# 樱桃多品质数据分析与无损快速检测模型的建立

王 冬1,孙俊鹏2,于世锋3,李 菁3,邱孟超4,韩 平1\*,王世芳1

 (1. 北京市农林科学院,北京农业质量标准与检测技术研究中心,北京 100097;2. 西安市灞桥区农产品质量 安全检验监测中心,西安 710038;3. 西安市农产品质量安全检验监测中心,西安 710077;
 4. 北京市大兴区土肥工作站,北京 102699)

**摘 要:目的** 研究樱桃多品质数据分布情况,建立樱桃多品质无损快速检测方法。**方法** 对樱桃样品分别 测试可溶性固形物含量(soluble solid content, SSC)、可滴定酸含量(titratable acid content, TAC)、果实硬度(fruit firmness, Firm)。采用统计分析方法对数据进行统计学描述,分别绘制含量分布直方图并计算直方图分布频次 百分比。以樱桃样品近红外(near infrared, NIR)光谱数据为自变量、品质数据参考值为因变量建立樱桃品质无 损快速定量检测模型。结果 统计分析结果表明,可溶性固形物含量 11~17 Brix 区间范围内的样品数占样品 总数的约 86.0%,可滴定酸含量 0.1%~0.8%区间范围内的样品数占样品总数的约 90.4%,果实硬度 1.60~ 3.00 kg/cm<sup>2</sup> 区间范围内的样品数占样品总数的约 86.0%。多元回归建模结果表明,剔除异常值有助于提高模 型预测性能,剔除异常值后可溶性固形物含量、可滴定酸含量、果实硬度模型的相对预测性能值分别提高了 15.3%、32.9%、12.3%。**结论** 采用统计分析结合直方图分析可较直观地描述樱桃品质分布情况;剔除异常值 对提高樱桃可滴定酸含量近红外无损检测模型预测能力的作用最大。

关键词: 近红外光谱法; 无损检测; 可溶性固形物含量; 可滴定酸含量; 果实硬度; 樱桃

## Analysis of the multi-quality data and the development of the non-destructive rapid testing models of cherry

WANG Dong<sup>1</sup>, SUN Jun-Peng<sup>2</sup>, YU Shi-Feng<sup>3</sup>, LI Jing<sup>3</sup>, QIU Meng-Chao<sup>4</sup>, HAN Ping<sup>1\*</sup>, WANG Shi-Fang<sup>1</sup>

 Beijing Academy of Agriculture and Forestry Sciences, Beijing Research Center for Agricultural Standards and Testing, Beijing 100097, China; 2. Xi'an Baqiao Testing and Monitoring Cetner for Agricultural Product Quality and Safety, Xi'an 710038, China; 3. Xi'an Testing and Monitoring Center for Agricultural Products Quality and Safety, Xi'an 710077, China; 4. Daxing District Soil and Fertilizer Workstation of Beijing, Beijing 102699, China)

**ABSTRACT: Objective** To study the distribution of the multi-quality data of cherry, and develop the non-destructive rapid testing methods for cherry. **Methods** The cherry samples were tested for soluble solid content (SSC), titratable acid content (TAC) and fruit firmness (Firm). The statistics methods were applied to describe the statistical characteristics of the data, meanwhile the histogram of the content distribution was drawn with the percentage of frequency in the histograms respectively. The non-destructive rapid quantitative calibration models

基金项目:北京市农林科学院科技创新能力建设专项(KJCX201910)、北京市农林科学院农业科技示范推广项目"果蔬有机化生产植保投 人品评价与应用技术示范"

Fund: Supported by the Innovation Ability Construction Special Research, Beijing Academy of Agriculture and Forestry Sciences (KJCX201910), and the Agricultural Science and Technology Demonstration and Extension Project of Beijing Academy of Agriculture and Forestry Sciences \*通信作者: 韩平, 博士, 副研究员, 主要研究方向为农产品质量安全。E-mail: hanp@brcast.org.cn

