

基于高光谱技术的霉变稻谷脂肪酸含量无损检测

文 韬^{1,2}, 洪添胜^{2,3*}, 李立君¹, 郭 鑫⁴, 赵 兵¹, 张仟仟¹, 刘 付¹

(1. 中南林业科技大学机电工程学院, 长沙 410004; 2. 华南农业大学工程学院南方农业机械与装备关键技术教育部重点实验室, 广州 510642; 3. 国家柑橘产业技术体系机械研究室, 广州 510642; 4. 中南林业科技大学理学院, 长沙 410004)

摘 要: 脂肪酸含量是表征稻谷霉变信息的重要指标。为了解决传统化学分析法测定稻谷脂肪酸含量有损、费时、低效等问题, 该文研究应用高光谱技术实施霉变稻谷脂肪酸含量无损检测的方法。研究选取人工制备的不同霉变时期的稻谷样本作为研究对象, 利用高光谱仪结合理化试验方法测定其相应的光谱信息和脂肪酸含量, 运用移动窗口平滑法(savitzky-golay, SG)和一阶微分(first derivation, FD)对光谱数据进行预处理, 采用连续投影算法(successive projections algorithm, SPA)提取反映稻谷脂肪酸含量变化的光谱特征波段, 应用回归分析法建立基于特征波段光谱反射值的稻谷脂肪酸含量预测模型, 对比分析不同光谱预处理方法的模型预测效果。研究结果显示, 原始光谱数据通过 SG 平滑和一阶微分处理后, 分别经 SPA 方法优选出了 14 和 10 个光谱特征波段; 采用 SG-SPA-MLR(multivariable linear regression)方法构建的模型质量和稻谷脂肪酸含量预测效果均优于 FD-SPA-MLR 模型, 校正时其内部交叉验证的相关系数 R_{CV} 和均方根误差 RMSECV 分别为 0.9419、11.9646 mg/(100 g); 预测时其外部验证的相关系数 R_p 和均方根误差 RMSEP 分别为 0.9366、12.3550 mg/(100 g), 模型对不同霉变时期的稻谷脂肪酸含量均具有较强的预测能力。研究表明, 利用高光谱技术对稻谷脂肪酸含量实施无损检测具有可行性, 可为将来快速检测稻谷霉变提供参考依据。

关键词: 脂肪酸; 无损检测; 模型; 霉变稻谷; 高光谱; 特征波段

doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.2015.18.032

中图分类号: S123; S51

文献标志码: A

文章编号: 1002-6819(2015)-18-0233-07

文 韬, 洪添胜, 李立君, 郭 鑫, 赵 兵, 张仟仟, 刘 付. 基于高光谱技术的霉变稻谷脂肪酸含量无损检测[J]. 农业工程学报, 2015, 31(18): 233—239. doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.2015.18.032 http://www.tcsae.org

Wen Tao, Hong Tiansheng, Li Lijun, Guo Xin, Zhao Bing, Zhang Qianqian, Liu Fu. Non-destructive detection of fatty acid content in mould paddy based on high-spectral technology[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2015, 31(18): 233—239. (in Chinese with English abstract)

doi: 10.11975/j.issn.1002-6819.2015.18.032 http://www.tcsae.org

0 引 言

稻谷是中国最主要的粮食作物之一, 其主产区和储备区大部分集中在长江以南^[1]。该区域气候具有终年高湿, 冬季短, 夏季长且酷暑等特点, 为霉菌繁殖提供了适宜的生长条件^[2-3]。稻谷中富含淀粉、蛋白质、碳水化合物等成分, 极易受霉菌污染造成霉烂变质, 产生对人体有毒害的物质^[4-5]。霉变的稻谷一旦进入流通市场, 最终将对人类健康产生严重危害。因此, 如何有效地检测稻谷是否产生霉变成为保障粮食安全的基础性工作。

霉菌侵染稻谷的劣变过程通常划分为 3 个阶段, 分

别是霉变初期、霉变中期、霉变后期。在霉变初期, 谷粒出现轻度变色、发潮, 肉眼很难直接观察; 在霉变中期, 谷粒胚部开始显现菌落, 并出现较为明显的霉斑和霉味; 在霉变后期, 霉变稻谷区出现严重的霉味、酸味和异常, 谷粒成团结块^[6-8]。目前, 稻谷霉变检测主要依靠人工定性分析, 通常是检测人员根据上述提及的稻谷色泽、气味等感官指标变异情况进行判别, 检测效果的好坏在很大程度上取决于检测者的知识经验以及所选用统计工具的指示性, 不可避免地会产生人为误差。

根据稻谷霉变过程中表征的症状, 生化研究学者对其变化过程开展了系统研究, 研究结果表明稻谷霉变过程实质上就是微生物以稻谷为营养基质, 进行消化、吸收和利用的物质代谢和能量代谢的生物化学反应, 其中脂肪酸是一种比较稳定的代谢产物, 容易在霉变的稻谷中积累, 从而导致稻谷中脂肪值增高^[9-11]。因此, 脂肪酸含量的变化可以较好地表征稻谷霉变的情况。

