

光谱技术在水产品品质检测中的应用研究进展

李鑫星¹, 郭渭¹, 白雪冰¹, 杨铭松^{2*}

1. 中国农业大学信息与电气工程学院食品质量与安全北京实验室, 北京 100083
2. 山东省烟台市森林资源监测保护服务中心, 山东 烟台 264000

摘要 随着我国水产养殖业以及水产加工业的快速发展, 水产品在国民饮食结构中占比越来越大, 消费者对于水产品的质量要求也越来越高。为了满足消费者对水产品的质量要求, 企业和市场需要在供应链的各个环节对水产品进行检验并公之于众。因此, 迫切需要开发一种能够满足对水产品进行快速无损检测的技术。光谱技术可以根据样品特征波长处的波谱特性推算出其物质性质与组分含量, 在水产品新鲜度检测、有害物残留检测、有害微生物含量检测、质量分级、掺假分析等方面具有巨大的应用前景。对水产品品质检测中几种常用的光谱技术的优势和局限性等特点进行讨论和总结, 认为光谱检测技术与实验室传统理化检测方法相比具有快速、无损、测试重现度好, 精度高等优点, 这些特点使得在线实时检测水产品质量成为可能, 继而可以带来巨大经济效益。但光谱检测具有前期投入高, 模型普适性差且需持续维护的缺点, 每种光谱技术也分别有各自的适用范围及局限性, 因此光谱技术在水产品品质检测中的应用有待进一步研究改进。此外, 整理了国内外现有的相关研究文献, 对检测过程中常用的光谱数据预处理算法和预测模型进行讨论和评述, 重点阐述了水产品品质检测中的几种常用光谱预处理算法和光谱数据建模方法的特点和应用现状。目前光谱技术在水产品品质检测中的应用主要处于实验室研究阶段, 尚未大规模应用于商品市场和消费市场, 根据上述分析展望了光谱技术在水产品品质检测中应用的发展方向, 认为建立统一、标准、高效的光谱检测模型库, 结合多个指标进行相关性分析, 并排除光谱采集过程中的环境干扰, 实现水产品品质实时在线检测是未来的技术发展趋势。

关键词 光谱技术; 水产品品质; 光谱数据处理; 预测模型

中图分类号: O433.4 **文献标识码:** R **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)05-1343-07

引言

随着我国消费者对于水产品的需求快速增加, 水产养殖业和加工业也随之急速发展, 目前我国的水产品养殖规模位于世界首位。根据《2018年中国渔业统计年鉴》, 2018年全国水产养殖面积约为7449.03千公顷, 水产品总产量达6457.7万吨。同时水产品进出口总额超300亿美元, 进出口总量超过900万吨, 产生了巨大的经济效益^[1]。鱼虾贝等水产品是重要的白肉来源, 白肉肌肉纤维细腻、富含蛋白质、不饱和脂肪酸等多种人体必需元素, 同时具有脂肪含量低、胆固醇含量低等特点, 为广大消费者所喜爱^[2], 为国民的饮食结构丰富性提供了重要的保障。

水产品品质检测主要包括新鲜度检测、质量分级、掺假

分析、有害物残留等方面^[3-5], 传统实验室物理化学分析方法难以实现大批量样品的快速、无损检测, 并且由于操作相对繁琐而易出现人为误差。近年来在水产检测行业新兴的光谱技术利用样品测得的光谱特性来定性或定量研究物质结构和组成, 具有快速、无损、测试重现度好, 精度高、成本较低、方法简便等优点^[6]。目前, 在基于光谱的水产品品质检测技术当中, 近红外光谱技术起步早, 相对成熟, 属于分子振动吸收光谱; 高光谱成像技术将物体的光谱信息和图像信息进行了融合, 可精确采集每个像素点信息, 并对检测结果进行可视化; 拉曼光谱是一种散射光谱, 可与近红外光谱相互补充以更好地研究分子振动状态^[7-9]。

分析了水产品品质检测中常用的各类光谱技术的优势以及局限性, 综述了国内外光谱检测技术在水产品品质检测应用中的研究进展, 及光谱数据预处理和建模的主要方法, 最

收稿日期: 2020-01-20, 修订日期: 2020-04-19

基金项目: 国家“十三五”重点研发计划项目(2018YFD0701003)资助

作者简介: 李鑫星, 1983年生, 中国农业大学信息与电气工程学院食品质量与安全北京实验室副教授

e-mail: lxxcau@cau.edu.cn

* 通讯作者 e-mail: ytsyms@126.com

后,分析了水产品光谱检测技术的未来发展趋势。

1 水产品质量检测中光谱技术概述

基于光谱分析技术对水产品质量进行检测已成为近年来的一个研究热点,光谱技术在水产品新鲜度检测、有害物残留检测、有害微生物含量检测、质量分级、掺假分析等方面具有良好的应用前景^[10]。几种常用的光谱技术特点如表 1 所示。

