

基于优选波长的多光谱检测系统快速检测猪肉中挥发性盐基氮的含量

魏文松, 彭彦昆, 郑晓春, 王文秀, 田 芳

中国农业大学工学院国家农产品加工技术装备研发分中心, 北京 100083

摘要 挥发性盐基氮(TVB-N)含量是评价猪肉新鲜度的重要理化指标。为了实现快速、无损检测猪肉的新鲜度, 优选出与猪肉中 TVB-N 含量相关的特征波长, 将包含特征波长的发光二极管(LED)光源用于多光谱检测系统, 测定了猪肉中 TVB-N 的含量。首先利用可见-近红外(VIS-NIR)高光谱系统对猪肉进行检测, 获取高光谱反射率数据, 并采用一阶导数(FD)法、标准正态变量变换(SNV)以及其他预处理方法建立猪肉中 TVB-N 含量的偏最小二乘回归(PLSR)模型; 然后分别利用逐步回归算法(SWA)、连续投影算法(SPA)、基因遗传算法(GA)筛选出与 TVB-N 含量相关的特征波长, 利用筛选出的特征波长分别建立 PLSR 模型与多元线性回归(MLR)模型, 比较模型结果后进一步优选特征波长; 最后, 将含有特征波长的 LED 光源用于多光谱检测系统, 并建立 PLSR 模型与 MLR 模型, 从而完成对猪肉中 TVB-N 含量的测定。实验结果表明: 利用 SWA、SPA、GA 这 3 种算法筛选出的特征波长能够很好地反映全光谱的信息, 建立的模型效果较好, 变量数大大减少; 包含优选特征波长的 LED 光源在多光谱检测系统中能很好地检测猪肉中的 TVB-N 含量; MLR 模型结果好于 PLSR 模型结果, MLR 模型的校正集相关系数和校正集均方根误差分别为 0.9050 和 3.63×10^{-5} , 预测集相关系数和预测集均方根误差分别为 0.9040 和 3.81×10^{-5} 。

关键词 光谱学; 挥发性盐基氮; 特征波长筛选; 多光谱方法; 算法分析

中图分类号 O657.33 **文献标识码** A

doi: 10.3788/AOS201737.1130003

Rapid Determination of Content of Total Volatile Basic Nitrogen in Pork Based on Multispectral Detection System with Optimal Wavelength

Wei Wensong, Peng Yankun, Zheng Xiaochun, Wang Wenxiu, Tian Fang

*National Research & Development Center for Agro-Processing Equipment, College of Engineering,
China Agricultural University, Beijing 100083, China*

Abstract The content of total volatile basic nitrogen (TVB-N) is an important index for evaluation of pork freshness. To achieve rapid and nondestructive detection of pork freshness, we use a light-emitting diode (LED) light source containing optimal characteristic wavelengths to set up a multispectral detection system by selecting optimal characteristic wavelengths related to the content of TVB-N in pork, and the content of TVB-N in pork is detected by the detection system. Firstly, a visible near infrared (VIS-NIR) hyperspectral system is applied to detect pork to acquire hyperspectral reflectance data, and then different preprocessing algorithms including the first derivative (FD), standard normal variable transformation (SNV), and other methods are utilized to build partial least squares regression (PLSR) model of the TVB-N content in pork. Secondly, some variable selection methods including the step wise algorithm (SWA), successive projections algorithm (SPA), and genetic algorithm (GA) are used to screen the characteristic wavelengths related to TVB-N content. PLSR model and multiple linear regression (MLR) model are established by these characteristic wavelengths. The model results are compared to choose optimal characteristic wavelengths. Lastly, the LED light source containing characteristic wavelengths is used in the

收稿日期: 2017-07-03; **收到修改稿日期:** 2017-07-11

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFD0401205)

作者简介: 魏文松(1989—), 男, 博士研究生, 主要从事农畜产品无损检测方面的研究。E-mail: weiwensong8@163.com

导师简介: 彭彦昆(1960—), 男, 博士, 教授, 主要从事农畜产品无损检测方面的研究。E-mail: ypeng@cau.edu.cn

(通信联系人)

multispectral detection system to establish PLSR and MLR models, so that the detection of TVB-N content in pork is completed. The results indicate that the screening characteristic wavelengths by using the SWA, SPA, and GA can reflect full spectral information well. The effect of the established model is good, and the number of variable decreases greatly. The LED light source containing characteristic wavelengths can detect the TVB-N content in pork well in the multispectral detection system. The results of the established MLR model are better than those of the PLSR model. The correlation coefficient and square error of calibration (SEC) set of the MLR model are 0.9050 and 3.63×10^{-5} , respectively, and the correlation coefficient and square error of prediction (SEP) set are 0.9040 and 3.81×10^{-5} , respectively.

Key words spectroscopy; total volatile basic nitrogen; characteristic wavelength screening; multispectral method; algorithm analysis

OCIS codes 300.6340; 300.6550

1 引 言

我国是最大的肉品产销国,2015年的生鲜肉产量约为8625万吨,其中猪肉的消费量约占总产量的40%。随着猪肉储存时间的延长,肉品中的氨类物质增加,从而加速肉品的腐败。挥发性盐基氮(TVB-N)含量是衡量肉品新鲜度的重要理化指标^[1-2]。检测TVB-N含量的传统方法存在费时、费力等缺点,且会对样品造成破坏^[3-4],无法满足快速、无损检测的需求。

近年来,随着图谱技术的发展,国内外学者利用图像或光谱技术开发了诸多检测果蔬和生鲜肉品质的便携式无损检测设备或仪器^[5-15],这些设备或仪器大多基于现有的光谱仪或工业相机搭建而成,成本昂贵,且体积较大,不利于在消费者市场中推广和使用。不同的化学成分对光谱具有特定的吸收峰,其含量的不同会以光谱信号强弱的形式反映出来,故而可通过筛选物质中待测成分的特征光谱来测定该成分的含量。本课题组之前已利用含有待测物质特征光谱的发光二极管(LED)光源构建了手持式便携多光谱检测设备^[16],该设备摆脱了光谱仪与相机等昂贵设备的制约,实现了与手机的网络通信,极大地降低了设备成本;但该设备对生鲜肉品中TVB-N含量的预测效果一般,与TVB-N含量有关特征波长还有待进一步优化,模型的预测结果还有待进一步提高和改善。

为了重新筛选与TVB-N含量有关的特征波长,本文首先利用可见-近红外(VIS-NIR)高光谱检测系统建立了预测TVB-N含量的模型,利用3种变量筛选方法筛选出与TVB-N含量有关的特征波长;然后利用特征波长进行建模分析,优化特征波长;最后将包含所选特征波长的LED光源应用于多光谱系统进行实验验证,完成了TVB-N含量的建模分析,从而改善了多光谱系统对生鲜肉中TVB-N含量的预测结果。

