



光谱分析和光谱成像技术检测大豆品质的研究进展

郭 榛¹, 金诚谦^{1,2}, 刘 鹏¹, 唐小涵¹, 赵 男¹

(1. 山东理工大学 农业工程与食品科学学院, 山东 淄博 255022; 2. 农业农村部 南京农业机械化研究所, 江苏 南京 210014)

摘 要: 光谱分析和光谱成像技术结合了化学计量学方法, 可以用于检测物质中各成分的含量。随着我国大豆产业不断发展, 光谱分析和光谱成像技术已应用到大豆品质检测技术的各个方面。本文介绍光谱分析和光谱成像技术的基本原理; 归纳技术检测工艺, 包括大豆检测状态、光谱预处理方法、光谱特征提取方法和常用建模分析方法; 重点总结光谱分析和光谱成像技术在大豆品质检测领域定量分析和定性判别的应用成果。整理大豆水分、蛋白质、脂肪和其他功能性营养成分含量定量检测的研究进展; 归纳大豆品种鉴定、转基因大豆鉴别, 病虫害和大豆外观品质识别定性分析的研究进展。此外, 还对光谱分析和光谱成像技术在大豆品质检测领域的研究重点和不足进行讨论, 并从研究和应用两方面展望了今后的发展趋势。

关键词: 光谱分析技术; 光谱成像技术; 大豆; 品质检测; 定量检测; 定性分析

Research Progress of Spectral Analysis and Spectral Imaging Technology in Soybean Quality Detection

GUO Zhen¹, JIN Cheng-qian^{1,2}, LIU Peng¹, TANG Xiao-han¹, ZHAO Nan¹

(1. School of Agricultural Engineering and Food Science, Shandong University of Technology, Zibo 255022, China; 2. Nanjing Institute of Agricultural Mechanization, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Nanjing 210014, China)

Abstract: The spectral analysis and spectral imaging technology combined with chemometrics methods can determine the content of different components in a substance. With the continuous development of soybean industry in China, spectral analysis and spectral imaging technology have been applied to many aspects of soybean quality detection technology. Firstly, this paper briefly introduced the principle of spectral analysis and spectral imaging technology. Secondly, we summarized the technical detection technology, which including soybean detection state, spectral preprocessing method, spectral feature extraction method and common model analysis method. Finally, this paper focused on the application results of spectral analysis and spectral imaging technology in quantitative analysis and qualitative discrimination in the field of soybean quality detection. We conclude the research progress on quantitative determination of moisture, protein, fat and other functional nutrients, summarized the research progress on qualitative inorganic analysis of soybean variety identification, transgenic soybean identification, plant diseases and insect pests identification and qualitative analysis of soybean appearance quality. In addition, we also discussed the research emphases and shortcomings of spectral analysis and spectral imaging technology in the field of soybean quality detection, and prospected the future development trend from two aspects of research and application.

Keywords: spectral analysis technology; spectral imaging technology; soybean; quality detection; quantitative detection; qualitative analysis

大豆富含水分、蛋白质、脂肪、脂肪酸、异黄酮、磷脂等营养物质^[1-3], 是植物油的重要来源之一, 也被加工成豆制品和饲料, 是我国重要的经济作物, 同时是我国进口量最大的农产品^[4]。我国是传统的农业大国, 大豆产业在我国经济领域占有重要地位^[5]。2020 年, 我国大豆产量 1 960 万 t, 播种面积 987 万 hm², 同年总计进口大豆 10 033 万 t, 位居全球大豆进口国第一位。随着我国大豆产业不断发展, 大豆品质检测技术的重要性也愈加突出。目前大豆品质检测大多依赖肉眼识别和化学检测方法。人工检测判别准确率、客观性较差, 传统的化学检

测方法发展比较成熟, 能够对大豆化学成分组成和含量进行准确检测, 但相关方法操作比较繁琐, 而且会破坏样本, 污染环境, 且成本较高。两种检测方式并不适用于大规模检测。迫切需要检测速度快、准确率高、无损的大豆品质检测方法。光谱分析和光谱成像技术采集的光谱和图像信息中包含着样品物质化学性质的信息, 在光谱和图像信息与被测物质成分之间建立数学关联, 可以获得被测样品的检测结果^[6]。光谱和光谱成像技术有快速、准确、无损分析等优点, 已经广泛应用于果蔬^[7-9]、茶叶^[10-11]、肉类^[12-13]和其他农产品^[14-16]的品质检测。

收稿日期: 2021-06-30

基金项目: 国家自然科学基金(32171910); 国家重点研发计划(2017YFD0700305); 现代农业产业技术体系建设专项(CARS-04-PS26); 江苏省农业科技自主创新资金(CX(20)1007); 山东省科技创新基地专项(SDKJ2019014)。

第一作者: 郭榛(1998—), 男, 硕士研究生, 主要从事谷物品质检测研究。E-mail: 806559062@qq.com。

通讯作者: 金诚谦(1973—), 男, 博士, 教授, 研究员, 主要从事大田作物收获机械化与智能化技术研究。E-mail: 412114402@qq.com。

近些年来,随着光谱成像技术的不断发展,高光谱成像技术应用于大豆品种鉴定、转基因大豆鉴别,也可以将高光谱图像数据和光谱数据结合,实现物质含量可视化^[17]。基于光谱分析和光谱成像技术的大豆品质检测的主要目的是构建可靠、稳定的模型,建立图像、光谱信息与相关检测指标的数学关系,实现对相关检测指标的定量分析和定性判别。光谱分析技术结合化学计量学方法检测大豆物质成分含量时主要依靠发掘光谱数据信息,研究的重点是运用不同的预处理方法、特征波长提取方法、建模方法,最终建立有较强鲁棒性的模型^[18]。检测同一物质成分时,不同学者采用的光谱预处理方法不同,提取的特征波段也各不相同,因此物质成分与其特定吸收波段的联系还存有争议。如何将建立的模型迁移到便携设备上用于指导田间生产仍是主要的研究方向。本文总结了应用光谱分析和光谱成像技术进行大豆品质检测的主要研究进展,介绍光谱分析和光谱成像技术的基本原理,归纳了检测工艺技术,重点总结了光谱分析和光谱成像技术在大豆品质检测领域定量分析和定性判别的应用成果,并预测发展趋势,旨在促进光谱分析和光谱成像技术更好地应用于大豆品质检测。

