

DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20241106008

引用格式: 李杰, 高春, 许丽, 等. 近红外光谱技术快速无损检测轻度霉变玉米[J]. 食品安全质量检测学报, 2025, 16(4): 18–25.

LI J, GAO C, XU L, *et al.* Rapid non-destructive detection of mildly moldy *Zea mays* by near-infrared spectroscopy technology [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2025, 16(4): 18–25. (in Chinese with English abstract).

近红外光谱技术快速无损检测轻度霉变玉米

李杰^{1,2,3}, 高春³, 许丽³, 朱旱林³, 庞敏^{1,2,3}, 操丽丽^{1,2,3*}

(1. 合肥工业大学食品与生物工程学院, 合肥 230601; 2. 农产品现代加工安徽省重点实验室, 合肥 230601; 3. 农产品智能化绿色质选技术与装备安徽省联合共建学科重点实验室, 合肥 230071)

摘要: **目的** 应用近红外光谱(near-infrared spectroscopy, NIRS)技术对轻度霉变玉米中黄曲霉毒素进行快速无损检测。**方法** 本研究选取轻度霉变的玉米样本作为实验材料, 以黄曲霉毒素 B₁ (aflatoxin B₁, AFB₁)的含量作为检测指标, 利用 NIRS 图像采集系统收集了 153 个样本图像, 采用多元散射校正、标准正态变换及移动平均平滑(moving average smoothing, MAS) 3 种预处理方法对样本的原始 NIRS 数据(raw near-infrared spectral data, RNSD)进行预处理。并采用反向传播神经网络(backpropagation neural network, BPNN)、极限学习机和支撑向量机对处理后的光谱数据与 AFB₁ 含量数据进行建模分析, 评估预处理方法对模型性能的影响; 并通过连续投影算法(stepwise projection algorithm, SPA)对预处理数据进行特征光谱选取后代入模型进行综合比较。**结果** 最佳光谱预处理方法为 MAS, 通过 SPA 选取 10 个特征光谱, 使用 BPNN 模型时预测结果最佳, 模型预测集的决定系数可达到 0.932, 相对预测偏差为 3.922, 该模型具有良好的性能和可靠性。**结论** 利用 NIRS 技术测定轻度霉变玉米中的 AFB₁ 含量具备可行性, 本研究成果为 NIRS 在鉴别其他农产品方面的应用提供了重要的参考依据。

关键词: 玉米; 近红外光谱; 黄曲霉毒素; 反向传播神经网络

Rapid non-destructive detection of mildly moldy *Zea mays* by near-infrared spectroscopy technology

LI Jie^{1,2,3}, GAO Chun³, XU Li³, ZHU Han-Lin³, PANG Min^{1,2,3}, CAO Li-Li^{1,2,3*}

(1. School of Food and Bioengineering, Hefei University of Technology, Hefei 230601, China; 2. Anhui Province Key Laboratory of Agricultural Products Modern Processing, Hefei 230601, China; 3. Anhui Province Key Laboratory of Intelligent Green Quality Sorting Technology and Equipment for Agricultural Products, Hefei 230071, China)

ABSTRACT: Objective To rapidly and non-destructively detect aflatoxin in mildly moldy *Zea mays* using near-infrared spectroscopy (NIRS) technology. **Methods** Mildly moldy *Zea mays* samples were selected as experimental materials, with the content of aflatoxin B₁ (AFB₁) as the detection indicator. A total of 153 sample images were collected using the NIRS imaging acquisition system. Three kinds of preprocessing methods, including

收稿日期: 2024-11-06

基金项目: 安徽省重点研究与开发计划项目(2023n06020014)

第一作者: 李杰(2000—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为食品无损检测。E-mail: lj996461726@163.com

*通信作者: 操丽丽(1979—), 女, 博士, 副教授, 主要研究方向为粮油加工与质量安全控制技术。E-mail: lilycs04@hfut.edu.cn

multiplicative scatter correction, standard normal variate transformation, and moving average smoothing (MAS), were applied to preprocess the raw near-infrared spectral data (RNSD). Backpropagation neural network (BPNN), extreme learning machine, and support vector machine were employed to model and analyze the preprocessed spectral data along with AFB₁ content data, evaluating the impact of preprocessing methods on model performance. Furthermore, the stepwise projection algorithm (SPA) was performed to select characteristic spectra from the preprocessed data for comprehensive comparison after incorporating them into the models. **Results** The optimal spectral preprocessing method was MAS. Ten characteristic spectra were selected through SPA, and the BPNN model exhibited the best prediction results, achieving a coefficient of determination of 0.932 and a relative prediction deviation of 3.922. This model demonstrated good performance and reliability. **Conclusion** It is feasible to determine AFB₁ content in mildly moldy *Zea mays* using NIRS technology. The findings of this study provide an important reference for the application of NIRS in identifying other agricultural products.

