

# 基于光谱波段优化的鸡肉冻干粉粗蛋白 近红外定量预测模型研究

陶琳丽, 杨秀娟, 邓君明, 曹胜雄, 陈琛, 钟兴文, 孙照程, 孔凡虎, 华雪妃, 章雨竹, 张曦

(云南农业大学动物科学技术学院, 云南省动物营养与饲料重点实验室, 云南昆明 650201)

**摘要:** 本文通过将鸡肉蛋白质近红外光谱特性与组间间隔偏最小二乘法 (SiPLS)、遗传算法(GA)相结合筛选校正模型的最佳建模光谱区域, 旨在提高鸡肉冻干粉粗蛋白近红外定量预测模型的预测精度和模型稳健性。以 260 个鸡腿肌冻干粉为研究对象, 提取其中 100 个样品的蛋白质, 在 999.7~2502.3 nm 扫描腿肌冻干粉和腿肌提取蛋白冻干粉的 NIRS, 比较两光谱异同, 根据腿肌提取蛋白冻干粉 NIRS 光谱特征及主成分分析 (PCA) 结果将全谱划分为 10 个建模光谱区, 采用 PLS 建模, 比较全谱建模与特征光谱组合区建模的优劣, 筛选出基于鸡肉蛋白特征光谱的建模光谱组合区, 应用 FiPLS 和 BiPLS 在全谱和优选出的光谱区再次进行建模光谱区域筛选, 接着使用 GA 和 FBiPLS 进行第三次建模光谱筛选。结果表明: 在 999.7~1850.4 nm 波长上采用 FBiPLS 法优选出的建模光谱区 1811.6~1794.0 nm、1756.2~1722.4 nm、1704.4~1688.9 nm、1594.4~1580.8 nm、1510.8~1485.7 nm、1472.1~1424.3 nm、1222.2~1057.6 nm、1051.2~1008.7 nm 所建模型最优。研究显示, 为保证校正模型的精确性和稳定性, 在筛选最佳建模波长时, 应将样品预测成分的光谱特征与光谱筛选数学算法相结合, 才能获得更好的建模结果。

**关键词:** 近红外光谱; 鸡肉; 蛋白质; 波段优选

文章编号: 1673-9078(2019)08-236-246

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2019.8.034

## Quantitative Prediction Model of the Crude Protein Content in the Chicken Freeze-dried Powder Based on the Optimizing Spectral Region of Near Infrared Spectroscopy

TAO Lin-li, YANG Xiu-juan, DENG Jun-ming, CAO Sheng-xiong, CHEN Chen, ZHONG Xin-wen,

SUN Zhao-cheng, KONG Fan-hu, HUA Xue-fei, ZHANG Yu-zhu, ZHANG Xi

(Faculty of Animal Science and Technology, Key Laboratory of Animal Nutrition and Feed Science of Yunnan Province, Yunnan Agricultural University, Kunming 650201, China)

**Abstract:** This paper is trying to obtain the optimum spectra to build the calibration model by the spectral characteristics of the chicken protein in near infrared region, interval partial least-squares regression (iPLS) and genetic algorithm (GA), and aims to improve the prediction accuracy and robustness of the near infrared spectroscopy quantitative prediction model of the crude protein content in the chicken freeze-dried powder. Taking the muscles powders of 260 freeze-dried legs as the research object, the proteins from the muscles powders of 100 freeze-dried legs were extracted, the near infrared reflectance spectra (NIRS) from the freeze-dried leg muscle powder samples and the protein samples of the freeze-dried leg muscle powder were scanned in the 999.7~2502.3 nm wavelength region. The differences between two NIRS were studied. The NIRS of the freeze-dried leg muscles powder was divided into 10 spectral regions based on spectral characteristic and principal component analysis (PCA). The partial least squares regression (PLS) was used to build the quantitative prediction model. First, the modeling results based on full-spectrum and combining spectral regions of the characteristic spectra were compared to select the optimum spectral regions. Next, the PLS (FiPLS) and backward interval PLS (BiPLS). It is the third time the modeling spectra were filtrated by GA and forward and backward

收稿日期: 2019-03-25

基金项目: 国家自然科学基金项目 (31760487); 云南省重大科技专项 (2016ZA008); 云南省现代农业禽蛋产业技术体系项目 (2017KJTX0017); 国家高技术研究发展计划 (863 计划) 项目 (2011AA100305)

作者简介: 陶琳丽 (1974-), 女, 博士, 副教授, 研究方向: 动物营养与饲料科学

通讯作者: 张曦 (1960-), 男, 教授, 研究方向: 动物营养与饲料科学

regions and the optimum combining region based on the characteristic spectra by forward interval PLS (FiPLS) and backward interval PLS optimum spectral regions were extracted from the full-spectrum (BiPLS). Then, the modeling spectra were filtrated by GA and forward and backward interval partial least squares (FBiPLS). The result showed that the most optimum modeling spectral ranges were 1811.6~1794.0 nm、1756.2~1722.4 nm、1704.4~1688.9 nm、1594.4~1580.8 nm、1510.8~1485.7 nm、1472.1~1424.3 nm、1222.2~1057.6 nm and 1051.2~1008.7 nm by using FBiPLS. In conclusion, to ensure the accuracy and robustness of the calibration model, the selection method of optimum spectral regions was the combination of the spectral characteristics of sample composition and mathematical algorithm of wavelength selection.

**Key words:** near infrared spectroscopy; chicken; protein; wavelength selection

健康和高品质食品已成为当今的消费时尚,鸡肉是健康食品的重要组成部分,在世界范围有着较高的消费水平<sup>[1]</sup>。因此,评价与控制鸡肉品质的需求就越来越高,鸡肉品质通常与鸡肉的物理和化学性能相关联,而鸡肉中蛋白质含量的高低是一个非常重要的化学评价指标。常用的蛋白质检测湿化学法耗时长、过程繁琐,污染环境,不能满足现有需求,近红外光谱分析技术具有样品前处理简单,快速、无损、绿色和经济的特点,目前已逐渐发展成为肉及肉制品品质检测中的一种重要手段<sup>[2,3]</sup>。近红外光谱分析技术是近红外光谱与化学计量分析法的结合,使用化学计量学方法建立近红外光谱校正模型,建模变量数(光谱数据)通常远大于观测数量(样本数),因此在变量之间会存在共线性问题,共线性问题会降低模型的预测精度,这个问题可以通过使用正交因子空间提取与预测变量有关的信息来解决,如使用偏最小二乘回归 PLS。PLS 模型是目前近红外光谱建模的主要方法,使用 PLS 回归算法数据之间的多重共线性问题能够被减少,但不能被完全解决<sup>[4]</sup>。

因此,如何建立具有较好预测性能的极简校正模型,是近红外光谱分析技术研究的核心问题<sup>[5]</sup>。在使用 PLS 模型时,可进行建模变量选择(建模光谱数据)来降低无效信息变量或大量的不确定性变量的影响以提高校正模型的预测能力。因此,与模型预测变量相关的特征光谱选择就是 NIRS 分析技术的核心研究点之一<sup>[6]</sup>。