2 材料与方 法

2.1 材 料

实验中采用的样品为2组购自某超市的里脊猪肉样品(24 h排酸后),供货商为北京鹏程万达果品有限公司,按照55 mm×55 mm×25 mm的尺寸分割成块。其中一组猪肉样品数为52,用于VIS-NIR高光谱系统建立TVB-N含量预测模型,并据此筛选特征波长;另一组样品数为44,用于对筛选出的特征波长进行多光谱系统建模,并对模型性能进行验证与分析。实验过程中,2组样品均依次进行编号,用密封袋保存于冷藏箱后运回实验室,并储存在冷藏温度为4℃的冰箱中,每隔12~18 h,按照编号从小到大的顺序依次取出4~6个样品,静置于24℃的室温中约20 min,然后分别利用高光谱系统与多光谱系统进行检测与分析。

2.2 理化值检测

实验中2组猪肉样品数共计96,根据国家标准GB 2707—2016测量样品的理化值,然后选取第1组样品中的39个样品作为第1组的校正集,用以建立模型;其余13个样品作为第1组的验证集,用以验证模型。选取第2组样品中的33个样品作为第2组的校正集,用以建立模型,其余11个样品作为第2组的验证集,用以验证模型。表1和表2所示分别为2组猪肉中TVB-N含量实测值的最小值、最大值及平均值。由表1与表2可知,两组猪肉样品中TVB-N的质量分数很接近,均值误差不超过 1.6×10^{-5} 。

表 1 第 1 组样品校正集和预测集中 TVB-N 质量分数的实测值

Table 1 Measured mass fraction of TVB-N in calibration set and prediction set of the first group pork samples

Set	Sample number	Maximum /10 ⁻⁵	Minimum /10 ⁻⁵	Average /10 ⁻⁵
Calibration	39	31.71	5.55	15.45
Prediction	13	35.56	6.56	16.85

表 2 第 2 组样品校正集与预测集中 TVB-N 质量分数的实测值

Table 2 Measured mass fraction of TVB-N in calibration set and prediction set of the second group pork samples

Set	Sample number	Maximum /10 ⁻⁵	Minimum /10 ⁻⁵	Average /10 ⁻⁵
Calibration	33	38.01	6.96	17.69
Prediction	11	34.86	6.29	16.09

2.3 高光谱原始数据与反射率获取

实验中使用的 VIS-NIR 高光谱成像是实验室自行搭建的线光源扫描系统^[17],该系统的光谱摄制仪可以采集波长为 400~1100 nm 的反射光谱,光谱分辨率为 2.8 nm,整个系统置于铝合金框架组成的封闭箱体内,目的是减少外界杂散光的影响。

检测样品时,光源照射样品形成的漫反射影像通过镜头被高光谱成像仪捕获,有关图像数据信息的获取方式详见文献[17]。在采集样品前,先利用该系统采集黑白标定数据,然后采集样品的高光谱数据,对高光谱数据进行黑白标定^[17],输出标定后的高光谱数据;再从标定后的高光谱图像中选取直径为 30 mm 的圆形区域(ROI),该区域是理化值测定的样品范围,如图 1(a)中红色圆环区域,选取时避开样品边缘及反光区,避免贴近样品边缘,以防漏光。将 ROI 内的所有像素点的平均光谱值作为该样品的光谱值。某样品在波长 280 nm 处的 ROI 高光谱图像及标定后光谱的反射率分别如图 1(a)和图 1(b)所示。

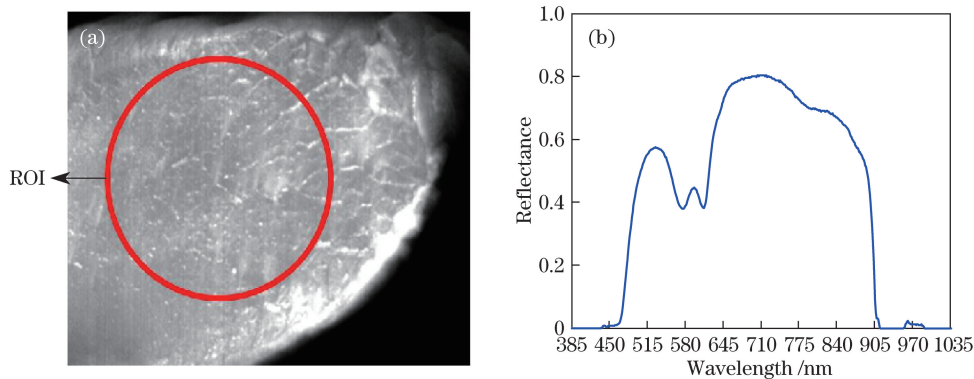


图 1 某样品在(a)波长 280 nm 处的 ROI 高光谱图像及(b)标定后的反射率曲线

Fig. 1 (a) Hyperspectral image at wavelength of 280 nm of ROI and (b) reflectance curve after calibration of a certain sample

由图 1(b)可知:实验中获取了波长为 385~1035 nm 的反射光谱,且提取的反射光谱曲线在首尾波段区域的噪声明显,信号强度弱;在波长小于 450 nm 的区域和大于 905 nm 的区域,光谱反射强度趋于 0,对实验建模无任何作用。因此,选取 450~905 nm 全波段范围内的反射光谱用于后续建模分析。所有 52 个猪肉样品的反射光谱如图 2 所示。

2.4 全波段 TVB-N 模型建立

由图 2 可知,原始光谱曲线有诸多毛刺,因此建立模型前需要对其进行预处理。常用的预处理方法有一阶导数(FD)法、二阶导数(SD)法、标准化方法(AS)和标准正态变量变换(SNV)等^[18]。预处理后,结合偏最小二乘回归(PLSR)模型建立全光谱与 TVB-N 含量的预测模型,结果如表 3 所示。在表 3 中, R_c 为校正集相关系数, R_p 为预测集相关系数, x_{SEC} 和 x_{SEP} 分别为校正集均方根误差(SEC)与预测集均方根误差(SEP)的值。

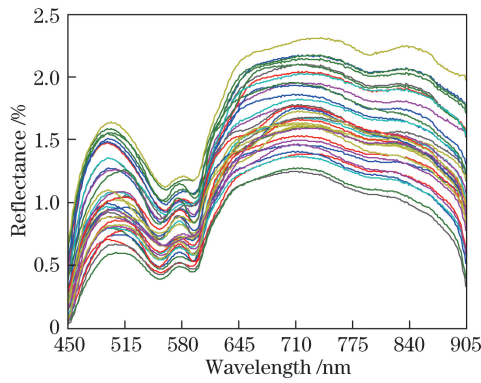


图 2 52 个猪肉样品的原始反射光谱

Fig. 2 Raw reflectance spectra of 52 pork samples

表 3 原始光谱经不同方法预处理后的 PLSR 模型结果

Table 3 PLSR model results of raw spectra after preprocessing with different methods