<sup>\*</sup>Corresponding author: HAN Ping, Ph.D, Associated Professor, Beijing Academy of Agriculture and Forestry Sciences, Beijing Research Center for Agricultural Standards and Testing, Beijing 100097, China. E-mail: hanp@brcast.org.cn

were developed by the near infrared (NIR) spectra data of cherry as independent and the specified values of the qualities as dependent. **Results** It was demonstrated by statistic analysis that the percentage of the samples with SSC between 11 and 17 Brix was about 86.0% of the total samples, the percentage of the samples with TAC between 0.1% and 0.8% was about 90.4% and the percentage of the samples with Firm between 1.60-3.00 kg/cm<sup>2</sup> was about 86.0%. It was indicated by multi-regression models that the outlier elimination was good for enhancing the prediction performance of the models, by which, the ratio performance deviation values had been increased by 15.3%, 32.9%, 12.3% for the models of SSC, TAC and Firm respectively. **Conclusion** Statistical analysis combined with histogram analysis can directly describe the distribution of cherry quality, eliminating outliers has the greatest effect on improving the prediction ability of NIR nondestructive testing model of titratable acid content in cherry.

**KEY WORDS:** near infrared spectroscopy; non-destructive testing; soluble solid content; titratable acid content; fruit firmness; cherry

## 0 引 言

樱桃作为高附加值农产品,其品质一直受到种植户 和消费者的广泛关注。对于樱桃品质检测,可溶性固形物 含量(soluble solid content, SSC)、可滴定酸含量(titratable acid content, TAC)、果实硬度(fruit firmness, Firm) 是一直 以来重点检测的指标。然而按照现有方法,上述 3 种指标 需对被测试樱桃个体进行破坏性取样,由此造成检测成 本居高不下;此外目前广泛采用的有损检测方法导致检 测仍停留在抽样检测阶段,从而导致检测过程存在样品 代表性受限的问题,进而造成樱桃产销过程中争议不断。 针对上述情况,在对樱桃品质数据分布情况进行调研的 同时,建立樱桃品质无损快速检测方法成为亟待解决的 问题。

近年来,随着仪器制造技术、计算机技术的进步及化 学计量学的发展,以近红外光谱(near infrared spectroscopy, NIRS)为代表的无损快速检测技术越来越多地成为无损快 速分析的首选方案<sup>[1-3]</sup>,目前已在蔬菜<sup>[4-5]</sup>、肉类<sup>[6-7]</sup>、经济 作物<sup>[8-9]</sup>、种子<sup>[10-12]</sup>、肥料<sup>[13-15]</sup>的品质检测方面得到了广 泛应用。近红外光谱吸收主要来源于物质分子中含氢官能 团的合频与倍频吸收。农产品的近红外光谱携带了其中的 各种化学物质信息,借助化学计量学算法即可建立有关品 质的定量校正模型。近年来,近红外光谱技术被应用于水 果品质无损检测<sup>[16-17]</sup>与分类<sup>[18]</sup>方面,其中不乏采用近红 外光谱技术对樱桃 SSC 进行无损快速定量测定的报道<sup>[19]</sup>, 例如采用线性渐变分光原理近红外光谱仪建立樱桃 SSC 定量校正模型,测定系数*R*<sup>2</sup>可达到约 0.86~0.91。

本研究针对樱桃样品按照种植面积进行抽样,测定 了樱桃 SSC、TAC、Firm 参考值,采用统计分析结合直方 图分布对樱桃 SSC、TAC、Firm 的分布情况进行分析;同 时以樱桃近红外光谱数据为自变量、以樱桃品质数据参考 值为因变量,建立樱桃 SSC、TAC、Firm 的无损快速检测 模型,采用异常值剔除对模型进行优化,记录并比较模型 参数,以期为樱桃品质分布情况提供一定的参考,为樱桃 品质无损快速检测模型的建立与优化提供一定的借鉴。

## 1 材料与方法

#### 1.1 实验材料

2020 年 5 月于西安樱桃主产区生产基地采集樱桃样品 100 份,其中灞桥区 70 份、长安区 15 份、蓝田县 15 份,涉及美早、红灯、艳阳、萨米脱等 19 个品种。为充分反映樱桃品质分布情况,根据种植面积对 100 份樱桃样品进行抽样,采集单个樱桃近红外光谱数据,并测试 SSC、TAC、Firm 参考值。

