李琳, 孙慧慧, 曹荣, 等. 基于近红外光谱技术的南极磷虾品质快速评定 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(1): 318−325. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2024120219

LI Lin, SUN Huihui, CAO Rong, et al. Rapid Quality Assessment of Antarctic Krill Based on Near-Infrared Spectroscopy[J]. Science and Technology of Food Industry, 2026, 47(1): 318−325. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2024120219

· 分析检测 ·

基于近红外光谱技术的南极磷虾品质快速评定

李　琳[1,2], 孙慧慧[1], 曹　荣[1], 孙　永[1,*], 张朝辉[2,*]

（1.中国水产科学研究院黄海水产研究所, 山东青岛 266071;
2.中国海洋大学, 食品科学与工程学院, 山东青岛 266003）

摘　要: 为实现南极磷虾（*Euphausia superba*）品质的快速评定，本研究将近红外光谱技术（Near infrared spectroscopy，NIRS）与偏最小二乘法（Partial least squares，PLS）相结合，构建用于快速预测磷虾体内非蛋白氮（Non-protein nitrogen，NPN）含量和挥发性盐基氮（Total volatile base nitrogen，TVB-N）含量的近红外定量分析模型。采集近红外光谱后，通过比较决定系数（Coefficient of determination，R^2）、校正标准偏差（Root mean square error of calibration，RMSEC）、预测标准偏差（Root mean square error of prediction，RMSEP）等模型的评价参数，选取近红外光谱定量分析模型的最佳预处理方式、特征光谱范围以及主因子数。结果显示，NPN 含量模型的最佳预处理方法为多元散射校正（Multiplicative signal correction，MSC），其特征光谱范围为 8887.1~7774.2 cm^{-1}；TVB-N 含量模型则采用 MSC 与卷积平滑（Savitzky-Golay smoothing，SG）相结合的方式进行预处理，建模范围为全波段。两个定量模型的主因子数均为 5。经模型的优化与外部验证，最终构建的 PLS 最优模型如下：NPN 含量近红外定量分析模型的 R^2 为 0.9384，RMSEC 为 0.279，RMSEP 为 0.443；TVB-N 含量近红外定量分析模型的 R^2 为 0.8685，RMSEC 为 3.800，RMSEP 为 4.070。研究结果表明，两个模型均具有良好的预测精度（R^2>0.85）和稳定性，其中 NPN 定量分析模型的预测能力优于 TVB-N 定量分析模型。综上，本研究基于 NIRS 与 PLS 构建的定量分析模型能够有效预测南极磷虾体内的 NPN 和 TVB-N 含量，为南极磷虾的品质评价提供了可靠的技术支持，满足快速评定的实际应用需求。

关键词: 南极磷虾, 近红外光谱技术, 偏最小二乘法, 非蛋白氮, 挥发性盐基氮

中图分类号: TS254.7　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1002−0306(2026)01−0318−08

DOI: 10.13386/j.issn1002-0306.2024120219

本文网刊:

Rapid Quality Assessment of Antarctic Krill Based on Near-Infrared Spectroscopy

LI Lin[1,2], SUN Huihui[1], CAO Rong[1], SUN Yong[1,*], ZHANG Zhaohui[2,*]

（1.Yellow Sea Fisheries Research Institute, Chinese Academy of Fishery Sciences, Qingdao 266071, China;
2.College of Food Science and Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266003, China）

Abstract: The aim of this study was to develop a rapid quality assessment method for Antarctic krill (*Euphausia superba*) by integrating near-infrared spectroscopy (NIRS) with partial least squares (PLS) regression. Quantitative models were established to predict two critical quality indicators: non-protein nitrogen (NPN) and total volatile base nitrogen (TVB-N) contents. Following spectral acquisition, the key model parameters, including the preprocessing methods, characteristic spectral ranges, and principal factor numbers, were systematically optimized. Model performance was evaluated using the

收稿日期: 2024−12−17

基金项目: 国家重点研发计划项目（2023YFD2401205）。

作者简介: 李琳（1998−）, 女, 硕士, 研究方向: 食品科学, E-mail: lilin_4x@163.com。

*** 通信作者:** 孙永（1982−）, 男, 博士, 副研究员, 研究方向: 水产品加工与质量安全, E-mail: sunyong@ysfri.ac.cn。

张朝辉（1968−）, 男, 博士, 教授, 研究方向: 海洋生物活性物质及水产品加工, E-mail: zhangzhh@ouc.edu.cn。

coefficient of determination (R^2), root mean square error of calibration (RMSEC), and root mean square error of prediction (RMSEP). For the NPN model, multiplicative scatter correction (MSC) was selected as the optimal preprocessing method, with a characteristic spectral range of 8887.1 to 7774.2 cm^{-1}. The TVB-N model utilized a combination of MSC and Savitzky-Golay smoothing (SG), with the full spectral band employed for modeling. Both models adopted five principal factors. After optimization and external validation, the optimized NPN model demonstrated a robust performance, with R^2=0.9384, RMSEC=0.279, and RMSEP=0.443, whereas the TVB-N model achieved R^2=0.8685, RMSEC=3.800, and RMSEP=4.070. These results indicated that both models exhibit high predictive accuracy (R^2>0.85) and stability, with the NPN model outperforming the TVB-N model in terms of predictive capability. In conclusion, quantitative analysis models constructed by combining NIRS and PLS can predict the NPN and TVB-N content in Antarctic krill. This approach provides a rapid solution for Antarctic krill quality assessment, addressing the growing demand for the efficient monitoring of Antarctic krill resource utilization.

