马铃薯可溶性固形物的近红外光谱快速定量模型及优化

陈素彬1,杨华1,罗蓉2,胡振1

(1.南充职业技术学院,四川南充 637131;2.西南油气田公司川中油气矿地质研究所,四川遂宁 629000)

摘要 「目的]为了检测马铃薯的饲用品质,用近红外光谱法建立马铃薯可溶性固形物含量(SSC)快速测定模型。[方法]以偏最小二乘 法(PIS)建立原始光谱的校正模型为基础,用蒙特卡洛交互验证法别除异常样本,经比较选择标准正态变量和均值中心化算法进行光 谱预处理、光谱-参考值共生距离法划分样本集,然后对所得数据分别以 PLS 和最小二乘支持向量机(LS-SVM)建立定量校正模型,并 用竞争性自适应重加权采样法和风驱动-差分进化混合算法完成相应模型的特征波长和参数优化。[结果]优化的 PLS 模型和 LS-SVM 模型波长变量分别减至全光谱的 8.67% \ 67.80%, 二者的 R,² \ R,² \ RMSEC \ RMSEP \ RPD 分别为 0.970 8 \ 0.954 2 \ 0.258 6 \ 0.262 8 \ 5.91 和 0.987 3、0.983 0、0.170 5、0.173 4、8.96, LS-SVM 模型的各项性能指标全面优于 PLS 模型。[结论]2 种定量模型均可用于马铃薯 SSC 的实 际检测工作。

可溶性固形物;近红外光谱分析;定量模型;偏最小二乘法;最小二乘支持向量机 关键词 中图分类号 TS 255.7 文献标识码 A 文章编号 0517-6611(2021)20-0205-05 开放科学(资源服务)标识码(OSID): doi:10.3969/j.issn.0517-6611.2021.20.055



Rapid Quantitative Model and Optimization of Potato Soluble Solids by Near Infrared Spectroscopy

CHEN Su-bin¹, YANG Hua¹, LUO Rong² et al (1. Nanchong Vocational and Technical College, Nanchong, Sichuan 637131;2. Geological Resarch Institute of Central Sichuan Oil and Gas District of Southwest Oil and Gasfield Company, Suining, Sichuan 629000) Abstract [Objective] In order to test the feeding quality of potatoes, the quick measurement model of potato soluble solids content (SSC) had been established by means of the near infrared spectroscopy. [Method] The establishment of the original spectrum correction model was taken as the basis by the partial least squares (PLS), the abnormal samples were eliminated by using the Monte Carlo cross validation method, the sample set was divided by the spectrum pretreatment and spectral-reference value symbiotic distance method through comparing and selecting the standard normal variable and mean centralized algorithm, and then the quantitative calibration model of the obtained data was established with the PLS and the least squares-support vector machine (LS-SVM) respectively, and the characteristic wave length and parameters of the corresponding model were optimized by the competitive adaptive reweighted sampling method and the wind-driven differential evolution hybrid algorithm. [Result] The wavelength variables of the optimized PLS model and LS-SVM model were reduced to the 8.67% and 67.80% of the full spectrum respectively, and the R_e², R_p², RMSEC, RMSEP and RPD of the two models were 0.970 8, 0.954 2, 0.258 6, 0.262 8, 5.91 and 0.987 3, 0.983 0, 0.170 5, 0.173 4, 8.96, respectively. The various performance indexes of LS-SVM model were fully superior to those of the PLS model. [Conclusion] The two quantitative models can be used for practical detection of potato SSC. Key words Soluble solids; Near infrared spectroscopy; Quantitative model; PLS; LS-SVM

马铃薯是重要的粮食、饲料兼用作物,其可食部分富含 有益于动物健康的各种物质成分,为世界公认的全价食品和 优良饲料,可用于鲜食和加工原料。可溶性固形物含量(soluble solids content,SSC)是马铃薯的主要品质指标之一,直接 反映其质量和加工适宜性^[1]。

