

## 《食品工业科技》网络首发论文

题目: 基于近红外光谱的红提内部品质无损检测研究  
作者: 高升, 徐建华  
DOI: 10.13386/j.issn1002-0306.2022030285  
网络首发日期: 2022-07-07  
引用格式: 高升, 徐建华. 基于近红外光谱的红提内部品质无损检测研究[J/OL]. 食品工业科技. <https://doi.org/10.13386/j.issn1002-0306.2022030285>



**网络首发:** 在编辑部工作流程中, 稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定, 且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式(包括网络呈现版式)排版后的稿件, 可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定; 学术研究成果具有创新性、科学性和先进性, 符合编辑部对刊文的录用要求, 不存在学术不端行为及其他侵权行为; 稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准, 正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性, 录用定稿一经发布, 不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容, 只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

**出版确认:** 纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊(光盘版)》电子杂志社有限公司签约, 在《中国学术期刊(网络版)》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版, 以单篇或整期出版形式, 在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊(网络版)》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物(ISSN 2096-4188, CN 11-6037/Z), 所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

doi:10.13386/j.issn1002-0306.2022030285

作者简介: 高升 (1988—), 男, 山东临朐人, 讲师, 博士, 研究方向: 农产品无损检测技术及机电一体化, E-mail: gaosheng@qut.edu.cn.

\*通讯作者: 高升 (1988—), 男, 山东临朐人, 讲师, 博士, 研究方向: 农产品无损检测技术及机电一体化, E-mail: gaosheng@qut.edu.cn.

基金项目: 国家自然科学基金(31871863; 32072302); 湖北省自然科学基金(2012FKB02910); 湖北省研究与开发计划项目(2011BHB016)。

# 基于近红外光谱的红提内部品质无损检测研究

高升<sup>1</sup>, 徐建华<sup>2</sup>

(1. 青岛理工大学信息与控制工程学院, 山东青岛 266520;  
2. 青岛国际机场集团有限公司运行指挥中心, 山东青岛 266000)

**摘要:** 红提的可溶性固形物含量 (Soluble Solids Content, SSC)、总酸 (Total Acid, TA)、pH、硬度 (Firmness Index, FI) 和含水率 (Moisture Content, MC) 等内部品质指标直接影响着果实的口感及品质, 同时也是水果成熟度的评判标准。为快速获得上述内部品质指标, 且避免不必要的检测损耗, 本文提出了一种新的红提无损检测模型。以生长期红提为研究对象, 利用 Antaris II 近红外光谱仪采集了 360 个样本的近红外光谱信息。对采集到的光谱信息分别用 SNV 等算法进行预处理并通过建模确定了最优预处理方法。然后通过降维算法提取光谱信息的特征波长, 最后基于偏最小二乘回归算法 (Partial Least Squares Regression, PLSR) 分别建立了红提的 SSC、TA、pH、FI 和 MC 的检测模型。红提的 SSC、TA 的最优检测模型为 SG-CARS-SPA-PLSR 模型, pH 的最优检测模型为 MA-CARS-SPA-PLSR 模型, FI 和 MC 的最优检测模型为 SG-CARS-PLSR 模型。所建立的红提 SSC、TA、pH、FI 和 MC 的最优 PLSR 模型的预测集的相关系数  $R_p$  分别为 0.9787, 0.9811, 0.9870, 0.9568, 0.9329, 残差预测偏差 RPD 分别为 4.8637, 4.9006, 6.0939, 3.4453, 2.5825, 表明以上模型具有较高的检测精度。本文所建的红提内部品质检测模型可为红提内部品质的检测提供可靠的方法。

**关键词:** 红提, 内部品质, 近红外光谱, 偏最小二乘回归算法, 无损检测模型

## Non-destructive Detection of The Internal Quality of Red Globe Grapes Based on Near Infrared Spectroscopy

GAO Sheng<sup>1</sup>, XU Jianhua<sup>2</sup>

(1. School of Information and Control Engineering, Qingdao University of Technology, Qingdao, 266520, China;  
(2. AOC, Qingdao International Airport Group, Qingdao, 266000, China))

**Abstract:** The internal quality indicators such as Soluble Solids Content (SSC), Total Acid (TA), pH, Firmness Index (FI) and Moisture Content (MC) of red globe grapes affect the taste and quality of the fruit directly. And they are also criterion for maturity. In order to obtain the internal quality indicators showed above quickly and avoid unnecessary inspection losses, a new non-destructive detection model for red globe grapes was proposed in this paper. The near-infrared spectral information of 360 samples was collected using the Antaris II near-infrared spectrometer for red globe grapes in the growing period. The collected spectral information was pre-processed by algorithms such as SNV and then modelled to determine the optimal spectral pre-processing method. The characteristic wavelengths of the spectral information were extracted by dimensionality reduction algorithms. Finally, the detection models for SSC, TA, pH, FI and MC of red grapes were established respectively based on Partial Least Squares Regression (PLSR) algorithm. For SSC and TA the optimal detection model was SG-CARS-SPA-PLSR, for pH the optimal detection model was MA-CARS-SPA-PLSR, and for FI and MC the optimal detection model was SG-CARS-PLSR. The correlation coefficients( $R_p$ ) and the residual prediction deviations(RPD) of the optimal PLSR models established of the prediction sets for red globe grape SSC, TA, pH, FI and MC were 0.9787, 0.9811, 0.9870, 0.9568, 0.9329 respectively, indicating that the above models had high detection accuracy. The models established in this paper could provide a reliable method for the detection of the internal quality of red globe grapes.

