

近红外光谱技术无损检测火龙果有效酸度

罗霞^{1,2,3}, 洪添胜^{2,3,4}, 罗阔^{2,3,4}, 林凛⁴, 梁雄建⁴, 代芬^{1,2,3}, 吴伟斌^{2,3,4}

(1. 华南农业大学电子工程学院, 广东广州 510642) (2. 华南农业大学南方农业机械与装备关键技术教育部重点实验室, 广东广州 510642) (3. 国家柑橘产业技术体系机械研究室, 广东广州 510642) (4. 华南农业大学工程学院, 广东广州 510642)

摘要: 火龙果是一种有益于人类健康的水果。本文利用 FieldSpec 3 便携式地物波谱仪采集 350~2500 nm 波段的光谱数据, 通过多种预处理方法、连续投影算法 (SPA) 优选波长、偏最小二乘回归 (PLSR) 等分析方法, 建立了火龙果有效酸度预测模型。实验结果表明: 原始光谱经过 Savitzky-Golay 卷积平滑法 (SGS), 建立的 PLS 模型最优, 其 R_{CV} 为 0.8862, RMSECV 为 0.1535; 联合 SPA 算法, 利用优选出的 25 个变量建立的 PLS 模型, 其预测相关系数 (R_p) 为 0.8702, 预测均方根误差 (RMSEP) 为 0.1682, 其模型的预测精度高于原始光谱 2151 个变量建立模型。比较分析了果皮对模型精度的影响, 对光谱数据进行最佳 Normalize 预处理后, 完整果 PLS 模型的 R_p 为 0.8151, 果肉 PLS 模型 R_p 为 0.8583, 说明果皮存在对模型有影响, 但可以进行光谱优化减小影响。本研究结果表明基于近红外光谱技术联合连续投影算法的漫反射无损检测火龙果有效酸度含量具有可行性。

关键词: 近红外光谱技术; 火龙果; 有效酸度; 无损检测; 模型

文章编号: 1673-9078(2016)07-276-282

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2016.7.042

Non-destructive Measurement of the Active Acidity of Pitaya by Near-infrared Spectroscopy

LUO Xia^{1,2,3}, HONG Tian-sheng^{2,3,4}, LUO Kuo^{2,3,4}, LIN Lin⁴, LIANG Xiong-jian⁴, DAI Fen^{1,2,3}, WU Wei-bin^{2,3,4}

(1. College of Electronic Engineering, South China Agricultural University, Guangzhou 510642, China)

(2. Key Laboratory of Key Technology on Agricultural Machine and Equipment, Ministry of Education, South China Agricultural University, Guangzhou 510642, China) (3. Division of Citrus Machinery, China Agriculture Research System, Guangzhou 510642, China) (4. College of Engineering, South China Agricultural University, Guangzhou 510642, China)

Abstract: Pitaya is a fruit that exhibits health benefits. The FieldSpec 3 spectroradiometer was used to collect spectral data of pitaya in the wavelength range of 350–2500 nm. Multiple pretreatments, successive projections algorithm (SPA), and partial least squares regression (PLSR) were adopted to establish the active acidity prediction model for pitaya. The experimental results showed that the optimal partial least squares (PLS) model was established after the original spectrum was processed by using the Savitzky-Golay convolution smoothing method (SGS). The correlation coefficients of cross-validation (R_{CV}) and root mean square error of cross-validation (RMSECV) were found to be 0.8862 and 0.1535, respectively. In combination with SPA algorithm, the preferentially selected 25 variables were used to establish the PLS model with a correlation coefficient of prediction (R_p) of 0.8702 and a root mean square error of prediction (RMSEP) of 0.1682. The predictive accuracy of the model was higher than that of the model constructed by using 2151 variables from the original spectrum. The effect of the fruit peel on the model accuracy was analyzed. After the optimal normalization pretreatment of spectral data, the R_p of the whole fruit PLS model was 0.8151 and that of the R_p of the fruit flesh PLS model was 0.8583, which showed that the fruit peel affected the model, but the effect could be reduced by spectral optimization. The results obtained indicate that it is feasible to use diffuse reflectance based on near infrared spectroscopy combined with SPA for the non-destructive measurement of the active acidity of pitaya.