1 技术原理

1.1 光谱分析技术

光谱分析技术通过光谱仪采集目标在一定波长范围内的光谱信息,研究其在特定波长下的光谱曲线来分析目标的物质结构和成分含量。其基本原理是不同物质对电磁波的吸收特征不同,每种物质都有特定的吸收特征,因此可以通过特定光谱域的光谱曲线判别目标的特定属性。光谱分析技术根据波段不同可分为可见光、近红外和中红外^[19],目前相关研究多集中于近红外波段。光谱分析技术采样分析速度快,对被检测样品损害小,处理方法强大。但是检测模型的准确性要建立在采集大量光谱信息的基础上,模型的稳定性和模型的传递也是需要考虑的问题。

1.2 光谱成像技术

光谱成像技术结合了光谱分析技术和成像技术的优点,光谱成像技术的图像既包含样品的图像信息也包含光谱信息,可以反映样品的几何和物理特征以及内部组分的化学和分子信息。光谱成像技术的图像是一个三维的图像块,特定波长范围内每个窄波段记录一个图像,也能反映二维图像上每个像素点的光谱信息和空间信息^[20]。根据波段数

量不同分为多光谱和高光谱,波段数越多则光谱的分辨率越高,越容易识别和区分目标信息。多光谱成像技术的图像一般由离散的多个波段组成;高光谱成像技术的图像由几十到上百个连续的波段组成。高光谱成像技术可以对多个目标同时进行检测,实现物质成分含量分布可视化,有着连续波段多、光谱分辨率高、“图谱合一”的优点。高光谱图像包含丰富的光谱数据,但是由此带来的缺陷是高光谱图像带有大量的冗余信息,导致采集和数据处理工作复杂,需要对数据进行降维处理,因此通常在基础研究中应用高光谱成像技术。

2 检测工艺技术

2.1 大豆检测状态

光谱分析和光谱成像技术检测大豆品质过程中,反射光谱和透射光谱应用较多,大豆籽粒表面光滑,会产生全反射,形状大小均会影响光谱穿透效果,因此大豆的检测状态对采集的光谱数据有重要影响。大豆检测状态可分为3种:大豆整体、籽粒粉末和单个籽粒。大豆整体检测是将大豆均匀平铺在器皿里并保持各样品铺放高度一致,或将样品直接铺放在试验台上采集光谱,较多地应用于光谱成像技术中,便于获取样品的平均光谱信息。谭克竹等^[21]通过采集大豆整体的高光谱图像,测定大豆异黄酮含量并对5个大豆品种进行鉴定。这种检测方式适合检测样品的整体状态,但需要较多的样品。籽粒粉末检测是将大豆籽粒粉碎后铺放在器皿里采集光谱信息。王丽萍等^[22]采集了大豆整体和粉碎后两种状态下的近红外光谱,检测了粗蛋白和粗脂肪含量。柴玉华等^[23]、孙君明等^[24]和王雪莲等^[25]检测大豆粉末的脂肪酸含量。相关研究表明,相比于整体状态,粉碎后样品的检测准确性较高,但这种方法会破坏样品,浪费种质资源。单个籽粒检测是直接采集单粒大豆的光谱信息。Han等^[26]采集了600个单粒大豆的光谱信息,Mark等^[27]使用近红外光谱仪采集了3200个单粒大豆光谱数据。这种方法可以获取大量的样本信息,模型的识别范围较好。国内对于单个大豆籽粒的研究还较少,主要原因是光谱仪采集配件的缺乏,而高光谱成像技术可同时采集多个目标的光谱和图像信息,可较好地避免这种限制。

2.2 光谱预处理方法

由于环境及暗电流等因素影响,光谱信息中包含背景和噪声,需要结合化学计量学方法对光谱进行预处理,消除噪声和无关信息^[28]。常用的光谱预

处理方法有净分析信号 (Net Analyte Signal, NAS)、离散小波变换 (Discrete Wavelet Transformation, DWT)、多元散射校正 (Multiplicative Scatter Correction, MSC)、正交信号校正 (Orthogonal Signal Correction, OSC)、平滑预处理 (Moving Average, MA)、标准正态变量 (Standard Normal Variate, SNV)、基线校正 (Baseline)、归一化 (Normalize) 和去趋势 (Detrending) 等。

2.3 光谱特征提取方法

为了提高模型运算速度,减少光谱冗余信息,需要进行光谱特征提取,包括光谱数据特征提取和光谱图像特征提取^[29]。光谱数据特征提取方法主要有相关系数法 (Correlation Coefficient, r)、主成分分析法 (Principal Components Analysis, PCA)、连续投影算法 (Successive Projections Algorithm, SPA)、竞争性自适应加权算法 (Competitive Adaptive Reweight Sampling, CARS)、递归特征消除 (Recursive Feature Elimination, RFE) 等。光谱图像特征主要包括纹理特征、颜色特征和形态特征。其中,2-D Gabor 变换和灰度共生矩阵是提取纹理特征常用的方法^[19]。

