển tích hợp nhiều thuật toán học máy một cách hiệu quả và nhẹ nhàng là một hướng nghiên cứu quan trọng trong tương lai.

Từ khóa: học máy; quang phổ cận hồng ngoại; hấp thụ ánh sáng; đo lường không xâm lấn; kiến trúc sâu sắc



Trích dẫn: Zhang, W.; Kasun, LC; Vương, QJ; Zheng, Y.; Lâm, Z. Đánh giá về học máy cho quang phổ cận hồng ngoại. *Cảm biến* 2022, 22, 9764. <https://doi.org/10.3390/s22249764>

10.3390/s22249764

Biên tập viên học thuật: Yuhua Liu và

Vương Tiểu Dương

Đã nhận: ngày 5 tháng 11 năm 2022

Được chấp nhận: ngày 5 tháng 12 năm 2022

Đã xuất bản: ngày 13 tháng 12 năm 2022

Lưu ý của nhà xuất bản: MDPI giữ thái độ trung lập đối với các khiếu nại về quyền tài sản trong các bản đồ và tổ chức đã xuất bản sự liên kết.



Bản quyền: © 2022 của các tác giả.

Được cấp phép MDPI, Basel, Thụy Sĩ.

Bài viết này là một bài viết truy cập mở được phân phối theo các điều khoản và điều kiện của Creative Commons

Giấy phép ghi công (CC BY) (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Giới thiệu

Hồng ngoại (IR) là bức xạ điện từ được chia thành ba loại dựa trên bước sóng của chúng: (1) hồng ngoại gần (NIR) được định nghĩa là bước sóng trong khoảng 0,78 đến 2,5 μm ; (2) hồng ngoại trung bình (MIR) được định nghĩa là bước sóng trong khoảng từ 2,5 đến 25 μm ; và (3) hồng ngoại xa (FIR) được định nghĩa là bước sóng trong khoảng từ 25 đến 1000 μm . Khi một chất tiếp xúc với ánh sáng NIR từ nguồn sáng, các liên kết phân tử hoạt động hồng ngoại sẽ tương tác với ánh sáng để tạo ra sự hấp thụ phổ NIR. Sự hấp thụ của các phân tử trong vùng phổ hồng ngoại là kết quả của sự thay đổi trạng thái dao động hoặc quay hoặc sự chuyển đổi giữa các mức năng lượng. Các chuyển đổi năng lượng bao gồm các chuyển đổi tần số cơ bản (tương ứng với các chuyển đổi trạng thái dao động phân tử giữa các mức năng lượng lân cận), các chuyển đổi tần số kép (tương ứng với các chuyển đổi trạng thái dao động phân tử được phân tách bằng một hoặc nhiều mức năng lượng) và các chuyển đổi tần số kết hợp (tương ứng với các chuyển đổi đồng thời). mức năng lượng của hai trạng thái dao động của phân tử). Tất cả các dải hấp thụ cận hồng ngoại được nhân lên và kết hợp với tần số của dải hấp thụ hồng ngoại trung cơ bản (2000 4000 cm^{-1}). Trong số đó, nhóm XH chứa hydro (như CH, OH, NH, v.v.) là nhóm chiếm ưu thế. Ngoài ra còn có thông tin liên quan đến các nhóm khác (chẳng hạn như C=C, C=O, v.v.) nhưng cường độ của chúng yếu. Các nhóm này là thành phần chất hữu cơ quan trọng, bước sóng và cường độ hấp thụ NIR của các nhóm khác nhau hoặc cùng một nhóm trong các môi trường hóa học khác nhau là khác biệt đáng kể. Quang phổ NIR chứa rất nhiều thông tin về cấu trúc và thành phần, rất hữu ích để đánh giá các đặc tính hóa học và vật lý của các chất.

Phổ IR là biểu đồ hai chiều của các giá trị hấp thụ IR và các bước sóng IR tương ứng. Phổ IR chứa ba loại đỉnh riêng biệt: (1) cơ bản; (2) âm bội; và (3) sự kết hợp [1]. Việc phổ NIR chứa cả ba loại cực đại nhưng phổ MIR chỉ chứa cực đại cơ bản là điểm khác biệt chính giữa phổ NIR và phổ MIR. Các liên kết cộng hóa trị phân tử có thể được xác định bằng cách sử dụng các bước sóng IR bị hấp thụ vì phổ MIR rất đơn giản và mỗi liên kết cộng hóa trị phân tử được biểu thị bằng một nhóm bước sóng IR riêng biệt. Ngược lại, rất khó để xác định trực tiếp liên kết cộng hóa trị phân tử trong phổ NIR vì mỗi loại liên kết cộng hóa trị phân tử có thể được biểu diễn bằng sự kết hợp của ba loại đỉnh.

Vì tín hiệu điện tử FIR có năng lượng thấp nên việc thiết kế nguồn sáng và máy dò có thể gặp nhiều thách thức. Thông thường, việc tăng năng lượng của nguồn sáng FIR sẽ dẫn đến tăng nhiệt độ và cần các vật liệu đặc biệt để xử lý nhiệt độ [2].

Phần lớn công việc này tập trung vào MIR do những thách thức của FIR và NIR. NIR được sử dụng với các thuật toán phân tích dữ liệu để tìm hiểu mối quan hệ giữa thành phần mẫu và phổ NIR, trái ngược với MIR, trong đó thành phần mẫu có thể được xác định bằng cách kiểm tra trực quan các đỉnh trong phổ MIR [3,4].

Thành phần của một mẫu, chẳng hạn như hàm lượng protein, chất béo, vitamin và chất xơ, có thể được sử dụng để xác định chất lượng của nó. Ngành công nghiệp thực phẩm có thể sử dụng dữ liệu này để xác định các mặt hàng thực phẩm cao cấp. Tương tự, ngành y tế có thể sử dụng thành phần của mẫu để xác định mức độ ác tính của khối u hoặc ngành nông nghiệp có thể sử dụng nó để đánh giá chất lượng phân.

Theo hiểu biết tốt nhất của chúng tôi, đây là bài đánh giá đầu tiên tập trung vào chủ đề học máy cho quang phổ hồng ngoại. Mặc dù phần lớn các bài viết đánh giá đều nghiên cứu chủ đề rộng hơn về trí tuệ nhân tạo (AI) cho quang tử học, nhưng phạm vi bao phủ của các thuật toán học máy được sử dụng trong quang phổ hồng ngoại là tương đối hạn chế.

2. Hệ thống phân tích quang phổ NIR dựa trên máy học

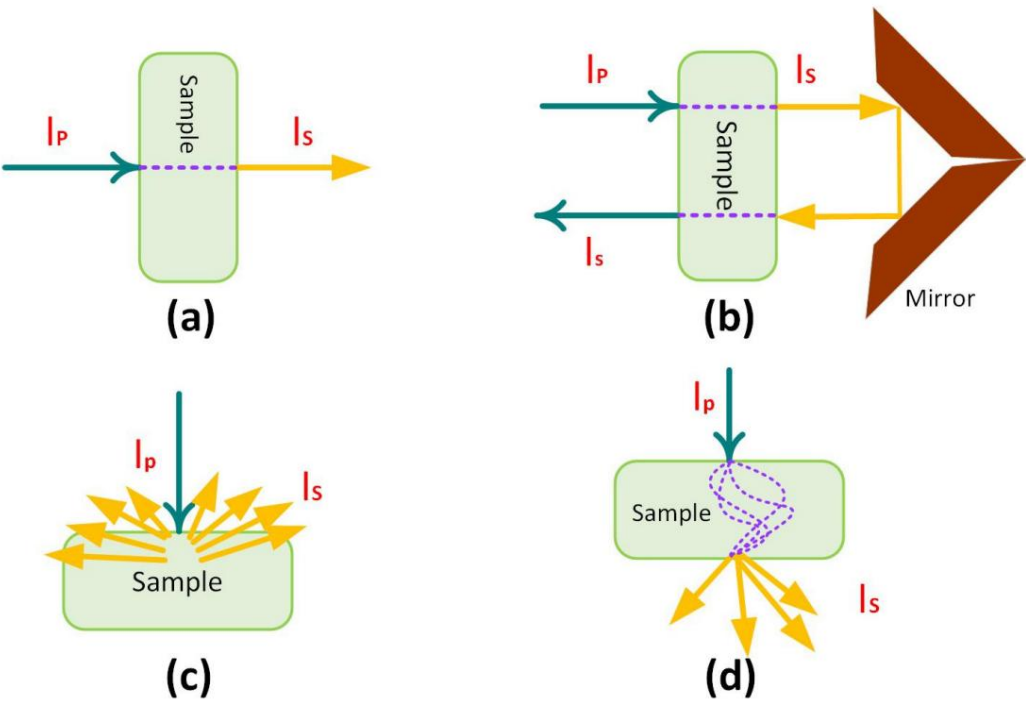
Quang phổ NIR được củng cố bởi ba trụ cột: (1) nguyên tắc cơ bản; (2) dụng cụ; và (3) phân tích dữ liệu. Như được minh họa trong Hình 1a-d, nguyên tắc cơ bản là các chế độ đo khác nhau có sẵn trong NIR: (a) độ truyền qua; (b) độ truyền sáng; (c) phản xạ khuếch tán; và (d) độ truyền qua môi trường tán xạ [5].

Vật liệu mẫu xác định chế độ đo được sử dụng để tạo ra quang phổ. Chế độ truyền qua được sử dụng cho các mẫu khí, chất lỏng hoặc bán rắn, trong đó các mẫu được đặt trong cuvet và NIR được áp dụng ở một bên và độ truyền qua NIR được đo ở mặt kia. Không đặt mẫu vào cuvet, chế độ truyền ánh sáng được sử dụng cho các mẫu bán rắn. Ở chế độ này, mẫu được xử lý bằng NIR ở một mặt, xuyên qua mẫu và được phản xạ qua mẫu bằng cách sử dụng gương phản xạ bằng thép không gỉ hoặc vàng để đo độ truyền qua NIR. Do đó, ở chế độ truyền qua, đường đi của ánh sáng dài gấp đôi ở chế độ truyền qua. Chế độ phản xạ khuếch tán được sử dụng cho các mẫu rắn trong đó NIR được áp dụng trên một mặt của mẫu và đo độ tán xạ và hấp thụ NIR. Chế độ tương tác được áp dụng cho các mẫu rắn, trong đó phép đo độ hấp thụ được thực hiện ở khoảng cách lớn hơn so với tỷ lệ NIR.

Do đó, các phép đo độ hấp thụ này không bị ảnh hưởng bởi tín hiệu tới NIR nhưng chúng có thể bị ảnh hưởng bởi tín hiệu NIR xung quanh. Ngược lại, các chế độ đo độ phản xạ truyền và phản xạ khuếch tán tìm thấy thành phần trên bề mặt của mẫu.

Vì có nhiều loại thiết bị NIR khác nhau nên việc lựa chọn sử dụng loại nào phụ thuộc vào yêu cầu ứng dụng, chi phí, tỷ lệ tín hiệu trên nhiễu và tốc độ đo. Thiết bị NIR có thể được phân loại như sau: (1) điốt phát sáng (LED) [6]; (2) bộ lọc điều chỉnh quang âm (AOTF) [7]; (3) quang học tán sắc [8]; và (4) Biến đổi Fourier [9]. Những thiết bị ít tốn kém nhất là những thiết bị sử dụng đèn LED và mỗi đèn LED tạo ra bước sóng NIR riêng biệt. Các thiết bị dựa trên AOTF hoạt động nhanh vì chúng không chứa bất kỳ bộ phận chuyển động nào. Các thiết bị dựa trên AOTF tạo ra NIR có các bước sóng khác nhau bằng tinh thể làm từ TeO₂, tần số vô tuyến (RF) và ánh sáng đa sắc. Tinh thể điều chỉnh chiết suất của tinh thể bằng tín hiệu RF để thay đổi bước sóng của ánh sáng đa sắc thành giá trị mong muốn. Một cách tử lốm phản xạ, được sử dụng trong quang học phân tán

dụng cụ, làm thay đổi bước sóng của ánh sáng đa sắc. Hệ thống đầu tiên của NIR máy quang phổ sử dụng quang học tán sắc, không có khả năng tạo ra NIR chính xác bước sóng. Giao thoa kế và biến đổi Fourier được sử dụng trong các thiết bị dựa trên biến đổi Fourier để phân chia ánh sáng đa sắc thành sóng NIR có bước sóng khác nhau. Ưu điểm chính của các thiết bị dựa trên biến đổi Fourier là chúng có tỷ lệ tín hiệu trên tạp âm thấp. Ưu điểm và nhược điểm của các loại thiết bị NIR khác nhau là được tổng hợp trong Bảng 1.



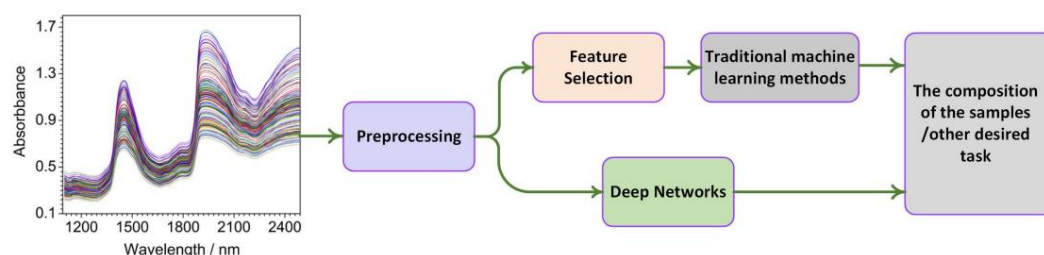
Hình 1. (a) Chế độ đo độ truyền qua, được sử dụng với các chất khí và chất bán rắn được đặt trong một cuvet; (b) chế độ đo độ phản xạ, được sử dụng với chất bán rắn không có cuvet; (c) chế độ đo phản xạ khuếch tán, được sử dụng với chất rắn nơi thực hiện phép đo từ tỷ lệ NIR; (d) độ truyền qua môi trường tán xạ.

Bảng 1. So sánh các thiết bị NIR khác nhau.

Dụng cụ	Trị giá	Tốc độ	Tỷ lệ tín hiệu
Dẫn đến	rất thấp	vừa phải	vừa phải
AOTF	vừa phải	rất nhanh	thấp
phân tán	thấp	chậm	cao
Fourier	cao	nhanh	rất thấp

Phân tích dữ liệu là trụ cột ánh xạ các giá trị độ hấp thụ hoặc độ truyền qua NIR tới đặc tính mẫu mong muốn. Trong bài viết đánh giá này, chúng tôi chủ yếu nhấn mạnh nghiên cứu về dữ liệu phân tích bằng cách sử dụng máy học.

Như được minh họa trong Hình 2, thuật toán ML ánh xạ các giá trị hấp thụ NIR tới mức mong muốn đầu ra. Thuật toán ML bao gồm các giai đoạn đào tạo và thử nghiệm. Mô hình học thuật toán ML các tham số trong giai đoạn huấn luyện bằng cách sử dụng các giá trị hấp thụ ánh sáng làm đầu vào và kết quả mong muốn làm đầu ra. Dựa trên các giá trị hấp thụ ánh sáng được cung cấp, thuật toán ML dự đoán kết quả mong muốn trong giai đoạn thử nghiệm.



Hình 2. Kiến trúc máy học cho quang phổ NIR.

Thuật toán ML có thể được phân loại thành phương pháp học máy truyền thống và kiến trúc mạng sâu. Các phương pháp học máy truyền thống có ít hoặc không có lớp ẩn, chẳng hạn như bình phương tối thiểu một phần (PLS), lân cận gần nhất K (KNN), phân tích thành phần chính (PCA), v.v., trong khi kiến trúc mạng sâu có nhiều lớp ẩn như AlexNet, GoogLeNet, v.v. Các phương pháp học máy truyền thống yêu cầu chuyên gia thiết kế các tính năng phù hợp, trong khi kiến trúc mạng sâu sử dụng các tính năng thô. Ngược lại với kiến trúc mạng sâu, hiệu suất của các phương pháp học máy truyền thống phụ thuộc vào các tính năng được thiết kế. Do đó, kiến trúc mạng sâu đang trở nên phổ biến hơn vì không cần phải có chuyên gia để thiết kế các tính năng.

Các phương pháp học máy truyền thống sử dụng thuật toán lựa chọn tính năng để tìm ra các tính năng thú vị. Do đó, các phương pháp học máy truyền thống thường có dạng kiến trúc đường ống, trong đó việc học tính năng được sử dụng để chọn các tính năng thú vị, theo sau là các biến hồi quy hoặc bộ phân loại. Ngược lại, kiến trúc sâu có nhiều lớp ẩn được đào tạo từ đầu đến cuối bao gồm các lớp chuyên biệt như lớp tích chập để tìm hiểu các mẫu đặc trưng cục bộ và các lớp lặp lại để tìm hiểu thông tin tạm thời của dữ liệu đầu vào. Do đó, kiến trúc deep learning nhìn chung hoạt động tốt hơn các phương pháp học máy truyền thống khi có số lượng lớn mẫu đào tạo. Tuy nhiên, kiến trúc mạng sâu thường gặp phải vấn đề trang bị quá mức và có chi phí tính toán cao trong giai đoạn huấn luyện khi có ít mẫu huấn luyện. Các phương pháp học máy truyền thống có thể khắc phục những thiếu sót của kiến trúc mạng sâu khi không đủ dữ liệu. Trong kịch bản này với dữ liệu hạn chế, kiến trúc mạng sâu được tăng cường với các kỹ thuật chính quy hóa và loại bỏ sẽ thích hợp hơn các phương pháp học máy truyền thống.

3. Bộ dữ liệu công khai

Các phương pháp được sử dụng để thu thập dữ liệu và số lượng mẫu từ các bộ dữ liệu có thể truy cập miễn phí đều được mô tả trong phần này. Các bộ dữ liệu có thể truy cập công khai có sẵn cho nhiều mục đích sử dụng khác nhau bao gồm xác định khối u và phân tích đất, thực phẩm, dược phẩm và gỗ.

Bộ dữ liệu đất của Thụy Điển [10] cung cấp dữ liệu về giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của chất hữu cơ trong đất. Dữ liệu được thu thập từ các ô đất ở Thụy Điển, nơi mỗi ô có kích thước 120×120 cm. Để sản xuất chất hữu cơ trong đất, sáu phương pháp khác nhau đã được sử dụng trên sáu ô trong tổng số 36 ô. Tổng cộng có 108 mẫu được thu thập, trong đó một mẫu chất hữu cơ được lấy từ độ sâu 0–5 cm và hai mẫu từ độ sâu 5–10 cm. Rễ và đá được loại bỏ khỏi các mẫu, sau đó được đồng nhất thủ công trong 15 phút trước khi sấy khô trong lò ở nhiệt độ 70°C . Giữa các bước sóng 400 và 2500 nm ở khoảng cách 2 nm, các giá trị hấp thụ của quang phổ hồng ngoại đã được ghi lại. Bộ dữ liệu có sẵn tại <http://www.models.life.ku.dk/NIRsoil> (truy cập vào ngày 18 tháng 11 năm 2022).

Bộ dữ liệu ngô chứa các bản ghi giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của ngô. Các giá trị hấp thụ được lấy từ phạm vi 1100–2498 nm ở các khoảng 2 nm và các giá trị độ ẩm, dầu, protein và tinh bột tương ứng của chúng được ghi lại.

Tổng cộng có 80 mẫu và 700 tính năng trong tập dữ liệu và nó có sẵn tại <http://www.eigenvector.com/data/Corn/index.html> (truy cập vào ngày 18 tháng 11 năm 2022).

Tập dữ liệu về máy tính bảng chứa các bản ghi giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của 654 máy tính bảng. Các giá trị hấp thụ được lấy từ phạm vi 600–1898 nm ở khoảng cách 2 nm và các thành phần viên thuốc tương ứng API tramadol, cộng với talc, ethyl cellulose và rượu stearyl đã được ghi lại. Tập dữ liệu có sẵn tại https://eigenvector.com/wp-content/uploads/2019/06/nir_shootout_2002.mat_.zip (truy cập vào ngày 18 tháng 11 năm 2022).

Bộ dữ liệu melamine-formaldehyde (MF) [11] chứa các bản ghi giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của các hỗn hợp hóa học khác nhau được sử dụng trong quá trình trùng hợp. Quá trình trùng hợp tạo ra các loại nhựa khác nhau. Các giá trị hấp thụ được lấy từ khoảng 3900–11.000 cm⁻¹ ở khoảng cách 1 cm từ bốn hỗn hợp hóa học. Nhiều số đọc được lấy từ mỗi hỗn hợp, mang lại tổng cộng 1413 mẫu. Bộ dữ liệu có sẵn theo yêu cầu của các tác giả của [11].

Bộ dữ liệu đất chứa các bản ghi giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của các mẫu đất khác nhau để xác định độ phì nhiêu. Các giá trị hấp thụ được lấy từ phạm vi 1000–2500 nm từ 40 mẫu đất và độ phì được đo bằng nitơ (N), photpho (P), kali (K), pH đất, magie (Mg) và canxi (Ca). Bộ dữ liệu có sẵn tại <https://data.mendeley.com/datasets/h8mht3jsbz/1> (truy cập vào ngày 18 tháng 11 năm 2022).

Bộ dữ liệu tràn dịch màng phổi chứa các giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của các mẫu mô phổi lành tính và ác tính. Các giá trị hấp thụ được lấy từ khoảng 4000–10.000 cm⁻¹ với khoảng cách 4 cm⁻¹ từ 82 mẫu mô. Có 47 mô ác tính và 35 mô lành tính. Dữ liệu được chia thành 62 và 20 mẫu để huấn luyện và kiểm tra tương ứng. Các mô được quay ở tốc độ 1600 g trong 10 phút ở 4 °C và sau đó được bảo quản ở 80 °C trước khi ghi lại giá trị hấp thụ. Bộ dữ liệu có sẵn tại <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC8093263/> (truy cập vào ngày 18 tháng 11 năm 2022).

Bộ dữ liệu chất lượng gỗ [12] chứa các giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của gỗ với các khuyết tật khác nhau: (1) nút thắt; (2) phân rã; (3) vỏ cây (4) bình thường; (5) nhựa; (6) phản ứng; và (7) không có chữ ký. Các giá trị hấp thụ được lấy từ phạm vi 340–2500 nm với bốn cảm biến phát hiện ánh sáng khác nhau. Tổng cộng 25 mẫu gỗ có đường kính từ 100 mm đến 400 mm được thu thập từ khu vực cắt gỗ và bọc trong nhôm trước khi bảo quản ở nhiệt độ -21 °C. Những mẫu được lưu trữ này được vận chuyển đến phòng thí nghiệm nơi chúng được rửa đông ở nhiệt độ 15 °C trước khi tiến hành đo. Các phép đo được thực hiện tại 36 địa điểm, mang lại tổng số 1800 kết quả; 66% được sử dụng làm đào tạo và phần còn lại làm bài kiểm tra. Bộ dữ liệu có sẵn theo yêu cầu của các tác giả của [12].