Key words: near infrared spectroscopy; pitaya; active acidity; non-destructive measurement; model

收稿日期: 2015-01-25

基金项目: 国家现代农业产业技术体系建设专项资金 (GARS-27); 教育部高等学校博士学科点专项科研项目 (20124404120006)

作者简介: 罗霞 (1973-), 女, 博士, 实验师, 主要从事光谱技术在农产品、食品无损检测研究。

通讯作者: 洪添胜, 男, 教授, 博士生导师, 主要从事农业工程、机电一体化和信息技术应用研究

火龙果是仙人掌科量天尺属和蛇鞭柱属植物的果实, 俗称红龙果、仙蜜果等, 不仅颜色鲜艳, 口感爽口, 而且富含丰富的糖、有机酸、蛋白质等营养成分, 红龙果果皮和果肉含有丰富的多酚, 其通过抗氧化、调节免疫等机制抑制肿瘤作用^[1], 火龙果是一种有益于人类健康的新型热带和亚热带水果。水果的酸度不但影响水果的口感, 而且也是水果成熟程度的标志之一。水果的有效酸度(即 pH) 是氢离子的浓度, 能够反映出水果的酸度, 现有火龙果有效酸度检测采用传统方法, 主要有精密 pH 试纸和酸度计^[2], 该方法都是将样品冲洗干净、打成果酱等处理后进行测试。这些方法都需要破坏样品, 而且检测样品时间长, 适合抽样检测, 不适合大规模样品的检测。因此研究快速无损检测火龙果有效酸度的技术, 实现采摘果分级和规模化在线检测, 对于减少火龙果采后损失, 增加火龙果优品筛选, 提高果农的经济效益具有重要意义。

近红外光谱技术由近红外光谱仪、化学计量学软件和数学模型三部分构成, 近红外光谱仪采集的光谱信号携带的物质内部甲基、亚甲基 C-H、N-H、O-H 的振动信息, 结合化学计量学方法, 通过数学模型建立可以快速实现对含有上述基团的物质定量分析, 因此这种方法具有成本低、速度快、操作简单、无损样品等特点, 已经被广泛应用于农产品和食品品质检测领域^[3-4]。罗雪宁等将二维相关红外光谱技术对不同冷藏温度的南疆骏枣品质进行了相关分析研究表明南疆骏枣的最佳冷藏温度为 0 °C^[5]; 吴建虎等研究表明可见/近红外反射光谱技术可以较好的预测新鲜鸡蛋的蛋白质含量^[6]; 刘辉军等研究表明利用背景光校正方法可有效减小田间环境光照对黄花梨光谱采集影响, 建立黄花梨糖度的预测模型^[7]。应用近红外光谱技术已经成为现代无损检测的主要发展方向, 更多研究主要是对薄皮农产品和食品品质的检测研究^[8-12], 对厚皮水果品质的研究则较少。

该文以厚皮水果火龙果为研究对象, 采用不同预处理方法减小光谱数据噪声, 运用连续投影算法(Successive Projections Algorithm, SPA)优选波长变量, 建立了偏最小二乘回归(partial least square regression, PLSR)、连续投影算法联合偏最小二乘回归(SPA-PLSR)和连续投影算法联合多元线性回归(SPA-multivariate linear regression, SPA-MLR)预测模型, 并比较火龙果果皮对有效酸度预测模型精度的影响, 为实现火龙果有效酸度无损检测提供科学依据。

1 材料与方法

1.1 实验材料

试验所用火龙果均为产于广东省湛江市的白肉火龙果, 单果质量在 304~569 g, 果皮厚度在 2.598~8.005 mm, 将其洗净擦干后, 剔除有损的样本, 最后得到试验样本 82 个。试验中所用试剂为: 蒸馏水、pH 标准缓冲溶液等。

1.2 实验设备

本实验中采用美国 ASD 公司生产的 FieldSpec 3 便携式地物波谱仪进行光谱采集, 光谱范围 350~2500 nm, 该设备由三个独立的光谱仪构成, 因此光谱分辨率 350~1000 nm 范围内是 3 nm, 在 1000~2500 nm 范围内是 10 nm; 采样间隔在 350~1000 nm 范围内是 1.4 nm, 在 1000~2500 nm 范围内是 2 nm; 数据输出间隔为 1 nm。

实验中采用的 PHS-3C 型精密 pH 计用来测定火龙果有效酸度即 pH 值, 测量精度为 0.01; pH 测量范围在 0~14.00; 最小显示单位为 0.01 pH; 温度补偿范围为 0~60 °C。

