

doi: 10.12452/j.fxcxb.250411283

基于深度学习的樱桃番茄 γ -氨基丁酸含量无损检测研究

黄彦发¹, 张瑶², 朱彦哲¹, 田雨¹, 张祎洋¹, 吴龙国^{1,3*}

(1. 宁夏大学 葡萄酒与园艺学院, 宁夏 银川 750021; 2. 宁夏回族自治区食品检测研究院, 宁夏 银川 750001; 3. 宁夏现代设施园艺工程技术研究中心, 宁夏 银川 750021)

摘要: 为建立不同品种樱桃番茄中 γ -氨基丁酸(GABA)含量的快速无损检测方法, 构建了基于近红外高光谱成像与深度学习的建模框架。选取宁夏、山东两地5个品种共500个样本; 采用基于X-Y联合距离的样本划分算法(SPHY)划分校正/预测集, 对900~1 700 nm光谱进行去趋势化(Detrending)预处理, 并用迭代保留信息变量法(IRIV)提取特征波长。在此基础上构建并比较卷积神经网络(CNN)、卷积递归神经网络(RCNN)、分组卷积神经网络(GCNN)和并行卷积神经网络(PCNN)4种模型。结果表明, 基于IRIV波长的GCNN模型表现最佳, 预测集相关系数(R_p)为0.896, 预测集均方根误差(RMSEP)为3.022 $\mu\text{mol/g}$, 优于其他模型。利用最优模型实现了GABA含量的可视化, 不同品种樱桃番茄呈现显著的空间分布差异。研究表明, 近红外高光谱与深度学习的结合可高效、准确地实现樱桃番茄中GABA的无损检测, 为功能性品质的快速分级与规模化监测提供技术支撑。

关键词: 近红外高光谱成像; 樱桃番茄; γ -氨基丁酸(GABA); 深度学习; 无损检测

中图分类号: O657.3; TS207.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-4957(2025)12-2554-10

A Study on Non-destructive Detection of GABA Content in Cherry Tomatoes Based on Deep Learning

HUANG Yan-fa¹, ZHANG Yao², ZHU Yan-zhe¹, TIAN Yu¹,
ZHANG Yi-yang¹, WU Long-guo^{1,3*}

(1. College of Enology and Horticulture, Ningxia University, Yinchuan 750021, China; 2. Institute of Food Testing in Ningxia, Yinchuan 750001, China; 3. Ningxia Modern Protected Horticulture Engineering Technology Research Center, Yinchuan 750021, China)

Abstract: This study established a rapid, non-destructive approach for quantifying γ -aminobutyric acid(GABA) in cherry tomatoes by coupling near-infrared hyperspectral imaging with deep learning. Five cultivars ($n=500$) from Ningxia and Shandong, China, were analyzed. The sample set was partitioned into calibration and prediction subsets using sample set partitioning based on joint X-Y distance (SPHY); spectra (900–1 700 nm) were preprocessed by detrending, and informative wavelengths were selected via iteratively retaining informative variable (IRIV). Four architectures—convolutional neural network (CNN), recurrent convolutional neural network (RCNN), group convolutional neural network (GCNN), and parallel convolutional neural network (PCNN)—were constructed and compared. The IRIV-based GCNN delivered the best prediction, achieving a correlation coefficient of prediction (R_p) of 0.896 and a root mean square error of prediction (RMSEP) of 3.022 $\mu\text{mol/g}$, outperforming the alternative models. Maps generated with the optimal model revealed pronounced spatial heterogeneity of GABA among cultivars. Overall, integrating NIR-HSI with deep learning enables efficient and accurate non-destructive detection of GABA in cherry tomatoes, supporting rapid grading and large-scale monitoring of functional quality.