近年来,应用 PLS 或改进的 PLS 方法建立鸡肉蛋白质 NIRS 定量预测模型,已有相关报导,通常以肉鸡为研究对象,校正模型建模决定系数  $R^2_{\text{CAL}}$  在 0.91~0.98 之间,一般采用扫描获得的全部光谱进行建模,如 1100~2498 nm<sup>[7]</sup>、1100~2500 nm<sup>[8]</sup>、800~2800 nm<sup>[9]</sup>、1000~2502 nm<sup>[10]</sup>、400~2500 nm<sup>[11]</sup>。采用全光谱建模,信噪比低,模型计算量大,计算过程繁琐,存在大量与预测值无关的无效光谱数据,导致多重共线性问题,预测精度降低,有时全谱建模虽然在研究条件下模型的预测结果较好,但影响了模型的稳健性和鲁棒性。近红外光谱吸收峰通常是宽的、弱的和复

杂的,其吸收峰是多个分子基团在某一波长区域共同振动产生<sup>[12,13]</sup>,因此不能使用单个吸收峰反映某个化学成分,但构成化学成分的分子基团,一定会产生相应的近红外光谱振动,则该化学成分的近红外预测模型一定与这些光谱区域紧密相关,因此提取这些特征波长区域对极简模型的建立具有重要的作用。

组合间隔偏最小二乘法是由 Norgaard 提出的一种特征波长区间选择方法,通过不同波长区间个数的任意组合,得到相关系数最大且误差最小的波长区间组合,用以解决变量多、光谱复共线性多样化等问题对 PLS 建模效果的影响,分为前向间隔偏最小二乘法(Forward Interval PLS, FiPLS)和后向间隔偏最小二乘法(Backward interval PLS, BiPLS)<sup>[14-16]</sup>。FiPLS 法是选取有用波段, BiPLS 法是删除无用波段,是常用的基于波长变量选择的建模方法,其模型精度较高,但贪婪搜索特性较强,导致选出的波段并不能较好地反映待测成分的信息<sup>[17,18]</sup>。遗传算法(GA)是以生物进化论为基础,以适应度函数为依据,通过对群体中个体施加遗传操作来实现群体的迭代优化,但筛选的变量数目较多时,运用 GA 可能导致筛选出变量在后续偏最小二乘法建模时出现过拟合风险<sup>[19]</sup>。

因此,本文以五种不同体型大小和来源地放养的云南地方鸡的腿肌冻干粉为研究对象,保证建模样品蛋白质含量分布较宽,首先提取腿肌冻干粉中的蛋白质,扫描腿肌冻干粉和腿肌提取蛋白质冻干粉的光谱特征和 PCA 分析结果,将腿肌冻干粉 NIRS 全光谱区域划分为不同谱段,在不同光谱区应用 PLS 进行建模,比较建模结果筛选出基于蛋白质 NIRS 的特征光谱区,在此基础上,应用 FiPLS 和 BiPLS 方法对全光谱区和优选出的光谱区再次进行建模光谱谱段筛选,接着使用 GA 算法和 FBiPLS 算法<sup>[18]</sup>在第二次筛选的建模波长范围上进行第三次筛选,旨在将待测成分的光谱信息和数学方法相结合筛选建模光谱,以提高鸡肉蛋白质 NIRS 定量预测模型的准确度和预测能力。

## 1 材料与方法

## 1.1 试验材料

腿肌冻干粉样品：采集300~350日龄来自云南省剑川县、香格里拉县、南涧县、新平县和武定县放养自由采食的青花鸡(QH)58只、尼西鸡(NX)48只、无量山乌骨鸡(LW)52只、新平黎明鸡(XP)58只和武定鸡(W)47只，共计260只。试验鸡在禁食24h后，放血致死，干拔毛，取出腿肌，除去表面结缔组织，放入绞肉机中绞2min，重复3次，再用研钵研成泥状后制成均质肉糜，将肉糜冷冻干燥，粉碎，用0.178mm孔径的样品筛过筛，制备成冻干粉样品，取3g装入厚度为6丝的聚乙烯自封袋中，再次冻干恒重，制备成冻干粉样品后进行光谱扫描。

腿肌提取蛋白质冻干粉样品：每个品种腿肌冻干粉样品选20个，参考Segura等<sup>[20]</sup>脂肪提取方法，使用氯仿-甲醇提取液对样品中的脂肪进行超声提取，将去除脂肪后的剩余物，参照Visessanguan等<sup>[21]</sup>蛋白质提取方法，对脂肪提取后的剩余样品进行蛋白质提取，将提取后获得的盐溶性蛋白、碱溶性蛋白和非碱溶性蛋白混匀后进行冷冻干燥制成冻干蛋白粉，装入厚度为6丝的聚乙烯自封袋中进行光谱扫描。

## 1.2 粗蛋白质湿化学检测方法

参照《GB/T 9695.11-2008 肉与肉制品氮含量测定》中半微量定氮法进行检测。

## 1.3 近红外光谱采集

使用岛津傅立叶变换红外光谱仪IRPrestige-21及其配套近红外附件FlexIRTM Near-Infrared Fiber Optics module扫描样品，光谱采集软件为岛津IRsolution 1.50，光谱室温度恒定为(25±2)℃，湿度为(38±5)%。光谱扫描的波长范围为999.7~2502.3nm，分辨率8cm<sup>-1</sup>。进行背景扫描时，将预先剪好的1cm直径的6丝聚乙烯圆片放置于背景金箔面上，用于背景扫描时去除聚乙烯对样品光谱的影响。每个样品扫描3次，每次扫描50遍，每个样品获得3条近红外光谱。将近红外光谱数据从IRsolution 1.50软件中以文本形式导出，再导入Excel文件中保存，以每个样品的3条近红外光谱的平均值作为分析时使用的样本原始光谱数据。进行腿肌冻干粉NIRS和腿肌提取蛋白质冻干粉NIRS光谱特征研究时均以所有样本NIRS的平均值为研究对象。

## 1.4 光谱波段优化方法

### 1.4.1 基于蛋白质光谱特征的光谱区间划分

根据腿肌提取蛋白质冻干粉NIRS形态和主成分分析(PCA)结果将腿肌冻干粉NIRS划分成不同波长范围的谱区。

### 1.4.2 光谱区间数学方法划分

将全谱区和基于蛋白质光谱特征的优选谱区分别划分为40个子区间、30个子区间、20个子区间后，使用FiPLS和BiPLS方法<sup>[22,23]</sup>进行建模光谱区域筛选；在优选出的光谱区域中接着采用GA法和FBiPLS法(在前述FiPLS的基础上再使用BiPLS方法)进行第三次建模光谱区域筛选。

## 1.5 光谱建模方法

校正集与预测集的划分：在260个腿肌冻干粉样本中，从每种地方鸡中各取40个样品(除武定鸡公鸡18个，母鸡22个样品外，其余四种鸡公母各半)，共200个为建模样本(校正集)，剩余60个为预测样本(预测集)，样品划分时满足预测样品的粗蛋白质检测值均包含在建模样品检测值中的要求。

建模光谱：采用原始光谱和预处理光谱两种。在全光谱建模时，对原始光谱数据进行标准正态变量(SNV)、多元散射校正(MSC)、Norris gap-segment一阶导数(gap=15, segment=7)、Norris gap-segment二阶导数(gap=15, segment=7)、SNV+Detrending和SNV+Norris gap-segment一阶导数6种预处理，优选出1种方法作为后续光谱建模时的预处理方法。