Bộ dữ liệu khảo sát thống kê khung sử dụng đất/khu vực che phủ (LUCAS) [13] chứa các giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của các mẫu đất và tính chất đất tương ứng của chúng: (1) đất sét; (2) hàm lượng bùn và cát; (3) mảnh thô; (4) độ pH; (5) hàm lượng cacbon hữu cơ; và (6) nitơ. Các giá trị hấp thụ được lấy từ phạm vi 400–2500 nm ở các khoảng 0,5 nm. Có tổng cộng 19.019 mẫu, trong đó 75% được sử dụng để đào tạo và 25% được sử dụng để thử nghiệm. Bộ dữ liệu có sẵn tại https://esdac.jrc.ec.europa.eu/nội_dung/lucas-2009-topsoil-data#tabs-0-description=0 (truy cập vào ngày 18 tháng 11 năm 2022).

Bộ dữ liệu thịt gà [14,15] chứa các giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của các mẫu gà và nhãn chất lượng tương ứng của chúng. Phi lê ức gà giết mổ được lựa chọn bởi một nhà phân tích có kinh nghiệm và có sự khác biệt lớn về chất lượng. Tổng cộng có 158 mẫu trong vòng 5 giờ kể từ khi giết mổ được vận chuyển trong điều kiện lạnh đến phòng thí nghiệm, nơi phần trung tâm của mỗi mẫu được cắt tỉa cẩn thận bằng dao phẫu thuật để vừa với tế bào mẫu. Sau đó, các mẫu được băm nhỏ bằng máy xay nhà bếp trong 10 giây và thu thập các giá trị hấp thụ của quang phổ hồng ngoại từ phạm vi bước sóng 400–2500 nm. Nhãn chất lượng được xác định bởi giá trị pH và màu sắc (1) nhạt; (2) nhạt nhạt, mềm mại và tiết dịch; (3) sẫm màu, chắc và khô; và (4) bình thường. Bộ dữ liệu có sẵn theo yêu cầu của các tác giả của [14,15].

Bộ dữ liệu phân [16] chứa các giá trị hấp thụ quang phổ hồng ngoại của các mẫu phân và các đặc tính tương ứng của chúng: (1) chất khô; (2) nitơ amoni; (3) nitơ; (4) oxit canxi; (5) kali oxit; (6) oxit magie; (7) photpho

pentoxit; và (8) loại phân bón. Tổng cộng có 332 mẫu phân được thu thập từ Pháp và đảo Reunion, trong đó có 196 mẫu gia súc và 136 mẫu gia cầm. Các mẫu được đông lạnh sau khi thu thập và đồng nhất hóa bằng cách nghiền chúng trong máy xay sinh tố. Những mẫu này sau đó được sấy khô trong 4 ngày ở 40 °C trong lò đối lưu. Các giá trị hấp thụ của quang phổ hồng ngoại được lấy từ ba máy quang phổ, hai trong số đó có bước sóng phát hiện 400–2500 nm, trong khi máy quang phổ thứ ba có bước sóng phát hiện 4000–12.500 cm. Bộ dữ liệu có sẵn tại <https://doi.org/remotexs.ntu.edu.sg/10.15454/JIG08R> (truy cập vào ngày 18 tháng 11 năm 2022).

4. Xử lý trước dữ liệu

Các phương pháp tiền xử lý dữ liệu, có mục đích là tách tín hiệu khỏi nhiễu và giảm tỷ lệ tín hiệu trên nhiễu, đóng một vai trò quan trọng trong sự thành công của ước tính thành phần mẫu mục tiêu dựa trên NIRS. Trong phần này, chúng tôi cung cấp cái nhìn tổng quan về các thuật toán tiền xử lý tín hiệu phổ biến nhất đã được áp dụng cho tín hiệu quang phổ hấp thụ NIR trước đây.

Định luật Beer-Lambert phát biểu rằng sự hấp thụ NIR phụ thuộc vào độ dài đường NIR, độ hấp thụ phân tử và nồng độ của mẫu. Độ hấp thụ phân tử và chiều dài đường đi NIR thường không đổi và độ hấp thụ NIR tỷ lệ thuận với nồng độ mẫu. Tuy nhiên, sự tán xạ NIR gây ra bởi sự phân bố hạt của mẫu làm thay đổi kích thước hạt, mật độ mẫu, hình dạng mẫu, chiều dài đường đi và độ hấp thụ phân tử. Kết quả là các mẫu có cùng nồng độ sẽ có phổ NIR khác nhau. Những khác biệt này trong phổ NIR được phản ánh trong nhiễu phân cực cộng gộp đối với tất cả các phổ NIR, nhiễu phân cực nhân đối với tất cả các phổ NIR, cũng như nhiễu phân cực cộng và phân cực nhân ở một bước sóng cụ thể trong phổ NIR.

Do thực tế là một số thuật toán học máy hoạt động kém với dữ liệu nhiễu, nên quá trình tiền xử lý nhằm mục đích loại bỏ nhiễu sai lệch cộng và nhân. Các hàm liên quan đến tiền xử lý dữ liệu phổ biến trong NIR là (1) định tâm trung bình [17]; (2) phương sai chuẩn tắc chuẩn (SNV) [18]; (3) hiệu chỉnh phân tán nhân (MSC) [18,19]; (4) hiệu chỉnh phân tán nhân có xu hướng (EMSC) [20]; (5) hiệu chỉnh tán xạ nghịch đảo (ISC) [21]; (6) và làm mịn Savitzky-Golay [22].

Giải thích chi tiết về các chức năng tiền xử lý có sẵn trong [23] và Các phần phụ sau đây tóm tắt các hàm tiền xử lý được sử dụng cho dữ liệu NIR.

4.1. Định tâm trung bình và biến thiên chuẩn chuẩn (SNV)

Định tâm trung bình là cách tiếp cận đơn giản nhất để loại bỏ nhiễu sai lệch cộng tính khỏi tất cả phổ NIR bằng cách tính giá trị trung bình và trừ đi nó. SNV lấy trung tâm trung bình hơn nữa bằng cách loại bỏ cả nhiễu sai lệch cộng và nhân khỏi tất cả các phổ NIR bằng cách tính giá trị trung bình và phương sai, sau đó trừ đi giá trị trung bình và chia cho phương sai; cả định tâm trung bình và SNV đều giả định rằng nhiễu sai lệch cộng tính có thể xấp xỉ bằng giá trị trung bình của dữ liệu và nhiễu sai lệch nhân có thể xấp xỉ bằng phương sai của dữ liệu. Định tâm trung bình đã được nghiên cứu với các chức năng tiền xử lý khác trên sáu bộ dữ liệu NIR và thấy phù hợp nếu có ít mẫu huấn luyện [17]. Hàm lượng protein trong hạt vừng đã được nghiên cứu bằng cách sử dụng SNV và nó được cho là hữu ích [18].

4.2. Hiệu chỉnh phân tán nhân (MSC)

MSC giả định rằng nhiễu có thể được mô tả bằng độ lệch nhân và cộng. Độ lệch nhân có thể được xác định bằng cách so sánh NIR tham chiếu không nhiễu với từng mẫu dữ liệu NIR. MSC được áp dụng bằng cách khớp lặp lại mẫu NIR tham chiếu với hồi quy tuyến tính cho từng mẫu dữ liệu NIR, sau đó trừ đi phần chặn hồi quy tuyến tính và chia độ dốc hồi quy tuyến tính cho mẫu dữ liệu NIR; giá trị trung bình hoặc trung vị của tất cả các mẫu dữ liệu trong dữ liệu NIR đóng vai trò gần đúng cho NIR tham chiếu. MSC đã được chứng minh là hữu ích trong việc xác định lượng protein trong hạt vừng [18].

4.3. Hiệu chỉnh phân tán nhân mở rộng (EMSC)

EMSC mở rộng MSC bằng cách loại bỏ nhiễu phi tuyến và các nguồn nhiễu phi tuyến được xác định bởi chuyên gia, chẳng hạn như thuật ngữ hiệu chỉnh độ dài đường truyền và thành phần hóa học của mẫu. EMSC tính toán lặp lại nhiễu nhân và cộng tuyến tính và phi tuyến cho từng mẫu dữ liệu NIR dựa trên tín hiệu tham chiếu. NIR tham chiếu được tính gần đúng bằng giá trị trung bình hoặc trung vị của tất cả các mẫu dữ liệu trong dữ liệu NIR. Ảnh hưởng của độ dài đường đi trong khí có thể được loại bỏ một cách hiệu quả bởi EMSC [20].

4.4. Hiệu chỉnh phân tán nghịch đảo (ISC)

Ngược lại với MSC, ISC đảo ngược các biến hồi quy cho mẫu NIR tham chiếu và mẫu dữ liệu NIR biến phụ thuộc của MSC khi áp dụng hồi quy tuyến tính để xác định nhiễu sai lệch nhân và cộng. Hơn nữa, tín hiệu tham chiếu của ISC là mẫu dữ liệu NIR không nhiễu đã biết. ISC đã được chứng minh là chức năng tiền xử lý hiệu quả trong tám bộ dữ liệu NIR thực phẩm [21].

Savitzky-Golay

Savitzky-Golay là bộ lọc làm mịn tín hiệu NIR bằng cách loại bỏ nhiễu tần số cao. Savitzky-Golay thực hiện hồi quy đa thức trên các mẫu dữ liệu NIR có cửa sổ.

Do đó, mức độ làm mịn được xác định bởi kích thước cửa sổ và số lượng đa thức. Quá trình này được xây dựng dưới dạng phép toán tích chập, trong đó hạt nhân biểu thị các trọng số hồi quy đa thức. Savitzky-Golay thường được sử dụng cho dữ liệu NIR cho thấy ảnh hưởng đáng kể đến độ dài đường truyền do các kích thước hạt khác nhau như trong đất [24].

4.5. Cuộc thảo luận

Dữ liệu NIR được định hình trong quá trình tiền xử lý để loại bỏ sự khác biệt về độ dài đường truyền và độ biến thiên liên quan đến độ hấp thụ phân tử. Các hàm tiền xử lý định hình dữ liệu NIR một cách khác nhau, vì chúng xác định nhiễu sai lệch cộng và nhân theo cách khác nhau. Do đó, các chức năng tiền xử lý phải được lựa chọn cẩn thận dựa trên ứng dụng. Ví dụ, các mẫu rắn có xu hướng có độ dài đường đi khác với mẫu khí do sự tán xạ gây ra bởi các kích thước hạt khác nhau. Vì các mẫu khí có độ biến thiên ít hơn so với các mẫu rắn nên chỉ cần một bước tiền xử lý đơn giản là đủ.

Để tìm ra chức năng tiền xử lý tốt nhất, các thí nghiệm đã được tiến hành trên 13 bộ dữ liệu về thực phẩm, chất lỏng và thực vật [25,26]. Kết quả cho thấy việc làm mịn Savitzky-Golay bằng tiền xử lý SNV hoạt động tốt hơn các chức năng tiền xử lý khác [25]. Làm mịn Savitzky-Golay vượt trội hơn các hàm tiền xử lý khác theo các thí nghiệm trên dữ liệu quang phổ đất được tiến hành để xác định hàm tiền xử lý tốt nhất [26].

Tuy nhiên, cần lưu ý rằng việc làm mịn Savitzky-Golay rất tốn kém về mặt tính toán.

5. Lựa chọn tính năng

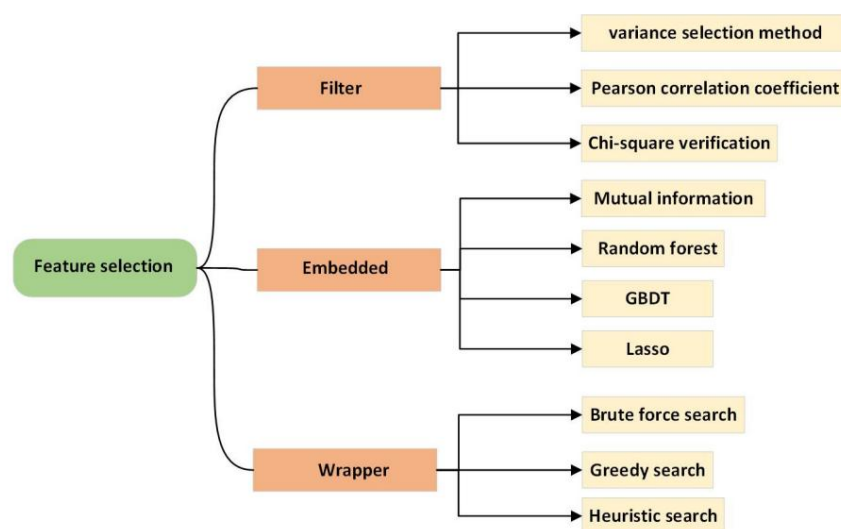
Lựa chọn tính năng đã được chứng minh là một kỹ thuật tiền xử lý dữ liệu hiệu quả và hiệu quả để chuẩn bị dữ liệu (đặc biệt là dữ liệu chiều cao) cho nhiều vấn đề khai thác dữ liệu và học máy. Tập hợp con các đặc trưng nhất quán, phù hợp và không dư thừa nhất từ vectơ đặc trưng là mục đích của việc lựa chọn đặc trưng. Nó không chỉ làm giảm độ phức tạp của mô hình và thời gian đào tạo mà còn giảm nguy cơ trạng bị quá mức. Các thuật toán lựa chọn đặc trưng có thể giảm kích thước của dữ liệu phổ một cách hiệu quả và loại bỏ thông tin dư thừa khỏi phổ. Ở đây, chúng tôi tổng hợp một bản tổng quan ngắn gọn về các phương pháp lựa chọn tính năng phổ biến nhất cho quang phổ hấp thụ NIR như đã được báo cáo trong tài liệu.

Liên quan đến các giá trị hấp thụ ở các bước sóng cụ thể, dữ liệu phổ NIR mô tả thành phần của mẫu. Trái với mong đợi, nhiễu khiến dữ liệu phổ NIR chứa nhiều đỉnh hơn dự kiến, mỗi đỉnh tương ứng với một bước sóng khác nhau.

Vì nhiễu làm giảm hiệu suất của các thuật toán học máy nên việc lựa chọn tính năng nhằm mục đích xác định các tính năng quan trọng mô tả thành phần của mẫu.

Các thuật toán lựa chọn tính năng được phân loại thành bộ lọc, trình bao bọc và các phương pháp ứng dụng nhúng. Sơ đồ phân loại được mô tả trong Hình 3. Sự khác biệt chính

giữa ba loại thuật toán là cách sử dụng thuật toán học để phân tích và lựa chọn các tính năng.



Hình 3. Phân loại các phương pháp lựa chọn đặc trưng.

Tầm quan trọng của các đặc điểm được xác định bằng cách tiếp cận dựa trên bộ lọc bằng cách sử dụng hàm như số liệu thống kê, khoảng cách hoặc độ tương tự. Do đó, các tính năng được chọn bằng cách sử dụng phương pháp dựa trên bộ lọc không phù hợp quá mức và được xếp hạng theo mức độ quan trọng. Các thuật toán dựa trên bộ lọc bao gồm lựa chọn hiệp phương sai, mức độ liên quan tối đa dự phòng tối thiểu (mRMR) [27] và lựa chọn tính năng dựa trên tương quan (CFS) [14]. Tuy nhiên, các phương pháp tiếp cận dựa trên bộ lọc không tính đến tính tổng quát của các đặc điểm được chọn.

Các phương pháp tiếp cận dựa trên trình bao bọc chọn các tính năng dựa trên khả năng khái quát hóa của chúng. Do đó, các tính năng dựa trên trình bao bọc có xu hướng phù hợp quá mức và hầu hết các phương pháp lựa chọn tính năng trong NIR đều sử dụng phương pháp này. Việc tìm kiếm toàn diện được yêu cầu bởi các phương pháp dựa trên trình bao bọc để ngăn chặn việc trang bị quá mức cũng khiến chúng trở nên tốn kém về mặt tính toán. Các thuật toán dựa trên trình bao bọc được sử dụng trong NIR bao gồm tối ưu hóa bầy hạt (PSO) và tối ưu hóa bầy hạt nhị phân (BPSO) [28], thuật toán di truyền (GA) [29-33], phân tích quần thể kết hợp biến đổi (VCPA) [32,34], phương pháp thu hẹp không gian lặp có thể thay đổi (VISSA) [35], thu nhỏ mềm khởi động (BOSS) [36], giữ lại các biến thông tin lặp đi lặp lại (IRIV) [32], lấy mẫu trọng số lại thích ứng cạnh tranh (CARS) [37-39], thuật toán chiếu liên tiếp (SPA) [40], loại bỏ biến không chính xác (UVE) [41], loại bỏ biến không chính xác Monte Carlo (MCUVE) [35], phương pháp lựa chọn tính năng bình phương nhỏ nhất một phần [42], thử nghiệm ngẫu nhiên (RT) [43], tầm quan trọng của phép chiếu (VIP) [44] và quy trình jackknife.

Các phương pháp tiếp cận nhúng bao gồm thuật ngữ học mô hình để đánh giá khả năng khái quát hóa của các tính năng được chọn và thuật ngữ lựa chọn tính năng để chọn các tính năng. Các phương pháp tiếp cận nhúng cùng nhau tối ưu hóa cả hai thuật ngữ và yêu cầu ít tài nguyên tính toán hơn so với các phương pháp tiếp cận dựa trên trình bao bọc vì chúng không yêu cầu học nhiều mô hình. Toán tử chọn lọc và co rút tuyệt đối nhỏ nhất (LASSO) [45,46] và thuật toán mạng đàn hồi [47] đều là ví dụ về các phương pháp nhúng.

5.1. Tối ưu hóa nhóm hạt (PSO) và Tối ưu hóa nhóm hạt nhị phân (BPSO)

PSO là một công nghệ tính toán tiến hóa phát triển từ nghiên cứu về hành vi săn mồi của chim. Ý tưởng cơ bản đằng sau thuật toán tối ưu hóa bầy đàn là tìm ra giải pháp tốt nhất thông qua hợp tác nhóm và chia sẻ thông tin. Chim được trừu tượng hóa dưới dạng các hạt (điểm) trong không gian N chiều không có khối lượng hoặc thể tích. Vị trí của một hạt trong không gian N chiều được biểu thị dưới dạng vectơ $X_i = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, và tốc độ bay được biểu thị dưới dạng vectơ $V_i = (v_1, v_2, \dots, v_N)$. Mỗi hạt có một giá trị thích hợp được xác định bởi hàm mục tiêu. Ngoài ra, mỗi hạt đều nhận thức được

vị trí tốt nhất (pbest) được phát hiện cho đến nay và vị trí hiện tại (x_i). Đây có thể được coi là trải nghiệm chuyến bay cá nhân của hạt. Ngoài ra, mỗi hạt đều nhận thức được vị trí tốt nhất (gbest) được phát hiện cho đến nay bởi từng hạt trong cả nhóm (gbest là giá trị tốt nhất trong pbest), có thể coi là trải nghiệm của hạt đồng hành.

Các hạt xác định chuyển động tiếp theo của chúng dựa trên những trải nghiệm tốt nhất của chúng và của các hạt cùng loại.

Sau đây là các quy tắc cập nhật:

$$v_i = v_i + c_1 \cdot \text{rand}() \cdot (pbest_i - x_i) + c_2 \cdot \text{rand}() \cdot (gbest - x_i) \quad (1)$$

$$x_{id}^{k+1} = x_{id}^k + v_{id}^k \quad (2)$$

trong đó v_{id}^k biểu thị vectơ chiều thứ d của tốc độ bay của lần lặp thứ $(k+1)$ vectơ vectơ cho hạt i ; x_{id}^k chiều thứ d của vectơ vị trí của hạt i trong lần lặp thứ k ; c_1 và c_2 các hệ số học tập thường được đặt thành 2; $\text{rand}()$ một số ngẫu nhiên trong khoảng từ 0 đến 1; x_i vị trí hiện tại của hạt; và v_i tốc độ của hạt.

Ngược lại với PSO tập trung vào các bài toán giá trị thực liên tục, BPSO ưu tiên các bài toán ràng buộc không gian rời rạc [28]. Thuật toán BPSO dựa trên thuật toán bầy hạt rời rạc và người ta đồng ý rằng vectơ vị trí và vectơ vận tốc lần lượt bao gồm các giá trị 0 và 1. Mặc dù BPSO có khả năng tìm kiếm toàn cục tốt nhưng nó không thể hội tụ về giá trị tối ưu toàn cục. Hơn nữa, khi thuật toán tìm kiếm lặp đi lặp lại, tính ngẫu nhiên ngày càng mạnh hơn và nó thiếu khả năng tìm kiếm cục bộ ở các giai đoạn sau. Trong nghiên cứu ở [48], bốn thông số chất lượng nước tương đã được xác định bằng kỹ thuật Vis-NIR kết hợp với lựa chọn biến bằng thuật toán tối ưu hóa bầy hạt được sửa đổi đơn giản (PSO). Các phát hiện đã chứng minh rằng việc áp dụng lựa chọn biến dựa trên thuật toán tối ưu hóa PSO đã được sửa đổi không chỉ đơn giản hóa các mô hình mà còn cải thiện đáng kể chất lượng của các mô hình về độ chính xác và độ tin cậy.

5.2. Thuật toán di truyền (GA)

GA mang tính ngẫu nhiên và dựa trên sự tiến hóa sinh học và di truyền. GA bao gồm năm bước: (1) khởi tạo; (2) thể lực; (3) lựa chọn; (4) chéo; và (5) đột biến. Các bộ tính năng khác nhau được chọn ngẫu nhiên trong bước khởi tạo. Bước thích hợp đánh giá từng bộ tính năng thông qua xác thực chéo và xếp hạng chúng dựa trên độ chính xác của xác thực chéo. Hai bộ tính năng được chọn trong bước lựa chọn dựa trên xác suất lựa chọn ngẫu nhiên xếp hạng và không đồng nhất (NRSP). NRSP có giá trị xác suất cao đối với tập hợp các đặc điểm có thứ hạng cao hơn và giá trị xác suất thấp đối với tập hợp các đặc điểm có thứ hạng thấp. Bước chéo tạo ra một tập hợp các tính năng mới bằng cách chọn ngẫu nhiên các tính năng theo cách không chồng chéo từ hai bộ tính năng đã chọn trong bước lựa chọn. Một tính năng từ bộ tính năng mới được tạo sẽ được chọn ngẫu nhiên hoặc bỏ chọn trong quá trình đột biến. Các bước từ 2 đến 5 được lặp lại cho đến khi đáp ứng tiêu chí dừng chẳng hạn như số lần lặp hoặc độ chính xác mong muốn của xác thực chéo. GA đã được sử dụng để xác định chất lượng thực phẩm [32,33], chất lượng đất [29], niên đại tài liệu [30] và các bệnh sử dụng huyết tương [31]. Nghiên cứu trong [49] đã đề xuất một phương pháp không phá hủy để xác định chất lượng bên trong của táo bằng cách sử dụng máy quang phổ NIR không tiếp xúc và thuật toán di truyền để tối ưu hóa mô hình. Hiệu suất của hệ thống không tiếp xúc được tăng cường 30% nhờ tối ưu hóa mô hình bằng thuật toán di truyền, đưa nó đến gần hơn với hiệu suất của các mô hình từ máy phân tích đa năng.

