

高光谱成像技术的三文鱼多品质指标的预测与分布可视化研究

孙宗保, 李君奎, 梁黎明, 邹小波*, 刘小裕, 牛增, 高云龙

江苏大学食品与生物工程学院, 江苏 镇江 212013

摘要 采用颜色、剪切力和 K 值评价冰鲜与冻融三文鱼的品质, 利用高光谱成像技术结合化学计量学方法对三个品质指标进行预测, 并讨论了不同波长选择算法所建模型的预测效果。准备不同冻融次数三文鱼样本, 进行高光谱数据采集和品质指标真实值的测定。采用六种预处理方法减少光谱数据中暗电流以及噪声的干扰, 采用竞争性自适应重加权算法(CARS)、区间变量迭代空间收缩法(iVISSA), iVISSA-CARS 筛选出与待测指标相关的变量, 通过比较三种波长选择算法筛选的特征变量所建偏最小二乘(PLS)模型的预测结果, 优选出三个品质指标最佳的变量选择方法。结果表明 1st Der-CARS-PLS 模型对颜色中的 a^* 预测效果最好, 筛选出的 51 个变量建立模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.931 6 和 0.929 7, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.716 和 0.735; 2nd Der-CARS-PLS 模型对剪切力的预测效果最好, 筛选出的 61 个特征变量建立模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.892 1 和 0.887 3, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.67 N 和 0.80 N; 模型 N-CARS-PLS 取得了 K 值最好的预测效果, 筛选出的 51 个特征变量所建模型的 R_c , R_p , RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.951 4, 0.950 0, 1.33, 1.53。说明 CARS 变量筛选方法能够有效提取与特征指标相关的变量, 提高模型的预测性能。除此之外, 特征变量筛选联合算法 iVISSA-CARS-PLS 对三个指标的预测也取得了较好的结果, 对三个指标测试集的 R_p 分别为 CARS-PLS 预测模型的 97.48%, 97.02%, 98.98%, 而所用变量数仅为 CARS-PLS 的 60.78%, 62.29%, 60.78%, 说明变量筛选组合算法极大的减少了建立模型所用的数据量。三个指标的 CARS-PLS 以及 iVISSA-CARS-PLS 模型取得的预测效果均高于 iVISSA-PLS, 说明对于三文鱼三个品质指标的预测, CARS 波长点筛选策略优于 iVISSA 波段选择策略。将优选出来的 PLS 模型分别用于构建三个品质指标的可视化分布图, 清楚的展示了不同冻融次数三个品质指标的大小以及空间分布。因此, 高光谱成像技术结合化学计量学方法可以较好的表征三文鱼的品质指标, 为三文鱼多品质指标的同时快速检测提供了部分理论参考。

关键词 高光谱成像技术; 三文鱼; 颜色; 剪切力; K 值; 变量筛选方法

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2021)08-2591-07

引言

三文鱼含有大量的核苷酸和游离氨基酸等呈味物质, 使三文鱼滋味鲜美甘香, 广受消费者喜爱^[1]。冰鲜储存能够最大限度的保留三文鱼的品质, 但冰鲜三文鱼货架期较短, 容易发生腐败和变质。冷冻三文鱼在冻结温度下能够抑制自身酶活性和微生物的生长, 因此具有较长的保质期。但冷冻和融解过程会造成三文鱼的组织结构破坏和汁液流失, 汁液中含有大量核苷酸、氨基酸等呈味物质以及虾青素、类胡萝

卜素等呈色物质, 因此冻融三文鱼存在嫩度下降, 颜色暗淡、滋味缺失等情况^[2]。

颜色是消费者挑选三文鱼时衡量其品质最直观的指标, 对三文鱼的市场销售至关重要^[3]。另外嫩度作为鱼类产品最重要的品质特征之一, 直接影响了鱼肉的食用口感。当鱼肉组织结构受到破坏时, 会导致口感变差, 从而不易被消费者接受。鱼肉是一种极易发生腐败的食物, 其新鲜度一直是备受人们关注的品质指标, 因此对冰鲜与冻融三文鱼的新鲜度监测具有重要意义。 K 值作为一种常见的肉类品质指标, 代表肉类中核苷酸的降解程度, 被广泛应用于鱼类的新鲜度检

收稿日期: 2020-11-16, 修订日期: 2021-03-02

基金项目: 国家重点研发计划项目(2016YFD0401104), 江苏高校优势学科建设工程项目, 镇江市重点研发项(SH2019019)和江苏省研究生科研与实践创新计划项目(SJCX19_0571)资助

作者简介: 孙宗保, 1976 年生, 江苏大学食品与生物工程学院副教授 e-mail: zongbaos@163.com

* 通讯作者 e-mail: zou_xiaobo@ujs.edu.cn

测中^[4-5]。

对三文鱼的品质指标进行检测具有重要意义,常规的检测方法有理化实验法、微生物检测法、液相色谱法等。这些检测方法虽然测定结果较精确,但费时费力,一般对样品具有破坏性^[6];而无损检测方法,例如光谱法、电子鼻技术等,虽然检测快速无损,但测定结果仅为采样部分属性的平均值,因此对分布不均匀的样品指标的测量结果没有很好的代表性。针对以上问题,尝试采用高光谱成像技术对三文鱼的多种品质指标进行检测,通过建立光谱与各品质指标的对应关系,实现对三文鱼品质的快速预测,之后通过光谱图像上各像素点的光谱值与品质指标的对应关系完成样品品质指标的分布可视化。

