

# 近红外光谱技术在牛油生产过程中的应用

陈广川<sup>1</sup>, 赵波<sup>1</sup>, 徐坤俐<sup>1</sup>, 龚晨辉<sup>1</sup>, 张立实<sup>2</sup>, 王培鉴<sup>3</sup>, 唐勇<sup>1\*</sup>

(1. 西华大学食品与生物工程学院, 成都 610039; 2. 四川大学华西公共卫生学, 成都 610041;  
3. 成都奕阳现代科技有限公司, 成都 610041)

**摘要: 目的** 利用便携式近红外(near infrared, NIR)光谱仪无损快速鉴别不同种类、不同部位的牛油原料及判别牛油熬制加工过程脱水程度。**方法** 利用 NIR 对不同种类、不同部位以及熬制过程不同时相点的牛油进行反射光谱采集, 通过光谱预处理、偏最小二乘法(partial least squares method, PLS)和支持向量机(support vector machine, SVM)探究鉴别牛油的不同种类和不同部位的预测模型和快速判别牛油熬制脱水程度。**结果** 利用 PLS 分析方法对不同种类、不同部位的牛油原料预测的正确率为 75%; 利用 SVM 分析方法对牛油加工熬制过程中水分含量的预测正确率为 78.6%。**结论** 使用便携式近红外光谱仪对不同种类、不同部位的牛油原料和牛油熬制加工过程中水分含量的无损检测方式在工业上作为大流量检测相关质控环节指标具有可行性。

**关键词:** 近红外光谱法; 牛油; 支持向量机; 偏最小二乘; 水分

## Application of near infrared technology in the butter production process

CHEN Guang-Chuan<sup>1</sup>, ZHAO Bo<sup>1</sup>, XU Kun-Li<sup>1</sup>, GONG Chen-Hui<sup>1</sup>, ZHANG Li-Shi<sup>2</sup>,  
WANG Pei-Jian<sup>3</sup>, TANG Yong<sup>1\*</sup>

(1. College of Food and Biological Engineering, Xihua University, Chengdu 610039, China; 2. West China College of Public and Health, Sichuan University, Chengdu 610041, China; 3. Chengdu Yi Yang Modern Technology Co., Ltd., Chengdu 610041, China)

**ABSTRACT: Objective** To achieve non-destructive and rapid identification of different types and different parts of butter raw materials by portable near infrared (NIR) spectrometer, in order to discriminate the degree of dehydration during processing of butter. **Method** The reflectance spectra of different types and different parts and the different time points of the tanning process were collected by NIR, and through spectral preprocessing, partial least squares method (PLS) and support vector machine (SVM) were used to explore predictive models for identifying different types and different parts of butter and to quickly determine the degree of dehydration of butter. **Results** The correct rate of prediction of different types and different parts of butter raw materials by PLS analysis method was 75%; and the correct rate of prediction of moisture content in the processing of butter processing by SVM analysis method was 78.6%. **Conclusion** The use of portable NIR spectrometer for non-destructive testing of moisture content in different types and different parts of butter raw materials and butter processing is feasible in the industry, which can be as a quality control link for large-throughput testing.

**KEY WORDS:** near infrared spectroscopy; butter; support vector machine; partial least squares; moisture

\*通讯作者: 唐勇, 博士, 副教授, 主要研究方向为食品加工与安全检测。E-mail: jacktangy@gamil.com

\*Corresponding author: TANG Yong, Ph.D, Associate Professor, School of Food and Biological Engineering, Xihua University, NO.999, Jinzhou Road, Jinniu District, Chengdu 610039, China. E-mail: jacktangy@gamil.com

## 1 引言

牛油, 一般是指从牛的脂肪里提取出来的油脂, 其富含多种脂溶性维生素、矿物质、脂肪酸、胆固醇, 具有很高的营养价值, 是一种重要的食品原材料, 可用作油炸原料、起酥剂以及火锅底料的重要基础原料。