1.3 测量方法

1.3.1 光谱测量

本试验采集火龙果近红外漫反射光谱使用 FieldSpec 3 地物波谱仪。采集系统如图 1 所示。该实验搭建的系统由三部分组成: 高密度反射探头采集火龙果样本的光谱, 然后通过光纤将数据传送到光谱仪中, 光谱仪通过无线网络和计算机连接进行数据传输, 并通过图形化操作软件 RS³ 将光谱数据保存至计算机, 光源为 ASD 公司提高的 A128932 型卤钨灯, 光谱可覆盖 350-2500 nm 波段范围, 内置于高密度反射探头中。

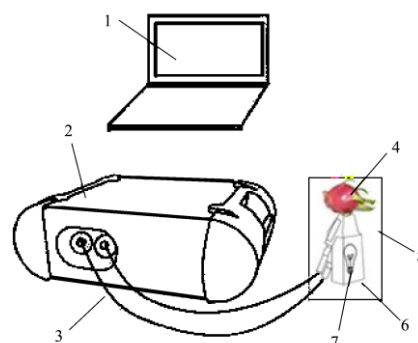


图 1 FieldSpec 3 地物波谱仪采集光谱系统

Fig.1 Schematic diagram of the spectral acquisition system using the FieldSpec 3 spectroradiometer

注：1.计算机，2.光谱仪，3. 光纤，4. 火龙果，5. 全封闭实验箱，6. 反射式探头，7. 光源。

光谱采集前，先采用漫反射标准白板进行标定，为了最大降低温度差异的影响，将样品取出置于实验室环境 2 h 后采集光谱，实验室环境温度保持在 25 ℃，本实验采用接触式漫反射测量方式，光谱采集在全封闭实验箱中进行，在火龙果样本的赤道位置取等间隔 90° 的 4 点，果梗和果蒂位置取间隔 120° 的各 3 点，共计 10 个点采集光谱数据，每个点扫描 10 次，取 10 个光谱数据的平均作为一个点的光谱数据，实验中采集的漫反射光谱如图 2 所示。研究中用到的数据分析软件图形化操作软件 RS³，ViewSpec Pro 光谱数据处理软件，Unscrambler 9.8，Excel 2007，Matlab 2009a (Mathworks, USA)。

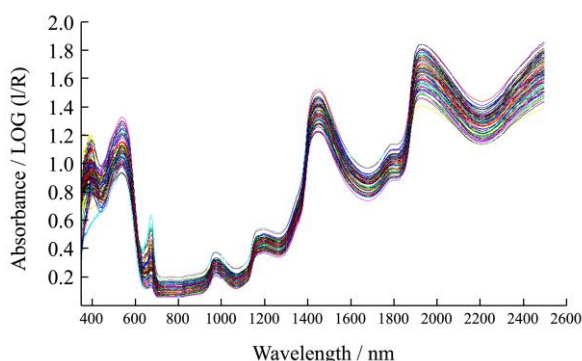


图 2 火龙果样本漫反射光谱

Fig.2 Diffuse reflectance spectrum of pitaya

1.3.2 有效酸度含量化学测量方法

有效酸度是测量果汁的 pH 值。果汁的 pH 值的测量方法是参照国标 GB10468-89。按照 SPXY (Sample Set Partitioning based on joint X-Y, SPXY) 样本划分方法^[13]选取 56 个试验样本作为校正集，26 个试验样本作为预测集。实验样品有效酸度分布情况如表 1 所

示。

表 1 82 火龙果有效酸度含量统计结果

Table 1 Statistical results of the active acidity of 82 pitaya samples

样本集	样本数	最小值 /%	最大值 /%	平均值 /%	标准误差 /%
校正集	56	3.6467	5.1067	4.21697	0.3328
预测集	26	3.7033	4.8567	4.2083	0.3346

1.4 数据处理和分析

1.4.1 连续投影算法

连续投影算法是通过向量的投影分析，从光谱矩阵提取特征变量信息，并使得光谱变量共线性最小的一种新型变量选择算法，具体算法步骤如参考文献^[14]。

1.4.2 建模方法

本研究采用多元线性回归 (MLR) 和偏最小二乘法回归 (PLSR) 方法进行建模分析，其中 MLR 是建立因变量与多个自变量的最优组合的回归方程；PLSR 集主成分分析、普通多元线性回归和典型相关分析于一体的回归分析方法，较好地解决了自变量多重共线性的问题，在光谱分析中得到了广泛应用。模型最佳因子数由模型交叉验证法来确定，为了有效评价模型精度，实验选取了交叉验证相关系数 (R_{CV})、交叉验证均方根误差 (RMSECV)、预测相关系数 (R_P) 和预测均方根误差 (RMSEP) 4 个参数作为评价标准， R_{CV} 和 R_P 值越大，RMSECV 和 RMSEP 值越小，模型的预测效果越好。

