

近红外光谱的结球甘蓝可溶性糖含量测定

李鸿强^{1,2}, 孙红¹, 李民赞^{1*}

1. 中国农业大学现代精细农业系统集成研究教育部重点实验室, 北京 100083

2. 河北建筑工程学院理学院, 河北 张家口 075000

摘要 结球甘蓝是一种富含碳水化合物的常见蔬菜,可溶性糖含量是决定其品质的重要参数。可溶性糖易溶于水,是蔬菜和水果口味的有效调节剂。作为碳水化合物,可溶性糖由三种元素 C, H 和 O 组成,其分子吸收光谱主要由被检测材料的分子中 C—H, O—H 和 C=O 等基团的组合频率吸收和倍频吸收组成,包含丰富的有机物信息。因此,采用近红外光谱和化学计量学方法,探索结球甘蓝可溶性糖含量的快速检测方法。用德国布鲁克公司的 MATRIX-I 型傅里叶变换近红外光谱仪采集 161 份结球甘蓝样本光谱数据。波数范围: 12 800~4 000 cm^{-1} (780~2 500 nm)。萘酮比色法测量样本的可溶性糖。综合应用马氏距离法(MD)和蒙特卡洛交叉验证法(MCCV)剔除异常样本,采用 Kennard-Stone(K-S)法将样本按照给定比例划分为校正集和验证集。分别使用 Savitzky-Golay 卷积平滑(S-G),一阶导数(FD),二阶导数(SD),多元散射校正(MSC)和变量标准化(SNV)及它们的组合共 12 种方法对样本进行光谱预处理,获得最佳预处理方法,提高光谱数据的信噪比。采用竞争性自适应重加权采样法(CARS)筛选偏最小二乘回归(PLS)模型中回归系数绝对值大的波数点,去掉回归系数绝对值小的波数点,以有效选择与所测特性值相关的最优波数组合,获得具有良好鲁棒性和强预测能力的校正模型。使用模型决定系数 R^2 、交互验证均方根误差(RMSECV)、预测均方根误差(RMSEP)作为模型精度评价指标。根据蒙特卡洛交叉验证法和马氏距离剔除异常样本的原理,共剔除 10 个光谱或者化学值异常的样本。最终参与建模分析的样本个数为 151。异常样本剔除后,通过 K-S 法将样本按照 3:1 被分成校正集(110 个样本)和验证集(41 个样本)。使用原始光谱数据,预处理后的光谱数据和对应于优选波数的光谱数据,建立 PLS 模型。结果表明,利用 MSC+FD 光谱预处理可以提高建模精度,校正集 R^2 从处理前的 0.68 增长到 0.93, MSC+FD 是本研究中理想的光谱数据预处理方法。利用 CARS 法共优选了 84 个建模波数。在 12 000~10 000 cm^{-1} 波数区域内,有 O—H 键 2 级和 C—H 键 3 级倍频伸缩振动吸收,此区域主要的背景信息为水和其他含氢基团,在此区域内共包含了 36 个选定的波数。在 8 500~6 000 cm^{-1} 区域,存在糖类和水的 O—H 键的 1 级倍频伸缩振动吸收,葡萄糖的 O—H 键的 1 级倍频伸缩振动吸收,该区域是包含反映可溶性糖成分的主要光谱区间,背景影响较小,CARS 方法在此区域共选择了 15 个建模波数。5 800~4 000 cm^{-1} 区域与 12 000~10 000 cm^{-1} 区域相似,包含的选定波数多,CARS 方法在此区域选择了 33 个建模波数。利用 CARS 对参与建模的波数进行优选,减少了无关信息,降低了模型的复杂度,选择的波数不但引入了表征待测组分的光谱,同时还引入了代表背景信息的光谱,使得校正模型适应性增强。建立了结球甘蓝可溶性糖的全谱 PLS 模型,根据 CARS 波数优选结果,建立了结球甘蓝可溶性糖的 CARS-PLS 模型。对于全谱 PLS 定量模型,校正集的决定系数 R^2 为 0.93, RMSECV 为 0.157 2%, RMSEP 为 0.132 8%。对于 CARS-PLS 模型,校正集的决定系数 R^2 为 0.96, RMSECV 为 0.076 8%, RMSEP 为 0.059 4%。数据表明,两种模型具有相当的 R^2 ,但 CARS-PLS 模型的 RMSECV 是全谱 PLS 模型的 1/2。RMSEP 也接近 1/2, CARS-PLS 模型比全谱 PLS 定量模型所用建模变量少,模型得到简化,精度更优。用 CARS-PLS 模型对验证集 41 个样本进行预测,预测集决定系数 R^2 为 0.86, 预测标准误差为 0.059 4%。提供了一种工作效率较高的结球甘蓝质量无损检测方法。

