

近红外光谱结合导数方法在烟叶等级一致性检测中的应用

胡涌¹ 王宇恒² 刘伟¹ 黎启祥¹ 李军会^{2*}

(1. 贵州烟叶复烤有限责任公司, 贵阳 550005;

2. 中国农业大学 信息与电气工程学院/现代精细农业系统集成研究教育部重点实验室, 北京 100083)

摘要 针对目前实际生产应用中, 烟叶等级一致性检测流程过度依赖传统的外观评价方法和化学检测方法而导致的成本过高, 效率低下等问题, 采用导数等现代光谱信号处理技术和变异系数等统计指标, 对 2016 年度贵州省内共计 78 组烟叶样品的近红外光谱和烟碱、总糖等化学值数据进行分析与研究。结果表明: 采用全谱段均值进行变异系数计算, 以及一阶导数处理后, 光谱变异系数与尼古丁值变异系数的相关系数达到 86.60%, 与总糖值变异系数的相关系数达到 86.12%, 满足实际生产应用中对烟叶等级一致性检测的准确度要求, 能够实现直接应用近红外光谱进行烟叶等级一致性检测, 同时降低烟叶等级一致性检测的人力物力成本, 达到绿色快速无损检测的目的。

关键词 烟叶; 等级; 近红外光谱; 导数预处理; 变异系数

中图分类号 TS47

文章编号 1007-4333(2018)03-0106-05

文献标志码 A

Application of Near Infrared spectroscopy combined with derivative method in detecting the consistency of different grade tobacco leaf

HU Yong¹, WANG Yuheng², LIU Wei¹, LI Qixiang¹, LI Junhui^{2*}

(1. Guizhou Tobacco Leaf Redring Co., Ltd., Guiyang 55000, China;

2. College of Information and Electrical Engineering/Key Laboratory of Modern Precision Agriculture System Integration Research of the Ministry of Education, China Agricultural University, Beijing 100083, China)

Abstract It was very important to improve tobacco leaf quality detection method in tobacco industry. The traditional detection methods based on appearance and chemical were time-consuming and laborious, and it is difficult to meet the requirements of industrial production. A total of 78 batches of tobacco leaves of Guiyang rebaked plant on 2016 were used in this study. Near Infrared spectroscopy, nicotine, total sugar and other chemical data were analyzed. Based on the modern spectral signal processing techniques such as derivative and the coefficient of variation, a fast detection method based on near infrared spectroscopy was developed. The results showed that using the full spectral average at calculating variation and the first derivative spectra, the correlation coefficient between spectral variation coefficient and the nicotine value's variation coefficient reached 86.60% and 86.12%, respectively. This new method could be used in tobacco grade detection directly.

Keywords tobacco; grade; Near Infrared spectroscopy; derivative pretreatment; variation coefficient

近红外分析技术(Near Infrared, NIR)是近些年发展起来的绿色分析技术, 具备简单、高效、快速等优点, 适于过程分析和在线分析, 是质量控制的理想手段, 在农业、食品、石油等领域的应用日益广

泛^[1-3]。烟叶等级和产区是决定烟叶品质的 2 个重要因素, 烟叶等级的划分使得烟叶原料模块和叶组配方的可操作性更强。近红外光谱主要是对含氢基团振动的倍频和合频吸收, 其中包含了大多数类型