1.1 光谱检测技术的优势

(1)快速。不需要对样品进行繁琐处理即可进行光谱采集,通过建立预测模型能迅速检测水产中化学组分的含量或性质,大大缩短了检测周期。Yu 等利用高光谱成像技术结合深度学习算法快速预测冷藏期间太平洋白虾的 TVB-N 含量,模型计算时间仅为 3.9 ms^[11]。

(2)无损。光谱检测过程不会对样品本身产生影响,待测样品从外观到内部的物质结构与性质都不发生变化,只需应用相关装置采集光谱信息即可。鉴于这一特性,光谱检测技术可以良好应用于水产品加工流水线及消费者市场。

(3)测试重现度高。样品测得的每个特征波段处光谱特性可以代表相应物质的特性,根据特征波长处的波谱可推算出样品中的物质组分与含量。由于光谱测量过程很少受外界因素的干扰,且仪器操作相对简便不容易出现人为失误,测量结果相对平稳。

(4)成本低。面向大规模检验时,光谱分析不消耗样品和试剂,不论用于定性判别样品性质还是定量检测样品成分都无需雇佣专业人员进行检测^[12]。通过多参数耦合建模,可有效同时预测多个指标含量,相对于传统实验室分析方法,显著降低了大量检测费用。

1.2 光谱技术局限性

(1)前期投入较高。模型的可靠性依赖于足够的样品数量,因此光谱分析的实现需提前选取大量代表性样品进行定性或定量检测,这一过程需要雇佣专业的检验员并且检测周期长、成本高^[13]。此外,研究人员建模过程相对复杂,精度符合要求的光谱分析仪器价格也相对昂贵,较难普及到大众市场。

(2)模型普适性差且需持续维护。不同光谱方法适用于不同物质检测,且不同检测对象所适用的特征波段不同,难以实现同一方法全覆盖检测。另外,建模后难免会遇到模型对某些样品预测效果差的情况,所以需要不断对模型进行优化、修正和完善。鉴于以上特点,光谱分析技术适合于大规模连续检测却不适用于分散性样品检测。

(3)每种光谱技术都有其局限性和缺点。近红外光谱灵敏度相对较低,谱带较宽波峰易重叠,易受干扰,信噪比较低^[14];高光谱每个像素都含有连续的波谱信息,数据量极大,临近波段冗余且间距狭窄导致了数据处理难度增加^[15-16];拉曼光谱波峰易重叠,且拉曼散射信号较弱^[17]。

表 1 水产检测中 3 种常用光谱技术特点

Table 1 Characteristics of three common spectral techniques for aquatic products quality inspection

光谱技术	波段范围	特点	用途	参考文献
近红外光谱	780~2 526 nm	吸收强度较低,具有较强的穿透性,易受环境光干扰	检测具有 C—H, O—H, S—H, N—H 等含氢基团的化合物	[18-19]
高光谱	覆盖范围包括几百到上千个波段	融合了光谱及图像信息,每个像素都具有完整连续光谱,波段众多且间距窄、数据量极大	检测水产品当中水、蛋白质、脂肪、挥发性盐基氮等物质的含量及指标分布可视化	[20-22]
拉曼光谱	不限于紫外、可见光、近红外	散射强度反比于激光波长四次方、谱峰清晰、灵敏度高、样品检测面积小、光谱无需预处理	几乎适用于所有含对称化学键物质的化合物、包括孔雀石绿、结晶紫等渔药残留痕量检测	[23-25]

2 水产品质量光谱检测中的数据解析

利用光谱技术检测水产品质量依赖于数学模型的建立。首先,要将样本集划分为训练集和验证集,建立训练集模型的样本应在组成及性质上与验证集样品基本一致。建立模型之前应先消除与样本无关的信息与噪声,并对光谱进行特征波段的提取。最后,需要对模型的泛化能力进行性能度量并不断改进和优化。本文主要对水产检测中常用的光谱预处理算法及光谱建模方法的研究进展进行讨论和分析。

2.1 光谱数据的预处理

光谱采集过程中常遇到各种噪声影响,主要为环境光噪声,因此光谱数据预处理算法尤为重要。光谱数据预处理可以有效过滤无关信息和干扰因素对光谱或图像的影响进而提

高信噪比,从而保证模型预测结果的精度。目前水产品光谱检测技术中的光谱数据预处理方法通常包括:SG 平滑算法、导数法、标准正态变换法、多元散射校正法等。4 种常见的光谱预处理算法的对比分析如表 2 所示。