收稿日期: 2018-04-12, 修订日期: 2018-07-29

基金项目: 国家自然科学基金项目(31501219)资助

作者简介: 李鸿强, 1979 年生, 中国农业大学信息与电气工程学院博士研究生, 河北建筑工程学院理学院副教授

e-mail: hqgood@cau.edu.cn * 通讯联系人 e-mail: limz@cau.edu.cn

关键词 结球甘蓝; 可溶性糖; 近红外光谱; 偏最小二乘法

中图分类号: O433.4 文献标识码: A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2018)10-3058-06

引言

可溶性糖是一种易溶于水的糖,它是果蔬味觉感受的有效调节剂,也是人类可以吸收和使用的有效碳水化合物。因此,快速检测水果和蔬菜中的可溶性糖含量非常重要。近红外(near infrared, NIR)光谱可反映分子中诸如 C—H, O—H, N—H 和 C=O 等基团合频和倍频吸收信息,广泛用于水果和蔬菜营养成分的分析^[1-11]。其中,郝勇等^[7]针对食醋还原糖、邓亮等^[8]针对烟草总糖、李路等^[9]针对大米总糖、Marrubini 等^[10]针对植物乳葡萄糖、Lee 等^[11]针对朝鲜梨总糖含量开展了光谱学快速测定研究,建立的预测模型都具有良好应用前景。

甘蓝具有抗冻、高产、耐贮运、适应性强等特点,在中国普遍种植。但是,长期以来忽略了对其内部品质差异性的关注和营养要素便捷检测方法的研究,利用近红外光谱预测结球甘蓝糖含量的文献鲜有报道。本研究基于分子光谱多元校正定量分析通则^[12],采用近红外光谱结合偏最小二乘回归方法,检测结球甘蓝中的可溶性糖含量,为结球甘蓝的内部质量评定提供一种无损检测途径。

1 实验部分

1.1 样本与仪器

超市随机购买结球甘蓝 20 颗,去除外层腐烂和外形不规则叶片,每颗结球甘蓝由外向内依次获取 7~8 个叶片,所有叶片统一编号,共获得 161 份样本。使用德国布鲁克公司的 MATRIX-I 型傅里叶变换近红外光谱仪采集光谱,光谱范围: 12 800~4 000 cm^{-1} (780~2 500 nm)。

采用积分球漫反射测样方式,样品杯旋转采样,将切碎的结球甘蓝均匀填入样品杯中,装填 3/4 杯。仪器参数设置如下:波数范围 11 988~3 996 cm^{-1} ,分辨率为 8 cm^{-1} ,扫描次数为 32 次,环境温度 23 $^{\circ}\text{C}$,测量 3 次取平均值。每次扫描时重新装样,保持样品装填均匀。蒽酮比色法^[13]测定可溶性糖含量。

1.2 样本集划分及数据预处理

利用马氏距离法(Mahalanobis distance, MD)和蒙特卡罗交叉验证法(MCCV)^[14]消除异常样本,以提高近红外光谱结球甘蓝可溶性糖定量分析模型的精确性和可靠性。

剔除异常样本之后,运用 Kennard-Stone(K-S)法^[15]将全部样本的 3/4 作为校正集,其他样本作为验证集。该样本集划分方法保证建模样本具有代表性,确保校正集样本包括测量样本的完整背景信息。同时,验证集的样本可以落在校正集样本的空间内,利于模型有效性检验。