1 实验部分

1.1 样品准备

三文鱼样本来自法罗群岛当地最大的三文鱼养殖公司 Bakkafrost。三文鱼被捕捞后,由加工厂在 3 h 内将鲜活三文鱼屠宰加工为冰鲜三文鱼。然后全程 4 °C 冷链空运至上海纯尔贸易发展有限公司,再通过冷藏车运送至镇江麦德龙超市,真空包装后,置放在铺满碎冰的保鲜盒中快速运送到实验室,整个冷链过程约为 4 d。

三文鱼去皮清洗干净后,用灭菌后的刀片取中段鱼块切成长 3 cm、宽 3 cm、高 2 cm 的鱼片,个体质量约(20±5) g,真空包装并贴上标签。将分割好的三文鱼样本分为冰鲜组(C)和冻融组(FT),冻融组又分为一次冻融组(FT-1)、两次冻融组(FT-2)以及三次冻融组(FT-3),每组 30 个样本,共 120 个。参考 Ali^[7] 等的循环冻融方法,C 组真空包装后当天进行分析。FT-1 组在 -30 °C 下冷冻 30 d 后解冻分析。FT-2 组先在 -30 °C 下冷冻 15 d,后取出在 4 °C 下解冻 12 h,然后继续保藏在 -30 °C 条件下,第 30 天取出,解冻后分析。FT-3 组在第 10 天和第 20 天分别完成一次冻融,在第 30 天取出分析。

1.2 高光谱数据采集与校正

采用的高光谱成像系统主要包括高光谱相机(ImSpector V10E, Spectral Imaging Ltd, Oulu, Finland),石英卤素灯(Fiber-LiteDC-950 Illuminator, Dolan-Jenner Industries Inc, America),精密自动平移装置(SC30021 A, Zolix Instruments co. Ltd., China),以及装配了图像采集卡的电脑(P4P800-X 型号, Asus computer co. Ltd., Taiwan, China),其中高光谱相机由一台光谱仪和一台 CCD 相机组成,光谱仪是整个高光谱成像采集系统最核心的部件,能够在测试时获取样品面每个点在 431~962 nm 波段的光谱信息。系统硬件部分主要组成示意图见图 1。

1.3 品质指标的测定

1.3.1 L*, a*, b* 测定

仪器开机预热之后进行黑白板校正,校正后开始对样品颜色进行采集,每个样本进行三次颜色测定,取三次结果的平均值作为样品的 L*, a*, b* 的真值。

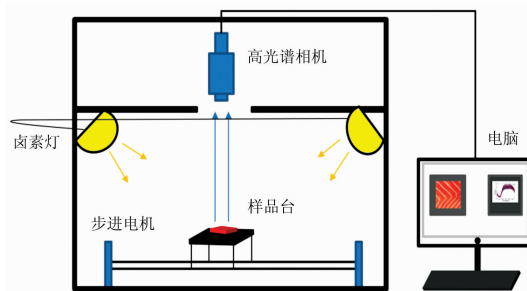


图 1 高光谱成像系统

Fig. 1 Hyperspectral imaging system

1.3.2 剪切力测定

取 3 cm×3 cm×2 cm 大小的三文鱼样品,用滤纸吸除样品表面水分后,利用 TA-XY2 型物性测量仪对样品剪切力进行测定,选道具型号为 warner-bratzler blade,选用模式为 compression,剪切速度均为 60 mm·min⁻¹,目标模式设置为 distance,鱼片按肌纤维垂直于刀口方向放置于刀槽上。仪器测定过程中刀具受到的最大剪切力值即样品的剪切力测量值。

1.3.3 K 值的测定

(1) K 值的计算方法

鱼死后,机体内的三磷酸腺苷(Adenosine-5'-triphosphate, ATP)会按顺序分解为二磷酸腺苷(Adenosine 5'-diphosphate, ADP)、一磷酸腺苷(Adenosine monophosphate, AMP)、肌苷酸(Inosinacid, inosinemonphosphate, IMP)、肌苷(Inosine, HxR)、次黄嘌呤(Hypoxhantine, Hx)。K 值为鱼肉中 HxR 和 Hx 总量之和与 ATP, ADP, AMP, IMP, HxR 和 Hx 总量之和的比值,K 值越大说明鱼新鲜度越差。计算公式如下^[5]

$$K = \frac{M_{HxR} + M_{Hx}}{M_{ATP} + M_{ADP} + M_{AMP} + M_{IMP} + M_{HxR} + M_{Hx}} \times 100\%$$

式中: M_{ATP} , M_{ADP} , M_{AMP} , M_{IMP} , M_{HxR} 和 M_{Hx} 分别为样品中 ATP, ADP, AMP, IMP, HxR 和 Hx 的含量,单位均为 $\mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$ 。