Preprocessing method	R_c	$x_{SEC} / 10^{-5}$	R_p	$x_{SEP} / 10^{-5}$
Raw spectrum	0.8762	3.4443	0.8601	3.9485
FD	0.9466	2.3026	0.9372	2.7969
SD	0.9041	3.2120	0.8820	3.7442
SNV	0.8686	4.4983	0.6788	7.8631
FD-SNV	0.9454	2.3288	0.9395	2.6838
AS	0.8039	4.3647	0.7630	5.1728
AS-FD	0.8955	4.0074	0.8251	5.5752
AS-SD	0.6952	4.7815	0.6578	7.5999
SD-SNV	0.9113	3.0918	0.8949	3.8736

由表 3 可知,原始光谱的 PLSR 建模结果一般, R_c 、 R_p 、 x_{SEC} 及 x_{SEP} 分别为 0.8762, 0.8601, 3.4443×10^{-5} , 3.9485×10^{-5} 。与预处理之后的建模结果进行对比后可知,原始光谱的噪音对建模结果有很大影响。另由表 3 可以看出,采用 FD-SNV 法(即先利用 FD 法对原始光谱平滑去噪,再利用 SNV 进行处理)的建模结果最好,校正集与预测集的 R_c 和 R_p 分别为 0.9454 和 0.9395,对应的 x_{SEC} 和 x_{SEP} 分别为 2.3288×10^{-5} 和 2.6838×10^{-5} ;与原始光谱相比,FD-SNV 法大大提高了预测精度,降低了误差。经过 FD-SNV 法预处理后的光谱如图 3 所示。

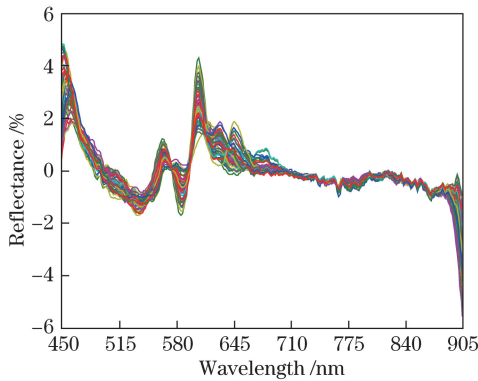


图 3 原始光谱经 FD-SNV 法预处理后的结果

Fig. 3 Spectrograms of raw spectra after preprocessing with FD-SNV algorithm

2.5 TVB-N 参数特征波长的筛选

由高光谱的建模结果可知,全光谱对 TVB-N 含量有很好的预测性能,但其数据量庞大,冗余信息较

多。虽然上述预处理方法可使原始光谱的预测性能有所提高,但这些预处理方法无法去除光谱数据中的冗余信息^[19],也不利于提高模型的预测效率。此外,全光谱数据中包含与猪肉 TVB-N 含量高度相关的特征波长,通过算法筛选出这些特征波长,并利用这些特征波长建立多元线性回归(MLR)模型或 PLSR 模型,就可以大幅减少模型中变量的数目,还能提高模型的预测效率^[20]。特征波长筛选方法可分为区间筛选法和单变量筛选法,为了精确地找到每个变量波长与 TVB-N 含量的关系,采用基于单变量的特征波长筛选方法,分别利用逐步回归算法(SWA)、连续投影算法(SPA)和基因遗传算法(GA)对与 TVB-N 参数有关的特征波长进行筛选。最后结合 PLSR 模型与 MLR 模型的预测结果,优选出最佳特征波长。

SWA 与 SPA 在原始建模变量降维、剔除不相关变量、消除共线性,以及选择最优变量集方面具有较大优势,不仅可以降低数据的维数(或减少变量个数),还可以最大限度地提取解释信息,克服原始数据的线性相关性、奇异性和不稳定性,从而提高预测的可靠性及检测速度。近年来,这两种方法在各类样品的光谱变量选择中得到了越来越多的应用^[21-23]。筛选变量的优劣通常用模型的均方根误差(RMSE) x_{RMSE} 来评价:

$$x_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n (S_{f\text{-pre},j} - S_{f,j})^2}{n}}, \quad (1)$$

式中 n 为光谱数量, $S_{f,j}$ 为实际的 TVB-N 理化值, $S_{f\text{-pre},j}$ 为利用筛选出的特征波长变量建立的模型预测出的 TVB-N 理化值, j 为与光谱顺序对应的样品顺序。选择 x_{RMSE} 最小值对应的变量为筛选出的最佳变量。

利用 SWA 筛选出特征变量,然后利用 MATLAB 进行处理。利用 SWA 逐步剔除对 TVB-N 建模影响不显著的变量,直到无法剔除为止。由图 4(a)可以看出,该过程一共筛选出 6 个模型,并且第 6 个模型的 x_{RMSE} 最小,为 4.04。图 4(a)中的蓝色点代表筛选出的变量,以 X248 为例, X 代表所有的波长个数, 248 代表波长顺序,因此 X248 代表在所有波长中第 248 个波长顺序处所对应的波长,表示筛选出的变量的顺序。第 6 个模型筛选出的变量在全波长的分布顺序为 X22、X117、X248、X282、X297,具体的波长分布如图 4(b)所示,纵坐标为 52 个样品原始光谱数据经 FD-SNV 法预处理后的平均值,表征整体样品的原始光谱经预处理后的趋势。由图 4(b)可知,筛选出的 5 个特征波长分别为 472、595、765、811、831 nm。

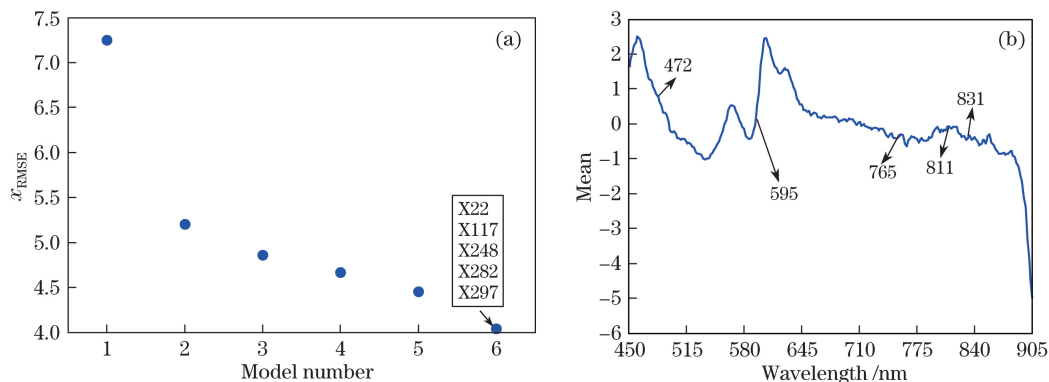


图 4 (a)采用 SWA 筛选出的特征波长的数量;(b)筛选变量的波长分布

Fig. 4 (a) Number of characteristic wavelength screened by SWA algorithm;