分别使用了五种光谱预处理方法^[16]: Savitzky-Golay 卷积平滑(S-G)、一阶导数(first derivative, FD)、二阶导数(second derivative, SD)、多元散射校正(multiplication scat-

tering correction, MSC)和变量标准化(standard normalized variate, SNV)和它们的不同组合对样本进行光谱预处理,以找到最佳预处理方法。竞争性自适应重加权采样(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)法^[17]是近年来提出的一种新的变量选择方法。每次,通过自适应重加权采样,挑选出 PLS 模型中,回归系数绝对值较大的波数点,去掉回归系数绝对值较小的波数点,使用交互检验选出模型交互验证均方差值最小的子集,可有效选择与被测化学值相关性高的最优波数组合。

应用偏最小二乘(partial least squared, PLS)校正方法^[18-20]建立数学模型。用模型决定系数 R^2 、交互验证均方根误差(root mean squared error of cross validation, RMSECV)、预测均方根误差(root mean squared error of prediction, RMSEP)作为模型精度评价指标。

2 结果与讨论

2.1 剔除异常样本

测得的结球甘蓝样本近红外光谱如图 1 所示,样本的近红外光谱非常接近,波数 10 310, 8 540, 6 900 和 5 200 cm^{-1} 附近出现吸收峰,分别是 O—H 键二级倍频伸缩振动, C—H 键二级倍频伸缩振动, O—H 键一级倍频伸缩振动和 C=O 键一级倍频伸缩振动;同时,样本的吸收峰较宽,不同基团吸收重叠严重。

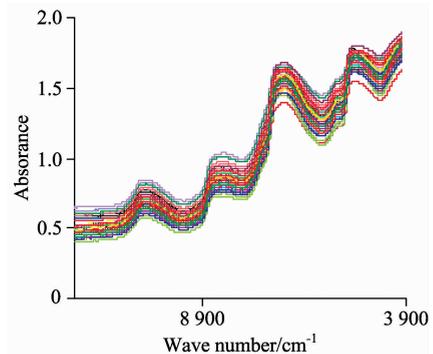


图 1 样本的原始近红外光谱

Fig. 1 Raw NIRS of samples

图 2 是根据蒙特卡罗交叉验证法剔除异常样本的结果。首先,计算所有样本 RMSEP 的均值(Mean, M)和标准偏差(Std, S),再计算各自的均值(μ_M 和 μ_S)和标准偏差(σ_M 和 σ_S)。如果某个样本满足($M \geq \mu_M + 3\sigma_M$)或者($S \geq \mu_S + 3\sigma_S$),就认为是奇异样本,并将它们去除。图 2 左下区域属于正常样本,右下区域样本的 RMSEP 的均值较大属于浓度异常样本,左上区域样本的标准偏差较大属于光谱异常样本,右上区域属于光谱和浓度值均异常的样本。

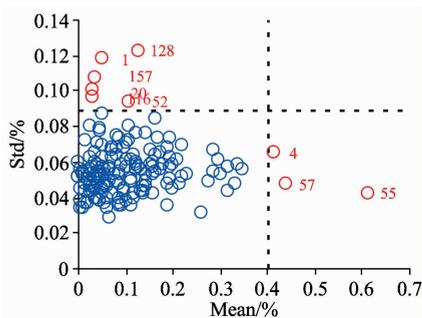


图 2 预测均方根误差均值方差分布

Fig. 2 Mean and standard deviation distributions of RMSEP

图 3 是各个样本到样本中心的马氏距离分布图, 以马氏距离的均值加上 3 倍马氏距离标准偏差为阈值, 超出阈值可作为异常样本剔除。

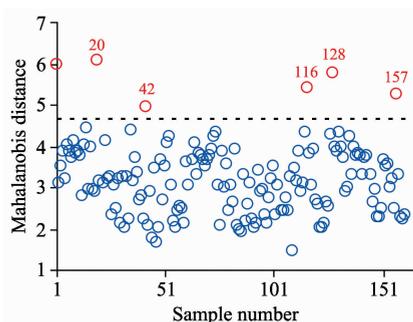


图 3 样本马氏距离

Fig. 3 Mahalanobis distance of samples

异常样本剔除后, 通过 K-S 法将样本按照 3 : 1 划分为校正集和验证集, 校正集和验证集结球甘蓝样本可溶性糖的实测值统计结果如表 1 所示, 110 个校正集样本基本涵盖了现有的结球甘蓝可溶性糖值分布范围, 验证集落在校正集范围之内。