(2) 核苷酸关联物的测定

采用水产标准 SC/T 3048—2014 的方法对 K 值进行测定。

1.4 数据处理

1.4.1 样品光谱提取与预处理

采集的高光谱图像是一个三维数据块,不仅包含着样品的光谱信息、图像信息,同时也含有很多背景光谱。因此合理的选取一块有效的区域进行研究以及对提取的光谱进行预处理对减少数据处理运算量和提高模型的正确率有至关重要的作用^[8]。采用 ENVI 4.5 软件中的矩形工具选取样品中心附近 200 pixel×200 pixel 的范围作为感兴趣区域(ROI),ROI 选定后,对 ROI 范围内所有像素点的光谱值进行平均,作为该样本的光谱值,每个样本对应一条光谱值。采用一阶导数(1st Der)、二阶导数(2nd Der)、多元散射校正(MSC)、标准正态变量变换(SNVT)、归一化(N)和均值中心化(MC)来减少光谱重现性差、噪声高等不良影响。

1.4.2 特征波长选择

采集的光谱信息包含 618 个波长的光谱值, 数据繁多, 其中可能会存在冗余信息和噪声, 若将每个光谱值都输入模型进行分析, 不仅影响模型的准确率, 也会增大模型的运算量, 降低模型运算速度, 难以满足光谱检测的快捷性^[9], 因此有必要通过变量筛选的方法对光谱进行降维和特征波长筛选。故采用竞争性自适应重加权算法 (competitive adaptive reweighted sampling, CARS)^[10]、区间变量迭代空间收缩法 (interval variable iterative space shrinkage approach, iVISSA)^[11-12] 以及 iVISSA-CARS^[13] 筛选特征变量, 并比较结果, 从而确定三个品质指标最优的变量选择方法。

2 结果与讨论

2.1 颜色测定结果

对冰鲜与冻融三文鱼的颜色测定如表 1 所示, 冰鲜三文鱼具有较高的亮度值 L^* 和 redness 值 a^* , 这是因为冰鲜的三文鱼表面偏红并具有光泽, 肉质较好。冻融三文鱼随着冻融次数的增加, 亮度值和 redness 值均逐渐降低, 可能是由于三文鱼肉中的虾青素和胡萝卜素等物质的降解以及随汁液流失造成的。三文鱼的黄度值在冻融后呈现上升趋势, 可能是由于冷冻期间鱼肉表面的脂肪成分发生了酸败与氧化, 从而呈现了淡黄色^[14]。根据颜色差异显著性分析得到不同冻融次数三文鱼的 redness 值 a^* 之间差异较显著, 因此在后续的颜色品质检测中选用 redness 值 a^* 作为颜色指标进行检测。

表 1 冰鲜与冻融三文鱼的 L^* , a^* , b^* 值

Table 1 L^* , a^* , b^* values of chilled and frozen-thawed salmon

样品组	L^*	a^*	b^*
C	53.66±2.72 ^a	16.96±0.96 ^a	17.64±0.65 ^c
FT-1	52.61±2.53 ^a	15.24±0.80 ^b	18.01±1.19 ^{bc}
FT-2	48.63±2.99 ^b	14.42±0.97 ^c	18.41±0.82 ^b
FT-3	48.10±2.13 ^b	12.09±0.48 ^d	18.92±0.65 ^a

注: 小写字母不同表示在 $p < 0.05$ 水平差异显著

Note: different lower case letters show significant differences ($p < 0.05$)

2.2 剪切力与 K 值的测定结果

剪切力的测定结果如图 2 黑色柱状图所示, 从图中可以看出, 冰鲜三文鱼的剪切力高于三组冻融样本, 并且冻融样本的剪切力随着冻融次数的增加呈现下降趋势。其原因一方面可能是在冷冻过程中, 鱼肉组织受到自身体内冰晶的破坏, 造成肌肉纤维间隙增大、膜组织破裂等机械损伤; 另一方面, 低温冻结过程中肌肉组织可能存在冷冻不均匀现象从而产生内应力。受内应力的影响, 肌纤维会发生低温断裂, 从而造成肉品的机械强度降低, 剪切力下降。

冰鲜与不同冻融次数三文鱼 K 值测量结果如图 2 红色柱状图所示, 由图中可以看出, 从市场上购入的冰鲜三文鱼即 C 组的初始 K 值在 11% 左右, 处于一级新鲜范围; 样本冷冻 30 d 后, K 值有所上升, 说明在冷冻过程中样本的新