2.4 常用建模分析方法

结合化学计量学建立模型的目的是建立化学值与光谱、图像数据对应联系。模型的可靠性和准确性对于定量分析或定性判别具有重要意义。化学计量学建模方法可分为线性和非线性两类。线性方法包括偏最小二乘法 (Partial Least Squares, PLS)、主成分回归 (Principal Component Regression, PCR)、多元线性回归 (Multiple Linear Regression, MLR)、偏最小二乘判别分析 (Partial Least Squares Discrimination Analysis, PLS-DA) 等。非线性方法包括软独立建模分类法 (Soft Independent Modeling of Class Analogy, SIMCA)、极限学习机 (Extreme Learning Machine, ELM)、反向传播神经网络 (Back Propagation Neural Network, BPNN)、支持向量机 (Support Vector Machine, SVM)、偏最小二乘支持向量机算法 (Least Squares Support Vector Machine, LS-SVM) 等。其中,较为常用的方法为偏最小二乘法和反向传播神经网络。

3 在大豆品质检测上的应用

3.1 水分

水分含量会影响大豆的储藏期,是评价大豆品质的重要指标之一^[30]。薛雅琳等^[31]使用近红外光谱仪采集了中国不同地区的 154 份大豆的近红外光谱信息,建立的水分模型有效好的预测效果。

Daniela 等^[32]应用傅里叶近红外光谱技术对 100 份巴西大豆水分、蛋白质、灰分、碳水化合物的含量进行预测,采用 MSC、SNV、一二阶导数变换对平均光谱进行处理并建立 PLS 预测模型,对水分和蛋白质的预测结果较好。郭东升等^[33]同时研究大豆水分和粗脂肪含量检测,建立的 MSC-PLSR 模型和 Nor-PLSR 模型可以有效地分别对水分和粗脂肪进行定量分析,预测集相关系数分别为 0.905 5 和 0.929 5。为了提高预测精度,相关研究都对大豆进行了粉碎处理,对于大豆整体和单个籽粒的水分预测还有待研究,光谱波段集中于 400 ~ 2 500 nm,普遍应用的是 PLS 模型。

3.2 蛋白质和脂肪

蛋白质和脂肪含量是衡量大豆品质好坏的两个重要指标。传统的凯氏定氮法^[34]和索氏抽提法^[35]作为常规标准检测方法,检测准确性高,但也存在操作复杂、破坏样品、污染环境等弊端。

蛋白质和脂肪类物质在近红外区有丰富的吸收谱带,表现出特定的光谱特征^[36],近红外光谱技术常用于大豆蛋白质和脂肪含量的检测。李琳琳等^[37]分析数学处理方法和去散射校正方法及回归方法对模型准确性的影响,建立大豆蛋白质和粗脂肪含量近红外预测模型。王燕等^[38]采用二阶导数和 Norris 导数滤波法对近红外光谱数据进行预处理,分别对大豆干物质、粗蛋白质、粗脂肪、粗灰分 4 种成分建立 PLS 预测模型,对于干物质、粗蛋白质和粗脂肪含量有较为准确的预测效果,但对粗灰分含量的预测精度有待于提高。Ferreira 等^[39]研究表明除近红外以外,中红外光谱技术也可预测大豆水分、蛋白质、脂质和灰分含量,且均比化学方法节约大量时间。

研究者从不同角度优化大豆蛋白质和脂肪的近红外检测模型。王丽萍等^[22]发现在使用近红外光谱预测蛋白质和粗脂肪含量时,样品的状态对预测模型的准确度有一定的影响,大豆样品粉碎后检测效果更好。王翠秀等^[40]的研究结果表明 CARS 能减少建模所需波长变量个数,有效提高模型精度,并发现 OSC-CARS-PLS 对于蛋白质含量的检测效果最佳,OSC-CARS-反向神经网络更适用于粗脂肪含量检测。Xu 等^[41]分析预测去除种皮大豆样品的水溶性蛋白质含量,对采集的近红外光谱进行 MSC 和 Savitsky-Golay 变换,建立了偏最小二乘回归模型。有学者从仪器和模型转移方面进行研究。邹涛等^[42]对 IAS-2000 便携式近红外光谱仪硬件结构及建模算法进行优化研究,建立大豆粗蛋白的校正模型。还研究了模型共享问题,对于检测方法大

规模推广应用具有一定意义。

上述研究多集中于近红外波段,对中红段波段的研究还较少,研究发现预处理光谱能在一定程度上提高模型预测精度,偏最小二乘法仍是最常用的方法,其他的建模方法还有待于进一步研究,总体而言在大豆蛋白质和粗脂肪含量检测方面的研究正在不断深入。

3.3 功能性营养成分

3.3.1 脂肪酸 大豆脂肪酸主要包括油酸、亚油酸、亚麻酸、硬脂酸和棕榈酸,脂肪酸含量及其配比决定着大豆油的品质,也影响着大豆油的营养、贮藏和加工,因而大豆脂肪酸含量的测定是大豆新品种选育和油脂加工的关键^[43]。传统标准测定方法采用高效液相色谱法和气相色谱法^[44],耗时长、成本高,限制大批量样品的测定。为此一些专家学者开展大豆脂肪酸含量的光谱检测技术。柴玉华等^[23]采集黑龙江省各地的25份大豆样品的光谱数据,分别采用多元线性回归方法和偏最小二乘法建立定标模型,并用传统方法测得脂肪酸含量,两种方法检测结果相关性为94.87%,校正标准偏差为0.377 5。王雪莲等^[25]利用近红外光谱仪建立大豆脂肪酸含量定标方程,并通过内部交叉法验证优化方程,但对于定标方程的建立过程介绍较少。