KEY WORDS: *Zea mays*; near-infrared spectroscopy; aflatoxin; backpropagation neural network

0 引言

玉米是我国第二大粮食作物, 每年产量可达 2.8 亿 t 以上, 但因天气或储存不当有近 25% 的玉米受真菌污染而霉变^[1-2]。霉变的玉米会产生真菌毒素, 常见的有黄曲霉毒素、玉米赤霉烯酮、脱氧雪腐镰刀菌烯醇等^[3], 其中黄曲霉毒素 B₁ (aflatoxin B₁, AFB₁) 作为一种强致癌物, 对人类健康构成了严重潜在风险^[4]。因轻度霉变的玉米与正常玉米在外观及感官上差异不大, 难以区分^[5], 故本研究针对轻度霉变玉米, 采用近红外光谱(near-infrared spectroscopy, NIRS)对轻度霉变玉米中的 AFB₁ 进行快速无损检测, 结合分离技术, 探索在加工之前快速有效筛选出霉变玉米。

目前有关 AFB₁ 的检测方法主要包括高效液相色谱法 (high performance liquid chromatography, HPLC)^[6-7]、聚合酶链反应^[8]、气相色谱-质谱法^[9]、DNA 探针法^[10]以及酶联免疫法^[11]等。但是这些方法存在操作烦琐、破坏样品以及耗时较长等缺点^[12]。而光谱技术由于其高效性、无损性、低成本以及良好的可重复性, 已在肉类、水果、茶叶等农产品的检测中得到了广泛应用^[13-15], 并且在区分筛选上取得了显著成效^[16]。目前, 玉米霉变的无损检测主要依赖高光谱技术, 而基于 NIRS 技术的相关研究仍较少^[17]。尽管高光谱技术相较于 NIRS 具有更高的光谱分辨率和更丰富的光谱信息^[18-19], 但 NIRS 因其设备便携、数据处理简便、能够实现实时检测及成本相对较低等优势, 在应用中占据了重要地位^[20-22]。

袁莹等^[23]采用傅里叶变换 NIRS 对霉变玉米进行分类, 支持向量机 (support vector machine, SVM) 分类模型在训练集和测试集的预测准确率分别达到了 93.3% 和 91.7%, 而独立样品集的预测准确率为 87.8%, 显示出其在大规模筛查中的适用性。CHENG 等^[24]利用紫外-NIRS 法对玉米中的黄曲霉毒素建立模型, 预处理可从原始光强中减去背景光强, 采用随机森林算法建立检测模型, 其特异性达到了

97.7%, 表明在允许的误差范围内检测玉米中的黄曲霉毒素是可行的。GASPARDO 等^[25]应用基于积分球的傅里叶变换 NIRS 分析技术对玉米粉中的伏马毒素 B₁ 和 B₂ 进行了快速检测, 直接使用偏最小二乘法建立模型, 检测结果 R^2 可以达到 0.983, 适合于需要高精度检测的应用。严晨等^[26]结合 NIRS 信息与表面图像信息, 构建了线性判别分析和 SVM 判别模型。与仅依赖特征波长建立的模型相比, 综合使用这两种信息后, 模型的准确率得到了显著提升, 最佳识别率提高至 92%, 显示了多模态数据结合的潜力^[27]。综合来看, 结合可见-NIRS 技术与机器学习来建立玉米霉变检测模型, 已被证实为一种有效的无损检测方法^[28]。然而, 尽管 NIRS 在该领域表现出潜力, 但仍面临多个亟待解决的挑战^[29-30]。

本研究结合多种预处理方法和 3 种不同的模型, 对比特征光谱选取后模型结果, 尝试构建玉米样品 AFB₁ 含量的 NIRS 预测模型, 旨在为快速、无损和客观评估玉米霉变程度提供更深入的研究基础。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

玉米中单 909 (合肥市农贸市场); 黄曲霉毒素混合对照品 (纯度 $\geq 98\%$, 成都埃法生物科技有限公司); 黄曲霉菌株 Bio-52973 (国家菌种保藏中心); 三氟乙酸 (分析纯, 国药控股有限公司); 甲醇、乙腈、正己烷 (色谱纯, 国药集团化学试剂有限公司)。

1.2 仪器与设备

E2695 高效液相色谱仪 (美国 Waters 公司); WAT054275 C₁₈ 色谱柱 (4.6 mm \times 250 mm, 5 μ m, 沃特世科技上海有限公司); SH-400 涡旋混合仪 (上海贤德实验仪器有限公司); BSP-30D 超声波清洗机 (上海比朗仪器制造有限公司); RH-B10 数显恒温水浴锅、RH-GC-6 氮吹仪 (江苏金坛市荣

华仪器制造有限公司); NIRQuest 512 近红外光谱仪(美国 Ocean optics 公司); ME204 电子分析天平(感量为 0.00001 g 和 0.01 g, 梅特勒-托利多仪器公司); DHG-9053A 电热鼓风恒温箱(上海一恒科技有限公司)。

1.3 实验方法

1.3.1 霉变玉米样品制备

如图 1 所示, 选择干燥玉米粒, 喷洒黄曲霉孢子, 在 20 °C、相对湿度为 70% 条件下培养, 制备不同霉变程度的玉米样本。样本制备好后置于冰箱冷藏保存, 以备后续使用。最终制备 51 组样本, 每组样本取 3 个平行, 共 153 个样本, 任取其中 120 个作为训练集, 剩余 33 个作为测试集。



图1 霉变玉米样品的制备

Fig.1 Sample preparation of moldy *Zea mays*

1.3.2 HPLC 检测 AFB₁ 含量

参照 GB 5009.22—2016《食品安全国家标准 食品中黄曲霉毒素 B 族和 G 族的测定》中的高效液相色谱-柱前衍生法对不同霉变玉米样本中的 AFB₁ 进行测定。

(1) HPLC 色谱条件

WAT054275 色谱柱: C₁₈ (4.6 mm×250 mm, 5 μm); 流动相: A 相为水, B 相为乙腈:甲醇溶液(50:50, V:V), 流速 1.0 mL/min, 柱温 40 °C, 激发波长 360 nm; 发射波长 440 nm, 进样量 20 μL。