#### 1.2 仪器设备

PAL-1 型数字折光仪(0.1 Brix, 日本 ATAGO 公司); GMK-835N 型数字酸度计(0.01%, 韩国 G-WON 公司); 艾 德堡机械指针式 GY-2 型果实硬度计(最小分度: 0.02 kg/cm<sup>2</sup>,最小读数分度: 0.01 kg/cm<sup>2</sup>,中国艾德堡仪器 有限公司); TDR-1700 型便携台式水果品质无损快速分析 仪[由北京农业质量标准与检测技术研究中心自主集成研 制, 以数字光处理近红外光谱仪(digital light processing-near infrared spectrometer, DLP-NIR spectro meter)为内核,光谱中心分辨率优于 10 nm]。

#### 1.3 实验方法

#### 1.3.1 SSC 参考值的测定

根据 ISO 02173-2003 Fruit and vegetable products-Determination of soluble solids-Refractometric method 及 NY/T 2637—2014《水果和蔬菜可溶性固形物含量的测定 折射仪法》测定樱桃 SSC 参考值,仪器自动温度补偿。将 数字折光仪用纯水(18 MΩ)校准 0 点,拭干折光晶体水分; 将樱桃样品挤汁并完全覆盖数字折光仪晶体,按"开始测 试"按钮,读数并记录;用纯水清洗数字折光仪并拭干折 光晶体水分。

#### 1.3.2 TAC 参考值的测定

采用数字酸度计测定樱桃 TAC 参考值。将数字酸度 计用纯水(18 MΩ)校正 0 点, 拭干数字酸度计测试区水分; 将樱桃样品挤汁, 用移液器吸取 0.306 mL 于样品杯, 定量 加入 30 mL±0.5 mL 纯水, 摇匀后静置 20 s; 将样品杯中液 体倒入数字酸度计测试区, 按"开始测试"按钮, 读数并记 录; 用纯水清洗数字酸度计测试区并拭干测试区水分。

## 1.3.3 Firm 参考值的测定

根据 NY/T 2009—2011《水果硬度的测定》测定樱桃 Firm 参考值。将果实硬度计机械校准 0 点,将读数指针回 拨至果实硬度计 0 点;用水果刀削去樱桃样品表皮,将果 实硬度计探针插入去皮果实直至探针刻线与樱桃果肉面相 切,读数并记录;将果实硬度计读数指针回拨至果实硬度 计 0 点。

1.3.4 近红外光谱数据的采集

水果品质无损快速分析仪开机预热 15 min, 以白色 聚四氟乙烯板为参比, 光谱范围 900~1700 nm, 光谱累加 50 次取平均; 将樱桃样品放置于仪器上方的光谱采集镜 头并将镜头全部覆盖以避免漏光, 在仪器屏幕显示"准备 就绪"状态下, 单击触摸屏红色按钮开始采集樱桃样品近 红外光谱数据, 待触摸屏再次显示"准备就绪"时将樱桃 样品移除。

## 1.4 数据处理方法

#### 1.4.1 樱桃品质指标数据统计分析

采用统计量对樱桃品质数据进行描述<sup>[20]</sup>。分别对全部 樱桃样品的 SSC、TAC、Firm 品质指标计算样本容量(*n*)、 最小值(Min)、最大值(Max)、样本均值(Ave)、样本标准差 (Std)、样本极差(Rx)和变异系数(character voice, CV)共 7 个统计量。进一步地,对全部樱桃样品 SSC、TAC、Firm 分别计算各品质数据频次分布,并据此绘制樱桃品质数据 分布直方图,对直方图数据进行分布分析。