Key words: Antarctic krill; near infrared spectroscopy; partial least squares; non-protein nitrogen; total volatile base nitrogen

南极磷虾（*Euphausia superba*）的生物资源量巨大，且营养价值丰富，富含人体必需氨基酸和多不饱和脂肪酸，因此，其具有很高的开发利用价值，已成为南大洋中重要的渔业资源[1−2]。目前，南极磷虾多用于加工成南极磷虾粉、磷虾油、虾干等产品[3]。然而，南极磷虾在贮运过程中易受自身水解酶以及温度波动、贮藏时间等因素的影响，引起自身的品质劣变[4−5]，这导致磷虾原料的品质不一。当前，对于磷虾品质的评定多采用化学分析法测定其理化指标，如非蛋白氮（Non-protein nitrogen, NPN）含量、挥发性盐基氮（Total volatile base nitrogen, TVB-N）含量、硫代巴比妥酸值（Thiobarbituric acid reactive substances, TBARS）等[6]，然而传统的化学分析方法存在操作繁琐，耗时长，效率低，且品质信息片面等缺点，很难满足生产实践的要求[7]。因此，建立一种快检技术实现南极磷虾品质的快速评定对于南极磷虾后续的加工利用具有重要意义。

近红外光谱技术（Near infrared spectroscopy, NIRS）具有检测速度快、操作简便，样品处理简单，待测样品范围广，主观因素影响小，检测过程无污染等特点。目前已逐渐成为食品快速检测技术发展的重要方向之一[8−9]。近红外光谱是介于可见光与中红外光谱之间的光谱，其波长范围在 750~2500 nm（波数范围为 13300~4000 cm^{-1}）[10]。近红外光谱主要是由含氢基团（X-H）的伸缩振动产生的倍频和各基团的合频吸收产生的，光谱特征随着样品中成分及结构的不同引起散射和吸收光的变化而变化，因此，通过光谱信息可预测样品的化学结构，并识别样品中的代表性化学成分[11]。

NIRS 主要与化学计量学等计算机技术相结合，提取光谱中的有效信息，用于定量或定性分析待测样品。目前已广泛应用于食品、农业、医药、化工等重要领域[12−15]。国内外多项研究表明 NIRS 在鳙鱼[16]、虹鳟鱼[17]、鲐鱼[18]、大西洋鲑鱼[19]、南美白对虾[20] 等水产品品质的定量检测中均具有较好的预测效果，说明 NIRS 是水产品领域中可靠的快检技术之一。然而，NIRS 在南极磷虾品质检测中应用尚浅，因此，可借助近红外光谱建立快速评定南极磷虾品质的检测方法。

实验室前期已证实 NPN 含量是可以表征南极磷虾自溶进程的指标[21]，且 TVB-N 含量是 GB 2733-2015 中明确规定水产品的理化限量指标，是目前评价水产品品质时广泛采用的指标[22]。因此，本研究采用 NPN 含量和 TVB-N 含量作为品质指标，将近红外光谱技术与偏最小二乘法（Partial least squares, PLS）相结合，分别建立近红外定量分析模型，实现南极磷虾中 NPN 含量和 TVB-N 含量的快速测定，从而为高效评定南极磷虾品质提供技术支撑，具有实际应用价值。

1　材料与方法

1.1　材料与仪器

南极磷虾　中国水产有限公司于南极海域 48.1 区捕捞，以虾砖的形式于−20 ℃ 冷冻贮运至实验室后，经流水解冻，将其分装成 100 份样品，装入无菌自封袋，随机取 10 份作为初始样品，其余 90 份均分成两组，分别放置于 0 ℃ 和 4 ℃ 冷藏条件下贮藏 120 h，每间隔 24 h 分别从两组中随机取 10 份样品，匀浆后用于近红外光谱的采集及理化指标的测定；硫酸　分析纯，成都市科隆化学品有限公司；盐酸、三氯乙酸、硼酸、饱和碳酸钾、甲基红、溴甲酚绿、2-硫代巴比妥酸（TBA）、甘油　均为分析纯，国药集团化学试剂有限公司。

Tensor27 傅里叶变换红外光谱仪　德国 Bruker 公司；IntegratIR™ 型近红外积分球　美国 PIKE 公司；K9840 型自动凯氏定氮仪　山东海能公司；ME204 型分析天平　感量为 0.1 mg，梅特勒托利多科技（中国）有限公司；HH-4 型数显恒温水浴锅　国华科技有限公司；2802UV/VIS 型紫外分光光度计　上海 UNIQUE 公司；5804-R 型冷冻离心机　德国 EPPENDORF 公司；5PX-25085H-Ⅱ型生化培养箱　上海新苗医疗器械有限公司。

1.2　实验方法

1.2.1　近红外光谱的采集　取 2~3 g 南极磷虾样品装入样品瓶中，排除底部气泡。Tensor 27 傅里叶变

换红外光谱仪预热 30 min 并经镀金标准板系统校正后采集样品的近红外光谱。光谱测定条件: 光谱扫描范围为 10000~4000 cm^{-1}, 扫描次数为 64 次, 分辨率为 8 cm^{-1}, 工作环境温度为 25 ℃。每份样品重复扫描 3 次, 取平均光谱。

1.2.2 NPN 含量的测定 参考曹荣等[21]的方法并稍作修改。将 5 g 磷虾与蒸馏水按照 1∶4(m∶v)比例进行均质, 准确称取匀浆液 8 g, 加入 8 mL 质量分数为 10% 的三氯乙酸(Trichloroacetic acid, TCA)溶液, 涡旋振荡 1 min, 静置 15 min, 8000 r/min 离心 20 min, 取上清液 10 mL, 参照 GB 5009.5-2016《食品安全国家标准 食品中蛋白质的测定》, 采用凯氏定氮法测定其中氮元素的含量, 即为非蛋白氮的含量, 结果以 mg/g 表示。