鲜度在下降; 样本经过三次冻融循环后, 其 K 值已经超过了 20%, 变为二级新鲜度, 说明多次冻融会加速样品的变质。

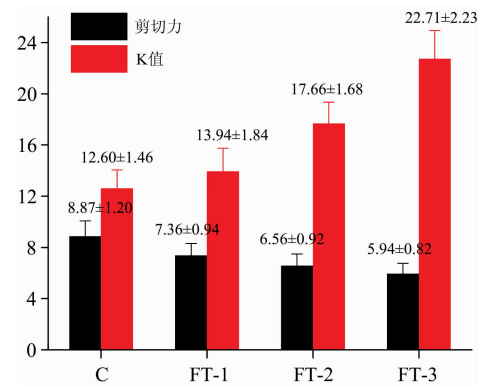


图 2 冰鲜与冻融三文鱼的剪切力和 K 值变化

Fig. 2 Changes in shear force and K values of chilled and frozen-thawed salmon

2.3 样本集划分

采用 SPXY 方法对样本集划分, 划分结果见表 2。由表中可以看出, 基于 SPXY 方法划分的校正集和预测集的品质指标较均匀, 并且预测集的各品质指标值均在校正集的品质指标值范围内, 有助于定量模型精度提升^[15]。

表 2 校正集和测试集的划分结果

Table 2 Division results of calibration set and test set

品质指标	校正集			预测集		
	含量范围	平均值	标准偏差	含量范围	平均值	标准偏差
a^*	11.21~18.52	14.94	1.95	11.51~18.03	14.16	1.84
剪切力/N	4.79~10.98	7.46	1.58	5.21~8.66	6.63	1.00
K 值	9.71~25.89	16.66	4.49	10.48~25.88	16.86	4.03

2.4 三文鱼品质指标全光谱预测模型

样本集划分后, 建立了基于全光谱波段范围内的原始光谱和不同预处理后光谱的 a^* 、剪切力、K 值 PLS 预测模型, 并对模型结果进行了分析和比较, 结果见表 3。由表中结果可以看出, 采用一阶导数预处理, 基于全光谱变量的 PLS 模型对 a^* 预测效果最好, 此时的 R_c 和 R_p 值分别为 0.926 9 和 0.913 5, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.72 和 1.00。经过二阶导数预处理后的全光谱变量所建模型对剪切力的预测效果最优, 其 R_c 和 R_p 分别为 0.874 6 和 0.842 1, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.68 N 和 0.82 N。在 K 值的预测模型中, 经过归一化(N)预处理的光谱所建模型效果最优, 其 R_c 和 R_p 分别为 0.881 7 和 0.846 3, RMSECV 和 RMSEP 分别为 1.75 和 2.27。为尝试提高模型的预测效果和降低模型输入变量的复杂性, 分别采用 CARS, iVISSA 以及 iVISSA-CARS 方法对光谱变量进行筛选, 并将筛选后的光谱值作为变量建立 a^* 值、剪切力和 K 值的 PLS 定量模型, 比较模型的预测效果。

表 3 基于全光谱变量的三文鱼 a^* 、剪切力、K 值预测结果
Table 3 Prediction results of a^* , shear force and K value based on full spectrum variables

品质指标	预处理方法	R_c	RMSECV	R_p	RMSEP
a^* 值	Raw	0.914 1	0.94	0.865 6	1.23
	1 st Der	0.926 9	0.72	0.913 5	1.00
	2 nd Der	0.789 8	1.35	0.755 9	1.42
	MSC	0.846 6	1.27	0.792 6	1.31
	SNVT	0.761 7	1.42	0.707 6	1.43
	N	0.919 9	0.89	0.852 5	1.20
	MC	0.899 7	1.14	0.882 5	1.18
	剪切力	Raw	0.862 6	0.69 N	0.796 6
1 st Der		0.851 6	0.73 N	0.826 2	0.85 N
2 nd Der		0.874 6	0.68 N	0.842 1	0.82 N
MSC		0.703 2	1.12 N	0.569 2	1.55 N
SNVT		0.767 4	1.02 N	0.618 3	1.46 N
N		0.713 0	1.04 N	0.676 1	1.23 N
MC		0.536 2	1.94 N	0.478 9	2.02 N
K 值		Raw	0.851 4	2.17	0.810 2
	1 st Der	0.853 8	2.02	0.840 7	2.38
	2 nd Der	0.859 3	1.94	0.774 2	2.83
	MSC	0.860 4	1.93	0.831 2	2.45
	SNVT	0.851 0	2.24	0.802 5	2.74
	N	0.881 7	1.75	0.846 3	2.27
	MC	0.852 6	2.13	0.823 1	2.54

2.5 iVISSA 变量筛选

使用 iVISSA 在 431~962 nm 波段范围内筛选出 14 个波段[见图 3(a)]共 217 个与 a^* 值相关的特征变量, 筛选出 13 个与剪切力、K 值相关的波段以及对应的 443 个和 324 个

特征波长点[见图 3(b, c)]。将 iVISSA 筛选出的变量与对应的三文鱼品质指标建立预测模型。iVISSA-PLS 对 a^* 值预测模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.906 6 和 0.888 3, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.80 和 0.99。预测结果稍低于基于全光谱变量的 PLS 模型, 但变量简化了, 降低了模型的运算复杂度。iVISSA-PLS 对剪切力预测模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.650 5 和 0.644 4, RMSECV 和 RMSEP 分别为 1.10 N 和 1.22 N, 虽然相对于全光谱建立的模型来说变量数减少了 28.31%, 但是 R_p 也降低了 23.47%。iVISSA-PLS 对 K 值预测模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.878 4, 0.878 0, RMSECV 和 RMSEP 分别为 2.07, 2.29, 相对于全光谱建立的模型, iVISSA-PLS 对 K 值的预测效果得到提高。