(2) 玉米样品的制备

将玉米样品粉碎并通过 20 目筛网筛选后, 称取 5.00 g 样品置于 100 mL 的带塞锥形瓶中, 随后加入 25.0 mL 的乙腈水溶液(84:16, V:V)。在室温下, 以 200 r/min 的速度进行振荡提取, 持续 60 min。提取后, 使用中速滤纸过滤, 并将 10.0 mL 的滤液转移至 50 mL 的具塞离心管中, 再加入 10.0 mL 三氯甲烷进行萃取, 旋涡混合 1 min 后静置以分层。取下层的萃取液并转移至 15 mL 的具塞离心管中, 随后在 50 °C 的水浴中进行氮气吹干。复溶时, 加入 200 μL 的乙腈水溶液(90:10, V:V), 接着再加入 700 μL 的三氟乙酸、水和冰乙酸的混合溶液(20:70:10, V:V:V), 并加塞混匀。在 40 °C 的恒温水浴中进行 75 min 的衍生反应后, 通过 0.22 μm 的微孔滤膜过滤, 准备测定。

1.3.3 NIRS 采集

如图 2 所示, 采集玉米 NIRS 数据的光谱仪为 NIRQuest 近红外光谱仪, 采集系统由高分辨率干涉仪、红外光源、探测器、数据分析软件、计算机等组成。可采集到的反射光谱范围为 400~2500 nm, 光谱分辨率为 0.5 cm⁻¹, 经软件

处理后共得到 128 个不同的波段。每个样本取 3 粒玉米样品, 测 3 组光谱数据, 共得到 153 组 NIRS 数据。



图2 NIRS数据采集系统

Fig.2 Data acquisition system of NIRS

1.4 数据处理

(1) 本研究应用 TQ Analyst 9.5 软件将 NIRS 转化为成对数据点(数据点间隔 6.063 cm⁻¹); 在 Matlab 2023a 平台上执行了数据预处理的对比分析, 建立霉变等级 NIRS 模型。

(2) 为降低仪器噪声和暗电流等干扰因素, 本研究采用多种预处理技术对光谱数据进行处理。这些方法包括无光谱预处理、多元散射校正(multivariate scatter correction, MSC)、标准正态变换(standard normal variate, SNV)和移动平均平滑(moving average smoothing, MAS)。通过对以上预处理方法的建模和模型结果的比较, 确定最佳的 NIRS 预处理方法。

(3) 模型结果用 R²、均方根误差(root mean square error, RMSE)、相对预测偏差(relative prediction deviation, RPD) 表示。计算公式如式(1)、(2)、(3):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y_{i,p})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (1)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - y_{i,p})^2} \quad (2)$$

$$\text{RPD} = \frac{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}{\text{RMSE}} \quad (3)$$

式中: y_i 与 $y_{i,p}$ 分别表示第 i 个样本的 AFB₁ 含量真实值与第 i 个样本的 AFB₁ 含量预测值。 \bar{y} 表示所有样本的 AFB₁ 含量真实值的平均值, n 是样本数量。在本研究中, R² 值的大小反映了模型对数据集的拟合优度, 其值的增加表明模型对变量间关系的解释能力越强。当 R² 值趋近于 1 时, 表明模型具有较高的解释力。相对地, RMSE 值的降低意味着模型预测的精度提高, 误差减小, 这表明模型能够更准确地拟合数据, 从而提供更可靠的预测结果。较低的 RMSE 值

与模型性能的优越性呈正相关。此外,RPD值的增大表明模型在预测方面的能力增强,RPD值若超过2,则通常认为模型具有良好的预测性能,其值越高,表明模型的预测可靠性越强。

1.5 模型建立

1.5.1 反向传播神经网络

如图3所示,在构建反向传播神经网络(backpropagation neural network, BPNN)模型时,采用了3层网络结构,分别为输入层、中间层(隐层)和输出层。输入层包含128个神经元,针对128个不同波长下的光谱值;输出层则由一个神经元构成,用于表示AFB₁的预测值。在此模型中,隐层神经元的传递函数使用Tansig函数,训练函数选用Traincgf函数,而输出层神经元的传递函数则采用Logsig函数。隐层神经元的数量设定为5个。样本经过随机化分配,训练集包含120个样本,预测集包含33个样本。网络训练的误差目标定为 $1e^{-6}$,训练步数为1000,学习率设置为0.01。

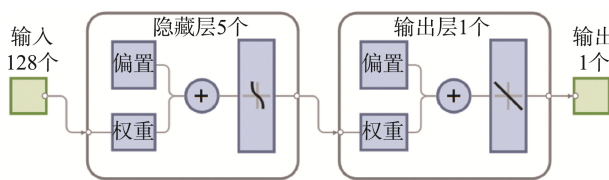


图3 反向传播神经网络结构

Fig.3 Structure of the backpropagation neural network

1.5.2 极限学习机

在极限学习机(extreme learning machine, ELM)模型的架构中,使用了单隐层前馈神经网络结构。隐层的权重通过随机生成,而训练的主要任务则是计算输出层权重的确定。隐层节点的数量设定为50,激活函数选择了Sigmoid函数。而训练过程则由Elmtrain函数来执行。样本经随机化分,训练集分包含120个样本,预测集包含33个样本。