2 结果与讨论

2.1 光谱数据分析

表 2 7 种预处理光谱 PLS 建模预测结果

Table 2 Prediction results using PLS models with seven spectral pretreatments

模型序号	预处理方法	波段/nm	主成分数	相关系数 R_{CV}	验证均方根误差 RMSECV
1	Non	350~2500	13	0.8789	0.0582
2	SGS	350~2500	18	0.8862	0.1535
3	Nor	350~2500	11	0.8827	0.1561
4	De	350~2500	15	0.8725	0.1634
5	MSC	350~2500	23	0.8656	0.1700
6	SNV	350~2500	22	0.8635	0.1707
7	BL	350~2500	14	0.8573	0.1718
8	FD	350~2500	9	0.7796	0.2172

本实验采集的光谱范围为 350~2500 nm，由于 ASD Fieldspec3 输出数据间隔为 1 nm，因此每个实验样品就是 2151 维的高维数据。在光谱采集过程中，由

于有光的散射、外界环境光的干扰等因素的影响，对原始光谱进行预处理是非常必要的。为比较多种预处理方法对模型精度的影响，分别利用原始光谱数据，

经归一化 (Nor)、卷积平滑 (SGS)、标准正态变量变换 (SNV)、多元散射校正 (MSC)、一阶导数 (FD)、基线校正(BL)、去趋势变换 (De) 等预处理的光谱数据建立 PLSR 模型, 结果如表 2 所示。

表 3 4 种预处理经 SPA 优选波长

Table 3 Preferentially selected wavelengths by SPA after four pretreatments

序号	原始光谱	SGS	Nor	MSC	De
1	350	352	359	351	361
2	351	355	361	354	371
3	354	358	371	358	384
4	356	361	375	359	387
5	358	366	383	361	393
6	361	371	385	362	400
7	362	375	387	371	412
8	381	384	393	383	433
9	387	388	412	384	490
10	415	391	456	390	611
11	459	394	491	393	684
12	548	412	611	402	699
13	608	429	1360	501	929
14	678	455	1518	543	1000
15	699	491	1867	589	1002
16	809	518	1903	697	1364
17	1159	699	2157	705	1393
18	1405	976	2254	826	1548
19	1554	1364	2306	988	2163
20	1932	1403	2495	1249	2468
21		1466		1884	2487
22		1590		2050	2494
23		1933		2092	
24		2306		2310	
25		2495		2334	
26				2372	
27				2391	
28				2421	
29				2466	
30				2468	
31				2477	
32				2486	
33				2490	
34				2495	
35				2500	

由表 2 的数据可知, 与原始光谱数据建立的模型相比, 最优预处理方法是 Savitzky-Golay 卷积平滑法

(SGS), 其 PLS 模型的相关系数 $R_{CV}=0.8862$, 验证均方根误差 $RMSECV=0.1535$, 其次是归一化 (Nor) 预处理, PLS 模型的相关系数 $R_{CV}=0.8827$, 验证均方根误差 $RMSECV=0.1561$, 可以优先作为火龙果有效酸度含量测定的光谱预处理方法; 最差的预处理方法是 FD, PLS 模型的相关系数 $R_{CV}=0.7796$, 验证均方根误差 $RMSECV=0.2172$ 。

2.2 应用 SPA 优选波长变量

采用高维 2151 维光谱数据建立的 PLS 全谱模型, 在建模过程中, 数据量大, 且运行时间长, 同时还引入了干扰变量, 反而会降低模型的预测精度, 本实验对表 2 的前 5 个模型, 进行 SPA 运算, 压缩后, 得到 5 种优选波长变量, 见表 3 所示。