2.6 CARS 变量筛选

在简化 a^* 值预测 PLS 模型过程中, 使用 CARS 变量筛选方法在 431~962 nm 波段范围内共筛选得到 51 个与 a^* 值相关的特征波长, 将 120 个样本的 51 个波长组合为新的 120×51 的变量矩阵, 建立三文鱼 a^* 值的 PLS 预测模型, 模型结果如图 4(a)所示。由图 4(a)结果可以看出, PLS 对 a^* 值预测模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.931 6 和 0.929 7, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.72 和 0.74。CARS 挑选出 61 个与剪切力相关的特征变量, 用这 61 个特征变量建立的 PLS 预测模型得到较好的剪切力预测效果, R_c 和 R_p 分别为 0.892 1, 0.887 3, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.67 N 和 0.80 N, 见图 4(b)。在简化 K 值预测模型中, CARS 从全光谱中筛选出了 51 个特征变量。建立的 CARS-PLS 模型对 K 值预测结果如图 4(c)所示, $R_c = 0.951 4$, $R_p = 0.950 0$, RMSECV = 1.33, RMSEP = 1.53。CARS-PLS 对三个品质指标的预测结果与各自的基于全光谱变量的 PLS 模型效果相比有较明显的提升。

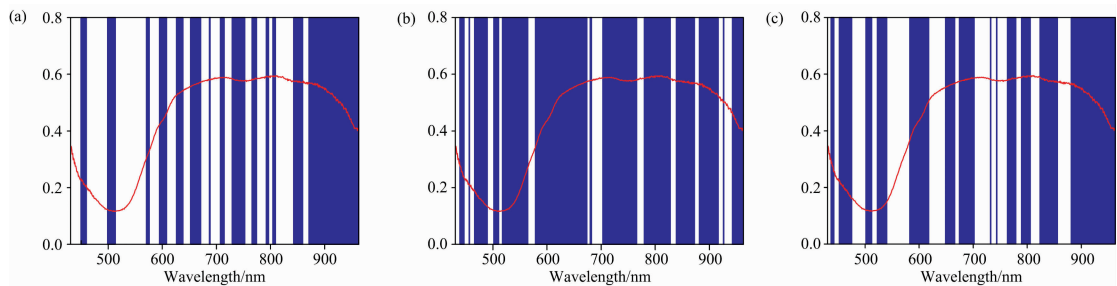


图 3 iVISSA 挑选的与 a^* (a)、剪切力 (b) 以及 K 值 (c) 相关的波长区间位置

Fig. 3 Wavelength interval positions selected by iVISSA for a^* (a), shear force (b) and K value (c)

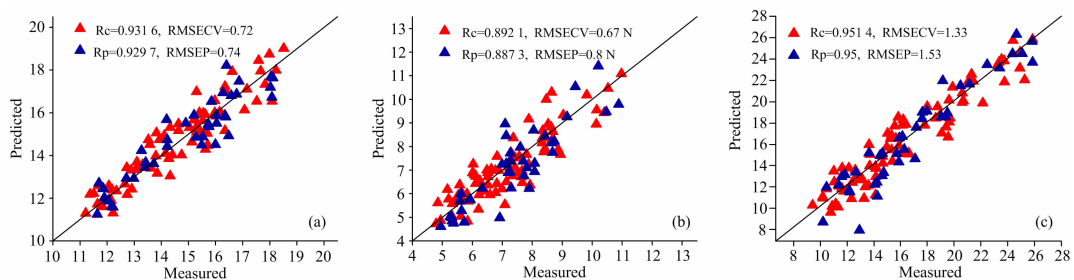


图 4 CARS-PLS 模型对 a^* (a)、剪切力 (b) 以及 K 值 (c) 最佳预测结果

Fig. 4 The best prediction results of a^* (a), shear force (b) and K value (c) obtained by CARS-PLS model

2.7 iVISSA-CARS 变量筛选

为了更简化模型数据量,提高模型的预测性能,将波段选择方法与波长点选择方法结合,先通过 iVISSA 波段选择方法对特征变量进行粗选,然后使用 CARS 精选波长点。图 5 分别展示了 CARS 对三个品质指标特征变量筛选过程,在 iVISSA 筛选的 217 个变量的基础上,筛选了 31 个与 a^* 相关的特征变量[见图 5(a)],以这些变量建立的对 a^* 最佳 PLS 预测模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.915 4 和 0.906 3, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.79, 0.83。使用该变量选择方法提取的变量数最少,极大的简化了模型的数据量,并且预测效果高于 iVISSA-PLS,稍低于全光谱建立的 PLS 及 CARS-PLS。在 iVISSA 提取了 443 个与剪切力相关的变量后, CARS 经过波长点精选出 38 个变量[见图 5(b)],以这些变量建立的对剪切力最佳 PLS 预测模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.885 3 和