1.5.3 支持向量机

一个使用径向基函数核的支持向量回归(support vector regression, SVR)模型,配置了特定的惩罚因子、Gamma参数和容忍度。这些参数控制了模型的复杂性和对训练数据的拟合程度,从而影响模型的预测性能。Svmtrain函数用于训练SVM模型,惩罚因子设定为4.0。RBF核的Gamma参数设定为0.8。回归的容忍度用于指定允许的回归误差范围,设定为0.01。样本经随机化分,训练集分包含120个样本,预测集包含33个样本。

2 结果与分析

2.1 霉变玉米中AFB₁含量的检测

严重霉变的玉米样品肉眼可分辨,无需建模分析,因

此利用HPLC对153个轻度霉变的玉米样本中AFB₁的含量进行检测,依据含量的不同进行了分组,结果见表1。

表1 霉变玉米的分组及其AFB₁含量

Table 1 Grouping of mouldy <i>Zea mays</i> and its AFB ₁ content					
毒素含量/($\mu\text{g}/\text{kg}$)	0~20	20~40	40~60	60~80	>80
样品个数	36	51	36	18	12

由表1可知,AFB₁含量集中在20~40 $\mu\text{g}/\text{kg}$ 的样本个数最大,为51个。而AFB₁含量大于80 $\mu\text{g}/\text{kg}$ 的样本数量最少,为12个。样本量总共153,根据GB 2761—2011《食品安全国家标准 食品中真菌毒素限量》,玉米、玉米面(渣、片)及玉米制品中的AFB₁限量指标为20 $\mu\text{g}/\text{kg}$,其中36个样本毒素含量未超标,117个样本毒素含量超标。

2.2 分组后不同霉变玉米的平均原始近红外光谱

根据表1将不同AFB₁含量的玉米样本分组,对分组后样本的RNSD求平均值,得到图4。从图4可知,AFB₁含量低的玉米样本,其反射率总体偏大。这是因为玉米霉变时,通常会导其化学成分发生变化,例如当玉米霉变时,真菌会分解玉米中的淀粉、蛋白质和脂肪等成分。这些化学成分的改变导致其对红外光的吸收特性发生变化。霉变的玉米通常伴随有水分含量的增加,当样品中水分增加时,更多的红外光会被吸收而不是反射,从而导致总体反射率下降。因此,玉米霉变越严重,其红外光谱图的反射率总体偏小。

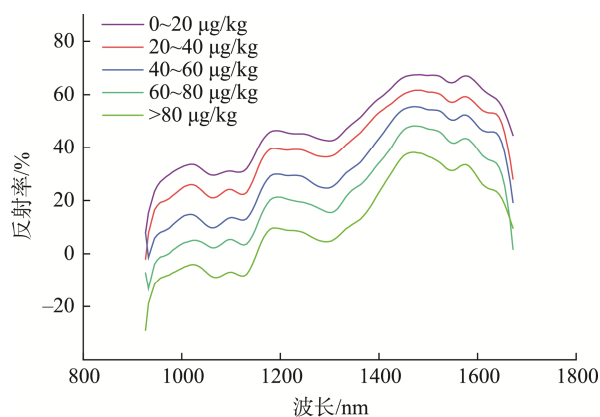
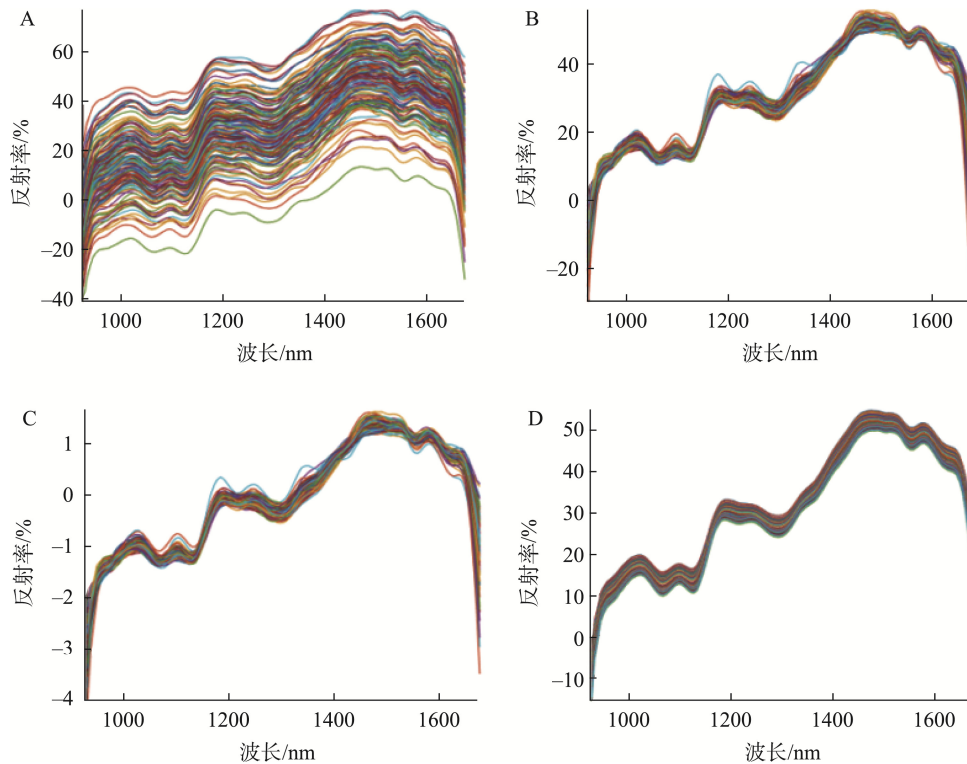