建模方法：采用PLS方法建模，建模时对建模数据进行均值中心化(mean centering)处理和内部留一交互验证。

## 1.6 数据统计分析

校正模型评价方法：采用校正决定系数R<sub>CV</sub><sup>2</sup>、校正标准偏差SE<sub>CAL</sub>、交互验证决定系数R<sub>CV</sub><sup>2</sup>、交互验证标准偏差SE<sub>CV</sub>四个指标，以最高的校正决定系数R<sub>CV</sub><sup>2</sup>最小的交互验证标准偏差SE<sub>CV</sub>确定最优的校正模型。

预测集结果评价方法：校正模型建立后，采用预测集对其进行验证。衡量模型预测效果的指标是预测决定系数R<sub>p</sub><sup>2</sup>、预测标准偏差SE<sub>p</sub>，预测集标准偏差与预测标准偏差的比值RPD<sub>p</sub>，其中R<sub>p</sub><sup>2</sup>和RPD<sub>p</sub>值越大SE<sub>p</sub>值越小预测结果越好。根据校正模型的评价指标和预测集评价指标综合评定模型的优劣，根据模型的优劣筛选建模最佳光谱区。

## 2 结果与讨论

### 2.1 腿肌冻干粉粗蛋白质湿化学方法检测结

果

如表1所示,校正集样本粗蛋白质含量在92.24%~62.30%之间,变异系数7.22,表明腿肌中蛋白质含量

差异较大,原因是本次试验鸡是来自于云南省5个不同地区的不同放养本地品种,品种、体型和日粮差异较大所致。预测集样本的粗蛋白质含量包含在校正集之中,满足了近红外模型的预测集样本要求。

表1 腿肌冻干粉校正集和预测集粗蛋白质含量统计表

Table 1 Statistics of crude protein content measured by chemical method for the calibration and prediction sets of the leg muscles freeze-dried powder

样本	样本数/个	最大值/%	最小值/%	平均值/%	标准偏差	变异系数
校正集	200	92.24	62.30	83.63	6.04	7.22
预测集	60	90.50	72.51	83.46	5.01	6.00

## 2.2 腿肌冻干粉和腿肌提取蛋白质冻干粉光

谱图

### 2.2.1 原始光谱图分析

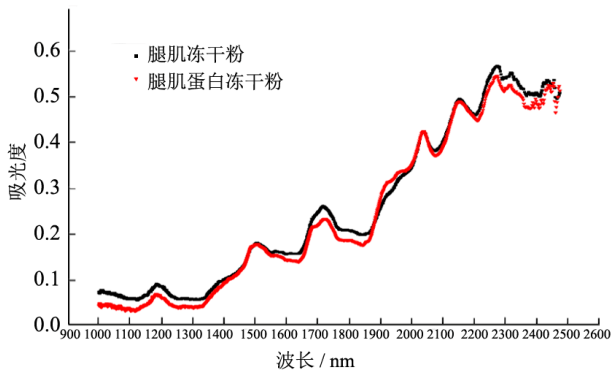


图1 腿肌冻干粉和腿肌提取蛋白质冻干粉近红外光谱图

Fig.1 NIRS of the freeze-dried powder form leg muscles and NIRS of the protein freeze-dried powder form leg muscles

如图1所示,腿肌提取蛋白质和腿肌冻干粉的光谱形态非常相近,在1000~1300 nm、1600~2000 nm、2250~2500 nm 波长上吸光度值和波形上存在微小差异,其原因是冻干粉中83%左右都是蛋白质,脂肪只占到12%左右,灰分占比更少,因此腿肌提取蛋白质光谱与冻干粉光谱非常相似。腿肌冻干粉和蛋白质NIRS在1000~2502 nm 波长范围有多个特征吸收峰,明显的吸收峰有6个。研究报导,C-H 基团振动的一级倍频出现在1700~1800 nm 区域,二级倍频出现在1150~1210 nm 区域,最重要的组合频发生在1300~1500 nm 和2200~2500 nm 处<sup>[24]</sup>,1600~1680 nm 区域吸收峰与C=C 基团相关<sup>[25]</sup>,通常认为这些吸收区域是脂肪或脂肪酸的NIRS 特征光谱区,而代表蛋白质的NIRS 特征区域很难被观测到,因为蛋白NIRS 出现的波长区域通常被样品中其他化学成分在此谱区的NIRS 掩盖<sup>[26]</sup>。从图1可以看出,腿肌提取蛋白冻干粉NIRS 特征吸收峰在上述区域也有明显吸收峰出现,Izutsu 等<sup>[27]</sup>扫描的牛血清蛋白冻干粉NIRS在1570

nm、1698~1738 nm、2057 nm、2071 nm、2289~2462 nm 区域也有5个明显特征吸收峰,与腿肌提取蛋白冻干粉NIRS 谱形相似。一般来说, $\alpha$  螺旋结构较多的蛋白质在2445 nm、2291~2281 nm、2167 nm、2172 nm 和1738 nm 区域会出现比较强的谱带, $\beta$  折叠结构为主的蛋白质则多在2463nm、2313nm 2270nm、2264 nm、2210~2203 nm、2055 nm 和1691~1688 nm 附近出现,2265 nm 则呈现是无序结构的光谱属性。构成蛋白质的酰氨基团在1500~1530 nm 附近为N-H 伸缩振动的一级倍频,973~1020 nm 附近为N-H 伸缩振动的二级倍频,2050~2060 nm 附近为N-H 伸缩振动的组合频吸收,2168~2180 nm 附近为N-H 弯曲的二级倍频与C=O 伸缩/N-H 面内弯曲/C-N 伸缩振动的组合频<sup>[24]</sup>。因此,腿肌冻干粉NIRS在1190 nm 附近的吸收光谱主要与C-H 基团振动的二级倍频、脂肪簇和芳香族氨基酸有关;1500 nm 附近的吸收光谱主要与酰氨基团N-H 伸缩振动的一级倍频、C-H 基团振动的组合频有关;1750 nm 附近的吸收光谱主要与C-H 基团振动的一级倍频、20种氨基酸均有关,蛋白质的 $\alpha$  螺旋结构和 $\beta$  折叠结构也在此区域有所表达;2000 nm 附近的吸收光谱主要与精氨酸和酪氨酸、蛋白质的 $\beta$  折叠结构、酰氨基团N-H 伸缩振动的组合频吸收有关;2175 nm 附近的吸收光谱主要与羧酸、氨基酸和蛋白质的 $\alpha$  螺旋结构有关;2300~2502 nm 复杂的谱形变化,与18种氨基酸和构成蛋白质的分子基团光谱属性、蛋白质空间构象的光谱属性在此区域的联合体现相关<sup>[28]</sup>。

### 2.2.2 腿肌提取蛋白质冻干粉近红外光谱主成分分析

对腿肌提取蛋白原始光谱进行了PCA 分析后,以2个主成分为坐标,建立样本的二维得分图(图2a)。其中PC1 对光谱矩阵的累积方差贡献为75%,PC2 为18%,因此,样本在二维空间的分布可反应其特征。从得分图可以看出,5种腿肌蛋白基本混杂为一体,聚类趋势不明显。由于PC1 已包含了绝大多数分类信