0.860 9, RMSECV 和 RMSEP 分别为 0.69 N 和 0.90 N。相对于全光谱建立的 PLS 模型, iVISSA-CARS-PLS 模型的变量数从 618 减少到 38, 而 R_p 从 0.842 1 增加到 0.860 9; 相对于 iVISSA-PLS, iVISSA-CARS-PLS 模型的预测性能得到显著提高; 但相对于 CARS-PLS, iVISSA-CARS-PLS 模型的变量数减少 37.70%, R_p 为 CARS-PLS 的 97.02%。经过 iVISSA-CARS 筛选后, 31 个变量用于建立预测 K 值的 PLS 模型[见图 5(c)], 以该变量建立的对 K 值的最佳 PLS 预测模型的 R_c 和 R_p 分别为 0.950 7 和 0.940 4, RMSECV 和 RMSEP 分别为 1.35 和 1.56。相对于全光谱建立的 PLS 模型以及 iVISSA-PLS 模型, iVISSA-CARS-PLS 采用的变量数大大较少, 并且 R_c 和 R_p 也分别提高了 11.1% 与 7.11%; 虽然 iVISSA-CARS-PLS 得到的 R_p 为 CARS-PLS 的 98.98%, 但是采用的变量数减少了 39.21%。

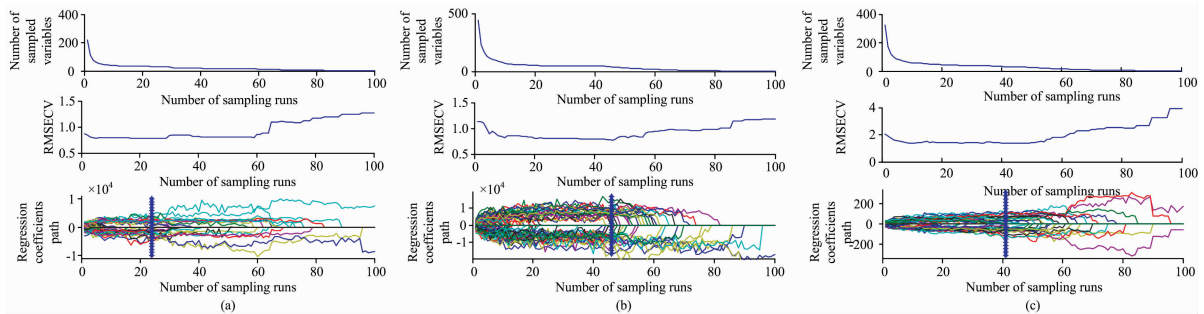


图 5 CARS 选择与 a^* (a)、剪切力(b)以及 K 值(c)相关特征变量的过程

Fig. 5 The processes of CARS selecting characteristic variables related to a^* (a), shear force (b) and K value (c)

表 4 基于波长筛选后建立的 a^* 、剪切力、 K 值预测模型结果

Table 4 The model results of a^* , shear force and K value prediction based on screened wavelength

品质指标	模型	变量数	R_c	RMSECV	R_p	RMSEP
a^*	CARS-PLS	51	0.931 6	0.72	0.929 7	0.74
	iVISSA-PLS	217	0.906 6	0.80	0.888 3	0.99
	iVISSA-CARS-PLS	31	0.915 4	0.79	0.906 3	0.83
剪切力	CARS-PLS	61	0.892 1	0.67 N	0.887 3	0.80 N
	iVISSA-PLS	443	0.650 5	1.10 N	0.644 4	1.22 N
	iVISSA-CARS-PLS	38	0.885 3	0.69 N	0.860 9	0.90 N
K 值	CARS-PLS	51	0.951 4	1.33	0.950 0	1.53
	iVISSA-PLS	324	0.878 4	2.07	0.878 0	2.29
	iVISSA-CARS-PLS	31	0.950 7	1.35	0.940 4	1.56

对上述三个品质指标的不同算法预测结果(见表 4)比较得出, iVISSA-CARS 算法筛选得到的变量数最少, 较大程度减少了模型的数据量, 但 CARS 筛选后的光谱作为变量建立的 PLS 模型预测效果最佳, 其测试集具有较高的相关系数以及最低的 RMSEP 值, 校正集的模型效果也高于其余三种模型。同时 R_c 与 R_p 之间差值最小, 说明模型不仅具有较好的预测性能, 而且具有较高的一致性, 并且相对于全光谱建立的模型来说极大的减少了变量数, 说明 CARS 变量选择方法适合运用于三文鱼品质指标特征变量的提取。同时从表 4 中可以看出, 三个指标的 CARS-PLS 以及 iVISSA-CARS-PLS

模型均高于 iVISSA-PLS, 说明对于三文鱼上述三个品质指标的预测, CARS 的特征变量筛选策略优于 iVISSA 的波段选择策略。因此选择 CARS-PLS 用于后续品质指标的可视化分析中。