(b) wavelength distribution of screening variable

SWA 筛选出的 5 个特征波长与全波段建模中回归系数的对应关系如图 5 所示。由图 5 可知:在全波段模型回归系数中,筛选出的波长处的回归系数较大,对模型的结果有较大影响;但在较大回归系数对应的其他波长处,相应的波长并没有被筛选出。可见,SWA 很可能未筛选出影响较大的变量。

为了得到更准确、完整的特征变量,继续采用 SPA 和 GA 进行变量筛选,结果仍根据(1)式进行判断,利用 SPA 筛选的结果如图 6(a)所示。由图 6(a)可知,SPA 筛选的最佳变量数为 13, x_{RMSE} 为 1.1305。所对应的 13 个波长在全光谱中的位置如图 6(b)所示,纵坐标为全光谱预处理后的均值,表征整体光谱的趋势。由图 6(b)可知,SPA 筛选出的特征波长的数量大于 SWA 筛选的结果,且 SPA 筛选出的特征波长覆盖了 SWA 筛选出的特征波长。

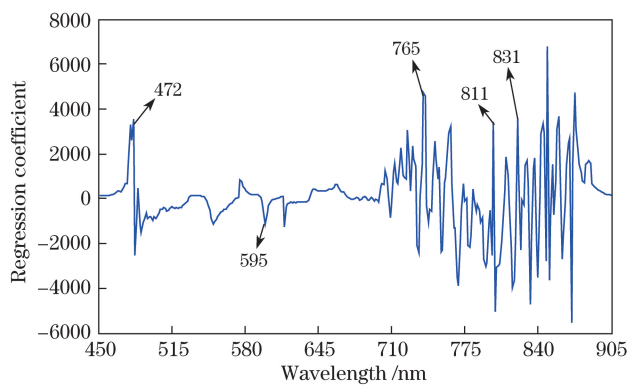


图 5 采用 SWA 筛选出的波段的回归系数分布

Fig. 5 Regression coefficient distribution of band screened by SWA algorithm

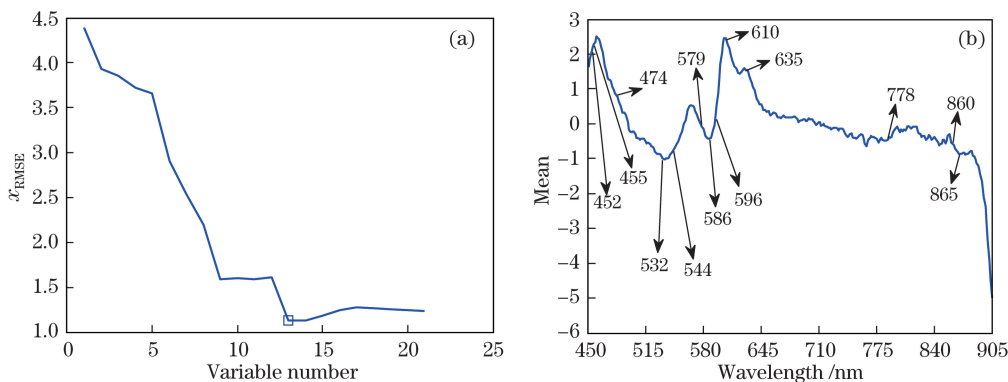


图 6 (a)采用 SPA 筛选出的最佳特征波长的数量；(b)特征波长的具体位置

Fig. 6 (a) Number of optimal characteristic wavelength screened by SPA algorithm;

(b) detailed position of characteristic wavelength

GA 是一种有效的全局搜索算法,其基本原理是借鉴生物界的自然选择和遗传机制进行最优结果的筛选^[24],该方法在特征变量筛选方面也获得了较好的结果。为了与上述 SWA、SPA 所得的特征变量进行比较,利用 GA 筛选变量,结果如图 7 所示。

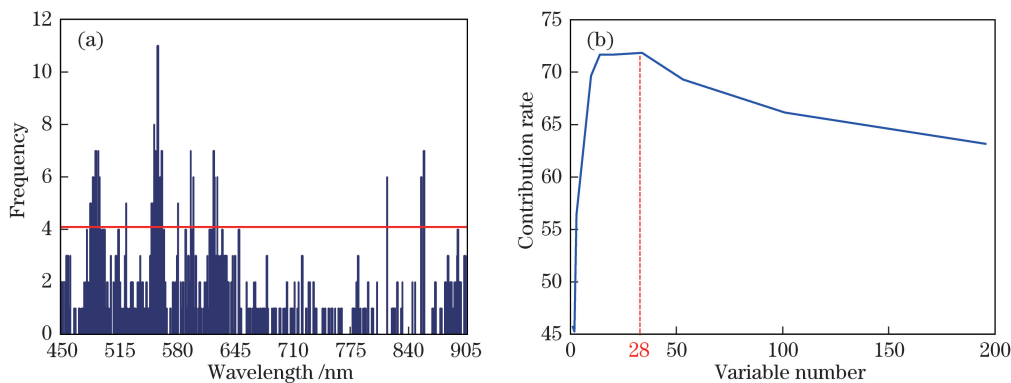


图 7 (a)GA 筛选出的特征波长的使用频率分布；(b)特征波长数量的建模贡献率

Fig. 7 (a) Frequency of characteristic wavelength screened by GA algorithm;

(b) modeling contribution rate of characteristic wavelength number

图 7(a)表征了全波段范围内所使用波长的贡献率大小,以每个变量使用频次 4 为阈值,图中红色线以上部分为筛选出的变量。图 7(b)表征了筛选出的各个特征波长组合建模后的贡献率。由图 7(b)可知,当筛选变量个数为 28 时,变量对模型的贡献率最大。28 个变量对应的特征波长在全波段范围内的分布如图 8 所示。