2.3 建模结果分析

表 4 MLR 和 PLS 模型预测结果

Table 4 Predictive results of the MLR and PLS models

序号	预处理方法	建模方法	变量个数	R_p	RMSEP
1	原始光谱	PLS	2151	0.8314	0.1958
2	原始光谱+SPA	PLS	20	0.8273	0.1959
3	原始光谱+SPA	MLR	20	0.8645	0.1715
4	SGS	PLS	2151	0.8830	0.1623
5	SGS+SPA	PLS	25	0.8702	0.1682
6	SGS+SPA	MLR	25	0.8321	0.1466
7	Nor	PLS	2151	0.8614	0.1774
8	Nor+SPA	PLS	20	0.8790	0.1649
9	Nor+SPA	MLR	20	0.7020	0.1779
10	MSC	PLS	2151	0.8696	0.1756
11	MSC+SPA	PLS	35	0.8665	0.2022
12	MSC+SPA	MLR	35	0.7221	0.1783
13	De	PLS	2151	0.8642	0.1827
14	De+SPA	PLS	22	0.9255	0.1378
15	FD	PLS	2151	0.8489	0.2037
16	BL	PLS	2151	0.8481	0.1885
17	SNV	PLS	2151	0.8524	0.1850

对校正集 56 个样本, 使用全谱、经过预处理和 SPA 压缩后的波长优选建立 PLS 模型和 MLR 模型, 采用留一全交互验证, 并对预测集 26 个样本进行预测, 预测结果见表 4 所示。模型 1 是全谱 2151 个变量建立的 PLS 模型, 经过 SPA 进行数据压缩后提取出 20 个优选波长建立的 PLS 模型 2, 模型的校正集变量仅为模型 1 变量的 0.93%, 得到的模型的相关系数为 $R_p=0.8273$, 预测均方根误差 $RMSEP=0.1959$, 其预测效果和全谱模型 1 的基本相当; 同时将全谱数据经过去

趋势预处理后, 再进行 SPA 算法压缩, 建立的 PLS 预测模型 14 的相关系数 $R_p=0.9255$, 预测均方根误差 $RMSEP=0.1378$, 其模型的预测精度高于模型 1 和模型 2, 说明 SPA 算法能够有效的进行光谱数据的压缩, 最大程度的消除共线性对模型的影响, 降低模型的复杂度, 提高模型的运行速度。

经过光谱预处理和 SPA 优选波长压缩光谱变量后建立的 PLS 模型 5, 8, 11, 14, 预测效果都高于全谱的模型 1 的预测精度, 其中原始光谱经过去趋势预处理和 SPA 算法后建立的模型 14, 采用的 22 个光谱变量, 却取得了相关系数 $R_p=0.9255$, 预测均方根误差 $RMSEP=0.1378$, 精度高于全谱 PLS 模型 1 和经 SPA 压缩后的模型 2, 说明基于原始光谱的预处理可以有效的去除光谱噪声, SPA 算法运算有利于后续的波长优选。原始光谱经过 SPA 运算后建立的 MLR 模型的预测效果优于 PLS 模型, 但是经过 SGS 和 MSC 预处理, 经过 SPA 压缩后建立的 MLR 模型的预测效果都不如 PLS 模型。

2.4 果皮对有效酸度检测精度的影响

2.4.1 去皮前后火龙果光谱差异

本实验通过 FieldSpec 3 地物波谱仪分别采集完整火龙果和去皮火龙果的光谱数据, 每个样本分别对果梗、赤道、果蒂三个位置采集 10 个点, 取 10 个光谱数据的平均值作为一个样本的光谱数据。以 70 个火龙果为研究对象, 分别采集完整火龙果和去皮火龙果的光谱数据, 经过剔除 5 个异常样本后, 最后以 65 个火龙果样本作为研究对象, 经过 SPXY 算法, 以 45 个样本为校正集, 20 个样本为预测集。表 5 是其有效酸度含量的统计分布情况。光谱采集时首先进行带皮光谱的采集, 然后去掉果皮再进行光谱采集, 图 3 为 65 个火龙果去皮后的火龙果漫反射光谱图, 图 4 为一个样本完整果、果皮和果肉的漫反射光谱对比图。

表 5 65 个火龙果有效酸度含量统计结果

Table 5 Statistical results of active acidity in 65 pitaya samples

样本集	样本数	最小值 /%	最大值 /%	平均值 /%	标准误差 /%
校正集	45	3.43	4.73	4.2068	0.3235
预测集	20	3.7633	4.7133	4.2119	0.3230

由图 4 可知, 在 350~696 nm 波段范围内, 果肉和果皮、完整果的吸光度光谱曲线形状有较大差异, 且果肉的吸光度都小于果皮和完整果的吸光度, 说明该波段的光谱对果皮是敏感的; 果皮和完整果的光谱曲线形很相似, 峰值出现的位置差异也不明显, 仅在 455~625 nm 波段范围内, 果皮的吸光度大于完整果。