2.1.1 SG 平滑算法

SG 平滑算法(Savitzky-golay Smoothing)基于最小二乘原理,是一种通过多次求光谱数据均值来降低误差的多项式平滑算法,又称卷积平滑算法,由 Savitzky 和 Golay 于 1964 年提出。可以过滤高频信号来提高光谱数据的平滑性,提高信噪比^[26]。Federico 等基于可见光光谱检测叫噪浓度,使用具有 10 点窗口的 Savitzky-Golay 平滑算法降低模型误差,更好地确定了虾的品质^[27]。陈伟华采集罗非鱼片近红外光谱数据与鱼肉 TVB-N 含量进行拟合,通过 Savitzky-Golay 卷积平滑对光谱进行预处理获得了良好的去噪效果^[28]。这种

方法具有算法简单、运行速度快的优点,随着 SG 平滑算法窗口尺度选取的改变,滤波的效果也随之发生改变,因而特别适合光谱数据的实时处理分析。

2.1.2 导数

导数法(derivative)可以对波谱信号进行提取,消除基线漂移和斜率并提高分辨率,是常用的光谱预处理方法之一^[29]。Vongsvivut 等基于傅里叶变换的红外光谱测定鱼油中的脂肪酸组成,期间使用 9 点 SG 算法计算光谱二阶导数^[30]。Dai 等使用 11 点的 SG 平滑算法计算 VIS/NIR 高光谱数据一阶和二阶导数,有效降低了提取数据的噪声水平,提高对虾分类的模型精度^[31]。为了降低求导造成的噪声影响,通常需要预先对原始光谱进行平滑处理,Savitzky-Golay 卷积平滑法是常用的平滑处理方法。另外,若存在复杂干扰或使用了不合适的平滑参数,求导的结果可能无效。

2.1.3 标准正态变换

标准正态变换(standard normal variate transformation, SNV)可以消除光谱数据中的加性效应和乘性效应。在 SNV 转换中,将每个光谱居中,然后按相应的标准偏差进行缩放,可以减少散射的乘法效应^[32]。Nonthawong 等利用 SNV 预处理的近红外高光谱数据建立 PLSR 模型,用以识别金枪

鱼粉中的虾粉^[33]。吴浩等建立对冷冻和解冻状态下鱼糜的等级评定模型,使用标准正态变量变换法对近红外光谱进行预处理,有效地消除了样品表面的散射效应^[34]。Grassi 等使用 SNV 对 NIR 数据进行预处理,用以区分大西洋鲑鱼和黑线鳕的鱼片^[35]。进行 SNV 处理的前提是,光谱之间的变化主要通过整个波长范围内的均匀乘法效应来建模。当不满足该前提条件时,不适当的预处理可能降低信噪比。

2.1.4 多元散射校正

多元散射校正(multiple scattering correction, MSC)定义了一个参照光谱(通常是校准数据的平均光谱),将每个光谱的基线和放大效应校正为参照光谱,MSC 的目的与 SNV 基本相同,主要是消除固体表面颗粒不均匀导致的散射影响^[36-37]。Alamprese 等建立了鉴别不同种类鱼片的预测模型,通过 MSC 算法对 NIR 数据进行标准化达到降噪的目的^[38]。Rahman 等利用鱼眼液的紫外线-可见(UV-Vis)光谱预测鱼肉 K 值,结果显示基于 MSC 预处理光谱数据为回归模型提供了更好的性能^[39]。MSC 是常用的多波长光谱建模方法,能有效增强与样品成分含量相关的波谱信息。它和 SNV 可相互转换,是减少粒径影响的两种替代方法。

表 2 4 种常用光谱预处理对比分析

Table 2 Comparative analysis of four common pretreatment algorithms of spectroscopy

预处理算法	特点	适用范围
SG 平滑	算法简单、运行速度快	随着选取窗口宽不同而不同,可以满足多种不同场合的需求
导数	为了避免求导引起的噪声扩大通常需预先对原始数据进行平滑处理	常用于分辨谱带重叠、消除光谱数据基线漂移引起的干扰
标准正态变换	与标准化算法相比,可对光谱矩阵的行进行处理	消除 NIR 漫反射光谱的散射干扰,提升模型精度和收敛速度
多元散射校正	转置过的 NIR 漫反射光谱没有多重共线性	消除固体表面颗粒不均匀产生的散射和粒径的乘法影响

2.2 水产品光谱检测常用数据模型

光谱技术和化学计量学方法以及机器学习方法的结合为水产光谱检测奠定了基础,继而可以建立稳定、可靠的分析模型,模型的好坏决定着预测精度的好坏,实际应用中应当根据任务复杂程度和训练数据量的不同选择合适的建模方法以达到最佳效果。4 种常见的建模方法对比分析如表 3 所示。