收稿日期: 2017-03-28

基金项目: 国家重点研发计划子课题(2016YFD0700304); 贵州烟叶复烤有限责任公司科技项目

第一作者: 胡涌, 经济师, 主要从事烟叶打叶复烤工艺研究, E-mail: 2472284417@qq.com

通讯作者: 李军会, 副教授, 主要从事近红外在农产品检测中的应用研究, E-mail: caunir@cau.edu.cn

有机化合物的组成信息,与烟叶的化学成分具有很高的相关性^[4-6]。近红外分析技术的日趋发展与成熟,使得烟叶等级一致性检测成为可能。

由于不同地区的海拔、温度、湿度等环境因素的差异,不同产区生产的烟叶的物理特征和内在品质也有较大的差异。近些年,近红外技术在烟叶的分组分级,产地分析等方面有着较为广泛的应用。具体如下:采用小波变化和神经网络分析完成了烟叶的分级工作^[7];将概率神经网络 PNN 引入到烤烟烟叶的分组分级中^[8];以来自 11 个不同省份的不同部位的烟叶样品作为试验对象,应用近红外光谱分析了不同产地的烟叶特性^[9];使用近红外光谱建立了定性分析模型对不同产区,不同年度的不同等级烟叶样品进行了分析与判定^[10];使用近红外光谱法和 PCA 主成分分析法对不同地区的烟叶样品进行了建模分析,表明了不同产地烟叶光谱主成分有较为明显的差别^[11];研究了我国 15 个产地中部烤烟的物理特性有一定差异^[12];应用基于 NIRS 的 DPLS 算法判别了四川、云南、重庆和福建产地的烤烟^[13];研究了山东、云南、湖南的土壤与烟叶中微量元素铁、锰、铜、锌的分布情况^[14];通过 NIRS 和 SVM 将云南曲靖市的烟叶进行的很好的判别^[15];应用相似性聚类方法将烤烟烟叶产区划分为 5 个生态产区^[16]针对不同产区烤烟烟碱含量的变异进行分析,结果表明不同产区的烤烟烟碱含量存在着一定的变异,且有不不同的变异特征^[17];以四川不同产区烤烟 C3F 样品为试验材料,研究不同地区烤烟烟碱含量的分布特点,研究表明四川地区烤烟烟碱含量大体呈现南高北低的趋势^[18]。另外,不同部位等级卷烟烟碱含量也有所不同,有研究探究了 11 个品种不同部位烤烟烟叶烟碱含量关系,发现不同品种烤烟烟叶烟碱含量高低均为上部、中部、下部^[19];采用连续流动法测定湘西主产区烟叶的烟碱含量,得出不同等级烟叶含量均值有差异^[20]。

综上所述,在烟叶近红外检测方面的研究主要以开发相应的定量、定性判别或相似性分析模型的方法为主,直接应用近红外光谱信息和简洁易用的统计指标,进行烟叶等级一致性快速检测的方法研究和应用还鲜有文献报道。本研究拟采用导数等现代光谱信号处理技术和全波段变异系数计算方法对烟叶样品的近红外数据进行分析,以期实现对烟叶等级一致性的快速检测。

1 材料与方法

1.1 试验材料

试验样品为复烤加工过程中不同产地、不同等级的实际工业生产样品,分别来自安顺、贵阳、黔东南和遵义等 4 处产地,5 个等级的原烟样品,其中,安顺 X3F 的样品数目为 8,贵阳 B2F 为 13,贵阳 C4F 为 27,黔东南 B2F 为 21,遵义 BO4Z 为 9,共计 78 份试验样品。

1.2 设备及测试方法

近红外光谱数据的采集试验设备为美国热电尼高力公司的 Antaris II 型近红外光谱检测仪 1 台。光谱采集方法是积分球漫反射测量法,光谱波数的采集范围 4 000~10 000 cm^{-1} ,分辨率为 8 cm^{-1} ,扫描次数为 64 次/min。将烤烟烟叶去主梗,磨成粉,在低于 55 $^{\circ}\text{C}$ 下烘 2~3 h,过 60 目筛,取适量烟末放入样品杯中,自然压实后进行近红外光谱扫描,扫描过程中样品杯旋转 15 圈/min;烟碱、总糖等化学值数据使用流动分析检测法获得。

1.3 分析方法

1.3.1 一阶导数

导数光谱可有效地消除基线和其他背景的干扰,分辨重叠峰,提高分辨率和灵敏度;但它同时会引入噪声,降低信噪比。本研究选用的是 Savitzky-Golay 平滑求一阶导数方法,平滑点数为 15 点^[21]。

1.3.2 变异系数

变异系数是反映总体各单位标志值差异程度的指标,可以反映数据的分布情况,其含义是总体各单位的标准差与其算术平均数对比的相对数,采用式(1)计算:

$$V = \frac{\sigma}{\bar{x}} \quad (1)$$

式中: V 为变异系数; σ 为全波段下每个波长点光谱吸收度标准差,采用式(2)计算:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{j=m} \sum_{i=1}^{i=n} (x_{i,j} - \bar{x})^2}{n}} \quad (2)$$