在实际检测和相关研究中,SSC 的测定常用折射仪(折 光计)法和手持糖度计法^[2-3],相应国家标准和农业行业标准 分别为《食品罐头的检验方法》(GB/T 10786—2006)、《水果 和蔬菜可溶性固形物含量的测定 折射仪法》(NY/T 2637— 2014)。近年来,随着各类新型分析仪器的普及应用和化学 计量学方法、软件技术的不断发展,近红外光谱分析(near infrared spectroscopy,NIRS)技术得到了广泛应用,在SSC检测 方面也取得了一些成果^[4-5]。王世芳等^[6]对西瓜不同部位的 样品集进行近红外光谱检测,其赤道部位样品光谱经归一化 预处理后,建立的偏最小二乘(partial least squares, PLS)模型 预测相关系数为0.864、均方根误差为0.33%;王冬等^[7]采用 PLS 结合全交互验证算法,将 2 种樱桃样品光谱数据与 SSC 测定值建立定量校正模型,其校正决定系数、校正均方根误 差、交互验证决定系数、交互验证均方根误差和相对分析误 差分别为0.9125、0.81、0.8946、0.89、3.38;于怀智等^[8]基于近 红外光谱技术设计了"蒙阴黄桃"内部品质在线无损检测分 级系统,所建 SPA-PLS 模型较优,其 SSC 预测集相关系数和 预测均方根误差分别为 0.916、0.721%。这些研究为应用 NIRS 技术检测 SSC 提供了有效验证,但用于测定马铃薯 SSC 的报道尚不多见。

该试验参考农业行业标准《苹果中可溶性固形物、可滴 定酸无损伤快速测定 近红外光谱法》(NY/T 1841-2010), 以NIRS 法检测马铃薯 SSC 为目标,分别以偏最小二乘 (PLS)和最小二乘支持向量机(least squares-support vector machine, LS-SVM)建立定量模型,并运用化学计量学方法和 软件技术对其进行全面优化,通过性能对比确定较优建模方 案,为同类试验和实际检测提供方法和技术思路。

1 材料与方法

1.1 试验材料 从南充市农贸市场、生猪饲养场和饲料企业 采集新鲜马铃薯样品 213个,其品种、产地和种植条件不尽相 同。获得的样品在实验室统一编号,清洁其表面、于阴凉处风 干,在温度(6±1)℃、相对湿度 80%~85%环境避光保存。

1.2 主要仪器 近红外光谱仪(型号为 MPA),德国 Bruker 公司;阿贝折光仪(型号为 WAY-1S),上海精密仪器厂;组织

基金项目 南充市 2019 年应用技术研究与开发资金项目(19YFZJ0028)。

陈素彬(1967-),女,四川仪陇人,副教授,从事分析检测 作者简介 工作。 收稿日期 2021-02-03

捣碎机(型号为JJ-2),江苏金坛市亿通电子有限公司。

1.3 样品 SSC 参考值测定 随机取马铃薯样品块茎 3~5 个,选择相同部位切碎、混匀,放入组织捣碎机中打浆,用 4 层纱布挤出滤液,弃去最初几滴,按农业行业标准《水果和蔬 菜可溶性固形物含量的测定 折射仪法》(NY/T 2637—2014) 之步骤完成 SSC 测定。

1.4 SSC 快速定量模型建立

1.4.1 样品近红外光谱测量。将马铃薯样品切成圆形片块, 用近红外光谱仪直接测量其漫反射光谱。光谱扫描范围 10 500~7 400 cm⁻¹,以8 cm⁻¹分辨率扫描样品 64 次;每个试 样重复装样、扫描3次,取其平均值为光谱数据。

1.4.2 NIRS 定量模型建立。用 KS 法(kennard-stone)将样 品按 3:1划分为定标集和验证集,以 PLS 法建立定标集样品 光谱与相应 SSC 参考值的校正模型,用该模型预测验证集样 品的 SSC,并以校正决定系数(calibration r-square, R_e^2)、预测 决定系数(prediction r-square, R_p^2)、校正均方差(root mean square error of calibration, RMSEC)、预测均方差(root mean square error of prediction, RMSEP)和相对分析误差(residual predictive deviation, RPD)为指标评价模型性能。