2.2.1 多元线性回归

多元线性回归(multiple linear regression, MLR)可以拟合单特征和多样本之间的线性相关关系,通常也被称为逆最小二乘法。光谱技术中多元线性回归的原理为:多个光谱特征波长处的吸收谱带深度与样品的某种化学组分性质高度相关,从而可以找出与某种指标显著相关的波段进行多元回归得到多元线性回归模型的参数^[40]。Shi 等基于高光谱数据最佳波长,建立了 MLR 校准模型,实验结果表明,高光谱成像技术结合 MLR 方法可在快速预测形状不圆的虾的水分含量以及分布^[41]。Cheng 等利用 400~1 000 nm 的高光谱波段测量草鱼鱼肉中的大肠杆菌菌落数,研究表明,简化的 MLR 模型在预测大肠杆菌菌落数方面显示出良好的有效性和鲁棒

性,并且可用来转移图像中的每个像素,以对大肠杆菌的空间分布可视化^[42]。MLR 方法适用于线性关系良好的简单体系,只需知道样品中被测组分的浓度和性质即可建立校正模型,计算过程简单清晰明了,无需考虑交互干扰效应和非线性因果关系,但 MLR 方法在遇到多重共线性或者噪声较强时往往预测效果不佳。

2.2.2 偏最小二乘回归

偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)是一种拟合多因变量和多自变量的建模方法,常用于构建光谱数据的线性回归模型,能有效去除光谱数据的高度共线性^[43-44]。Prieto 等基于 NIR 的偏最小二乘判别分析正确地将 100% 的纯化鲑鱼片进行分类^[45]。Masoum 等的研究证明,PLSR 结合 NIRS 技术非常适合于评估鱼粉的蛋白质和水分含量^[46]。徐富斌等采集大黄鱼背部的 NIR 光谱,建立了全波段 PLSR 模型用以预测挥发性盐基氮含量和菌落总数^[47]。Yang 等通过近红外光谱技术对纯鱼粉进行偏最小二乘法建模,将掺假样本区别出来^[48]。Tito 等研究了基于近红外光谱方法检测大西洋鲑需氧菌落数的方法,建立了 PLSR 预测模

型, 校准方程拟合良好($R^2 = 0.95$)。结果表明, 通过进一步的模型开发, 可使用 NIR 来预测海产品保存期限^[49]。PLSR 方法吸收融合了多元线性回归(MLR)、典型相关分析(CCA)以及主成分分析(PCA)等方法的长处, 简化了数据结构, 消除了变量间多重共线性。在光谱数据的多元线性回归中, 样本量过少且变量间有多重相关性时, 宜选用 PLSR 方法, 该方法能有效降低计算量提升模型性能。

2.2.3 最小二乘支持向量机

最小二乘支持向量机(least squares support vector machine, LS-SVM)是 SVM 的变体, 它与 SVM 一样是基于边际最大化原理的分类器, 训练模型只与支持向量相关。它使用核函数解决非线性问题中边界划分^[50]。Wu 等使用高光谱数据建立 LS-SVM 模型来预测虾样品的明胶浓度, 结果表明, 高光谱成像技术能良好应用于对虾明胶掺假检测^[51]。章海亮等用高光谱成像技术检测鱼的新鲜度, 采用最小二乘支持向量机作为分类模型, 验证集准确率达到 98%^[52]。Jun 等利用高光谱成像技术对冷藏草鱼片硬度进行分析, 实验结果表明 LS-SVM 性能优于 PLSR^[53]。LS-SVM 适合于小样本的学习环境, 它继承了 SVM 出色的泛化性能且更容易训练, 核函数将光谱数据映射到更高维特征空间, 并求得最大化余量的超平面进行分类。超参数(正则化参数和内核参数)的选择会影响 LS-SVM 的性能。

2.2.4 人工神经网络

人工神经网络(artificial neural networks, ANN)是一种自学习自适应的非线性建模方法, 它由大量相互联系的基本单元组成, 处理信息的方式类似于人类大脑, 随着硬件设备计算能力的剧增, 人工神经网络的优势也越来越明显。其