现有的脂肪酸值测定主要采取传统的化学分析方法, 该方法在分析稻谷脂肪酸含量时需要添加化学试剂对稻谷本身实施破坏性检测, 处理周期较长, 易造成环境污染, 难以达到快速检测的要求。高光谱技术可以获取目标的光谱和图像信息, 常用于分析目标中感兴趣区域的物质结构及化学组成, 已在农作物生长监测和农产

收稿日期: 2015-06-19 修订日期: 2015-08-03

基金项目: 国家自然科学基金(31401281); 湖南省自然科学基金(14JJ3115); 湖南省大学生研究性学习和创新性实验计划项目(湘教通[2014]248号); 湖南省高校科技创新团队支持计划(2014207)

作者简介: 文韬, 男, 湖南长沙人, 博士, 副教授, 主要从事农业工程、机电一体化和信息技术应用研究。长沙 中南林业科技大学机电工程学院 410004。Email: wt207@sina.com

*通信作者: 洪添胜, 男, 广东梅县人, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事农业工程、机电一体化和信息技术应用研究。广州 华南农业大学工程学院, 南方农业机械与装备关键技术教育部重点实验室, 国家柑橘产业技术体系机械研究室, 510642。Email: tshong@scau.edu.cn

中国农业工程学会高级会员: 洪添胜(E041200036S)

品品质检测等方面获得了广泛应用^[12-20]。目前,有学者将光谱技术应用于稻谷品质的检测研究并取得了初步的进展。张强等^[21]应用近红外光谱结合化学分析方法测定储藏稻谷中黄曲霉毒素 B₁ 含量,建立稻谷黄曲霉毒素 B₁ 支持向量机模型,模型决定系数达 0.913,但该方法运算比较复杂,给在线检测带来困难。本研究选取稻谷霉变生物化学反应产生的代谢产物脂肪酸为研究对象,通过分时段测定不同霉变时期稻谷的光谱信息和相应的脂肪酸值,建立基于特征波段光谱反射值的稻谷脂肪酸含量预测模型,以期对稻谷霉变检测提供一种无损检测方法。

1 材料与方法

1.1 稻谷样本制备

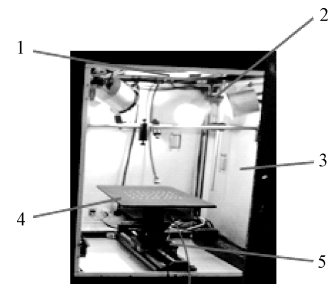
导致稻谷发生霉变的主要霉菌包括曲霉菌、青霉菌、根霉菌和镰刀霉菌等,上述霉菌最适宜的繁殖温度为 25~30℃,相对湿度为 80%~90%^[22]。本研究所选用的稻谷样本为 C 两优 34156 晚稻,含水率为 14.2%,由湖南农业大学提供。首先,选取完整、无霉变、未发芽的稻谷,分别装入 200 个样品皿中进行单独编号,每个样品皿中装 100 g,其中 50 个样品皿按照粮食储藏要求(温度 10℃,相对湿度 15%)放入恒温恒湿箱 A 中存储;然后,将剩余的 150 个样品皿根据稻谷霉菌适宜滋生的条件(温度 30℃,相对湿度 90%)放置于恒温恒湿箱 B 中培育^[7]。考虑到稻谷霉变程度对其脂肪酸含量的动态影响,选取的稻谷样本应具有代表性和普适性,霉变稻谷的制备过程按照稻谷储藏过程中理化特性和感官指标随时间的变异情况,人工将培育阶段划分成 3 个周期,每个周期约为 10 d^[23],共得到不同霉变时期的稻谷样本各 50 份。

1.2 稻谷脂肪酸含量测定

为了尽量减少稻谷脂肪酸的损失,制备的样本在完成光谱数据采集后立即按照 GB/T 15684-1995《谷物制品脂肪酸值测定法》测定稻谷脂肪酸含量^[24],并将其作为建模的标准参考值。首先,称取 100 g 稻谷,放入高速组织捣碎机内捣碎,将捣碎粉末通过 CQ16 筛筛选,称取捣碎粉末 10 g,准确到 0.01 g,放入 250 mL 三角锥瓶加入 50 mL 无水乙醇混合,置于电动摇床振荡 10 min,静置 1~2 min 后用滤纸过滤;然后,采用移液管吸取 25 mL 滤液,加入 50 mL 蒸馏水和酚酞指示剂 3~4 滴,用氢氧化钾标准溶液滴定,至出现微红色 30 s 内不退色为终点,记下所消耗的体积;同步用 25 mL 无水乙醇代替 25 mL 滤液进行空白试验,记下所消耗的体积。最后,再将上述滴定数据代入标准指定公式计算脂肪酸含量。同一试样取 2 个平行样测定,以其算术平均值作为测定结果,2 个平行样的测定值相差不得大于平均值的 2%。