式中: \bar{x} 为每个等级样品中所有试验样品平均光谱的吸光度平均值,计算方法为:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{j=1}^{j=m} \sum_{i=1}^{i=n} x_{i,j}}{n} \quad (3)$$

式中: i 为每个等级的烟叶样品数; j 为每条光谱的波长点数。

2 结果与分析

使用近红外光谱仪测量获得不同等级烟叶样品的

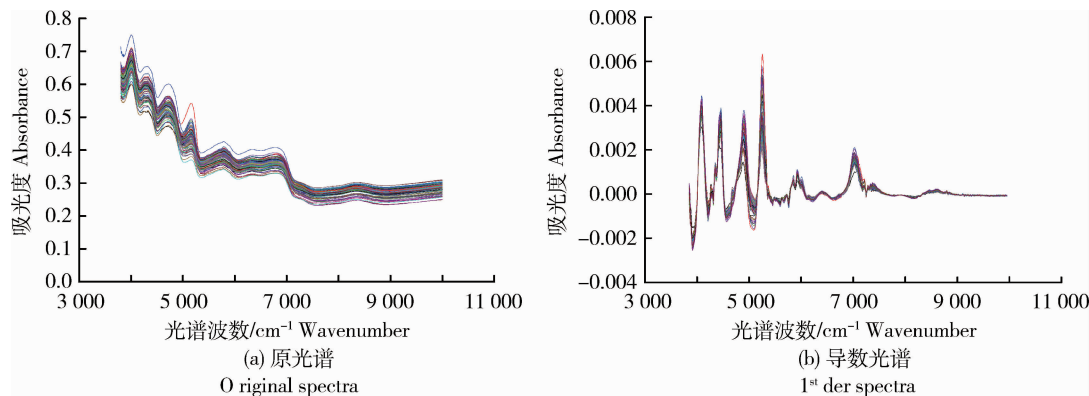


图1 不同等级烟叶样品的原光谱和导数预处理光谱图

Fig. 1 Different level grade tobacco leaf samples' original spectra and spectra after first der

分别计算预处理前后不同等级烟叶样品的吸光度变异系数和化学值变异系数(表1),并绘制了预处理前后光谱变异系数与不同化学值变异系数的线性相关图(图2),计算得到相关系数 R ,结果表明:在无预处理的情况下,烟叶样品的吸光度变异系数与化学值变异系数之间的相关度较低,而经过一阶

近红外光谱吸光度,并使用 Savitzky-Golay 平滑求导对吸光度值进行预处理(图1),表明了试验样品在导数处理后的吸光度值,在多数波长下的变化幅度减小,在信号较弱波段范围内趋于一致,说明该方法可较好的消除基线和其他背景的干扰,提高光谱信号的有效性。

导数处理后,烟叶样品的吸光度变异系数与化学值变异系数之间的相关度有显著提高。其中,原光谱-总糖组的相关系数为48.26%,原光谱-尼古丁组的相关系数为23.00%;而一阶导数处理后,导数光谱与2种化学值变异系数的相关系数均可达到85.00%以上。

表1 不同等级烟叶样品的吸光度变异系数和化学值变异系数

Table 1 Variation coefficient of absorbance and chemical values of different grade flue-cured tobacco samples

烟叶产地 Tobacco's origin	烟叶等级 Tobacco's level	样品数目 Sample number	变异系数 Variable coefficient			
			原光谱 Original	一阶导数光谱 1 st der	总糖 Total sugar	尼古丁 Nicotine
安顺 Anshun	X3F	8	0.046	0.294	0.192	0.196
贵阳 Guiyang	B2F	13	0.034	0.261	0.175	0.172
贵阳 Guiyang	C4F	27	0.041	0.283	0.182	0.228
黔东南 Qiangdongnan	B2F	21	0.024	0.275	0.181	0.191
遵义 Zunyi	BO4Z	9	0.036	0.248	0.124	0.113

3 结论

本研究采用导数等现代光谱信号处理技术和变异系数等统计指标,对2016年度贵州省内的共计78份烟叶样品的近红外光谱和烟碱、总糖等化学值数据进行分析与研究。结果表明,应用 Savitzky-