**Key words:** red globe grape; internal quality; near infrared spectroscopy; partial least squares regression algorithm; non-destructive detection model

中图分类号: O433.4; O439; S371 文献标志码: A

红提营养丰富, 鲜嫩多汁, 深受消费者喜爱<sup>[1-2]</sup>。可溶性固形物 (SSC)、总酸 (TA)、pH、硬度 (FI) 和含水率 (MC) 决定了果实的口味, 可反映红提的感官性能、商品价值、水果成熟度<sup>[3-4]</sup>。FI 和 MC 也是评价果蔬贮藏及运输品质的重要参考<sup>[5]</sup>。掌握红提的含水率能及时挑选出将要腐烂的果实, 对减少腐烂蔓延至关重要<sup>[6]</sup>。传统的水果内部品质检测为破坏性抽样检测, 检测后的样本遭到严重破坏而无法销售和食用<sup>[7-10]</sup>, 且只能通过抽样检测来对整体进行评价, 而每个果实的品质无法进行准确评价。测定红提的 SSC、TA、pH、FI 和 MC 含量需要独立的实验, 常规检测方法无法一次性获得。市场迫切需要一种无损、快速准确的检测方法, 实现对红提内部品质的检测。

光谱技术已在果蔬品质检测方面得到广泛应用<sup>[11-17]</sup>刘燕德等<sup>[18]</sup>利用近红外光谱技术建立了不同产地苹果糖度的在线检测通用模型, 实现苹果糖度的快速在线无损检测。王转卫等<sup>[19]</sup>利用近红外光谱技术建立了苹果可溶性固形物含量、硬度、pH 值和含水率的最小二乘支持向量机和极限学习机模型, 实现了苹果各内部品质指标的检测。罗一甲等<sup>[20]</sup>利用近红外光谱技术结合 GA-ELM 预测模型实现了对赤霞珠葡萄总酚含量快速准确检测。Mza B 等<sup>[21]</sup>利用近红外光谱技术实现了苹果成熟度无损检测, 选定的特征波长和光谱指数可以为开发测定苹果成熟度的无损设备提供参考。Byun 等<sup>[22]</sup>利用近红外光谱技术研制了一种用于苹果糖含量的近红外(NIR)光谱仪器, 实现了对苹果糖含量的无损检测。Luo 等<sup>[23]</sup>提出了一种基于近红外光谱的快速方法来测定整串赤霞珠葡萄的可溶性固体含量 (SSC)、pH 值和总酚含量 (TPC) 的方法, 实现了对赤霞珠葡萄整串的化学参数无损检测。目前大多数的研究都侧重于采后和贮藏<sup>[24-28]</sup>中内部品质指标的检测与变化, 利用近红外光谱技术对生长期红提 SSC、TA、pH、FI 和 MC 等五个内部指标的研究还未见报道。

本文以生长期红提为研究对象, 利用近红外光谱技术分别建立准确检测红提各内部指标

(SSC、TA、pH、FI 和 MC) 的最优无损检测模型, 所建最优模型可为生长期红提内部品质 SSC、TA、pH、FI 和 MC 的无损快速检测提供新的方法。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料与仪器

实验选取生长期红提作为样本。从葡萄园选取 10 棵红提植株并逐一进行编号。红提生长的周期大约为两个月, 实验从红提开花后的第 61 天开始, 每隔 5 天进行 1 次样本采集, 每次采集 10 串葡萄, 共采集 12 次。样本于实验当天采摘并进行编号, 之后保存于恒温恒湿箱。

在每串葡萄串的顶部、中部、底部各挑选 5 粒大小相近、完好无损的果粒, 每串共采集 15 粒果粒作为实验材料。因单个果粒进行挤压后挤出的果汁较少, 无法利用实验方法同时对红提 SSC、TA、pH 指标的测定, 所以在实验材料中挑选 3 粒红提作为红提 SSC、TA、pH 指标检测的 1 个样本, 每串测定 3 个样本, 需要 9 粒红提。从每串红提采集的实验材料中分别挑选 3 粒作为红提硬度和含水率的实验样本, 每次试验分别取用 1 粒红提, 两个指标各进行 3 次实验。

美国 Thermo Fisher 生产的 Antaris II 傅里叶变换近红外光谱仪; 上海新苗医疗器械制造有限公司生产的恒温恒湿箱(HPX-25085H-III); 申光 WAY(2WAJ) 阿贝尔折射仪; TMS-PRO 型质构仪, 美国 FTC 公司; 余姚市星辰仪表厂生产电热鼓风干燥箱(XGQ-2000); 电子天平。

### 1.2 实验方法

#### 1.2.1 近红外光谱数据采集

将经过恒温恒湿箱处理后的样本用 Antaris II 傅里叶变换近红外光谱仪进行光谱采集。选择积分球模块, 利用该仪器采集样本  $10000\text{ cm}^{-1}$ ~ $4000\text{ cm}^{-1}$  范围的漫反射光谱信息。

#### 1.2.2 标准理化值测定

对样本进行完光谱采集后, 立即对样本进行标准理化值测定, 各指标检测方法如下:  
SSC 测定: 将样本放入到红提果粒挤压装置榨汁, 测定经纱布过滤后的果汁的 SSC 值。样本 SSC 测定参照 NY/T 2637-2014《水果、蔬菜制品可溶性固形物含量的测定——折射装置法》。

TA 测定: TA 测定方法与 SSC 测定方法基本相同, 参照 GB/T 12456-2008《食品中总酸的测定》方法。

pH 测定: 利用校准后的 pH 计对测定完 SSC 和总酸剩余后的果汁进行 pH 值的测定。

FI 测定: 将进行光谱检测后的红提样本横向放置在质构仪的实验台上, 采用 P100/R 探头进行压缩。设置质构仪的测前速度为  $2.0\text{ mm/s}$ , 测试速度为  $1.0\text{ mm/s}$ , 测后速度为  $2.0\text{ mm/s}$ , 起始力设置为  $0.05\text{ N}$ , 压缩距离为  $8.0\text{ mm}$ 。FI 的测定值为压缩过程中样本承受的最大压力值

MC 测定: 含水率采用国标 GB 5009.3—2016《食品中水分的测定》进行测定。

### 1.3 模型建立及评价方法

PLSR 算法是一种较优的通过最小化偏差平方和实现对曲线进行线性拟合的算法，具有较多的优点。各指标均建立 PLSR 模型。模型的评价由预测集相关系数 ( $R_p$ )、均方根误差 (RMSEP) 和残差预测偏差 (RPD) 进行模型性能的评价<sup>[1]</sup>。