1.5 模型性能优化

1.5.1 异常样本判断与剔除。采用蒙特卡洛交互验证法 (Monte Carlo cross validation, MCCV)。以蒙特卡洛采样法 (Monte Carlo sampling, MCS)取样本总量的 80%组成校正集, 其余样本为验证集,用 PLS 法建模、预测,计算各样本的预测 残差。重复该过程 2 000 次,计算各样本预测残差的均值 (MEAN)和标准差(standard deviation, STD),绘制全部样本 预测残差的 MEAN-STD 分布图,图中均值和标准差较大且 明显离群的样本为异常样本^[9]。

1.5.2 光谱预处理与样本集划分。首先分别尝试均值中心 化(mean centralization, MC)、矢量归一化(vector normalization, VN)、萨维茨基-戈莱平滑(savitzky-golay smoothing, SGS)、一阶导数(first derivative, FD)、标准正态变量变换 (standard normal variable, SNV)、多元散射校正(multiple scattering correction, MSC)和离散小波变换(discrete wavelet transform, DWT)等数据变换算法,然后依次用其他算法与 MC 的 组合方法进行样本光谱预处理;同时分别以 KS 法和光谱-参 考值共生距离法(sample set partitioning based on joint X-Y distance, SPXY)按 3:1划分样本集,用预处理后的样本光谱 与相应 SSC 参考值建模,比较其性能以确定最优的光谱预处 理和样本集划分方案。然后对于以最优方案所得样本数据, 分别用 PLS 和 LS-SVM 方法建模、预测,并进行性能评价与 比较。

1.5.3 建模波长优化。PLS 模型以竞争性自适应重加权采 样法(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)选取特 征波长:用 MCS 法抽取 80%样本为校正集,其余为验证集, 以 PLS 法建模预测,计算波长 j 对目标的贡献 $|b_j|$ 和权重 w_j , 以指数递减函数计算波长变量的保留率 $r_i = ae^{-ki}(a_k)$ 为常 数,i 为采样次数);去掉 $|b_j|$ 较小的波长点, $M \times r_i \land (m)$ 波长数)波长变量中用自适应重加权采样(adaptive reweighted sampling, ARS)法得到样本优选子集,以相应光谱数据建立 PLS 模型,计算其交互验证均方根误差(root mean square error of cross validation, RMSECV)。重复此过程 200 次,取 RMSECV 最小值对应的变量子集为特征波长^[10]。

LS-SVM 模型采用智能搜索算法进行波长变量和参数 优化:基于风驱动优化(wind driven optimization,WDO)和差 分进化(differential evolution,DE)算法构造一种 WDO-DE 混 合优化算法^[11],将其离散化,使连续的实数搜索空间映射到 离散的二进制空间,以各维搜索位置对应全部待选波长,其 值为1则相应波长被选中,反之为未选中,故最终取值为1 的各维即构成特征波长。将待选波长与模型参数 σ^2 、 γ 一起 构成优化变量,并进行二进制编码,用样本数据建立 LS-SVM 模型进行预测,以 RMSECV 为算法适应度,迭代搜索特 征波长和最优建模参数^[12]。

1.5.4 优化模型建立及性能评价。综合应用异常样本判断、 光谱预处理、样本集划分和特征波长选取的结果,得到优化 的定标集和验证集数据,分别建立 PLS 模型和 LS-SVM 模型 进行预测验证。

以 R_c^2 、 R_p^2 、RMSEC、RMSEP 和 RPD 为评价指标,比较 PLS 模型优化前后及 LS-SVM 模型的性能。 R_c^2 越大、RM-SEC 越小,则建模质量越好; R_p^2 越大、RMSEP 越小,则模型 预测能力越强; R_c^2 和 R_p^2 、RMSEC 和 RMSEP 相差少,则模型 精度高、稳健性好。根据国际谷物科技协会标准,模型的 RPD≥3 才能用于实际检测。

1.6 数据处理与建模工具数据记录、统计和结果计算用 Microsoft Excel 2010 完成,光谱预处理和 PLS 建模以 The Unscrambler X 10.4 实施, LS-SVM 建模和模型优化利用 MAT-LAB R2020a 编程实现。