牛的不同来源、不同部位炼制的牛油, 采买价格高低有别, 且熬制加工的成品也会因牛品种、部位不同而导致牛油的味道、营养成分、脂肪酸含量等有着较大的差别<sup>[1]</sup>。同时, 在牛油的生产加工过程中, 熬制是一道重要的工序, 熬制不仅能够去除牛油中的杂质, 更重要的是能够去除牛油中的水分<sup>[2]</sup>。牛油中的水分含量直接关系到后续脱色、脱酸等工序的效果, 控制好牛油熬制的时间, 使牛油的水分含量能够达到最适宜的范围, 是牛油精制过程中的关键控制点。目前在牛油加工行业, 如果需鉴别牛原油来自的品种和部位, 通常采用气相色谱法、高效液相色谱法等分析方法<sup>[3]</sup>, 但仪器设备昂贵, 需要专门的实验室和熟练的检测人员, 且前处理复杂, 分析结果滞后, 不能满足企业大通量、高效率的加工运作。在加工过程控制方面, 熬煮脱水终点的判读普遍依赖师傅的经验。因此, 牛油加工行业需要可数据化、大通量、实时的检测方法来解决原料鉴别和加工中某些质量指标判断问题。

近红外(near infrared, NIR)光谱技术是一种无损检测技术, 是利用介于可见光谱(visible spectral, Vis)和中红外(mid-infrared, MIR)光谱之间的电磁辐射波, 能够与有机分子中的含氢基团(O-H、N-H、C-H)振动的合频和各级倍频的吸收区一致, 通过扫描样品的近红外光谱, 得到样品中有机分子含氢基团的特征信息<sup>[4]</sup>, 并结合如偏最小二乘法(partial least squares method, PLS)、支持向量机(support vector machine, SVM)等各种算法进行数学模型的建立, 对样品进行定量或定性的分析<sup>[5]</sup>。

本研究应用近红外光谱技术分别建立了快速鉴别 2 种类别、2 种部位的牦牛肚油、牦牛腰油、黄牛肚油、黄牛腰油的无损快检技术, 以及牛油加工过程中熬制终点判定的无损判别技术, 为今后生产应用大通量、无损检测技术来品控原料和加工环节质量提供借鉴。

## 2 材料与方法

### 2.1 实验材料与试剂

#### 2.1.1 实验材料

黄牛肚油、黄牛腰油、牦牛肚油、牦牛腰油(成都市航佳食品有限责任公司)。

### 2.2 实验设备

MIR-500 便携式近红外光谱仪(成都奕阳现代科技有限公司); JA2003 电子天平(上海舜宇恒平科学仪器有限公

司); MA35 快速水分测定仪(德国 Saitorius 公司); ST20Max 红外测温仪(美国福禄克公司)。

### 2.3 样品处理

选取-18℃下冻藏的牦牛肚油、牦牛腰油、黄牛肚油、黄牛腰油各 100 g, 并在室温下(10℃)放置 30 min。

选取-18℃下冻藏的黄牛肚油、黄牛腰油各 500 g, 在室温下(10℃)放置 30 min 后, 放入炒锅中, 使用电磁炉进行加热, 开始对牛油样品进行熬制。首先将牛油样品加热至融化, 并使用红外测温仪进行油温的测定, 在加热时需使用勺子不断搅拌牛油, 使其受热均匀。待油温达到 310℃时, 保持熬制温度, 并开始计时。牛油的熬制时间一般为 30 min<sup>[6]</sup>, 故每 5 min 使用勺子取一次牛油样品, 共取 7 次样品, 取样量为 10 g 左右, 并放入容器中冷却, 待冷却后进行水分快速检测与近红外光谱的测量。

### 2.4 近红外光谱测量

本实验中, 采用的便携式近红外光谱仪的波长范围为 900~1700 nm。调试黑值(black)与白值(white), 将便携式近红外光谱仪对准室内的空旷处, 进行扫描后得到数据, 该数据则为近红外光谱仪在当前环境中的黑值(black); 将便携式近红外光谱仪对准校准专用的白板并进行扫描, 扫描后得到的全反射数据则为白值(white)。测量时, 将仪器的检测窗口与样品表面轻轻接触, 然后点击系统进行测定。在测定过程选取牛油内部切面不同的点位进行测量, 保证测定数据的准确性<sup>[7,8]</sup>。