中, 误差反向传播神经网络(back Propagation)是人工神经网络的传统代表, 它的模型共分输入层、隐层和输出层 3 层, 基于负梯度方向的梯度下降法对误差函数进行训练, 通过误差逆向传播调节连接权值和阈值^[54]。深度学习是近年来兴起的一种复杂多隐层神经网络模型, 可对光谱图像的每一个像素进行标记, 通过大量数据训练可有效降低模型过拟合导致的泛化不良^[55]。Huang 等融合近红外光谱技术和计算机视觉技术预测鱼的 TVB-N 含量, 基于反向传播(BP)人工神经网络建立了非线性预测模型。结果显示, 训练集和预测集的识别率分别达到 96.67% 和 93.33%^[56]。Wu 等利用 VIS/NIS 光谱结合堆叠式降噪自动编码神经网络(SDAE-NN)算法, 建立了预测鲑鱼冷藏时间模型。结果表明, SDAE-NN 比 PLSR 等常规方法具有更好的性能, 且无需光谱预处理^[57]。Yu 等用堆叠式自动编码器(SAE)和逻辑回归(LR)组成的深度学习算法(SAEs-LR)建立了基于高光谱数据用以区分虾新鲜度的模型。其中 SAE 算法用于高光谱图像特征提取, LR 算法用于高光谱图像分类。实验中, 大量像素光谱(每只虾 800 个随机像素光谱)被用作输入大数据集, 通过像素光谱训练完成后, 将 SAEs-LR 应用于平均光谱, 以区分虾的新鲜度等级。结果表明, SAEs-LR 分别在校准集和测试集中对虾的新鲜度准确率达到了 96.55% 和 93.97%^[58]。人工神经网络具有大规模并行数据处理能力, 但容易遭遇过拟合, 可通过正则化来降低泛化误差。其中, 近年来兴起的深度学习可以用于处理高维光谱数据量过大所引起的特征选择和建模难度增加, 深度学习与高光谱图像技术的结合在水产品品质检测中显示出良好应用前景。

表 3 4 种常用光谱建模方法对比分析

Table 3 Comparative analysis of four common modeling methods of Spectroscopy

建模方法	特点	类型	适用范围
多元线性回归	计算简单、物理意义明确	线性建模	自变量间非多重共线, 样品满足独立性、方差齐性、正态性
偏最小二乘回归	精简数据结构、避免线性相关、易于定性解释、模型稳健性好	线性建模	适用于小样本多组分混合复杂体系回归建模
最小二乘支持向量机	收敛速度快、不需要预设网络结构、容易训练、计算复杂	非线性建模	适合于小样本的学习环境
人工神经网络	自学习能力强大、对样本数量有一定要求、可大规模快速运算	非线性建模	可充分拟合大样本复杂非线性关系

3 发展趋势

随着光谱技术在水产品品质检测领域的研究推进, 其快速、无损、测试重现度好, 精度高、成本低等优势正逐渐体现出来。目前光谱技术在水产品品质检测应用尚处于研究阶段, 实际生产中应用较少, 未来的研究关键点主要集中在以下几点:

(1) 建立精确、统一、全面、完善的水产品光谱分析模型库, 采用更加标准化的技术手段来促进水产品品质光谱检测的

平台化, 真正实现水产品品质的在线实时分析。另外, 为了便于光谱检测更多应用于消费者市场, 应进一步降低设备成本, 促进设备一体化和小型化, 使光谱检测具有低价、灵活、稳定、精确等优势。

(2) 能反应水产品品质变化的指标较多, 仅选取单一指标对品质进行预测, 往往难以反映样品真实品质。因此, 可考虑结合多个检测指标, 同时增加波段范围, 使用多波段组合等方法进行指标相关性分析, 从而对水产品品质做出更加客观准确的评价。

(3) 样品的光谱采集过程容易受到外界环境噪声干扰,

从而影响检测结果的准确性。为了应对这种缺陷,应同时从设备层面和算法层面对环境干扰进行屏蔽,并且进一步改进光谱特征波段提取的算法,消除重复性检测结果的随机性,从而推动光谱技术实时在线检测的产业化发展。