2 结果与分析

2.1 SSC 快速定量模型建立

2.1.1 马铃薯样品近红外光谱测量。213个马铃薯样品的原始近红外光谱见图 1。由图 1 可知,在 9 000~10 500 cm⁻¹波段光谱趋势平缓,7 400~9 000 cm⁻¹波段相对尖锐、吸收峰较多。样品光谱在 7 630 和 8 965 cm⁻¹处存在明显的波谷,而在 7 830、8 216 和 8 833 cm⁻¹左右有较明显的波峰,这些区域含有较多特征光谱信息。不同品种、产地和种植条件的马铃薯样品近红外光谱相似度很高,但谱线较分散,表明各样品的成分一致、含量差异明显。

2.1.2 NIRS 定量模型建立。将全部 213 个样品用 KS 法按 3:1划分样本集后,以无预处理的全光谱数据直接建立 PLS 定量模型,结果发现,用样本集原始 NIRS 数据所建 PLS 定量 模型的 R_e^2 和 R_p^2 分别为 0.723 7、0.660 3, RMSEC 和 RMSEP 分别为 0.784 9、0.800 3, RPD 仅为 1.87, 其各项性能指标较 差, 不能直接用于实际检测。

2.2 模型性能优化

2.2.1 异常样本判断与剔除。用 MCCV 法所得全部样本的 预测残差 MEAN-STD 分布如图 2 所示。从图 2 可看出,全



图 1 马铃薯样品的原始近红外光谱 Fig.1 Original NIRS of potato samples

部样本预测残差的均值和标准差集中分布于坐标原点区域 附近,预测残差均值大于 0.8 的样品有 140 号、81 号、147 号 和 172 号,但其预测残差标准差均较小;预测残差标准差大 于 0.15 的样品有 141 号、148 号、32 号和 33 号,其中 141 号样 品的预测残差均值也较大,故可确定为异常样本。将该样本 剔除后,再以 PLS 法建立 SSC 定量模型,结果发现,其模型的 $R_c^2 和 R_p^2$ 分别为 0.725 3、0.661 0,RMSEC 和 RMSEP 分别为 0.781 8、0.789 5, RPD 仅为 1.90,可见剔除 141 号样本后,所 建 PLS 定量模型的各项性能指标皆有所改善。



图 2 全部样本的预测残差 MEAN-STD 分布 Fig.2 MEAN-STD distribution of prediction residuals for all samples

2.2.2 光谱预处理与样本集划分。分别以 KS 法和 SPXY 法 划分样本集,结果见表 1。从表 1 可以看出,用 KS 法和 SPXY 法划分样本集的结果没有明显差异,2 种方法所得定 标集和验证集样本的 SSC 分布情况极为相似,各项数据均相 差很小。样本集中 SSC 的变化范围较大,最小值和最大值的 样本都划分在定标集中;定标集样本的 SSC 涵盖了验证集样 本的 SSC 范围,验证集样本 SSC 的标准差大于定标集,适合 于建立一个准确、稳健的校正模型。

表 1 KS 法和 SPXY 法所划分的样本集 SSC 分布 Table 1 SSC distribution of sample set divided by KS method and SPXY method

方法 Method	样本集 Sample set	样本数 Sample number	最小值 Minimum//%	最大值 Maximum//%	平均值 Mean//%	标准差 SD//%
KS	定标集	159	4.61	9.38	7.39	1.33
	验证集	53	4.75	9.27	6.94	1.50
SPXY	定标集	159	4.61	9.38	7.36	1.31
	验证集	53	4.74	9.23	7.02	1.55
全部 Total		212	4.61	9.38	7.28	1.38

分别以2种样本集划分方法结合多种光谱预处理方案 处理样本集数据,用 PLS 法建立 SSC 定量模型,结果见表2。 将表2中的数据对比可知,样本光谱经过预处理后,所建 NIR 定量模型的性能皆有提高,其中组合方法的预处理效果 优于单一算法;对于同一种光谱预处理方法,用 SPXY 法划 分样本集所建模型的性能优于 KS 法。显然,光谱预处理结 合样本集划分的最优方案为"'SNV+MC'+SPXY",相应 PLS 校正模型的性能指标 $R_c^2 \ \pi R_p^2 \ D$ 别为 0.970 2、0.936 9, RM-SEC 和 RMSEP 分别为 0.261 9、0.269 1, RPD 为 5.77, 达到了 可用于实际检测的标准。