1.3 光谱信息校正及数据采集

本研究使用 Hypersis 农产品高光谱仪(Hypersis-VNIR-PFH,卓立汉光,北京)采集稻谷光谱信息,该系统内部结构如图 1 所示。



1.高光谱相机 2.光源 3.暗箱 4.载物台 5.线性导轨
1. High-spectral camera 2. Light source 3. Dark chamber 4. Work bench 5. Linear rail

图 1 高光谱信息采集系统

Fig.1 Hyper-spectral information acquisition system

采集样本高光谱数据前,首先对仪器进行校准,通过对比预试验,设置理想曝光时间 20 ms,移动平台运行速度 14.6 mm/s,扫描距离 150 mm,光谱范围 380~1 000 nm,光谱分辨率 2.8nm。将稻谷样本置于反射率接近于 0 的黑色底板上,平铺固定后置于载物台,在电机的驱动下,样本垂直于镜头纵向移动。高光谱相机同时获得样本在各波长处的光谱信息和图像信息,每个稻谷采集得到 256 个波段的图像。由于光源的强度分布不均及暗电流噪声的存在,每次采样均需利用全黑、全白标定图像对扫描的稻谷图像进行校正,减少光源产生的噪声,如式(1)^[25]:

$$I_a = (I_o - I_b) / (I_w - I_b) \quad (1)$$

式中: I_a 为校正后的稻谷扫描图像, I_o 为校正前的稻谷扫描图像, I_w 为全白标定图像, I_b 为全黑标定图像。对校正后的光谱图像,利用遥感图像处理平台(environment for visualizing images, ENVI)选取载物台感兴趣区域(稻谷样本)每个像素点的光谱反射率平均值,以此作为观测稻谷的光谱反射值。研究中光谱数据处理与分析使用 Unscrambler10.3 和 Matlab 2008a 软件实现。

1.4 模型建立与评价

研究稻谷反射光谱与其脂肪酸含量之间的关系属于非确定性问题,研究该问题应用回归分析构造变量间数理统计模型是一种有效的分析方法^[26]。由于光谱曲线具有极高的光谱分辨率,导致数据维数较高,如果用全光谱波段作为输入变量建立回归模型,模型将由于输入变量的共线性问题,产生较多冗余数据,耗费大量的建模时间。

本研究运用光谱技术建立稻谷脂肪酸含量预测模型过程如下:①在稻谷样本制备的 4 个区段随机选取共计 45 个样本作为模型预测集,剩余 155 个样本构成校正集样本用于模型建立;②对校正集和预测集样本的光谱数据进行预处理,增强光谱特征;③采用连续投影算法(successive projections algorithm, SPA)^[27]提取光谱数据的特征波段,消除原始光谱矩阵中冗余的信息,实现光谱数据压缩;④通过相关性分析,建立光谱特征波段与脂肪酸含量的多元线性回归模型(multivariable linear regression, MLR);⑤运用校正集建立的模型对预测集样本进行预测验证。模型建立过程中,采用留一法进行

校正集交叉验证^[28]，使用相关系数 R_p 和预测均方根误差 (RMSEP) 等指标来评价模型质量，其相应的计算公式如 (2) 和 (3)。

$$R_p = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{Ti} - y_{Pi})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{Ti} - \bar{y}_a)^2}} \quad (2)$$

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{Ti} - y_{Pi})^2}{n}} \quad (3)$$

式中： n 为样本数； y_{Ti} 为样本实测值，mg/(100 g)； y_{Pi} 为样本预测值，mg/(100 g)； \bar{y}_a 为样本实测平均值，mg/(100 g)。

2 结果与分析

2.1 制备样本脂肪酸含量分布

本研究制备的 200 份稻谷样本分布于正常、霉变初期、中期和后期 4 个阶段。通过理化试验，测得不同霉变时期稻谷脂肪酸含量分布结果如表 1 所示，4 个不同时期的稻谷脂肪酸含量具有不同梯度分布，脂肪酸含量在稻谷霉变的初期和中期上升较快，到达后期变化趋于平缓，符合文献提出的研究结论^[29]；上述结果说明试验制备的样本具有一定代表性，脂肪酸含量可作为检测稻谷霉变的依据。

表 1 不同霉变时期稻谷脂肪酸质量分数分布

Table 1 Paddy fatty acid content distribution under different moldy periods

稻谷类型 Paddy type	样本数 Sample number	平均值 Mean/ (mg·(100 g) ⁻¹)	最小值 Minimum/ (mg·(100 g) ⁻¹)	最大值 Maximum/ (mg·(100 g) ⁻¹)
正常	50	21.98	18.55	24.40
霉变初期	50	54.80	27.03	80.90
霉变中期	50	104.31	84.44	127.26
霉变后期	50	110.35	101.09	124.88

所建模型的质量很大程度取决于样本标准值的检测精度和覆盖范围，本研究选取的稻谷样本校正集和预测集脂肪酸含量统计结果如表 2 所示，由表 2 中统计结果可知，预测集测定的脂肪酸含量变化范围介于建模集的数值变化范围内，为后续建模的可靠性奠定了基础。