## 2 结果与分析

### 2.1 光谱预处理

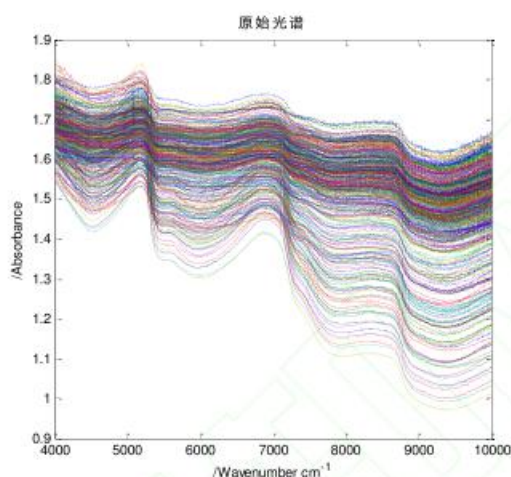


图 1 原始光谱信息

Fig.1 Raw spectral information

由图 1 可知，样本光谱曲线中存在 4 个明显波谷，分别为  $4520\text{ cm}^{-1}$ 、 $6000\text{ cm}^{-1}$ 、 $7900\text{ cm}^{-1}$ 、 $9350\text{ cm}^{-1}$ 。为消除噪声等干扰信息，本研究选择标准正态变量变换 (Standard Normal Variable transformation, SNV) 等预处理方法对原始光谱 (RAW) 进行处理<sup>[29-30]</sup>。采用不同预处理方法对 RAW 进行处理后所建 PLSR 检测模型的结果如表 1 所示。

对于 SSC, TA, FI, MC 来说，经过 SG 预处理后的原始光谱所建 PLSR 模型的  $R_c$  (每个模型对应的  $R_c$  值分别为 0.9834, 0.9799, 0.9241, 0.9223) 和  $R_p$  (每个模型对应的  $R_p$  值分别为 0.9444, 0.9697, 0.9155, 0.8886) 较大，且校正集和预测集的均方根误差较小。因此，针对 SSC, TA, FI, MC 四个指标，下文选取 SG 预处理后进行优化。对于 pH 经 MA 预处理后所建 PLSR 效果较好，选取 MA 预处理后进行优化。

表 1 采用不同预处理方法的全波长 PLSR 检测模型

Table 1 Full-band PLSR prediction model using different preprocessing methods

指标	预处理	LVs 主因子数	校正集		预测集		RPD
			$R_c$	RMSEC	$R_p$	RMSEP	
SSC	RAW	9	0.9635	0.9128	0.9104	1.3456	2.2971
	SNV	12	0.9820	0.6439	0.9113	1.3266	2.2988
	SG	12	0.9834	0.6176	0.9444	1.0941	3.0490
	MSC	13	0.9804	0.6277	0.9089	1.3485	2.2683
	MA	10	0.9416	1.1474	0.8951	1.4507	2.1429
	MC	9	0.9616	0.9348	0.9114	1.3376	2.3527
	Nor	9	0.9599	0.9599	0.8991	1.4285	2.2107
TA	RAW	9	0.9776	1.9762	0.9657	3.0839	3.5477

	SNV	10	0.9779	1.9617	0.9638	3.1588	3.4574
	SG	10	0.9799	1.8713	0.9697	2.8647	3.8977
	MSC	10	0.9771	1.9959	0.9628	3.1949	3.4185
	MA	11	0.9639	2.4976	0.9579	3.3612	3.4129
	MC	9	0.9674	2.3771	0.9457	3.8147	2.8195
	Nor	9	0.9755	2.0629	0.9651	3.1012	3.5166
pH	RAW	7	0.9370	0.1828	0.9351	0.1910	2.6190
	SNV	7	0.9370	0.1829	0.9391	0.1854	2.7272
	SG	15	0.9860	0.0870	0.9668	0.1386	3.8078
	MSC	7	0.9365	0.1836	0.9390	0.1856	2.7231
	MA	12	0.9885	0.0792	0.9815	0.1045	5.0952
	MC	6	0.9281	0.1949	0.9262	0.2042	2.3806
	Nor	7	0.9371	0.1827	0.9344	0.1921	2.6013
FI	RAW	7	0.9239	9.0404	0.9061	8.9320	2.2733
	SNV	6	0.9238	9.0414	0.9013	9.1305	2.1717
	SG	6	0.9241	9.0364	0.9155	8.4327	2.3738
	MSC	7	0.9238	9.0804	0.9072	8.8552	2.2746
	MA	6	0.9135	9.6202	0.8921	9.5306	2.1115
	MC	7	0.9218	9.1667	0.8762	10.2534	1.9845
	Nor	7	0.9206	9.2367	0.9045	9.0176	2.2589
MC	RAW	10	0.9147	0.9540	0.8496	1.3618	1.6058
	SNV	10	0.9115	0.9749	0.8581	1.3261	1.6392
	SG	9	0.9223	0.8886	0.8812	1.2185	1.8262
	MSC	10	0.9119	0.9738	0.8615	1.3117	1.6521
	MA	10	0.8946	1.0278	0.8474	1.3733	1.6541
	MC	10	0.9215	0.8920	0.8378	1.4166	1.5467
	Nor	10	0.9162	0.9439	0.8450	1.3817	1.5853

## 2.2 样本集划分

实验中每个指标各采集 360 个样本，利用 SPXY 算法按照 3:1 比例划分为校正集和预测集<sup>[31]</sup>。SSC、pH、TA、FI 和 MC 分布范围、校正集及预测集的平均值如表 2 所示。SSC、pH、TA、FI 和 MC 校正集的分布范围大于预测集的分布范围，证明通过 SPXY 算法划分后校正集的样本更具有代表性，校正集样本分布的范围更广对根据校正集所建模型的稳定性及准确性都会有所提升，利用 SPXY 算法划分样本集达到了较好的效果。

表 2 生长期红提样本利用 SPXY 算法划分样本集的数据统计

Table 2 Growth statistics of red globe grape extract samples during growing period using SPXY algorithm to divide the sample set