表 2 不同样本集划分与光谱预处理的性能对比

Table 2	Performance	comparison of	f different	sample set	partition	and	spectral	preprocessing	models
---------	-------------	---------------	-------------	------------	-----------	-----	----------	---------------	--------

预处理方案	KS 浸	长划分样本集	KS method div	vides the sampl	SPXY 法划分样本集 SPXY method divides the sample set						
Pretreatment plan	R_c^2	RMSEC	R_p^2	RMSEP	RPD	R_c^2	RMSEC	R_p^2	RMSEP	RPD	
NONE	0.725 3	0.781 8	0.661 0	0.789 5	1.90	0.728 2	0.784 4	0.664 0	0.811 0	1.92	
MC	0.954 5	0.302 7	0.932 8	0.320 3	4.68	0.963 1	0.298 1	0.929 3	0.297 0	5.23	
VN	0.763 3	0.650 9	0.757 6	0.747 6	2.01	0.773 3	0.654 9	0.749 8	0.750 5	2.07	
SGS(2,3)	0.723 7	0.785 2	0.660 1	0.800 3	1.87	0.728 1	0.784 8	0.653 7	0.811 1	1.91	
FD(2,3)	0.874 0	0.479 3	0.850 3	0.526 7	2.85	0.874 0	0.474 7	0.865 2	0.524 6	2.96	
SNV	0.752 6	0.688 2	0.729 0	0.764 5	1.96	0.754 6	0.691 4	0.721 1	0.787 5	1.97	
MSC	0.752 4	0.688 9	0.728 5	0.764 8	1.96	0.754 4	0.692 1	0.720 6	0.787 9	1.97	
DWT	0.695 9	0.675 8	0.581 2	0.753 6	2.02	0.744 5	0.669 3	0.619 8	0.712 8	2.08	
SGS+MC	0.954 5	0.303 1	0.932 6	0.320 2	4.68	0.963 1	0.288 4	0.929 2	0.297 1	5.23	
SNV+MC	0.961 5	0.284 2	0.939 8	0.292 3	5.13	0.970 2	0.261 9	0.936 9	0.269 1	5.77	
MSC+MC	0.961 5	0.284 4	0.939 8	0.292 4	5.13	0.970 2	0.262 1	0.936 8	0.269 2	5.77	
DWT+MC	0.937 2	0.334 1	0.929 7	0.342 6	4.43	0.946 3	0.318 2	0.924 1	0.322 9	4.60	

2.2.3 建模波长优化。对于用"'SNV+MC'+SPXY"方案优化所得样本集数据,以 CARS 法选取 PLS 模型的特征波长、WDO-DE 混合优化算法搜索 LS-SVM 模型的最优参数和波

长变量,所得特征波长见表 3,同时得到 LS-SVM 模型最优参数为 σ^2 = 11.309 93、 γ = 240.478 8。

衣り	件品 55C 足重模型的波长优化结果	
Wavelength	antimization results of sample SSC quantitativ	•

		Table 5	vare chight optimization results of sample 55C quantitative model
模型 Model	优化方法 Optimization method	变量数 Number of variables	特征波长(段) Characteristic wavelength (segment)//cm ⁻¹
PLS	CARS	35	7 400,7 406,7 607,7 907,8 154,8 170,8 394,8 826,8 833,8 849~8 872,8 988,8 995,9 011~9 049, 9 065,9 080~9 126,9 165,9 180,9 188,10 176,10 191,10 222
LS-SVM	WDO-DE	274	7 607~7 938.8 455~9 720.9 805~10 014.10 083~10 245.10 368~10 500