5.3. Lựa chọn hiệp phương sai

Phương pháp lựa chọn hiệp phương sai chọn các đặc trưng bằng cách tính toán ma trận tương quan giữa dữ liệu đầu vào và dữ liệu đầu ra, sau đó chọn các đặc trưng dữ liệu đầu vào có mối tương quan chặt chẽ với các đặc trưng dữ liệu đầu ra. Để giải quyết thực tế rằng quang phổ nhìn thấy và cận hồng ngoại (Vis-NIR) được tạo ra bởi sự kết hợp của nhiều đặc điểm có độ phân giải thấp, các biến quang phổ có mối tương quan cao, gây khó khăn trong việc lựa chọn biến thích hợp nhất cho một ứng dụng nhất định. Nghiên cứu này đề xuất ứng dụng chuyên dụng

lựa chọn bộ lọc (ADSF), có thể chọn tập hợp con các bộ lọc phù hợp nhất từ bất kỳ hình dạng được xác định trước nào bằng cách tối đa hóa hiệp phương sai và sử dụng phép chiếu trực giao. ADSF hoạt động như một quá trình chính quy hóa, dẫn đến một lựa chọn có khả năng chống lại tình trạng quá khớp ngay cả trong bối cảnh cỡ mẫu nhỏ [50].

5.4. Phân tích dân số kết hợp biến đổi (VCPA)

VCPA bao gồm ba bước: (1) lấy mẫu ma trận nhị phân (BMS); (2) phân tích dân số mô hình (MPA); và (3) lựa chọn tính năng. BMS là một ma trận lấy mẫu ngẫu nhiên bao gồm các giá trị 1 và 0 để chọn và bỏ chọn các đối tượng tương ứng có khả năng đồng nhất và bằng nhau. Bước MPA tính toán độ chính xác xác thực chéo của các đối tượng được lấy mẫu bằng BMS. Sau đó, tần suất của mỗi tính năng được chọn từ 10% độ chính xác xác thực chéo cao nhất sẽ được tính toán. Cuối cùng, hàm mũ được sử dụng trong bước lựa chọn đối tượng để xác định số lượng đối tượng cần giữ lại dựa trên tần suất mỗi đối tượng được chọn. Các bước này được lặp lại cho đến khi đáp ứng được tiêu chí dừng, chẳng hạn như số lần lặp tối đa hoặc độ chính xác xác thực chéo mong muốn. Để đạt được sự phát hiện nhanh chóng sự nhiễm vi khuẩn gây bệnh từ thực phẩm (*Escherichia coli* 0157 và *Staphylococcus aureus*) trong cơ thịt lợn *longissimus* tươi, trong nghiên cứu ở [32], hình ảnh siêu phổ cận hồng ngoại (V-NIR) có thể nhìn thấy cùng với PLSR và Thuật toán VCPA đã được đề xuất để dự đoán và định lượng *Escherichia coli* 0157: H7 và *Staphylococcus Aureus*. Kết quả chứng minh rằng bước VCPA được cập nhật là một cách rất hiệu quả để loại bỏ các biến không liên quan.

5.5. Phương pháp tiếp cận co rút không gian lặp lại có thể thay đổi (VISSA)

VISSA lấy mẫu ngẫu nhiên các đối tượng bằng cách lấy mẫu BMS, sau đó sử dụng mô hình PLS để tính toán độ chính xác xác thực chéo cho từng đối tượng được lấy mẫu ngẫu nhiên. Sau đó, 5% mô hình PLS hàng đầu sẽ được chọn và các tính năng được chọn bằng cách sử dụng các hệ số mô hình có giá trị cao. Để xác định xem các tính năng được chọn có phải là tốt nhất hay không, mô hình PLS sau đó sẽ được tạo với các tính năng đã chọn và độ chính xác xác thực chéo của nó được so sánh với độ chính xác xác thực chéo của mô hình trước đó. Nếu độ chính xác xác thực chéo của mô hình PLS với các tính năng được chọn kém chính xác hơn so với không có lựa chọn tính năng, thì BMS sẽ được áp dụng một lần nữa để chọn các tính năng. VISSA lặp lại các bước trên cho đến khi đạt tiêu chí dừng nhằm tối ưu hơn nữa các tính năng tối ưu đã được chọn. Nguồn gốc của táo được xác định bằng phương pháp kết hợp phương pháp thu hẹp không gian lặp có thể thay đổi với hồi quy từng bước (VISSA-SR), phương pháp này thu được bước sóng đặc trưng một cách hiệu quả và giảm thời gian vận hành của quá trình mô hình hóa [35].

5.6. Khởi động co rút mềm (BOSS)

Sự tương quan giữa dữ liệu đầu vào và đầu ra được BOSS sử dụng để lựa chọn các tính năng. Ngược lại với lựa chọn hiệp phương sai, chỉ xem xét tầm quan trọng của tính năng toàn cầu, BOSS xác định các tính năng tối ưu bằng cách xem xét cả tầm quan trọng của tính năng cục bộ và toàn cầu. BOSS gồm 3 bước: (1) lấy mẫu; (2) KBTB; và (3) lựa chọn tính năng. Đầu tiên, BOSS lấy mẫu ngẫu nhiên các đặc điểm của dữ liệu đầu vào, chỉ chọn 63,2% đặc điểm mà không lặp lại. Độ chính xác xác thực chéo của từng bộ tính năng được xác định trong bước MPA sử dụng PLS. Vectơ trọng số tuyệt đối của từng mô hình PLS được chuẩn hóa trong bước lựa chọn tính năng và vectơ trọng số chuẩn hóa của từng mô hình sau đó được thêm vào để xác định khả năng tính năng được chọn. Nếu trọng số tăng thêm cao hay thấp thì khả năng chọn được một tính năng sẽ cao. Do đó BOSS giả định rằng giá trị trọng số tuyệt đối cao biểu thị một đặc điểm thú vị. Cuối cùng, BOSS lấy mẫu các tính năng dựa trên xác suất lựa chọn tính năng để chọn 63,2% tính năng sử dụng lấy mẫu bootstrap có trọng số (WBS). Quá trình lặp lại cho đến khi đạt đến điểm dừng, chẳng hạn như số lần lặp tối đa, số tính năng tối ưu tối thiểu hoặc độ chính xác xác thực chéo được xác định trước. Xác định hàm lượng tạp chất trong dầu ô liu nguyên chất bằng phương pháp quang phổ FT-NIR kết hợp với BOSS-PLS

thuật toán đã được đề xuất trong [36]. Kết quả thu được chứng tỏ tính ưu việt của thuật toán BOSS trong việc lựa chọn số sóng hướng dẫn.

5.7. Lắp lại việc giữ lại các biến thông tin (IRIV)

IRIV là một phương pháp lựa chọn đặc điểm toàn diện sử dụng thử nghiệm Mann-Whitney U để xác định các đặc điểm tối ưu. IRIV trước tiên sử dụng BMS để tạo một tập hợp các tính năng và chọn một tính năng quan tâm trong bộ tính năng đó. Tính năng quan tâm được thêm vào bộ tính năng để tính toán độ chính xác xác thực chéo trung bình và tính năng này được loại trừ khỏi bộ tính năng để tính toán độ chính xác xác thực chéo trung bình khác. Để xác định xem tính năng quan tâm có hữu ích hay không, thử nghiệm Mann-Whitney U cuối cùng được chạy trên hai giá trị xác thực chéo trung bình. Việc chọn lặp đi lặp lại tính năng quan tâm từ tính năng đầu tiên đến tính năng cuối cùng là tốn kém về mặt tính toán. Vì vậy, IRIV thường xuyên được kết hợp với các thuật toán lựa chọn đặc trưng khác. Thuật toán lựa chọn đối tượng như VCPA được sử dụng để chọn ra một số đối tượng được chọn từ dữ liệu đầu vào và sau đó, các đối tượng được chọn sẽ phải tuân theo IRIV để giảm thêm số lượng đối tượng. Chất lượng thịt lợn được đánh giá bằng IRIV trong [32] và mục đích của nghiên cứu là đánh giá liệu có khả thi khi tạo ra mô hình phổ giảm năng cao và hiệu quả để theo dõi định lượng mầm bệnh truyền qua thực phẩm hay không. Kết quả thí nghiệm chứng minh rằng, so với các phương pháp khác, phân tích quần thể tổ hợp biến đổi kết hợp với thuật toán di truyền (VCPA-GA) và phân tích quần thể tổ hợp biến đổi kết hợp với việc giữ lại các biến thông tin lặp đi lặp lại (VCPA-IRIV) có thể làm tăng đáng kể khả năng dự đoán của mô hình. hiệu quả.

5.8. Lấy mẫu tái cân bằng thích ứng cạnh tranh (CARS)

Thuật toán CARS xác định các đặc điểm tối ưu bằng cách giả định rằng các đặc điểm tối ưu được biểu thị bằng các trọng số hồi quy PLS tuyệt đối lớn. CARS trước tiên tính toán các trọng số hồi quy bằng PLS và sau đó chuẩn hóa các trọng số hồi quy. Hàm giảm theo cấp số nhân (EDF) được sử dụng để xác định số lượng đối tượng được giữ lại dựa trên các giá trị của trọng số hồi quy chuẩn hóa. Để tiếp tục lựa chọn các tính năng dựa trên trọng số hồi quy đã chuẩn hóa, việc lấy mẫu trọng số lại thích ứng sau đó sẽ được sử dụng. Giá trị trọng số hồi quy cao biểu thị khả năng cao tính năng này sẽ được chọn, trong khi giá trị trọng số hồi quy thấp biểu thị khả năng tính năng đó sẽ được chọn thấp. Các bước này được lặp đi lặp lại cho đến khi đạt được tiêu chí dừng, chẳng hạn như số lần lặp tối đa hoặc độ chính xác xác thực chéo mong muốn. CARS được sử dụng để xác định chất lượng của hạt có dầu [37], gạo [38] và hạt giống [39]. Để tìm ra quang phổ NIR độ ẩm hạt gạo [38], các mô hình bình phương nhỏ nhất một phần (PLS) và bình phương trọng số lại thích ứng cạnh tranh (CARS) đã được sử dụng để mô hình hóa và phân tích dữ liệu quang phổ. Những phát hiện này chứng minh tính hiệu quả của thuật toán lựa chọn tính năng CARS.

5.9. Thuật toán chiếu liên tiếp (SPA)

SPA là phương pháp lựa chọn tính năng chuyển tiếp được xây dựng trên một tính năng tại một thời điểm cho đến khi đạt được độ chính xác xác thực chéo mong muốn. PLS được SPA sử dụng lặp đi lặp lại để tính toán độ chính xác xác thực chéo từ tính năng đầu tiên đến tính năng mà nó ngừng tăng. Kết quả là SPA kết hợp PLS và lựa chọn tính năng chuyển tiếp thành một thuật toán duy nhất. SPA được sử dụng để xác định chất lượng dầu hạt nho [40]. Nghiên cứu trong [51] đã đề xuất một kỹ thuật phân tích thay thế để xác định hàm lượng chất béo của hamburger gà thương mại dựa trên quang phổ cận hồng ngoại (NIR) và SPA để lựa chọn khoảng trọng số bình phương nhỏ nhất một phần (iSPA-PLS), vượt trội so với toàn bộ- phổ PLS và iPLS về mặt hiệu suất dự đoán.

5.10. Loại bỏ biến không chính xác (UVE)

Thuật toán lựa chọn tính năng UVE loại bỏ các tính năng nhiễu. PLS ban đầu được sử dụng để xác định độ chính xác xác thực chéo một lần và các giá trị ổn định của hệ số mô hình bằng cách chia giá trị trung bình của từng hệ số cho độ lệch chuẩn của hệ số. Độ chính xác của việc xác thực chéo loại bỏ một lần sau đó được tính toán bằng cách xây dựng một

mô hình trên dữ liệu nhiễu sau khi thêm nhiễu ngẫu nhiên thống nhất với mức nhiễu 10 10 . Sau đó, các giá trị độ ổn định hệ số cho mô hình được tạo bằng dữ liệu nhiễu đã được tính toán và các đặc điểm lớn hơn giá trị ổn định hệ số cho mô hình được tạo bằng dữ liệu không nhiễu đã bị loại bỏ. Có thể kết hợp UVE và SPA để loại bỏ các đặc tính nhiễu và không tương quan. UVE và MCUVE đã được sử dụng để xác định sự pha trộn của dầu ô liu nguyên chất [41]. Nghiên cứu trong [52] đã đề xuất phương pháp UVE-SPA, một thuật toán chiếu liên tiếp (SPA) kết hợp với loại bỏ biến không chính xác (UVE), được sử dụng hiệu quả để lựa chọn biến trong phân tích quang phổ NIR của nicotin trong lamina thuốc lá và hoạt chất được phẩm trong viên còn nguyên vẹn.

5.11. Loại bỏ biến không thông tin Monte Carlo (MCUVE)

MCUVE là một phần mở rộng của UVE giúp giảm độ phức tạp tính toán bằng cách thay thế xác thực chéo loại bỏ một lần bằng xác thực chéo loại bỏ một lần ngẫu nhiên. Quá trình tính toán các giá trị ổn định hệ số của dữ liệu nhiễu cũng được MCUVE bỏ qua bằng cách loại bỏ các đặc trưng có giá trị ổn định hệ số thấp. Để dự đoán độ pH trong đất đen bê tông vôi, nghiên cứu trong [53] đã sử dụng CWT để tiền xử lý quang phổ của đất, tiếp theo là ELM kết hợp với bốn phương pháp chọn biến quang phổ, GA, SPA, MCUVE và CARS và toàn phổ. Theo kết quả thử nghiệm, thuật toán lựa chọn đặc trưng MCUVE có độ lệch dự đoán dư thấp nhất.

5.12. Kiểm tra ngẫu nhiên (RT)

RT là một quy trình gồm hai bước để lựa chọn tính năng. Dữ liệu đầu vào được sử dụng để tìm hiểu mô hình và dữ liệu đầu ra được hoán vị ngẫu nhiên trong bước đầu tiên. Quá trình này được lặp lại nhiều lần để tìm hiểu các mô hình ngẫu nhiên khác nhau. Với dữ liệu đầu vào và đầu ra, mô hình được học ở bước thứ hai. Sau đó, các đặc điểm có giá trị hệ số mô hình chuẩn nhỏ hơn giá trị hệ số mô hình ngẫu nhiên sẽ bị loại bỏ. So với CARS và UVE, RT là phương pháp hiệu quả hơn để lựa chọn tính năng trong bộ dữ liệu NIR [54] mặc dù cần nhiều tính toán do hoán vị ngẫu nhiên của nó. Trong nghiên cứu [55], một phương pháp mới được gọi là RT-PLS để chọn bước sóng trong phân tích phổ NIR đã được đề xuất dựa trên thử nghiệm ngẫu nhiên. Trong phương pháp được đề xuất, một số liệu thống kê có thể đánh giá tầm quan trọng của các biến trong phổ.

5.13. Tầm quan trọng thay đổi trong phép chiếu (VIP)

VIP sử dụng hệ số PLS để chọn tính năng. Để đạt được điều này, trước tiên VIP phải tìm hiểu mô hình dữ liệu đầu vào và đầu ra trước khi xác định tầm quan trọng của các tính năng dựa trên các hệ số được trọng số bởi dữ liệu đầu ra. Các hệ số có trọng số có giá trị lớn hơn 1 sẽ được chọn. VIP được sử dụng để xác định chất lượng của cây ươm. Ba chỉ số được khoa học công nhận—vectơ của các hệ số hồi quy, tỷ lệ chọn lọc và VIP—được sử dụng để phân tích các biến số quan trọng nhất nhằm phân biệt giữa các loại này [44]. Kết quả thực nghiệm cho thấy VIP có thể lựa chọn các biến số chính để phân biệt giữa các giống này.

5.14. Quy trình Jackknife

Quy trình lựa chọn tính năng jackknife tạo ra các mô hình PLS có số lượng bằng với số lượng mẫu huấn luyện bằng cách loại bỏ từng mẫu một. Tỷ lệ giữa các hệ số mô hình và độ lệch chuẩn của các hệ số mô hình sau đó được tính toán cho từng đặc tính. Giá trị tỷ lệ cao biểu thị tính hữu ích của một tính năng cụ thể. Nghiên cứu trong [56] đề xuất phân tích dữ liệu quang phổ NIR bằng cách sử dụng phương pháp chức năng. Họ đã sử dụng phương pháp tiếp cận dựa trên kỹ thuật quy trình dao xếp loại bỏ một lần để đánh giá sự khác biệt trong các ước tính đó.

5.15. Dự phòng tối thiểu Mức độ liên quan tối đa (mRMR)

Thuật toán mRMR giảm thiểu sự dư thừa và tối đa hóa mức độ liên quan giữa các tính năng. Mức độ liên quan mô tả mối tương quan cao nhất giữa các tính năng được chọn trong

dữ liệu đầu vào và dữ liệu đầu ra và độ dư thừa mô tả mối tương quan nhỏ nhất giữa các tính năng đó trong dữ liệu đầu vào. Độ dư thừa có thể được xác định cho dữ liệu rời rạc và liên tục bằng cách sử dụng thông tin lẫn nhau và hệ số Pearson tương ứng. Tương tự, thông tin lẫn nhau và thống kê F được sử dụng để xác định mức độ liên quan của dữ liệu rời rạc và liên tục. Để chọn một tính năng có mức độ dư thừa ít nhất và mức độ liên quan lớn nhất đối với các tính năng đã chọn trong nhóm, mRMR sẽ lặp đi lặp lại việc chọn các tính năng từ dữ liệu đầu vào không có trong nhóm. mRMR lặp lại quy trình này cho đến khi đạt được tiêu chí dừng chẳng hạn như số lượng tính năng tối đa. Nghiên cứu trong [57] đã nghiên cứu một kỹ thuật lựa chọn tính năng mới, mRMR, để chọn các bước sóng tốt nhất từ quang phổ nhìn thấy đến cận hồng ngoại của dữ liệu hình ảnh siêu phổ để phân loại tạp chất lạ trong bông. Kết quả thực nghiệm cho thấy các bước sóng được lựa chọn tương thích với nhiều loại máy phân loại tạp chất lạ trên bông.

5.16. Lựa chọn tính năng dựa trên tương quan (CFS)

Phương pháp CFS tìm cách tối đa hóa mức độ liên quan giữa các tính năng trong khi giảm thiểu sự dư thừa. Ngược lại với mRMR, tiêu chí dừng CFS dựa trên sự thay đổi tỷ lệ liên quan đến dự phòng xảy ra khi một tính năng mới được chọn. Điều này có nghĩa là CFS ngừng chọn các tính năng nếu thay đổi về tỷ lệ nhỏ hơn một chút so với giá trị được xác định trước. Trong phương pháp lựa chọn tính năng tham lam được CFS sử dụng, các tính năng sẽ được thêm vào nhóm nếu chúng tạo ra tỷ lệ liên quan đến dự phòng cao nhất. Quay lui có thể được sử dụng để cải thiện hơn nữa quá trình lựa chọn sau khi thêm một tính năng vào nhóm bằng cách xóa từng tính năng một và tính tỷ lệ giữa mức độ liên quan và mức độ dư thừa. Các bước quay lui nên được giới hạn để giảm bớt độ phức tạp tính toán. CFS được sử dụng để xác định chất lượng thịt gà [14]. Để đạt được mức giảm kích thước hiệu quả, lựa chọn tính năng dựa trên tương quan (CFS) đã được sử dụng để loại bỏ thông tin không liên quan và dư thừa khỏi quang phổ.

5.17. LASSO và lưới đàn hồi

LASSO bao gồm hai thuật ngữ, trong đó một thuật ngữ là thuật ngữ OLS và thuật ngữ còn lại là thuật ngữ phạt trọng lượng L1. Thuật ngữ OLS đánh giá khả năng khái quát hóa của các tính năng được chọn và thuật ngữ L1 chọn các tính năng bằng cách thu nhỏ các trọng số biểu thị các tính năng không quan trọng về 0. LASSO được sử dụng để xác định chất lượng của động cơ diesel trong [45] và mục tiêu của nghiên cứu là tạo ra một mô hình dự đoán các thông số nhiên liệu diesel bằng cách sử dụng dữ liệu từ phân tích quang phổ cận hồng ngoại của nhiên liệu. Kết quả cho thấy việc lựa chọn biến LASSO, sau đó là mô hình cây hồi quy, mang lại độ chính xác dự đoán tốt nhất.

Lưới đàn hồi là LASSO có thêm thời hạn phạt trọng lượng L2. Từ một nhóm tính năng tương quan, LASSO sẽ chỉ chọn một tính năng. Lưới đàn hồi giải quyết nhược điểm này của LASSO với sự hỗ trợ của thời hạn phạt L2 bổ sung. Kết quả là, mạng đàn hồi chọn nhiều tính năng hơn LASSO và phù hợp hơn với dữ liệu đa cộng tuyến như dữ liệu NIR [47].

5.18. Cuộc thảo luận

Dữ liệu phổ NIR chứa nhiều đặc điểm và số lượng mẫu thấp.

Do đó, dữ liệu phổ NIR thừa thớt vì có ít mẫu dữ liệu bao phủ không gian chiều rộng lớn này, một vấn đề được gọi là lời nguyền của chiều. Việc sử dụng thuật toán lựa chọn đặc điểm để giảm số lượng đặc điểm sao cho dữ liệu phổ NIR dày đặc trong không gian ít chiều là cách tiếp cận phổ biến để giải quyết vấn đề này.