息,因此可根据 PC1 的载荷图提取近红外光谱的特征光谱<sup>[29]</sup>。从载荷图可以看出,蛋白的特征光谱区主要在 1350~1400 nm、1500~1550 nm、1700~1800 nm、2050~2100 nm、2150~2450 nm 区域。

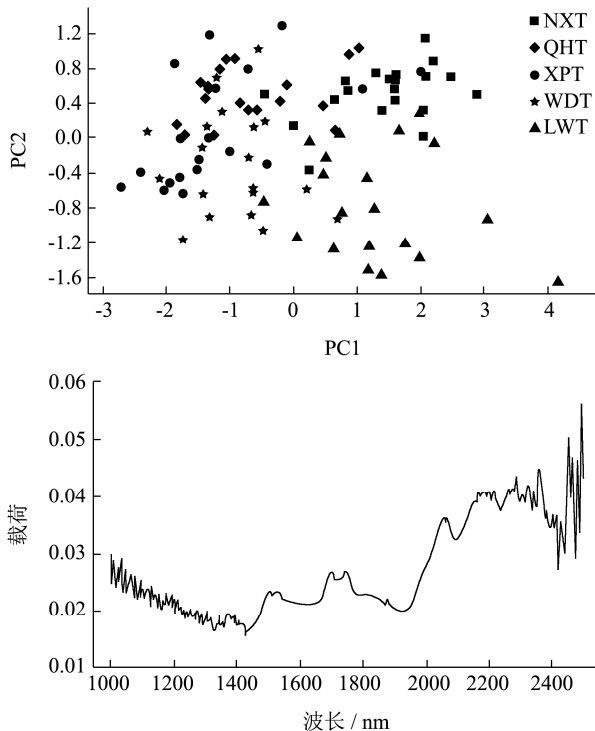


图2 腿肌提取蛋白质冻干粉原始光谱主成分分析

Fig.2 PCA analysis of original NIRS of the protein freeze-dried powder form leg muscles

注: a: 得分图; b: 载荷图。

综合原始光谱和 PCA 分析结果,将 999.7~2502.3 nm 波长区域划分为:2231.2~2502.3 nm、2090.6~2229.2 nm、1879.9~2088.9 nm、1650.1~1878.5 nm、1300.1~1649.1 nm、999.7~1299.4 nm 六个光谱区域,同时又根据原始光谱吸光度的高低,将全谱段划分成 1600.2~2502.3 nm、999.7~1599.2 nm、999.7~1850.4 nm 和 1437.0~1900.5 nm 四个组合区域,研究各光谱区域对腿肌冻干粉蛋白质 NIRS 定量模型预测精度的影响。

### 2.3 不同光谱区域对腿肌蛋白质近红外光谱定量模型的影响

表 2 显示,999.7~2502.3 nm 区域不同光谱预处理方法所建的模型中,使用 SNV+gap segment (1#, 15,

7) 光谱预处理方法所建模型最优。因此,在后面的研究中,只采用原始光谱和 SNV+gap segment (1#, 15, 7) 预处理光谱进行建模。

在 2231.2~2502.3 nm、2090.6~2229.2 nm、1879.9~2088.9 nm、1650.1~1878.5 nm、1300.1~1649.1 nm、999.7~1299.4 nm 六个光谱区域的建模结果中,后三个光谱区的建模效果较好,前三个光谱区所建模型效果较差 2090.6~2229.2 nm 光谱所建模型效果最差。可以看出,由 C-H 基团振动的二级倍频、脂肪簇和芳香簇氨基酸引起的 999.7~1299.4 nm 光谱吸收区域与酰氨基团 N-H 伸缩振动的一级倍频、C-H 基团振动的组合频引起的 1300.1~1649.1 nm 光谱吸收区域所建模型效果较好,而由蛋白质空间构象和氨基酸引起的 2090.6~2229.2 nm 光谱吸收区域所建模型预测效果较差。999.7~1299.4 nm 区域原始光谱所建模型的  $R_{CAL}^2$  和  $SE_{CV}$  与全波长 999.7~2502.3 nm 原始光谱所建模型相近,且  $RPD_p$  更优,但经 SNV+一阶导数预处理后光谱所建模型预测效果低于原始光谱,其原因是 999.7~1299.4 nm 所含光谱数仅 599 个远低于全光谱 1558 个波数,光谱经预处理后有效信息丢失所致。1600.2~2502.3 nm、999.7~1599.2 nm、999.7~1850.4 nm 和 1437.0~1900.5 nm 四个组合光谱区的建模效果较好,尤以 999.7~1850.4 nm 光谱区所建模型最优。999.7~1850.4 nm 区域包含了 3 个明显的 NIRS 吸收峰,分别来自于 C-H 基团振动的二级倍频、脂肪簇和芳香簇氨基酸引起的 NIRS 吸收区域,酰氨基团 N-H 伸缩振动的一级倍频和 C-H 基团振动的组合频引起的 NIRS 吸收区域, C-H 基团振动的一级倍频和 20 种氨基酸引起的 NIRS 吸收区域。2231.2~2502.3 nm、2090.6~2229.2 nm、1879.9~2088.9 nm 三个单独区域所建模型效果较差,但是当增加了 1700 nm 附近的吸收峰后,成为 1600.2~2502.3 nm 区域时,建模结果得到了大幅的提升,  $R_{CAL}^2$  达到了 0.91~0.92,  $SE_{CV}$  为 2.03~2.32,  $RPD_p$  在 2.21~2.41,说明 1700 nm 附近的光谱吸收峰对腿肌冻干粉蛋白质 NIRS 模型的建立具有非常重要的作用。比较这 11 个建模 NIRS 区间所建的 22 个模型可以看出,在 999.7~1850.4 nm 区域使用原始光谱和预处理光谱所建模型均较优,位于 1190 nm、1500 nm 和 1750 nm 左右的特征光谱吸收区域对腿肌冻干粉蛋白质预测模型的建立具有重要作用。

表 2 不同光谱区域的腿肌冻干粉粗蛋白质建模结果

**Table 2 The modeling results of crude protein based on freeze-dried powder of leg muscle in different wavelength regions**