References

- [1] TANG Qi-sheng, DING Xiao-ming, LIU Shi-lu, et al(唐启升, 丁晓明, 刘世禄, 等). Chinese Fisheries Economics(中国渔业经济), 2014, 32(1): 6.
- [2] Wu C, Yuan C, Ye X, et al. Journal of Integrative Agriculture, 2014, 13(12): 2788.
- [3] Cheng J H, Sun D W, Zeng X A, et al. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2015, 55(7): 1012.
- [4] Wang S L, Xu X R, Sun Y X, et al. Marine Pollution Bulletin, 2013, 76(1-2): 7.
- [5] Zhang J, Zhang X, Dediu L, et al. Food Control, 2011, 22(8): 1126.
- [6] ZHAO Fang, HAO Ya-nan, ZHAN Ji-sheng(赵芳, 郝亚楠, 战吉晟). China Brewing(中国酿造), 2014, 33(8): 1.
- [7] Ferrari A C, Basko D M. Nature Nanotechnology, 2013, 8(4): 235.
- [8] PENG Yan-kun, ZHANG Lei-lei(彭彦昆, 张雷蕾). Transactions of The Chinese Society for Agricultural Machinery(农业机械学报), 2013, 44(4): 137.
- [9] Cançado L G, Jorio A, Ferreira E H M, et al. Nano Letters, 2011, 11(8): 3190.
- [10] LAN Wei-qing, ZHANG Nan-nan, LIU Shu-cheng(蓝蔚青, 张楠楠, 刘书成). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2017, 37(11): 3399.
- [11] Yu X, Wang J, Wen S, et al. Biosystems Engineering, 2019, 178: 244.
- [12] Blanco M, Villarroya I. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2002, 21(4): 240.
- [13] ZHANG Hui, SONG Yan, LENG Jing, et al(张卉, 宋妍, 冷静, 等). Spectroscopy Laboratory(光谱实验室), 2007, 24(3): 388.
- [14] Inácio M R C, de Lima K M G, Lopes V G, et al. Food Chemistry, 2013, 136(3-4): 1160.
- [15] SU Hong-jun, DU Pei-jun(苏红军, 杜培军). Remote Sensing Technology and Application(遥感技术与应用), 2006, (4): 288.
- [16] Fauvel M, Benediktsson J A, Chanussot J, et al. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 2008, 46(11): 3804.
- [17] SUN Lu, CHEN Bin, GAO Rui-chang(孙璐, 陈斌, 高瑞昌). Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology(中国食品学报), 2013, 12(12): 113.
- [18] Mijovic J, Andjelic S. Macromolecules, 1995, 28(8): 2787.
- [19] WU Guang-zhou, MENG Juan, SHI Yan-min, et al(吴广州, 孟娟, 时彦民, 等). Chinese Fishery Quality and Standards(中国渔业质量与标准), 2013, 3(1): 94.
- [20] ElMasry G, Sun D W, Allen P. Food Research International, 2011, 44(9): 2624.
- [21] Hassoun A, Karoui R. Food Control, 2015, 54: 240.
- [22] Wu Di, Sun Dawen. Innovative Food Science & Emerging Technologies, 2012, 16(1): 361.
- [23] Sarkardei S, Howell N K. Food Chemistry, 2007, 103(1): 62.
- [24] Marquardt B J, Wold J P. LWT-Food Science and Technology, 2004, 37(1): 1.
- [25] GU Zhen-hua, ZHAO Yu-xiang, WU Wei-ping, et al(顾振华, 赵宇翔, 吴卫平, 等). Chemical World(化学世界), 2011, 52(1): 14.
- [26] Schafer R W. IEEE Signal Processing Magazine, 2011, 28(4): 111.
- [27] Federico-Perez R A, Xue Z L. Analytical Biochemistry, 2018, 557: 104.
- [28] CHEN Wei-hua, XU Chang-hua, FAN Yu-xia, et al(陈伟华, 许长华, 樊玉霞, 等). Food Science(食品科学), 2014, 35(24): 164.
- [29] Bocklitz T, Walter A, Hartmann K, et al. Analytica Chimica Acta, 2011, 704(1-2): 47.
- [30] Vongsivut J, Heraud P, Zhang W, et al. Food Chemistry, 2012, 135(2): 603.
- [31] Dai Q, Cheng J H, Sun D W, et al. Journal of Food Engineering, 2015, 149: 97.
- [32] Barnes R J, Dhanoa M S, Lister S J. Applied Spectroscopy, 1989, 43(5): 772.
- [33] Nonthawong K, Phiriyangkul P, Terdwongworakul A, et al. IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science, 2019, 301(1): 012066.
- [34] WU Hao, CHEN Wei-hua, WANG Xi-chang, et al(吴浩, 陈伟华, 王锡昌, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2015, 35(5): 1239.
- [35] Grassi S, Casiraghi E, Alamprese C. Food Chemistry, 2018, 243: 382.
- [36] Bi Y, Yuan K, Xiao W, et al. Analytica Chimica Acta, 2016, 909: 30.
- [37] Dumouchel C, Yongyingsakthavorn P, Cousin J. International Journal of Multiphase Flow, 2009, 35(3): 277.
- [38] Alamprese C, Casiraghi E. LWT-Food Science and Technology, 2015, 63(1): 720.
- [39] Rahman A, Kondo N, Ogawa Y, et al. Biosystems Engineering, 2016, 141: 12.
- [40] Kokaly R F, Clark R N. Remote Sensing of Environment, 1999, 67(3): 267.
- [41] Wu D, Shi H, Wang S, et al. Analytica Chimica Acta, 2012, 726: 57.