Thành phần của mẫu được mô tả bằng một tập hợp các bước sóng cụ thể được xác định bằng cách chọn đặc điểm. Ví dụ, lượng ẩm trong trà có thể được xác định bằng cách sử dụng các bước sóng trong khoảng từ 6694 7293 cm đến 7892 8193 cm. Các phạm vi cụ thể này được xác định bằng cách áp dụng thuật toán lựa chọn tính năng [28]. Thực tế là tần số liên kết kéo dài OH bậc nhất tăng gấp đôi ở mức 7143 cm [58] chỉ ra rằng thuật toán lựa chọn tính năng đã tìm thấy phạm vi tiềm năng cho lượng ẩm đã chọn. Số lượng tính năng bị giảm thông qua việc lựa chọn tính năng, điều này cũng làm giảm

độ phức tạp tính toán của các mô hình học máy. Do đó, các mô hình học máy có độ phức tạp thấp như vậy có thể được sử dụng trong các thiết bị NIR di động.

6. Phương pháp học máy truyền thống cho NIR Các kiến

trúc máy học cho NIR được báo cáo trong tài liệu có thể được chia thành hai loại: phương pháp học máy truyền thống và kiến trúc mạng sâu.

Trong kiến trúc đường ống điển hình dựa trên các kỹ thuật học máy truyền thống, học tính năng được sử dụng để chọn các tính năng thú vị từ dữ liệu đầu vào và sau đó kỹ thuật học máy truyền thống được sử dụng để mô hình hóa các tính năng đó để tạo ra dữ liệu đầu ra. Hạn chế của nó là khả năng tổng quát hóa bị hạn chế đối với các vấn đề phân loại phức tạp do khả năng biểu diễn hạn chế của các hàm phức tạp trong trường hợp mẫu và đơn vị tính toán hạn chế. Các ứng dụng của phương pháp học máy truyền thống vào quang phổ NIR đã được báo cáo trong tài liệu được tổng hợp trong phần này. Tóm tắt các phương pháp học máy truyền thống trong NIR được tổng hợp trong Bảng 2.

Dữ liệu NIR bị ảnh hưởng bởi hiện tượng đa cộng tuyến do các đỉnh cơ bản, âm bội và đỉnh kết hợp. Đa cộng tuyến là sự biểu diễn dư thừa của cùng một thành phần bằng nhiều đặc điểm như liên kết OH trong mẫu. Một mẫu lý tưởng nên có một tính năng duy nhất cho mỗi thành phần. Khả năng khái quát hóa của các thuật toán học máy truyền thống bị ảnh hưởng tiêu cực bởi mối quan hệ tuyến tính giữa các tính năng dư thừa. Bằng cách loại bỏ các tính năng dư thừa này, các phương pháp học máy truyền thống để giải quyết đa cộng tuyến trong NIR có thể được sử dụng bao gồm (1) bình phương tối thiểu một phần (PLS) [59,60]; (2) máy học cực cao (ELM) [61–63]; (3) hồi quy vectơ hỗ trợ (SVR) [64] và máy vectơ hỗ trợ (SVM) [65]; và (4) mạng thần kinh chuyển tiếp nguồn cấp dữ liệu một lớp (SLFN) [66].

6.1. Bình phương tối thiểu một phần (PLS)

Do hiện tượng đa cộng tuyến, bộ dữ liệu NIR thiếu thứ hạng đầy đủ và không thể được mô hình hóa bằng bình phương tối thiểu thông thường (OLS). PLS giữ lại các đặc điểm dữ liệu đầu vào có mối tương quan chặt chẽ với dữ liệu đầu ra và tìm hiểu mô hình hồi quy giữa các đặc điểm đó và dữ liệu đầu ra. Ngược lại với nhiều ngẫu nhiên mà PLS loại bỏ, các phần mở rộng của PLS như bình phương nhỏ nhất trực giao (OPLS) nhằm mục đích loại bỏ nhiễu có cấu trúc [67]. LASSO và PLS được kết hợp để lựa chọn tính năng và phân tích dữ liệu NIR, tương ứng, trong một biến thể khác được gọi là bình phương tối thiểu một phần thưa thớt (SPLS) [68]. Giải thích chi tiết về các biến thể PLS có sẵn trong [69]. Phương pháp PLS là một trong những phương pháp được sử dụng thường xuyên nhất để phân tích dữ liệu phổ NIR. Ví dụ, hồi quy bình phương nhỏ nhất một phần (PLS) đã được sử dụng trong [70] để phát triển mô hình hiệu chuẩn nhằm dự đoán nồng độ của hai chất chống oxy hóa, Irganox 1010 và Irganox 168, trong polyetylen mật độ cao. Các phát hiện cho thấy hồi quy PLS có thể được sử dụng để trích xuất thông tin hóa học có giá trị từ dữ liệu quang phổ NIR.

6.2. Máy học cực đoan (ELM)

Đầu ra của thuật toán nhúng tính năng ELM là một mẫu ngẫu nhiên các tính năng của dữ liệu đầu vào. Trong ELM, việc lấy mẫu ngẫu nhiên được thực hiện bằng cách nhân dữ liệu đầu vào với một ma trận ngẫu nhiên chia tỷ lệ và xoay dữ liệu đầu vào một cách ngẫu nhiên. Nếu có đủ các bước trong lấy mẫu ngẫu nhiên, việc nhúng tính năng ELM có thể tìm hiểu các tính năng không tương quan. Số lượng tế bào thần kinh ẩn trong ELM xác định số lượng ngẫu nhiên các bước lấy mẫu. Do đó, nhiều nơ-ron ẩn ELM hơn được ưa thích hơn. Cuối cùng, ELM phát triển mô hình hồi quy giữa dữ liệu đầu ra và việc nhúng tính năng ELM. Lời giải thích chi tiết về các biến thể của ELM có thể được tìm thấy trong [71]. Trong [72] đã đề xuất một phương pháp nhận dạng mới sử dụng máy quang phổ cận hồng ngoại (NIR) và thuật toán máy học cực đoan đa lớp (ML-ELM) để xác định nhanh chóng và không phá hủy các khu vực sản xuất lá thuốc lá được xử lý bằng khói. Kết quả cho thấy các vùng sản xuất lá thuốc lá Văn Nam khác nhau có thể được xác định nhanh chóng, chính xác và không bị phá hủy bằng cách sử dụng kết hợp NIR và ML-ELM.

Bảng 2. Tóm tắt các phương pháp học máy truyền thống được sử dụng trong NIR.				
Tham chiếu Ngày xuất bản	Nhiệm vụ NIR	Người mẫu	Công đức	giới hạn
Tháng 4 năm 2007, [58]	Rượu	Phân tích thành phần chính (PCA)+bình phương nhỏ nhất từng phần (PLS)	Có thể hiệu chỉnh hiệu quả.	Việc tạo ra các hiệu chuẩn NIR cho rượu vang các thông số thành phần không phải là mục đích của nghiên cứu này.
Tháng 5 năm 2018, [73]	Dầu ô liu	Hồi quy bình phương nhỏ nhất một phần (PLSR)	Thành phần chính và phụ của ô liu dầu có thể được thực hiện một cách đơn giản, nhanh chóng và được định lượng đồng thời.	Hiệu suất của từng sterol mô hình dự đoán hình thức là subpar.
Tháng 6 năm 2017, [74]	α-tocopherol và tổng số nội dung tocopherol	PLS và phân tích phân biệt (PLS-DA)	Các kỹ thuật nhanh chóng và thiết thực được sử dụng trong ngành công nghiệp phân loại dầu ô liu.	Số lượng mẫu có hạn.
Tháng 3 năm 2021, [75]	Độ ẩm, protein và chất béo trong thịt	Trực giao hóa (THỂ THAO)/trực giao hóa (PORTO)+PLSR	Giảm sai số và sai lệch lên tới 52% và 84% tương ứng.	Sự kết hợp của dữ liệu từ nhiều kỹ thuật hiệu chỉnh phân tán là cần thiết.
Tháng 4 năm 2019, [39]	Độ ẩm hạt gạo	PLS+điều chỉnh lại trọng số thích ứng cạnh tranh hình vuông (CARS)	Xác định nhanh độ ẩm hạt gạo.	Kết quả về tính ổn định và tính bắc cầu các thí nghiệm xác minh cho các mô hình đã được không cung cấp.
Tháng 12 năm 2019, [76]	Các loại bột gạo	PLS-DA+máy vectơ hỗ trợ (SVM) Độ chính xác cao.		Độ bền của mô hình cần được đảm bảo được xác minh thêm.
Tháng 5 năm 2020, [77]	Nhiều sự giả mạo dầu hạt lanh.	Bình phương tối thiểu riêng phần trực giao-một lớp bình phương tối thiểu một phần (OPLS-OCPLS)	Có thể phát hiện hiệu quả đơn, kép hoặc nhiều chất ngoại tình với độ chính xác cao; có thể nhanh chóng phát hiện sự pha trộn đa biến của các mục tiêu đã biết.	Các loại dầu hạt lanh bị pha trộn thực tế là không đủ và sự công nhận độ chính xác 95,8% vẫn cần phải được cải thiện.
Tháng 8 năm 2020, [78]	Sữa bột	Độ phân giải đường cong đa biến - xen kẽ bình phương tối thiểu (MCR-ALS)	Có thể xác định chính xác.	Mẫu sữa không đạt tiêu chuẩn bị nhiễm độc melamin và sucrose.
Tháng 12 năm 2021, [79]	Nồng độ huyết sắc tố máu	Monte Carlo+độ co rút tuyệt đối nhỏ nhất và toán tử lựa chọn + học tập cực độ máy (MC-LASSO-ELM)	Độ ổn định tốt hơn và độ chính xác cao nhất.	Quy trình vận hành mô hình được phức tạp và kết quả MC cho một tập hợp con mẫu có ảnh hưởng trực tiếp đến kết quả của mô hình hoàn chỉnh
Tháng 9 năm 2017, [80]	Viêm xương khớp	PCA+SVM+PLS	Chứng minh năng lực của NIR quang phổ để theo dõi những thay đổi trong nền sụn khớp.	Khả năng đánh giá năng lực của NIR quang phổ để ước tính liên quan đến collagen thông tin đã không được cung cấp.
Tháng 3 năm 2020, [81]	Chất hữu cơ trong đất (SOM)	Savitzky-Golay (SG)+bình thường tiêu chuẩn biến thiên (SNV)+đạo hàm bậc nhất (FD)+PLSR	Kiểm tra nhanh; một cách đơn giản và không phá hủy phương pháp phân tích.	Quy trình tiền xử lý đã phức tạp; sơ bộ kết quả thực nghiệm.

Bảng 2. Tiếp theo					
Tham chiếu	Ngày xuất bản	Nhiệm vụ NIR	Người mẫu	Công đức	giới hạn
	Tháng 3 năm 2017, [82]	Cà phê	Thuật toán di truyền+SVM	Một phương pháp nhanh chóng và hiệu quả mà không cần sản xuất chất thải hóa học.	Việc lựa chọn mẫu là bắt buộc.
	Tháng 4 năm 2022, [83]	Lưu huỳnh hexaflorua	GA-ELM	Độ chính xác dự đoán cao hơn; điều hành hiệu quả; sự ổn định tốt hơn; sự khái quát hiệu suất.	Đó là một thách thức để khai thác một cách hiệu quả các tính năng sử dụng thuật toán GA.
	Tháng 10 năm 2015, [84]	Dầu hạt	MLR+SVR+ANN	Lỗi dự đoán nhanh, đơn giản và thấp hơn.	Phương pháp lựa chọn bước sóng tốt hơn cho sử dụng làm tín hiệu đầu vào cần được giải quyết.
	Tháng 6 năm 2017, [33]	Giá trị axit trong dầu đậu phộng	GA-Si-PLS	Đo lường đồng thời và nhanh chóng giá trị axit trong dầu đậu phộng.	Tất cả các thuật toán được so sánh đều các thuật toán dựa trên PLS đơn giản.
	Tháng 9 năm 2017, [85]	Độ ôi của dầu tía tô	Phương pháp phân tích đa biến ANN	Các mô hình ANN được sản xuất tốt nhất kết quả dự đoán.	Chỉ PCR và PLSR được sử dụng để so sánh kết quả thực nghiệm và mô hình các thông số có thể được tối ưu hóa hơn nữa.
	Tháng 9 năm 2017, [86]	Dầu, phenol, glucosinolate, và hàm lượng axit béo trong hạt có dầu nguyên vẹn Các loài cải	Bình phương tối thiểu một phần đã sửa đổi (MLPS)	Độ chính xác dự đoán cao hơn.	Phương trình dựa trên NIRS phải là được cải thiện hơn nữa bằng cách bao gồm các mẫu từ nhiều môi trường khác nhau với một mức độ đồng đều phạm vi giá trị lớn hơn.
	Tháng 11 năm 2017, [87]	Dầu Copaiba	PLSR	Nhanh; không cần chuẩn bị mẫu; độ tin cậy.	Phải so sánh nhiều thuật toán hơn chứng minh tính ưu việt của PLSR.
	Tháng 6 năm 2019, [36]	Dầu ô liu	BOSS-PLS	Phân tích định lượng nhanh chóng.	Các mẫu thí nghiệm không đủ đa dạng.
	Tháng 11 năm 2019, [6]	Ước tính hàm lượng đường của cam quýt	Hồi quy tuyến tính bội từng bước (SMLR)	Hiệu suất phát hiện cao hơn.	Phát hiện thí nghiệm cam quýt trực tuyến được yêu cầu.
	Tháng 8 năm 2018, [14]	Thịt gà	SVM; Cây quyết định	Tránh cấu hình phức tạp hoặc cần để có kiến thức chuyên môn về một kỹ thuật cụ thể.	Độ chính xác có thể được cải thiện hơn nữa.
	Tháng 4 năm 2016, [88]	Hạt mè	Phân tích phân biệt đa yếu tố	Độ chính xác phân loại trên 90%.	Phân tích mẫu hạt giống sâu hơn là cần thiết để tăng độ chính xác phân biệt đối xử.

6.3. Máy vectơ hỗ trợ (SVM) và hồi quy vectơ hỗ trợ (SVR)

SVM là một trình phân loại học siêu phẳng nhằm tối đa hóa sự khác biệt giữa hai lớp. Siêu phẳng được tính toán bằng cách định vị các điểm dữ liệu gần ranh giới lớp; những điểm dữ liệu này được gọi là vectơ hỗ trợ (SV). Một bộ hồi quy có tên SVR học một siêu phẳng dựa trên hai mặt phẳng biên cách đều nhau. Hầu hết các điểm dữ liệu cần học đều được ghi lại bởi các mặt phẳng biên. Đa cộng tuyến được loại bỏ bằng cách sử dụng thuật ngữ chính quy hóa để loại bỏ các điểm dữ liệu phụ thuộc trong thuật toán SVM và SVR. Mỗi quan hệ tuyến tính giữa dữ liệu đầu vào và dữ liệu đầu ra được mô hình hóa bằng SVM và SVR. SVM và SVR đều mô hình hóa mối quan hệ tuyến tính giữa dữ liệu đầu vào và đầu ra. Hạt nhân sử dụng sản phẩm bên trong trong không gian nhiều chiều để đánh giá sự giống nhau giữa các điểm dữ liệu. Siêu phẳng giữa kernel và dữ liệu đầu ra được SVM và SVR của kernel học. Lời giải thích chi tiết về SVM và SVR có thể được tìm thấy trong [89]. Công trình trong [90] đề xuất sử dụng kết hợp quang phổ hình ảnh cận hồng ngoại (NIR) và máy vectơ hỗ trợ (SVM) để phát hiện bột thịt và xương (MBM) trong thức ăn hỗn hợp. SVM hoạt động tốt hơn đáng kể so với hai thuật toán PLS và ANN cân bằng hóa học khác, với tỷ lệ phát hiện dương tính giả thấp hơn đáng kể.

6.4. Mạng chuyển tiếp nguồn cấp dữ liệu một lớp (SLFN)

SLFN [66] là các mạng có lớp đầu ra và một lớp ẩn. Các nút ẩn của SLFN có thể là các nút ẩn sigmoid giống nơ-ron hoặc các nút ẩn Fourier. Trọng số lớp ẩn và lớp đầu ra của SLFN được huấn luyện bằng phương pháp lan truyền ngược, tính toán độ dốc của các tham số mạng ở mỗi lớp và sử dụng phương pháp giảm độ dốc để cập nhật các tham số mạng ở mỗi lớp. Các tính năng không tương quan của bộ dữ liệu NIR được học bằng cách sử dụng chính quy. Nghiên cứu trong [91] đã nghiên cứu khả năng kết hợp SLFN, bao gồm 451 nơ-ron ở lớp đầu vào, 1 đến 30 nơ-ron ở lớp ẩn và một nơ-ron duy nhất ở lớp đầu ra và quang phổ cận hồng ngoại (NIRS) để dự đoán các thuộc tính cảm quan. Kết quả chỉ ra rằng kiến trúc SLFN được tối ưu hóa áp dụng cho phổ NIR đã phân loại chính xác tất cả các mẫu.

6.5. Cây quyết định (DT) và Rừng ngẫu nhiên (RF)

Cây quyết định (DT) [92] là một kiến trúc phi tham số bao gồm các nút trong cấu trúc cây. Các nút bao gồm một quy tắc quyết định dựa trên dữ liệu đầu vào để quyết định xem nên chuyển ngang dữ liệu đầu ra của nút bên phải hay bên trái và dữ liệu đầu ra của nút dưới cùng. DT được sử dụng cho cả nhiệm vụ phân loại và hồi quy và ưu điểm chính là thuật toán có thể hiểu được. Thu thập thông tin là một phương pháp phổ biến để xây dựng các nút trong cây sử dụng entropy để tính toán lượng thông tin mà mỗi tính năng trong dữ liệu đầu vào được giữ lại trước khi xác định dữ liệu đầu ra. Nghiên cứu trong [93] đã trình bày một số ví dụ về cách sử dụng DT và tập hợp của chúng trong phân tích dữ liệu quang phổ NIR cho cả hồi quy và phân loại. Các kết quả thử nghiệm chứng minh rằng phương pháp DT rất hiệu quả trong việc phân loại/phân biệt đối xử dữ liệu NIR bao gồm các bộ dữ liệu đa biến.

Rừng ngẫu nhiên (RF) [94] là một tập hợp các DT, trong đó mỗi DT được tạo bởi một tập hợp con của dữ liệu đầu vào. Kết quả là, mỗi kiến trúc DT khác biệt với các kiến trúc khác và các quyết định được đưa ra theo đa số phiếu. Tuy nhiên, để RF hoạt động, các tập hợp con của dữ liệu đầu vào được sử dụng để tạo các cây riêng lẻ phải không tương quan với nhau. Kiến trúc DT tương tự có thể được tạo ra bởi các tập hợp con tương quan của dữ liệu đầu vào. Nghiên cứu trong [95] đề xuất xác định thuốc nhuộm thực phẩm indigotine trong kem bằng công nghệ quang phổ cận hồng ngoại kết hợp với mô hình rừng ngẫu nhiên. Các kết quả thực nghiệm được trình bày trong nghiên cứu lần đầu tiên cho thấy NIRS kết hợp với mô hình rừng ngẫu nhiên là một công cụ hiệu quả để dự đoán nhanh chóng và không phá hủy sắc tố indigotine trong kem.

6.6. Cuộc thảo luận

Việc điều tra các ứng dụng khác nhau là trọng tâm nghiên cứu chính của NIR. NIR đã được sử dụng rộng rãi trong các ứng dụng trong đó việc xác định chất lượng thực phẩm tốn thời gian do sử dụng các phương pháp xâm nhập [14,33,38,73-76,96,97]. Các

việc pha trộn các mặt hàng thực phẩm đất tiền đã trở nên phổ biến và NIR đã được sử dụng để xác định thành công mức độ pha trộn [36,77,78,87,98-100]. Là một phương pháp nhanh chóng với chi phí thấp để xác định bệnh tật, NIR cũng đã được sử dụng trong các ứng dụng y tế [79,80]. Do vị trí địa lý chỉ cung cấp dấu hiệu sơ lược về chất lượng của thực phẩm hoặc khoáng sản nên NIR có thể xác định vị trí sản xuất các mặt hàng này [81,82,101]. Ngoài ra, NIR còn có khả năng xác định chất lượng gỗ [12], xác định tuổi của polyvinyl clorua (PVC) [102], đánh giá ô nhiễm nước [103], xác định nồng độ lưu huỳnh hexafluorua [83], xác định sự pha trộn của hỗn hợp diesel [104], phân loại các loại rau quả [105], phân loại các loại hạt [106] và xác định bệnh thối thân ở cây cọ dầu [107].

Một số nghiên cứu đã điều tra việc phát triển các thuật toán mới cho NIR và thực hiện lựa chọn siêu tham số mở rộng để xác định tính hiệu quả của các thuật toán được đề xuất như máy học tập cục bộ (EELM) [108], tăng cường ELM [109]. Lựa chọn rameter hyperpa cho SVM dựa trên vectơ hỗ trợ (SV) và tìm kiếm dựa trên lưới đã được nghiên cứu về NIR để mô hình đã học có thể hiểu được [110].

Phản ứng tổng hợp dữ liệu đã được sử dụng trong NIR để kết hợp thông tin từ các cảm biến khác nhau để thu thập các thông tin khác nhau như xác định mức độ tạp nhiễm của mật ong bằng NIR và MIR [111], xác định hàm lượng bột gạo bằng NIR và MIR [112], xác định kho gạo tuổi thọ dựa trên điều kiện bảo quản sử dụng NIR và cảm biến khí [113], tăng cường xử lý trà bằng NIR và thị giác máy tính [114], xác định chất lượng hạt giống cây trồng bằng hình ảnh NIR và tia X [115], và xác định chất lượng của trái cây bằng cách sử dụng hai thiết bị NIR di động có phạm vi khác nhau [116].

7. Kiến trúc sâu cho NIR

Kiến trúc sâu là kiến trúc nhiều lớp tích hợp các nhiệm vụ phân loại hoặc hồi quy từ đầu đến cuối. Chúng có khả năng xấp xỉ các hàm phức tạp bằng cách tìm hiểu cấu trúc mạng phi tuyến sâu, xác định cách biểu diễn phân tán của dữ liệu đầu vào và thể hiện khả năng mạnh mẽ để tìm hiểu các thuộc tính chính của bộ dữ liệu từ một số bộ thử nghiệm hạn chế. Mạng nơ-ron học sâu có thể tự động học cách biểu diễn tính năng hiệu quả bằng cách áp dụng các phép biến đổi phi tuyến tính cho các tính năng dữ liệu thô. Các cấu trúc sâu phổ biến nhất và ứng dụng của chúng trong quang phổ NIR được tóm tắt trong phần này. Bản tóm tắt các kiến trúc sâu trong NIR được tổng hợp trong Bảng 3.