表 1 可溶性糖统计结果

Table 1 Statistical results of soluble sugar

分组	样本数量	可溶性糖取值/%	平均值/%	标准偏差/%
校正集	110	0.339~1.433	0.972	0.050
验证集	41	0.497~1.376	0.996	0.046

2.2 光谱消噪方法对建立校正模型的影响分析

分别使用 12 种光谱预处理方法对结球甘蓝的原始光谱进行预处理, 并建立了对应的全谱 PLS 预测模型, 建模结果见表 2。分析比较上述预处理方法对在全光谱区内所建最小二乘回归模型的影响。经 FD, SD, MSC 和 SNV 对光谱数据进行预处理, 均能有效提高建模精度。其中, MSC 和 SNV 的数据用于建模, 建模效果相当, 说明原始光谱数据受样本不均匀性的影响, 样本的散射效应明显, 试验中应该尽量切碎样本, 减少因粒度带来的散射, 同时装样时应该均匀压实。MSC+FD 预处理后的光谱所建 PLS 模型综合性能最

优, 样本不均匀性对光谱的影响, 可以通过 MSC 校正; 基线平移以及平缓背景的干扰, 可以通过 FD 消除; 经过 MSC+FD 数据处理后, 有效减少光谱的随机和系统误差, 提高了光谱数据的信噪比。

表 2 不同预处理方法的 PLS 建模结果

Table 2 Modeling results of PLS under different pretreatment methods

方法	主成分数	校正集		验证集
		RMSECV/%	R ²	RMSEP/%
无	7	0.145 6	0.68	0.114 0
S-G	7	0.146 4	0.68	0.113 6
FD	5	0.154 5	0.82	0.136 1
SD	7	0.160 8	0.88	0.158 7
MSC	12	0.146 2	0.88	0.120 2
SNV	12	0.145 0	0.87	0.125 6
S-G+FD	6	0.150 8	0.68	0.131 9
S-G+SD	6	0.169 3	0.66	0.137 5
S-G+MSC	11	0.151 4	0.72	0.116 7
MSC+FD	6	0.157 2	0.93	0.132 8
MSC+SD	8	0.161 6	0.92	0.168 8
SNV+FD	5	0.166 5	0.88	0.163 4
SNV+SD	6	0.155 0	0.91	0.161 3

2.3 波段优选结果及可溶性糖 CARS-PLS 模型的建立

如图 4 所示, 通过 MSC+FD 进行光谱处理后, 此区域的 1 阶导数光谱, 谱峰密集, 信息丰富。在 12 000~10 000 cm⁻¹ 区域内, 存在 O—H 键 2 级和 C—H 键 3 级倍频伸缩振动吸收, 此区域主要的背景信息为水和其他含氢基团。CARS 波长选择结果显示, 此区域共包含了 36 个选定的波数, 如图 5 所示。在这个区域有 12 个波数处的校正系数为负值, 代表了背景的光谱信息, 选取这些吸光度值参与校正模型, 可以对背景信息进行模型内部校正。在 8 500~6 000 cm⁻¹ 区域, 存在糖类和水的 O—H 键的 1 级倍频伸缩振动吸收和葡萄糖的 O—H 键的 1 级倍频伸缩振动吸收, 此区域共包含了 15 个选定的波数, 只有 1 个波数处的校正系数为负值(图 5), 表明此区域是包含可溶性糖成分的主要光谱区域, 背景影响较小。5 800~4 000 cm⁻¹ 区域与 12 000~10 000 cm⁻¹ 区域相似。在建模过程中, 引入代表背景信息的光谱, 可使得校正模型适应性更强。