## 1.4.2 樱桃品质无损速测模型的建立

参考 NY/T 1841—2010《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》,分别针对樱桃样品 SSC、TAC、Firm 品质指标,以 DLP-NIR 光谱数据为自变 量、以各品质指标数据为因变量,采用偏最小二乘回归 (partial least square regression, PLSR)算法结合数据中心化 预处理初步建立校正模型。根据模型的样本残差(Residual) 结合样本得分杠杆值(Leverage)识别并剔除异常值;当样 品的模型残差值 Residual 超过校正集模型残差值平均值的 2 倍且光谱杠杆值 Leverage 超过校正集光谱杠杆值平均值 的 3 倍时,该样品将作为异常值被剔除。将剔除异常值后 的数据重新计算 PLSR 模型,采用全交互验证算法对所建 模型进行验证。记录模型维数(number of factors,  $N_f$ )、校正 测定系数(determination coefficient of calibration,  $R^2_C$ )、校正 均方根误差(root mean square error of calibration, RMSEC)、 交互验证测定系数(determination coefficient of cross validation,  $R^2_{CV}$ )、交互验证均方根误差(root mean square error of cross validation, RMSECV)、相对预测性能(ratio performance deviation, RPD)以及校正回归方程(regression equation of calibration, RE<sub>C</sub>)和交互验证回归方程(regression equation of cross validation, RE<sub>CV</sub>),并计算F统计量对模型回归显著性做检验。其中, Residual、Leverage、 $R^2$ 、RMSE、RPD、F统计量的计算分别如公式(1)~(6)所示:

$$Residual_i = y_i - y_{iP}$$
(1)

$$Leverage_{i} = t_{i}'(T'T)t_{i}$$
(2)

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - y_{iP})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i} - y_{M})^{2}}$$
(3)

RMSE = 
$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - y_{iP})^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - y_{iP})^2}}$$
 (4)

$$RPD = \frac{Std}{SEP}$$
(5)

$$F = (n-2)\frac{R^2}{1-R^2}$$
(6)

公式(1)中, Residual<sub>i</sub>是第 *i* 个样品的模型残差值, y<sub>i</sub>是第 *i* 个样品的该品质指标参考值, y<sub>iP</sub>是第 *i* 个样品的模型预测 值; 公式(2)中, Leverage<sub>i</sub>是第 *i* 个样品的光谱杠杆值, *t*<sub>i</sub>是 第*i*个样品的得分值, *T*是模型得分矩阵; 公式(3)中, y<sub>i</sub>是第 *i*个样品的参考值, y<sub>iP</sub>是第 *i* 个样品的预测值, y<sub>M</sub>是参考值 平均值, *n*为样本容量; 公式(4)中, y<sub>i</sub>是第*i*个样品的参考值, y<sub>iP</sub>为第 *i*个样品的预测值, *n*为样本容量; 公式(5)中, *Std*是 对应数据集的样本标准差, SEP 是预测标准分析误差 (standard error of prediction), 当样品量较大时(一般大于 30), 可采用 RMSECV 代替 SEP; 公式(6)中, *F* 为统计量 *F* 的计算值, *n*为回归数据对应的样本容量, *R*<sup>2</sup>为回归数据对 应的测定系数。

## 2 结果与分析

## 2.1 樱桃品质数据统计分析

分别对樱桃 SSC、TAC、Firm 数据进行统计分析,计 算 *n*、Min、Max、Ave、Std、Rx 和 CV 共 7 个统计量,如 表 1 所示。SSC、TAC、Firm 的单位分别为"白利度(Brix)"、 "%"、"kg/cm<sup>2</sup>"。

2.1.1 樱桃 SSC 数据分析

对樱桃 SSC 数据计算品质数据频次分布,并据此绘制 SSC 分布直方图,如图 1 所示,横坐标为频次区间阈值,间隔设定为 1.0 Brix;纵坐标为对应区间的样品百分比。11~17 Brix 区间范围内各区间的樱桃样品频次皆大于 5%,特别是 12~15 Brix 区间范围内各区间的樱桃样品的频次皆

大于 10%。12~15 Brix 区间范围内的樱桃样品之和占樱桃 样品总数的约 59.7%; 11~17 Brix 区间范围内的樱桃样品之 和占樱桃样品总数的约 86.0%。