光谱区域/nm	光谱数/个	光谱预处理方法	主成分数	R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub>	SE <sub>CAL</sub>	R <sup>2</sup> <sub>CV</sub>	SE <sub>CV</sub>	R <sub>p</sub> <sup>2</sup>	SE <sub>p</sub>	RPD <sub>p</sub>
999.7~2502.3	1558	原始光谱	7	0.93	1.57	0.87	2.18	0.83	2.07	2.42
		SNV	4	0.92	1.74	0.87	2.18	0.81	2.24	2.28
		MSC	4	0.92	1.74	0.89	2.04	0.81	2.24	2.27
		gap segment (1#,15,7)	5	0.92	1.70	0.87	2.21	0.83	2.09	2.44
		gap segment (2#,15,7)	4	0.91	1.80	0.87	2.18	0.84	2.04	2.50
		SNV+ Detrending	4	0.93	1.58	0.90	1.94	0.81	2.24	2.27
		SNV+gap segment (1#,15,7)	5	0.94	1.52	0.91	1.81	0.85	1.95	2.58
2231.2~2502.3	127	原始光谱	3	0.81	2.64	0.75	3.04	0.62	3.11	1.61
		SNV+gap segment (1#,15,7)	6	0.63	3.69	0.53	4.17	0.43	3.77	1.33
2090.6~2229.2	78	原始光谱	1	0.62	3.72	0.61	3.76	0.40	3.88	1.29
		SNV+gap segment (1#,15,7)	2	0.38	4.75	0.33	4.96	0.26	4.32	1.46
1879.9~2088.9	139	原始光谱	5	0.83	2.46	0.76	2.98	0.48	3.52	1.38
		SNV+gap segment (1#,15,7)	3	0.39	4.69	0.32	4.98	0.26	4.32	1.16
1650.1~1878.5	192	原始光谱	4	0.89	2.02	0.86	2.23	0.86	1.86	2.70
		SNV+gap segment (1#,15,7)	2	0.89	2.01	0.88	2.11	0.82	2.10	2.39
1300.1~1649.1	423	原始光谱	6	0.90	1.91	0.84	2.42	0.85	1.91	2.62
		SNV+gap segment (1#,15,7)	4	0.92	1.74	0.88	2.09	0.85	1.95	2.57
999.7~1299.4	599	原始光谱	5	0.92	1.73	0.87	2.21	0.85	1.92	2.61
		SNV+gap segment (1#,15,7)	5	0.91	1.84	0.86	2.26	0.80	2.25	2.23
1600.2~2502.3	585	原始光谱	6	0.92	1.73	0.85	2.32	0.80	2.27	2.21
		SNV+ gap segment (1#,15,7)	5	0.91	1.77	0.89	2.03	0.83	2.08	2.41
999.7~1599.2	973	原始光谱	5	0.92	1.69	0.88	2.07	0.87	1.81	2.78
		SNV+gap segment (1#,15,7)	4	0.92	1.66	0.89	2.01	0.83	2.06	2.43
999.7~1850.4	1193	原始光谱	6	0.94	1.51	0.90	1.90	0.89	1.68	2.98
		SNV+gap segment (1#,15,7)	3	0.94	1.43	0.93	1.63	0.87	1.80	2.78
1437.0~1900.5	439	原始光谱	3	0.90	1.92	0.89	2.03	0.89	1.68	2.98
		SNV+gap segment (1#,15,7)	3	0.93	1.60	0.92	1.75	0.87	1.78	2.82

2.4 FiPLS 和 BiPLS 筛选的组合光谱区域对腿

肌蛋白质近红外光谱定量模型的影响

应用 FiPLS 和 BiPLS 对 999.7~2502.3 nm 全光谱和优选出的 999.7~1850.4 nm 谱段进行不同子区间数组合的筛选, 由于目前尚不能从理论上确定参加联合建模的子区间数, 因此本研究将上述两个光谱区域分别划分为 20、30、40 不同子区间。由表 3 可知, 999.7~2502.3 nm 光谱区间共有 1558 个波数点, 以 2502.3 nm 波数点为第 1 波数点, 划分为 20 个子区间时, 前 19 个子区间, 每个区间含 78 个波数, 第 20

个子区间只含 76 个波数点不足 78 个波点数因此不参与子区间建模比较。同理, 划分为 30 个子区间时, 只有 29 个子区间参与建模比较, 划分为 40 个子区间时, 有 39 个子区间参与建模比较。在 999.7~1850.4 nm 谱区, 划分为 20 个子区间时有 19 个子区间参与建模光谱区间筛选, 划分为 30 个子区间时有 29 个子区间参与建模光谱区间筛选, 划分为 40 个子区间时有 39 个子区间参与建模光谱区间筛选。由表 3 可以看出, 应用 FiPLS 和 BiPLS 算法在相同子区间内筛选出的最优光谱区间并不相同, 各优选光谱区间建模组合效果如表 4 所示。

表3 建模光谱区域子区间

Table 3 The subintervals of modeling spectra

光谱区域 /nm、 波点数/个	子区 间数 /个	参与筛选子 区间数、每 个区间波点 数/个	参与筛选的 光谱区域/nm、 总波点数/个	优选出的组合子区间					
				FiPLS			BiPLS		
				建模光谱 区域编号	子区间组合、 子区间个数/个	光谱区域/nm、波点数/个	建模光谱 区域编号	子区间组合、 子区间个数/个	光谱区域/nm、波点数/个
999.8~2502.2 (1558)	20	19 (78)	2502.2~1014.6 (1482)	S-1558-20-9	5~11、14、19 (9)	1923.1~1369.5、1264.5~1218.8、 1062.5~1030.0 (702)	B-1558-20-13	3~11、13、14、16、 19 (13)	2174.9~1369.5、1314.6~1218.8、 1175、1~1135.5、1062.5~1030.0 (1014)
	30	29 (52)	2502.0~1019.4 (1508)	S-1558-30-9	7、9、10、12、 14、15、19、20、 24 (9)	1923.1~1852.9、1785.4~1667.2 1612.1~1562.5、1514.2~1428.4 1314.6~1249.4、1161.4~1135.5 (468)	B-1558-30-18	3、5~11、13~15、 19~22、24、28、29 (18)	2273.8~2176.8、2083.8~1613.2、 1561.8~1428.4、1314.6~1189.6、 1161.4~1135.5、1062.5~1019.6 (936)
	40	39 (39)	2502.0~1014.2 (1521)	S-1558-40-7	7、11、13、18、 20、23、26 (7)	2041.2~1981.8、1817.9~1770.9 1723.5~1681.2、1525.8~1492.5 1458.8~1428.4、1368.7~1341.7 1288.5~1265.5 (273)	B-1558-40-21	4、6、7、9、11、 12、14~16、18~20、 25~29、32、37~39 (21)	2248.2~2176.8、2105.7~1981.8、 1923.1~1970.2、1817.9~1724.7、 1680.1~1562.5、1525.8~1428.4、 1314.6~1196.9、1154.7~1135.5、 1062.5~1030.0 (780)
999.8~1850.5 (1193)	20	19 (60)	1850.5~1020.6 (1140)	S-1193-20-7	1、2、6、7、111、 12、15 (7)	1850.5~1705.6、1523.9~1424.3 1295.5~1222.8、1156.7~1127.1 (420)	B-1193-20-13	1~4、6~12、15、19 (13)	1850.5~1580.8、1523.9~1222.8、 1156.7~1127.1、1044.9~1020.6 (780)
	30	29 (40)	1850.5~1012.7 (1160)	S-1193-30-7	1~4、9、11、29 (7)	1850.5~1661.7、1506.3~1473.0 1440.0~1408.8、1028.3~1012.7 (280)	B-1193-30-14	2~5、7、9、11、12、 16~18、22、27、28 (14)	1798.9~1620.2、1579.8~1543.0、 1506.3~1473.0、1439.5~1378.9、 1295.5~1222.8、1156.7~1137.0、 1062.0~1028.7 (560)
	40	39 (30)	1850.5~1008.7 (1170)	S-1193-40-15	2~5、8、11~14、 24、25、29、36、 37、39 (15)	1811.6~1672.5、1609.3~1580.8、 1523.9~1424.3、1239.8~1205.7、 1156.7~1141.9、1057.6~1032.8、 1020.2~1008.7 (450)	B-1193-40-13	2~5、9、11、12、 14、25、29、36、 37、39 (13)	1811.6~1672.5、1579.8~1552.3、 1523.9~1473.0、1447.4~1424.3、 1222.2~1205.7、1156.7~1141.9、 1057.6~1032.8、1020.2~1008.7 (390)