Các kiến trúc sâu phổ biến nhất bao gồm (1) bộ mã hóa tự động xếp chồng (SAE) [117]; (2) bộ mã hóa tự động biến thiên (VAE) [118]; (3) mạng nơ-ron tích chập (CNN) [119]; (4) CNN với mạng thần kinh tái phát (RNN) [120]; (5) máy học cục bộ đa lớp (ML-ELM) [121]; (6) máy học cục bộ trường tiếp nhận cục bộ (LRF ELM) [122]; và (7) mạng đối thủ tổng hợp (GAN).

7.1. Bộ mã hóa tự động xếp chồng (SAE) và Bộ mã hóa tự động biến thể (VAE)

SAE bao gồm một bộ mã hóa tìm hiểu đa dạng chiều thấp của dữ liệu đầu vào và bộ giải mã tái tạo lại dữ liệu đầu vào. Theo thứ tự ngược lại, bộ giải mã có cùng số lớp và số nơ-ron ẩn như bộ mã hóa. Là một mạng nhiều lớp, SAE hội tụ đến mức tối thiểu cục bộ. Để cải thiện sự hội tụ, phương pháp học hai bước được sử dụng. Bộ mã hóa tự động một lớp (AE) tìm hiểu trọng số của bộ mã hóa-bộ giải mã cho mỗi lớp trong bước học theo lớp tham lam trước khi tinh chỉnh SAE. Do đó, SAE chia việc học SAE nhiều lớp thành hai giai đoạn: học AE một lớp và tinh chỉnh AE nhiều lớp. Wojciech và cộng sự. tại Đại học Khoa học và Công nghệ AGH đã sử dụng ba mô hình khác nhau để đánh giá đất và đất: SAE, CNN và mô hình ngăn xếp, bao gồm một tập hợp các thuật toán perceptron đa lớp với hai phương pháp riêng biệt để ước tính hồi quy nhằm phân tích Vis- Tán hiệu đáp ứng phổ NIR [123]. Fu và cộng sự. đã đề xuất một bộ mã hóa tự động thừa thớt xếp chồng lên nhau kết hợp với máy vectơ hỗ trợ được tối ưu hóa tìm kiếm chim cu (CS) (SSAE-CS-SVM) để phân tích dữ liệu siêu phổ cận hồng ngoại (NIR) của hạt ngô (871,61-1766,32nm) để thu được hạt ngô nhận dạng giống [124].

Bảng 3. Tóm tắt các kiến trúc sâu được sử dụng trong NIR.					
Tham chiếu	Ngày xuất bản	Nhiệm vụ NIR	Người mẫu	Công đức	giới hạn
	Tháng 12 năm 2022, [125]	Sắc tố xanh sáng trong kem	Bộ mã hóa tự động-học sâu (AE-DN)	Chi phí tính toán thấp hơn, độ chính xác cao hơn và tốc độ nhanh hơn với các mẫu không bị hư hại.	Các bước tiền xử lý tín hiệu dự phòng
	Tháng 9 năm 2019, [126]	Axit Aristolochic (AAS) 1D CNN		Nếu không có tính năng trích xuất, có thể có hiệu quả, không phá hủy, và nhanh chóng xác định.	Mẫu dữ liệu thử nghiệm bị hạn chế và không thể so sánh với các phương pháp học sâu khác các phương pháp đã được thực hiện.
	Tháng 6 năm 2020, [127]	Thuốc	Học chuyển giao dựa trên CNN	Độ chính xác phân loại cao hơn với ít hơn dữ liệu huấn luyện.	Việc xác nhận được thực hiện với số lượng nhỏ bộ dữ liệu thử nghiệm; không so sánh với sự chuyển giao hiện đại các mô hình học tập.
	Tháng 8 năm 2020, [128]	Cá hồi, cá ngừ và món ngon thịt bò	Học máy dựa trên CNN	Với tính năng bất biến dịch chuyển, biến thể gây ra bởi việc sử dụng nhiều thiết bị trong một cài đặt trong thế giới thực có thể được giảm thiểu.	Các loại công nhận độ tươi phải được khả năng ứng dụng cảnh trong thế giới thực được mở rộng phải được cải thiện và độ chính xác nhận dạng vẫn có thể được cải thiện.
	Tháng 9 năm 2021, [129]	Hoa quả tươi	Tích chập 1 chiều đa đầu ra mạng lưới thần kinh	RMSE thấp hơn; dễ dàng thích nghi với mô hình đa phân hồi bằng cách thay đổi đầu ra của các lớp được kết nối đầy đủ.	Việc sử dụng phương pháp học chuyển giao để xử lý, cập nhật và chuyển một mô hình duy nhất sang tích hợp nhiều câu trả lời là không được thảo luận.
	Tháng 6 năm 2019, [130]	Đất	Mạng lưới thần kinh tích chập	Khả năng học tập đa nhiệm; đa chiều tận dụng đầu vào; hiệu suất cao hơn; khả năng giải thích của bước sóng quan trọng các biến dùng để dự đoán tính chất của đất thông qua phân tích độ nhạy.	Đói dữ liệu; nhiều siêu tham số; đòi hỏi cao cấp hơn phần cứng máy tính.
	Tháng 11 năm 2021, [131]	Trà	Biến thể thông thường tiêu chuẩn (SNV)+TeaNet; SNV+TeaResNet; SNV+TeaMobilenet	Nhanh chóng, không xâm phạm và thân thiện với môi trường giải pháp thân thiện với độ chính xác 100%.	Các loại dữ liệu NIR khác nhau đòi hỏi lựa chọn dữ liệu tốt nhất phương pháp tiền xử lý.
	Tháng 5 năm 2021, [132]	xoài khô	Phương pháp hóa học + mô hình DL	Cải thiện hiệu suất dự đoán của DL mô hình; đạt được RMSEP thấp nhất.	Việc sử dụng bộ dữ liệu lớn là cần thiết.
	Tháng 12 năm 2020, [13]	Tổng nitơ của đất (STN) nội dung	Ba CNN có cấu trúc khác nhau mô hình+khởi đầu	Hiệu suất tốt và mạnh mẽ sự khái quát.	Đủ số lượng các loại đất cùng loại mẫu có cấu trúc vật lý tương tự được yêu cầu; kết quả thí nghiệm của thuật toán bị ảnh hưởng nặng nề bởi tiền xử lý chẳng hạn như lựa chọn tính năng.

Bảng 3. Tiếp theo					
Tham chiếu	Ngày xuất bản	Nhiệm vụ NIR	Người mẫu	Công đức	giới hạn
	Tháng 10 năm 2020, [133]	Than	Thuật toán tối ưu hóa coyote được cải thiện (I-COA) +cực đoan dựa trên trường tiếp nhận cục bộ máy học (LRF-ELM)	Cải thiện tính kinh tế, tốc độ và độ chính xác đồng thời mở rộng quang phổ hiệu quả hơn tính chất của than.	Thời gian đào tạo dài.
	Tháng 12 năm 2020, [134]	Đất	Một mạng lưới thần kinh tích chập chung và kiến trúc mạng lưới thần kinh tái phát (CCNVR)	Cải thiện đáng kể khả năng dự đoán độ chính xác và khả năng di chuyển tốt hơn.	Với ít mẫu huấn luyện hơn, mô hình sự chắc chắn và chính xác sẽ giảm đáng kể.
	Tháng 6 năm 2021, [135]	Hàm lượng muối trong đất nhiễm mặn kiềm (SAS)	Mạng lưới thần kinh tích chập-trọng lực máy tính hồ chứa-học tập cực độ máy (CNN-GRC-ELM).	Phương pháp nhanh chóng, chi phí thấp và chính xác.	Không so sánh với các công nghệ tiên tiến khác mô hình học sâu; thí nghiệm dữ liệu mẫu không đủ.
	Tháng 6 năm 2022, [136]	Polyetylen	Bộ mã hóa tự động biến thiên β (β -VAE)	Cải thiện khả năng phân tích quang phổ dữ liệu từ các hệ thống không đồng nhất phức tạp.	Cần nhiều thuật toán hơn để so sánh hơn so với thuật toán PCA.
	Tháng 10 năm 2020, [137]	Ô nhiễm nguồn nước	Một mạng lưới thần kinh tích chập được cải tiến (CNN)+cây quyết định	Cải thiện độ chính xác dự đoán NIR; quyết tâm nhanh chóng.	Chỉ có kết quả thử nghiệm sơ bộ; các tham số của cây quyết định có tác động đến hiệu suất của mô hình.
	Tháng 1 năm 2020, [138]	Ngũ cốc	Bộ mã hóa tự động thưa thớt xếp chồng (SSAE)+affine chuyển đổi (AT) + học tập cực độ máy (ELM)	Phương pháp nhanh chóng, hiệu quả và tiết kiệm để phân tích đặc tính ngũ cốc với kết quả dự đoán tốt.	Các mẫu thử nghiệm không đủ về mặt số lượng và sự đa dạng.
	Có thể. 2020, [139]	Tế bào	Mie tuyệt chủng-nhân rộng mở rộng hiệu chỉnh tín hiệu (ME-EMSC)	Về tốc độ, độ bền và tiếng ồn cấp độ, DSAE hoạt động tốt hơn Mie tín hiệu nhân mở rộng tuyệt chủng hiệu chỉnh (ME-EMSC).	Trong các kết quả thử nghiệm sơ bộ, một số lượng lớn các thử nghiệm bổ sung mẫu được yêu cầu.
	Tháng 11 năm 2020, [140]	Đất	CNN	Khi số lượng mẫu hiệu chuẩn vượt quá 2000 thì CNN chính xác hơn hơn các mô hình học máy.	Các bộ dữ liệu lớn hơn nên được khám phá để kiểm tra sự khái quát hóa độ chính xác so với mẫu kích thước và khám phá xem liệu học sâu Mô hình CNN từng đạt đến trạng thái ổn định sự chính xác.
	Tháng 11 năm 2020, [141]	Biến dạng vật lý	Tín hiệu nhân mở rộng tăng cường (EMSA)+SpectraVGG	Sự hội tụ xảy ra nhiều hơn nhanh chóng và kết quả tốt hơn.	Kết quả mô hình cuối cùng rất mạnh mẽ bị ảnh hưởng bởi các phương pháp được sử dụng cho dữ liệu tăng cường và tiền xử lý tín hiệu.

Đầu ra bộ mã hóa của AE một lớp được cho bởi

$$h = f(xW1 + b1) \quad (3)$$

trong đó $f()$ là hàm kích hoạt phi tuyến chẳng hạn như sigmoid và $W1$ và $b1$ lần lượt là trọng số và độ lệch của bộ mã hóa. Đầu ra bộ giải mã của AE một lớp được cho bởi

$$z = f(hW2^T + b2) \quad (4)$$

trong đó z là đầu vào được xây dựng lại x và $W2$ và $b2$ lần lượt là trọng số và độ lệch của bộ giải mã. Hàm mục tiêu sau đây được giảm thiểu bởi AE và SAE:

$$J_r = E_x \|x - z\|_2^2 \quad (5)$$

trong đó E_x là giá trị kỳ vọng. Cuối cùng, lớp giải mã SAE bị loại bỏ và tùy theo nhiệm vụ, lớp phân loại hoặc hồi quy sẽ được thêm vào. Các biến thể SAE khác, chẳng hạn như bộ mã hóa tự động hợp đồng xếp chồng (SCAE) [142], học một đa tạp chiều thấp bất biến với những thay đổi nhỏ và được đưa ra bởi

$$J_c = J_r + \sum_j \frac{\delta(x_{in} - x_{out})^2}{\delta x_j} \quad (6)$$

Bộ mã hóa tự động khử nhiễu xếp chồng (SDAE) [143] học một đa tạp chiều thấp không thay đổi nhiễu và được đưa ra bởi

$$J_d = E_x \|x - \tilde{z}\|_2^2 \quad (7)$$

trong đó \tilde{x} là dữ liệu đầu vào bị hỏng ngẫu nhiên.

AE học được một đa tạp chiều thấp, điều này thuận lợi cho nhiệm vụ tiếp theo như phân loại hoặc hồi quy.

VAE là một mô hình tổng quát tạo ra các mẫu bằng cách lập mô hình phân phối chung $P(x, z)$. Phân bố chung được tính bằng cách lập mô hình phân bố có điều kiện $P(x|z)$ và nhân với $P(z)$ là $P(x, z) = P(x|z)P(z)$. Kết quả là, bộ mã hóa VAE ánh xạ dữ liệu đầu vào tới một đa tạp có chiều thấp với phân bố Gaussian do có thể tính được phân bố chung $P(x, z)$ nếu biết phân bố của đa tạp có chiều thấp. Do đó, bộ mã hóa có thể được loại bỏ khỏi VAE và giá trị phân phối Gaussian ngẫu nhiên có thể được tạo và chuyển đến bộ giải mã để tạo mẫu. Tối ưu hóa VAE được đưa ra bởi

$$J_{svae} = J_{sae} + KL(q(z|x) || N(0, 1)) \quad (8)$$

trong đó $N(0, 1)$ là phân bố chuẩn có giá trị trung bình bằng 0 và phương sai bằng 1 và $q(z|x)$ là phân bố đầu ra gần đúng của bộ mã hóa.

7.2. Mạng thần kinh chuyển đổi (CNN)

CNN tìm hiểu các đặc điểm cục bộ như đỉnh dữ liệu NIR bằng cách sử dụng một loạt các lớp tích chập và gộp, theo sau là lớp được kết nối đầy đủ để phân loại hoặc hồi quy. Trọng số của lớp tích chập được gọi là hạt nhân và mỗi hạt nhân chỉ kết nối với một phần dữ liệu đầu vào được gọi là trường tiếp nhận cục bộ (LRF). Để xử lý tất cả dữ liệu đầu vào, các hạt nhân được di chuyển từ đầu này sang đầu kia, bao phủ tất cả chúng bằng sự chồng chéo. Kích thước hạt nhân, chuyển động hoặc bước tiến của hạt nhân và số lượng hạt nhân là các siêu tham số do người dùng cung cấp. Lớp tích chập tạo ra bản đồ đặc trưng cho từng hạt nhân bằng cách tính tích số chấm của từng LRF và hạt nhân. Mỗi hạt nhân chỉ kết nối với một LRF, cho phép hạt nhân có được các tính năng cục bộ. Có hai kết quả đầu ra khác nhau từ một lớp tích chập: (1) giống nhau; và (2) hợp lệ. Để đưa ra bản đồ đặc trưng sau

Hoạt động tích chập có cùng kích thước với dữ liệu đầu vào, cùng một lớp tích chập sẽ tăng kích thước của dữ liệu đầu vào bằng cách đệm các số 0. Dữ liệu đầu vào không được đệm bởi lớp chập hợp lệ và bản đồ đối tượng có kích thước thấp hơn dữ liệu đầu vào. Hoạt động tích chập 2D được đưa ra bởi

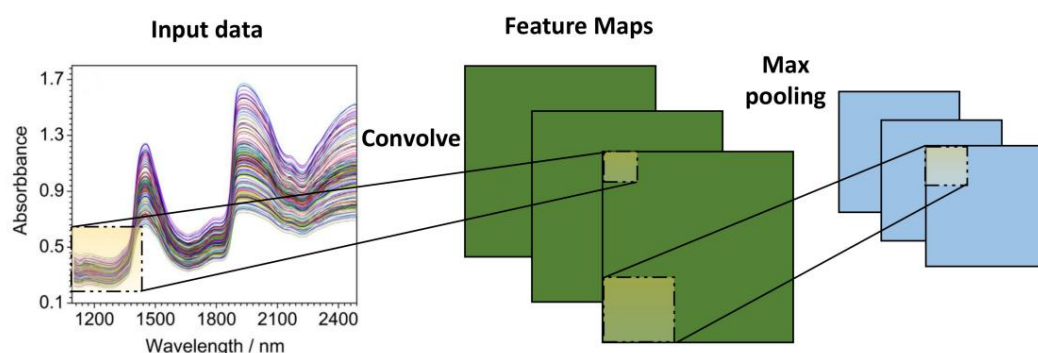
$$h(k)1 = \sum_j W1(k) \cdot x(i, j) \quad (9)$$

trong đó $W1(k)$ là hạt nhân thứ k và $h(k)1$ là bản đồ đặc trưng k của phép toán tích chập. Bản đồ đặc trưng được lấy mẫu xuống bằng cách thêm lớp gộp sau lớp chập. Để tìm hiểu các tính năng cấp cao, lớp tổng hợp kết hợp các tính năng cấp thấp.

Lớp gộp bao gồm một hạt nhân với các giá trị cố định di chuyển từ đầu này sang đầu kia bao gồm tất cả các đầu ra của các lớp trước đó và sử dụng phép toán tối đa hoặc trung bình để tính toán đầu ra thay vì tích số chấm. Hoạt động tổng hợp tối đa 2D được đưa ra bởi

$$h(k)2 = \max_{i,j} Rh(k)1(i, j) \quad (10)$$

trong đó R là vùng gộp tối đa được sử dụng. Các phép toán tích chập và gộp được minh họa trong Hình 4.



Hình 4. Minh họa lớp tích chập và lớp gộp được sử dụng trong CNN.

Khi thiết kế CNN, hướng nghiên cứu chính là nâng cao khả năng khái quát hóa của CNN bằng cách tăng các lớp và giải quyết các vấn đề gặp phải khi tăng các lớp. AlexNet là CNN đầu tiên được áp dụng cho các nhiệm vụ phân loại hình ảnh và được chứng minh là có khả năng sử dụng bộ xử lý đồ họa (GPU) để giảm thời gian đào tạo [144]. VGGNet [145] đã mở rộng thêm AlexNet bằng cách tăng số lượng lớp từ 8 lên 19 và giảm kích thước hạt nhân từ 11 xuống 3, giúp cải thiện khả năng khái quát hóa của mô hình. Một trong những vấn đề chính khi tăng số lượng lớp CNN ngoài 19 là các lớp ban đầu không được cập nhật khi độ dốc trở nên nhỏ hơn ở mỗi lớp hoặc bùng nổ do lỗi lớn của mạng CNN sâu. ResNet [146] là mạng đầu tiên sử dụng 152 lớp và đã giải quyết được vấn đề biến mất và bùng nổ độ dốc bằng cách bỏ qua các kết nối giữa một khối các lớp.

Tuy nhiên, một số lớp không có được bất kỳ khả năng hữu ích nào. Để tránh vấn đề này, Wide ResNet [147] đã giảm số lớp xuống còn 40 trong khi tăng số lượng bản đồ đặc trưng của mỗi lớp.

Kiến trúc CNN sử dụng nhiều loại lớp khác nhau để tìm hiểu mô hình ánh xạ dữ liệu đầu vào với dữ liệu đầu ra và nắm bắt các tính năng quan trọng. Kết quả là, các kiến trúc CNN khác nhau được sử dụng cho các loại dữ liệu khác nhau. Ví dụ: để chuyển đổi giọng nói thành văn bản, kiến trúc CNN với các lớp chập và lặp lại đã được sử dụng [148] vì các lớp lặp lại có thể nắm bắt thông tin thời gian dài hạn. DeepSpectra, một kiến trúc CNN với ba lớp tích chập và một mô-đun khởi động, cũng được giới thiệu cho dữ liệu NIR [149]. Mô-đun khởi động bao gồm các lớp chập song song với các kích thước hạt nhân khác nhau. Mô-đun khởi động đã huấn luyện các bộ lọc thừa thớt bằng cách phân phối các tính năng giữa các lớp tích chập song song để cải thiện khả năng tổng quát hóa. dữ liệu

các tính năng thừa thớt vì chỉ có một số tính năng mô tả thành phần của mẫu và được các lớp chấp bằng mô-đun khởi động trong DeepSpectra ghi lại.

7.3. Mạng thần kinh tái phát (RNN) và sự chú ý

RNN được sử dụng cho dữ liệu chuỗi thời gian trong xử lý ngôn ngữ tự nhiên (NLP), nhận dạng cảm xúc giọng nói (SER), chuyển giọng nói thành văn bản (STT) và các quy trình khác [150]. Vì độ dài sóng được đo đều đặn nên trục bước sóng được coi là trục chuỗi thời gian trong dữ liệu NIR.

Có nhiều loại RNN như RNN đơn giản, bộ nhớ ngắn hạn dài (LSTM) [151] và các đơn vị tái phát có kiểm soát (GRU) [152]. RNN tính toán lớp ẩn dựa trên bước thời gian trước đó và đầu ra của lớp ẩn của RNN đơn giản được đưa ra bởi

$$h(t) = f(W1x(t) + W2h(t-1) + b1) \quad (11)$$

trong đó $W1$ là trọng số dữ liệu đầu vào, $W2$ là trọng số đầu ra $h(t-1)$ của lớp ẩn trước đó và $b1$ là độ lệch. Vấn đề độ dốc biến mất và bùng nổ ảnh hưởng đến các RNN đơn giản với các bước thời gian dài. LSTM giải quyết vấn đề độ dốc biến mất bằng cách sử dụng bộ nhớ để ghi nhớ độ dốc của các bước thời gian trước đó. GRU là phiên bản hợp lý của LSTM với độ phức tạp tính toán thấp hơn. GRU đã được chứng minh là hoạt động tương tự như LSTM trên các tập dữ liệu có số lượng mẫu dữ liệu hạn chế, nhưng LSTM vượt trội hơn GRU trên các tập dữ liệu có số lượng mẫu lớn.

RNN xuất ra một loạt trạng thái ẩn ở mỗi bước thời gian khi được sử dụng để phân loại hoặc hồi quy, với trạng thái hoặc số liệu thống kê gần đây nhất từ các trạng thái ẩn, chẳng hạn như giá trị trung bình hoặc độ lệch chuẩn, được sử dụng làm đầu vào. Tuy nhiên, những phương pháp này không phải lúc nào cũng chọn trạng thái ẩn thích hợp nhất. Ngược lại, cơ chế chú ý có thể được sử dụng để chọn trạng thái ẩn tốt nhất cho RNN để phân loại hoặc hồi quy.

Trong dịch thuật ngôn ngữ, sự chú ý đầu tiên được đưa ra là xác định các từ khóa. Hình 5 cho thấy một lớp lặp lại, theo sau là một cơ chế chú ý. Sự chú ý đạt được điều này bằng cách sử dụng các trọng số để định lượng tầm quan trọng của từng đầu ra của RNN, được đưa ra bởi

$$s = \sum_t \alpha(t)h(t) \quad (12)$$

trong đó $\alpha(t)$ là trọng số được chú ý học để đo tầm quan trọng của trạng thái ẩn của RNN và được tính như sau

$$\alpha(t) = \text{softmax}(v(t)) \quad (13)$$

trong đó $W3$ là trọng số có thể học được và $v(t)$ là đầu ra SLFN, tìm hiểu tầm quan trọng của trạng thái ẩn của RNN và được đưa ra bởi

$$v(t) = W4 \tanh(W3h(t) + b2) \quad (14)$$

7.4. Kiến trúc máy học cực sâu ELM lần đầu tiên

được giới thiệu dưới dạng SLFN và đã chứng minh hiệu suất tốt đối với dữ liệu với số lượng mẫu đào tạo hạn chế như dữ liệu NIR [153]. Do các kiến trúc sâu khác yêu cầu số lượng lớn mẫu đào tạo, ELM đã được mở rộng sang các kiến trúc sâu nhằm cải thiện khả năng khái quát hóa cho dữ liệu với ít mẫu đào tạo.