1.2.3 TVB-N 含量的测定 参照 GB 5009.228-2016《食品安全国家标准 食品中挥发性盐基氮的测定》中的第三法 微量扩散法测定样品中 TVB-N 的含量, 结果以 mg/100 g 表示。

1.2.4 光谱数据预处理 采集近红外光谱过程中, 由于样品的状态、均匀程度以及环境变化和仪器状态等因素会引起光谱出现基线漂移和噪声等现象。因此, 采用光谱预处理方式对原始光谱进行基线校正及降噪处理, 消除无关信息, 提高信噪比, 从而优化光谱[23]。本研究选取几种常用的光谱预处理方式, 包括多元散射校正(Multiplicative signal correction, MSC)、标准正态变量变换(Standard normal variate, SNV)、卷积平滑(Savitzky-Golay smoothing, SG)、一阶导数(First derivative, D1)、二阶导数(Second derivative, D2)等及其组合共 8 种。其中, MSC 和 SNV 主要用来消除或降低待测样品由于形态、颗粒大小及均匀程度不同产生的散射效应; SG 平滑用于降低系统本身引起的随机噪声, 过滤高频信号以提高信噪比; 求导数法能够有效去除基线漂移对光谱的影响, 一般只使用一阶和二阶导数[17,24]。

1.2.5 模型的建立与评价 采用 Kennard-Stone 算法将样本集按照 3∶1 的比例划分为校正集和验证集, 通过综合考量 TQ analyst 软件(Thermo Fisher, 美国)推荐的光谱范围及光谱吸光度显著变化区域确定模型的特征波数范围, 并运用 TQ analyst 软件中的 PLS 建立定量分析模型。通过比较模型的决定系数(Coefficient of determination, R^2)、校正标准偏差(Root mean square error of calibration, RMSEC)、预测标准偏差(Root mean square error of prediction, RMSEP)和偏差(Bias)等模型参数评价模型的稳定性和准确性, 从而选择出各模型的最佳光谱预处理方式、最优建模波数范围和最佳主因子数, 进而构建出最佳的定量分析模型。模型的预测能力进一步通过模型的外部样本进行验证, 即: 将建模样本集外的数据输入至所建立的模型中, 所得的预测值与实测值相比较验证模型的准确性。

1.3 数据处理

每组检测数据平行测定 3 次, 取平均值。数据统计及图表绘制采用 Excel 2021 软件和 OriginPro 2021 软件。近红外光谱的预处理由 OPUS 7.0 (BRUKER, 德国)完成。

2 结果与分析

2.1 南极磷虾样品的近红外光谱

图 1 为贮藏期所收集的所有南极磷虾样品的原始近红外光谱图。由图可知, 原始光谱图趋势大致相同, 但样品间的吸光度存在一定差异, 这是由南极磷虾在贮藏过程中品质变化引起体内化学成分发生变化导致[16]。谱图中, 在 8887.1~7774.2 cm^{-1}、5601.2~4176.6 cm^{-1} 波数范围内出现较为明显的吸收峰, 这是磷虾体内 O-H 键以及蛋白质或氨基酸组分的 N-H 键伸缩振动的结果[25]。有关含氮键光谱区域的明显波动对于定量 NPN 和 TVB-N 至关重要。NPN 含量是指包括除大分子蛋白质以外的含氮化合物的总量; TVB-N 含量指蛋白质在酶和微生物的作用下分解产生碱性含氮物质及挥发性胺的含量[26], 二者的化学结构中均含有 N-H 和 N-N 等官能团, 因此, 采集的近红外光谱可用于预测 NPN 和 TVB-N 含量。

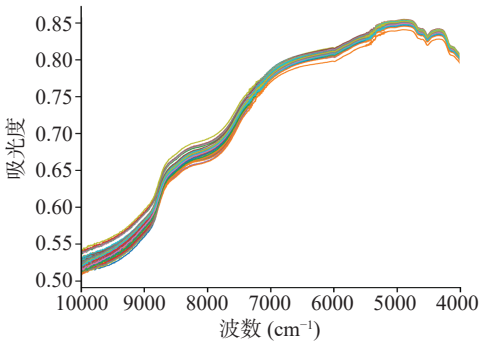


图 1 南极磷虾样本集的原始近红外光谱图

Fig.1 Raw NIR spectra of the Antarctic krill sample set

2.2 理化指标的化学分析结果

校正集和验证集的 NPN 含量和 TVB-N 含量的化学值范围、平均值、标准偏差等见表 1。其中, NPN 含量中一组数据与其他平行组相比化学值偏高, 被判定为异常值, 因此剔除该组数据。为确保预测模型的准确性和稳定性, 试验中使得验证集的化学值范围在校正集的化学值范围内[27−28]。此外, 校正集和验证集中的 TVB-N 最大测定值均超过 30 mg/100 g(国标规定值), 说明建立定量模型采用的数据

表 1 NPN 含量和 TVB-N 含量测定结果

Table 1 Measurement results of NPN content and TVB-N content

化学指标	样本集	样本数	最大值	最小值	平均值	标准偏差
NPN(mg/g)	校正集	74	8.96	5.74	7.16	0.046
	验证集	25	8.46	6.09	7.01	0.039
TVB-N (mg/100 g)	校正集	75	43.568	7.218	18.747	1.916
	验证集	25	35.889	7.877	17.333	2.254

范围足够大，满足了建模的标准要求，且化学测定值的数据分布均匀，保证了模型的适用性及预测准确性。

2.3　最佳光谱预处理方式的选择

原始光谱经 8 种不同光谱预处理方式处理后的谱图如图 2 所示。将预处理前后的光谱数据分别与样本集的 NPN 含量和 TVB-N 含量相关联，利用 TQ analyst 软件分别建立两种 PLS 定量分析模型，所得建模结果见表 2。模型的决定系数（R^2）越接近于 1，校正标准偏差（RMSEC）与预测标准偏差（RMSEP）越小，且二者间的差异越小，表明模型的精度越高，预测性能越好[29]。经不同预处理方式处理后，大多数模型的 R^2 均大于原始光谱，且均超过 0.8，说明这些预处理方式均一定程度上优化了光谱，提高了模型的信噪比[30]。