品质参数	校正集			预测集		
	数量	范围	平均值	数量	范围	平均值
SSC/°Brix	270	4.5~19.0	11.9	90	4.5~18.0	11.9
TA/%	270	2.254~37.663	9.629	90	2.320~37.302	11.538
pH	270	2.68~4.62	3.64	90	2.68~4.52	3.57
FI/N	270	9.414~121.305	33.453	90	13.149~102.930	32.475

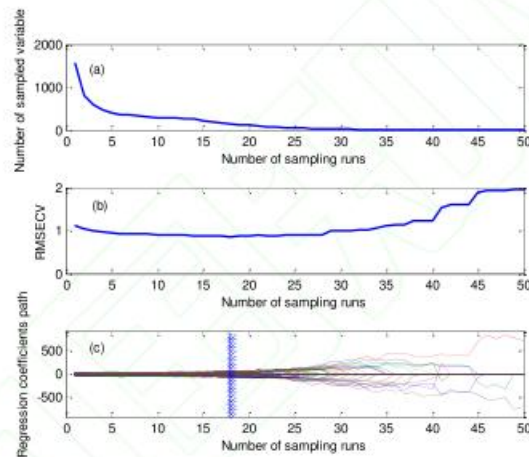
### 2.3 特征波长的提取

将经过光谱预处理的原始光谱利用 CARS 算法, SPA 算法和 UVE 算法提取特征波长, 以下以 SSC 特征波长提取过程举例说明<sup>[32]</sup>。

CARS 的提取过程见图 2, 蒙特卡罗采样设置为 50 次, 5 折交叉验证。当 RMSECV 值达到最小值时, 为所建 PLSR 模型的最优结果, 当运行为图中竖线的位置时, RMSECV 值最小值时, 采样运行了 18 次。

SPA 算法<sup>[33]</sup>提取过程见图 3, 根据 RMSE 的变化来确定被选取的特征变量, 随着变量个数的增加, RMSE 先迅速下降, 表明光谱中的无用信息被高效剔除, 然后趋于平稳。图 4 (a) 中 RMSE 取得最小值 24 为选定的波长个数, 最终选取的波长点索引见图 3(b), 模型取得最好的效果。

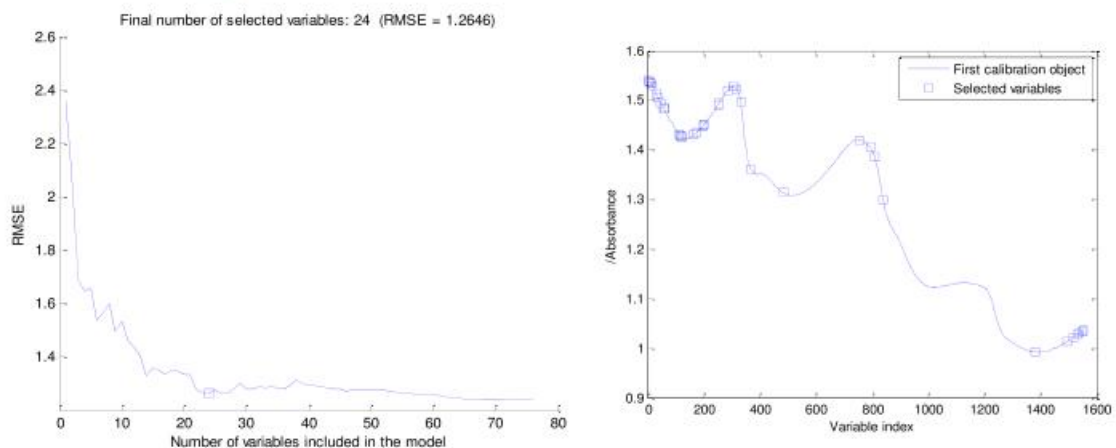
UVE 提取特征波长的后选取的结果见图 4, 设定噪声矩阵最大稳定性绝对值的 99% 作为剔除阈值, 左侧黄色曲线为光谱信息, 右侧红色曲线为添加的噪声信息, 只保留两条虚线外侧的有用信息。



(a)采样变量数; (b)RMSECV; (c)回归系数路径

图 2 基于 CARS 算法的样本的 SSC 特征波长提取图

Fig.2 Characteristic wavelength selection chart of SSC content in red globe grape extraction based on CARS algorithm



(a)模型 RMSE 的变化 (b)SPA 选择的最优特征波长

图 3 基于 SPA 算法的红提 SSC 含量特征波长选取图

Fig.3 Characteristic wavelength selection chart of SSC content in red globe grape extraction based on SPA algorithm

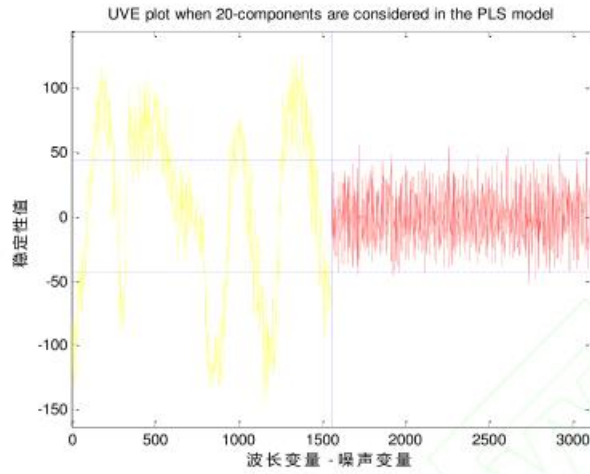


图 4 基于 UVE 算法的红提 SSC 含量特征波长选取图

Fig.4 Characteristic wavelength selection chart of SSC content in red globe grape extraction based on UVE algorithm

## 2.4 特征波长提取方法建立的 PLSR 模型效果

表 3 基于不同特征波段提取方法建立的 PLSR 模型效果

Table 3 Effects of PLSR Models Based on Different Feature Band Extraction Methods