图4 分组后霉变玉米样本的平均原始NIRS

Fig.4 Mean raw NIRS of mouldy *Zea mays* samples after grouping

2.3 原始光谱预处理

对153个玉米样本进行了NIRS扫描,得到原始光谱图5A。从图5A可见,原始光谱曲线存在明显基线漂移现象,因此用MSC、SNV、MAS对RNSD进行了预处理,结果见图5。



注: A. 原始光谱图; B. MSC处理光谱图; C. SNV处理光谱图; D. MAS处理光谱图。

图5 玉米样品原始近红外光谱图与不同预处理后的图谱

Fig.5 Original near-infrared spectroscopy of *Zea mays* samples with different pre-treatments

从图 5B、C 可见, 经过 MSC 和 SNV 预处理后, 光谱曲线均显示出相似的特征, 表明基线漂移现象得到了有效消除。此外, 从图 5D 可见, MAS 平滑处理进一步提升了光谱曲线的平滑度。从所获得的光谱曲线来看, 不同霉变等级的玉米在总体变化规律上表现出一定的相似性。具体而言, 各霉变等级的玉米在 1180 nm 附近均出现反射波谷; 而在 1100~1500 nm 波段内, 平均光谱反射率呈现总体增加趋势, 并在 1550 nm 附近达到最大峰值, 随后逐渐下降。这些发现为后续霉变玉米的鉴别与分析提供了重要的光谱特征依据。

2.4 特征光谱选取

特征选取通过减少数据维度、降低计算复杂度、提高模型准确性和泛化能力, 从而提升分类和回归性能。连续投影算法(stepwise projection algorithm, SPA)可以减少输入特征的维度, 在处理高维数据, 如光谱数据时, 减少计算复杂度和提高模型的可解释性。用 SPA 对玉米样本 RNSD 进行特征光谱选取, 选取了 980.9、1023.2、1059.4、1119.5、1173.4、1215.1、1333.3、1467.2、1547.6、1581.7 nm, 一共 10 个特征光谱点, 如图 6 所示。

2.5 模型的建立

将 RNSD、3 种经过预处理的光谱数据与 SPA 特征光谱数据分别以 BPNN、ELM、SVM 法进行建模, 结果见表 2、表 3。

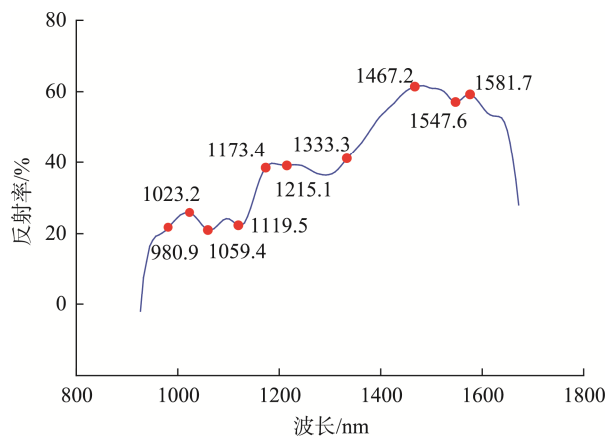


图6 玉米样品近红外光谱SPA选取的特征光谱点

Fig.6 Characteristic spectral points selected by SPA for near-infrared spectroscopy of *Zea mays* samples

2.5.1 BPNN

由表 2 可知, 在 BPNN 建模过程中, 直接使用未经处理的 RNSD 进行建模所得到的训练集和预测集的 R^2 值均低于其他经过预处理的数据, 表明其拟合效果不理想。同时, 较大的 RMSE 也揭示了预测值与实际值之间存在显著差异。此外, RPD 值低于 2 进一步表明模型的预测性能不显著。在 3 种预处理方法中, MAS 处理的预测集 R^2 值最接近 1, 为 0.909, 且预测集的 RMSE 仅为 5.064, RPD 值为 3.375,

显示出模型具备良好的预测能力。经过 SPA 特征光谱选取后, BPNN 模型的预测性能进一步提高, 结果见表 3, 其中预测集的 R^2 最大为 0.932, RMSE 仅为 4.539, RPD 值最大为 3.922。

2.5.2 ELM

由表 2 可知, 在 ELM 建模过程中, 采用 MAS 预处理方法得到的模型效果最佳, 其训练集和测试集的 R^2 值分别达到了 0.942 和 0.790。此外, 该模型在训练集和测试集上的 RPD 值分别为 4.202 和 2.217, 均超过了 2 的阈值, 表明模型的预测性能优良。与 MAS 预处理方法相比, 其他两种预处理方法及未经预处理的 RNSD 所建立的模型效果存在

显著差距。如表 3 所示, 经过 SPA 特征光谱选取后, ELM 模型的可靠性得到了提高, 其预测集 R^2 最高为 0.885, RPD 值最高为 2.999。

2.5.3 SVM

如表 2 所示, 在构建 SVM 模型的过程中, 3 种预处理方法及 RNSD 所形成的训练集均出现了过度拟合现象, 使得 R^2 值接近 1。然而, 在预测集方面, 只有采用 MAS 预处理方法的模型表现较为理想, R^2 值达到 0.843, RPD 值为 2.565, 而其他模型的预测结果拟合度较低。如表 3 所示, SPA 特征光谱选取后, SVM 模型的预测性能显著提高, 其预测集 R^2 最高为 0.864, RPD 值最高为 2.796。