相关学者的研究结果普遍对油酸和总脂肪酸含量的预测精度较高,对其他含量较低的脂肪酸含量预测效果较差。孙君明等^[24]提取光谱特征波长后,采用偏最小二乘回归和交叉验证法验证傅里叶近红外光谱预测108个大豆品种的脂肪酸含量的可行性。其预测模型对油酸有较好的预测效果,但对于其他脂肪酸组分预测效果一般。Patil等^[45]研究近红外透射光谱法测定大豆种子脂肪酸组成的潜力,采用改进的偏最小二乘回归方法建立了612个大豆中最主要脂肪酸的化学计量学模型。在外部验证中,油酸、亚油酸和棕榈酸的预测精度较高,而亚麻酸和硬脂酸的预测精度较差。

上述研究中,相关学者利用光谱分析仪测定脂肪酸含量时,大多对大豆样品进行了粉碎处理来减少大小差异和不均一性对光谱扫描造成的影响,大豆脂肪酸含量无损检测方法还有待于进一步研究。国外学者较多地以完整单粒大豆为研究对象,相关方法可以借鉴学习。Han等^[26]采集了600个单粒大豆的光谱信息,建立大豆种子高油酸含量的校准方程,在减小交叉验证标准误差和提高预测决定系数的基础上,选择了油酸的最佳预测方程,对于总油酸和50%以上油酸的含量具有较好的预测性。

Roberts等^[46]采用近红外光谱法对大豆子叶中的5种脂肪酸含量进行定量分析,并较为成功地预测了其中4种脂肪酸含量。

3.3.2 异黄酮 光谱分析和光谱成像技术可以有效预测总异黄酮含量,但对各异黄酮组分不能有效预测。王力立等^[47]验证傅里叶近红外光谱预测大豆中总异黄酮含量的可行性,但是各异黄酮组分的近红外模型决定系数均低于0.75,不能达到准确预测。谭克竹^[21]基于高光谱成像技术采集大豆的高光谱图像并提取光谱信息,选择特征波长后采用支持矢量回归算法建立大豆异黄酮含量预测模型, $R^2=0.971\ 3$,方均误差为0.087,预测效果较好。Mark等^[27]使用近红外光谱仪采集了3 200个单粒大豆光谱数据,对预处理的光谱数据进行线性回归分析,建立优化的预测模型,对于总异黄酮含量预测效果较好,但对于总皂苷含量预测结果较差。

3.3.3 氨基酸 李楠等^[48]采用傅里叶近红外光谱技术对经高效液相色谱法分析的197份大豆的18种氨基酸含量进行模拟预测,发现对甘氨酸、谷氨酸等15种含量较高的氨基酸可进行准确预测,对于其他种类氨基酸预测效果较差,该研究与糙米氨基酸含量预测^[49]的研究结果相似。

3.3.4 膳食纤维 Daniela等^[50]以传统方法作为参考,用VIP算法选择变量后,使用近红外光谱数据所建立的PLS回归模型可以准确地预测巴西大豆总膳食纤维含量。

3.3.5 磷脂和花青素 马莉等^[51]应用近红外光谱法检测大豆磷脂含量,采用偏最小二乘回归建立了测量光谱与大豆磷脂主要成分浓度间的预测模型。Hanim等^[52]使用傅里叶近红外光谱技术和傅里叶近红外光谱技术成功预测单粒大豆总花青素和不同类型花青素含量。

3.4 品种鉴定

大豆品种繁多,准确、快速鉴定大豆品种对保护农民利益、鉴定种子质量以至保障国家粮食食品安全具有重要意义,相关学者在大豆品种鉴定领域进行了广泛研究。研究大都集中在400~1 000 nm波段范围,对于高光谱成像技术应用较多,反向传播神经网络^[53-54]、T-S模糊神经网络^[54-55]、极限学习机、随机森林^[56]等模型对供试大豆品种鉴定准确率均较高,且较常用的模型为反向传播神经网络方法,但是所构建的模型常针对特定品种,需要适当调整并进行训练后才能用于其他大豆品种的鉴定。朱大洲等^[57]针对大豆育种过程中早代快速筛选的问题,结合SIMCA对单粒大豆的近红外光谱数据建

立定性分析模型,能够准确鉴定垦鉴豆 43 和中黄 13。刘瑶等^[56]将整个高光谱波段分解成 3 个子段,分别在每个子段作主成分分析提取特征变量,发现第二波段的识别效果优于全波段。Zhu 等^[58]采集了 10 个品种大豆的高光谱图像,对光谱进行预处理并提取特征波长,发现 MSC-CARS-EL 模型鉴定效果最好,训练集和测试集准确率都达到 100%。国外大豆品种较为单一,采用光谱分析和光谱成像技术对大豆品种鉴定的报道较少。

3.5 转基因鉴别

转基因大豆的安全性一直受到广泛关注,研究转基因大豆与非转基因大豆的鉴别和检测方法具有重要意义。吴江等^[59]对大豆近红外反射光谱数据进行预处理,建立 PCA-反向传播神经网络模型,对 22 个样本的鉴别率达到 100%,但是其只对单一转基因大豆品种进行鉴别。方慧等^[60]对 3 个大类大豆品种建立 PLS-DA 模型,验证中红外光谱技术鉴别转基因大豆品种的可行性。王海龙等^[61]对非转基因大豆亲本及其转基因大豆品种进行鉴别,采用近红外高光谱成像技术,分别基于预处理全谱、未预处理全谱、特征波长建立 PLS-DA 的模型,取得较好的鉴别成功率。以上学者在近红外和中红外波段都进行了研究,建立的反向传播神经网络模型和偏最小二乘判别模型鉴别成功率平均都在 80% 以上,但相关研究涉及的转基因大豆品种较少,还需扩大转基因大豆品种范围。同时,发掘高光谱的图像信息并与光谱信息结合是相关研究的发展方向。