表 2 稻谷样本校正集与预测集脂肪酸质量分数分析

Table 2 Paddy fatty acid content analysis between calibration sets and predicted sets

样本类型 Sample classification	样本数 Sample number	均值 Mean/ (mg·(100 g) ⁻¹)	标准差 Standard deviation/ (mg·(100 g) ⁻¹)	变化范围 Variable range/ (mg·(100 g) ⁻¹)
校正集	155	77.81	35.71	18.55~127.26
预测集	45	78.02	35.60	18.74~116.55

2.2 稻谷原始光谱预处理特征分析

制备的 4 个不同霉变时期稻谷平均光谱曲线经过 Savitzky-Golay (SG) 平滑处理^[30]的结果如图 2 所示。从获取的光谱曲线可知，不同时期稻谷的光谱曲线总体变化规律具有相似性；正常和霉变稻谷光谱反射率在 420 nm 附近出现了不同程度的低谷；霉变稻谷在 450~650 nm 波段相对于正常稻谷光谱反射率上升的陡坡效应

被削弱；700~850 nm 波段出现高平反射区，正常和霉变稻谷基本无差异；930 nm 附近正常和霉变稻谷反射率出现吸收波谷。

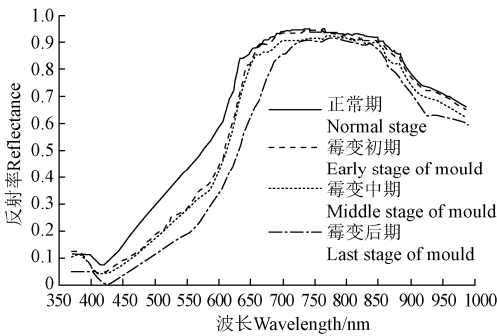


图 2 稻谷原始光谱平滑处理

Fig.2 Paddy original spectra by Savitzky-Golay smoothing

光谱曲线的一阶微分能增强不同类数据间的差异性^[31]。4 个不同时期的稻谷光谱一阶微分如图 3 所示，不同时期样本采集的光谱反射值差异集中在 380~430、580~700 和 840~950 nm 3 个区间。根据上述原始光谱和一阶微分曲线的特点，初步确定波段 380~430、580~700 和 840~950 nm 为检测霉变稻谷脂肪酸含量变化的特征区间。

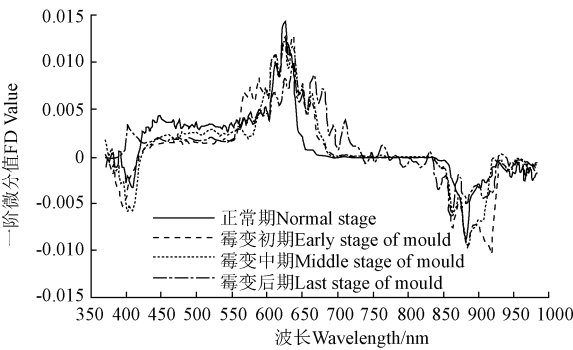


图 3 稻谷原始光谱一阶微分

Fig.3 Paddy original spectra by the first derivation

2.3 光谱特征波段的选取

利用连续投影算法 (SPA) 对稻谷的校正模型进行光谱特征波段选取，指定波段数 N 范围为 2~30^[32]，根据校正集的内部交叉验证均方根误差 RMSECV 值确定最佳的光谱特征波段个数。

稻谷校正集样本的原始光谱经过 SG 数据平滑，从 256 个波段中共优选出 14 个特征波段，分别是 378、407、431、441、491、564、583、646、665、885、897、907、948 和 987 nm，如图 4 所示。

稻谷校正集样本的原始光谱经过一阶微分，从 256 个波段中共优选出 10 个特征波段，分别是 394、426、580、646、853、875、933、940、962 和 974 nm，如图 5 所示。

上述研究结果显示，利用 SPA 算法选择光谱波段实现了光谱数据的压缩，降低了模型的复杂度。从优选的光谱特征波段可知，大部分特征波段分布基本与前续光谱预处理特征分析结果一致。

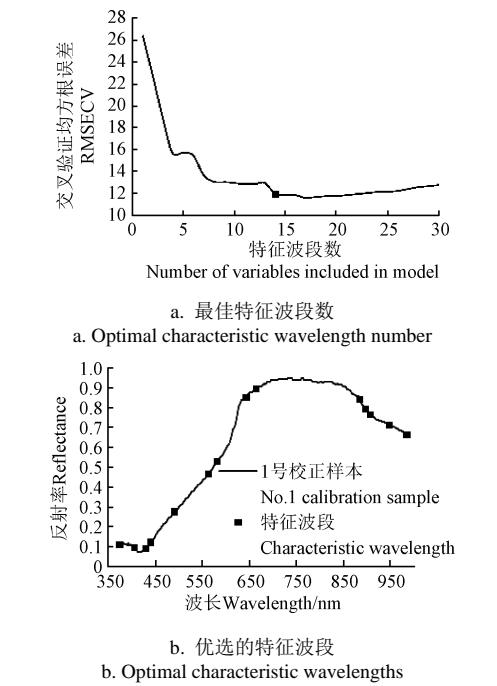


图 4 稻谷平滑光谱模型特征波段数确定和优选
Fig.4 Optimal selection of characteristic wavelengths and numbers for paddy SG smoothing model