由表 3 可知, PLS 校正模型用 CARS 法筛选后, 保留了 35 个波长点, 仅占全波长的 8.67%; 所选波长多数集中于 8 826~9 188 cm⁻¹波段, 共有 25 个, 正好位于 8 833 cm⁻¹处的 波峰和 8 965 cm⁻¹处的波谷区域, 该段光谱表达了马铃薯样 品 SSC 的主要信息; 另外 10 个特征波长中, 7 400、7 406 和 10 176、10 191、10 222 cm⁻¹分别位于谱线两端的波峰附近, 7 607、7 907 cm⁻¹分别在 7 630 cm⁻¹处的波谷和 7 830 cm⁻¹处 的波峰区域, 8 154、8 170 和 8 394 cm⁻¹也位于 8 216 cm⁻¹处的 波峰附近。LS-SVM 校正模型以 WDO-DE 混合优化算法选 得波长变量 274 个, 为全波长的 67.8%; 建模波长主要分布在 8 455~9 720 cm⁻¹波段, 共 146 个, 其中包含了8 833 cm⁻¹处的 波峰和 8 965 cm⁻¹处的波谷区域; 其次为7 607~7 938 cm⁻¹波 段, 共 38 个, 正好位于 7 630 cm⁻¹处的波谷和 7 830 cm⁻¹边的 波峰区域; 然后为 9 805~10 014 cm⁻¹波段, 共 21 个, 对应于 9 900 cm⁻¹附近的平缓波峰;此外,10 083~10 245 cm⁻¹波段 18 个、10 368~10 500 cm⁻¹波段 15 个,其余波长 36 个。

2.2.4 优化模型建立及性能评价结果。综合应用前述优化 方法,分别以 PLS 和 LS-SVM 法建立马铃薯 SSC 定量模型, 结果见表 4。由表 4 可知,剔除异常样本并应用光谱预处理、 样本集划分和波长选择等优化方法后,用 PLS 法所建马铃薯 SSC 校正模型的优化效果较为显著,其 R_c^2 和 R_p^2 分别为 0.970 8、0.954 2, RMSEC 和 RMSEP 分别 0.258 6、0.262 8, RPD 为 5.91;与之相比,采用智能搜索算法进行波长和参数 优化的 LS-SVM 模型性能更好,其 R_c^2 和 R_p^2 分别为 0.987 3、 0.983 0, RMSEC 和 RMSEP 分别 0.170 5、0.173 4, RPD 为 8.96。 显然,后者的 R_c^2 和 R_p^2 均大于前者且相差更小, RMSEC 和 RMSEP 则小于前者且更为接近, RPD 亦明显高于前者。

表 4 优化的 PLS 和 LS-SVM 定量模型性能比较 Table 4 Performance comparison of optimized PLS and LS-SVM quantitative models

模型 Model	样本数 Sample number	预处理方案 Pretreatment plan	样本集划分 Sample set division	波长数 Number of wavelengths	${R_c}^2$	RMSEC	R_p^{-2}	RMSEP	RPD
PLS	212	SNV+MC	SPXY	35	0.970 8	0.258 6	0.954 2	0.262 8	5.91
LS-SVM	212	SNV+MC	SPXY	274	0.987 3	0.170 5	0.983 0	0.173 4	8.96

2种模型所得样品 SSC 预测值与相应参考值的拟合曲 线见图 3。从图 3 可以看出,数据点在拟合线两边分布较均 匀,且距拟合线较近,说明校正模型稳定性好,其预测值与参 考值相差较小。与 PLS 模型相比, LS-SVM 模型中的数据点 分布更集中, 其中多数紧靠拟合线, 表明 LS-SVM 校正模型 的预测精度高于 PLS 模型。



图 3 PLS 模型(a)和 LS-SVM 模型(b)所得样品 SSC 预测值与参考值的拟合曲线

Fig.3 Fitting curve of sample SSC predicted value and reference value obtained by PLS model(a) and LS-SVM model(b)

3 结论与讨论

利用近红外光谱法建模检测马铃薯 SSC,以 MCCV 法剔 除异常样本,选用"SNV+MC"组合算法进行光谱预处理、

SPXY 法划分样本集,分别采用 CARS 法、WDO-DE 混合优 化算法选取 PLS 模型和 LS-SVM 模型的特征波长,得到全面 优化的 NIRS 校正模型。结果表明:

209

(1)剔除异常样本后,以 PLS 法所建校正模型性能有所 改善,其 *R*² 和 *R*² 分别由 0.723 7、0.660 3 升到 0.725 3、 0.661 0, RMSEC 和 RMSEP 分别由 0.784 9、0.800 3 降为 0.781 8、0.789 5, RPD 由 1.87 增至 1.90; 在此基础上,选择、应 用优化的光谱预处理和样本集划分方法,相应 PLS 模型的性 能显著提升,此时 *R*²、*R*²、RMSEC、RMSEP 和 RPD 分别为 0.970 2、0.936 9、0.261 9、0.269 1、5.77。相比之下,光谱预处 理对模型性能提升的作用尤为显著。究其原因,SNV 变换可 消除样品不均匀造成的噪声、散射以及光程变换对 NIR 漫反 射的影响,增强光谱与数据之间的相关性; MC 方法可增加样 品光谱之间的差异,提高模型的预测能力和稳健性。SPXY 算法利用光谱数据和待测成分参考值计算样品间距离,可保 证最大程度表征样本分布,有效覆盖多维向量空间,增加样 本间的差异性和代表性,从而提高模型稳定性。

(2)同时引入了 LS-SVM 方法建模,所得模型性能显著 优于 PLS 模型,其 $R_o^2 \langle R_p^2 \rangle$ RMSEC $\langle RMSEP \rangle$ 和 RPD 分别为 0.987 3 $\langle 0.983 \rangle \langle 0.170 \rangle \langle 0.173 \rangle \langle 0.876 \rangle$ 。由此可见,马铃薯样 品的 NIRS 与相应 SSC 之间并非简单的线性关系,采用非线 性的 LS-SVM 方法建模是更好的选择。

(3)优化的 PLS 模型和 LS-SVM 模型大幅度缩减了波 长变量,消除了光谱中的大量非待测成分信息,既提高了模 型的预测能力,也显著降低了计算量,加快了运行速度。

综上所述,试验所建马铃薯 SSC 测定的 2 种 NIRS 定量 校正模型均有较高精度和效率,其性能优于同类试验模型, 均已达到国际谷物科技协会的实际检测标准,可用于马铃薯

(上接第197页)

抑菌活性成分,以抑制三七根腐病原菌腐皮镰孢菌的生长, 为三七根腐病的防治以及植物性杀菌剂的开发奠定良好的 基础。

参考文献

- [1] 周清华.云南省文山州三七产业化发展研究[D].昆明:云南大学,2014.
- [2]沙孟晨,周永峰,张海珠,等.三七不同部位化学成分的差异性研究[J]. 中国现代中药,2018,20(7):832-836.
- [3] 刘大会,徐娜,郭兰萍,等.三七药材质量特征和商品规格等级标准研究 [J].中国中药杂志,2016,41(5):776-785.
- [4] LI Q Q, HUO Y Y, CHEN C J, et al. Biological activities of two essential oils from *Pogostemon cablin* and *Eupatorium fortunei* and their major components against fungi isolated from *Panax notoginseng* [J/OL]. Chemistry and biodiversity, 2020, 17 (12) [2020-11-03]. https://doi.org/10.1002/ cbdv.202000520.DOI:10.1002/cbdv.202000520.
- [5] 杜用玺,蒋靖怡,徐扬,等黄连常见病害研究进展与防治策略[J].中国 中药杂志,2021,46(5):1067-1072.
- [6] SHARMA G,NAM J S,SHARMA A, et al.Antimicrobial potential of silver nanoparticles synthesized using medicinal herb *Coptidis rhizome*[J].Molecules,2018,23(9):1–2.
- [7] ANEJA K R, SHARMA C, JOSHI R.In vitro efficacy of amaltas (Cassia fis-

SSC 的快速检测。2 种校正模型相比,PLS 模型波长变量较少、计算量小,故其运行速度占优;LS-SVM 模型则预测精度 更高、稳健性较好,具有更好的泛化性能。