3.6 病虫害

应用光谱分析和光谱成像技术检测大豆病虫害的研究还较少。Chelladurai 等^[62]基于软 X 射线和近红外高光谱成像技术建立判别模型,检测大豆是否被豇豆象甲侵染,利用近红外高光谱数据建立的 LDA 分类模型对未侵染和侵染种子的分类准确率分别达到 86% 和 87% 以上,QDA 判别模型对 79% 以上的未侵染种子和侵染种子进行了正分化。

3.7 外观

有学者对菜用大豆的外观等级划分进行研究。黄敏等^[63]基于高光谱成像技术对菜用大豆厚度进行检测,采集 200 份菜用大豆的高光谱图像并用数字式游标卡尺测量其厚度,采用 MSC 和 SNV 对 400~1 000 nm 范围内的光谱数据进行预处理,再结合 PLS 和 MLR 建立菜用大豆厚度的定量分析模型。模型预测结果表明,基于 MSC 预处理后的 PLS 模型

预测效果较优。此外,Wang 等^[64]利用近红外光谱和随机森林变量选择方法对大豆种子开裂进行判别分析,测试集识别准确率达到 80%。

4 结论与展望

近年来光谱分析和光谱成像技术的大部分相关研究围绕探求提取特征波段和建立最优模型进行。发现对光谱进行预处理可以消除无效信息和噪声,有效提高模型的预测效果。在提取特征波段过程中,邻近学科的新方法在光谱数据处理环节使用得越来越多,比如变量组合集群分析法、粒子群优化算法、遗传算法、深度学习等。为了建立鲁棒性较好的模型,需要有尽可能多的建模样品,扩大研究的大豆品种范围,保持光谱采集条件一致性,减少仪器和人为误差。同时,研究无损检测方法,对保护优质种子资源具有重要意义。同样光谱分析和光谱成像技术在大豆品质检测方面的应用也有一些不足,研究中可以对水分、蛋白质和脂肪含量进行有效预测,对总脂肪酸、总异黄酮、总膳食纤维含量预测效果较好,但对含量较低的脂肪酸和各异黄酮组分预测效果较差,这说明光谱分析和光谱成像技术适合检测成分含量较高的物质,组分含量一般应大于 0.1%。

目前光谱分析和光谱成像技术检测大豆品质还多处于基础研究阶段,建立大量可长期使用的预测模型,形成相关技术检测大豆品质的标准流程是一个长远目标。这就需要研究范围包含我国大部分的大豆品种,扩大研究的波段范围,并尝试多种光谱预处理方法,运用更多的提取特征波长和建模的新方法,总结出具有普适性的检测方法和流程,同时也要保证所建模型的鲁棒性和传递性。应用方面,从实验室向实际应用的转变是整体发展趋势。国内已经开始生产光谱仪和高光谱成像仪,但是其核心部件依然需要进口,购买成本比较昂贵,光谱设备的国产化、低成本化将是未来发展的一个重要方向。目前使用的光谱仪和光谱成像仪体积均较为庞大、不易携带,使得研究局限于实验室内。简化模型算法,优选检测大豆特定物质成分的特征波长,开发手持式、便携式的检测专用设备具有重要意义,如 Olesen 等^[65]使用了 LED 光源的多光谱成像设备检测蓖麻种子活力,仅用 19 个波段就取得了 96% 的识别准确率。这种由 LED 光源组成的小型多光谱设备是未来检测设备小型化的重要方向。