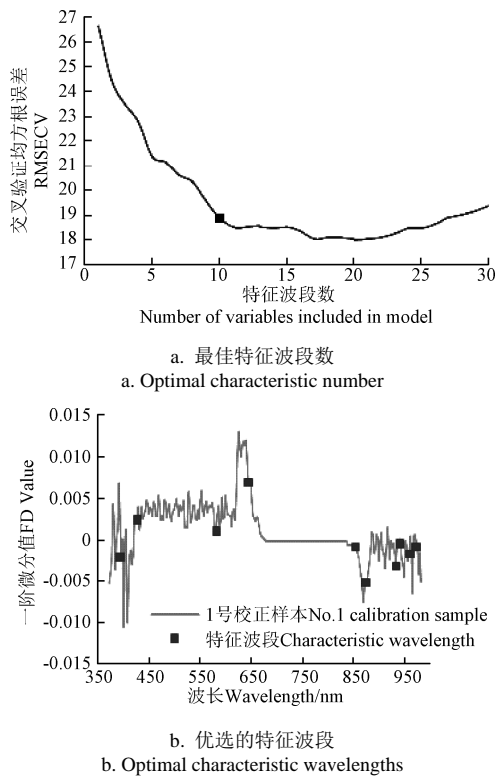


图 5 稻谷一阶微分光谱模型特征波段数确定和优选
Fig.5 Optimal selection of characteristic wavelengths and numbers for paddy FD model

2.4 稻谷脂肪酸含量预测模型的建立与验证

测量的 155 份稻谷校正集样本全波段光谱, 分别经过 SG 平滑和一阶微分, 按照 SPA 算法优选出特征波段对应的光谱反射值作为自变量, 以理化试验测定的脂肪酸含量作为因变量, 建立 SPA-MLR 模型, 利用预测集的

45 份稻谷样本检验建立模型预测效果, 不同光谱预处理方法建立的模型检验结果和预测效果如表 3 所示。

表 3 不同预处理光谱 SPA-MLR 模型预测的稻谷脂肪酸含量
Table 3 Paddy fatty acid predicted value for SPA-MLR model under different preprocessing methods

预处理方法 Preprocessing method	变量数 Variable number	校正集 calibration set		预测集 Prediction set	
		相关系数 R_{CV}	均方根误差 RMSECV ($\text{mg} \cdot (100 \text{ g})^{-1}$)	相关系数 R_p	均方根误差 RMSEP ($\text{mg} \cdot (100 \text{ g})^{-1}$)
SG 平滑 SG smoothing	14	0.9419	11.9646	0.9366	12.3550
一阶微分 FD	10	0.8486	18.8618	0.7579	23.0796

表 3 的结果表明,SG 平滑与一阶微分预处理方法相比,构建的模型质量和稻谷脂肪酸含量预测效果均较好。采用 SG 平滑光谱预处理后建立的 SPA-MLR 模型,校正时其内部交叉验证的相关系数 R_{CV} 和均方根误差 RMSECV 分别为 0.9419、11.9646 mg/(100 g); 预测时模型预测值与实测值之间离散分布如图 6 所示,其外部验证的相关系数 R_p 和均方根误差 RMSEP 分别为 0.9366、12.3550 mg/(100 g),达到了对稻谷脂肪酸含量较好的预测性能。

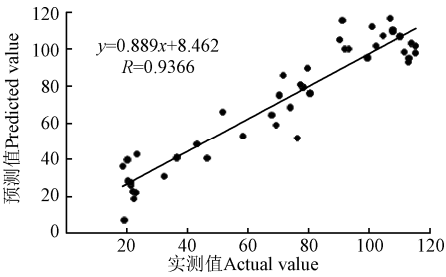


图 6 SG-SPA-MLR 模型预测值与实测值相关性
Fig.6 Correlation analysis between predicted value and actual value for SG-SPA-MLR model

3 结 论

本文基于不同霉变时期的稻谷光谱试验数据,分析了正常、霉变初期、霉变中期和霉变后期稻谷的光谱特性及其脂肪酸含量的变化规律,研究了稻谷特征波段光谱反射值预测其脂肪酸含量的无损检测方法,并通过试验进行了验证,得到以下结论:

1) 试验制备的不同霉变时期的稻谷脂肪酸含量具有不同梯度分布。正常、霉变初期、霉变中期和霉变后期稻谷脂肪酸质量分数分别在 18.55~24.40、27.03~80.90、84.44~127.26 和 101.09~124.88 mg/(100 g) 范围内变化,脂肪酸含量在稻谷霉变的初期和中期上升较快,到达后期变化趋于平缓。脂肪酸含量可作为检测稻谷霉变的依据。