2.8 三文鱼品质指标的可视化分析

样品生成的高光谱图像中的每个像素点对应一条光谱, 可以通过所建立的品质指标的预测模型的相关系数将光谱值转化为品质指标的预测值, 再将不同颜色表示的预测值以像素的形式叠加在原始图像中, 即可得到代表指标数值大小以及空间分布的伪彩图^[16]。

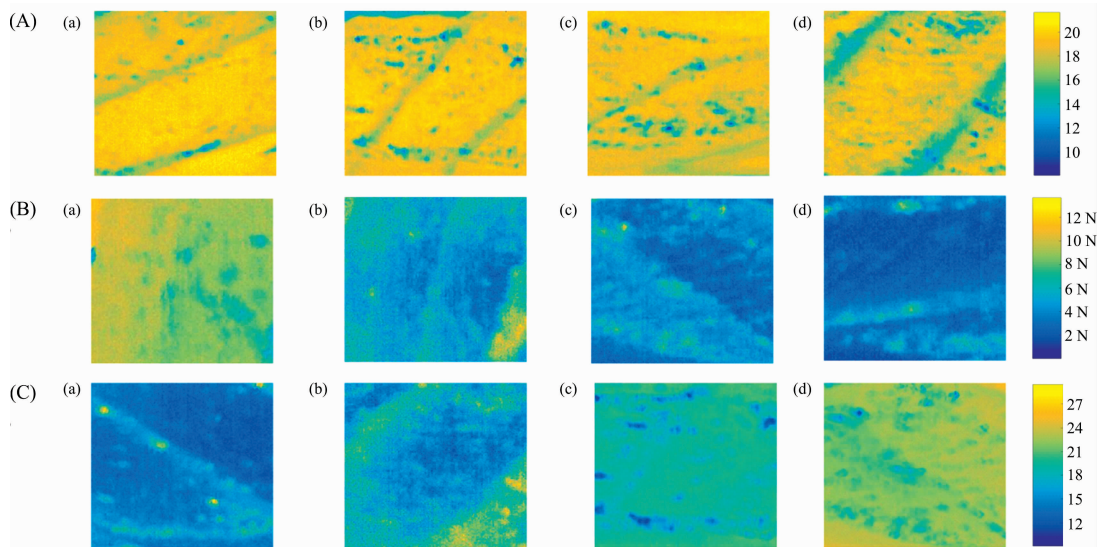


图 6 (A), (B), (C) 分别为 a^* 、剪切力、 K 值可视化分布图, (a), (b), (c), (d) 分别代表 C 组、FT-1、FT-2、FT-3 组

Fig. 6 (A), (B), (C) are the visual distribution maps of a^* , shear force, and K value, respectively, and (a), (b), (c), (d) represent group C, FT-1, FT-2, and FT-3

图 6(A)为 a^* 值的分布可视图, C 组样本的 a^* 值分布图中黄色像素点居多, 代表着样本具有较高的 a^* 值; 冻融组 FT-1, FT-2 和 FT-3 样品的 a^* 值分布图中黄色像素点个数逐渐减少, 蓝色像素点增多, 说明冻融组的 a^* 值低于冰鲜组, 与表 2 的结果相符, 其中 FT-3 组样本 a^* 分布图中的蓝色像素点最多, 说明三文鱼经历三次冻融后 a^* 值明显下降。图 6(B)为冰鲜与冻融三文鱼的剪切力分布图, 通过剪切力可视化分布图可以直观的看出, 冰鲜三文鱼具有较高的剪切力; 经历冻融后, 三文鱼剪切力下降, 并且随冻融次数的增加, 剪切力呈下降趋势。图 6(C)为冰鲜与冻融三文鱼的 K 值分布图。 K 值作为表征鱼类新鲜度的重要指标, 对其实时监测具有重要意义。通过三文鱼的 K 值分布图, 可以直观的了解三文鱼的新鲜度情况。从可视化图中可以看出, C 组三文鱼具有较低的 K 值, 冻融三文鱼在冻藏期间 K 值有所上升, 并且随着冻融次数的增加而加快上升。以伪彩图的形式

对三文鱼品质指标的可视化分析, 可以直观的展示品质指标的大小, 还能展示其空间分布, 有利于商家对三文鱼更加精确的切割管理以及消费者对鱼体品质的快速评估。

3 结 论

利用高光谱成像技术结合变量筛选方法对冰鲜和冻融三文鱼的品质指标 (a^* 、剪切力、 K 值) 进行研究, 结果表明, a^* 、剪切力和 K 值的最佳预处理方法分别为一阶导数, 二阶导数, 归一化。在 a^* 、剪切力以及 K 值预测模型中, 得到 CARS-PLS 取得的预测效果最好。将得到的三个品质指标的 CARS-PLS 模型分别用于三种指标的可视化分布中, 可视化分布的伪彩图与三个指标的实际值大小吻合, 为三文鱼质量提供了更详细更直观的信息。因此, 高光谱成像技术结合化学计量学方法能够快速准确的表征三文鱼品质。