参考文献

- [1] 李福山, 常汝镇, 舒世珍, 等. 栽培、野生、半野生大豆蛋白质含量及氨基酸组成的初步分析[J]. 大豆科学, 1986, 5(1): 65-72. (LI F S, CHANG R Z, SHU S Z, et al. Preliminary analysis of protein content and amino acid composition of cultivated, wild and semi wild soybean[J]. Soybean Science, 1986, 5(1): 65-72.)
- [2] 赵淑敏, 谭红梅, 葛红霞, 等. 大豆磷脂及其应用[J]. 大豆通报, 2006(1): 39-42. (ZHAO S M, TAN H M, GE H X, et al. Soybean phospholipid and its application[J]. Soybean Science & Technology, 2006(1): 39-42.)
- [3] 刘志胜, 李里特, 辰巳英三. 大豆异黄酮及其生理功能研究进展[J]. 食品工业科技, 2000(1): 78-80. (LIU Z S, LI L T, CHENSI Y S. Research progress on soybean isoflavones and their physiological functions[J]. Science and Technology of Food Industry, 2000(1): 78-80.)
- [4] 韩立德, 盖钧镒, 张文明. 大豆营养成分研究现状[J]. 种子, 2003(5): 58-60. (HAN L D, GAI J Y, ZHANG W M. Research status of soybean nutrition[J]. Seed, 2003(5): 58-60.)
- [5] 杨树果. 产业链视角下的中国大豆产业经济研究[D]. 北京: 中国农业大学, 2014. (YANG S G. Economics of soybean industry in China from industry chain perspective[D]. Beijing: China Agricultural University, 2014.)
- [6] 卢俊玮, 田容才, 花宇辉, 等. 光谱技术在甘蓝型油菜品质检测中的研究进展[J]. 激光生物学报, 2020, 29(4): 289-294, 301. (LU J W, TIAN R C, HUA Y H, et al. Research progress of spectral technology in detection of quality in oilseed rape (*Brassica napus* L.)[J]. Acta Laser Biology Sinica, 2020, 29(4): 289-294, 301.)
- [7] CHEN H Z, QIAO H L, FENG Q X, et al. Rapid detection of pomelo fruit quality using near-infrared hyperspectral imaging combine with chemometric methods[J]. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2021, 8: 616943.
- [8] SYLVIE B, DANIEL C, CHRISTOPHER J C. Contributions of fourier-transform mid infrared (FT-MIR) spectroscopy to the study of fruit and vegetables: A review[J]. Postharvest Biology and Technology, 2019, 148: 1-14.
- [9] LU Y Z, WOUTER S, MOON K, et al. Hyperspectral imaging technology for quality and safety evaluation of horticultural products: A review and celebration of the past 20-year progress[J]. Postharvest Biology and Technology, 2020, 170: 111318.
- [10] HUANG Y F, DONG W T, ALIREZA S, et al. Development of simple identification models for four main catechins and caffeine in fresh green tea leaf based on visible and near-infrared spectroscopy[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2020, 173: 105388.
- [11] YUAN L, YAN P, HAN W Y, et al. Detection of anthracnose in tea plants based on hyperspectral imaging[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2019, 167: 105039.
- [12] MOHAMMED K, GAMAL E, SUN D W, et al. Prediction of some quality attributes of lamb meat using near-infrared hyperspectral imaging and multivariate analysis[J]. Analytica Chimica Acta, 2011, 714: 57-67.
- [13] YAO X L, CAI F H, ZHU P Y, et al. Non-invasive and rapid pH monitoring for meat quality assessment using a low-cost portable hyperspectral scanner[J]. Meat Science, 2019, 152: 73-80.
- [14] 李江波, 饶秀勤, 应义斌. 农产品外部品质无损检测中高光谱成像技术的应用研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(8): 2021-2026. (LI J B, RAO X Q, YING Y B. Research progress on hyperspectral imaging in nondestructive detection of agricultural products disease and pest[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2011, 31(8): 2021-2026.)
- [15] NICOLA C, MARTIN B W, IAN D F. Protein content prediction in single wheat kernels using hyperspectral imaging[J]. Food Chemistry, 2018, 240: 32-42.
- [16] BA T L. Application of deep learning and near infrared spectroscopy in cereal analysis[J]. Vibrational Spectroscopy, 2020, 106: 103009.
- [17] WANG Y, WANG C X, DONG F J, et al. Integrated spectral and textural features of hyperspectral imaging for prediction and visualization of stearic acid content in lamb meat[J]. Analytical methods: Advancing methods and applications, 2021, 13(36): 4157-4168.
- [18] 郭志明, 郭闯, 王明明, 等. 果蔬品质安全近红外光谱无损检测研究进展[J]. 食品安全质量检测学报, 2019, 10(24): 8280-8288. (GUO Z M, GUO C, WANG M M, et al. Research advances in nondestructive detection of fruit and vegetable quality and safety by near infrared spectroscopy[J]. Journal of Food Safety & Quality, 2019, 10(24): 8280-8288.)
- [19] 何勇, 彭继宇, 刘飞, 等. 基于光谱和成像技术的作物养分生理信息快速检测研究进展[J]. 农业工程学报, 2015, 31(3): 174-189. (HE Y, PENG J Y, LIU F, et al. Critical review of fast detection of crop nutrient and physiological information wit spectral and imaging technology[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2015, 31(3): 174-189.)
- [20] 高迎旺, 耿金凤, 饶秀勤. 果蔬采后内部损伤无损检测研究进展[J]. 食品科学, 2017, 38(15): 277-287. (GAO Y W, GENG J F, YAO X Q. Non-invasive bruise detection in postharvest fruits and vegetables: A review[J]. Food Science, 2017, 38(15): 277-287.)
- [21] 谭克竹. 基于高光谱图像和机器视觉技术的大豆品质检测研究[D]. 哈尔滨: 东北农业大学, 2014. (TAN K Z. Research on quality of soybean using hyperspectral imaging and machine vision technique[D]. Harbin: Northeast Agricultural University, 2014.)
- [22] 王丽萍, 陈文杰, 赵兴忠, 等. 基于近红外漫反射光谱法的大豆粗蛋白和粗脂肪含量的快速检测[J]. 大豆科学, 2019, 38(2): 280-285. (WANG L P, CHEN W J, ZHAO X Z, et al. Rapid determination of crude protein and crude oil content of soybean based on near infrared diffuse reflectance spectroscopy[J]. Soybean Science, 2019, 38(2): 280-285.)
- [23] 柴玉华, 谭克竹. 基于近红外分析技术检测大豆脂肪酸含量的研究[J]. 农业工程学报, 2007(1): 238-241. (CHAI Y H, TAN K Z. Measurement of soybean fatty acid content by near infrared spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2007(1): 238-241.)