- [42] Cheng J H, Sun D W. *Food and Bioprocess Technology*, 2015, 8(5): 951.
- [43] Mehmood T, Liland K H, Snipen L, et al. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2012, 118: 62.
- [44] Geladi P, Kowalski B R. *Analytica Chimica Acta*, 1986, 185: 1.
- [45] Prieto N, Swift M L, Summerfelt S T, et al. *Food Analytical Methods*, 2015, 8(10): 2660.
- [46] Masoum S, Alishahi A R, Farahmand H, et al. *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*, 2012, 31(3): 51.
- [47] XU Fu-bin, HUANG Xing-yi, DING Ran, et al(徐富斌, 黄星奕, 丁然, 等). *Food Safety and Quality Detection Technology(食品安全质量检测学报)*, 2012, 3(6): 644.
- [48] Yang Z L, Han L J, Liu X, et al. *Animal Feed Sci. Technol.*, 2008, 147(4): 357.
- [49] Tito N B, Rodemann T, *Food Microbiology*, 2012, 32(2): 431.
- [50] Adankon M M, Cheriet M. *Pattern Recognition*, 2009, 42(12): 3264.
- [51] Wu D, Shi H, He Y, et al. *Journal of Food Engineering*, 2013, 119(3): 680.
- [52] ZHANG Hai-liang, CHU Bing-quan, YE Qing, et al(章海亮, 楚秉泉, 叶青, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2018, 38(2): 559.
- [53] Cheng Junhu, Qu Jiahuan, Sun Dawen, et al. *Food Research International*, 2014, 56: 190.
- [54] Wang L, Zhang Y, Chen T. *Expert Systems With Applications*, 2015, 42(2): 855.
- [55] LeCun Y, Bengio Y. *Nature*, 2015, 521(7553): 436.
- [56] Huang X, Xu H, Wu L, et al. *Analytical Methods*, 2016, 8(14): 2929.
- [57] Wu T, Zhong N, Yang L. *Journal of Spectroscopy*, 2018, 2018.
- [58] Yu X, Tang L, Wu X, et al. *Food Analytical Methods*, 2018, 11(3): 768.

Review on the Application of Spectroscopy Technology in Aquatic Product Quality Detection

LI Xin-xing¹, GUO Wei¹, BAI Xue-bing¹, YANG Ming-song^{2*}

1. Beijing Laboratory of Food Quality and Safety, College of Information and Electrical Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China
2. Forest Resource Monitoring and Protection Service Center of Yantai, Shandong Province, Yantai 264000, China

Abstract With the rapid development of China's aquaculture and aquatic processing industries, aquatic products have become more and more important in the national diet structure, which make consumers have more requirements for the quality of aquatic products. In order to meet consumers' need for the quality of aquatic products, enterprises and markets need to detect the quality of aquatic products at every links in the supply chain and make it public. Therefore, it urgently needs to develop a technology that can satisfy the fast non-destructive testing of aquatic products. Spectroscopic technology can infer the material properties and component content based on the spectral characteristics of the sample at the characteristic wavelength, which has huge application prospects in the detection of aquatic product freshness, hazardous substance residue, harmful microorganism, quality classification, adulteration analysis and so on. This review discusses and summarizes the advantages and limitations of several commonly used spectroscopic techniques in aquatic product quality testing. It is believed that compared with traditional laboratory testing methods, spectroscopic techniques have the advantages of fast, non-destructive, good test reproducibility, and high accuracy. These characteristics make it possible for online real-time detection of aquatic product quality, which can bring huge economic benefits. However, spectral detection also has the disadvantages of high initial investment, poor universality and need for continuous maintenance. Each spectrum technology also has its own scope and limitations. Therefore, this technology in the quality inspection of aquatic products needs further research and improvement. This review collates the existing relevant research literature at home and abroad, discussing and commenting on the commonly used spectral data preprocessing algorithms and prediction models in the detection process. Focusing on characteristics and current application status of four kinds of spectral preprocessing algorithms and several modeling methods. At present, the application of spectroscopic technology in aquatic product quality testing is mainly in the laboratory research stage, rather than been applied to commodity markets and consumer markets widely. Based on the above analysis, this paper prospects the future development of the application of spectroscopy technology in the quality inspection of aquatic products, think that building a unified, standard and efficient spectral detection model library, combined multiple indicators to correlation analysis, eliminate environmental interference during the spectrum acquisition process, and realizing online real-time detection of aquatic product quality is the future technology development trend.