通过近红外光谱检测得到的数据分为强度(intensity)、反射值(reflectance)、吸收值(absorbance)3 种, 光波段范围为 900~1700 nm, 扫描间隔 3.5 nm, 每组共有 228 个数据。在本实验中, 取每个样品的反射值(reflectance)作为建模的数据<sup>[9,10]</sup>。4 组牛油, 每组选取 10 个不同的点位, 1 个点位重复测 3 次数据, 故 4 种不同的牛油共有 120 组数据。在对牛油熬制过程中的水分检测中, 在 0、5、10、15、20、25、30 min 的 7 组样品, 每组样品取 5 个不同的点位, 每个点位重复测 4 次数据, 共有 140 组数据。将测得数据利用 MATLAB 数据处理软件进行光谱预处理和分析。

### 2.5 快速水分测定仪测量

按照 2.4 所述熬煮加工取样点分组取样进行快速水分测定。将快速水分测定仪预热时间为 30 min。首先将准备熬制的牛油样品装入玻璃纤维滤膜中, 再将玻璃纤维滤膜放入快速水分测定仪, 并设置好参数, 具体参数为: 加热温度 125℃, 加热时间 40 min。

## 3 结果与分析

### 3.1 光谱预处理

由于仪器设备、样本、环境等多方面因素的影响, 近

红外光谱常出现噪声、光谱图基线平移和漂移等现象,为了消除这些非目标因素对建模的影响,应尽可能去除无关信息变量,以提高模型的预测能力和稳定性<sup>[11]</sup>。本试验采取一阶导数光谱预处理方法对原始光谱进行处理,将采集得到光谱数据输入 MATLAB 进行数据预处理<sup>[12]</sup>。

### 3.2 偏最小二乘法对不同种类牛油的分析预测

偏最小二乘法(PLS)是集合了多因素变量对多自变量的回归建模多元数据分析方法,其不仅能够计算多因素中各个因素对于成分的影响因子,更能够提取主要因素进行模型的建立,从而进行对于样品的定性、定量分析,与其他建模方法相比,具有简单、稳健、方便、预测精度高等优点<sup>[13]</sup>。

对不同种类、部位的牛油样品进行近红外光谱数据采集,同时利用 PLS 进行分析建模。本实验共有 4 种不同种类、部位的牛油样品,每个样品选取 10 个点采集 3 组数据,每种样品有 30 组数据,共 120 组数据,其中随机选取 80% 作为训练集,20% 作为预测集。4 种不同种类、部位的牛油(牦牛腰油、牦牛肚油、黄牛腰油、黄牛肚油)分别用 1、2、3、4 作为分类标签,将采集到的近红外光谱原始数据进行光谱预处理后输入到 MATLAB 中进行分析建模。

偏最小二乘法将多元校正的目标直接定位在预测上,所以确定 PLS 主成份数量的原则就是使预测误差最小,如表 1 所示,第 9 主成分与第 8 主成分的去一预测误差平方和的差值为 0.4,第 9 主成分与第 10 主成分的去一预测误差平方和的差值为 1.19 最小误差,据此确定提取 9 个主成分,建立 PLS 分析模型。

表 1 去一预测误差平方和值  
Table 1 Value of PRESS

| 提取主成分数量 | PRESS       |
|---------|-------------|
| 1       | 33.11940258 |
| 2       | 24.80852459 |
| 3       | 16.17153102 |
| 4       | 14.35444028 |
| 5       | 14.35276445 |
| 6       | 13.98972252 |
| 7       | 12.69257581 |
| 8       | 9.77414225  |
| 9       | 9.366296833 |
| 10      | 10.56123704 |

PLS 分析模型建立好后,将 20% 的预测集带入建立好的分析模型中,其预测结果如表 2 所示,其中预测值与已知值的偏差在 $\pm 0.1$ 之间则认为预测正确,所以利用 PLS 对 4 种不同种类、部位牛油的产品预测正确率为 75%。