2) 利用连续投影算法 (successive projections algorithm, SPA) 进行光谱特征波段选择,最终从 256 个波段中,光谱数据经 SG 平滑处理后优选出 14 个光谱波段,光谱数据经一阶微分 (first derivation, FD) 处理后优选出 10 个光谱波段,极小化光谱变量之间的共线性影响,实现了光谱数据的压缩,降低了模型的复杂度。

3) 分别建立的 SG-SPA-MLR 模型和 FD-SPA-MLR 模型建模质量及预测效果差异明显。采用 SG-SPA-MLR

方法构建的模型质量和稻谷脂肪酸含量预测效果均优于 FD-SPA-MLR 模型, 校正时其内部交叉验证的相关系数 R_{CV} 和均方根误差 RMSECV 分别为 0.9419、11.9646 mg/(100 g); 预测时其外部验证的相关系数 R_p 和均方根误差 RMSEP 分别为 0.9366、12.3550 mg/(100 g), 模型对不同霉变时期的稻谷脂肪酸含量均具有较强的预测能力。

综上所述, 应用高光谱技术, 利用连续投影算法 (successive projections algorithm, SPA) 结合多元线性回归方法 (multivariable linear regression, MLR) 建模, 可实现对稻谷脂肪酸含量无损检测, 为将来快速检测稻谷霉变提供参考依据。

【参 考 文 献】

- [1] 吴存荣, 唐怀建, 王艳艳. 我国粮食储藏标准体系的现状与展望[J]. 中国粮油学报, 2010, 25(11): 124—128.
Wu Cunrong, Tang Huaijian, Wang Yanyan. Development and prospect of Chinese grain storage standard system[J]. Journal of the Chinese cereals and oils association, 2010, 25(11): 124—128. (in Chinese with English abstract)
- [2] 成岩萍. 浅析粮食微生物与粮食储藏的关系[J]. 粮油食品科技, 2005, 13(1): 28—29.
Cheng Yanping. On the relationship between grain microorganism and grain storage[J]. Science and technology of cereals, oils and foods, 2005, 13(1): 28—29. (in Chinese with English abstract)
- [3] 周显青, 张玉荣. 储藏稻谷品质指标的变化及其差异性[J]. 农业工程学报, 2008, 24(12): 238—242.
Zhou Xianqing, Zhang Yurong. Changes and differential analysis of the quality indexes of stored paddy[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2008, 24(12): 238—242. (in Chinese with English abstract)
- [4] 包清彬, 猪谷富雄. 储藏条件对糙米理化特性影响的研究[J]. 农业工程学报, 2003, 19(6): 25—27.
Bao Qinbing, Tomio ITANI. Influence of storage conditions on physicochemical characteristic of brown rice[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2003, 19(6): 25—27. (in Chinese with English abstract)
- [5] 苏永腾, 刘强. 谷物霉菌毒素的危害及其控制措施的研究[J]. 中国食物与营养, 2010(4): 9—12.
Su Yongteng, Liu Qiang. Hazards and control measures of grain mycotoxin[J]. Food and Nutrition in China, 2010(4): 9—12. (in Chinese with English abstract)
- [6] 周建新. 论粮食霉变中的生物化学[J]. 粮食储藏, 2004, 32(1): 9—12.
Zhou Jianxin. The biochemistry during grain mildewing[J]. Grain storage, 2004, 32(1): 9—12. (in Chinese with English abstract)
- [7] 邹小波, 赵杰文. 电子鼻快速检测谷物霉变的研究[J]. 农业工程学报, 2004, 20(4): 121—124.
Zou Xiaobo, Zhao Jiewen. Rapid identification of moldy corn by electronic nose[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2004, 20(4): 121—124. (in Chinese with English abstract)
- [8] 惠国华, 倪戡. 基于信噪比分析技术的谷物霉变快速检测方法[J]. 农业工程学报, 2011, 27(3): 336—340.
Hui Guohua, Ni Yu. Investigation of moldy corn fast detection based on signal-to-noise ratio spectrum analysis technique[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2011, 27(3): 336—340. (in Chinese with English abstract)
- [9] Aibara S, Ismail I A. Changes in rice bran lipids and fatty acids during storage[J]. Agriculture Biology Chemistry, 1986, 50(3): 665—673.
- [10] 蔡静平, 等. 粮油微生物学[M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2002.
- [11] 邵龙, 邵怀宗, 彭启琼. 稻谷脂肪自动酸滴定仪设计与实现[J]. 电子测量与仪器学报, 2008, 22(6): 97—102.
Shao Long, Shao Huaizong, Peng Qicong. Design and realization of rice fatty acid automatic titrator[J]. Journal of electronic measurement and instrument, 2008, 22(6): 97—102. (in Chinese with English abstract)
- [12] 宋海燕, 岑海燕, 应霞芳, 等. 基于光谱技术的禽畜污水化学需氧量快速测定方法的研究[J]. 农业工程学报, 2006, 22(6): 148—151.
Song Haiyan, Cen Haiyan, Ying Xiafang, et al. Approach to rapid detection of chemical oxygen demand in livestock waste water based on spectroscopy technology[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2006, 22(6): 148—151. (in Chinese with English abstract)
- [13] 洪添胜, 乔军, Ning Wang, 等. 基于高光谱图像技术的雪花梨品质无损检测[J]. 农业工程学报, 2007, 23(2): 151—155.
Hong Tiansheng, Qiao Jun, Ning Wang, et al. Non-destructive inspection of Chinese pear quality based on hyperspectral imaging technique[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2007, 23(2): 151—155. (in Chinese with English abstract)
- [14] He Yong, Huang Min, Song Haiyan, et al. Prediction of soil macronutrients content using near-infrared spectroscopy[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2007, 58(2): 144—153.
- [15] 李晓丽, 唐月明, 何勇, 等. 基于可见/近红外光谱的水稻品种快速鉴别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(3): 578—581.
Li Xiaoli, Tang Yueming, He Yong, et al. Discrimination of varieties of paddy based on Vis/NIR spectroscopy combined