通过比较不同预处理方式的评价参数发现，NPN 定量分析模型由 MSC、D2 和 SG 平滑相结合的方式处理后，模型 R^2 最大，为 0.9958；但其 RMSEC（0.0737）与 RMSEP（0.6470）相差较大，说明该模型的稳定性差。此外，主因子数是否适宜也决定了模型的准确性。主因子数过少导致模型拟合不足，即模型不能涵盖所有的特性；若主因子数过多则会导致模型拟合过度，降低了模型的精度[31]。由表 2 可知，经 MSC 和 SNV 预处理后的 NPN 含量预测模型，其 R^2 非常接近，且主因子数均为 6。然而，MSC 预处理后的 RMSEP（0.3670）略低于 SNV 预处理后的 RMSEP（0.3690），表明 MSC 处理的结果稍优。此外，考虑到 MSC 在实际应用中的稳定性更高，因此选择 MSC 作为 NPN 模型的最佳预处理方式。同理，综合比较各评价参数，MSC 与 SG 平滑结合处理后的光谱在建立 TVB-N 含量预测模型时表现更佳。

2.4　特征波数的选择

近红外光谱数据中包含了大量冗余信息及噪声，本试验中每条光谱包含 1556 个信号点，从光谱信息中筛选出合适的建模波数范围，提取光谱中与 NPN、TVB-N 相关的有效信息，消除光谱中的无效信号，是提高模型预测性能的关键[32−33]。由 2.1 可知，光谱图中存在两个有明显吸收峰的波数范围，与 TQ analyst 软件推荐的建模范围相结合，通过模型评价参数筛选出适合建立模型的波段，结果见表 3。当光谱波数范围选定为 8887.1~7774.2 cm^{-1} 时，NPN 定量模型的 R^2 最大，为 0.9255；RMSEC 最小，为 0.3060。尽管该范围的 RMSEP 略高于全谱范围（RMSEP=0.4180），但其值在各光谱范围中仍处于较低水平，且与 RMSEC 的差值较小，表明模型具有较

表 2　不同光谱预处理方式的 PLS 建模结果

Table 2　PLS modelling results for different spectral pre-processing methods

模型	预处理方式	R^2	RMSEC	RMSEP	主因子数
NPN	Raw	0.7590	0.5260	0.4460	4
	MSC	0.9078	0.3090	0.3670	6
	SNV	0.9079	0.3090	0.3690	6
	D1	0.9138	0.3280	0.3960	2
	D2	0.8425	0.4350	0.6970	2
	SG	0.7585	0.5260	0.4460	4
	MSC+SG	0.8822	0.4470	0.4740	6
	MSC+D1+SG	0.8882	0.3710	0.4370	2
	MSC+D2+SG	0.9958	0.0737	0.6470	7
TVB-N	Raw	0.8385	4.150	4.210	6
	MSC	0.8594	3.650	4.550	5
	SNV	0.8595	3.640	4.540	5
	D1	0.8903	3.490	5.180	2
	D2	0.6693	5.690	6.300	1
	SG	0.9143	3.100	5.310	8
	MSC+SG	0.8567	3.920	4.280	5
	MSC+D1+SG	0.8789	3.650	5.770	2
	MSC+D2+SG	0.8782	3.660	6.780	2

注：Raw，原始光谱；MSC，多元散射校正；SNV，标准正态变量变换；D1，一阶导数；D2，二阶导数；SG，卷积平滑；R^2，决定系数；RMSEC，校正标准偏差；RMSEP，验证标准偏差。