表 1 樱桃品质数据统计 Table 1 Statistics of the quality data of cherry

统计量	SSC/Brix	TAC/%	Firm/(kg/cm <sup>2</sup> )
п	372	332	336
Min	9.1	0.00	0.76
Max	25.3	1.23	4.00
Ave	14.8	0.39	2.22
Std	2.7	0.26	0.56
Rx	16.2	1.23	3.24
CV	18.1%	65.3%	25.0%



#### 2.1.2 樱桃 TAC 数据分析

对樱桃样品 TAC 计算品质数据频次分布,并据此绘制 TAC 分布直方图,如图 2 所示,横坐标为频次区间阈值,间隔 设定为 0.10%;纵坐标为对应区间的样品百分比。0.1%~0.8% 区间范围内各区间的樱桃样品的频次皆大于 5%,特别是 0.1%~0.5%区间范围内各区间的樱桃样品的频次皆大于 10%。0.1%~0.5%区间范围内的樱桃样品之和占樱桃样品总数 的约 69.0%; 0.1%~0.8%区间范围内的樱桃样品之和占樱桃样 品总数的约 90.4%。



图 2 樱桃 TAC 频次分布直方图 Fig.2 Histogram of the frequency distribution of titratable acid content of cherry

## 2.1.3 樱桃 Firm 数据分析

对樱桃样品 Firm 计算品质数据频次分布,并据此绘制 Firm 分布直方图,如图 3 所示,横坐标为频次区间阈值,间隔设定为 0.20 kg/cm<sup>2</sup>;纵坐标为对应区间的样品百分比。1.60~3.00 kg/cm<sup>2</sup>区间范围内各区间的樱桃样品的频次皆大于 5%,特别是 2.00~2.40 kg/cm<sup>2</sup>区间范围内各区间的樱桃样品的频次皆大于 10%。2.00~2.40 kg/cm<sup>2</sup>区间范围内的樱桃样品之和占樱桃样品总数的约 86.0%。



图 3 樱桃硬度频次分布直方图 Fig.3 Histogram of the frequency distribution of fruit firmness of cherry

通过以上分析可见,采用统计分析结合直方图方式 可较直观地描述樱桃 SSC、TAC、Firm 的分布情况,其中, SSC 和 Firm 的分布情况近似于正态分布,TAC 的分布在正 态分布的基础上向较低含量方向倾斜。

## 2.2 樱桃品质无损检测模型的建立

樱桃 DLP-NIR 光谱如图 4 所示。从图 4 可见 3 个较 明显的吸收峰分别位于 1450、1204、980 nm 附近,分别 主要对应 O-H 的一级、二级、三级倍频吸收。更多的光 谱信息还需采用算法进一步提取,从而建立樱桃品质检 测模型。



Fig.4 DLP-NIR spectra of cherry

以光谱数据为自变量,分别以SSC、TAC、Firm参考 值数据为因变量,采用 PLSR 算法建立校正模型,并采用 全交互验证算法对所建模型进行验证,模型结果如表 2 所示。从表 2 数据可见,剔除异常值前 SSC、TAC、Firm 模型 RMSECV 分别为 1.52、0.26、0.48, RPD 分别为 1.76、1.03、1.23,模型准确度有待提高。F 统计量数值表明,所建模型校正、交互验证数据皆具有回归显著性。

根据 Residual 和 Leverage 剔除异常值后重新建立校 正模型。SSC、TAC、Firm 剔除异常值前后的参考值统计 如表 3 所示。从表 3 可见,剔除异常值前后,SSC、TAC、 Firm 的数据分布特征基本一致,说明剔除异常值未对数据 整体造成严重影响;从 Std 和 CV 数据可见,剔除异常值后, SSC、TAC、Firm 的 Std、CV 分别较剔除异常值前有少量 降低,说明剔除异常值过程去掉了原数据集中的极端值。