在 696~2500 nm 波段范围内, 果肉、果皮和完整果的光谱曲线形状很相似, 峰值出现的位置差异不明显, 果肉的吸光度显著大于果皮和完整果, 除了 1407~1528 nm 和 1870~2500 nm 波段范围外, 果皮的吸光度大于完整果, 为了探讨样本果皮的影响, 下面将通过定量分析进行讨论。

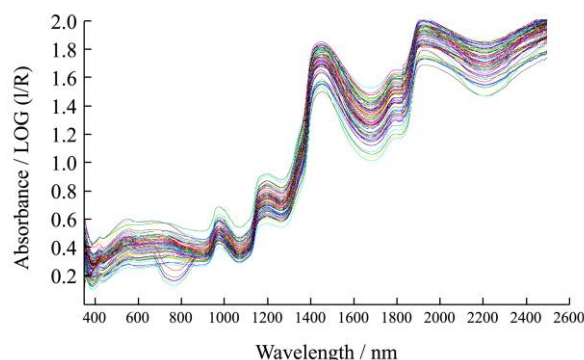


图 3 65 个火龙果去皮后的火龙果漫反射光谱图

Fig.3 Diffuse reflectance spectra of 65 pitaya samples after the peel removal

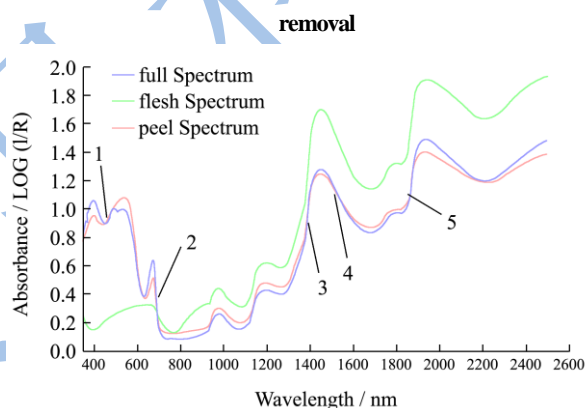


图 4 1 个样本完整果、果肉和果皮的漫反射光谱对比图

Fig.4 Comparison of diffuse reflectance spectra between a full pitaya, flesh, and peel

Note: 1.455 nm, 2.696 nm, 3.1407 nm, 4.1528 nm, 5.1870 nm.

2.4.2 果皮对火龙果有效酸度模型的影响分析

本试验为了研究果皮对火龙果有效酸度模型的影响, 采用多种预处理方法对 65 个火龙果样本的完整果光谱和果肉光谱进行处理, 然后采用留一全交互验证, 通过 PLS 方法建立预测模型, 建模效果如表 6 所示。

由表 6 可知, 对于完整果光谱, Nor 和 MSC 预处理后的光谱建模效果较好, 模型验证相关系数均有所提高, 验证均方根误差均有所下降, 模型精度和稳定性都得到提高。对于去皮果光谱, Nor 预处理后的光谱建模效果最好, 其次是 MSC 预处理, 模型验证相关系数均有所提高, 验证均方根误差均有所下降, 而且校正集参数和验证集参数更加相近, 模型精度和稳定性都得到提高。

表 6 6 种预处理方法 PLS 模型效果比较

Table 6 Comparison of the performances of the PLS models with six spectral pretreatments

预处理方法	完整果				去皮果肉			
	R _C	RMSEC	R _{CV}	RMSECV	R _C	RMSEC	R _{CV}	RMSECV
None	0.8854	0.1421	0.7793	0.1948	0.9502	0.0952	0.8187	0.1802
SGS	0.8833	0.1433	0.7776	0.1955	0.9468	0.0983	0.8213	0.1793
Nor	0.8802	0.1450	0.7899	0.1901	0.9540	0.0917	0.8267	0.1760
MSC	0.8681	0.1517	0.7889	0.1898	0.9651	0.0801	0.8238	0.1780
BL	0.8691	0.1511	0.7578	0.2030	0.9555	0.0901	0.8199	0.1842
SNV	0.8688	0.1513	0.7887	0.1898	0.9479	0.0973	0.8128	0.1827
De	0.8681	0.1517	0.7699	0.1974	0.9108	0.1262	0.7936	0.1882

2.4.3 建模结果分析

挑选最佳完整果和去皮果经过光谱预处理后的光谱,校正集 45 个样本建立校正模型,并对预测集中的 20 个样本进行预测,预测结果如表 7 所示。

表 7 去皮前后 PLS 模型预测结果

Table 7 Predictive results for the PLS models with and without peel

建模方法	预处理方法	完整果		去皮果肉	
		R _p	RMSEP	R _p	RMSEP
PLS	None	0.7528	0.2128	0.8248	0.1804
	Nor	0.8151	0.1932	0.8583	0.1666
	MSC	0.7319	0.2232	0.8477	0.1732