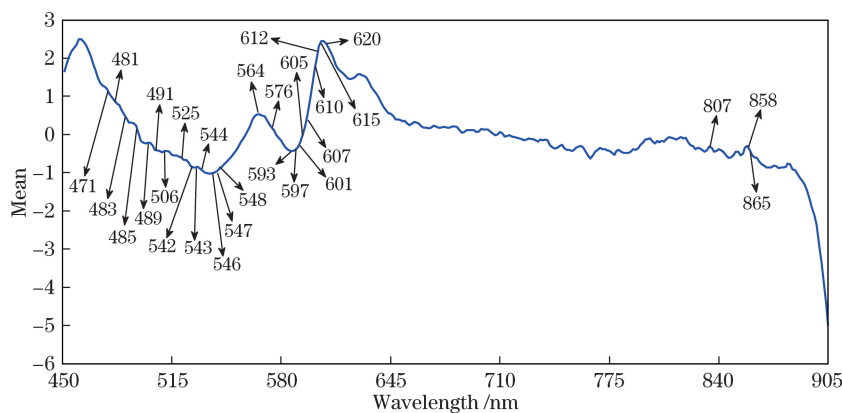


图 8 采用 GA 筛选出的特征波长分布

Fig. 8 Distribution of characteristic wavelength screened by GA algorithm

2.6 特征波长建模评价

为了验证 SWA、SPA、GA 这 3 种算法筛选出的特征变量对建模降维及建模效果的影响,分别利用 PLSR 与 MLR 建立相对应的模型,结果如表 4 所示。由表 4 可知:利用 PLSR 建模时,GA 筛选的 28 个特征变量的建模效果最好, R_c 为 0.95, x_{SEC} 为 2.24×10^{-5} , R_p 为 0.91, x_{SEP} 为 3.78×10^{-5} ,筛选出的特征波长在全波长中的占比 t 为 28/455;其次为 SPA 得到的结果,SWA 所得结果最差。利用 MLR 建模时,SPA 的效果最好, R_c 为 0.94, x_{SEC} 为 2.47×10^{-5} , R_p 为 0.89, x_{SEP} 为 3.14×10^{-5} ,优于 GA 与 SWA 的结果,且 SPA 筛选变量在全波段中的占比 t 为 13/455。综合考虑可知,3 种算法建立的 PLSR 模型和 MLR 模型的结果比全波段 FD-SNV 预处理后的 PLSR 建模结果稍差,但是建模的特征波长变量占全波段的比率非常小,大大降低了建模维度与建模的变量数。结果表明,3 种算法筛选出的特征波长变量与猪肉中 TVB-N 含量具有极强的相关性,而且特征波长主要集中在吸收峰位置或其附近,且分布较集中,说明此处是与 TVB-N 含量有关的特征峰归属位置。

表 4 不同筛选变量方法得到的特征波长的建模结果

Table 4 Modeling results of characteristic wavelength obtained by different screening variable algorithms

Screening algorithm	Variable number	Modeling method	R_c	$x_{SEC} / 10^{-5}$	R_p	$x_{SEP} / 10^{-5}$	Screening wavelength /nm	t
SWA	5	PLSR	0.81	4.18	0.79	4.47	472,595,765,811,830	5/455
		MLR	0.83	4.04	0.78	4.62		
SPA	13	PLSR	0.92	2.88	0.892	3.40	452,455,474,532,	13/455
		MLR	0.94	2.47	0.893	3.14	610,635,778,860,865	
GA	28	PLSR	0.95	2.24	0.91	3.78	471,481,483,485,	28/455
		MLR	0.96	2.16	0.85	4.24	489,491,506,525, 542,543,544,546, 547,548,564,576, 593,597,601,605, 607,610,612,615, 620,807,858,865	

3 结果与讨论

3.1 特征波长的优选

为了进一步研究 SWA、SPA、GA 这 3 种算法筛选出的特征波长之间的关系,从而优选特征波长,将 3 种算法筛选出的特征波长融合标记在全波段光谱建模的回归系数图中,如图 9 所示。由图 9 可知,3 种算法筛

选出的特征波长分布比较集中。由于 TVB-N 属于肉类中的胺类化合物^[1,25],因此通过对 TVB-N 进行近红外光谱分析即可测定含氢基团—OH、—CH、—NH 和—SH 的含量。由图 9 还可以看出,在波长 472 nm 处有较大的回归系数,以 472 nm 为中心,左右两侧 20 nm 处有 452,455,471,481,483,485,489,491 nm 特征波长,这些波段区域为肉中高铁肌红蛋白的吸收峰区^[26]。以 525 nm 为中心,左右两侧各 20 nm 处有 491,506,532 nm 特征波长,这些波段区域为氧化血红蛋白吸收区^[26]。以 544 nm 为中心,左右两侧各 20 nm 处有 542,543,546,547,548 nm 特征波长,这些波段区域为肉品中氧化肌红蛋白吸收区^[26]。以 579 nm 为中心,左右两侧各 20 nm 处有 564,576,586,593,595,597 nm 特征波长,这些波段区域为高铁肌红蛋白吸收区^[26]。以 610 nm 为中心,左右两侧各 20 nm 处有 601,605,607,612,615,620,635 nm 特征波长,这些波段为肉品中 S—H 键硫肌红蛋白吸收区^[26-27]。以 778 nm 为中心,左右两侧各 20 nm 处有 765 nm 特征波长,此处为 O—H 键三次倍频吸收峰^[28]。以 810 nm 为中心有明显吸收峰,峰内左右两侧各 20 nm 处有 807,830 nm 特征波长,此处为肉品中 C—H 键倍频吸收峰^[29]。以 860 nm 为中心的吸收峰的峰内左右两侧各 20 nm 处有 858,865 nm 特征波长,此处为氨中 N—H 键倍频吸收峰^[29]。

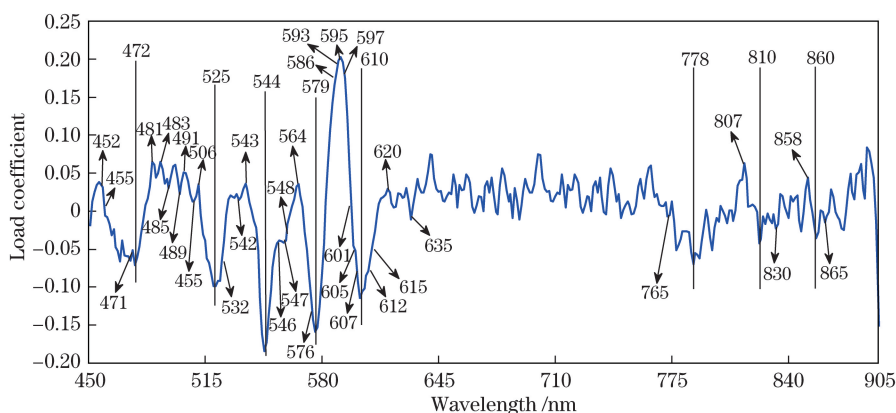


图 9 采用 SWA、SPA、GA 筛选出的最佳特征波长的分布

Fig. 9 Distribution of optimal characteristic wavelength screened by three algorithms of SWA, SPA, and GA