Golay 平滑和一阶导数,并采用全谱段均值的变异系数计算方法,完全可以实现直接应用近红外光谱进行烟叶等级一致性检测,其中,光谱变异系数与尼古丁值变异系数的相关系数达到86.60%,与总糖值变异系数的相关系数达到86.12%,准确率满足实际生产应用中的需求。由于本研究方法的绿色高

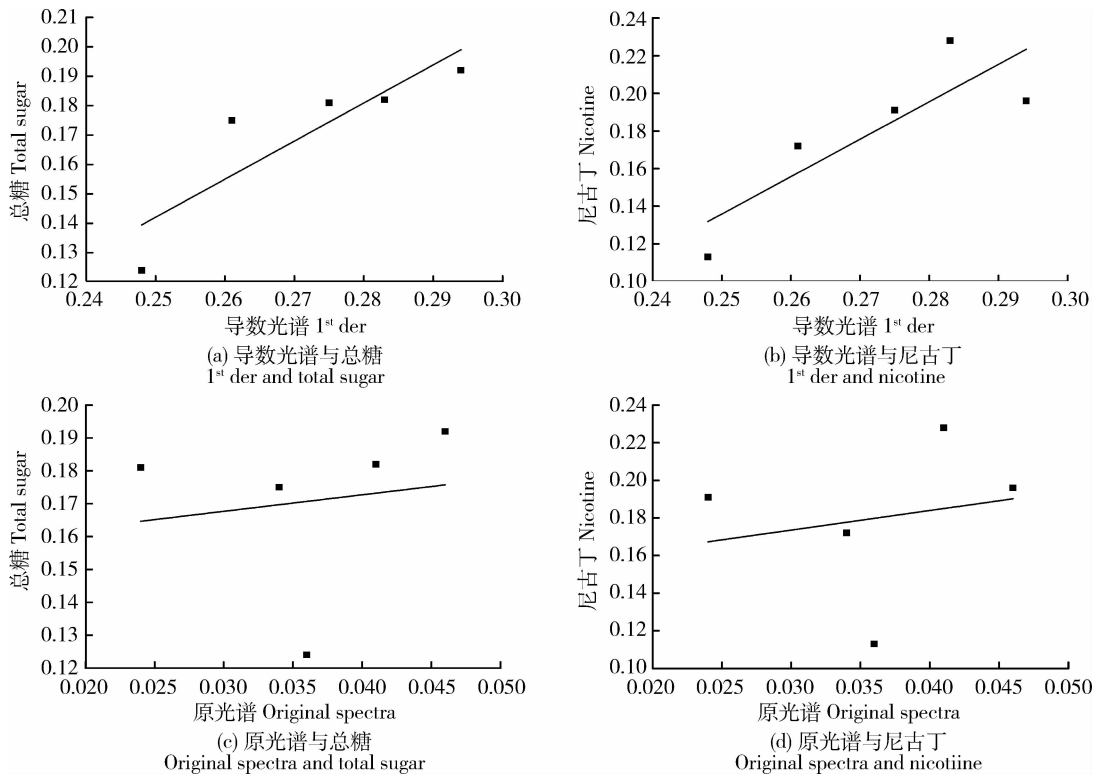


图2 导数预处理前后不同等级烟叶样品的吸光度与化学值含量变异系数的相关关系

Fig. 2 Linear correlation diagram of different level tobacco's spectra and chemical values' variation coefficient

效,成本较低,在烟叶等级一致性的检测流程中可以减少烦琐的化学值测量工作以及大量的近红外定量统计模型的建立维护工作,在实际生产中具有较高的应用价值,对提升烟叶加工质量和工业可用性具有重要作用。