- [24] 孙君明, 韩粉霞, 闫淑荣, 等. 傅里叶近红外反射光谱法快速测定大豆脂肪酸含量[J]. 光谱学与光谱分析, 2008(6): 1290-1295. (SUN J M, HAN F X, YAN S R, et al. Rapid determination of fatty acids in soybeans by FT-near-infrared reflectance spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008(6): 1290-1295.)
- [25] 王雪莲, 薛雅琳, 赵会义, 等. 近红外法测定大豆脂肪酸值方法的研究[J]. 中国粮油学报, 2009, 24(8): 152-154. (WANG X L, XUE Y L, ZHAO H Y, et al. Measuring soybean fatty acid value by near-infrared spectroscopy technique[J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2009, 24(8): 152-154.)
- [26] HAN S I, CHAE J H, KRISTIN B, 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.
- [27] MARK A B, MUKTI S, MICHAEL J B, et al. Quantitative NIR determination of isoflavone and saponin content of ground soybeans[J]. Food Chemistry, 2020, 317: 126373.
- [28] SHEN L Z, GAO M F, YAN J W, et al. Hyperspectral estimation of soil organic matter content using different spectral preprocessing techniques and PLSR method[J]. Remote Sensing, 2020, 12(7): 1206.
- [29] CHENG J H, QU J H, SUN D W, et al. Visible/near-infrared hyperspectral imaging prediction of textural firmness of grass carp (*Ctenopharyngodon idella*) as affected by frozen storage[J]. Food Research International, 2014, 56: 190-198.
- [30] 曹毅, 崔国华. 大豆安全储藏技术综述[J]. 粮食储藏, 2005(3): 17-23. (CAO Y, CUI G H. Review about safe storage technology of soybean[J]. Grain Storage, 2005(3): 17-23.)
- [31] 薛雅琳, 王雪莲, 赵会义, 等. 利用近红外分析技术测定大豆水分含量方法的研究[J]. 中国油脂, 2009, 34(7): 69-71. (XUE Y L, WANG X L, ZHAO H Y, et al. Measurement of moisture content in soybean by near-infrared spectroscopy technique[J]. China Oils and Fats, 2009, 34(7): 69-71.)
- [32] DANIELA S F, JULIANA A L P, RONEI J P. Fourier transform near-infrared spectroscopy (FT-NIRS) application to estimate Brazilian soybean [*Glycine max* (L.) Merrill] composition[J]. Food Research International, 2013, 51(1): 53-58.
- [33] 郭东升, 张志勇, 武志明, 等. 基于近红外光谱的大豆水分和粗脂肪含量的快速检测[J]. 食品安全质量检测学报, 2020, 11(20): 7378-7384. (GUO D S, ZHANG Z Y, WU Z M, et al. Rapid detection of moisture and crude fat content in soybean based on near infrared spectroscopy[J]. Journal of Food Safety & Quality, 2020, 11(20): 7378-7384.)
- [34] 陈智慧, 史梅, 王秋香, 等. 用凯氏定氮法测定食品中的蛋白质含量[J]. 新疆畜牧业, 2008(5): 22-24. (CHEN Z H, SHI M, WANG Q X, et al. Determination of protein content in food by Kjeldahl method[J]. XINJIANG XUMUYE, 2008(5): 22-24.)
- [35] 姚虹. 索氏提取法测定脂肪含量方法改进[J]. 中州大学学报, 1996(4): 64-65. (YAO H. Improvement of Soxhlet extraction method for determination of fat content[J]. Journal of Zhongzhou University, 1996(4): 64-65.)
- [36] 朱丽伟, 马文广, 胡晋, 等. 近红外光谱技术检测种子质量的应用研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(2): 346-349. (ZHU L W, MA W G, HU J, et al. Advances of NIR spectroscopy technology applied in seed quality detection[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(2): 346-349.)
- [37] 李琳琳, 金华丽, 崔彬彬, 等. 基于近红外透射光谱的大豆蛋白质和粗脂肪含量快速检测[J]. 粮食与油脂, 2014, 27(12): 57-60. (LI L L, JIN H L, CUI B B, et al. Rapid determination of soybean protein and crude fat content by near-infrared transmittance spectroscopy[J]. Cereals & Oils, 2014, 27(12): 57-60.)
- [38] 王燕, 鞠涛, 刘晓兰, 等. 近红外光谱法预测大豆营养成分含量模型的建立和应用[J]. 中国畜牧杂志, 2014, 50(7): 62-65. (WANG Y, JU T, LIU X L, et al. Building and application of soybean nutrients content model predicted by near infrared spectral method[J]. Chinese Journal of Animal Science, 2014, 50(7): 62-65.)
- [39] FERREIRA D S, GALÃO O F, PALLONE J A L, et al. Comparison and application of near-infrared (NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopy for determination of quality parameters in soybean samples[J]. Food Control, 2014, 35(1): 227-232.
- [40] 王翠秀, 曹见飞, 顾振飞, 等. 基于近红外光谱大豆蛋白质、脂肪快速无损检测模型的优化构建[J]. 大豆科学, 2019, 38(6): 968-976. (WANG C X, CAO J F, GU Z F, et al. Rapid nondestructive test of soybean protein and fat by near infrared spectroscopy combined with different model methods[J]. Soybean Science, 2019, 38(6): 968-976.)
- [41] XU R X, HU W, ZHOU Y C, et al. Use of near-infrared spectroscopy for the rapid evaluation of soybean [*Glycine max* (L.) Merri.] water soluble protein content[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2020, 224: 117400.
- [42] 邹涛, 兰树明, 阎巍, 等. 基于便携式近红外光谱仪的大豆蛋白波长优选[J]. 分析仪器, 2019(3): 94-99. (ZOU T, LAN S M, YAN W, et al. Soybean protein wavelength optimization based on portable NIR spectrometer[J]. Analytical Instrumentation, 2019(3): 94-99.)
- [43] 胡明祥, 梁歧, 孟祥勋. 我国大豆品种脂肪酸组成的分析研究[J]. 吉林农业科学, 1986(1): 12-17. (HU M X, LIANG Q, MENG X X. Analysis of fatty acid composition of soybean varieties in China[J]. Journal of Northeast Agricultural Sciences, 1986(1): 12-17.)
- [44] 李丹华, 朱圣陶. 气相色谱法测定常见植物油中脂肪酸[J]. 粮食与油脂, 2006(8): 46-48. (LI D H, ZHU S T. Determination of fatty acids in vegetable oils by gas chromatography[J]. Cereals & Oils, 2006(8): 46-48.)
- [45] PATIL A G, OAK M D, TAWARE S P, et al. Nondestructive estimation of fatty acid composition in soybean [*Glycine max* (L.) Merrill] seeds using near-infrared transmittance spectroscopy[J]. Food Chemistry, 2009, 120(4): 1210-1217.
- [46] ROBERTS C A, REN C, BEUSELINCK P R, et al. Fatty acid profiling of soybean cotyledons by near-infrared spectroscopy[J]. Applied Spectroscopy, 2006, 60(11): 1328.
- [47] 王力立, 段灿星, 双少敏, 等. 大豆中异黄酮含量的测定及其近