### 3.3 利用支持向量机分析法对牛油生产终点的判定

支持向量机(SVM)是一类按监督学习方式对数据进

行二元分类的广义线性分类器,其决策边界是对学习样本求解的最大边距超平面,根据有限的样本信息在模型的复杂性和学习能力之间寻求最佳折中,以求获得最好的推广能力。它在解决小样本、非线性及高维模式识别中表现出许多特有的优势,并能够推广应用到函数拟合等其他机器学习问题中<sup>[14,15]</sup>。支持向量机可以分析数据,识别模式,用于分类和回归分析等,具有全局最优、结构简单、泛化能力强优点<sup>[16]</sup>。

表 2 PLS 模型预测情况  
Table 2 The prediction of PLS model

| 编号 | 预测值         | 已知值 | 预测结果 | 备注 |
|----|-------------|-----|------|----|
| 1  | 0.9522589   | 1   | 预测正确 |    |
| 2  | 0.9241964   | 1   | 预测正确 |    |
| 3  | 1.065201507 | 1   | 预测正确 |    |
| 4  | 1.495853948 | 1   | 预测错误 |    |
| 5  | 1.098211034 | 1   | 预测正确 |    |
| 6  | 1.094381679 | 1   | 预测正确 |    |
| 7  | 2.175619163 | 2   | 预测错误 |    |
| 8  | 2.082096925 | 2   | 预测正确 |    |
| 9  | 2.096696304 | 2   | 预测正确 |    |
| 10 | 1.763449325 | 2   | 预测错误 |    |
| 11 | 1.940292262 | 2   | 预测正确 |    |
| 12 | 2.054383829 | 2   | 预测正确 |    |
| 13 | 3.06581933  | 3   | 预测正确 |    |
| 14 | 3.002769775 | 3   | 预测正确 |    |
| 15 | 3.088076776 | 3   | 预测正确 |    |
| 16 | 2.906405035 | 3   | 预测正确 |    |
| 17 | 3.374993479 | 3   | 预测错误 |    |
| 18 | 2.98883597  | 3   | 预测正确 |    |
| 19 | 3.93058021  | 4   | 预测正确 |    |
| 20 | 4.098877444 | 4   | 预测正确 |    |
| 21 | 4.29589022  | 4   | 预测错误 |    |
| 22 | 4.048286449 | 4   | 预测正确 |    |
| 23 | 3.542163887 | 4   | 预测错误 |    |
| 24 | 3.940198511 | 4   | 预测正确 |    |

图 1 是利用快速水分测定仪,分别在黄牛腰油加工熬制的第 0、5、10、15、20、25、30 min 时快速测定牛油水分含量,当到达 30 min 时,黄牛腰油的含水量逐渐趋于平稳,即熬制加工过程结束。

本实验对黄牛腰油原料进行牛油熬制加工,熬制过程中取 7 个时间点(0、5、10、15、20、25、30 min),每个时间点的样品选取 5 个点位,每个点位采集 4 组数据,每个样品有 20 组数据。熬制过程中不同时间点的牛油原料分别用 1、2、3、4、5、6、7 进行编号,将每个时间点测得的水分含量与编号进行对应。近红外光谱仪测得的原始数

据通过光谱预处理后输入 MATLAB 中。其中随机选取 80% 的数据作为训练集, 20% 作为预测集。20% 的预测集的预测结果和已知结果进行对比如表 3 所示。