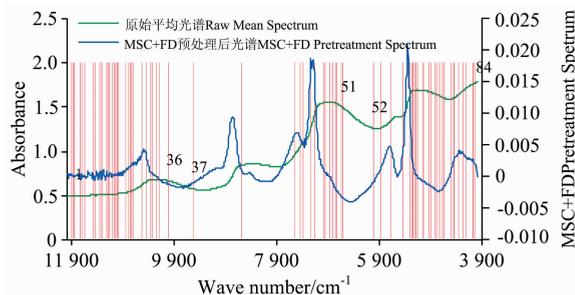


图 4 波数优选结果

Fig. 4 Results of selected wave number

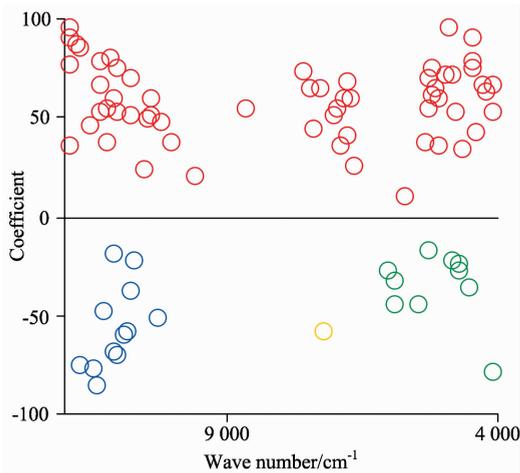


图 5 模型系数分布

Fig. 5 Distribution of the model coefficients

在 MSC+FD 预处理方法分别消除了校正集和验证集光谱的噪声后,采用 CARS 方法选定的 84 个波数处的吸光度作为校正变量,选取主成分数为 5,建立了结球甘蓝可溶性糖含量的 CARS-PLS 定量校正分析模型。图 6 显示校正模型建模结果。与没有进行波段优选的全谱 PLS 模型相比,利用优选的波数进行建模,所建模型的 R^2 从 0.93 增长到 0.96, RMSECV 减小到 0.076 8%。可见,建模前对光谱区域进行选择,将有利于减少噪声影响。图 6 也显示了验证集 41 个样本的预测结果。验证集的决定系数 R^2 为 0.86, RMSEP 为 0.059 4%。结果表明,用 CARS 方法筛选的光谱数据建立的可溶性糖定量模型的预测效果良好。

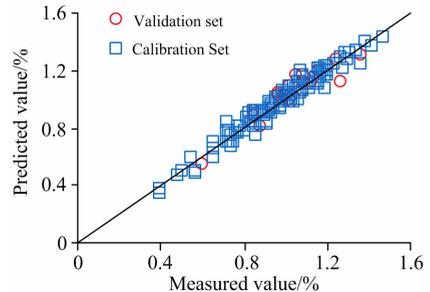


图 6 实测值和 CARS-PLS 模型预测值

Fig. 6 Measured values and CARS-PLS model predictions

3 结 论

通过采集结球甘蓝近红外光谱,应用近红外光谱分析和偏最小二乘方法获得了结球甘蓝可溶性糖的数学预测模型,获得以下主要结论:

(1) 通过 CARS 波段优选最终参与建模的波数个数为 84 个,数据量得到压缩。与没有进行波段优选的全谱 PLS 模型相比,利用优选的波数进行建模,所建模型的 R^2 从 0.93 增长到 0.96, RMSECV 减小到 0.076 8%。建模结果表明波数优选方法可以获得与分析值更相关的波数进行建模,降低了模型的复杂度,使模型精度得到改善。

(2) 所建立的 CARS-PLS 结球甘蓝可溶性糖含量预测模型验证集决定系数为 0.86, RMSEP 为 0.059 4%。结果证明预测模型稳健性好、预测能力强。该研究为结球甘蓝的内部品质检测提供了一种可推广的无损检测方法。