表 2 玉米样品光谱预处理数据建模结果
Table 2 Data modelling results of *Zea mays* sample spectral data

建模方法	预处理方法	训练集			预测集		
		R^2	RMSE	RPD	R^2	RMSE	RPD
BPNN	RNSD	0.746	9.485	1.996	0.343	13.442	1.253
	MSC	0.824	6.392	2.394	0.379	11.372	1.289
	SNV	0.758	2.189	2.160	0.674	4.150	1.762
	MAS	0.964	2.967	5.348	0.909	5.064	3.375
ELM	RNSD	0.602	12.256	1.593	0.254	16.698	1.175
	MSC	0.704	2.554	1.849	0.357	12.412	1.267
	SNV	0.600	2.932	1.590	0.310	7.425	1.222
	MAS	0.942	3.898	4.202	0.790	6.839	2.217
SVM	RNSD	0.998	0.854	22.768	0.397	16.241	1.307
	MSC	0.996	0.262	18.233	0.450	3.608	1.370
	SNV	0.996	0.303	16.098	0.375	4.473	1.026
	MAS	0.975	2.324	6.414	0.843	7.768	2.565

表 3 选取特征光谱后数据建模结果
Table 3 Data modelling results after selection of feature spectra

建模方法	预处理方法	训练集			预测集		
		R^2	RMSE	RPD	R^2	RMSE	RPD
BPNN	RNSD	0.776	9.372	2.068	0.461	11.092	1.383
	MSC	0.846	6.192	2.565	0.591	8.872	1.588
	SNV	0.820	1.975	2.371	0.657	4.465	1.714
	MAS	0.967	2.815	5.586	0.932	4.539	3.922
ELM	RNSD	0.701	10.945	1.894	0.436	14.345	1.458
	MSC	0.767	2.231	2.021	0.679	12.142	1.884
	SNV	0.801	2.612	2.213	0.773	7.190	2.367
	MAS	0.971	2.822	5.903	0.885	4.367	2.999
SVM	RNSD	0.995	0.898	14.245	0.621	12.824	1.634
	MSC	0.997	0.394	20.274	0.773	8.329	1.907
	SNV	0.998	0.200	25.034	0.632	5.473	1.712
	MAS	0.977	2.309	6.684	0.864	5.408	2.796

2.6 数据预测

经过 MAS 预处理后, SPA 选取的特征光谱用于 BPNN 建模的结果最佳。如图 7 所示, 建模结果显示了预测集真实值与预测值之间的高度拟合性。其预测集 R^2 值最高达 0.932, RPD 值最高到 3.922。在本研究中, 影响 NIRS 技术预测霉变玉米中 AFB₁ 含量的主要因素包括光谱预处理方法的差异和模型构建方式。结果表明, 经过 MAS 预处理的波长数据更适合用于模型构建。在 3 种模型中, 使用 BPNN 建模效果, 预测结果更加突出。同时, SPA 特征光谱的选取显著增强了模型的有效性和可靠性。

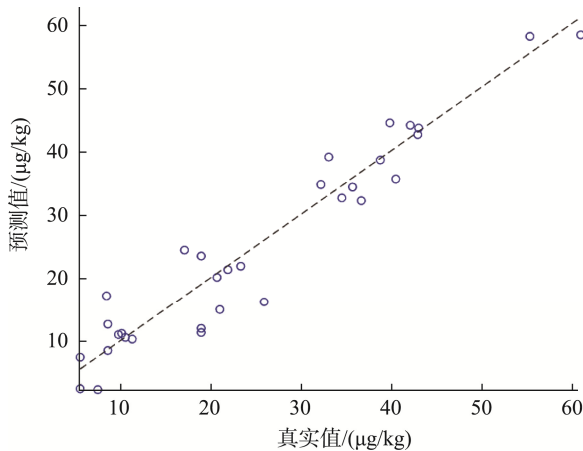


图7 经MAS处理后光谱数据BPNN建模的测试集预测结果对比
Fig.7 Comparison of test set predictions for BPNN modelling of spectral data after MAS processing

3 结论

本研究针对轻度真菌污染的霉变玉米, 采用 NIRS 技术检测其中的 AFB₁ 含量。在 RNSD 上采用了 3 种预处理方法, 将 RNSD 和预处理后光谱数据输入 3 种模型进行建模, 并与通过 SPA 选取特征光谱建模的结果比较。结果表明, 对于轻度霉变玉米, 在 3 种预处理方法中, MAS 更加优秀, 能得到较好的结果。在 3 种模型中, BPNN 的表现优于 ELM 和 SVM, 并且经 SPA 选取特征光谱建模的结果优于预处理完直接建模。最后, 经过 MAS 预处理的 NIRS 数据, 在 SPA 特征光谱选择后, 通过 BPNN 建模获得了较理想的结果, R^2 值最高达 0.932, 显示出较高的稳定性和可靠性。因此, 该方法可有效用于轻度霉变玉米的快速无损检测。

虽然本研究表明 BPNN 为最佳模型, 但其他模型的潜力仍待深入挖掘。例如, 对于 SVM, 可以探索不同的核函数和参数组合。此外, 数据处理环节中, 光谱预处理后可采用其他特征选择方法, 如主成分分析或线性判别分析, 以用更少的数据量传递更丰富的信息。尽管 NIRS 技术在霉变玉米的无损检测中显示出良好潜力, 但仍存在局限性,