Key words: near-infrared hyperspectral imaging; cherry tomato; GABA; deep learning; non-destructive detection

收稿日期: 2025-04-11; 修回日期: 2025-05-29

基金项目: 宁夏基础条件建设项目(2025DPC05011); 宁夏青年拔尖人才项目(2024NXQNB043); 宁夏高等学校自然科学项目(NYG-2024-019); 宁夏重点研发计划重大项目(2024BBF01011, 2025BBF01004)

* 通讯作者: 吴龙国, 博士, 讲师, 研究方向: 设施园艺产品无损检测, E-mail: wlg@nxu.edu.cn

网络首发时间: 2025-10-16

γ -氨基丁酸(GABA)是樱桃番茄中含量较高的功能性氨基酸,具有降压、缓解焦虑、改善睡眠与增强免疫等保健作用^[1-3]。健康饮食需求的增长推动了富含 GABA 食品的开发,但现行以高效液相色谱(HPLC)为代表的化学分析方法虽准确,却存在前处理繁琐、耗时长、成本高且为破坏性检测的不足,难以满足大批量、实时分级的应用场景^[4]。因此,建立快速、无损、可规模化的 GABA 检测技术具有现实需求与产业价值。

近红外高光谱成像集成光谱与图像信息,具备无损、快速与高通量优势^[5],已广泛用于农产品糖度^[6]、水分^[7]、色度^[8]与定性判别^[9]等检测领域。在具体实践中,算法与模型融合显著提升了性能:如高光谱结合基于竞争性自适应重加权抽样算法(CARS)、平均影响值算法(MIV)、遗传算法(GA)和支持向量机(SVM)构建的分类模型实现了桃子缺陷识别^[10],以及多种预处理与特征提取结合回归模型用于番茄叶绿素定量,均取得良好效果^[11]。近年来,深度学习在农产品无损检测领域快速发展,卷积神经网络(CNN)等模型已用于果蔬糖度^[12-13]、酸度^[14]、成熟度^[15-16]及缺陷检测^[17];进一步的研究中,堆叠加权自编码器结合灰狼优化支持向量回归(SWAE-GWO-SVR)等新方法提升了可溶性固形物预测精度^[18],基于瓦瑟斯坦距离的生成对抗网络(WGAN)的数据集增强策略改善了番茄可溶性糖的建模表现^[19]。这些研究表明,融合深度学习与高光谱技术可有效应对特征提取困难、建模稳定性不足等问题。

然而,针对 GABA 这一功能性成分的高光谱建模仍缺乏系统研究,尤其是基于近红外高光谱对樱桃番茄或其他果蔬中 GABA 含量进行无损定量预测的文献鲜有报道。与常规理化指标相比, GABA 在光谱中的响应弱、含量相对较低、易受背景干扰,同时化学测定成本较高、样本获取困难,这些因素共同增加了特征提取与模型构建的难度。随着果蔬表型采集趋于精细化,近红外高光谱与深度学习的结合正在从基础品质检测走向功能性成分建模与化学异质性可视化,显示出更大潜力^[20]。

本研究以樱桃番茄为对象,围绕 GABA 含量的快速无损检测,构建并比较了 CNN、卷积递归神经网络(RCNN)、分组卷积神经网络(GCNN)和并行卷积神经网络(PCNN)4 种深度学习模型的预测性能,并实现含量可视化。考虑样品可获得性与产区代表性,选取宁夏与山东两地产区的 5 个代表性品种(覆盖不同颜色与类型)开展建模,旨在形成面向多品种、多产地的通用预测模型,为跨区域应用与推广提供参考。

1 实验部分

1.1 样品准备

樱桃番茄采摘自宁夏平罗县的樱桃番茄品种清甜(QT)、黄栗子(HLZ),以及山东寿光市羊口镇丁家村的夏日皇后(XRHH)、釜山 88(FS88)、清甜 2 号(QT2)共 5 个品种(后文以字母简写)。样品分别于 2024 年 10 月 8 日、12 日采摘,采摘后立即对样品进行封装冷藏保鲜运输,在实验室环境下对样品进行编号处理,每个品种选 100 个大小形态相近(以果实直径为参考,约为 22~28 mm)、表面无损伤开裂的果实,共 500 个。编号后将樱桃番茄表面擦拭干净,对其采集近红外高光谱成像,进行 γ -氨基丁酸含量检测。