References

- [1] QIANG Feng, WANG Qin-zhi, HE Jian-guo, et al(强 锋, 王芹志, 何建国, 等). Modern Food Science & Technology(现代食品科技), 2017, 212(4): 283.
- [2] Sanchez M T, Dela Haba M J, Perez-Marin D. Computers and Electronics in Agriculture, 2013, 92: 66.
- [3] Xu H R, Qi B, Sun T. Journal of Food Engineering, 2012, 109: 142.
- [4] Wedding B B, White R D, Grauf S. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2011, 91(2): 233.
- [5] Liu R, Qi S, Han D. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 2015, 23(5): 301.
- [6] Fox G. Journal of the Institute of Brewing, 2016, 122(3): 437.
- [7] HAO Yong, YU Yong-jian, ZHU Sheng-hu(郝 勇, 余永建, 朱胜虎). Journal of Northwest A&F University • Natural Science Edition (西北农林科技大学学报 • 自然科学版), 2013, 41(5): 102.
- [8] DENG Liang, LENG Hong-qiong, DUAN Yuan-xing, et al(邓 亮, 冷红琼, 段沅杏, 等). Journal of Yunnan Agricultural University • Nature Science(云南农业大学学报 • 自然科学), 2013, 28(6): 814.
- [9] LI Lu, HUANG Han-ying, ZHAO Si-ming, et al(李 路, 黄汉英, 赵思明, 等). Journal of the Chinese Cereals and Oils Association(中国粮油学报), 2017, 32(7): 121.
- [10] Marrubini G, Papetti A, Genorini E, et al. Food Analytical Methods, 2017, 10(5): 1556.
- [11] Lee Y, Han S. Bulletin of the Korean Chemical Society, 2016, 37(2): 166.
- [12] National Standards of the People's Republic of China(中华人民共和国国家标准). GB/T 29858—2013. Standard Guidelines for Molecular Spectroscopy Multivariate Calibration Quantitative Analysis(分子光谱多元校正定量分析通则).
- [13] LIU Hai-ying, WANG Hua-hua, CUI Chang-hai(刘海英, 王华华, 崔长海). Laboratory Science(实验室科学), 2013, 16(2): 19.
- [14] LIANG Yi-ceng, XU Qing-song(梁逸曾, 徐青松). Instrumental Analysis of Complex Systems-White, Gray and Black Analytical Systems and Their Multivariate Methods(复杂体系仪器分析-白、灰、黑分析体系及其多变量解析方法). Beijing: Chemical Industry Press(北京: 化学工业出版社), 2012. 489.

- [15] CHEN Yi-yun, ZHAO Rui-ying, QI Tian-ci, et al(陈奕云, 赵瑞瑛, 齐天赐, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2017, 37(7): 2133.
- [16] WANG Fu-teng, SUN Xiao-rong, LIU Cui-ling, et al(王赋腾, 孙晓荣, 刘翠玲, 等). Science and Technology of Food Industry(食品工业科技), 2017, 38(10): 58.
- [17] LI Shui-fang, SHAN Yang, FAN Wei, et al(李水芳, 单杨, 范伟, 等). Food Science(食品科学), 2011, 32(8): 182.
- [18] YUAN Shuai, ZHANG Juan, LIU Mei-juan, et al(原帅, 张娟, 刘美娟, 等). Journal of Analytical Science(分析科学学报), 2016, 32(4): 553.
- [19] LIU Xiu-ying, WANG Li, CHANG Qing-rui, et al(刘秀英, 王力, 常庆瑞, 等). Chinese Journal of Applied Ecology(应用生态学报), 2015, 26(7): 2107.
- [20] ZHANG Sen, SHI Wei-ren, SHI Xin, et al(张森, 石为人, 石欣, 等). Computer Engineering and Applications(计算机工程与应用), 2015, 51(15): 249.

Prediction of Soluble Sugar Content in Cabbage by Near Infrared Spectrometer

LI Hong-qiang^{1,2}, SUN Hong¹, LI Min-zan^{1*}

1. Key Laboratory of Modern Precision Agriculture System Integration Research, China Agricultural University, Beijing 100083, China
2. School of Science, Hebei Institute of Architecture and Civil Engineering, Zhangjiakou 075000, China