参考文献 References

- [1] 严衍禄. 近红外光谱分析基础与应用[M]. 中国轻工业出版社, 2005
Yan Y L. *Foundation and Application of NIR Spectra Analysis*[M]. Beijing: China Light Industry Press, 2005 (in Chinese)
- [2] Martelo-Vidal M J, Vázquez M. Determination of polyphenolic compounds of red wines by UV-VIS-NIR spectroscopy and chemometrics tools[J]. *Food Chemistry*, 2014, 15(8): 28
- [3] Wheeler D A, Newhouse R J, Wang H, Zou S, Zhang J Z. Optical properties and persistent spectral hole burning of near infrared-absorbing hollow gold nanospheres[J]. *Journal of Physical Chemistry*, 2011(42): 114
- [4] Zhang M, Cai W S, Shao X G. Wavelet unfolded partial least squares for near-infrared spectral quantitative analysis of blood and tobacco powder samples[J]. *Analyst*, 2011, 136(20): 4217-1221
- [5] Marques A S, Castro J N F, Costa F J, Neto R M, Lima K M G. Near-infrared spectroscopy and variable selection techniques to discriminate *Pseudomonas aeruginosa* strains in clinical samples[J]. *Microchemical Journal*, 2016, 124(1): 306-310
- [6] Cruz M V, Sarragaça M C, Freitas F, Lopes J A, Reis M A. Online monitoring of P (3HB) produced from used cooking oil with near-infrared spectroscopy[J]. *Journal of Biotechnology*, 2015(194): 1-9
- [7] 彭丹青, 申金媛, 刘剑君, 丁春峰, 刘润杰. 基于径向基网络的烟叶光谱分级[J]. 农机化研究, 2009, 31(10): 15-18
Peng D Q, Shen J Y, Liu J J, Ding C F, Liu R J. Tobacco leaves grading with spectrum based on RBF network[J]. *Journal of Agricultural Mechanization Research*, 2009, 31(10): 15-18 (in Chinese)
- [8] 张乐明, 申金媛, 刘剑君, 刘润杰. 概率神经网络在烟叶自动分级中的应用[J]. 农机化研究, 2011, 33(12): 32-35
Zhang L M, Shen J Y, Liu J J, Liu R J. Application of probabilistic neural network in tobacco automatic grading [J]. *Journal of Agricultural Mechanization Research*, 2011, 33(12): 32-35 (in Chinese)
- [9] 张璐, 唐宏兴, 马翔, 钱颖颖, 王萝萍, 温亚东, 王毅, 张晔晔, 赵龙莲, 李军会. 应用近红外光谱分析不同生态环境的烟叶特性[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(3): 664-668
Zhang L, Tang X H, Ma X, Qian Y Y, Wang L P, Wen Y D, Wang Y, Zhang Y H, Zhao L L, Li J H. Research on characteristic