- 红外分析[J]. 食品科技, 2011, 36(1): 242-246. (WANG L L, DUAN C X, SHUANG S M, et al. Determine the isoflavones content in soybean and analysis by near-infrared reflectance spectroscopy(NIRS)[J]. Food Science and Technology, 2011, 36(1): 242-246.)
- [48] 李楠, 许韵华, 宋雯雯, 等. 利用近红外光谱技术快速检测大豆氨基酸含量[J]. 植物遗传资源学报, 2012, 13(6): 1037-1044. (LI N, XU Y H, SONG W W, et al. A rapid method for detecting amino acid compositions in soybean by using near-infrared spectroscopy[J]. Journal of Plant Genetic Resources, 2012, 13(6): 1037-1044.)
- [49] WU J G, SHI C H, ZHANG X M. Estimating the amino acid composition in milled rice by near-infrared reflectance spectroscopy[J]. Field Crops Research, 2002, 75(1): 1-7.
- [50] DANIELA S F, RONEI J P, JULIANA AL P. Evaluation of dietary fiber of Brazilian soybean (*Glycine max*) using near-infrared spectroscopy and chemometrics[J]. Journal of Cereal Science, 2015, 64: 43-47.
- [51] 马莉, 孙日飞, 刘超群. 近红外光谱法快速检测大豆磷脂[J]. 现代食品, 2018(16): 93-96, 99. (MA L, SUN R F, LIU C Q. Rapid detection of soybean phospholipids by near infrared spectroscopy[J]. Modern Food, 2018(16): 93-96, 99.)
- [52] HANIM Z A, RAHUL J, RUDIATI E M, et al. Nondestructive measurement of anthocyanin in intact soybean seed using Fourier Transform Near-Infrared (FT-NIR) and Fourier Transform Infrared (FT-IR) spectroscopy[J]. Infrared Physics and Technology, 2020, 111: 103477.
- [53] 杨冬风, 朱洪德. 基于近红外透射光谱分析和反向传播神经网络的大豆品种识别[J]. 大豆科学, 2013, 32(2): 249-253. (YANG D F, ZHU H D. Recognition of soybean varieties based on near infrared transmittance spectroscopy and BP neural network[J]. Soybean Science, 2013, 32(2): 249-253.)
- [54] TAN K Z, WANG R T, LI M Y, et al. Discriminating soybean seed varieties using hyperspectral imaging and machine learning[J]. Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering, 2019, 19(4): 1001-1015.
- [55] 柴玉华, 毕文佳, 谭克竹, 等. 基于高光谱图像技术的大豆品种无损鉴别[J]. 东北农业大学学报, 2016, 47(3): 86-93. (CHAI Y H, BI W J, TAN K Z, et al. Nondestructive identification of soybean seed varieties based on hyperspectral image technology[J]. Journal of Northeast Agricultural University, 2016, 47(3): 86-93.)
- [56] 刘瑶, 谭克竹, 陈月华, 等. 基于分段主成分分析和高光谱技术的大豆品种识别[J]. 大豆科学, 2016, 35(4): 672-678. (LIU Y, TAN K Z, CHEN Y H, et al. Variety recognition of soybeans using segmented principal component analysis and hyperspectral technology[J]. Soybean Science, 2016, 35(4): 672-678.)
- [57] 朱大洲, 王坤, 周光华, 等. 单粒大豆的近红外光谱特征及品种鉴别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(12): 3217-3221. (ZHU D Z, WANG K, ZHOU G H, et al. The NIR spectra based variety discrimination for single soybean seed[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(12): 3217-3221.)
- [58] ZHU S L, CHAO M N, ZHANG J Y, et al. Identification of soybean seed varieties based on hyperspectral imaging technology[J]. Sensors, 2019, 19(23): 5225.
- [59] 吴江, 黄富荣, 黄才欢, 等. 近红外光谱结合主成分分析和反向传播神经网络的转基因大豆无损鉴别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(6): 1537-1541. (WU J, HUANG F R, HUANG C H, et al. Study on near infrared spectroscopy of transgenic soybean identification based on principal component analysis and neural network[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(6): 1537-1541.)
- [60] 方慧, 张昭, 王海龙, 等. 基于中红外光谱技术鉴别转基因大豆的方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(3): 760-765. (FANG H, ZHANG Z, WANG H L, et al. Identification of transgenic soybean varieties using mid-infrared spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2017, 37(3): 760-765.)
- [61] 王海龙, 杨向东, 张初, 等. 近红外高光谱成像技术用于转基因大豆快速无损鉴别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(6): 1843-1847. (WANG H L, YANG X D, ZHANG C, et al. Fast identification of transgenic soybean varieties based near infrared hyperspectral imaging technology[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(6): 1843-1847.)
- [62] CHELLADURAI V, KARUPPIAH K, JAYAS D S, et al. Detection of *Callosobruchus maculatus* (F.) infestation in soybean using soft X-ray and NIR hyperspectral imaging techniques[J]. Journal of Stored Products Research, 2014, 57: 43-48.
- [63] 黄敏, 万相梅, 朱启兵, 等. 基于高光谱图像技术的菜用大豆厚度检测[J]. 食品与生物技术学报, 2012, 31(11): 1142-1147. (HUANG M, WAN X M, ZHU Q B, et al. Thickness measurement of green soybean using hyperspectral imaging technology[J]. Journal of Food Science and Biotechnology, 2012, 31(11): 1142-1147.)
- [64] WANG L S, HUANG Z L, WANG R J. Discrimination of cracked soybean seeds by near-infrared spectroscopy and random forest variable selection[J]. Infrared Physics & Technology, 2021, 115: 103731.
- [65] OLESEN M H, NIKNESSHAN P, SHRESTHA S, et al. Viability prediction of *Ricinus communis* L. seeds using multispectral imaging[J]. Sensors, 2015, 15(2): 4592-4604.