- with chemometrics[J]. Spectroscopy and spectral analysis, 2008, 28(3): 578—581. (in Chinese with English abstract)
- [16] Liu Fei, Zhang Fan, Jin Zonglai, et al. Determination of acetolactate synthase activity and protein content of oilseed rape(*Brassica napus* L.) leaves using visible/near-infrared spectroscopy[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2008, 629(1/2): 56—65.
- [17] 周子立, 张瑜, 何勇, 等. 基于近红外光谱技术的大米品种快速鉴别方法[J]. 农业工程学报, 2009, 25(8): 131—135.
Zhou Zili, Zhang Yu, He Yong, et al. Method for rapid discrimination of varieties of rice using visible NIR spectroscopy[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(Transactions of the CSAE)*, 2009, 25(8): 131—135. (in Chinese with English abstract)
- [18] Dissing B S, Nielsen M E, Ersboll B K, et al. Multispectral imaging for determination of astaxanthin concentration in salmonids[J]. *PLoS ONE*, 2011, 6(5): 19—32.
- [19] 梅慧兰, 邓小玲, 洪添胜, 等. 柑橘黄龙病高光谱早期鉴别及病情分级[J]. 农业工程学报, 2014, 30(9): 140—147.
Mei Huilan, Deng Xiaoling, Hong Tiansheng, et al. Early detection and grading of citrus huanglongbing using hyperspectral imaging technique[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(Transactions of the CSAE)*, 2014, 30(9): 140—147. (in Chinese with English abstract)
- [20] 邹小波, 张小磊, 石吉勇, 等. 基于高光谱图像的黄瓜叶片叶绿素含量分布检测[J]. 农业工程学报, 2014, 30(13): 169—175.
Zou Xiaobo, Zhang Xiaolei, Shi Jiyong, et al. Detection of chlorophyll content distribution in cucumber leaves based on hyperspectral imaging[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(Transactions of the CSAE)*, 2014, 30(13): 169—175. (in Chinese with English abstract)
- [21] 张强, 刘成海, 孙井坤, 等. 基于支持向量机稻谷黄曲霉毒素 B_1 近红外无损检测[J]. 东北农业大学学报, 2015, 46(5): 84—88.
Zhang Qiang, Liu Chenghai, Sun Jingkun, et al. Near-infrared spectroscopy nondestructive determination of aflatoxin B_1 in paddy rice based on support vector machine regression[J]. *Journal of Northeast Agricultural University*, 2015, 46(5): 84—88. (in Chinese with English abstract)
- [22] 尹青岗, 王锋, 陈井旺. 粮食中真菌毒素污染现状及控制[J]. 粮食与油脂, 2009(4): 31—34.
Yin Qinggang, Wang Feng, Chen Jingwang. Status of contaminating controlling measures of mycotoxins in grain[J]. *Cereals & Oils*, 2009(4): 31—34. (in Chinese with English abstract)
- [23] 张瑛, 吴先山, 吴敬德, 等. 稻谷储藏过程中理化特性变化的研究[J]. 中国粮油学报, 2003, 29(5): 565—566.
Zhang Ying, Wu Xianshan, Wu Jingde, et al. Study on physical and chemical characters in rice storage[J]. *Journal of the Chinese cereals and oils association*, 2003, 18(6): 565—566. (in Chinese with English abstract)
- [24] GB/T 15684-1995, 谷物制品脂肪酸值测定法[S].
- [25] 陈全胜, 赵杰文, 蔡健荣, 等. 利用高光谱图像技术评判茶叶的质量等级[J]. 光学学报, 2008, 28(4): 669—674.
Chen Quansheng, Zhao Jiewen, Cai Jianrong, et al. Estimation of tea quality level using hyperspectral imaging technology[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, 28(4): 669—674. (in Chinese with English abstract)
- [26] 赵杰文, 林颢. 食品、农产品检测中的数据处理和分析方法[M]. 北京: 科学出版社, 2012: 78—139.
- [27] Moreira E D T, Pontes M J C, Galvão R K H, et al. Nearinfrared reflectance spectrometry classification of cigarettes using the successive projections algorithm for variable selection [J]. *Talanta*, 2009, 79: 1260—1264.
- [28] Galvão R K H, Araujo M C U, Silva E C, et al. Crossvalidation for the selection of spectral variables using the successive projections algorithm[J]. *Braz. Chem. Soc*, 2007, 18(8): 1580—1584.
- [29] 杨晓蓉, 周建新, 姚明兰, 等. 不同储藏条件下稻谷脂肪酸值变化和霉变相关性研究[J]. 粮食储藏, 2006, 35(5): 49—52.
Yang Xiaorong, Zhou Jianxin, Yao Minglan, et al. Study on a correlation between the fatty acid value change and mould of paddy in different storage conditions[J]. *Grain Storage*, 2006, 35(5): 49—52. (in Chinese with English abstract)
- [30] Bauriegel E, Giebel A, Geyer M, et al. Early detection of *Fusarium* infection in wheat using hyper-spectral imaging[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2011, 75(2): 304—312.
- [31] 李震, 洪添胜, 倪慧娜, 等. 用高光谱成像技术检测柑橘红蜘蛛为害叶片的色素含量[J]. 农业工程学报, 2014, 30(6): 124—130.
Li Zhen, Hong Tiansheng, Ni Huina, et al. Pigment content measurement for citrus red mite infected leaf using hyper-spectral imaging technology[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE)*, 2014, 30(6): 124—130. (in Chinese with English abstract)
- [32] 高洪智, 卢启鹏, 丁海泉, 等. 基于连续投影算法的土壤总氮近红外特征波长的选取[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(11): 2951—2954.
Gao Hongzhi, Lu Qipeng, Ding Haiquan, et al. Choice of characteristic near-infrared wavelengths for soil total nitrogen based on successive projection algorithm[J]. *Spectroscopy and spectral analysis*, 2009, 29(11): 2951—2954. (in Chinese with English abstract)