Máy học cực đoạn nhiều lớp (ML-ELM) được phát triển bằng cách xếp chồng các trọng số đầu ra của bộ mã hóa tự động máy học cực đoạn (ELM-AE) để học một đa tạp chiều thấp với số lượng mẫu đào tạo hạn chế. Ngược lại với SAE, ML-ELM sử dụng một phương pháp đào tạo đơn giản hơn, trong đó lớp phân loại hoặc hồi quy được học sau một bước đào tạo theo từng lớp tham lam. Do đó, ML-ELM không yêu cầu bất kỳ tinh chỉnh nào, giúp rút ngắn thời gian đào tạo. Hơn nữa, trọng số đầu vào của ELM-AE được chọn ngẫu nhiên và không được điều chỉnh, trong khi trọng số đầu ra là

tính toán bằng giải pháp dạng đóng. Đầu ra lớp ẩn của ELM-AE được tính như sau:

$$h = f(xW_1 + b_1) \quad (15)$$

trong đó $f()$ là hàm kích hoạt phi tuyến chẳng hạn như sigmoid và W_1 và b_1 là các trọng số và độ lệch ngẫu nhiên không được điều chỉnh. Đầu ra của ELM-AE như sau:

$$z = hWT_2 \quad (16)$$

trong đó z là đầu ra của ELM-AE và W_2 là trọng số đầu ra của ELM-AE được tính toán bằng giải pháp dạng đóng như sau:

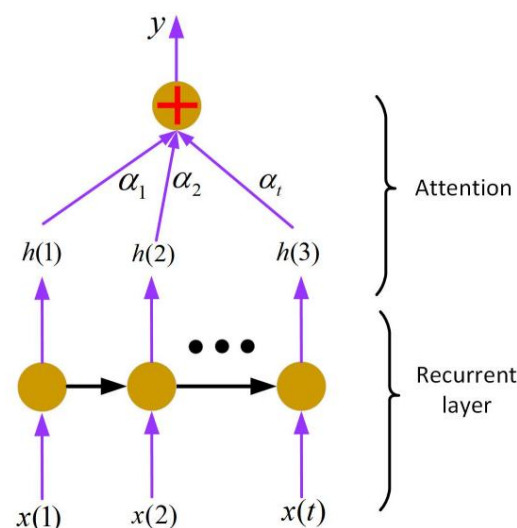
$$WT_2 = (H^T H + 1/C)^{-1} H^T T_X \quad (17)$$

trong đó C là siêu tham số do người dùng cung cấp. Trong trường hợp ML-ELM một lớp, lớp ẩn đầu tiên của ML-ELM được tính như sau:

$$h_1 = f(xW_2). \quad (18)$$

ELM-AE tính toán và xếp chồng các lớp trọng số ML-ELM tiếp theo, như được hiển thị trong Công thức (17) và (18), tương ứng.

LRF-ELM là kiến trúc CNN có một hoặc nhiều lớp tích chập, theo sau là lớp tổng hợp tối đa và lớp phân loại hoặc lớp hồi quy. Ngược lại với các lớp tích chập thông thường, cập nhật trọng số hạt nhân của chúng bằng cách truyền ngược, trọng số hạt nhân của LRF-ELM là ngẫu nhiên trực giao và không được điều chỉnh. Phân tách giá trị số ít (SVD) được áp dụng cho các trọng số hạt nhân ngẫu nhiên để tạo ra các trọng số hạt nhân ngẫu nhiên trực giao. Các tính năng được chia tỷ lệ và xoay ngẫu nhiên được chứa trong các trọng số hạt nhân ngẫu nhiên, trong khi các tính năng trong các trọng số ngẫu nhiên trực giao chỉ được xoay ngẫu nhiên. Các đối tượng được chia tỷ lệ ngẫu nhiên được hiển thị vô dụng và chỉ các đối tượng được xoay ngẫu nhiên mới hữu ích, vì lớp gộp đưa ra tính bất biến của tỷ lệ.



Hình 5. Lớp lặp lại với cơ chế chú ý.

7.5. Mạng đối thủ sáng tạo (GAN)

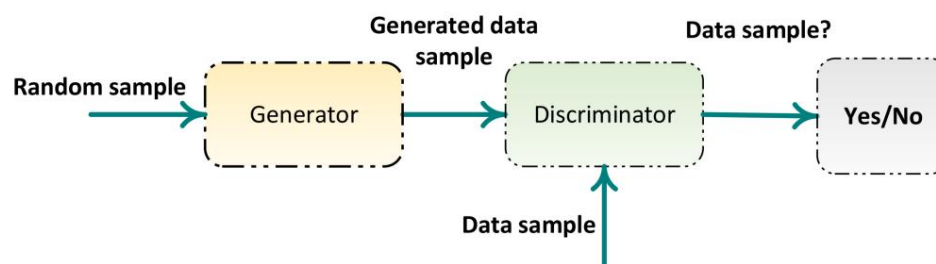
Do số lượng mẫu đào tạo có sẵn cho dữ liệu NIR có hạn, GAN được sử dụng để tạo các mẫu đào tạo mới [154]. GAN là một mô hình tổng quát bao gồm một mạng máy phát tạo ra dữ liệu từ một vectơ ngẫu nhiên được lấy mẫu từ phân phối Gaussian và một bộ phân biệt đối xử cố gắng xác định xem dữ liệu được tạo có giống với dữ liệu thực tế hay không, như được mô tả trong Hình 6. Do đó, mục tiêu là tối đa hóa tổn thất của bộ phân biệt trong khi giảm thiểu tổn thất của bộ tạo. Mạng thần kinh được kết nối đầy đủ, CNN hoặc RNN

các kiến trúc được chọn dựa trên kiểu dữ liệu có thể được sử dụng làm công cụ tạo và phân biệt đối xử. Kiến trúc CNN+RNN cho bộ tạo và bộ phân biệt sẽ phù hợp với dữ liệu NIR vì nó có thể nắm bắt các đặc điểm cục bộ cũng như mối quan hệ lâu dài giữa các bước sóng. Zheng và cộng sự. đề xuất một phương pháp mạng đối nghịch tạo ra hai chiều (BI-GAN) đã được sửa đổi để phân loại phổ cận hồng ngoại của thuốc, do tình trạng khó xử là không đủ mẫu trong một lớp và mất cân bằng mẫu giữa các lớp. Kết quả chứng minh rằng mô hình dựa trên CNN hoạt động tốt hơn bộ mã hóa tự động xếp chồng, có tỷ lệ lỗi cao nhất khi ước tính đặc điểm đất [155].

Yang và cộng sự. các thuật toán học máy được đề xuất kết hợp với quang phổ NIR để phân biệt chính xác thì là và thì là từ ba vùng khác nhau, Turpan, Yumen và Dezhou, với tất cả các tham số mô hình không thay đổi [156]. Việc tối ưu hóa GAN như sau:

$$\min_G \max_D V(D, G) = E_x \log(D(x)) + E_z \log(1 - D(G(z))) \quad (19)$$

trong đó $D()$ là bộ phân biệt đối xử, $G()$ là bộ tạo và z là vectơ ngẫu nhiên được lấy mẫu từ phân bố Gaussian. GAN phân loại dữ liệu thực và dữ liệu được tạo bằng quy trình học hai bước, trong đó bước đầu tiên chỉ cập nhật các trọng số của bộ phân biệt đối xử. Trong bước thứ hai, các trọng số của trình tạo được sửa đổi để tạo ra dữ liệu nhằm đánh lừa người phân biệt đối xử tin rằng đó là dữ liệu thực. Phần lớn kiến trúc được mô tả trong tài liệu sử dụng thuật toán ML để ánh xạ các giá trị hấp thụ NIR tới đầu ra mong muốn.



Hình 6. Cấu trúc của mạng GAN.

Ngược lại với VAE sử dụng sai số bình phương trung bình (MSE) để đo lường khả năng tái thiết, GAN sử dụng mô hình phân biệt đối xử để đo lường khả năng tái thiết. MSE không phải là thước đo thích hợp để đo lường quá trình tái thiết vì nó không tính đến tầm quan trọng của các đặc điểm. Do đó, việc tái tạo GAN được người dùng đánh giá là thực tế hơn so với việc tái tạo VAE.

7.6. Cuộc thảo luận

Mặc dù hầu hết các phương pháp học máy truyền thống đều được sử dụng cho dữ liệu NIR từ các mẫu chất lỏng hoặc khí, nhưng kiến trúc sâu được sử dụng cho dữ liệu NIR từ các mẫu rắn. Kiến trúc sâu có thể làm giảm phương sai do các mẫu rắn gây ra, có độ dài đường đi thay đổi do tán xạ. Kiến trúc sâu được sử dụng trong NIR để xác định chất lượng thuốc [125-127,157], thịt, rau và trái cây [128-132], hàm lượng đất và khoáng chất [13,133-135,158], vết nứt trong đường ống nước [136], ngày sản xuất giấy [159], và ô nhiễm nước [137], cũng như trong đánh giá sơ bộ về bệnh tật [160]. Các thử nghiệm được thực hiện trên bốn bộ dữ liệu riêng biệt chứa các mẫu rắn đã chứng minh rằng số lượng mẫu huấn luyện ảnh hưởng đến khả năng khái quát hóa của các thuật toán học sâu [140,141].

Dữ liệu NIR có số lượng mẫu huấn luyện hạn chế do khó lấy được dữ liệu được dán nhãn. Tạo dữ liệu bằng GAN là một phương pháp để tăng số lượng mẫu đào tạo [154]. Tuy nhiên, khả năng khái quát hóa của thuật toán học máy có thể bị ảnh hưởng bởi chất lượng của dữ liệu được tạo ra. Do đó, người gắn nhãn nên đánh giá dữ liệu được tạo để xác định xem chúng có đủ chất lượng để đào tạo hay không.

Các kiến trúc sâu như SAE và VAE được sử dụng như một phương pháp giảm tính năng phi tuyến, trái ngược với phương pháp giảm tính năng PCA thường được các phương pháp học máy truyền thống sử dụng cho dữ liệu NIR. Cách tiếp cận giảm bớt tính năng là phi tuyến tính trong SAE và VAE, không có ánh xạ với các tính năng được rút gọn và không thể diễn giải các tính năng dữ liệu NIR không rút gọn.

Kiến trúc sâu cũng được sử dụng để tiền xử lý, nhằm mục đích loại bỏ phương sai liên quan đến tán xạ. Để thực hiện điều này, một kiến trúc bộ mã hóa-giải mã tích chập vượt trội hơn các chức năng tiền xử lý khác đã được giới thiệu [139].

8. Kết luận

Các thuật toán học máy cho nghiên cứu quang phổ NIR đã được xem xét trong bài báo này. Việc xử lý quang phổ NIR bằng thuật toán ML là phương pháp được sử dụng rộng rãi, nhanh chóng và không xâm lấn để xác định thành phần của mẫu mục tiêu.

Phần lớn các kiến trúc được báo cáo trong tài liệu đều sử dụng thuật toán ML để ánh xạ các giá trị hấp thụ NIR tới đầu ra mong muốn. Có hai loại kiến trúc mạng cho thuật toán ML: phương pháp học máy truyền thống và kiến trúc mạng sâu.

Kiến trúc mạng sâu có nhiều lớp ẩn, trong khi các phương pháp học máy truyền thống chỉ có một vài hoặc không có lớp nào. Kiến trúc mạng sâu sử dụng các tính năng thô, trong khi các phương pháp học máy truyền thống đòi hỏi kỹ thuật chuyên môn về các tính năng phù hợp. Ngược lại với kiến trúc mạng sâu, hiệu suất của các phương pháp học máy truyền thống phụ thuộc vào các tính năng được thiết kế. Do đó, sự phổ biến của kiến trúc mạng sâu ngày càng tăng, do các chuyên gia không còn cần thiết phải thiết kế các tính năng nữa. Cần phải xử lý trước dữ liệu nhiều để loại bỏ nhiễu phân cực cộng và nhân trước khi thuật toán ML có thể hoạt động như dự kiến do không gian dành cho pin và khả năng xử lý mạnh mẽ các thành phần trong thiết bị NIR di động bị hạn chế.

Một khía cạnh quan trọng khác là lựa chọn tính năng, xác định các bước sóng cụ thể mô tả thành phần của mẫu và giảm số lượng tính năng, giảm độ phức tạp tính toán của các mô hình học máy. Tóm lại, việc tích hợp nhiều thuật toán học máy một cách hiệu quả và nhẹ nhàng là mục tiêu của những nỗ lực nghiên cứu và phát triển trong tương lai.

Đóng góp của tác giả: Khái niệm hóa, ZL, YZ và QJW; phương pháp luận, LCK và WZ; viết-đánh giá và chỉnh sửa, WZ và LCK Tất cả các tác giả đã đọc và đồng ý với phiên bản đã xuất bản của bản thảo.

Tài trợ: Công trình này được hỗ trợ một phần bởi Cơ quan Khoa học, Công nghệ và Nghiên cứu (A*STAR) (số cấp A2090b0144), Quỹ Nghiên cứu Quốc gia Singapore (số cấp NRF CRP18-2017-02 và NRF-CRP19-2017- 01) và Hội đồng nghiên cứu y tế quốc gia (NMRC) (cấp số 021528-00001).

Tuyên bố của Ban Đánh giá Thẻ chế: Không áp dụng.

Tuyên bố đồng ý sau khi được thông báo: Không áp dụng.

Tuyên bố về tính sẵn có của dữ liệu: Không áp dụng.

Xung đột lợi ích: Các tác giả tuyên bố không có xung đột lợi ích.

Người giới thiệu

- Smith, BC Các ngón tay benzen, phần I: Âm bội và dải kết hợp. *Quang phổ* 2016, 31, 30–34.
- Quang phổ hồng ngoại Ozaki, Y.–Quang phổ hồng ngoại trung, cận hồng ngoại và hồng ngoại xa/Terahertz. *Hậu môn. Khoa học*. 2021, 37, 1193–1212. [[Tham khảo chéo](#)] [[PubMed](#)]
- Norris, KH; Hart, JR 4. Xác định trực tiếp độ ẩm của hạt và hạt bằng phương pháp quang phổ. *J. Quang phổ cận hồng ngoại*. 1996, 4, 23–30. [[Tham khảo chéo](#)]
- Ben-Gera, tôi.; Norris, KH Xác định bằng quang phổ trực tiếp chất béo và độ ẩm trong các sản phẩm thịt. *J. Khoa học thực phẩm*. 1968, 33, 64–67. [[Tham khảo chéo](#)]
- Skvaril, J.; Kyprianidis, KG; Dahlquist, E. Ứng dụng quang phổ cận hồng ngoại (NIRS) trong quá trình chuyển đổi năng lượng sinh khối: Đánh giá. ứng dụng. *Quang phổ. Rev.* 2017, 52, 675–728. [[Tham khảo chéo](#)]

6. Fu, XP; Vương, XY; Rao, XQ Một nguồn sáng có thể điều chỉnh quang phổ dựa trên đèn LED để phân tích quang phổ nhìn thấy và cận hồng ngoại: Một nghiên cứu điển hình về ước tính hàm lượng đường trong cam quýt. Hệ thống sinh học. Anh. 2017, 163, 87-93. [\[Tham khảo chéo\]](#)

7. Xie, LJ; Vương, AC; Xu, nhân sự; Fu, XP; Ying, YB Ứng dụng hệ thống cận hồng ngoại để đánh giá chất lượng trái cây: Đánh giá. Dịch. ASABE 2016, 59, 399-419.

8. Pasquini, C. Quang phổ cận hồng ngoại: Nguyên tắc cơ bản, khía cạnh thực tế và ứng dụng phân tích. J. Braz. Chem. Sóc. 2003, 14, 198-219. [\[Tham khảo chéo\]](#)

9. Haghi, RK; Dương, J.; Tohidi, B. Quang phổ cận hồng ngoại biến đổi Fourier (FTNIR) và thuật toán bình phương nhỏ nhất một phần (PLS) để theo dõi sự thay đổi thành phần trong khí hydrocarbon dưới áp suất tại chỗ. Nhiên liệu Năng lượng 2017, 31, 198-219. [\[Tham khảo chéo\]](#)

10. Rinnan, R.; Rinnan, Å. Ứng dụng phổ phản xạ hồng ngoại gần (NIR) và quang phổ huỳnh quang để phân tích vi sinh vật và tính chất hóa học của đất Bắc Cực. Đất sinh học. Hóa sinh. 2007, 39, 1664-1673. [\[Tham khảo chéo\]](#)

11. Nikzad-Langerodi, R.; Zellinger, W.; Lughofer, E.; Saminger-Platz, S. Hồi quy bình phương nhỏ nhất một phần bất biến miền. Hậu môn. Chem. 2018, 90, 6693-6701. [\[Tham khảo chéo\]](#)

12. Sandak, J.; Sandak, A.; Zitek, A.; Hintestoisser, B.; Picchi, G. Phát triển máy quang phổ cầm tay chi phí thấp để phát hiện khuyết tật gỗ. Cảm biến 2020, 20, 545. [\[CrossRef\]](#)

13. Vương, YT; Li, MZ; Ji, RH; Vương, MJ; Zheng, LH So sánh các mô hình dự đoán hàm lượng nitơ tổng số trong đất dựa trên quang phổ Vis-NIR. Cảm biến 2020, 20, 7078. [\[CrossRef\]](#)

14. Barbon, S.; Costa Barbon, APAd; Mantovani, RG; Barbin, DF Machine Learning áp dụng cho quang phổ cận hồng ngoại cho gà Phân loại thịt. Châu Á J. Spectrosc. 2018, 2018, 8949741. [\[Tham khảo chéo\]](#)

15. Nikzad-Langerodi, R.; Zellinger, W.; Saminger-Platz, S.; Moser, BA Điều chỉnh miền cho hồi quy theo định luật Beer-Lambert. Hệ thống dựa trên kiến thức 2020, 210, 106447. [\[Tham khảo chéo\]](#)

16. Gogé, F.; Thuries, L.; Fouad, Y.; Damay, N.; Davrieux, F. Bộ dữ liệu đo quang phổ hóa học và cận hồng ngoại của phân gia cầm và gia súc tươi và khô. Tóm tắt dữ liệu 2021, 34, 106447. [\[CrossRef\]](#)

17. Trường, M.; Kapper, C. Nghiên cứu nhu cầu xử lý trước dữ liệu quang phổ cận hồng ngoại như một hàm của cỡ mẫu. Hóa chất. Trí tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống. 2020, 204, 104105. [\[Tham khảo chéo\]](#)

18. Quách, R.; Vương, JS; Jin, HL; Lạc, L.; Yên, LH; Xie, AG Đo hàm lượng protein trong vũng bằng kỹ thuật quang phổ cận hồng ngoại. Trong Kỷ yếu của Hội nghị quốc tế về công nghệ mới trong nông nghiệp năm 2011, Zhengzhou, Trung Quốc, ngày 22-25 tháng 10 năm 2011.