表 4 基于 FiPLS 和 BiPLS 组合光谱区域的腿肌冻干粉粗蛋白质 NIRs 建模结果

Table 4 The modeling results of crude protein of freeze-dried powder of leg muscle based on combination spectral region by FiPLS and

BiPLS									
建模光谱区域编号	光谱预处理方法	主成分数	$R_{CAL}^2$	$SE_{CAL}$	$R_{CV}^2$	$SE_{CV}$	$R_p^2$	$SE_p$	$RPD_p$
S-1558-20-9	原始光谱	7	0.94	1.41	0.91	1.81	0.84	2.06	2.48
	SNV+gap segment (1#,15,7)	3	0.93	1.56	0.92	1.74	0.86	1.89	2.65
B-1558-20-13	原始光谱	7	0.95	1.37	0.91	1.81	0.84	2.03	2.51
	SNV+gap segment (1#,15,7)	3	0.94	1.53	0.92	1.70	0.86	1.88	2.66
S-1558-30-9	原始光谱	4	0.93	1.57	0.90	1.87	0.85	2.00	2.55
	SNV+gap segment (1#,15,7)	4	0.95	1.33	0.94	1.51	0.85	1.92	2.60
B-1558-30-18	原始光谱	7	0.95	1.35	0.91	1.81	0.84	2.02	2.53
	SNV+gap segment (1#,15,7)	4	0.94	1.42	0.93	1.61	0.86	1.90	2.64
S-1558-40-7	原始光谱	4	0.91	1.85	0.89	2.01	0.85	1.95	2.62
	SNV+gap segment (1#,15,7)	4	0.93	1.55	0.91	1.79	0.84	1.97	2.54
B-1558-40-21	原始光谱	7	0.95	1.31	0.92	1.74	0.84	2.05	2.49
	SNV+gap segment (1#,15,7)	4	0.94	1.43	0.92	1.69	0.86	1.90	2.64
S-1193-20-7	原始光谱	6	0.93	1.54	0.91	1.82	0.85	1.99	2.57
	SNV+gap segment(1#,15,7)	3	0.93	1.55	0.92	1.75	0.85	1.96	2.56
B-1193-20-13	原始光谱	6	0.94	1.52	0.90	1.89	0.82	2.13	2.39
	SNV+gap segment(1#,15,7)	3	0.94	1.44	0.92	1.67	0.85	1.94	2.58
S-1193-30-7	原始光谱	4	0.89	1.96	0.88	2.07	0.84	2.01	2.54
	SNV+gap segment(1#,15,7)	3	0.92	1.75	0.90	1.92	0.86	1.88	2.67
B-1193-30-14	原始光谱	7	0.96	1.24	0.92	1.72	0.83	2.10	2.43
	SNV+gap segment(1#,15,7)	3	0.93	1.57	0.92	1.76	0.84	1.98	2.54
S-1193-40-15	原始光谱	7	0.96	1.26	0.92	1.72	0.83	2.11	2.42
	SNV+gap segment (1#,15,7)	3	0.94	1.49	0.93	1.65	0.88	1.71	2.92
B-1193-40-13	原始光谱	6	0.94	1.45	0.91	1.79	0.83	2.08	2.46
	SNV+gap segment (1#,15,7)	3	0.94	1.53	0.92	1.68	0.88	1.77	2.83

由表 4 可知,经 FiPLS 和 BiPLS 方法筛选的光谱区域建模效果较好,除编号为 S-1193-30-7 区域使用原始光谱建模  $R_{CAL}^2$  低于 0.90 外,其余 23 个模型的  $R_{CAL}^2$  均高于 0.90,  $SE_{CV}$  高于 2.0% 仅出现在编号为 S-1558-40-7 和 S-1193-30-7 区域使用原始光谱所建模型。在本研究中,相同的光谱区域使用 BiPLS 方法筛选出的光谱所建模型效果除编号为 B-1193-40-13 低于 S-1193-40-15 外,其余模型均优于 FiPLS 方法光谱所建模型。在 999.7~2502.3 nm 光谱区域,使用全谱段建模结果仅优于编号为 S-1558-40-7 光谱所建模型,但低于使用 FiPLS 和 BiPLS 方法划分为 20、30 子区间时优选出的组合光谱及使用 BiPLS 方法划分为 40 子区间时优选出的组合光谱所建模型。将 999.7~2502.3 nm 全光谱所建模型与 999.7~1850.4 nm 区域筛选的组合光谱所建模型进行比较,可以看出,除编号为 S-1193-30-7 光谱所建模型外,组合光谱所建的其余 11 个模型均优于 999.7~2502.3 nm 全光谱所建模型。将 999.7~1850.4

nm 光谱区域所建模型与筛选的组合光谱所建模型进行对比,可以看出,在 999.7~2502.3 nm 区间编号为 S-1558-30-9 和 B-1558-30-18 两个组合区间使用 SNV+gap segment (1#, 15, 7) 光谱所建模型优于 999.7~1850.4 nm 光谱区域所建模型,但预测集的  $RPD_p$  值低于 999.7~1850.4 nm 光谱区域所建模型。在 999.7~1850.4 nm 光谱区域,编号为 B-1193-30-14、S-1193-40-15、B-1193-40-13 组合区间使用原始光谱所建模型优于 999.7~1850.4 nm 区域使用原始光谱所建模型,但预测集的  $RPD_p$  值也同样低于 999.7~1850.4 nm 光谱区域所建模型,推测原因是由于建模波数的减少,导致一些有效光谱没有包含在内,从而使用预测集验证时准确性稍有下降。

综合表 2 和表 4 建模结果可以看出,有三个模型建模结果较好,分别为:(1)编号为 S-1558-30-9 组合区间使用 SNV+gap segment (1#, 15, 7) 光谱所建模型  $R_{CAL}^2=0.96$ ,  $R_{CAL}^2=0.94$ ,  $SE_{CV}=1.51$ , 结果最优,但其



预测集  $R_p^2$  仅为 0.85,  $RPD_p$  为 2.60, 结果中等, 建模使用了 468 个光谱; (2) 编号为 S-1193-40-15 组合区间使用 SNV+gap segment (1#, 15, 7) 光谱所建模型  $R_{CAL}^2=0.94$ ,  $R_{CV}^2=0.93$ ,  $SE_{CV}=1.65$ , 结果较优, 其预测集  $R_p^2$  仅为 0.88,  $RPD_p$  为 2.92, 结果最优, 建模使用了 450 个光谱; (3) 999.7~1850.4 nm 光谱区使用 SNV+gap segment (1#, 15, 7) 光谱所建模型的  $R_{CAL}^2=0.94$ ,  $R_{CV}^2=0.93$ ,  $SE_{CV}=1.63$ , 结果较优, 其预测集  $R_p^2$  为 0.87,  $RPD_p$  为 2.78, 结果较优, 建模使用了 1193 个光谱。