基于剔除异常值后的数据,以光谱数据为自变量、分别以 SSC、TAC、Firm 参考值数据为因变量,采用 PLS 回

归算法建立校正模型,并采用全交互验证算法对所建模型进行验证,模型结果如表 4 所示,剔除异常值后 SSC、TAC、Firm 模型 RMSECV 分别为 1.29、0.15、0.36, RPD 分别为 2.03、1.37、1.38。剔除异常值后,SSC 模型 *RPD* 值大于 2.0,可以满足对樱桃 SSC 的无损快速检测需求,TAC、Firm 模型 RPD 值处于 1.0~1.5 之间,可分别满足樱桃 TAC、Firm 的快速无损初筛需求。对比表 2 数据可知,剔除异常值后,SSC、TAC、Firm 的 RMSECV 分别下降了 15.1%、42.3%、25.0%,而 RPD 分别上升了 15.3%、32.9%、12.3%。其中,剔除异常值对提高 TAC 模型预测能力的作用最大。F 统计量数值表明,所建模型校正、交互验证数据皆具有回归显著性。

剔除异常值后 SSC、TAC、Firm 的校正、全交互验证 数据预测值-参考值相关关系图如图 5 所示。

表 2 剔除异常值前 SSC、TAC、Firm 的模型结果 Table 2 Results of the models of SSC TAC. Firm before outlier elimination

品质	$N_{ m f}$	$R^2_{\rm C}$	RMSEC	RE <sub>c</sub>	$F_{\rm C}$	$R^2_{\rm CV}$	RMSECV	$RE_{CV}$	$F_{\rm CV}$	RPD
SSC	8	0.7278	1.40	<i>Y</i> =0.7289 <i>X</i> +4.0202	989.3	0.6808	1.52	<i>Y</i> =0.7007 <i>X</i> +4.4146	789.1	1.76
TAC	6	0.2431	0.23	<i>Y</i> =0.2431 <i>X</i> +0.3030	53.3	0.0680	0.26	<i>Y</i> =0.1499 <i>X</i> +0.3421	12.1	1.03
Firm	4	0.3760	0.46	<i>Y</i> =0.3760 <i>X</i> +1.3291	102.4	0.3312	0.48	<i>Y</i> =0.3521 <i>X</i> +1.3811	84.2	1.23

表 3 SSC、TAC、Firm 剔除异常值前后的参考值统计 Table 3 Statistics of SSC, TAC, Firm before and after outlier elimination

统计量 ——	SSC	/Brix	TAC	C/%	Firm/(kg/cm <sup>2</sup> )		
	剔除前	剔除后	剔除前	剔除后	剔除前	剔除后	
п	372	351	168	131	172	154	
Min	9.1	9.1	0.00	0.00	0.76	0.76	
Max	25.3	25.3	1.23	0.92	4.00	3.28	
Ave	14.8	14.8	0.40	0.37	2.13	2.09	
Std	2.68	2.62	0.27	0.20	0.59	0.50	
Rx	16.2	16.2	1.23	0.92	3.24	2.52	
CV	18.1%	17.7%	66.8%	56.0%	27.7%	23.8%	

表 4 剔除异常值后 SSC、TAC、Firm 的模型结果 Table 4 Results of the models of SSC, TAC, Firm after outlier elimination

品质	$N_{ m f}$	$R^2_{\rm C}$	RMSEC	RE <sub>c</sub>	$F_{ m C}$	$R^2_{\rm CV}$	RMSECV	RE <sub>CV</sub>	$F_{ m CV}$	RPD
SSC	8	0.7902	1.20	<i>Y</i> =0.7902 <i>X</i> +3.0975	1314.5	0.7590	1.29	<i>Y</i> =0.7692 <i>X</i> +3.4088	1099.1	2.03
TAC	8	0.6052	0.13	<i>Y</i> =0.6052 <i>X</i> +0.1444	197.7	0.4489	0.15	<i>Y</i> =0.5248 <i>X</i> +0.1762	105.1	1.37
Firm	6	0.5723	0.32	<i>Y</i> =0.5723 <i>X</i> +0.8927	203.4	0.4797	0.36	<i>Y</i> =0.5206 <i>X</i> +1.0010	140.1	1.38



图 5 剔除异常值后预测值-参考值相关关系图

Fig.5 Correlation between the estimated and specified values after outlier elimination