特征波段提取方法	因子数	特征数目	校正集		预测集		RPD
			$R_c$	RMSEC	$R_p$	RMSEP	
SG-CARS	10	154	0.9779	0.7125	0.9603	0.9362	3.5968
SG-SPA	12	24	0.9449	1.1154	0.9235	1.2663	2.5763
SG-UVE	13	996	0.9849	0.5908	0.9316	1.2151	2.7493
SG-CARS-SPA	13	32	0.9811	0.6764	0.9787	0.6617	4.8637
SG-UVE-SPA	11	20	0.9289	1.2617	0.9036	1.4479	2.3262
SG-CARS	9	78	0.9814	1.8012	0.9801	2.3019	4.5187
SG-SPA	9	16	0.9637	2.5063	0.9624	2.8910	3.8750
SG-UVE	9	1207	0.9790	1.9153	0.9702	2.8431	3.9255
SG-CARS-SPA	20	44	0.9816	1.7934	0.9811	2.2835	4.9006
SG-UVE-SPA	15	31	0.9644	2.4815	0.9608	2.8946	3.8606
MA-CARS	9	60	0.9839	0.0935	0.9826	0.1011	5.2468
MA-SPA	11	27	0.9835	0.0946	0.9819	0.1032	5.1235
MA-UVE	10	1399	0.9862	0.0868	0.9814	0.1042	5.1114
MA-CARS-SPA	12	27	0.9878	0.0816	0.9870	0.0867	6.0939
MA-UVE-SPA	12	20	0.9812	0.1011	0.9830	0.100	5.3303
SG-CARS	9	42	0.9579	6.8049	0.9568	6.1870	3.4453
SG-SPA	7	26	0.9237	9.0598	0.9212	8.1288	2.4308
SG-UVE	7	1067	0.9233	9.0790	0.9079	8.8303	2.2944
SG-CARS-SPA	9	13	0.9320	8.5719	0.9362	7.3602	2.7195

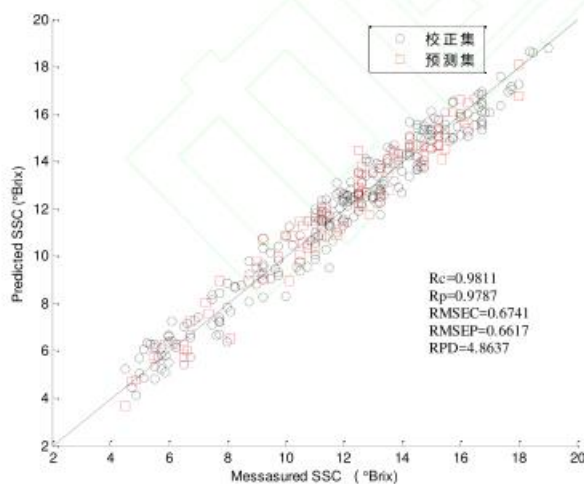


SG-UVE-SPA	6	18	0.9172	9.4204	0.9099	8.6666	2.2538
SG-CARS	9	78	0.9384	0.7944	0.9329	0.9277	2.5825
SG-SPA	11	26	0.8850	1.0705	0.8699	1.2710	1.7250
SG-UVE	9	1226	0.9189	0.9074	0.8729	1.2588	1.7294
SG-CARS-SPA	13	45	0.9388	0.7921	0.9206	1.0102	2.3351
SG-UVE-SPA	20	29	0.8925	1.0372	0.8794	1.2304	1.7695

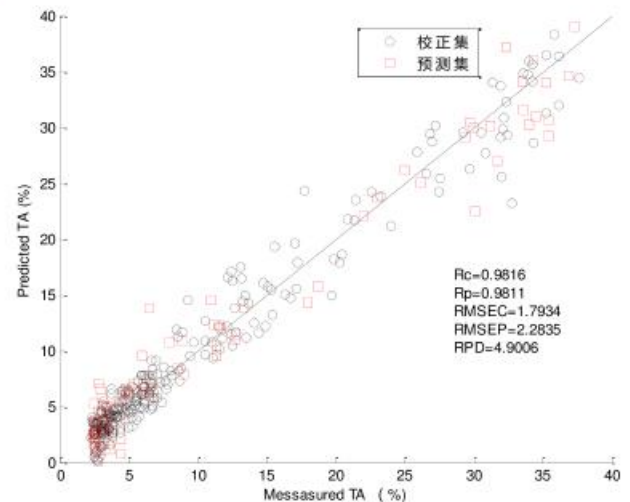
结合表 1 选取的最优预处理方法, 对于 SSC, TA, FI, MC 来说, 经过 SG 预处理后的原始光谱所建 PLSR 效果最佳; 对于 pH 指标, 原始光谱进行 MA 预处理后所建 PLSR 模型效果最佳。本文对预处理后的光谱采用 UVE 算法, CARS 算法和 SPA 算法等一次降维算法提取特征波长后建立 PLSR 模型。由表 3 可知, 一次降维算法对样本的 SSC, TA 指标的提取效果较差。经过二次降维算法提取特征波段后, 样本 SSC 和 TA 的 CARS-SPA 模型的 RPD 分别为 4.8637 和 4.9006, 模型的性能得到了提升并简化了模型。原始光谱经过 MA 预处理建立的 pH 的 PLSR 模型也需要进行二次特征波长提取, 二次降维后建立的 CARS-SPA 模型的 RPD 为 6.0939。对于 FI 和 MC 两个指标, 经过 CARS 特征波段提取后, FI 和 MC 的 RPD 达到 3.4453 和 2.5825, 所建模型的效果较好。