Abstract Soluble sugar is an effective regulator of the taste of vegetables and fruits. It is also a necessary carbohydrate absorbed and used by human beings. The head cabbage is a common vegetable rich in carbohydrates. Soluble sugar content is an important parameter in determining the nutrient quality of head cabbage. Carbohydrates are made up of carbon, hydrogen and oxygen, and the molecular absorption spectra are mainly composed of the combination bands and overtone bands of C—H, O—H and C=O groups, and contain abundant organic matter information. The experiment was conducted to study the rapid detection method of soluble sugar content in head cabbage by near infrared spectroscopy and chemometrics. The experiment collected a total of 161 samples of head cabbage. The spectral data were measured by the MATRIX-I FT-NIR spectrometer made in Bruker Company, Germany, and the soluble sugar was measured by the anthrone colorimetric method. Mahalanobis Distance (MD) method and Monte Carlo cross validation (MCCV) method were used to eliminate the abnormal samples. And then the Kennard-Stone (K-S) method was used to divide all samples into a calibration set and a validation set according to the given ratio. All 12 spectral pretreatment methods including Savitzky-Golay convolution smoothing (S-G), first derivative (FD), second derivative (SD), multiple scatter correction (MSC), variable Standardization (SNV), and their combinations, were used to improve the S/N ratio to find the best pretreatment method from them. The competitive adaptive reweighted sampling (CARS) algorithm was used to select and screen out the optimal wavenumbers with the greater absolute values of the regression coefficients in the PLS model, and to remove the wavenumbers with the small regression coefficients. Thus, the best wave number combination related to the nature of the measurement can be selected to get a good calibration model with good robustness and prediction ability. The coefficient of determination (R^2), root mean squared error of cross validation (RMSECV), and root mean squared error of prediction (RMSEP) were used to evaluate models. According to the principles of Monte Carlo cross validation method and Mahalanobis distance method, 10 abnormal samples were eliminated, and finally 151 samples were used in modelling. The samples were divided into calibration set (110 samples) and validation set (41 samples) according to 3 : 1 by K-S method. Three PLS models were established by using the original spectral data, the preprocessed spectral data, and the spectral data with optimal wavenumbers, respectively. The modeling results showed that the spectral preprocessing method using MSC combined with FD could well improve modeling accuracy, and the R^2 of the calibration model increased from 0.68 to 0.93 and was thought to be the best spectral data preprocessing method in this experiment. The CARS method was applied to select optimal wave numbers for modelling. From 12 000 to 10 000 cm^{-1} , there exist O—H str. second overtone and C—H third overtone, and the main background information in this area is water and other groups containing hydrogen. In this region 36 optimal wavenumbers were selected. From 8 500 to 10 000 cm^{-1} , there exist sugar's and water's O—H str. first overtone and glucosamine O—H str. first overtone. This region is the main spectral region containing soluble sugar information and is less affected by the background. 15 optimal wavenumbers were selected in this region. The region of 5 800 to 4 000 cm^{-1} is similar to the region of 12 000 to 10 000 cm^{-1} , and

contains 36 selected optimal wavenumbers. Based on the results of the CARS wave number optimization, a full spectrum PLS model and a CARS-PLS model to estimate the head cabbage soluble sugar content were established. The R^2 , RMSECV, and RMSEP of the full spectrum PLS model were 0.93, 0.157 2%, and 0.132 8%, respectively. While the R^2 , RMSECV, and RMSEP of the CARS-PLS model were 0.96, 0.076 8%, and 0.059 4%, respectively. The experimental results showed that both CARS-PLS model and full spectrum PLS model had the similar R^2 , but the RMSECV of the CARS-PLS model was the 1/2 of that of the full spectrum PLS model, and the RMSEP of the CARS-PLS model was also close to 1/2 of that of the full spectrum PLS model. The CARS algorithm reduced the modeling variables so that the complexity of the model was reduced, and the accuracy of CARS-PLS model was improved. The CARS-PLS model is used to predict 41 samples of the validation set. The R^2 of the prediction set is 0.86 and the prediction standard error is 0.059 4%, which meant that the prediction model of soluble sugar content in head cabbage was practical. CARS algorithm can reduce the unrelated information and the complexity of the model, and the wavenumbers selected can introduce both the spectra related components information and the spectra related the background information to improve the adaptivity of the calibration model. It provides a new approach for quality evaluation of head cabbage.

Keywords Cabbage; Soluble sugar; Near infrared spectroscopy; Partial least squares regression

(Received Apr. 12, 2018; accepted Jul. 29, 2018)

* Corresponding author

(上接 3057 页)

杨绪彤

中国科学院青岛生物能源与过程研究所

电话: 0532-80662771; 13906423996

e-mail: yangxt@qibebt.ac.cn

支持媒体

会议官网: 光谱网 <http://www.sinospectroscopy.org.cn> (会议各类信息发布以光谱网信息为准);

分析测试百科网 <http://www.antpedia.com/>

仪器信息网 <http://www.instrument.com.cn>

主办单位: 中国光学学会

中国光学学会光谱专业委员会(代章)

中国化学会

承办单位: 中科院青岛生物能源与过程研究所

2017 年 9 月