References

- [1] Jääskeläinen E, Jakobsen L M A, Hultman J, et al. International Journal of Food Microbiology, 2019, 293: 44.
- [2] Mousakhani-Ganjeh A, Hamdami N, Soltanizadeh N. Innovative Food Science & Emerging Technologies, 2016, 36: 42.
- [3] Kono S, Kon M, Araki T, et al. Journal of Food Engineering, 2017, 214: 158.
- [4] Mørkøre T, Rødbotten M, Vogt G, et al. Food Chemistry, 2010, 119(4): 1417.
- [5] Li Q, Zhang L, Lu H, et al. LWT—Food Science and Technology, 2017, 78: 317.
- [6] Sun Z B, Liang L M, Li J K, et al. Food Science & Nutrition, 2020, 8(2): 862.
- [7] Ali S, Zhang W, Rajput N, et al. Food Chemistry, 2015, 173: 808.
- [8] Jiang H, Jiang X, Ru Y, et al. Infrared Physics & Technology, 2020, 110: 103467.
- [9] Anderssen K E, Stormo S K, Skåra T, et al. LWT—Food Science and Technology, 2020, 133: 110093.
- [10] Wang Y J, Li T H, Li L Q, et al. Journal of Food Engineering, 2021, 290: 110181.
- [11] Wan G, Liu G, He J, et al. Journal of Food Engineering, 2020, 287: 110090.
- [12] LIU Gui-shan, ZHANG Chong, FAN Nai-yun, et al(刘贵珊, 张 翀, 樊奈韵, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2020, 40(8): 2558.

- [13] Cheng L, Liu G, He J, et al. *Meat Science*, 2020, 167: 107988.
- [14] Chan S S, Roth B, Jessen F, et al. *Scientific Reports*, 2020, 10(1): 17160.
- [15] Galvao R K H, Araujo M C U, José G E, et al. *Talanta*, 2005, 67(4): 736.
- [16] Aheto J H, Huang X, Tian X, et al. *Journal of Food Process Engineering*, 2019, 42(6): e13225.

Prediction and Distribution Visualization of Salmon Quality Based on Hyperspectral Imaging Technology

SUN Zong-bao, LI Jun-kui, LIANG Li-ming, ZOU Xiao-bo*, LIU Xiao-yu, NIU Zeng, GAO Yun-long
School of Food and Biological Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China

Abstract In this study, color, shear force and K value was used to evaluate the quality of salmon with different freeze-thaw times, and then predicted by hyperspectral imaging technology combined with chemometric methods. Besides, the prediction performance of the PLS model developed with characteristic variables was compared and discussed to select the optimal variable selection method for color, shear force and K value. The prepared salmon samples with different freeze-thaw times were scanned and analyzed to obtain hyperspectral data and the true values of quality indicators (color, shear force, K value). Afterwards, six different pretreatment methods were used to reduce dark current and noise interference in the spectral data. The competitive adaptive reweighting algorithm (CARS), interval variable iterative space shrinkage approach (iVISSA), and iVISSA-CARS algorithms were applied to screen out variables related to the indicators to improve the prediction performance of the model. The optimal variable selection method was determined according to the prediction performance of the PLS model built by the characteristic variables screened by the three-wavelength selection algorithms. The result exhibited that the 1st Der-CARS-PLS model developed by 51 characteristic variables related to a^* possessed the best prediction with R_c of 0.931 6, R_p of 0.929 7, RMSECV and RMSEP of 0.72 and 0.74, respectively. Similarly, in shear force prediction, 2nd Der proved to be the best pretreatment method and 2nd Der -CARS -PLS model developed by 61 characteristic variables displayed the best prediction with R_c of 0.885 3, R_p of 0.860 9, RMSECV and RMSEP of 0.69 N and 0.90 N respectively. Besides, the N-CARS-PLS model built by 51 characteristic variables achieved the best predictive effect on K value and obtained R_c of 0.951 3, R_p of 0.946 0, RMSECV and RMSEP of 1.33 and 1.53, respectively. It indicates that CARS can effectively extract variables related to feature indicators and improve the prediction performance of the PLS model. Besides, the combined algorithm iVISSA-CARS-PLS also achieved a significant results in the prediction of the three indicators. The R_p of the test set was 97.48%, 97.02% and 98.98% of the CARS-PLS prediction model. In comparison, the number of variables used was only 60.78%, 62.29% and 60.78% of CARS-PLS, indicating that the variable selection combined algorithm greatly reduces the amount of data. The CARS-PLS and iVISSA-CARS-PLS models of the three indicators show higher prediction performance than iVISSA, which indicates that the feature variable selection strategy of CARS is more advantages than iVISSA in predicting of the above three quality indicators of salmon. Using the optimized PLS model, the visual distribution map of salmon quality indexes with different freezing and thawing time was constructed in the form of a pseudo color images, which provided more detailed and intuitive information for understanding the quality of salmon. In general, the combination of hyperspectral imaging combined with chemometrics, can accurately and non-destructively determine the quality indicators in salmon. This study can provide the same theoretical reference for the simultaneous rapid detection of multiple quality indicators of salmon.

Keywords Hyperspectral imaging technology; Salmon; Color; Shear force; K value; Variable screening method

(Received Nov. 16, 2020; accepted Mar. 2, 2021)

* Corresponding author