#### 3 结 论

本研究针对 2020 年 5 月采集的 100 份樱桃样品按照 种植面积进行抽样,测定了樱桃 SSC、TAC、Firm 参考值, 采用统计分析结合直方图分布对樱桃 SSC、TAC、Firm 的 分布情况进行分析;同时以樱桃近红外光谱数据为自变 量、以樱桃品质数据参考值为因变量,建立樱桃 SSC、 TAC、Firm 的无损快速检测模型,采用异常值剔除对模型 进行优化,记录并比较模型参数。结果表明,采用统计分 析结合直方图方式可较直观地描述樱桃品质分布情况,可 为樱桃品质及其分布情况提供一定的参考; 剔除异常值后, SSC 模型 RPD 值大于 2.0, 可以满足对樱桃 SSC 的无损快 速检测需求, TAC、Firm 模型 RPD 值处于 1.0~1.5 之间, 可 分别满足樱桃 TAC、Firm 的快速无损快速初筛需求; 剔除 异常值后 SSC、TAC、Firm 模型的 RPD 值分别提高了 15.3%、32.9%、12.3%,说明剔除异常值有助于提高所建 模型的预测性能,其中对 TAC 模型预测性能的提高效果最 大;所建樱桃品质无损速测模型可为樱桃品质的大量无损 快速检测提供技术支持,进而可为樱桃品质无损快速分 级、提高樱桃产品附加值与市场竞争力提供技术保障。基 于无损速测模型可实现樱桃多品质高效速测与省力化检测, 从而可实现不同品质樱桃的物尽其用,进而可促进樱桃产 业节支增收与可持续发展。然而年度、地区、品种等因素 都会对模型准确度造成不同程度的影响,进一步扩大样品 代表性、完善樱桃品质及近红外光谱数据库、维护樱桃品

质无损速测模型等是接下来需要跟进的工作。

#### 参考文献

- WANG Z, CHEN J, FAN Y, *et al.* Evaluating photosynthetic pigment contents of maize using UVE-PLS based on continuous wavelet transform [J]. Comput Electron Agric, 2020, 169: 105160.
- [2] 宦克为,刘小溪,王欣,等.基于连续小波变换参数选择的小麦近红 外光谱模型优化方法研究[J].长春理工大学学报(自然科学版),2014, 37(5):146–150.

HUAN KW, LIU XX, WANG X, *et al.* Research on optimization method of wheat near-infrared spectroscopy model based on continuous wavelet transform parameter selection [J]. J Changchun Univ Sci Technol (Nat Sci Ed), 2014, 37(5): 146–150.

- [3] GAO J, NUYTTENS D, LOOTENS P, et al. Recognising weeds in a maize crop using a random forest machine-learning algorithm and near-infrared snapshot mosaic hyperspectral imagery [J]. Biosys Eng, 2018, 170: 39–50.
- [4] BRITO ALB, ARAÚJO DA, PONTES MJC, et al. Near infrared reflectance spectrometry classification of lettuce using linear discriminant analysis [J]. Anal Methods, 2015, 7(5): 1890–1895.
- [5] PEDRO AMK, FERREIRA MMC. Nondestructive determination of solids and carotenoids in tomato products by near-infrared spectroscopy and multivariate calibration [J]. Anal Chem, 2005, 77(8): 2505–2511.
- [6] KAMRUZZAMAN M, ELMASRY G, SUN DW, et al. Non-destructive assessment of instrumental and sensory tenderness of lamb meat using NIR hyperspectral imaging [J]. Food Chem, 2013, 141(1): 389–396.
- [7] HE HJ, SUN DW. Toward enhancement in prediction of *Pseudomonas* counts distribution in salmon fillets using NIR hyperspectral imaging [J].

LWT-Food Sci Technol, 2015, 62: 11-18.