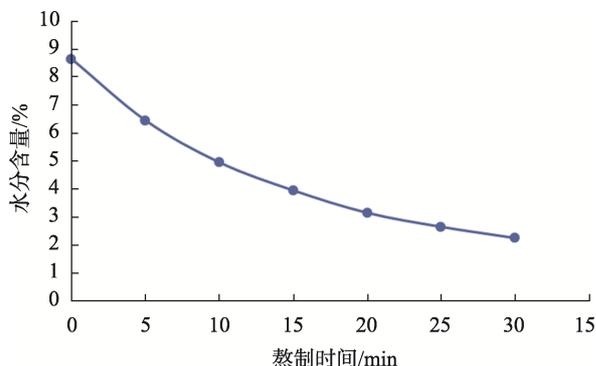


图 1 牛油水分含量变化情况

Fig.1 Change in moisture content of butter

表 3 SVM 模型预测情况  
Table 3 The prediction of SVM model

| 编号 | 预测值   | 已知值 | 预测结果 | 备注 |
|----|-------|-----|------|----|
| 1  | 1     | 1   | 预测正确 |    |
| 2  | 1     | 1   | 预测正确 |    |
| 3  | 1     | 1   | 预测正确 |    |
| 4  | 1     | 1   | 预测正确 |    |
| 5  | 2     | 2   | 预测正确 |    |
| 6  | 65535 | 2   | 预测错误 |    |
| 7  | 5     | 2   | 预测错误 |    |
| 8  | 2     | 2   | 预测正确 |    |
| 9  | 3     | 3   | 预测正确 |    |
| 10 | 5     | 3   | 预测错误 |    |
| 11 | 5     | 3   | 预测错误 |    |
| 12 | 3     | 3   | 预测正确 |    |
| 13 | 65535 | 4   | 预测错误 |    |
| 14 | 4     | 4   | 预测正确 |    |
| 15 | 4     | 4   | 预测正确 |    |
| 16 | 4     | 4   | 预测正确 |    |
| 17 | 5     | 5   | 预测正确 |    |
| 18 | 5     | 5   | 预测正确 |    |
| 19 | 5     | 5   | 预测正确 |    |
| 20 | 5     | 5   | 预测正确 |    |
| 21 | 6     | 6   | 预测正确 |    |
| 22 | 6     | 6   | 预测正确 |    |
| 23 | 65535 | 6   | 预测错误 |    |
| 24 | 6     | 6   | 预测正确 |    |
| 25 | 7     | 7   | 预测正确 |    |
| 26 | 7     | 7   | 预测正确 |    |
| 27 | 7     | 7   | 预测正确 |    |
| 28 | 7     | 7   | 预测正确 |    |

预测集预测的结果如表 4 所示, 对牛油熬制加工过程中水分含量预测结果为: 拟合预测正确率为 96.4%, 去一预测正确率为 78.6%, 表明在对数据分析建模时去一预测比拟合预测在对样品分类时更加准确, 同时可以发现利用 SVM 建立好的数据模型在对 20% 预测集牛油样品进行预测时, 其预测正确率为 78.6%。

表 4 SVM 模型预测结果  
Table 4 The result of SVM model

| 模型评价   | 正确率/% |
|--------|-------|
| 去一预测   | 78.6  |
| 拟合预测   | 96.4  |
| 未知样品预测 | 78.6  |

### 4 结 论

本试验基于近红外光谱技术, 建立了不同种类、部位牛油原料和熬制过程水分程度快速鉴别和判断的方法。结果显示, 将采集不同种类的牛油原料得到的光谱数据通过一阶导数平滑处理后, 将数据输入 MATLAB 中, 利用 PLS 分析方法, 对不同种类、部位的牛油原料具有良好的预测精度; 采集到的熬制加工过程中的原始光谱数据通过一阶导数平滑处理后, 将数据输入 MATLAB 中, 利用 SVM 分析方法, 判断牛油熬制加工过程中水分含量具有良好的预测精度。

### 参考文献

- [1] 李桂华, 王成涛, 张玉杰, 等. 食用牛油理化特性及组成分析的研究[J]. 河南工业大学学报(自然科学版), 2010, 31(1): 30-32, 36.  
Li GH, Wang CT, Zhang YJ, *et al.* Study on physical and chemical properties and composition analysis of edible butter [J]. J Henan Univ Technol (Nat Sci Ed), 2010, 31(1): 30-32, 36.
- [2] 王家升, 张慧, 丁秀臻, 等. 食用牛油的制备及深加工技术综述[J]. 粮油食品科技, 2017, 25(5): 32-36.  
Wang JS, Zhang H, Ding XZ, *et al.* Review on preparation and deep processing technology of edible butter [J]. Sci Technol Cereals, Oils Foods, 2017, 25(5): 32-36.
- [3] 杨雪吟. 精制牛油、猪油及中间油脂产品品质评价[D]. 天津: 天津科技大学, 2011.  
Yang XY. Quality evaluation of refined butter, lard and intermediate fat products [D]. Tianjin: Tianjin University of Science and Technology, 2011.
- [4] 褚小立, 陆婉珍. 近五年我国近红外光谱分析技术研究与应用进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(10): 2595-2605.  
Chu XL, Lu WZ. Progress in research and application of near infrared spectroscopy in China in recent five years [J]. Spectrosc Spect Anal, 2014, 34(10): 2595-2605.
- [5] 吴静珠, 刘翠玲, 李慧, 等. 近红外光谱技术在食用油种类鉴别及脂肪酸含量检测中的应用[J]. 北京工商大学学报(自然科学版), 2010, 28(5): 56-59.