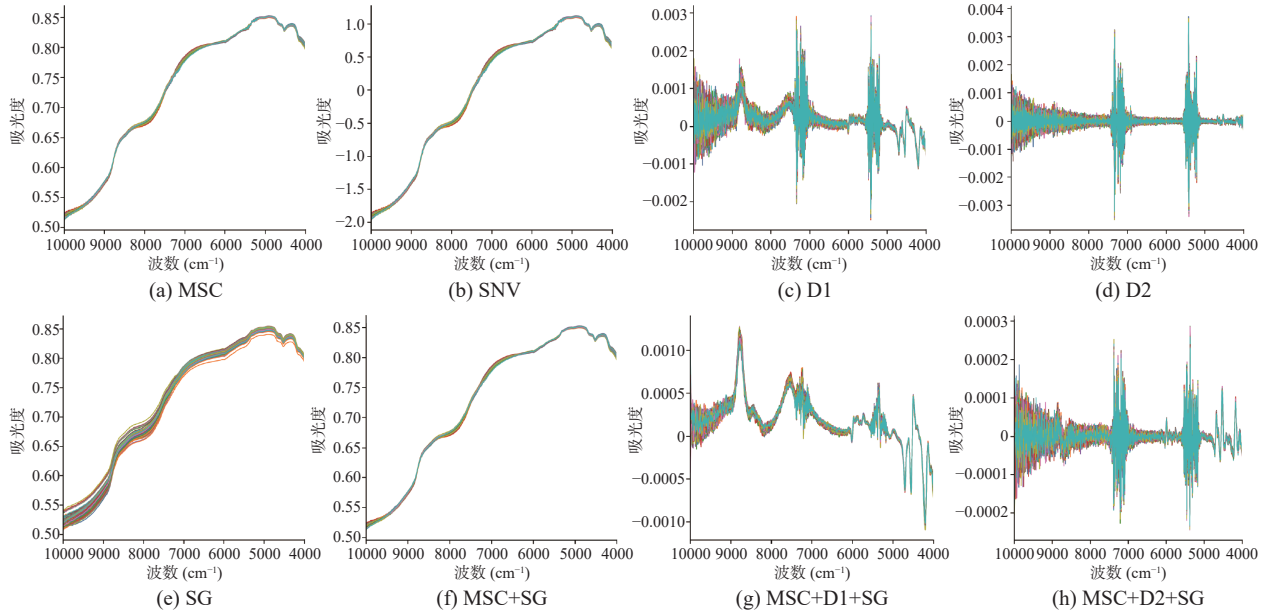


图 2　不同预处理方式处理后的近红外光谱图

Fig.2　NIR spectra after treatment with different preprocessing methods

表 3 不同光谱范围的 PLS 建模结果

Table 3 PLS modelling results for different spectral ranges

模型	光谱范围	R^2	RMSEC	RMSEP
NPN	全谱	0.7715	0.5140	0.4180
	8887.1~7774.2 cm^{-1}	0.9255	0.3060	0.4240
	5981.6~4915.4 cm^{-1}	0.6579	0.6080	0.5340
	8887.1~7774.2 cm^{-1}、5981.6~4915.4 cm^{-1}	0.7590	0.5260	0.4460
TVB-N	全谱	0.8385	4.150	4.210
	8773.8~7827.5 cm^{-1}	0.8398	4.140	5.120
	5175.3~4169.1 cm^{-1}	0.3320	7.190	6.490
	8773.8~7827.5 cm^{-1}、5175.3~4169.1 cm^{-1}	0.9377	2.650	5.300

好的稳定性。因此，选用 8887.1~7774.2 cm^{-1} 作为 NPN 含量定量分析模型的特征波数范围。

同理，经比较发现，采用全光谱建立的 TVB-N 模型具有较高的 R^2(0.8385)和较低且最接近的 RMSEC(4.150)与 RMSEP(4.210)，其他波数范围的 RMSEP 显著增大，且与 RMSEC 的差值过大，表明模型可能存在过拟合现象。这说明，在筛选特征波数时可能剔除了与预测 TVB-N 含量有关的信息。因此，建立 TVB-N 含量定量分析模型时应选用近红外光谱的全波段范围，以保证模型的准确性。

2.5 主因子数的选择

PLS 通过主成分分析对光谱数据进行压缩(降维，特征提取)，然后通过间接最小二乘法(Indirect least square, ILS)创建线性多元回归模型。由于 PLS 在计算主因子时同时利用了光谱数据和浓度信息，因此其定量分析模型的预测精度与主因子数量密切相关，主因子数也被称作模型的维数[34]。如 2.3 节所述，主因子数对模型预测准确性具有重要影响。为避免模型出现拟合不足或过拟合现象，本研究分别绘制了 NPN 和 TVB-N 模型的主因子数与 RMSEP 之间的关系图，如图 3 所示。结果表明，当主因子数为 5 时，两种模型的 RMSEP 均达到最小值，此时模型的精度最高，预测性能最好。