19. Geladi, P.; MacDougall, D.; Martens, H. Tuyến tính hóa và hiệu chỉnh tán xạ cho phổ phản xạ cận hồng ngoại của thịt. ứng dụng. Quang phổ. 1985, 39, 491-500. [\[Tham khảo chéo\]](#)

20. Martens, H.; Stark, E. Hiệu chỉnh tín hiệu nhân rộng và trừ nhiễu quang phổ: Các phương pháp tiên xử lý mới cho quang phổ hồng ngoại gần. J. Pharm. Sinh học. Hậu môn. 1991, 9, 625-635. [\[Tham khảo chéo\]](#)

21. Helland, IS; Næs, T.; Isaksson, T. Các phiên bản liên quan của phương pháp hiệu chỉnh tán xạ nhân để xử lý trước dữ liệu quang phổ. Hóa chất. Trí tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống. 1995, 29, 233-241. [\[Tham khảo chéo\]](#)

22. Savitzky, A.; Golay, MJE Làm mịn và phân biệt dữ liệu bằng thủ tục bình phương tối thiểu đơn giản hóa. Hậu môn. Chem. 1964, 36, 1627-1639. [\[Tham khảo chéo\]](#)

23. Rinnan, Å.; Van Den Berg, F.; Engelsen, S. Xem xét các kỹ thuật tiên xử lý phổ biến nhất cho quang phổ cận hồng ngoại. Trắc-Trends Anal. Chem. 2009, 28, 1201-1222. [\[Tham khảo chéo\]](#)

24. Chen, HZ; Bài hát, QQ; Đường, GQ; Phong, QX; Lin, LL Sự tối ưu hóa kết hợp giữa làm mịn Savitzky-Golay và hiệu chỉnh tán xạ nhân cho các mô hình FT-NIR PLS. Hậu môn. Chem. 2013, 2013, 642190. [\[Tham khảo chéo\]](#)

25. Tiêu, YP; Lý, ZC; Trần, XS; Fei, SM Phương pháp tiên xử lý để hiệu chuẩn phổ cận hồng ngoại. J. Hóa học. 2020, 34, e3306. [\[Tham khảo chéo\]](#)

26. Heil, K.; Schmidhalter, U. Đánh giá các phương pháp xử lý trước quang phổ NIR khác nhau để rút ra các thông số đất C và N của đất giàu mùn-đất sét. Cảm biến 2021, 21, 1423. [\[CrossRef\]](#)

27. Gu, XY; Quách, JC; Tiêu, LJ; Li, CY Thuật toán lựa chọn tính năng dựa trên thông tin lẫn nhau có điều kiện để có mức độ liên quan tối đa dư thừa tối thiểu. ứng dụng. Trí tuệ. 2022, 52, 1436-1447. [\[Tham khảo chéo\]](#)

28. Bài, X.; Trương, L.; Kang, C.; Quân, B. Quang phổ cận hồng ngoại và kỹ thuật dựa trên máy học để dự đoán các thông số liên quan đến chất lượng trong trà hòa tan. Khoa học. Dân biểu 2022, 12, 3833. [\[CrossRef\]](#)

29. Dương, MH; Xu, DY; Chen, SC; Lý, HY; Shi, Z. Đánh giá các phương pháp học máy để dự đoán chất hữu cơ trong đất và pH sử dụng phổ Vis-NIR. Cảm biến 2019, 19, 263. [\[CrossRef\]](#)

30. Bossard, JA; Văn, S.; Werner, DH; Mayer, TS Tổng hợp các ngân xếp siêu vật liệu có chỉ số âm tổn thất thấp cho hồng ngoại giữa sử dụng thuật toán di truyền. Opt. Express 2009, 17, 14771-14779. [\[Tham khảo chéo\]](#)

31. Silva, LG; Péres, AFS; Quang phổ Freitas, DLD ATR-FTIR trong huyết tương kết hợp phân tích đa biến để phát hiện Nhiễm HIV ở phụ nữ mang thai. Khoa học. Dân biểu 2020, ngày 10, 20156. [\[CrossRef\]](#)

32. Bonah, E.; Hoàng, X.; Aheto, JH; Yi, S.; Tu, H. So sánh các thuật toán chọn lọc khác nhau trên quang phổ hình ảnh siêu phổ vis nir để theo dõi định lượng và hiển thị trực quan các mầm bệnh vi khuẩn gây bệnh thực phẩm trong cơ thịt lợn tươi. Vật lý hồng ngoại. Technol. 2020, 107, 103327. [\[Tham khảo chéo\]](#)

33. Dương, MX; Trần, QS; Kutsanedzie, FYH; Dương, XJ; Quách, ZM; Qin, OY Hệ thống quang phổ cầm tay xác định axit giá trị trong đầu đậu phộng dựa trên các thuật toán lựa chọn biến. Số đo 2017, 103, 179-185. [\[Tham khảo chéo\]](#)

34. Mishra, P.; Woltering, EJ Xác định các số sóng quan trọng giúp cải thiện khả năng dự đoán amyloza trong các mẫu lúa bằng cách sử dụng công nghệ tiên tiến kỹ thuật lựa chọn số sóng Talanta 2021, 224, 121908. [\[Tham khảo chéo\]](#)

35. Điền, Y.; Tôn J.; Chu, X.; Ngô, XH; Lữ, B.; Dai, CX Nghiên cứu về phân loại nguồn gốc táo dựa trên phương pháp thu nhỏ không gian lập đi lập lại có thể thay đổi bằng thuật toán máy vectơ hỗ trợ hồi quy từng bước và hình ảnh siêu phổ hồng ngoại gần nhìn thấy được. J. Chế biến thực phẩm Eng. 2020, 43, e13432. [\[Tham khảo chéo\]](#)

36. Giang, H.; Chen, QS Xác định hàm lượng tạp chất trong dầu ô liu nguyên chất bằng phương pháp quang phổ FT-NIR kết hợp với thuật toán BOSS-PLS. Phân tử 2019, 24, 2134. [\[CrossRef\]](#)

37. Kong, WW; Lưu, F.; Trương, JF; Feng, HL Xác định không phá hủy sự phân bố malondialdehyde (mda) trong hạt cải dầu lá bằng hình ảnh siêu âm nir quy mô phòng thí nghiệm. Khoa học. Dân biểu 2016, 6, 35393. [\[CrossRef\]](#)

38. Lâm, L.; Chảo.; Tiêu, ZT; Triệu, K.; Đồng, T.; Nie, Cảm biến phát hiện nhanh PC về độ ẩm hạt gạo dựa trên quang phổ NIR. ứng dụng. Khoa học. 2019, 9, 1654. [\[Tham khảo chéo\]](#)

39. Vương, trụ sở chính; Rehmetulla, AG; Quách, SS; Kong, X. Học máy dựa trên bộ dữ liệu quang phổ FTIR và cấu trúc để tự động phân loại hạt giống. RSC Adv. 2022, 12, 11413–11419. [\[Tham khảo chéo\]](#)

40. Yang, L. Phân biệt chất lượng nhanh chóng của dầu hạt nho bằng cách sử dụng phương pháp học máy cục đoạn với tia hồng ngoại gần (NIR) Quang phổ. Quang phổ 2021, 36, 14–20.

41. Hàn, QJ; Ngô, HL; Cái, CB; Xu, L.; Yu, RQ Một tập hợp các phương pháp loại bỏ biến không chính xác của Monte Carlo để lựa chọn bước sóng. Hậu môn. Chim. Acta 2008, 612, 121–125. [\[Tham khảo chéo\]](#)

42. Sampaio, PS; tăng vọt, A.; Castanho, A.; Almeida, NHU; Oliverira, J.; Brites, C. Tối ưu hóa việc xác định amyloza gạo bằng phương pháp quang phổ NIR sử dụng thuật toán hóa học PLS. Hóa chất thực phẩm. 2018, 242, 196–204. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)

43. Lưu, Y.; Vương, Y.; Hạ, Z.; Vương, Y.; Ngô, Y.; Gong, Z. Xác định nhanh phytosterol bằng NIRS và phương pháp đo hóa học. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2019, 211, 336–341. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)

44. Borraz-Martínez, S.; Simó, J.; Gras, A.; Mestre, M.; Boqué, R. Phân loại đa biến các giống prunus dulcis sử dụng lá của cây ươm và quang phổ cận hồng ngoại. Khoa học. Dân biểu 2019, ngày 9, 19810. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)

45. Shukla, A.; Bhatt, H.; Pani, AK Lựa chọn và mô hình hóa các biến từ dữ liệu phổ NIR: Một nghiên cứu điển hình về dự đoán chất lượng động cơ diesel bằng cách sử dụng LASSO và Cây hồi quy. Trong Kỷ yếu của Hội nghị Quốc tế về Dữ liệu, Kỹ thuật và Ứng dụng (IDEA) lần thứ 2, Bhopal, Ấn Độ, ngày 28–29 tháng 2 năm 2020.

46. Triệu, Z.; Vương, K.; Vương, S.; Tương, Y.; Bian, X. Cảm nhận sự thay đổi thực sự: Kỷ yếu của Hội nghị quốc tế lần thứ 20 về hồng ngoại gần Quang phổ; ICNIR 2021; Springer: Singapore, 2022; trang 291–300

47. Craig, AP; Vương, K.; Pháp, AS; Oliveira, LS; Irudayaraj, J.; Ileleji, K. Ứng dụng lưới đàn hồi và quang phổ hồng ngoại trong việc phân biệt cà phê rang bị lỗi và không bị lỗi. Talanta 2014, 128, 393–400. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)

48. Hư, LQ; Âm, CL; Mẹ, S.; Quang phổ Liu, ZM Vis-NIR kết hợp với lựa chọn bước sóng bằng thuật toán tối ưu hóa PSO để xác định đồng thời bốn thông số chất lượng và phân loại nước tương. Thực phẩm hậu môn. Ma túy đá. 2019, 12, 633–643. [\[Tham khảo chéo\]](#)

49. Ntunambirwe, JFI; Nieuwoudt, HH; Perold, WJ; Opaya, UL Đo không phá hủy chất lượng bên trong của quả táo bằng máy quang phổ NIR không tiếp xúc với tối ưu hóa mô hình thuật toán di truyền. Khoa học. Châu Phi 2019, 3, e00051. [\[Tham khảo chéo\]](#)

50. Hadoux, X.; Kant Kumar, D.; Sarossy, MG; Roger, JM; Gorretta, N. Lựa chọn bộ lọc dành riêng cho ứng dụng (ADSF) bằng cách sử dụng tối đa hóa hiệp phương sai và phép chiếu trực giao. Hậu môn. Chim. Acta 2016, 921, 1–12. [\[Tham khảo chéo\]](#)

51. Krepper, G.; Romeo, F. Xác định hàm lượng chất béo trong bánh mì kẹp thịt gà bằng phương pháp quang phổ NIR và Thuật toán dự đoán liên tiếp để chọn khoảng trong hồi quy PLS (iSPA-PLS). Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2018, 189, 300–306. [\[Tham khảo chéo\]](#)

52. Ye, SF; Vương, D.; Min, SG Thuật toán chiếu liên tiếp kết hợp với việc loại bỏ các biến không chính xác cho phổ lựa chọn biến. Hóa chất. Trí tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống. 2008, 91, 194–199. [\[Tham khảo chéo\]](#)

53. Vương, LS; Wang, RJ Xác định độ pH của đất từ quang phổ Vis-NIR bằng máy học cục đoạn và lựa chọn biến số: Một nghiên cứu điển hình về đất đen bê tông hóa vôi. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2022, 283, 121707. [\[Tham khảo chéo\]](#)

54. Trương, J.; Thôi, XY; Cái, WS; Shao, XG Một tiêu chí có tầm quan trọng thay đổi để lựa chọn biến trong phân tích quang phổ cận hồng ngoại. Khoa học. Trung Quốc-Chem. 2019, 62, 271–279. [\[Tham khảo chéo\]](#)

55. Xu, H.; Lưu, ZC; Cái, WS; Shao, XG Phương pháp lựa chọn bước sóng dựa trên thử nghiệm ngẫu nhiên cho quang phổ cận hồng ngoại Phân tích. Hóa chất. Trí tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống. 2009, 97, 189–193. [\[Tham khảo chéo\]](#)

56. Dias, R.; Garcia, NL; Ludwig, G.; Saraiva, MA Mô hình dữ liệu chức năng tổng hợp để hiệu chuẩn và dự đoán quang phổ cận hồng ngoại. J. Ứng dụng. Thống kê. 2015, 42, 127–143. [\[Tham khảo chéo\]](#)

57. Giang, Y.; Lựa chọn tính năng dựa trên Li, CV mRMR để phân loại tạp chất bóng bằng cách sử dụng hình ảnh siêu phổ. Máy tính. Điện tử. Nông nghiệp. 2015, 119, 191–200. [\[Tham khảo chéo\]](#)

58. Cozzolino, D.; Lưu, L.; Cynkar, WU; Damberg, RG; Janik, L.; Colby, CB; Gishen, M. Ảnh hưởng của sự thay đổi nhiệt độ đến phổ hồng ngoại nhìn thấy và gần của rượu vang và hậu quả đối với việc hiệu chuẩn bình phương nhỏ nhất một phần được phát triển để đo thành phần hóa học. Hậu môn. Chim. Acta 2007, 588, 224–230. [\[Tham khảo chéo\]](#)

59. Wold, H. Ước tính các thành phần chính và các mô hình liên quan bằng bình phương tối thiểu lặp lại. J. Multivar. Hậu môn. 1966, 1, 391–420.

60. Geladi, P.; Kowalski, BR Hồi quy bình phương nhỏ nhất một phần: Hướng dẫn. Hậu môn. Chim. Acta 1986, 185, 1–17. [\[Tham khảo chéo\]](#)

61. Hoàng, GB; Siew, CK Extreme learning machine: Trường hợp mạng RBF. Trong Kỷ yếu của Kiểm soát lần thứ 8 của ICARCV 2004, Hội nghị Tự động hóa, Robot và Tầm nhìn, Côn Minh, Trung Quốc, ngày 6–9 tháng 12 năm 2004.

62. Hoàng, GB; Chu, QY; Siew, CK Extreme learning machine: Lý thuyết và ứng dụng. Điện toán thần kinh 2006, 70, 489-501. [\[Tham khảo chéo\]](#)
63. Hoàng, GB; Chu, HM; Đinh, XJ; Zhang, R. Máy học cực đoan để hồi quy và phân loại nhiều lớp. IEEE Trans. Hệ thống. Người đàn ông Cybern. Phần B Cybern. 2011, 42, 513-529. [\[Tham khảo chéo\]](#)
64. Drucke, H.; Burges, CJ; Kaufman, L.; Smola, A.; Vapnik, V. Hỗ trợ máy hồi quy vector. Khuyến cáo. Thần kinh Inf. Quá trình. Hệ thống. 1997, 9, 155-161.
65. Cortes, C.; Vapnik, V. Mạng vectơ hỗ trợ. Mach. Học hỏi. 1995, 20, 273-297. [\[Tham khảo chéo\]](#)
66. Hoàng, GB; Chen, L.; Siew, CK Xấp xỉ phổ quát bằng cách sử dụng các mạng chuyển tiếp mang tính xây dựng tăng dần với các nút ẩn ngẫu nhiên. IEEE Trans. Mạng lưới thần kinh. 2006, 17, 879-892. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)
67. Trygg, J.; Wold, S. Các phép chiếu trực giao cho các cấu trúc tiềm ẩn (O-PLS). J. Hóa học. 2002, 16, 119-128. [\[Tham khảo chéo\]](#)
68. Chun, H.; Kele, S. Hồi quy bình phương nhỏ nhất một phần thừa thớt để giảm kích thước đồng thời và chọn biến. Thống kê JR. Súc. B 2010, 72, 3-25. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)
69. Rosipal, R.; Kele, S. Tổng quan và những tiến bộ gần đây trong bình phương tối thiểu một phần. Trong Kỷ yếu của không gian con, Cấu trúc tiềm ẩn và lựa chọn tính năng, Thống kê và tối ưu hóa, Hội thảo phối cảnh (SLSFS 2005), Bohinj, Slovenia, 23-25 tháng 2 năm 2005.
70. Camacho, W.; Karlsson, S. Định lượng chất chống oxy hóa trong polyetylen bằng phân tích hồng ngoại gần (NIR) và bình phương tối thiểu một phần (PLS) hồi quy. Int. J. Polym. Hậu môn. Nhân vật. 2002, 7, 41-51. [\[Tham khảo chéo\]](#)
71. Hoàng, G.; Hoàng, GB; Bài hát, SJ; Bạ, KY Xu hướng về máy học cực độ: Đánh giá. Mạng lưới thần kinh. 2015, 61, 32-48. [\[Tham khảo chéo\]](#)
72. Lý, RD; Hoàng, WY; Thương, GL; Trương, XB; Vương, X.; Lưu, JG; Vương, Y.; Kiều, JF; Quạt, X.; Wu, K. Nhanh chóng nhận biết khu vực sản xuất lá thuốc lá bằng công nghệ cận hồng ngoại và thuật toán máy học cực cao nhiều lớp. J. Braz. Chem. Súc. 2022, 33, 251-259. [\[Tham khảo chéo\]](#)
73. Özdemir, İS; Dağ, Ç. Định lượng sterol và axit béo của dầu ô liu nguyên chất bằng phương pháp quang phổ FT-NIR và đa biến Phân tích thống kê. LWT-Khoa học thực phẩm. Technol. 2018, 91, 125-132. [\[Tham khảo chéo\]](#)
74. Cayuela, JA; García, JF Phân loại dầu ô liu dựa trên hàm lượng alpha-tocopherol và tổng hàm lượng tocopherol bằng thống số kỹ thuật cận hồng ngoại phân tích nội soi (NIRS). J. Thực phẩm Eng. 2017, 202, 79-88. [\[Tham khảo chéo\]](#)
75. Minshra, P.; Verkleij, T.; Klont, R. Cải thiện khả năng dự đoán tính chất hóa học của thịt lợn băm bằng phương pháp quang phổ cận hồng ngoại bằng sự kết hợp của các kỹ thuật hiệu chỉnh tán xạ. Vật lý hồng ngoại. Technol. 2021, 113, 103643. [\[Tham khảo chéo\]](#)
76. Sampaio, PS; Castanho, A.; Almeida, NHU; Oliveira, J.; Brites, C. Xác định các loại bột gạo bằng quang phổ cận hồng ngoại liên quan đến phương pháp PLS-DA và SVM. Euro. Thực phẩm Res. Technol. 2020, 246, 527-537. [\[Tham khảo chéo\]](#)
77. Nhân dân tộc, Z.; Trương, LX; Vương, D.; Giang, J.; de B. Harrington, P.; Mao, J.; Trương, Q.; Li, PW Phát hiện sự pha trộn nhiều loại dầu hạt lanh bằng phương pháp quang phổ cận hồng ngoại và phân tích phân biệt đối xử bình phương nhỏ nhất một phần phi tuyến. LWT-Khoa học thực phẩm. Technol. 2020, 125, 109247. [\[Tham khảo chéo\]](#)
78. Mazivila, SJ; Páscoa, RNMJ; Castro, RC; Ribeiro, DSM; Santos, JLM Phát hiện melamine và sucrose là chất pha trộn trong sữa bột bằng phương pháp quang phổ cận hồng ngoại với DD-SIMCA là bộ phân loại một lớp và MCR-ALS là phương tiện để cung cấp bằng chứng pháp lý về hồ sơ nguyên chất của sữa và của cả hai chất pha trộn: Một bản tóm tắt ngắn gọn giao tiếp. Talanta 2020, 216, 120937.
79. Vương, KJ; Biện, XH; Zheng, M.; Lưu, P.; Lâm, LG; Tan, XY Xác định nhanh nồng độ hemoglobin bằng phương pháp máy học cực đoan mới kết hợp với quang phổ cận hồng ngoại. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2021, 263, 120138. [\[Tham khảo chéo\]](#)
80. Afar, IO; Prasad, P.; Arabshahi, Z.; Tiểu, Y.; Oloyede, A. Theo dõi tiến triển viêm xương khớp bằng tia hồng ngoại gần (NIR) quang phổ. Khoa học. Dân biểu 2017, 7, 11463. [\[CrossRef\]](#)
81. Ba, YL; Lưu, JB; Hàn, JC; Zhang, XC Ứng dụng quang phổ Vis-NIR để xác định hàm lượng chất hữu cơ trong đất mặn-kiềm. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2020, 229, 117863. [\[Tham khảo chéo\]](#)
82. Bona, E.; Marquette, P.; Liền kết, liên doanh; Makimori, GYF; da Costa Arca, V.; Guimarães Lemes, AL; Ferreira, JMG; dos Santos Scholz, MB; Valderrama, P.; Poppi, RJ Hỗ trợ máy vectơ song song với quang phổ hồng ngoại để phân loại địa lý cà phê Arabica xanh. LWT-Khoa học thực phẩm. Technol. 2017, 76, 330-336. [\[Tham khảo chéo\]](#)
83. Lưu, H.; Chu, J.; Âm, H.; Yên, QQ; Lưu, H.; Quan, SX; Cái, QS; Mặt trời, JW; Yao, S.; Wei, RY Máy học cực đoan và thuật toán di truyền trong phân tích định lượng lưu huỳnh hexafluoride bằng quang phổ hồng ngoại. Ứng dụng. Opt. 2020, 61, 2834-2841. [\[Tham khảo chéo\]](#)
84. Olivos-Trujillo, M.; Gajardo, HA; Salvo, S.; González, A.; Muñoz, C. Đánh giá tính ổn định của việc ước tính các tham số và độ chính xác dự đoán trong các phương pháp hồi quy để ước tính hàm lượng dầu hạt trong Brassica napus L. bằng phương pháp quang phổ NIR. Trong nội dung trình bày của Hội nghị CHILEAN 2015 về Kỹ thuật Điện, Điện tử, Công nghệ Thông tin và Truyền thông (CHILECON), Santiago, Chile, ngày 28-30 tháng 10 năm 2015.
85. Hồng, SJ; Rho, SJ; Lee, AY; Park, H.; Thôi, JS; Park, JM; Hồng, SJ; Kim, YR; Kim, G. Ước tính độ ôi của dầu hạt tía tô bằng cách sử dụng quang phổ cận hồng ngoại và kỹ thuật phân tích đa biến. J. Quang phổ. 2017, 2017, 1082612. [\[Tham khảo chéo\]](#)
86. Rahu, S.; Sanjula, S.; Gurpreet, K.; Surinder, SB Hiệu chuẩn quang phổ phản xạ cận hồng ngoại để đánh giá hàm lượng dầu, phenol, glucosinolate và axit béo trong hạt nguyên vẹn của loài Brassica có hạt có dầu. J. Khoa học. Nông nghiệp thực phẩm. 2018, 98, 4050-4057. 87. de Oliveira Moreira, AC; de Lira Machado, AH; de Almeida, FV; Braga, JWB Xác định nhanh độ tinh khiết của dầu copaiba bằng máy quang phổ NIR di động và PLSR. Thực phẩm hậu môn. Ma túy đá. 2018, 11, 1867-1877. [\[Tham khảo chéo\]](#)