表 5 基于 GA 和 FBiPLS 组合光谱区域的腿肌冻干粉粗蛋白质 NIRS 建模结果

Table 5 The modeling results of crude protein of freeze-dried powder of leg muscle based on combination spectral region by GA and FBiPLS

建模光谱 筛选方法	建模光谱区域变量数	光谱预处理方法	主成分 分数	$R_{CAL}^2$	$SE_{CAL}$	$R_{CV}^2$	$SE_{CV}$	$R_p^2$	$SE_p$	$RPD_p$
GA	在 999.8~2502.2 nm 区域 筛选出 446 个光谱	原始光谱	9	0.95	1.36	0.91	1.84	0.76	2.46	2.04
		SNV+gap segment (1#, 15, 7)	5	0.94	1.49	0.92	1.75	0.87	1.83	2.73
	在 999.8~1850.5 nm 区域 筛选出 310 个光谱	原始光谱	6	0.95	1.40	0.92	1.69	0.87	1.77	2.83
		SNV+gap segment (1#, 15, 7)	3	0.94	1.44	0.93	1.65	0.87	1.79	2.80
	在 S-1558-30-9 区域筛 选出 111 个光谱	原始光谱	8	0.97	1.09	0.95	1.40	0.87	1.82	2.76
		SNV+gap segment (1#, 15, 7)	4	0.95	1.41	0.93	1.59	0.85	1.96	2.56
	在 S-1193-40-15 区域 筛选出 108 个光谱	原始光谱	7	0.97	1.09	0.95	1.39	0.83	2.04	2.46
		SNV+gap segment (1#, 15, 7)	3	0.93	1.60	0.91	1.78	0.88	1.77	2.83
	S-1558-30-9 区域划分为 12 个区间筛选出 429 个光谱	原始光谱	6	0.93	1.55	0.91	1.84	0.89	1.67	3.00
		SNV+gap segment (1#, 15, 7)	3	0.94	1.47	0.93	1.64	0.86	1.87	2.68
	S-1558-30-9 区域划分为 39 个区间筛选出 360 个光谱	原始光谱	8	0.96	1.19	0.93	1.61	0.87	1.81	2.77
		SNV+gap segment (1#, 15, 7)		0.93	1.62	0.91	1.78	0.85	1.92	2.60
FBiPLS	S-1193-40-15 区域划分为 10 区间筛选出 405 个光谱	原始光谱	6	0.94	1.46	0.91	1.79	0.89	1.68	2.98
		SNV+gap segment (1#, 15, 7)	3	0.93	1.57	0.92	1.75	0.87	1.84	2.73
S-1193-40-15 区域划分为 30 区间筛选出 300 个光谱	原始光谱	7	0.96	1.28	0.92	1.69	0.88	1.77	2.83	
	SNV+gap segment (1#, 15, 7)	3	0.93	1.61	0.92	1.76	0.88	1.76	2.85	
S-1193-40-15 区域划分为 45 区间筛选出 280 个光谱	原始光谱	8	0.97	1.12	0.93	1.56	0.86	1.91	2.63	
	SNV+gap segment (1#, 15, 7)	3	0.92	1.67	0.91	1.81	0.87	1.82	2.75	

### 3 结论

本研究结果表明, 减少建模时的无效光谱, 能使

### 2.5 GA 和 FBiPLS 筛选的组合光谱区域对腿肌蛋白质近红外光谱定量模型的影响

在表 4 研究的基础上, 采用 GA 和 FBiPLS 方法进行波段的筛选, 结果如表 5 所示, 使用 FBiPLS 方法在 S-1193-40-15 区域划分为 30 区间筛选出的 300 个光谱区间, 采原始光谱信息建模时, 模型效果最优; GA 算法在 S-1558-30-9 区域筛选出的 111 个光谱区间, 采用原始光谱信息所建模型次之。

模型更稳健, 且能提高模型的预测精度, 但过低的建模波长数会导致模型的稳定性下降。为保证校正模型的精确性和稳定性, 在筛选最佳建模波长时, 应将样

品预测成分的光谱特征与光谱筛选数学算法相结合,才能获得更好的建模结果。考虑到上述两因素及建模的复杂性,本研究确定的最优建模区间为使用 FBiPLS 法在 S-1193-40-15 区域划分为 30 个区间时筛选出的 300 个光谱,即 1811.6~1794.0 nm、1756.2~1722.4 nm、1704.4~1688.9、1594.4~1580.8、1510.8~1485.7 nm、1472.1~1424.3 nm、1222.2~1057.6 nm 和 1051.2~1008.7 nm 区间。