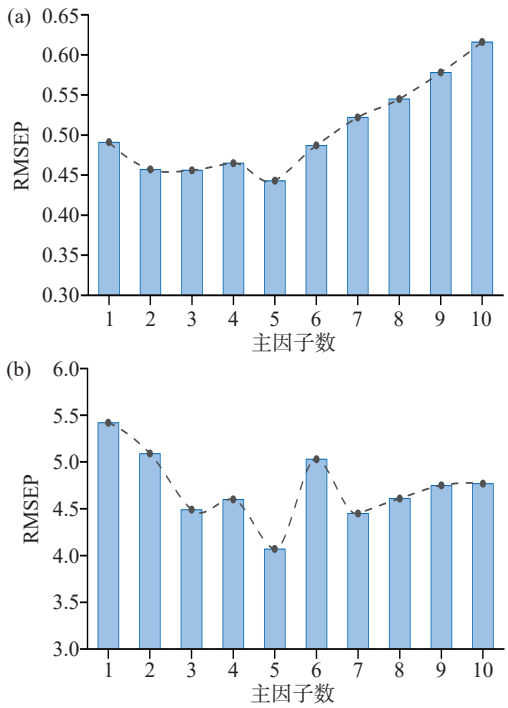


图 3 主因子数与 RMSEP 的关系图

Fig.3 Plot of principal factors with RMSEP

注：a. NPN 含量定量分析模型；b. TVB-N 含量定量分析模型。

2.6 定量分析模型的建立

应用筛选出的最佳 PLS 建模条件分别构建南极磷虾 NPN 和 TVB-N 含量的预测模型，如图 4

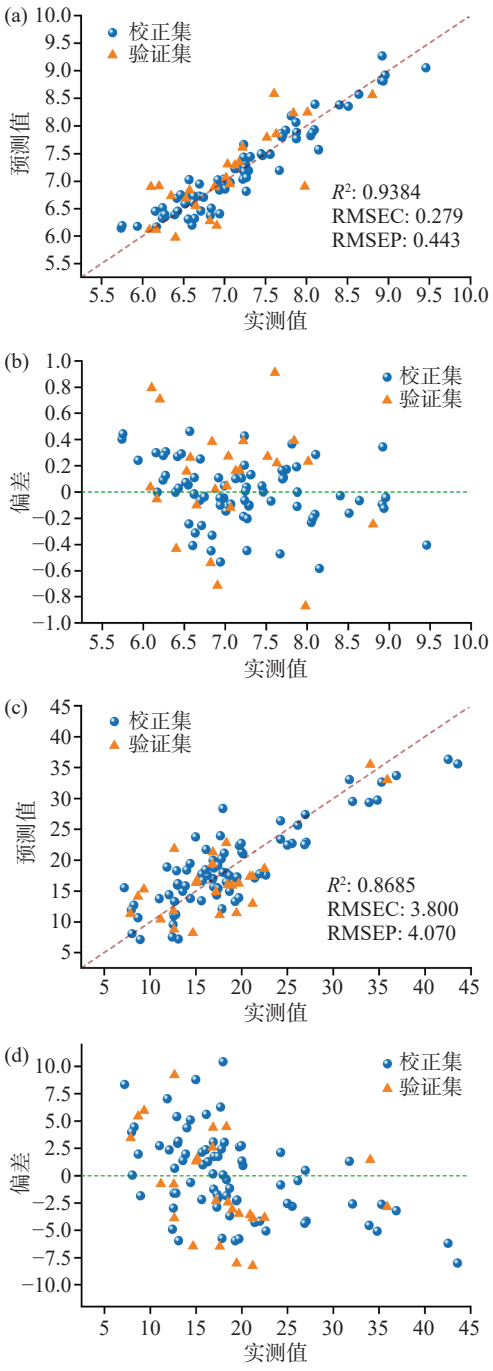


图 4 PLS 近红外定量分析模型

Fig.4 Quantitative NIR analysis model in PLS

注：a、c 分别为 NPN 和 TVB-N 实测值与预测值之间的关系；b、d 分别为 NPN 含量和 TVB-N 含量实测值与预测偏差之间的关系。

所示。NPN 含量模型的 R^2 为 0.9384，RMSEC 为 0.279，RMSEP 为 0.443；TVB-N 含量模型的 R^2 为 0.8685，RMSEC 为 3.800，RMSEP 为 4.070。图 4(a)(c)分别反映了南极磷虾体内 NPN 和 TVB-N 含量的实际测量值与模型预测值之间的关系。由图 4(a)可知，校正集与验证集的数据较为均匀地分布在拟合直线的两侧，无明显偏离直线的点，说明 NPN 含量近红外定量模型的预测能力较好，精度较高。然而，图 4(c)中 TVB-N 含量的校正集与验证集中的个别样本偏离拟合直线较远，且较多数据集中在 6~30 mg/100 g 之间，这是由于在南极磷虾贮藏前期 TVB-N 含量增加缓慢，而后期 TVB-N 含量迅速增加。

图 4(b)(d)反映了两种指标的实际测量值与模型预测偏差大小之间的关系。NPN 含量的偏差的绝对值均未超过 1，说明模型的预测值偏差小，较接近实测值，进一步表明所建模型具备良好的预测性能。TVB-N 含量中有一个样本的偏差大于 10，其余样本的偏差的绝对值均在 10 以内，说明模型的预测能力较好。综上，两种模型的 R^2 均大于 0.85，且误差值接近，说明模型的性能均较好[29]。然而，与 NPN 含量的定量分析模型相比，TVB-N 含量的模型预测性能较弱，这可能是由于微生物生长曲线随贮藏时间的延长发生变化，使得 TVB-N 含量后期显著上升，而 NPN 含量贮藏期间变化较稳定[35]。

2.7　模型的验证

为进一步验证模型的准确性，将建模样本集外的 15 组数据分别输入到所建模型中，所得的预测结果如图 5 所示。由图 5(a)可知，只有少数样品(三组)的 NPN 含量实测值与预测值之间存在较大偏差，表明该模型能够较为准确地预测南极磷虾体内的 NPN 含量，满足建模要求。此外，图 5(b)显示，TVB-N 含量的验证结果中同样存在三组样品的偏差较大，但其偏差绝对值均小于 10，进一步说明 TVB-N 含量定量分析模型具有良好的预测能力。因此，所建立的两种近红外定量分析模型均能够基本实现在工业生产、科学研究等实际需要中对南极磷虾体内 NPN 和 TVB-N 含量的快速检测。

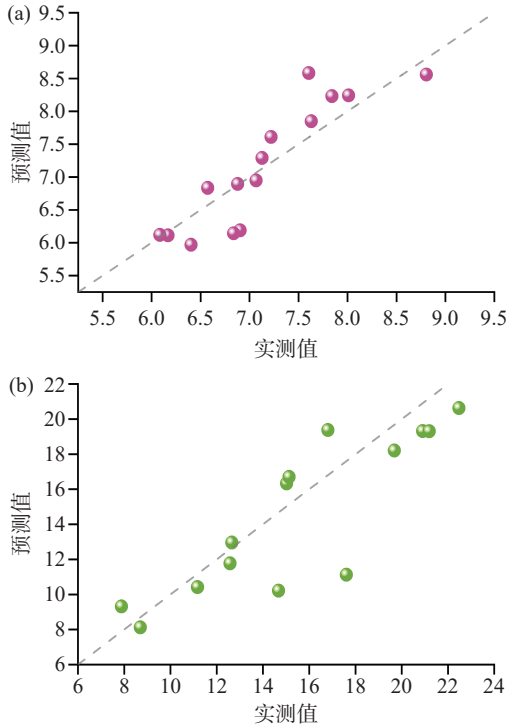


图 5　模型验证结果

Fig.5　Model validation results

注：a. NPN 含量模型验证结果；b. TVB-N 含量模型验证结果。

3　结论

本研究将近红外光谱与偏最小二乘法相结合，运用 TQ analyst 成功建立了用于快速预测南极磷虾体内 NPN 含量和 TVB-N 含量的定量分析模型。通过选择模型的最佳光谱预处理方式、特征波数范围以及主因子数实现模型的优化，其中，最优 NPN 含量近红外定量分析模型的 R^2 为 0.9384，RMSEC 为 0.279，RMSEP 为 0.443；最优 TVB-N 含量近红外定量分析模型的 R^2 为 0.8685，RMSEC 为 3.800，RMSEP 为 4.070。两个模型的 R^2 均大于 0.85，且 RMSEP 接近于 RMSEC。此外，模型外部验证结果表明模型预测值与测定值之间偏差较小，均在可接受范围内。研究表明，两个定量模型的预测精度及稳定性均较好，且 NPN 定量分析模型的预测能力优于 TVB-N 定量模型。综上，近红外光谱技术结合 PLS 可实现南极磷虾品质的快速评定，本研究为南极磷虾的品质评价提供了技术支撑。

本研究基于传统的化学计量学方法构建了南极磷虾关键指标的预测模型，为进一步提升模型性能，后续将从以下方面深入研究：其一，引入集成学习和人工神经网络等机器学习算法，通过非线性关系挖掘与特征重要性排序，优化模型的泛化能力与预测精度；其二，通过细化取样时间、选取不同季节的磷虾扩大样本量，并系统比较区间筛选、遗传算法等特征波长优选方法的适用性，以降低光谱噪声干扰并提高模型鲁棒性。此外，鉴于便携式近红外光谱仪在检测中的技术优势，后续拟研究基于便携式近红外光谱仪的磷虾品质预测模型的构建和应用，进一步提高快检技术的实用性。

© The Author(s) 2026. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

参考文献

[1] GIGLIOTTI J C, DAVENPORT M P, BEAMER S K, et al. Extraction and characterisation of lipids from Antarctic krill (*Euphausia superba*)[J]. Food Chemistry, 2011, 125(3): 1028−1036.