需进一步完善。同时, 本研究的样本数量及种类可能尚不足以覆盖广泛的地域和品种, 玉米样品霉变程度即 AFB₁ 含量可能也未能达到所需的最佳标准, 没有进行霉变程度更大玉米样本的研究。此外, 霉变玉米的鉴别方法相对单一, 构建的预测模型的泛化能力仍需进一步提升。因此, 后续仍需深入研究。

参考文献

- [1] 常莉, 钱承敬, 史晓梅, 等. 基于近红外光谱技术的主产区玉米品质分析[J]. 中国粮油学报, 2024, 39(6): 36–42.
CHANG L, QIAN CJ, SHI XM, *et al.* Quality analysis of corn in major producing areas based on near-infrared spectroscopy technology [J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2024, 39(6): 36–42.
- [2] 姜德铭, 刘晓萌, 邹球龙, 等. 4 种黄曲霉毒素吸附剂对花生油综合品质的影响[J]. 中国油脂, 2023, 48(4): 75–80.
JIANG DM, LIU XM, ZOU QL, *et al.* Effects of four aflatoxin adsorbents on the overall quality of peanut oil [J]. China Oils and Fats, 2023, 48(4): 75–80.
- [3] 王光辉, 殷勇. 基于高光谱融合神经网络的玉米黄曲霉毒素 B₁ 和赤霉烯酮含量预测[J]. 食品与机械, 2018, 34(11): 64–69.
WANG GH, YIN Y. Detection of moldy maize aflatoxin B₁ and gibberellin by hyperspectral coupled with neural network [J]. Food & Machinery, 2018, 34(11): 64–69.
- [4] 刘晓晗, 白艺珍, 岳晓凤, 等. 农产品及食品黄曲霉毒素污染研究[J]. 中国油料作物学报, 2022, 44(4): 729–738.
LIU XH, BAI YZ, YUE XF, *et al.* Study on aflatoxin contamination in agricultural products and foods [J]. Chinese Journal of Oil Crop Sciences, 2022, 44(4): 729–738.
- [5] 纪立波, 赵东霞, 顾雨焱, 等. 新收获玉米不同霉斑颜色生霉粒与真菌毒素污染情况及优势菌研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2024, 15(11): 26–34.
JI LB, ZHAO DX, GU YX, *et al.* Study on the contamination of different colored moldy kernels and mycotoxins in newly harvested corn and dominant fungi [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2024, 15(11): 26–34.
- [6] 苏升畅, 施莉, 蔺应宏. 高效液相色谱法测定食用植物油中黄曲霉毒素 B₁ 的要点与步骤[J]. 中国食品工业, 2024(11): 125–127.
SU SC, SHI L, LIN YH. Key points and steps for determining aflatoxin B₁ in edible vegetable oils by high-performance liquid chromatography [J]. China Food Industry, 2024(11): 125–127.
- [7] LIU P, LIAO YH, ZHENG HB, *et al.* Facile dispersive solid-phase extraction based on humic acid for the determination of aflatoxins in various edible oils [J]. Analytical Methods, 2020, 12(18): 2308–2316.
- [8] BAILLY S, ORLANDO B, BRUSTEL J, *et al.* Rapid detection of aflatoxins in ground maize using near infrared spectroscopy [J]. Toxins, 2024, 16(9): 385–385.
- [9] 尚清玉, 朱嘉铭, 李慧, 等. 用于黄曲霉毒素检测的生物传感技术研究进展[J]. 中国油料作物学报, 2024, 46(4): 712–718.
SHANG QY, ZHU JM, LI H, *et al.* Research progress on biosensing technologies for aflatoxin detection [J]. Chinese Journal of Oil Crop Sciences, 2024, 46(4): 712–718.
- [10] MUHAMMAD A, SAMREEN A, MUHAMMAD N, *et al.* Detection and