- of tobaccos from different ecological environments base on near infrared spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012,32(3):664-668 (in Chinese)
- [10] 王毅,马翔,温亚东,于春霞,王萝萍,赵龙莲,李军会.应用近红外光谱分析不同产区工业分级烟叶样品的特性[J]. *光谱学与光谱分析*,2012,32(10):2694-2697
Wang Y, Ma X, Wen Y D, Yu C X, Wang L P, Zhao L L, Li J H. Tobacco quality analysis of industrial classification of different producing area using Near-Infrared (NIR) spectrum [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2012, 32(10): 2694-2697 (in Chinese)
- [11] 张建平,陈江华,束茹欣,刘建利,杨凯.近红外信息用于烟叶风格识别及卷烟配方研究的初步探索[J]. *中国烟草学报*,2007,13(5):1-5
Zhang J P, Chen J H, Shu R X, Liu J L, Yang K. Tobacco characteristics identification and blending formula study by using NIRs[J]. *Acta Tabacaria Sinica*, 2007, 13(5): 1-5 (in Chinese)
- [12] 尹启生,张艳玲,薛超群,王广山,奚家勤.中国烤烟主要物理特性及其产区差异[J]. *中国烟草学报*,2009,15(4):33-38
Yin Q S, Zhang Y L, Xue C Q, Wang G S, Xi J Q. Physical characteristics and their regional variation in China's flue-cured tobacco leaf[J]. *Acta Tabacaria Sinica*, 2009, 15(4): 33-38 (in Chinese)
- [13] 施丰成,李东亮,冯广林,宋光富,周志刚.基于近红外光谱的PLS-DA算法判别烤烟烟叶产地[J]. *烟草化学*,2013(4):56-59
Shi F C, Li D L, Feng G L, Song G F, Zhou Z G. Discrimination of producing areas of flue-cured tobacco leaves with Near Infrared spectroscopy-based PLS-DA algorithm [J]. *Tobacco Science & Technology*, 2013(4): 56-59 (in Chinese)
- [14] 王影影.烤烟典型产区土壤与烟叶铁、锰、铜、锌分布特点研究[D].北京:中国农业科学院,2013
Wang Y Y. Distribution characteristics of Fe, Mn, Cu, Zn contents in soil and tobacco leaves of typical tobacco planting areas[D]. Beijing: Chinese Academy of Agricultural Sciences, 2013 (in Chinese)
- [15] 邱凯贤,田旷达,李祖红,郑波,唐果,宋相中,闵顺耕.基于SVM近红外光谱在烤烟烟叶产地判别中的应用研究[J]. *现代仪器*,2012,18(6):34-36
Qiu K X, Tian K D, Li Z H, Zheng B, Tang G, Song X Z, Min S G. The research of discriminating the producing area of tobacco leaf using Near-Infrared spectroscopy combined with support vector machine (SVM)[J]. *Modern Instruments*, 2012, 18(6): 34-36 (in Chinese)
- [16] 束茹欣,蔡嘉月,杨征宇,杨凯,赵龙莲,张录达,张晔晖,李军会.应用近红外光谱投影模型法分析烟叶的产区与风格特征[J]. *光谱学与光谱分析*,2014,34(10):2764-2768
Shu R X, Cai J Y, Yang Z Y, Yang K, Zhao L L, Zhang L D, Zhang Y H, Li J H. Analysis of tobacco style features using Near-Infrared spectroscopy and projection model[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, 34(10): 2764-2768 (in Chinese)
- [17] 陈伟,王三根,王玉明,唐远驹.不同生态区烤烟烟碱含量的变异分析[J]. *中国生态农业学报*,2009,17(2):285-290
Chen W, Wang S G, Wang Y M, Tang Y J. Variation analysis of nicotine content in flue-cured tobacco in different ecotopes [J]. *Chinese Journal of Eco-Agriculture*, 2009, 17(2): 285-290 (in Chinese)
- [18] 罗玲,杨杰,许自成,耿宗泽,汪显军,吴福如,阳苇丽.四川烤烟烟碱和总氮含量分布特点及对评吸质量的影响[J]. *郑州轻工业学院学报:自然科学版*,2012,27(1):33-36
Luo L, Yang J, Xu Z C, Geng Z Z, Wang X J, Wu F R, Yang W L. Distribution characteristics of nicotine and total nitrogen contents in flue-cured tobacco and their effects to smoking quality in Sichuan Province [J]. *Journal of Zhengzhou University of Light Industry: Natural Science Edition*, 2012, 27(1): 33-36 (in Chinese)
- [19] 黄富,成志军,张胜,杨会丽,荆永锋,宋浩.不同品种烤烟烟叶烟碱与烟气烟碱的关系研究[J]. *安徽农业科学*,2011,39(36):22265-22266
Huang F, Cheng Z J, Zhang S, Yang H L, Jing Y F, Song H. Study on correlation between nicotine in smoke and nicotine in leaves of flue-cured tobacco with different varieties[J]. *Journal of Anhui Agricultural Sciences*, 2011, 39(36): 22265-22266 (in Chinese)
- [20] 张黎明,张明发,田峰,巢进,陈前锋,邓小华.湘西州烤烟烟碱含量的区域特征及其与烟叶评吸质量的关系[J]. *烟草科技*,2014(12):57-61
Zhang L M, Zhang M F, Tian F, Chao J, Chen Q F, Deng X H. Regional characteristics of nicotine content in flue-cured tobacco leaves from Xiangxi and its relationships with smoking quality[J]. *Tobacco Science & Technology*, 2014(12): 57-61 (in Chinese)
- [21] 梁逸曾,俞汝勤.分析化学手册:化学计量学[M].北京:化工出版社,2001
Liang Y Z, Yu R Q. *Manual of Analytical Chemistry: Chemical Metrology* [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2001 (in Chinese)

责任编辑:刘迎春