根据各个特征波长及其所对应的肉品中化学成分的吸收峰,8 个中心点波长(图 9 中黑色竖线对应位置处)左右各 20 nm 范围覆盖了与 TVB-N 参数有关的全部特征波长,反映了肉品化学参数含量与特征波长之间的关系,这为 3.2 节中将特征波长用于多光谱设备提供了重要的理论依据。

3.2 优选特征波长的多光谱数据的获取

将与上述优选的中心特征波长对应的 8 个 LED 光源,应用于本课题组前期研究中搭建的多光谱检测系统^[16]。该多光谱系统主要由光源模块、镜头、检测器等组成,检测示意如图 10 所示。光源模块包含峰值波长分别为 472,525,544,579,610,778,810,860 nm 的 LED 光源,每个光源的半峰全宽为 20 nm,覆盖了与 TVB-N 参数有关的所有特征波长。镜头为会聚透镜,用于会聚从样品反射的光强信息。光电检测器的型号为 OPT101,光谱响应范围为 400~1100 nm,能够覆盖光源模块的全部波长。利用基于近红外光谱的漫反射理论^[25],多光谱系统中的检测器可采集生鲜肉样品的参数信息。由于生鲜肉样品中各成分的含量不同,

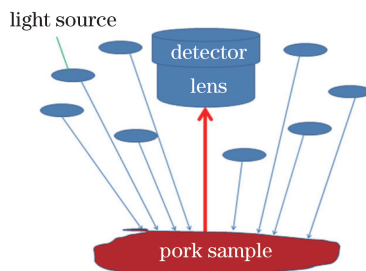


图 10 多光谱系统检测示意图

Fig. 10 Diagram of multispectral detection system

因此对各个特征波段光强的吸收不同。在检测时,8种LED光源依次照射生鲜肉样品,多光谱检测系统获取的光强信息能反映样品的参数信息。多光谱数据获取方法详见参考文献[16]。

利用2.2节中第2组猪肉样品中的44个样品建立模型。先采集黑参考值与白参考值,再分别测量每个样品的5个位置,将5个位置的平均光强作为样品的光谱值,通过黑白标定^[16]得到44个样品的反射率,特征波长分别为472,525,544,579,610,778,810,860nm处的样品反射率曲线如图11所示,其中8个离散特征波长之间的直线代表相邻特征波长对应的反射率的趋势。由图11可知,不同品质参数的猪肉样品的反射率不同,但反射率曲线的趋势一致。利用8个波段处反射率值的预测模型即可预测生鲜肉的不同指标参数。

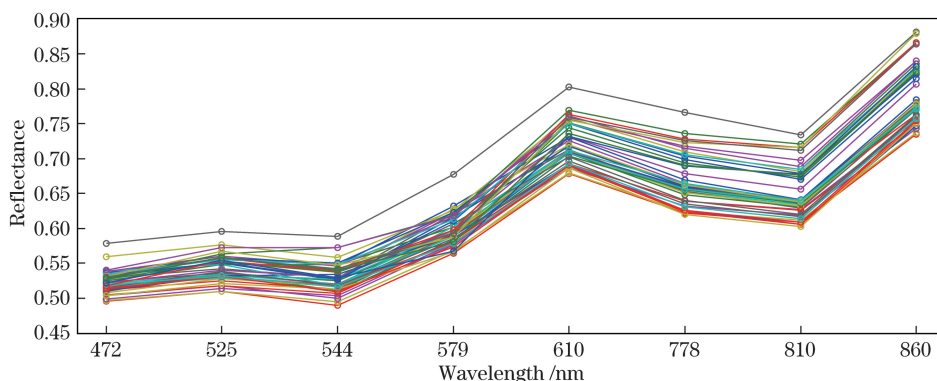


图 11 多光谱方法采集的 44 个样品的反射率

Fig. 11 Reflectance of 44 pork samples collected by multispectral method

3.3 多光谱 TVB-N 含量预测模型的建立与评价

为了验证含有优选波长的LED光源在多光谱系统中检测TVB-N性能的可行性,利用第2组猪肉样品中的44个样品,以8个波长的反射率为自变量,分别建立TVB-N含量的PLSR模型与MLR模型,结果如表5所示。

表 5 多光谱方法建立的 PLSR 和 MLR 模型的预测结果

Table 5 Predicted results of PLSR model and MLR model established by multispectral method

Model	R_c	$x_{SEC} / 10^{-5}$	R_p	$x_{SEP} / 10^{-5}$
PLSR	0.9014	4.18	0.8976	4.19
MLR	0.9050	3.63	0.9040	3.81

由表5可知,PLSR模型与MLR模型的预测结果比SWA、SPA、GA算法的预测结果更好,而且多光谱的MLR模型的预测结果比PLSR模型的预测结果更好。与文献[16]得到的结果相比,TVB-N参数的预测精度有较大提高,MLR模型预测结果的 R_c 和 R_p 分别为0.9050和0.9040, x_{SEC} 和 x_{SEP} 分别为 3.63×10^{-5} 和 3.81×10^{-5} 。多光谱系统PLSR模型与MLR模型的预测结果如图12所示。由图12可知,将优化特征波长用于多光谱设备测定猪肉中TVB-N含量的方法是可行的,这为农畜产品品质检测设备的小型化提供了理论指导与支持。

3.4 讨 论

从高光谱反射率数据着手,首先对预处理后的原始光谱进行建模,得出最佳TVB-N含量与光谱数据之间的PLSR模型,然后分别采用SWA、SPA、GA筛选出与TVB-N含量相关的特征波长,其中SWA筛选出的特征波长数为5,预测结果明显不及全波段建模的结果,这是由SWA未将全部有效变量进行筛选处理造成的。GA筛选出的特征波长数为28,覆盖了大部分的特征波段,据此建立的PLSR模型与MLR模型好于SWA模型,但其特征波长数量较多。SPA筛选的特征波长数为13,与SWA和GA相比,特征波长数少于GA筛选的特征波长数,但多于SWA筛选的特征波长数。从建模结果来看,SPA建模的综合效果好于SWA和GA算法,与原波段相比,变量的数量大大减少。3种算法筛选出的特征波长在全波段范围内有重合,且大部分集中于与TVB-N参数有关的吸收峰附近。