## 2.5 红提内部品质检测模型的检测结果

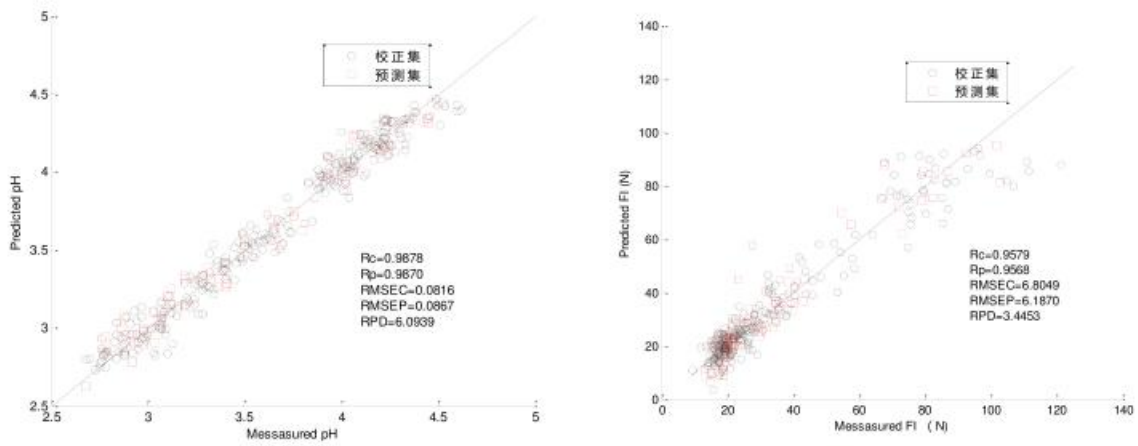
对于红提 SSC、TA 和 pH, CARS-SPA 组合降维算法提取特征波长效果最佳; 对于红提 FI 和 MC, 一次降维算法 CARS 提取特征波长效果最佳。在特征波长提取的基础上建立的红提的 SSC、TA 的最优检测模型为 SG-CARS-SPA-PLSR 模型, pH 的最优检测模型为 MA-CARS-SPA-PLSR 模型, FI 和 MC 的最优检测模型为 SG-CARS-PLSR 模型。所建立的红提的 SSC、TA、pH、FI 和 MC 的最优 PLSR 模型的 RPD 值均大于 2.5, 说明模型检测效果较好。图 5 为样本的检测效果图, 五个模型的  $R_c$  的值分别为: 0.9811, 0.9816, 0.9878, 0.9579, 0.9384, 五个模型的  $R_p$  的值分别为: 0.9787, 0.9811, 0.9870, 0.9568, 0.9329, 五个模型的 RPD 的值分别为: 4.4837, 4.9006, 6.0939, 3.4453, 2.5825。



(a)基于 SG-CARS-SPA 红提 SSC 最优 PLSR 模型

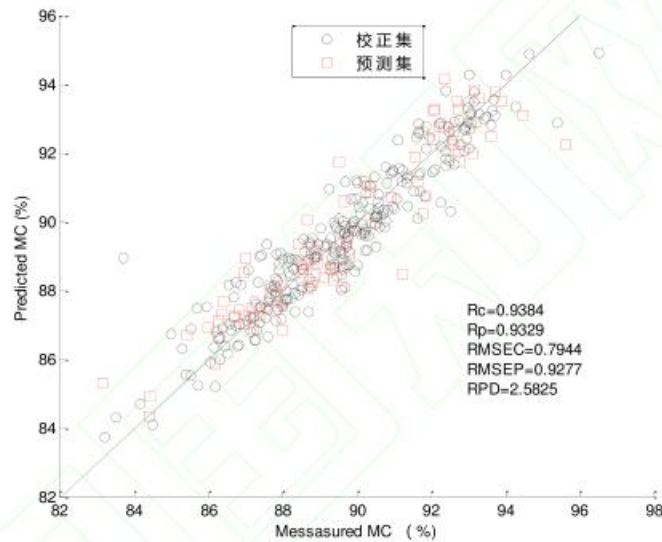


(b)基于 SG-CARS-SPA 红提总酸最优 PLSR 模型



(c)基于 MA-CARS-SPA 红提 pH 最优 PLSR 模型

(d)基于 SG-CARS 红提硬度最优 PLSR 模型



(e)基于 SG-CARS 红提含水率最优 PLSR 模型

图 5 基于最优特征波长组合建立的红提内部品质各指标的 PLSR 模型

Fig.5 PLSR model of various indexes of internal quality of red globe grape extract based on optimal characteristic wavelength combination

## 2.6 讨论与展望

利用近红外光谱技术对生长期的红提进行光谱实验采集后,不同生长期红提的光谱曲线都呈现出相同的变化趋势,波峰及波谷的位置比较固定,光谱曲线的变化产生的原因为红提内部物质,主要是含氢基团的物质对不同波段光谱的吸收和反射特性不同,SSC、TA、pH、FI 和 MC 等指标因内部各物质的不同而有所差异。说明光谱在进行红提内部各指标检测时光谱曲线比较稳定,也从另外一个方面说明了用近红外光谱技术进行检测的可靠性和稳定性。红提生长过程中内部品质的变化会引起光谱曲线的变化,可通过本文建立的最优模型实现对红提各内部品质指标的无损检测。在红提生长过程中内部物质会发生一定的转化,SSC、TA、pH、FI 和 MC 等指标因内部各物质的不同而有所差异,随着果实的成熟,SSC 和 pH 逐渐的增加,TA、FI 和 MC 逐渐的减小,说明果实品尝的甜度会慢慢增加,果实逐渐成熟。

后期将在本文的研究基础上,深入探究红提成熟度各内部指标的转化特性,建立红提成熟度与近红外光谱特征波长的对应关系模型。

### 3 结论

本文选取生长期内的红提作为研究对象,利用 Antaris II 近红外光谱仪采集了 360 个红提样本的近红外光谱信息。通过光谱预处理和各种降维算法提取光谱信息的特征波长建立了红提的 SSC、TA、pH、FI 和 MC 的最优 PLSR 检测模型。得到的结论如下:

(1) 对于红提 SSC、TA 和 pH, CARS-SPA 组合降维算法提取特征波长效果最佳;对于红提 FI 和 MC,一次降维算法 CARS 提取特征波长效果最佳。

(2) 红提的 SSC、TA 的最优检测模型为 SG-CARS-SPA-PLSR 模型, pH 的最优检测模型为 MA-CARS-SPA-PLSR 模型, FI 和 MC 的最优检测模型为 SG-CARS-PLSR 模型。