[2] NICOL S, FOSTER J, KAWAGUCHI S. The fishery for Antarctic krill-recent developments[J]. Fish and Fisheries, 2012, 13(1): 30−40.

[3] 刘禹希，陈琛，林香红. 南极渔业资源开发利用现状及启示

[J]. 中国渔业经济, 2023, 41(2): 117−126. [LIU Yuxi, CHEN Chen, LIN Xianghong. Current situation and enlightenment of exploitation and utilization of Antarctic fishery resources[J]. Chinese Fisheries Economics, 2023, 41(2): 117−126.]

[4] FAN Yan, TIAN Lili, XUE Yong, et al. Characterization of protease and effects of temperature and salinity on the biochemical changes during fermentation of Antarctic krill[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2017, 97(11): 3546−3551.

[5] MA Xinyu, SU Dong, ZHU Jiancheng, et al. Comparative metabolomics study on the quality of Antarctic krill (*Euphausia superba*) stored at different temperatures[J]. International Journal of Food Science & Technology, 2024, 59(7): 4489−4499.

[6] NI Ling, JIANG Chaojun, GUO Quanyou, et al. Metabolomics analysis of physicochemical properties associated with freshness degradation in frozen Antarctic krill (*Euphausia superba*)[J]. Food Research International, 2024, 183: 114190.

[7] 占可, 陈季旺, 徐言, 等. 基于近红外光谱特征的冷冻小龙虾鲜度快速检测方法[J]. 食品科学, 2024, 45(2): 299−307. [ZHAN Ke, CHEN Jiwang, XU Yan, et al. A rapid detection method for freshness of frozen crayfish based on near-infrared spectroscopy[J]. Food Science, 2024, 45(2): 299−307.]

[8] 陶瑞, 史智佳, 贡慧, 等. 傅里叶变换近红外光谱技术快速检测金枪鱼新鲜度[J]. 肉类研究, 2017, 31(4): 43−49. [TAO Rui, SHI Zhijia, GONG Hui, et al. Rapid determination of tuna meat freshness based on Fourier transform near infrared reflectance spectroscopy (FT-NIR)[J]. Meat Research, 2017, 31(4): 43−49.]

[9] ZAUKUU J Z, ZIMMERMANN E, ACQUAH B B, et al. Novel detection techniques for shrimp powder adulteration using near infrared spectroscopy in tandem chemometric tools and multiple spectral preprocessing[J]. Food Analytical Methods, 2023, 16(4): 819−831.

[10] NICOLAÏ B M, BEULLENS K, BOBELYN E, et al. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review[J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 46(2): 99−118.

[11] SAMPAIO P S, SOARES A, CASTANHO A, et al. Optimization of rice amylose determination by NIR-spectroscopy using PLS chemometrics algorithms[J]. Food Chemistry, 2018, 242: 196−204.

[12] JIANG Hao, LIN Hao, LIN Jinjin, et al. Non-destructive detection of multi-component heavy metals in corn oil using nano-modified colorimetric sensor combined with near-infrared spectroscopy[J]. Food Control, 2022, 133: 108640.

[13] 王甜甜, 冯国红, 朱玉杰. 近红外光谱结合化学计量学方法快速检测蓝莓可溶性固形物和维生素 C 含量[J]. 食品工业科技, 2023, 44(16): 297−305. [WANG Tiantian, FENG Guohong, ZHU Yujie. Rapid determination of soluble solids and vitamin C in blueberry by near infrared spectroscopy combined with chemometrics[J]. Science and Technology of Food Industry, 2023, 44(16): 297−305.]

[14] 邓妍, 刘晓凤, 叶萌, 等. 近红外光谱技术在中药研究中的应用缺陷及对策[J]. 成都大学学报(自然科学版), 2023, 42(3): 225−229. [DENG Yan, LIU Xiaofeng, YE Meng, et al. Application defects and countermeasures of near infrared spectroscopy in traditional Chinese medicine research[J]. Journal of Chengdu University (Natural Science Edition), 2023, 42(3): 225−229.]

[15] BERHOW M A, SINGH M, BOWMAN M J, et al. Quantitative NIR determination of isoflavone and saponin content of ground soybeans[J]. Food Chemistry, 2020, 317: 126373.

[16] ZHOU Jiaojiao, WU Xiaoyang, CHEN Zhou, et al. Evaluation of freshness in freshwater fish based on near infrared reflectance spectroscopy and chemometrics[J]. LWT, 2019, 106: 145−150.

[17] XU Kunli, YI Yuwen, DENG Jing, et al. Evaluation of the freshness of rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*) fillets by the NIR, E-nose and SPME-GC-MS[J]. RSC Advances, 2022, 12(19): 11591−11603.

[18] SHIM K, JEONG Y. Freshness evaluation in chub mackerel (*Scomber japonicus*) using near-infrared spectroscopy determination of the cadaverine content[J]. Journal of Food Protection, 2019, 82(5): 768−774.

[19] LI Peng, MA Junchao, ZHONG Nan. Fourier transform near-infrared spectroscopy coupled with variable selection methods for fast determination of salmon fillets storage time[J]. Journal of Molecular Structure, 2022, 1264: 133223.