Non-destructive detection of fatty acid content in mould paddy based on high-spectral technology

Wen Tao^{1,2}, Hong Tiansheng^{2,3*}, Li Lijun¹, Guo Xin⁴, Zhao Bing¹, Zhang Qianqian¹, Liu Fu¹

(1. School of Mechanical and Electrical Engineering, Central South University of Forestry and Technology, Changsha 410004, China;
2. Key Laboratory of Key Technology for South Agricultural Machinery and Equipment, Ministry of Education, Engineering College of South China Agricultural University, Guangzhou 510642, China; 3. Division of Citrus Machinery, China Agriculture Research System, Guangzhou 510642, China; 4. School of Science, Central South University of Forestry and Technology, Changsha 410004, China)

Abstract: Rice is rich in starches, proteins and carbohydrates, and when it is polluted by fungus, it is easy to become decayed and hence produces some poisonous substances for human bodies. Once moldy rice goes into the circulation market, human health will suffer from serious hazard. Therefore, how to effectively detect fungus in rice has become a fundamental work of guarantying food security. At present, the detection of moldy rice mainly depends on artificial qualitative analysis, which means that detectors discriminate fungus in rice according to some physical indices such as color and aroma. The detection precision of the mentioned methods mostly depends on the knowledge or experience of operators and the indication of statistic tools chosen by operators, which will bring out artificial errors inevitably. The fatty acid content is an important indicator of fungus information in rice. In order to solve these problems presented in the traditional way such as destruction, time consuming and low efficiency, a non-destructive detecting method for fatty acid content in rice using high-spectral technologies was proposed in this paper. In the research, rice samples for 4 different storage periods by means of artificial cultivating were selected as study objects, and spectral information and fatty acid content were detected through high-spectral measurement and physical and chemical experiment. The spectral data obtained were preprocessed using the Savitzky-Golay (SG) smoothing and the first derivation (FD) method, and the characteristic spectrum that indicated the variations of fatty acid content was selected by the successive projections algorithm (SPA). The prediction model of fatty acid content in rice based on spectral reflectance was built by the regression analysis method, and the prediction effect was evaluated by comparing different preprocessed methods. Experimental results indicated that 14 and 10 spectral characteristic wavelengths, which were from the original spectral data after the SG smoothing and the FD preprocessing, were optimized and selected according to the SPA. The quality of modeling and prediction effect for fatty acid content in rice showed that the SG-SPA-MLR (multivariable linear regression) method was superior to the FD-SPA-MLR method. The correlation coefficient of cross-validation (R_{cv}) and the root mean square error of cross-validation (RMSECV) for the SG-SPA-MLR model were 0.9419 and 11.9646 mg/(100 g) respectively at the model correction stage, while the correlation coefficient of prediction (R_p) and the root mean square error of prediction (RMSEP) were 0.9366 and 12.3550 mg/(100 g) respectively at the stage of the model prediction. The optimal model showed a good prediction ability in fatty acid content of rice during different storage periods. In summary, the results have indicated that it is feasible to non-destructively predict fatty acid content variation in rice applying high-spectral technologies, and can be used as the reference for the rapid detection of fungus stress in rice in the future.

Key words: fatty acid; nondestructive examination; models; mould paddy; high-spectra; characteristic wavelengths