- quantification of aflatoxins in spices stored in different food packaging materials [J]. *Journal of Stored Products Research*, 2023, 101: 102081.
- [11] BALAJI S, WEI L, CR J, *et al.* Rapid quantification of aflatoxin in food at the point of need: A monitoring tool for food systems dashboards [J]. *Current Research in Biotechnology*, 2023, 6: 100153.
- [12] 谭林, 陆阳, 王正坤. 玉米中真菌毒素检测技术的研究进展[J]. *粮食加工*, 2023, 48(6): 111–114.
TAN L, LU Y, WANG ZS. Research progress of detection technology of mycotoxin contamination of maize [J]. *Grain Processing*, 2023, 48(6): 111–114.
- [13] 袁迪, 洪滨, 张珊, 等. 食品中黄曲霉毒素样品前处理及检测技术研究进展[J]. *食品安全质量检测学报*, 2023, 14(24): 124–131.
YUAN D, HONG B, ZHANG S, *et al.* Research progress on sample pretreatment and detection techniques for aflatoxins in food [J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2023, 14(24): 124–131.
- [14] TAO F, YAO H, HRUSKA Z, *et al.* Detection of aflatoxin B₁ on corn kernel surfaces using visible-near infrared spectroscopy [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2020, 28(2): 59–69.
- [15] YI Z, REN Y, LI Y, *et al.* Development of portable and reusable optical fiber chemiluminescence biosensing platform for rapid on-site detection of aflatoxin B₁ [J]. *Microchemical Journal*, 2023, 186: 108305.
- [16] ZHAO Y, DENG J, CHEN Q, *et al.* Near-infrared spectroscopy based on colorimetric sensor array coupled with convolutional neural network detecting zearalenone in wheat [J]. *Food Chemistry: X*, 2024. DOI: 10.1016/j.fochx.2024.101322
- [17] LORENZO S, GIORGIO M, MARIA C, *et al.* Use of near-infrared spectroscopy and multivariate approach for estimating silage fermentation quality from freshly harvested maize [J]. *Italian Journal of Animal Science*, 2021, 20(1): 859–871.
- [18] 孟繁佳, 罗石, 吴月峰, 等. 近红外光谱的玉米种子穗腐病特征提取与判别模型研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2022, 42(6): 1716–1720.
MENG FJ, LUO S, WU YF, *et al.* Research on feature extraction and discrimination model of ear rot disease in corn seeds using near-infrared spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2022, 42(6): 1716–1720.
- [19] 谷忠超. 浅析近红外分析仪在玉米质量检测中的应用[J]. *现代食品*, 2024, 30(4): 101–103.
GU ZC. Analysis of the application of near infrared analyzer in corn quality testing [J]. *Modern Food*, 2024, 30(4): 101–103.
- [20] 李朋成, 刘含, 赵龙莲, 等. 基于高光谱数据研究应用近红外相机加装滤光片实现玉米叶片水分测量的关键参数[J]. *光谱学与光谱分析*, 2021, 41(10): 3184–3188.
LI PC, LIU H, ZHAO LL, *et al.* Key parameters for measuring moisture in corn leaves using near-infrared cameras with filters based on hyperspectral data [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2021, 41(10): 3184–3188.
- [21] 朱家骥, 荣雅文, 焦天慧, 等. 食品中常见真菌毒素的表面增强拉曼光谱检测研究进展[J]. *食品科学*, 2023, 44(17): 235–247.
ZHU JJ, RONG YW, JIAO TH, *et al.* Research progress on surface-enhanced Raman spectroscopy detection of common mycotoxins in food [J]. *Food Science*, 2023, 44(17): 235–247.
- [22] WANG GH, YIN Y. Prediction of aflatoxin B₁ and deoxynivalenol contents in corn based on hyperspectral fusion neural network [J]. *Food Machinery*, 2018, 34(11): 64–69.
- [23] 袁莹, 王伟, 褚璇, 等. 基于傅里叶变换近红外和支持向量机的霉变玉米检测[J]. *中国粮油学报*, 2015, 30(5): 143–146.
YUAN Y, WANG W, CHU X, *et al.* Detection of moldy corn based on Fourier transform near-infrared spectroscopy and support vector machine [J]. *Journal of the Chinese Cereals and Oils Association*, 2015, 30(5): 143–146.
- [24] CHENG X, VELLA A, STASIEWICZ MJ. Classification of aflatoxin contaminated single corn kernels by ultraviolet to near Infrared spectroscopy [J]. *Food Control*, 2018, 98: 253–261.
- [25] GASPARDO B, ZOTTO SD, TORELLI E, *et al.* A rapid method for detection of fumonisins B₁ and B₂ in corn meal using Fourier transform near infrared (FT-NIR) spectroscopy implemented with integrating sphere [J]. *Food Chemistry*, 2012, 135(3): 16081612.
- [26] 严晨, 蒋雪松, 沈飞, 等. 可见-近红外光谱结合机器视觉动态检测花生黄曲霉毒素 B₁ 污染[J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(12): 3865–3870.
YAN C, JIANG XS, SHEN F, *et al.* Dynamic detection of aflatoxin B₁ contamination in peanuts using visible-near infrared spectroscopy combined with machine vision [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2020, 40(12): 3865–3870.
- [27] 赵怡锟, 于燕波, 申兵辉, 等. 近红外光谱分析在玉米单籽粒品种真实性鉴定中的影响因素[J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(7): 2229–2234.
ZHAO YK, YU YB, SHEN BH, *et al.* Influencing factors of near-infrared spectroscopy analysis in the authenticity identification of single grain varieties of corn [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2020, 40(7): 2229–2234.
- [28] 李尚科, 李跑, 杜国荣, 等. 基于近红外光谱技术和优化预处理方法的不同品牌燕麦无损鉴别分析[J]. *食品安全质量检测学报*, 2019, 10(24): 8204–8210.
LI SK, LI P, DU GR, *et al.* Non-destructive identification of different brands of oats based on near-infrared spectroscopy and optimized pretreatment methods [J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2019, 10(24): 8204–8210.
- [29] 邵晨阳, 赵一墨, 鹿莉莉, 等. 近红外光谱快速分析技术的应用研究进展[J]. *化学通报*, 2024, 87(8): 898–912.
SHAO CY, ZHAO YM, LU LL, *et al.* Progress in the application of near-infrared spectroscopy for rapid analysis [J]. *Chemical Bulletin*, 2024, 87(8): 898–912.
- [30] 王永, 杨国耀, 乔俊峰, 等. 便携式近红外光谱仪及其在农业中的应用现状[J]. *江苏农业科学*, 2022, 50(7): 10–17.
WANG Y, YANG GY, QIAO JF, *et al.* Portable near-infrared spectrometer and its application in agriculture [J]. *Jiangsu Agricultural Sciences*, 2022, 50(7): 10–17.

(责任编辑: 于梦娇 韩晓红)