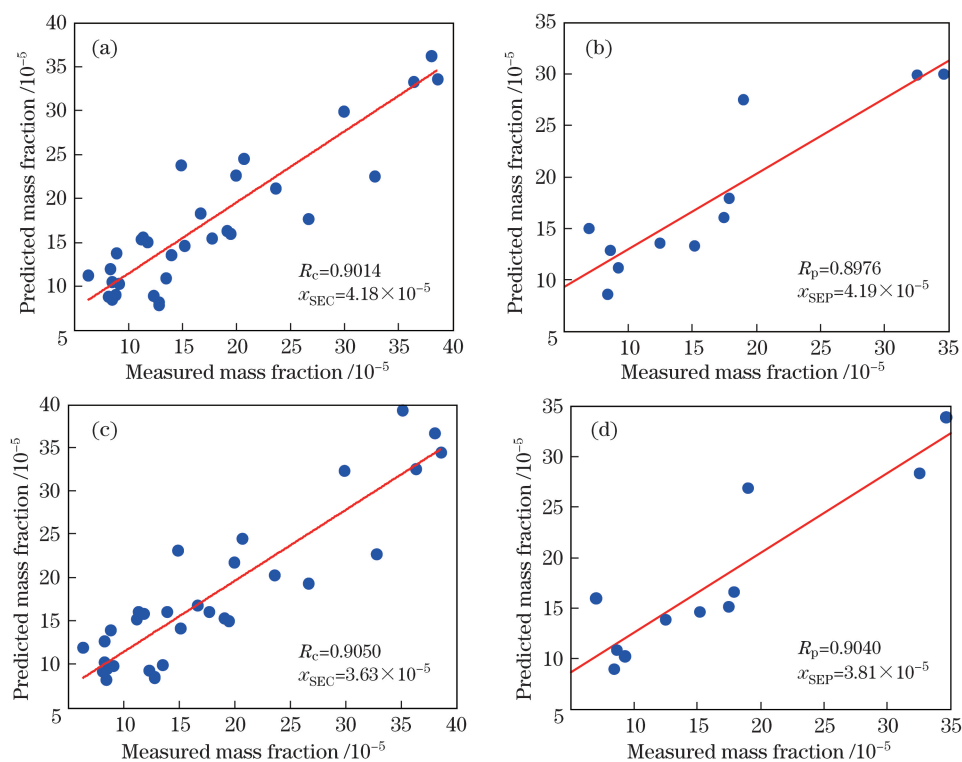


图 12 PLSR 模型与 MLR 模型预测 TVB-N 含量的结果。(a) PLSR 模型, 校正集; (b) PLSR 模型, 验证集; (c) MLR 模型, 校正集; (d) MLR 模型, 验证集

Fig. 12 Predicted content of TVB-N with PLSR model and MLR model. (a) PLSR model, calibration set; (b) PLSR model, prediction set; (c) MLR model, calibration set; (d) MLR model, prediction set

3 种算法筛选出的特征波长能够覆盖所有特征波长范围内 LED 光源的波长, 可用于多光谱检测系统, 光源的峰值波长分别为 472, 525, 544, 579, 610, 778, 810, 860 nm, 每个光源的半峰全宽为 20 nm, 覆盖了 3 种算法筛选出的所有特征波长。根据上述 8 种特征波段光源的多光谱系统建模结果可知, 利用这 8 个峰值波长光源代替特征波长进行 TVB-N 含量的测定是可行的。

4 结 论

利用高光谱系统获取猪肉样品的原始图谱特征, 并将其转化为样品反射率数据, 利用各种预处理方法建立反射率光谱与 TVB-N 含量的模型, 然后利用 SWA、SPA、GA 算法筛选出与 TVB-N 含量相关的特征波长, 并进一步比较。结果表明, 这 3 种算法筛选出的特征波长在全波段范围内集中分布, 都位于与 TVB-N 含量相关的 8 个吸收峰附近, 这些特征波长分别为 472, 525, 544, 579, 610, 778, 810, 860 nm。

根据优选的特征波长, 选择覆盖所有特征波长范围的 LED 光源, 基于多光谱检测系统建立预测 TVB-N 含量的 PLSR 模型与 MLR 模型。结果表明: 利用包含优选特征波长的 LED 光源的多光谱系统不仅能够对 TVB-N 含量进行预测, 而且 MLR 模型的建模结果好于分别利用 SWA、SPA、GA 筛选的特征波长的建模结果; 其中 MLR 模型的 R_c 为 0.9050, x_{SEC} 为 3.63×10^{-5} , R_p 为 0.9040, x_{SEP} 为 3.81×10^{-5} 。与本课题组的前期研究结果相比, 本研究不仅提高了特征波长多光谱方法预测 TVB-N 含量的精度, 而且为其他农畜产品便携式检测设备的研发提供了理论支撑。

参 考 文 献

- [1] Cai Jianrong, Wan Xinmin, Chen Quansheng. Feasibility study for the use of near-infrared spectroscopy in the quantitative analysis of TVB-N content in pork[J]. Acta Optica Sinica, 2009, 29(10): 2808-2812.
蔡健荣, 万新民, 陈全胜. 近红外光谱法快速检测猪肉中挥发性盐基氮的含量[J]. 光学学报, 2009, 29(10): 2808-2812.
- [2] 中华人民共和国国家卫生和计划生育委员会, 国家食品药品监督管理总局. 食品安全国家标准 鲜(冻)畜、禽产品:

- GB 2707—2016[S]. 北京: 中国标准出版社, 2016.
- [3] Peng Yangsi, Liu Pei, Zhang Hua. The comparison of methods to detect TVB-N in meat and meat products[J]. Food Research and Development, 2016, 37(4): 152-154.
彭杨思, 刘培, 章骅. 肉与肉制品中挥发性盐基氮测定方法的比较[J]. 食品研究与开发, 2016, 37(4): 152-154.
- [4] Liu Xueyun. Status and development direction of detection method for TVB-N[J]. Academic Periodical of Farm Products Processing, 2014(1): 51-53.
刘雪云. 挥发性盐基氮检测方法的现状及研究方向[J]. 农产品加工(学刊), 2014(1): 51-53.
- [5] Peng Yankun, Zhang Leilei. Advancement and trend of non-destructive detection technology for assessing agro-products quality and safety[J]. Journal of Food Safety and Quality, 2012, 3(6): 561-568.
彭彦昆, 张雷蕾. 农畜产品品质安全光学无损检测技术的进展和趋势[J]. 食品安全质量检测学报, 2012, 3(6): 561-568.
- [6] Yu Xinyang, Lu Qipeng, Gao Hongzhi, *et al.* Current status and prospects of portable NIR spectrometer[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(11): 2983-2988.
于新洋, 卢启鹏, 高洪智, 等. 便携式近红外光谱仪现状及展望[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(11): 2983-2988.
- [7] Li Cuiling, Peng Yankun, Tang Xiuying. Device for rapid nondestructive detection of pork freshness based on multispectral imaging technology[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Machinery, 2012, 43(s1): 202-206.
李翠玲, 彭彦昆, 汤修映. 基于多光谱成像技术的猪肉新鲜度无损快速检测装置[J]. 农业机械学报, 2012, 43(s1): 202-206.
- [8] Lin Wan, Peng Yankun, Wang Caiping. Design of portable device for rapid nondestructive detection of fresh meat quality[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2014, 30(7): 243-249.
林琬, 彭彦昆, 王彩萍. 便携式生鲜肉品质无损快速检测装置的设计[J]. 农业工程学报, 2014, 30(7): 243-249.
- [9] Guo Hui, Peng Yankun, Jiang Fachao, *et al.* Development of conveyable beef-marbling detection system[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Machinery, 2012, 43(s1): 207-210.
郭辉, 彭彦昆, 江发潮, 等. 手持式牛肉大理石花纹检测系统[J]. 农业机械学报, 2012, 43(s1): 207-210.
- [10] Sun Hongwei, Peng Yankun, Lin Wan. Development of a portable device for simultaneous detection on multi-quality attributes of fresh pork[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2015, 31(20): 268-273.
孙宏伟, 彭彦昆, 林琬. 便携式生鲜猪肉多品质参数同时检测装置研发[J]. 农业工程学报, 2015, 31(20): 268-273.
- [11] Wei W S, Peng Y K, Li Y Y, *et al.* Lightweight portable nondestructive detection technique for assessing meat freshness attributes based on light emitting diode array[C]. ASABE Annual International Meeting, 2015: 152189624.
- [12] Wang Wenxiu, Peng Yankun, Sun Hongwei, *et al.* Development of simultaneous detection device for multi-quality parameters of meat based on Vis/NIR spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2016, 32(23): 290-296.
王文秀, 彭彦昆, 孙宏伟, 等. 基于可见/近红外光谱生鲜肉多品质参数检测装置研发[J]. 农业工程学报, 2016, 32(23): 290-296.
- [13] Antonucci F, Pallottino F, Paglia G, *et al.* Non-destructive estimation of mandarin maturity status through portable VIS-NIR spectrophotometer[J]. Food and Bioprocess Technology, 2011, 4(5): 809-813.
- [14] Camps C, Christen D. Non-destructive assessment of apricot fruit quality by portable visible-near infrared spectroscopy[J]. LWT-Food Science and Technology, 2009, 42(6): 1125-1131.
- [15] Fan Shuxiang, Huang Wenqian, Zhang Baohua, *et al.* Design and experiment on portable apple soluble solids content spectrometer[J]. Infrared and Laser Engineering, 2014, 43(s1): 219-224.
樊书祥, 黄文倩, 张保华, 等. 便携式苹果糖度光谱检测仪的设计与试验[J]. 红外与激光工程, 2014, 43(s1): 219-224.
- [16] Wei Wensong, Peng Yankun. Development of hand-held device for nondestructive detection of meat quality parameters[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Machinery, 2016, 47(s1): 324-332.
魏文松, 彭彦昆. 手持式生鲜肉品质参数无损检测装置设计[J]. 农业机械学报, 2016, 47(s1): 324-332.
- [17] Zheng X C, Peng Y K, Wang W X. A nondestructive real-time detection method of total viable count in pork by hyperspectral imaging technique[J]. Applied Science, 2017, 7(3): 7030213.
- [18] Liu Shanmei. Research on cold fresh pork non-destructive detection methods based on hyperspectral imaging technology[D]. Wuhan: Huazhong Agricultural University, 2015: 48-50.
刘善梅. 基于高光谱成像技术的冷鲜猪肉品质无损检测方法研究[D]. 武汉: 华中农业大学, 2015: 48-50.
- [19] Zhou Yuanjiao. A new regression method: screening stepwise regression[D]. Yangzhou: Yangzhou University, 2011:

16-19.

周元娇. 筛选逐步回归方法的改进研究[D]. 扬州: 扬州大学, 2011: 16-19.

- [20] Wu Yiquan, Zhou Yang, Long Yunlin. Small target detection in hyperspectral remote sensing image based on adaptive parameter SVM[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(9): 0928001.
吴一全, 周杨, 龙云淋. 基于自适应参数支持向量机的高光谱遥感图像小目标检测[J]. *光学学报*, 2015, 35(9): 0928001.
- [21] Sun Tong, Wu Yiqing, Li Xiaozhen, *et al.* Discrimination of camellia oil adulteration by NIR spectra and subwindow permutation analysis[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(6): 0630005.
孙通, 吴宜青, 李晓珍, 等. 基于近红外光谱和子窗口重排分析的山茶油掺假检测[J]. *光学学报*, 2015, 35(6): 0630005.
- [22] Liao Yitao, Fan Yuxia, Cheng Fang, *et al.* Application of successive projections algorithm to nondestructive determination of pork pH value[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2010, 26(s1): 379-383.
廖宜涛, 樊玉霞, 成芳, 等. 连续投影算法在猪肉 pH 值无损检测中的应用[J]. *农业工程学报*, 2010, 26(s1): 379-383.
- [23] Zheng Yongmei, Zhang Jun, Chen Xingdan, *et al.* Research on model and wavelength selection of near infrared spectral information[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2004, 24(6): 675-678.
郑咏梅, 张军, 陈星旦, 等. 基于逐步回归法的近红外光谱信息提取及模型的研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2004, 24(6): 675-678.
- [24] 赵杰文, 林颖. 食品、农产品检测中的数据处理和分析方法[M]. 北京: 科学出版社, 2012: 224-226.
- [25] Peng Yankun. Nondestructive optical technology for agro-food quality and safety assessment[M]. Beijing: Science Press, 2016: 29-32.
彭彦昆. 农畜产品品质安全光学无损快速检测技术[M]. 北京: 科学出版社, 2016: 29-32.
- [26] Wu J H, Peng Y K, Li Y Y, *et al.* Prediction of beef quality attributes using VIS/NIR hyperspectral scattering imaging technique[J]. *Journal of Food Engineering*, 2012, 109(2): 267-273.
- [27] Sivertsen A H, Heia K, Stormo S K, *et al.* Automatic nematode detection in cod fillets (*Gadus morhua*) by transillumination hyperspectral imaging[J]. *Food Science*, 2011, 76(1): S77-S83.
- [28] Cheng J H, Sun D W, Pu H B, *et al.* Suitability of hyperspectral imaging for rapid evaluation of thiobarbituric acid (TBA) value in grass carp (*Ctenopharyngodon idella*) fillet[J]. *Food Chemistry*, 2015, 171: 258-265.
- [29] Cheng J H, Sun D W, Qu J H, *et al.* Developing a multispectral imaging for simultaneous prediction of freshness indicators during chemical spoilage of grass carp fish fillet[J]. *Journal of Food Engineering*, 2016, 182: 9-17.