- [8] SUN J, ZHOU X, HU Y, et al. Visualizing distribution of moisture content in tea leaves using optimization algorithms and NIR hyperspectral imaging [J]. Comput Electron Agric, 2019, 160: 153–159.
- [9] 鲍一丹,陈纳,何勇,等. 近红外高光谱成像技术快速鉴别国产咖啡 豆品种[J]. 光学精密工程, 2015, 23(2): 349–355.
  BAO YD, CHEN N, HE Y, *et al.* Rapid identification of coffee bean variety by near infrared hyperspectral imaging technology [J]. Optical Precis Eng, 2015, 23(2): 349–355.
- [10] 王冬,王坤,吴静珠,等.基于光谱及成像技术的种子品质无损速测研究进展[J].光谱学与光谱分析,2021,41(1):52-59.
  WANG D, WANG K, WU JZ, *et al.* Progress in research on rapid and non-destructive detection of seed quality based on spectroscopy and imaging technology [J]. Spectrosc Spect Anal, 2021, 41(1): 52-59.
- [11] ZHANG K, TAN ZL, CHEN CC, et al. Rapid prediction of camelina seed oil content using near-infrared spectroscopy [J]. Energ Fuel, 2017, 7: 1–21.
- [12] AMBROSE A, LOHUMI S, LEE WH, et al. Comparative nondestructive measurement of corn seed viability using Fourier transform near-infrared (FT-NIR) and Raman spectroscopy [J]. Sens Actuat B Chem, 2016, 224: 500–506.
- [13] 黄光群, 王晓燕, 韩鲁佳. 基于支持向量机的有机肥总养分含量 NIRS 分析[J]. 农业机械学报, 2010, 41(2): 93–98.
  HUANG GQ, WANG XY, HAN LJ. Near-infrared reflectance spectroscopy for total nutrient analysis in organic fertilizer using linear support vector machine [J]. Trans Chin Soc Agric Mach, 2010, 41(2): 93–98.
- [14] 宋乐,张红,倪晓宇,等. 基于 NIRS 技术的复合化肥成分定量分析及应用研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(1): 73–77.
   SONG L, ZHANG H, NI XY, *et al.* Quantitative analysis of contents in compound fertilizer and application research using near infrared reflectance spectroscopy [J]. Spectrosc Spectr Anal, 2014, 34(1): 73–77.
- [15] 王键, 汪六三, 王儒敬, 等. 基于优选波长的复合肥总氮含量可见/近 红外光谱分析[J]. 发光学报, 2018, 39(12): 1785–1791.
  WANG J, WANG LS, WANG RJ, *et al.* Analysis of total nitrogen in compound fertilizers by VIS-NIR spectroscopy [J]. Chin J Lumin, 2018, 39(12): 1785–1791.
- [16] CHE W, SUN L, ZHANG Q, et al. Pixel based bruise region extraction of

apple using Vis-NIR hyperspectral imaging [J]. Comput Electron Agric, 2018, 146: 12–21.

[17] 张鹤冬,吴静珠,韩平,等.近红外光谱变量选择及其在苹果可溶性 固形物含量无损速测中的应用[J].食品安全质量检测学报,2019,10(1): 209-214.

ZHANG HD, WU JZ, HAN P, *et al.* Variable selection of near infrared spectrum and its application in the non-destructive rapid detection for the soluble solid content in apples [J]. J Food Saf Qual, 2019, 10(1): 209–214.

- [18] GUO W, GU J, LIU D, et al. Peach variety identification using near-infrared diffuse reflectance spectroscopy [J]. Comput Electron Agric, 2016, 123: 297–303.
- [19] 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.

WANG D, ZHANG HD, ZHU YW, *et al.* Development and optimization of the rapid and non-destructive quantitative models of soluble solid content of cherry based on LVF-NIR spectrometer[J]. J Food Saf Qual, 2020, 11(3): 854–859.

[20] 王婷, 王冬, 韩平, 等. 灞桥樱桃多品质数据分析[J]. 食品安全质量检 测学报, 2019, 10(19): 6650–6655.

WANG T, WANG D, HAN P, *et al.* Data analysis of multi-quality of Baqiao cherry [J]. J Food Saf Qual, 2019, 10(19): 6650–6655.

(责任编辑:张晓寒郑丽)

## 作者简介



王 冬,博士,副研究员,主要研究方 向为振动光谱分析与化学计量学。 E-mail: wangd@brcast.org.cn



韩 平,博士,副研究员,主要研究方 向为农产品质量安全。 E-mail: hanp@brcast.org.cn