## 参考文献

- [1] Alexandrakis D, Downey G, Scannell A G M. Rapid non-destructive detection of spoilage of intact chicken breast muscle using near-infrared and Fourier transform mid-infrared spectroscopy and multivariate statistics [J]. Food Bioprocess Technology, 2012, 5: 338-347
- [2] Qu Jia-huan, Liu Dan, Cheng Jun-hu, et al. Applications of near-infrared spectroscopy in food safety evaluation and control: a review of recent research advances [J]. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2015, 55: 1939-1954
- [3] 陈杰,姚娜. 新疆鲜羊肉水分含量的近红外光谱法无损检测 [J]. 现代食品科技, 2017, 33(12): 267-271, 248  
CHEN Jie, YAO Na. Nondestructive detection of moisture content in fresh mutton using near infrared spectrometry of southern Xinjiang [J]. Modern Food Science and Technology, 2017, 33(12): 267-271, 248
- [4] LÍgia P Brás, Lopes M, Ferreira A P, et al. A bootstrap-based strategy for spectral interval selection in PLS regression [J]. Journal of Chemometrics, 2008, 22: 695-700
- [5] Dixit Y, Casado-gavalda M P, Cama-moncunill R, et al. Developments and challenges in online NIR spectroscopy for meat processing [J]. Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, 2017, 16: 1172-1187
- [6] Barbon S, Costa Barbon A P A, Mantovani R G, et al. Machine learning applied to near-infrared spectra for chicken meat classification [J]. Journal of Spectroscopy, 2018, 4: 1-12
- [7] Berzaghi P, Zotte A D, Jansson L M, et al. Near-infrared reflectance spectroscopy as a method to predict chemical composition of breast meat and discriminate between different n-3 feeding sources [J]. Poultry Science, 2005, 84(1): 128-136
- [8] Viljoen M, Hoffman L C, Brand T S. Prediction of the chemical composition of freeze dried ostrich meat with near infrared reflectance spectroscopy [J]. Meat Science, 2005, 69(2): 255-261
- [9] Kadim I T, Mahgoub O, Almarzooqi W, et al. Prediction of crude protein, extractable fat, calcium and phosphorus contents of broiler chicken carcasses using near-infrared reflectance spectroscopy [J]. Asian Australasian Journal of Animal Sciences, 2005, 18(7): 1036-1040
- [10] 燕昌江,李锋,王亮,等. 近红外光谱测定鸡肉品质指标的研究 [C]. 中国畜牧兽医学学会动物营养学分会第十一次全国动物营养学术研讨会论文集. 长沙: 中国农业科技出版社, 2012: 110-110  
YAN Chang-jiang, LI Feng, WANG Liang, et al. Study on the chicken quality by near infrared reflectance spectroscopy [C]. The 11th National Symposium on Animal Nutrition, Chinese Association of Animal Science and Veterinary Medicine, Animal Nutrition Society. Changsha: China Agriculture Science and Technique Press, 2012: 110-110
- [11] Cozzolino D, Murray I, Paterson R, et al. Visible and near infrared reflectance spectroscopy for the determination of moisture, fat and protein in chicken breast and thigh muscle [J]. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 1996, 4(2): 213-223
- [12] Camino-Sánchez F J, Delgado-Moreno B, Navarro-Fuentes P. Quick development of a NIRS method for the analysis of moisture, protein, and fat in nutritional clinical products [J]. Food Analytical Methods, 2015, 8(7): 1758-1770
- [13] 王立琦,刘亚楠,张青,等. 食用油脂酸值近红外光谱特征波长优选 [J]. 食品科学, 2016, 37(16): 205-210  
WANG Li-Qi, LIU Ya-Nan, ZHANG Qing, et al. Optimization of characteristic wavelength variables of near infrared spectroscopy for detecting edible oil acid value [J]. Food Science, 2016, 37(16): 205-210
- [14] 柳艳云,胡昌勤. 近红外分析中光谱波长选择方法进展与应用 [J]. 药物分析杂志, 2010, 30(5): 968-975  
LU Yan-yun, HU Chang-qin. Progress and application of spectral wavelength selection methods in NIR analytical technique [J]. Chin J Pharm Anal, 2010, 30(5): 968-975
- [15] 王拓,戴连奎,马万武. 拉曼光谱结合后向间隔偏最小二乘法用于调和汽油辛烷值定量分析 [J]. 分析化学, 2018, 46(4): 623-629  
WANF Tuo, DAI Lian-kui, MA Wan-wu. Quantitative analysis of blended gasoline octane number using raman spectroscopy with backward interval partial least squares method [J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2018, 46(4): 623-629
- [16] 王菊香,瞿军,邢志娜,等. 近红外光谱技术在推进剂质量检测中的应用 [J]. 火箭推进, 2018, 44(2): 82-87  
WANG Ju-xiang, QU Jun, XING Zhi-na, et al. Application of

- NIRS analysis technology in liquid propellant quality detection [J]. *Journal of Rocket Propulsion*, 2018, 44(2): 82-87
- [17] 瞿芳芳,任东,侯金健,等.基于向前和向后间隔偏最小二乘的特征光谱选择方法[J].*光谱学与光谱分析*,2016,36(2): 593-598
- QU Fang-Fang, REN Dong, HOU Jin-jian, et al. The characteristic spectral selection method based on forward and backward interval partial least squares [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, 36(2): 593-598
- [18] 仇逊超,曹军.近红外光谱波段优化在东北松子蛋白质定量检测中的应用[J].*现代食品科技*,2016,32(11):303-309
- QIU Xun-chao, CAO Jun. Application of band optimization of near-infrared spectra for quantitative detection of proteins in northeastern pine nuts [J]. *Modern Food Science and Technology*, 2016, 32(11): 303-309
- [19] 买书魁,杨洋,赵小波,等.基于 NIR 的白酒酿酒高粱中关键指标的定量分析[J].*食品科技*,2019,44(2):301-307
- MAI Shu-kui, YANG Yang, ZHAO Xiao-bo, et al. Quantitative analysis of key indicators in sorghum based on near infrared spectroscopy [J]. *Food Science and Technology*, 2019, 44(2): 301-307
- [20] Segura J, Lopez-bote C J A. A laboratory efficient method for intramuscular fat analysis [J]. *Food Chemistry*, 2014, 145(7): 821-825
- [21] Visessanguan W, Benjakul S, Riebroy S. Changes in composition and functional properties of proteins and their contributions to nham characteristics [J]. *Meat Science*, 2004, 66(3): 579-588
- [22] Norgaard L, Saudland A, Wagner J, et al. Interval partial least squares regression (iPLS): A comparative chemometric study with an example from near-infrared spectroscopy. *Applied Spectroscopy*, 2000, 54(3): 413-419
- [23] Leardi R, Norgaard L. Sequential application of backward interval PLS and genetic algorithms for the selection of relevant spectral regions [J]. *Journal of Chemometrics*, 2004, 18(11): 486-497
- [24] 褚小立,许育鹏,田高友,译.近红外光谱解析实用指南[M].北京:化学工业出版社,2009
- Chu X L, Xu Y P, Tian G Y. *Practical Guide to Interpretive Near-infrared Spectroscopy* [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2009
- [25] De Marchi M, Righi F, Meneghesso M, et al. Prediction of chemical composition and peroxide value in unground pet foods by near-infrared spectroscopy [J]. *Journal of Animal Physiology and Animal Nutrition*, 2018, 102(1): 337-342
- [26] Pieszczyk L, Czarnik Matusiewicz H, Daszykowski M. Identification of ground meat species using near-infrared spectroscopy and class modeling techniques-aspects of optimization and validation using a one-class classification model [J]. *Meat Science*, 2018, 139: 15-24
- [27] Izutsu K, Fijimaki Y, Kuwabara A, et al. Near-infrared analysis of protein secondary structure in aqueous solutions and freeze-dried solids [J]. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2006, 95(4): 781-789
- [28] 陶琳丽,黄伟,杨秀娟,等.20 种氨基酸近红外光谱及其分子结构的相关性[J].*光谱学与光谱分析*,2016,36(9):2766-2773
- TAO Lin-li, HUANG Wei, YANG Xiu-juan, et al. Correlations between near infrared spectra and molecular structures of 20 standard amino acids [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, 36(9): 2766-2773
- [29] 孙潇,史岩.近红外光谱技术对加工后鸡肉产地溯源的研究[J].*现代食品科技*,2015,31(6):315-321
- SUN X, SHI Y. Determining the geographic origin of cooked chicken based on near-infrared spectroscopy [J]. *Modern Food Science and Technology*, 2015, 31(6):315-321

---

(上接第 47 页)

- [23] 赵希荣.壳聚糖与葡萄糖发生美拉德反应的条件及产物的抗氧化性能[J].*中国食品添加剂*,2004,1:63-66
- ZHAO Xi-rong. The conditions of maillard reaction of chitosan with glucose and the antioxidant activity of the product [J]. *China Food Additives*, 2004, 1: 63-66
- [24] 杨豆,张卫波.O/W 型微乳液的制备及稳定性的研究[J].*中国洗涤用品工业*,2018,2:47-52
- YANG Dou, ZHANG Wei-bo. Study on the preparation and stability of O/W microemulsion [J]. *China detergent industry*, 2018, 2: 47-52

---

(上接第 253 页)

- [27] 杨一.鲜枣可溶性固形物的可见/近红外光谱检测模型研究[D].山西农业大学,2016
- YANG Yi. Research of soluble solid content detection models of fresh jujube based on Vis/NIR spectroscopy [D]. Shanxi Agricultural University, 2016