- Wu JZ, Liu CL, Li H, *et al.* Application of near infrared spectroscopy in identification of edible oils and detection of fatty acid content [J]. *J Beijing Technol Bus Univ (Nat Sci Ed)*, 2010, 28(5): 56–59.
- [6] 张郁松, 寇炜材. 牛油精炼工艺的研究[J]. *食品工业科技*, 2007, (4): 170–172.
- Zhang YS, Kou WC. Study on the refining process of butter [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2007, (4): 170–172.
- [7] 周小华, 张玫, 相秉仁. 近红外光谱结合区间偏最小二乘法应用于花生油酸价的测定[J]. *粮油食品科技*, 2017, 25(2): 62–64.
- Zhou XH, Zhang M, Xiang BR. Application of near infrared spectroscopy combined with interval partial least squares method to determine the acid value of peanut oil [J]. *Sci Technol Cereals, Oils Foods*, 2017, 25(2): 62–64.
- [8] 曹小华, 刘娟花. 基于近红外光谱技术快速测定豆油过氧化值的研究[J]. *广东饲料*, 2017, 26(5): 35–39.
- Cao XH, Liu JH. Rapid determination of peroxidation value of soybean oil based on near infrared spectroscopy [J]. *Guangdong Feed*, 2017, 26(5): 35–39.
- [9] Basri KN, Hussain MN, Bakar J, *et al.* Classification and quantification of palm oil adulteration via portable NIR spectroscopy [J]. *Spectrochim Acta A*, 2017, (173): 335–342.
- [10] Chiesa L, Panseri S, Bonacci S, *et al.* Authentication of Italian PDO lard using NIR spectroscopy, volatile profile and fatty acid composition combined with chemometrics [J]. *Food Chem*, 2016, 212(1): 296–304.
- [11] Li HD, Liang YZ, Xu QS, *et al.* Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration [J]. *Anal Chim Acta*, 2009, 648(1): 77–84.
- [12] 李倩倩. 无信息变量消除法在三种谱学方法中的定量分析研究[D]. 北京: 中国农业大学, 2014.
- Li QQ. Quantitative analysis of non-information variable elimination method in three spectral methods [D]. Beijing: China Agricultural University, 2014.
- [13] 沈乐丞, 刘书航, 邓海玲, 等. 近红外光谱结合偏最小二乘法快速测定糖果中水分含量[J]. *食品工业科技*, 2018, 39(7): 255–258, 322.
- Shen LC, Liu SH, Deng HL, *et al.* Rapid determination of moisture content in candy by Near Infrared Spectroscopy combined with partial least squares method [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2018, 39(7): 255–258, 322.
- [14] 常甜甜. 支持向量机学习算法若干问题的研究[D]. 西安: 西安电子科技大学, 2010.
- Chang TT. Research on some problems of support vector machine learning algorithm [D]. Xi'an: Xi'an University of Electronic Science and Technology, 2010.
- [15] 但松健. 基于 NIR 光谱分析的柑橘产地鉴别及品质检测技术研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2017.
- Dan SJ. Study on identification and quality detection technology of citrus origin based on NIR spectroscopy [D]. Chongqing: Chongqing University, 2017.
- [16] 薛贞霞. 支持向量机及半监督学习中若干问题的研究[D]. 西安: 西安电子科技大学, 2009.
- Xue ZX. Research on several problems in support vector machine and semi-supervised learning [D]. Xi'an: Xi'an University of Electronic Science and Technology, 2009.

(责任编辑: 苏笑芳)

## 作者简介



陈广川, 硕士, 主要研究方向为食品加工与安全检测。

E-mail: 410649177@qq.com



唐 勇, 博士, 副教授, 主要研究方向为食品加工与安全检测。

E-mail: jacktangy@gamil.com