(3) 红提 SSC、TA、pH、FI 和 MC 的最优检测模型的 RPD 的值分别为: 4.4837、4.9006、6.0939、3.4453、2.5825,各指标最优检测模型的  $R_p$  都大于 0.93,RPD 均高于 2.5,表明以上模型均具有较好的检测效果,实现了各内部指标的准确检测。本文建立的各项检测模型可为生长期红提内部品质的无损快速检测提供新的方法。

#### 参考文献:

- [1] 高升,王巧华,李庆旭,等.基于近红外光谱的红提维生素 C 含量、糖度及总酸含量无损检测方法[J].分析化学,2019,47(06):941-949. [GAO Sheng, WANG Qiaohua, LI Qingxu, et al. Non-destructive detection of vitamin C, sugar content and total acidity of red globe grape based on near-infrared spectroscopy[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry,2019,47(06):941-949.]
- [2] 陈辰,鲁晓翔,张鹏,等.红提葡萄 V<sub>2</sub>C 含量的可见/近红外检测模型[J].食品与机械,2015,31(05):70-74. [CHEN Chen, LU Xiaoxiang, ZHANG Peng, et al. Determination of vitamin C in red globe grape based on visible/near-infrared diffuse reflectance spectroscopy[J]. Food & Machinery, 2015,31(05):70-74.]
- [3] 田海龙,张平,农绍庄,等.基于 TPA 测试法对 1-MCP 处理后葡萄果实实质构性能的分析[J].食品与机械,2011,27(03):104-107. [TIAN Hailong, ZHANG Ping, NONG Shaozhuang, et al. Analysis on texture properties of treated grape fruit with 1-MCP based on TPA Test[J]. Food & Machinery,2011,27(03):104-107.]
- [4] ZHANG D, XU L, WANG Q, et al. The optimal local model selection for robust and fast evaluation of soluble solid content in melon with thick peel and large size by Vis-NIR spectroscopy[J]. Food Analytical Methods, 2018, 12:1-12.
- [5] 邓云,吴颖,李云飞.温度和相对湿度对采后葡萄浆果硬度的影响[J].食品科学,2007(03):46-49. [DENG Yun, WU Ying, LI Yunfei. Effects of temperature and relative humidity on postharvest grapes berry firmness[J]. Food Science, 2007(03):46-49.]
- [6] 朱丹实,张巧曼,曹雪慧,等.湿度条件对巨峰葡萄贮藏过程中水分及质构变化的影响[J].食品科学,2014,035(022):340-345. [ZHU Danshi, ZHANG Qiaoman, CAO Xuehui, et al. Effect of relative humidity on the changes in water and texture of kyoho grape during storage[J]. Food Science, 2014, 035(022):340-345.]
- [7] 孙世鹏,彭俊,李瑞,等,Vázquez-Arellano MANUEL,傅隆生.基于近红外高光谱图像的冬枣损伤早期检测[J].食品科学,2017,38(02):301-305. [SUN Shipeng, PENG Jun, LI Rui, et al. Early detection of mechanical damage in chinese winter Jujube(Zizyphus jujuba Mill. cv. Dongzao) using NIR hyperspectral images[J]. Food Science, 2017,38(02):301-305.]
- [8] 冯迪,纪建伟,张莉,等.基于高光谱成像提取苹果糖度与硬度最佳波长[J].发光学报,2017,38(06):799-806. [FENG Di, JI Jianwei, ZHANG Li, et al. Optimal wavelengths extraction of apple brix and firmness based on hyperspectral imaging[J]. Chinese Journal of Luminescence, 2017,38(06):799-806.]
- [9] 何嘉琳,乔春燕,李冬冬,等.可见-近红外高光谱成像技术对灵武长枣 VC 含量的无损检测方法[J].食品科学,2018,39(06):194-199. [HE Jialin, QIAO Chunyan, LI Dongdong, et al. Non-destructive detection of vitamin C content in "Lingwu Changzao" Jujubes (Zizyphus jujuba Mill. cv. Lingwu Changzao) using visible near infrared hyperspectral imaging[J]. Food Science, 2018,39(06):194-199.]