[20] 任瑞娟, 柴春祥, 鲁晓翔, 等. 近红外光谱技术在南美白对虾鲜度判别中的应用[J]. 食品与发酵工业, 2014, 40(3): 120−124. [REN Ruijuan, CHAI Chunxiang, LU Xiaoxiang, et al. Discrimination freshness of *Penaeus vannamei* Boone by near infrared spectroscopy[J]. Food and Fermentation Industries, 2014, 40(3): 120−124.]

[21] 曹荣, 余弈珂, 赵玲, 等. 南极磷虾(*Euphausia superba*)起捕后蛋白自溶进程及其影响因素[J]. 渔业科学进展, 2018, 39(6): 114−118. [CAO Rong, YU Yike, ZHAO Ling, et al. Study on the protein autolysis process of Antarctic krill (*Euphausia superba*) and its influencing factors[J]. Progress in Fishery Sciences, 2018, 39(6): 114−118.]

[22] BEKHIT A E A, HOLMAN B W B, GITERU S G, et al. Total volatile basic nitrogen (TVB-N) and its role in meat spoilage: A review[J]. Trends in Food Science & Technology, 2021, 109: 280−302.

[23] KUCHA C T, NGADI M O. Rapid assessment of pork freshness using miniaturized NIR spectroscopy[J]. Journal of Food Measurement and Characterization, 2020, 14(2): 1105−1115.

[24] 李树朋, 王佳雅, 王丽. 基于近红外光谱技术的直链淀粉含量定标模型的构建与应用[J]. 粮食与油脂, 2023, 36(12): 139−143. [LI Shupeng, WANG Jiaya, WANG Li. Construction and application of amylose content calibration model based on near infrared spectroscopy[J]. Cereals & Oils, 2023, 36(12): 139−143.]

[25] PRIETO N, ROEHE R, LAVÍN P, et al. Application of near infrared reflectance spectroscopy to predict meat and meat products quality: A review[J]. Meat Science, 2009, 83(2): 175−186.

[26] 邵宏宏, 周秀锦, 相兴伟, 等. 4 种海产品冷藏期间挥发性盐基氮和生物胺含量变化[J]. 食品安全质量检测学报, 2022, 13(9): 2794−2801. [SHAO Honghong, ZHOU Xiujin, XIANG Xingwei, et al. Changes in total volatile basic nitrogen and biogenic amines in 4 kinds of marine products during refrigerated storage[J]. Journal of Food Safety and Quality, 2022, 13(9): 2794−2801.]

[27] 王娅, 张存存, 付玉叶, 等. 融合图谱特征信息的明虾挥发性盐基氮含量无损检测[J]. 食品科学, 2021, 42(2): 283−290. [WANG Ya, ZHANG Cuncun, FU Yuye, et al. Non-destructive detection of volatile basic nitrogen content in prawns (*Fennerope-*

naeus chinensis）based on spectral and image information infusion［J］. Food Science, 2021, 42(2): 283−290.］

［28］ 赵昕, 郑树亮, 牛晓颖, 等. 基于高光谱成像技术和近红外光谱技术的金冠苹果货架期判别及其品质分析[J]. 食品工业科技, 2025, 46(11): 302−312. ［ZHAO Xin, ZHENG Shuliang, NIU Xiaoying, et al. Shelf life identification and quality analysis of Golden Crown apple based on hyperspectral imaging and near infrared spectroscopy［J］. Science and Technology of Food Industry, 2025, 46(11): 302−312.］

［29］ 刘欢, 徐文杰, 刘友明, 等. 鲫鱼新鲜度近红外定量预测模型的建立[J]. 现代食品科技, 2015, 31(7): 173−182. ［LIU Huan, XU Wenjie, LIU Youming, et al. Establishment of quantitative model to predict the freshness of crucian carp（*Carassius* auratus）based on near-infrared spectroscopy［J］. Modern Food Science & Technology, 2015, 31(7): 173−182.］

［30］ KURNIAWATI E, ROHMAN A, TRIYANA K. Analysis of lard in meatball broth using Fourier transform infrared spectroscopy and chemometrics［J］. Meat Science, 2014, 96(1): 94−98.

［31］ 方瑶, 谢天铧, 郭渭, 等. 基于近红外光谱的金鲳鱼新鲜度快速检测技术[J]. 江苏农业学报, 2021, 37(1): 213−218. ［FANG Yao, XIE Tianhua, GUO Wei, et al. Rapid detection technology of pomfret freshness based on near infrared spectroscopy［J］. Jiangsu Journal of Agricultural Sciences, 2021, 37(1): 213−218.］

［32］ AGYEKUM A A, KUTSANEDZIE F Y H, ANNAVARAM V, et al. FT-NIR coupled chemometric methods rapid prediction of K-value in fish［J］. Vibrational Spectroscopy, 2020, 108: 103044.

［33］ YU Haidong, ZUO Simin, XIA Guanghua, et al. Rapid and nondestructive freshness determination of tilapia fillets by a portable near-infrared spectrometer combined with chemometrics methods［J］. Food Analytical Methods, 2020, 13(10): 1918−1928.

［34］ 孟志娟, 周宇芳, 杨会成, 等. 近红外光谱技术快速检测带鱼新鲜度的研究[J]. 食品科技, 2013, 38(12): 294−298. ［MENG Zhijuan, ZHOU Yufang, YANG Huicheng, et al. Freshness evaluation of *Trichiurus lepturus* based on near-infrared spectroscopy［J］. Food Science and Technology, 2013, 38(12): 294−298.］

［35］ 邢姣姣, 徐扬, 高昕, 等. 凡纳滨对虾高鲜度期评定方法的建立[J]. 食品安全质量检测学报, 2022, 13(21): 6808−6814. ［XING Jiaojiao, XU Yang, GAO Xin, et al. Establishment of evaluation methods of high freshness of *Litopenaeus vannamei* period［J］. Journal of Food Safety & Quality, 2022, 13(21): 6808−6814.］