参考文献

- [1] 杨炳南,张小燕,赵凤敏,等.常见马铃薯品种特性分析及加工适宜性分类[J].食品科学技术学报,2016,34(1):28-36.
- [2] 吴聪宇,李子贤,李新国,等.3 种热带水果可溶性固形物含量的测定 [J].热带农业科学,2018,38(9):69-72.
- [3] 张巍巍,安进军,赵玉靖,等.大葱干物质和可溶性固形物含量的研究 [J].食品研究与开发,2017,38(10):128-130.
- [4] KRIVOSHIEV G P, CHALUCOVA R P, MOUKAREV M I.A possibility for elimination of the interference from the peel in nondestructive determination of the internal quality of fruit and vegetables by VIS/NIR spectroscopy [J].LWT-Food science and technology,2000,33(5):344–353.
- [5] KANG S, LEE K J, CHOI W, et al. A near-infrared sensing technique for measuring the quality of potatoes [C]//ASAE Annual International Meeting.St. Joseph, Michigan; American Society of Agricultural and Biological Engineers, 2003;27–30.
- [6] 王世芳,韩平,崔广禄,等.SPXY 算法的西瓜可溶性固形物近红外光谱 检测[J].光谱学与光谱分析,2019,39(3):738-742.
- [7] 王冬,张鹤冬,朱业伟,等,基于 LVF-NIR 的樱桃可溶性固形物含量无 损速测模型的建立与优化[J].食品安全质量检测学报,2020,11(3): 854-859.
- [8] 于怀智,陈东杰,姜沛宏,等.近红外光谱对蒙阴黄桃硬度和可溶性固形物的在线检测[J]食品与发酵工业,2020,46(14):216-221.
- [9] 陈素彬,胡振,张晓琪,等.软件技术在近红外光谱定量分析中的应用 [J].化学教育,2018,39(16):62-67.
- [10] 陈素彬,胡振,杨华.近红外光谱法检测饲料玉米品质的优化 PLS 模型 [J].饲料研究,2020,43(5):112-116.
- [11] 胡振,杨华,周金容,等.风驱动-差分进化混合优化算法设计及其性能 分析[J].现代计算机,2020(20):14-19.
- [12] 陈素彬,胡振.优化的近红外光谱 LS-SVM 模型测定小麦蛋白质[J]. 食品工业,2019,40(12):329-333.

tula L.) against the pathogens causing otitis externa[J].Jundishapur journal of microbiology,2011,4(3):175-183.

- [8] ZENG Z Y,LI Q Q,HUO Y Y,et al.Inhibitory effects of essential oils from Asteraceae plant against pathogenic fungi of *Panax notoginseng*[J].Journal of applied microbiology,2021,130(2):592–603.
- [9] 张庆莲,黄娟,邵单炫,等.黄连抗菌作用研究进展[J].中医药信息, 2019,36(5):125-127.
- [10] 蒋晶晶,彭沛穰,苏锋锋,等.中草药水浸提液对 5 种植物病原真菌的 影响[J].安徽农业科学,2020,48(17):172-174,235.
- [11] REN S C, FAN Y C, LI C C. Inhibitory effects of 30 kinds of Chinese herbal medicine on fungi in food. Advanced materials research [J]. Advanced materials research, 2011, 343/344:737-742.
- [12] SU Z X,XIAO H,CHEN L H.In vitro antibacterial effect of Chinese herbal medicine against Aeromonas hydrophila [C]//ZHU E,SAMBATH S.Information Technology and Agricultural Engineering. Berlin: Springer-Verlag,2012;233–239.
- [13] QU Z W, YU M J, ZHANG A R, et al. An experimental bacteriostasis of the banxiaxiexin decoction and 7 kinds of single taste traditional Chinese medicine on *Helicobacter pylori* resistant strains in vitro [J]. American journal of internal medicine, 2020, 8(3):138–142.
- [14] 刘继红,尹芳,王昌梅,等萃取浓缩沼液对尖孢镰刀菌和腐皮镰孢菌 抑制效果的影响研究[J].中国沼气,2019,37(1):88-93.