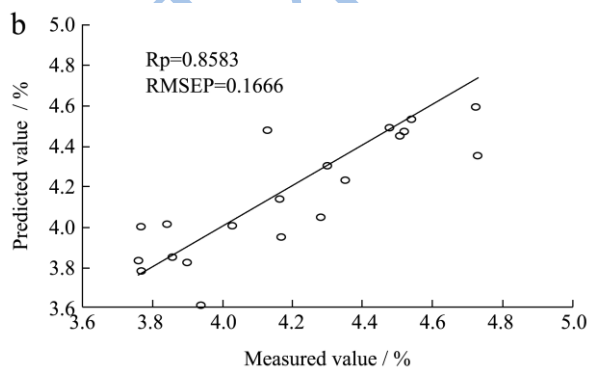
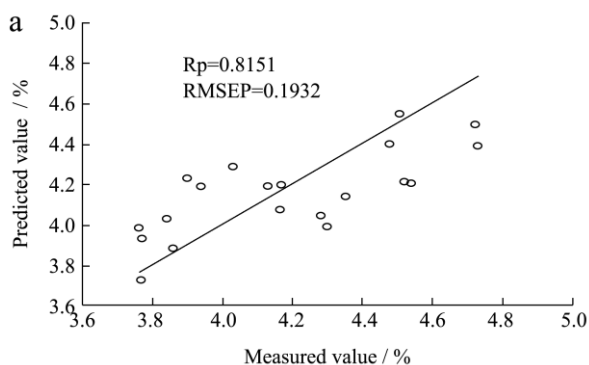


图 5 完整果和果肉预测回归图 (Nor 预处理)

Fig.5 Predictive regression chart of the models of full pitaya and pitaya flesh with the normalization pretreatment

注: a.整果预测回归图, b. 果肉预测回归图。

由表 7 可知,对光谱数据未处理的情况下,完整

果的有效酸度预测模型预测相关系数只有 0.7528,而果肉的有效酸度预测模型的预测相关系数为 0.8248,果肉模型的预测精度显著高于完整果模型。在对完整果光谱采用最佳 Nor 预处理后,预测相关系数为 0.8151,而果肉经过最佳 Nor 预处理后,预测相关系数为 0.8583,如图 5 所示,精度始终高于完整果模型。这表明火龙果果皮的存在,使得采集漫反射光谱的过程中,带回了果皮中的信息,在完整果建模过程中没有去掉携带有果皮信息的光谱数据,使得模型的预测能力下降,因此火龙果果皮的存在,对火龙果有效酸度预测模型有影响,后续研究可以通过多种光谱数据预处理或不同建模方法等减少果皮因素的影响,提高带皮火龙果光谱模型的预测精度。

3 结论

实验结果说明利用近红外光谱技术、连续投影算法等方法无损检测火龙果有效酸度含量是可行的。从本试验中得到如下结论:

3.1 采用 FieldSpec 3 近红外漫反射测量方法,最优光谱预处理方法是 Savitzky-Golay 卷积平滑法 SGS,其 PLS 模型的相关系数 R_{cv}=0.8862,验证均方根误差 RMSECV=0.1535,可以优先作为火龙果有效酸度含量测定的光谱预处理方法。

3.2 经过不同预处理后建立的 PLS 模型的预测精度都高于未处理的 PLS 模型,其中预处理最好的 SGS,PLS 模型的预测相关系数 R_p=0.8830, RMSEP=0.1623。将全谱数据经过去趋势预处理后,再进行 SPA 算法压缩,建立的 PLS 预测模型的相关系数为 R_p=0.9255,预测均方根误差 RMSEP=0.1378,其模型的预测精度高于全谱原始数据建立的 PLS 模型,说明 SPA 算法能够有效的进行光谱数据的压缩,最大程度的消除共线性对模型的影响,降低模型的复杂度,提高模型的运行速度。

3.3 实验表明火龙果果皮的存在,使得采集漫反射光

谱的过程中, 带回了果皮中的信息, 在完整果建模过程中没有去掉携带有果皮信息的光谱数据, 使得模型的预测能力下降, 因此火龙果果皮的存在, 对火龙果有效酸度预测模型有影响, 后续研究可以通过多种光谱数据预处理或不同建模方法等减少果皮因素的影响, 提高带皮火龙果光谱模型的预测精度。