- [10] 李江波,彭彦昆,陈立平,等.近红外高光谱图像结合 CARS 算法对鸭梨 SSC 含量定量测定[J].光谱学与光谱分析,2014,34(05):1264-1269. [LI Jiangbo, PENG Yankun, CHEN Liping, et al. Near-Infrared hyperspectral imaging combined with CARS algorithm to quantitatively determine soluble solids content in "Ya" pear[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2014,34(05):1264-1269.]
- [11] 潘磊庆,方莉,周彬静,等.光学参数测量系统和原理及其在果蔬品质检测方面的研究进展[J].南京农业大学学报,2021,44(03):401-411. [PAN Leiqing, FANG Li, ZHOU Binjing, et al. System and principle of optical properties measurement and advances on quality detection of fruits and vegetables[J]. Journal of Nanjing Agricultural University, 2021,44(03):401-411.]
- [12] 卢伟,蔡苗苗,张强,等.高光谱和集成学习的黑枸杞快速分级方法[J].光谱学与光谱分析,2021,41(07):2196-2204. [LI LU Wei, CAI Miaomiao, ZHANG Qiang, et al. Fast classification method of black Goji berry (*Lycium Ruthenicum* Murr.) based on hyperspectral and ensemble learning[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021,41(07):2196-2204.]
- [13] 胡静,黄金发,刘小丹,等.基于近红外光谱技术的猕猴桃品质检测研究进展[J].食品研究与开发,2022,43(02):196-201. [HU Jing, HUANG Jinfa, LIU Xiaodan, et al. Progress in research into kiwifruit quality assessment based on Near-infrared spectroscopy[J]. Food Research and Development, 2022,43(02):196-201.]
- [14] 李艳秋,马川兰.现代近红外光谱分析在食品检测中的应用[J].现代食品,2021(08):157-159. [LI Yanqiu, MA Chuanlan, LIU Xiaodan. Application of modern near infrared spectroscopy in food detection[J]. Modern Food, 2021(08):157-159.]
- [15] 张静,徐阳,姜彦武,等.近红外光谱技术在葡萄及其制品品质检测中的应用研究进展[J].光谱学与光谱分析,2021,41(12):3653-3659. [ZHANG Jing, XU Yang, JIANG Yanwu, et al. Recent advances in application of Near-Infrared spectroscopy for quality detections of grapes and grape Products [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021,41(12):3653-3659.]
- [16] 肖慧,孙柯,屠康,等.便携式葡萄专用可见-近红外光谱检测仪器开发与实验[J].食品科学,2019,40(08):300-305. [XIAO Hui, SUN Ke, TU Kang, et al. Development and application of a specialized portable visible and Near-Infrared instrument for grape quality detection[J]. Food Science, 2019,40(08):300-305.]
- [17] Costa D, Mesa N, Freire M S, et al. Development of predictive models for quality and maturation stage attributes of wine grapes using vis-nir reflectance spectroscopy[J]. Postharvest Biology and Technology, 2019, 150:166-178.
- [18] 刘燕德,徐海,孙旭东,等.不同产地苹果糖度可见近红外光谱在线检测[J].中国光学,2020,13(03):482-491. [LIU Yande, XU Hai, SUN Xudong, et al. On-line detection of soluble solids content of apples from different origins by visible and near-infrared spectroscopy[J]. Chinese Optics, 2020,13(03):482-491.]
- [19] 王转卫,迟茜,郭文川,赵春江.基于近红外光谱技术的发育后期苹果内部品质检测[J].农业机械学报,2018,49(05):348-354. [WANG Zhuanwei, CHI Qian, GUO Wenchuan, et al. Internal quality detection of apples during late developmental period based on Near-infrared spectral technology[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2018,49(05):348-354.]
- [20] 罗一甲,祝赫,李潇涵,等.赤霞珠酿酒葡萄总酚含量的近红外光谱定量分析[J].光谱学与光谱分析,2021,41(07):2036-2042. [LUO Yijia, ZHU He, LI Xiaohan, et al. Quantitative analysis of quantitative analysis of total phenol content in cabernet sauvignon grape based Near-Infrared spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021,41(07):2036-2042.]
- [21] Mza B, Bo Z, Hao L, et al. Determination of bagged 'Fuji' apple maturity by visible and near-infrared spectroscopy combined with a machine learning algorithm - ScienceDirect[J]. Infrared Physics & Technology, 2020, 111.
- [22] Byun S. Design of an Integrated Near-Infrared Spectroscopy Module for Sugar Content Estimation of Apples[J]. Micromachines 2022,4(13):2-14.
- [23] Luo Y, Dong J, Shi X, et al. Quantitative detection of soluble solids content, pH, and total phenol in Cabernet Sauvignon grapes based on near infrared spectroscopy[J]. International Journal of Food Engineering, 2021, 17(5).
- [24] Arazuri S, Jarén C, Arana JI. Selection of the Temperature in the Sugar Content Determination of Kiwi Fruit[J]. International Journal of Infrared and Millimeter Waves, 2005, 26:607-616.
- [25] Bobelyn E, Serban AS, Nicu M, Lammertyn J, Nicolai BM, Saeys W. Postharvest Quality of Apple Predicted by Nir-Spectroscopy: Study of the Effect of Biological Variability on Spectra and Model Performance[J]. Postharvest Biology & Technology, 2010, 55:133-143.
- [26] Ignat T, Lurie S, Nyasordzi J, Ostrovsky V, Egozi H, Hoffman A, Friedman H, Weksler A, Schmilovitch ZE. Forecast of Apple

- Internal Quality Indices at Harvest and During Storage by Vis-Nir Spectroscopy[J]. *Food & Bioprocess Technology*, 2014, 7:2951-2961.
- [27] Muhammad A , Zou X , Elrasheid T H , et al. Near-infrared spectroscopy coupled chemometric algorithms for prediction of antioxidant activity of black goji berries ( *Lycium ruthenicum* Murr.)[J]. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 2018, 12:2366-2376.
- [28] Amodio M L , Ceglie F , Chaudhry M , et al. Potential of NIR spectroscopy for predicting internal quality and discriminating among strawberry fruits from different production systems[J]. *Postharvest Biology and Technology*, 2017, 125:112-121.
- [29] 焦俊,圣阳,王标,等.光谱技术在核桃检测领域的研究进展[J].*激光与光电子学进展*,2021,58(22):44-54. [JIAO Jun, SHENG Yang, WANG Biao, et al. Research progress on spectroscopy in walnut detection[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2021,58(22):44-54.]
- [30] 赵杰文,毕夏坤,林颢,等.鸡蛋新鲜度的可见-近红外透射光谱快速识别[J].*激光与光电子学进展*,2013,50(05):213-220. [ZHAO Jiewen, BI Xiakun, LIN Hao, et al. Visible-Near-Infrared transmission spectra for rapid analysis of the freshness of eggs[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013,50(05):213-220.]
- [31] 高升,王巧华.基于可见/近红外透射光谱技术的红提糖度和含水率无损检测[J].*中国光学*,2021,14(03):566-577. [GAO Sheng, WANG Qiaohua. Non-destructive testing of red globe grape sugar content and moisture content based on visible/near infrared spectroscopy transmission technology [J]. *Chinese Optics*, 2021,14(03):566-577.]
- [32] 陈远哲,王巧华,高升,等.基于近红外光谱的淡水鱼贮藏期质构品质的无损检测模型[J].*激光与光电子学进展*,2021,58(12):507-515. [CHEN Yuanzhe, WANG Qiaohua, GAO Sheng, et al. Nondestructive testing model for textural quality of freshwater fish in storage using Near-Infrared spectroscopy[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2021,58(12):507-515.]
- [33] LIU D, SUN D W, ZNEG X A. Recent advances in wavelength selection techniques for hyperspectral image processing in the food industry[J]. *Food and Bioprocess Technology*, 2014 7:307-323.