88. Choi, YH; Hồng, CK; Công viên, GY; Kim, CK; Kim, JH; Jung, K.; Kwon, JH Một cách tiếp cận không phá hủy để phân biệt nguồn gốc của hạt vừng bằng phương pháp quang phổ ED-XRF và NIR với phương pháp hóa học. Khoa học thực phẩm. Công nghệ sinh học. 2016, 25, 433–438. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)
89. Kumar, B.; Vyas, OP; Vyas, RJ Đánh giá toàn diện về các biến thể của máy vectơ hỗ trợ. Mod. Vật lý. Lett. B 2019, 33, 1950303. [\[Tham khảo chéo\]](#)
90. Piera, JAF; Baeten, V.; Renier, AM; Cogdill, RP; Dardenne, P. Kết hợp máy vectơ hỗ trợ (SVM) và quang phổ hình ảnh hồng ngoại gần (NIR) để phát hiện bột thịt và xương (MBM) trong thức ăn hỗn hợp. J. Hóa học. 2004, 18, 341–349. [\[Tham khảo chéo\]](#)
91. Revilla, tôi.; Vivar-Quintana, sáng; María Inmaculada, G.; Miriam, H.; Ivan, M.; Pedro, H. Quang phổ NIR để phân biệt và dự đoán đặc tính cảm quan của thịt bò khô “Cecina”. Cảm biến 2020, 20, 6892. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)
92. Hyafil, L.; Ronald, LR Việc xây dựng cây quyết định nhị phân tối ưu là NP-đầy đủ. Thông báo. Quá trình. Lett. 1976, 5, 15–17. [\[Tham khảo chéo\]](#)
93. Kucheryavskiy, S. Phân tích dữ liệu quang phổ NIR bằng cách sử dụng cây quyết định và tập hợp của chúng. J. Hậu môn. Bài kiểm tra. 2018, 2, 274–289. [\[Tham khảo chéo\]](#)
94. Hồ, TK Rừng quyết định ngẫu nhiên. Trong Kỷ yếu của Hội nghị quốc tế lần thứ 3 về phân tích và công nhận tài liệu, Montréal, QC, Canada, 14–16 tháng 8 năm 1995; Tập 1, trang 278–282.
95. Trương, SP; Tân, ZL; Lưu, J.; Xu, ZH; Du, Z. Xác định thuốc nhuộm thực phẩm indigotine trong kem bằng công nghệ quang phổ cận hồng ngoại kết hợp mô hình rừng ngẫu nhiên. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2020, 227, 117551. [\[Tham khảo chéo\]](#)
96. Kahrıman, F.; Onaç, I.; Mert Türk, F.; Öner, F.; Egesel, C.Ö. Xác định hàm lượng carotenoid và tocopherol trong bột ngô và mẫu dầu bằng phương pháp quang phổ cận hồng ngoại. Quang phổ. Lett. 2019, 52, 473–481. [\[Tham khảo chéo\]](#)
97. Thiếu sinh quân, XF; Lộ-Thống, O.; Cục, S.; Dehak, R.; Bessafi, M. Sử dụng máy học và quang phổ hồng ngoại để mô tả đặc tính lưu biến và ứng dụng cho quả mơ. Khoa học. Dân biểu 2019, ngày 9, 19197. [\[Tham khảo chéo\]](#)
98. Lưu, P.; Vương, J.; Lý, Q.; Cao, J.; Tân, XY; Bian, XH Nhận dạng và định lượng nhanh chóng Panax notoginseng với các chất pha trộn của nó bằng phương pháp quang phổ cận hồng ngoại kết hợp với hóa học. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2019, 206, 23–30. [\[Tham khảo chéo\]](#)
99. Mặt trời, XF; Lý, HL; Yi, Y.; Hứa, HM; Quan, Y.; Chen, C. Phát hiện và định lượng nhanh chóng sự pha trộn trong bột quả táo gai Trung Quốc bằng phương pháp quang phổ cận hồng ngoại kết hợp với phương pháp hóa học. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2021, 250, 119346. [\[Tham khảo chéo\]](#)
100. Martinez-Castillo, C.; Lạc lối, G.; Mejuto, JC; Simal-Gandara, J. Rừng ngẫu nhiên, mạng lưới thần kinh nhân tạo và vectơ hỗ trợ mô hình máy phân loại mật ong. Thực phẩm điện tử 2020, 1, 69–76. [\[Tham khảo chéo\]](#)
101. Lôi, M.; Trương, L.; Lý, M.; Chen, HY; Zhang, X. Phổ cận hồng ngoại để xác định nguồn gốc than dựa trên thuật toán SVM. Trong Kỷ yếu của Hội nghị Kiểm soát Trung Quốc (CCC) lần thứ 37 năm 2018, Vũ Hán, Trung Quốc, ngày 25–27 tháng 7 năm 2018.
102. Kirkbright, GF; Menon, KR Xác định vinyl axetat kết hợp trong chất đồng trùng hợp polyvinyl clorua/polyvinyl axetat bằng phép đo quang phổ quang học cận hồng ngoại và phép đo phổ phản xạ khuếch tán. Hậu môn. Chim. Acta 1982, 136, 373–377. [\[Tham khảo chéo\]](#)
103. Chen, HZ; Xu, LL; Ai, W.; Lin, B.; Phong, QX; Cai, K. Các chức năng hạt nhân được nhúng trong các mô hình học máy vectơ hỗ trợ để đánh giá ô nhiễm nước nhanh chóng thông qua quang phổ cận hồng ngoại. Khoa học. Tổng môi trường. 2020, 714, 136765. [\[Tham khảo chéo\]](#)
104. Camara, ABF; de Carvalho, LS; de Moraes, CLM; de Lima, LAS; de Araújo, HOM; de Oliveira, FM; de Lima, KMG MCR-ALS và PLS kết hợp với quang phổ NIR/MIR để định lượng và xác định chất tạp nhiễm trong hỗn hợp diesel sinh học-diesel. Nhiên liệu 2017, 210, 497–506. [\[Tham khảo chéo\]](#)
105. Gupa, O.; Das, AJ; Hellerstein, J.; Raskar, R. Phương pháp học máy để phân loại sản phẩm trên quy mô lớn. Khoa học. Dân biểu 2018, 8, 5226. [\[Tham khảo chéo\]](#)
106. Guinda, A.; Rada, M.; Benaissa, M.; Ourrach, tôi.; Cayuela, JA Kiểm soát chất lượng hạt argan bằng NIR. Mứt. Hóa Dầu. Súc. 2015, 92, 1143–1151. [\[Tham khảo chéo\]](#)
107. Ahmadi, P.; Muharam, FM; Ahmad, K.; Mansor, S.; Abu Seman, I. Phát hiện sớm bệnh thối thân nấm linh chi ở cây cọ dầu sử dụng phân tích quang phổ mạng lưới thần kinh nhân tạo. Thực vật Dis. 2017, 101, 1009–1016. [\[Tham khảo chéo\]](#)
108. Trần, H.; Tân, C.; Lin, Z. Tập hợp các máy học cục bộ để hiệu chuẩn đa biến của quang phổ cận hồng ngoại. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2020, 229, 117982. [\[Tham khảo chéo\]](#)
109. Biên, XH; Trương, CX; Tân, XY; Dymek, M.; Quách, YG; Lâm, LG; Cheng, B.; Hu, XY Một máy học cục bộ cao tăng cường để phân tích định lượng quang phổ cận hồng ngoại của các mẫu nhiên liệu diesel và dầu hỗn hợp ăn được. Hậu môn. Phương pháp 2017, 9, 2983–2989. [\[Tham khảo chéo\]](#)
110. Devos, O.; Ruckebusch, C.; Durand, A.; Duponchel, L.; Huvenne, JP Máy vectơ hỗ trợ (SVM) trong quang phổ hồng ngoại gần (NIR) : Tập trung vào tối ưu hóa các tham số và giải thích mô hình. Hóa chất. Trí tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống. 2009, 96, 27–33. [\[Tham khảo chéo\]](#)
111. Hoàng, FR; Song, H.; Quách, L.; Quảng, PW; Dương, XH; Lý, LQ; Triệu, HX; Yang, MX Phát hiện sự pha trộn trong mật ong Trung Quốc bằng cách sử dụng phản ứng tổng hợp dữ liệu quang phổ NIR và ATR-FTIR. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2020, 235, 118297. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)
112. Xu, ZP; Thành, WM; Quạt, S.; Lưu, J.; Vương, HP; Lý, XH; Lưu, BM; Ngô, YJ; Trương, PF; Wang, Q. Sự kết hợp dữ liệu của phổ phản xạ khuếch tán cận hồng ngoại và phổ truyền qua để xác định chính xác các thành phần bột gạo. Hậu môn. Chim. Acta 2022, 1193, 339384. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)

113. Malegori, C.; Buratti, S.; Oliveri, P.; Ratti, S.; Cappa, C.; Lucisano, M. Một phương pháp tổng hợp dữ liệu cấp trung đã được sửa đổi trên môi điện tử và dữ liệu FT-NIR để đánh giá ảnh hưởng của các điều kiện bảo quản khác nhau đến thời hạn sử dụng của mầm lúa. *Talanta* **2020**, *206*, 120208. [\[Tham khảo chéo\]](#)

114. Vương, YJ; Lý, LQ; Lưu, Y.; Thôi, QQ; Ninh, JM; Zhang, ZZ Tăng cường giám sát chất lượng trong quá trình chế biến chè đen bằng sự kết hợp giữa nirs và thị giác máy tính. *J. Thực phẩm Eng.* **2021**, *304*, 110599. [\[Tham khảo chéo\]](#)

115. Medeiros, THÊM; Silva, LJD; Ribeiro, JPO; Ferreira, KC; Rosas, JTF; Santos, AA; Silva, CBD Học máy để phân loại chất lượng hạt giống: Một cách tiếp cận nâng cao sử dụng dữ liệu hợp nhất từ quang phổ FT-NIR và hình ảnh tia X. *Cảm biến* **2020**, *20*, 4319. [\[CrossRef\]](#)

116. Mishra, P.; Marini, F.; Brouwer, B.; Roger, JM; Biancolillo, A.; Woltering, E.; Hogeveen-van Echtelt, E. Kết hợp thông tin tuần tự từ hai máy quang phổ cầm tay để cải thiện dự đoán về độ ẩm và hàm lượng chất rắn hòa tan trong quá lên. *Cảm biến* **2021**, *223*, 121733. [\[CrossRef\]](#)

117. Hinton, GE; Osindero, S.; Teh, YW Một thuật toán học nhanh cho mạng lưới niềm tin sâu sắc. *Máy tính thần kinh.* **2006**, *18*, 1527-1554. [\[Tham khảo chéo\]](#)

118. Vua, DP; Welling, M. Tự động mã hóa các vịnh biển thể. Trong *Kỷ yếu của Hội nghị Quốc tế lần thứ 2 về Đại diện Học tập (ICLR)*, Banff, AB, Canada, 14-16 tháng 4 năm 2014.

119. Lécun, Y.; Bottou, L.; Bengio, Y.; Haffner, P. Học tập dựa trên gradient áp dụng cho nhận dạng tài liệu. *Proc. IEEE* **1998**, *86*, 2278-2324. [\[Tham khảo chéo\]](#)

120. Hochreiter, S.; Schmidhuber, J. Trí nhớ ngắn hạn dài. *Máy tính thần kinh.* **1997**, *9*, 1735-1780. [\[Tham khảo chéo\]](#)

121. Đặng, BH; Trương, XM; Công, WY; Shang, DP Tổng quan về Máy học cực đoan. Trong *Kỷ yếu của Hội nghị quốc tế lần thứ 4 về Điều khiển, Robot và Điều khiển học (CRC)*, Tokyo, Nhật Bản, ngày 27-30 tháng 9 năm 2019.

122. Hoàng, GB; Tả, B.; Công, WY; Kasun, LLC; Vong, CM Lĩnh vực tiếp thu cục bộ dựa trên máy học cực đoan. *Máy tính IEEE. Trí tuệ. Mag.* **2015**, *10*, 18-29. [\[Tham khảo chéo\]](#)

123. Gruszczy `nsk, S.; Gruszczy ´nski, W. Hỗ trợ đánh giá đất và đất bằng các mô hình học máy sử dụng quang phổ Vis-NIR phản ứng. *Geoderma* **2022**, *25*, 115451. [\[Tham khảo chéo\]](#)

124. Fu, LH; Mặt trời, J.; Vương, SM; Xu, M.; Yao, KS; Cao, Y.; Tang, NQ Nhận dạng các giống ngô dựa trên bộ mã hóa tự động thừa thớt xếp chồng lên nhau và công nghệ hình ảnh siêu phổ cận hồng ngoại. *J. Chế biến thực phẩm Eng.* **2022**, *45*, e14120. [\[Tham khảo chéo\]](#)

125. Lưu, J.; Trương, JX; Tân, ZL; Hầu, Q.; Liu, RR Phát hiện hàm lượng sắc tố xanh sáng trong kem dựa trên phương pháp học sâu và quang phổ cận hồng ngoại. *Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ.* **2022**, *270*, 120757. [\[Tham khảo chéo\]](#)

126. Chen, XY; Chai, QQ; Lâm, N.; Lý, XH; Wang, W. Mạng lưới thần kinh tích chập 1D để phân biệt axit aristolochic và các chất tương tự của chúng dựa trên quang phổ cận hồng ngoại. *Hậu môn. Phương pháp* **2019**, *11*, 5118-5125. [\[Tham khảo chéo\]](#)

127. Lý, LQ; Pan, XP; Chen, WL; Ngụy, MM; Phong, YC; Âm, LH; Hu, CQ; Yang, HH Nhận dạng thuốc của nhiều nhà sản xuất dựa trên quang phổ hồng ngoại gần và học chuyển sâu. *J. Đổi mới. Opt. Khoa học sức khỏe.* **2020**, *13*, 2050016. [\[Tham khảo chéo\]](#)

128. Trầ, EJ; Kim, Y.; Xu, Y.; Na, Y.; Giacci, AJ; Lee, JH Đánh giá độ tươi của cá hồi, cá nư và thịt bò bằng thiết bị cầm tay máy quang phổ. *Cảm biến* **2020**, *20*, 4299. [\[CrossRef\]](#)

129. Mishra, P.; Passos, D. Mạng lưới thần kinh tích chập 1 chiều đa đầu ra để dự đoán đồng thời các đặc điểm khác nhau của trái cây dựa trên quang phổ cận hồng ngoại. *Biol sau thu hoạch. Technol.* **2022**, *183*, 111741. [\[Tham khảo chéo\]](#)

130. Ng, W.; Minasny, B.; Montazerolghaem, M.; Padarian, J.; Ferguson, R.; Bức tường thành ngoài lâu đài.; McBratney, AB Mạng nơ-ron tích chập để dự đoán đồng thời một số tính chất của đất bằng cách sử dụng phổ nhìn thấy/hồng ngoại gần, hồng ngoại giữa và quang phổ kết hợp của chúng. *Geoderma* **2019**, *352*, 251-267. [\[Tham khảo chéo\]](#)

131. Yang, JR; Vương, J.; Lữ, GD; Phi, SM; Yển, T.; Trương, C.; Lư, XH; Yu, ZY; Lý, WC; Tang, XL TeaNet: Tìm hiểu sâu về dữ liệu Quang phổ cận hồng ngoại (NIR) để đảm bảo chất lượng trà. *Máy tính. Điện tử. Nông nghiệp.* **2021**, *190*, 106431. [\[Tham khảo chéo\]](#)

132. Mishra, P.; Passos, D. Việc sử dụng kết hợp phương pháp hóa học và học sâu đã cải thiện hiệu suất dự đoán của các mô hình quang phổ cận hồng ngoại để dự đoán chất khô trong quả xoài. *Hóa chất. Trí tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống.* **2021**, *212*, 104287. [\[Tham khảo chéo\]](#)

133. Tiểu, D.; Lý, HZ; Phương pháp phân loại than Sun, XY dựa trên thuật toán máy học cực đoan dựa trên trường tiếp nhận cục bộ được cải tiến và quang phổ hồng ngoại nhìn thấy được. *ACS Omega* **2020**, *5*, 25772-25783. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)

134. Yang, JC; Vương, XL; Vương, RH; Wang, HJ Sự kết hợp giữa Mạng thần kinh tích chập và Mạng thần kinh tái phát để dự đoán tính chất của đất bằng phương pháp quang phổ Vis-NIR. *Geoderma* **2020**, *380*, 114616. [\[Tham khảo chéo\]](#)

135. Tiểu, D.; Vũ, QH; Le, BT Hàm lượng muối trong phát hiện đất nhiễm mặn-kiềm bằng phương pháp quang phổ hồng ngoại gần nhìn thấy được và độ sâu 2D học hỏi. *Microchem J.* **2021**, *165*, 106182. [\[Tham khảo chéo\]](#)

136. Grossutti, M.; D'Amico, J.; Quintal, J.; MacFarlane, H.; Quirk, A.; Dutcher, JR Deep Learning và Quang phổ hồng ngoại: Học biểu diễn với Bộ mã hóa tự động biến thiên β. *J. Vật lý. Chem. Lett.* **2022**, *13*, 5787-5793. [\[Tham khảo chéo\]](#)

137. Chen, HZ; Chen, A.; Xu, LL; Xie, H.; Kiều, HL; Lin, QY; Cai, K. Kiến trúc CNN học sâu được áp dụng trong phân tích cận hồng ngoại thông minh về ô nhiễm nước đối với tài nguyên tưới tiêu nông nghiệp. *Nông nghiệp. Quản lý nước.* **2020**, *240*, 106303. [\[Tham khảo chéo\]](#)

138. Lê, BT Ứng dụng học sâu và quang phổ cận hồng ngoại trong phân tích ngũ cốc. *Vib. Quang phổ.* **2020**, *106*, 103009. [\[Tham khảo chéo\]](#)

139. Magnussen, EA; Solheim, JH; Blazhko, U.; Tafintseva, V.; Tondel, K.; Liland, KH; Dzurendova, S.; Shapaval, V.; Sandt, C.; Borondics, F.; et al. Mạng lưới thần kinh tích chập sâu phục hồi quang phổ hấp thụ thuần túy từ quang phổ bị biến dạng phân tán cao của các tế bào. *Hóa chất. Trí tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống.* **2020**, *13*, e20200204. [\[Tham khảo chéo\]](#)

140. Ng, W.; Minasny, B.; Mendes, WDS; Demattê, JAM Ảnh hưởng của cỡ mẫu huấn luyện đến độ chính xác của các mô hình học sâu để dự đoán tính chất đất bằng dữ liệu quang phổ cận hồng ngoại. *Đất* **2020**, *6*, 565-578. [\[Tham khảo chéo\]](#)

141. Blazhko, U.; Shapaval, V.; Kovalev, V.; Kohler, A. So sánh khả năng tăng cường và tiền xử lý cho học sâu và phân loại hóa học của phổ hồng ngoại. Hóa chất. Tri tuệ. Phòng thí nghiệm. Hệ thống. 2021, 215, 104367. [\[Tham khảo chéo\]](#)
142. Rifai, S.; Vincent, P.; Muller, X.; Glozet, X.; Bengio, Y. Bộ mã hóa tự động hợp đồng: Bất biến rõ ràng trong quá trình trích xuất tính năng. Trong Kỷ yếu của Hội nghị Quốc tế về Học máy lần thứ 28, Washington, DC, Hoa Kỳ, ngày 28 tháng 6–ngày 2 tháng 7 năm 2011.
143. Vincent, P.; Larochelle, H.; Lajoie, tôi.; Bengio, Y.; Manzagol, P.-A.; Bottou, L. Bộ mã hóa tự động khử nhiễu xếp chồng: Tìm hiểu các cách biểu diễn hữu ích trong mạng sâu với tiêu chí khử nhiễu cục bộ. J. Mach. Học hỏi. Res. 2010, 11, 3371–3408.
144. Krizhevsky, A.; Sutskever, tôi.; Hinton, GE Imagenet phân loại với mạng lưới thần kinh tích chập sâu. Cộng đồng. ACM 2017, 60, 84–90. [\[Tham khảo chéo\]](#)
145. Simonyan, K.; Zisserman, A. Mạng tích chập rất sâu để nhận dạng hình ảnh quy mô lớn. Trong Kỷ yếu lần thứ 3 Hội nghị Quốc tế về Đại diện Học tập, San Diego, CA, Hoa Kỳ, ngày 7–9 tháng 5 năm 2015.
146. Anh, KM; Trương, XY; Ren, SQ; Sun, J. Học dư sâu để nhận dạng hình ảnh. Trong Kỷ yếu của Hội nghị IEEE về Thị giác máy tính và Nhận dạng mẫu, Las Vegas, NV, Hoa Kỳ, ngày 26 tháng 6–ngày 1 tháng 7 năm 2016.
147. Zagoruyko, S.; Komodakis, N. Mạng dư rộng. Trong Kỷ yếu của Hội nghị Thị giác Máy Ảnh (BMVC), York, Vương quốc Anh, ngày 19–22 tháng 9 năm 2016.
148. Vương, D.; Vương, XD; Lv, SH Tổng quan về nhận dạng giọng nói tự động từ đầu đến cuối. Sự đối xứng 2019, 11, 1018. [\[CrossRef\]](#)
149. Trương, XL; Lâm, T.; Xu, JF; Lạc, X.; Ying, YB DeepSpectra: Một phương pháp học sâu toàn diện để phân tích quang phổ định lượng. Hậu môn. Chim. Acta 2019, 1058, 48–57. [\[Tham khảo chéo\]](#)
150. Trương, Thế giới; Tương, HT; Vương, YX; Bi, X.; Trương, YZ; Trương, PJ; Chen, J.; Vương, L.; Zheng, YJ Thuật toán nhận dạng khí trực quan hóa phản ứng tín hiệu dựa trên Mạng lưới bản đồ hệ số biến đổi Wavelet cho khẩu giác nhân tạo. IEEE Sens. J. 2022, 22, 14717–14726. [\[Tham khảo chéo\]](#)
151. Gers, FA; Schraudolph, NN; Nicol, N.; Schmidhuber, J. Học cách tính thời gian chính xác với mạng tái phát LSTM. J. Mach. Học hỏi. Res. 2002, 3, 115–143
152. Chết tiết, JC; Salem, FM Các biến thể đơn vị kiểm soát tối thiểu được đơn giản hóa cho các mạng thần kinh tái diễn. Trong Kỷ yếu của Hội nghị chuyên đề quốc tế về mạch và hệ thống vùng Trung Tây lần thứ 60 của IEEE năm 2017 (MWSCAS), Boston, MA, Hoa Kỳ, ngày 6–9 tháng 8 năm 2017.
153. Zuo, EG; mặt trời, L.; Yên, JY; Chen, C.; Chen, C.; Lv, XY Phát hiện nhanh nguồn gốc thì là của quang phổ cận hồng ngoại trên máy học cực độ. J. Khoa học. Dân biểu 2022, 12, 13593. [\[CrossRef\]](#)
154. Anh, KX; Lưu, JJ; Li, Z. Ứng dụng Mạng đối thủ sáng tạo để dự đoán các đặc tính của xăng. Chem. Anh. Dịch. 2020, 81, 907–912.
155. Zheng, AB; Dương, HH; Pan, XP; Âm, LH; Feng, YC Xác định nhiều loại thuốc dựa trên quang phổ cận hồng ngoại và Mạng đối thủ tạo ra hai chiều. Cảm biến 2021, 21, 1088. [\[CrossRef\]](#)
156. Dương, B.; Chen, C.; Chen, FF; Chen, C.; Đường, J.; Gao, R.; Lv, XY Xác định thì là và thì là từ các vùng khác nhau dựa trên mạng lưới đối nghịch tổng hợp và quang phổ hồng ngoại gần. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2021, 21, 119956. [\[Tham khảo chéo\]](#)
157. Trương, WD; Lý, LQ; Hu, JQ; Phong, YC; Âm, LH; Hu, CQ; Yang, HH Phân biệt thuốc bằng quang phổ hồng ngoại gần dựa trên bộ mã hóa tự động thưa thớt xếp chồng lên nhau kết hợp với máy học cực đoan hạt nhân. Cái cảm. J. Hậu môn. Chem. 2018, 46, 1146–1454.
158. Mao, YC; Lê, BT; Tiêu, D.; Anh ấy, ĐK; Lưu, CM; Giang, LQ; Yu, ZC; Dương, FH; Liu, XX Phương pháp phân loại than dựa trên quang phổ hồng ngoại khả kiến và máy học cực cao đa lớp cải tiến. Opt. Công nghệ Laser. 2019, 114, 10–15. [\[Tham khảo chéo\]](#)
159. Hạ, JJ; Du, XY; Xu, WX; Ngụy, Y.; Xiong, YM; Min, SG Phân tích không phá hủy xác định niên đại của giấy dựa trên phép chập mạng lưới thần kinh. Quang phổ. Acta Phần A Mol. Sinh khối. Quang phổ. 2021, 248, 119290. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)
160. Sarin, JK; Te Moller, N.; Mohammadi, A.; Prakash, M.; Torniaainen, J.; Brommer, H.; Nippolainen, E.; Shaikh, R.; Makelä, J.; Korhonen, RK; et al. Kiến trúc CNN học sâu được áp dụng trong phân tích cận hồng ngoại thông minh về ô nhiễm nước đối với tài nguyên tưới tiêu nông nghiệp. Osteoarthr. Cartil. 2021, 29, 423–432. [\[Tham khảo chéo\]](#) [\[PubMed\]](#)