Keywords Spectroscopy technology; Aquatic product quality; Spectral data processing; Prediction model

* Corresponding author

(Received Jan. 20, 2020; accepted Apr. 19, 2020)

《光谱学与光谱分析》投稿简则

《光谱学与光谱分析》是由中国科协主管,中国光学学会主办,钢铁研究总院、中国科学院物理研究所、北京大学、清华大学共同承办的专业学术期刊。国内外公开发行人,从 2004 年起为月刊,大 16 开本,2020 年仍为月刊,每期 332 页。《光谱学与光谱分析》主要报道我国光谱学与光谱分析领域内具有创新性科研成果,及时反映国内外光谱学与光谱分析的进展和动态;发现并培育人才;推动和促进光谱学与光谱分析的发展。为科教兴国服务。读者对象为从事光谱学与光谱分析的科研人员、教学人员、分析测试人员和科研管理干部。

栏目设置和要求

1. 研究报告 要求具有创新性的研究成果,一般文章以 8000 字(包括图表、参考文献、作者姓名、单位和中文、英文摘要,下同)为宜。

2. 研究简报 要求在前人研究的基础上有重大改进或阶段性研究成果,一般不超过 5000 字。

3. 评述与进展 要求评述国内外本专业的发展前沿和进展动态,一般不超过 10000 字。

4. 新仪器装置 要求介绍新型光谱仪器的研制、开发、使用性能和应用,一般不超过 5000 字。

5. 来稿摘登 要求测试手段及方法有改进并有应用交流价值,一般以 3000~4000 字为宜。

稿件要求

1. 投稿者请经本刊编委(或历届编委)一人或本专业知名专家推荐,并附单位保密审查意见及作者署名顺序,主要作者介绍。文章有重大经济效益或有创新者,请说明,同时注明受国家级基金或国家自然科学基金资助情况。

2. 来稿要观点明确、数据真实可靠、层次分明、言简意明、重点突出。来稿必须是网上在线投稿(含各种符号和外文字母大写、小写、正体、斜体;希腊字母、拉丁字母;上角、下角标位置应标清楚)。中文摘要以 800 字为宜,英文摘要(建议经专业英语翻译机构润色)与中文摘要要对照;另附关键词。要求来稿应达到“齐、清、定”,中文、英文文字通顺,方可接受送审。

3. 为了进一步统一和完善投稿方式、缩短论文发表周期,本刊只接收网上在线投稿,不接收以邮寄方式或 e-mail 方式的投稿,严禁“一稿多投”,对侵权、抄袭、剽窃等学术不端行为,一经发现,取消三年投稿资格。

4. 文中插图要求完整,图中坐标、线条、单位、符号、图注等应标注准确、完整。如作者特殊要求需出彩色插图者,必须在投稿时事先加以说明,并承担另加的彩印费用。图幅大小:单栏图 7.5cm(宽)×6cm(高);双栏图:14cm(宽)×6cm(高);图中数字、图题、表题全部用中文、英文对照,图中数字、中文、英文全用 6 号字。电子文档中除实物图外,曲线图要用 Matlab, Excel, Visio 或 Origin 等软件制作,稿件中图片的原图并转成相应(可编辑)的文件格式(.fig, .xls, .vsd, .opj),非“.jpg”格式的文档,随电子版修改稿一同发送到本刊的修改稿专用邮箱。

5. 文中出现的单位必须按“中华人民共和国计量标准”及有关 GB 标准规定缮写。物理量符号一律用斜体,单位符号和词头用正体字母。

6. 名词术语,请参照全国科学技术名词规定缮写。

7. 参考文献,采用顺序编码制,只列主要文献;以 15~20 条为宜。内部资料、私人通讯、未经公开发表的一律不能引用。日文、俄文等非英文文献,请用英文表述;中文文献和中文图书采用中、英文对照表述,文献缮写格式请参照本刊。

8. 请在投稿第一页左下角写明投稿联系人的电话和两个 e-mail,以便及时联系。

稿件处理

1. 自收到稿件之日起,一个月内作者会收到编辑部的稿件处理意见。请根据录用通知中所提出的要求认真修改,希望修改稿在 30 天内寄回编辑部,并作为作者最终定稿(当作者接到校样时,以此修改稿为准进行校对,请勿再做大的改动),若二个月内编辑部没收到修改稿,将视为自行撤稿处理。

2. 有重大创新并有基金资助者可优先发表;不录用的稿件,编辑部将尽快通知作者,底稿一律不退,请自留底稿。

3. 来稿一经发表将酌致稿酬并送样刊 2 册。

4. 遵照《中华人民共和国著作权法》,投稿作者须明确表示,该文版权(含各种媒体的版权)授权给《光谱学与光谱分析》期刊社。国内外各大文献检索系统摘录本刊刊出的论文;凡不同意被检索刊物无稿酬摘引者,请在投稿时事先声明,否则,本刊一律认为已获作者授权认可。

5. 修改稿请寄:100081 北京市海淀区学院南路 76 号(南院西北门),《光谱学与光谱分析》期刊社(收)

电话:010-62182998 或 62181070 传真:010-62181070

e-mail: chngpxygpfx@vip.sina.com; 修改稿专用邮箱: gp2008@vip.sina.com 网址: http://www.gpxygpfx.com