参考文献

- [1] Florian C Stintzing, Reinhold Carle. Functional properties of anthocyanins and betalains in plants, food, and in human nutrition [J]. Trends in Food Science & Technology, 2004, 15:19-38
- [2] 陈永杰. 几种水果有效酸度的测定[J]. 潍坊高等职业教育, 2010, 6(2):58-59,67
CHEN Yong-jie. The mensuration of effective acidity of some kinds of fruit [J]. Weifang Vocational College, 2010, 6(2): 58-59, 67
- [3] 陆婉珍, 袁洪福, 徐广通, 等. 现代近红外光谱分析技术[M]. 北京: 中国石化出版社, 2000
Bart M Nicolai, Katrien Beullens, Els Bobelyn, et al. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review [J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 46(2): 99-118
- [4] 罗雪宁, 倪明航, 孔维楠, 等. 二维相关红外光谱技术对不同冷藏温度的南疆骏枣品质分析研究[J/OL]. 现代食品科技, 2016(02). <http://www.cnki.net/kcms/detail/44.1620.TS.20151224.1511.028.html>
LUO Xue-ning, NI Ming-hang, KONG Wei-nan, et al. Quality analysis and research of jun-jujube at different cold storage temperatures by two-dimensional correlation infrared spectroscopy in southern Xinjiang [J/OL]. Modern Food Science and Technology, 2016(02). <http://www.cnki.net/kcms/detail/44.1620.TS.20151224.1511.028.html>
- [5] 吴建虎, 黄钧. 可见/近红外光谱技术无损检测新鲜鸡蛋蛋白质含量的研究[J]. 现代食品科技, 2015, 31(5):285-290
WU Jian-hu, HUANG Jun. Non-destructive detection of protein content in fresh eggs by visible/near-infrared reflectance spectroscopy [J]. Modern Food Science and Technology, 2015, 31(5): 285-290
- [6] 刘辉军, 应义斌. 田间黄花梨糖度的可见/近红外光谱检测方法[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(11):3078-3081
LIU Hui-jun, YING Yi-bin. Evaluation of sugar content of Huanghua pear on trees by visible/near infrared spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(11): 3078-3081
- [7] Nghia Nguyen Do Trong, Chyngyz Erkinbaev, Mizuki Tsuta, et al. Spatially resolved diffuse reflectance in the visible and near-infrared wavelength range for non-destructive quality assessment of 'Braeburn' apples [J]. Postharvest Biology and Technology, 2014, 91: 39-48
- [8] Emanuel José Nascimento Marques, Sérgio Tonetto de Freitas, Maria Fernanda Pimentel, et al. Rapid and non-destructive determination of quality parameters in the 'Tommy Atkins' mango using a novel handheld near infrared spectrometer [J]. Food Chemistry, 2016, 197(Part B): 1207-1214
- [9] Rizzolo Anna, Bianchi Giulia, Vanoli Maristella, et al. Electronic nose to detect volatile compound profile and quality changes in 'Spring Belle' peach (*Prunus persica* L.) during cold storage in relation to fruit optical properties measured by time-Resolved Reflectance Spectroscopy[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2013, 61(8): 1671-1685
- [10] Sang-Ik Han, Jong-Hyun Chae, Kristin Bilyeu, et al. Non-destructive determination of high oleic acid content in single soybean seeds by near infrared reflectance spectroscopy [J]. Journal of the American Oil Chemists' Society, 2014, 91(2): 229-234
- [11] Yidan Bao, Fei Liu, Wenwen Kong, et al. Measurement of soluble solid contents and pH of white vinegars using VIS/NIR spectroscopy and least squares support vector machine [J]. Food and Bioprocess Technology, 2014, 7(1): 54-61
- [12] GALVÃO R K H, ARAUJO M C U, JOSÉ G E, et al. A method for calibration and validation subset partitioning [J]. Talanta, 2005, 67: 736-740
- [13] 洪涯, 洪添胜, 代芬, 等. 连续投影算法在砂糖橘总酸无损检测中的应用[J]. 农业工程学报, 2010, 26(Supp.2):380-384
HONG Ya, HONG Tian-sheng, DAI Fen, et al. Successive projections algorithm for variable selection in nondestructive measurement of citrus total acidity [J]. Transactions of the CSAE, 2010, 26(Supp.2): 380-384.