1.2 仪器设备及实验过程

1.2.1 近红外高光谱图像采集 高光谱成像技术是一种融合图像与光谱信息的无损检测手段,可同时获取目标的空间特征与连续光谱数据^[21]。采用近红外高光谱成像系统(900~1 700 nm, 256 波段)采集图像。为消除环境光照与仪器背景噪声并去除暗电流,进行黑白校正,公式见式(1)。光谱分辨率 3.8 nm;曝光时间 10 ms,扫描速度 15 mm/s,增益 1。

$$R = \frac{I - D}{W - D} \quad (1)$$

式中: I 为原始图像; D 为黑校正图像; W 为白校正图像; R 为校正后的高光谱图像。

1.2.2 GABA 含量的测定 采用 GABA 比色法测试盒(生产厂家:Elabscience,型号:E-BC-K852-M)进行检测,检测范围:0.06~10.0 $\mu\text{mol/mL}$,灵敏度:0.06 $\mu\text{mol/mL}$ 。将番茄样品放入研钵研磨成匀浆,称取 0.05 g 样本匀浆通过试剂盒检测,经过测试盒反应处理后,取 200 μL 反应液于酶标板对应孔中,再通过酶标仪(生产厂家:杭州奥盛仪器有限公司,型号:Feyong-A300)于 640 nm 波长测定光

密度(OD)值。通过实验测得的拟合曲线,将OD值换算成GABA含量,计算公式如式(2)。实际测得标准的拟合曲线: $y=0.0801x-0.0075$, $R^2=0.9991$ 。

$$\text{GABA含量}(\mu\text{mol/g wet weight}) = \frac{(\Delta A_{640} - b) \times m \times f}{a \times V} \quad (2)$$

其中: y : 标准品OD值-空白OD值; x : 标准品的浓度; a : 拟合曲线的斜率; b : 拟合曲线的截距; ΔA_{640} : 样本测定OD值-空白OD值; m : 组织湿重质量, g; V : 加入提取液的体积, mL; f : 样本加入检测体系前的稀释倍数。

1.3 数据分析方法

采用Excel 2021进行数据统计和分析,利用ENVI 5.6进行光谱提取,通过Unscrambler X10.4进行数据预处理和预测模型建立,通过MATLAB 2018a提取特征光谱,在Visual Studio环境中,基于Python 3.10.0构建并运行深度学习模型,实现模型预测结果的可视化。

1.3.1 样本集的划分 500个样品按4:1划分为校正集(400个)与预测集(100个)。将所有样本混合后整体建模,以增强模型的泛化能力和稳定预测性能。采用基于X-Y联合距离的样本划分算法(SPHY),可确保选出的校正集样本在光谱分布和目标值分布上均具有代表性^[22]。在随机扰动样本顺序的条件下重复5次划分,构建偏最小二乘回归(PLSR)模型以评估划分稳健性。

1.3.2 光谱预处理方法 光谱采集过程中易受到样品背景、光照亮度变化因素干扰,样品大小的不均匀、光散射或反射效应也会导致光谱基线漂移,同时光谱数据通常包含大量冗余和噪声信息,所以通过光谱预处理可以消除或降低干扰因素,校正基线漂移和散射效应,增强光谱特征信号,提高模型的稳健性与预测能力^[19]。本实验采用均值滤波(MF)、Savitzky-Golay平滑(SG)、归一化处理(Normalize)、基线校准(Baseline)、标准正态变换(SNV)、去趋势化(Detrending)6种预处理方法优化处理光谱数据。

1.3.3 光谱特征波长提取 为降低维度并聚焦与GABA相关的有效信息,采用竞争性自适应重加权抽样(CARS)、变量组合集群分析(VCPA)、区间变量迭代空间收缩(iVISSA)、迭代保留信息变量(IRIV)与无信息变量消除(UVE),对预处理光谱进行特征波长提取。

1.3.4 模型建立与评估 为比较不同深度学习模型对GABA定量的适配性,构建并评估CNN、RCNN、GCNN与PCNN 4种模型。四者共享输入层(input layer)、三段卷积-池化(Conv-Pool)主干与全连接层(Fully connected layer),不同点如下(见图1): CNN在三段卷积-池化后直接接全连接层; RCNN于各池化层后加入转置卷积/上采样层(Deconv/Up-sample),并与对称卷积层做跳跃连接(Skip connection)以逐级上采样; GCNN采用分组卷积(Group convolution, groups=2)并结合通道重排(Channel shuffle)以降低参数量、增强通道交互; PCNN在首段卷积后引入步长为1与2的并行卷积分支(Parallel convolutional branches),多尺度特征在特征拼接层(Concat layer)融合后回到主干,其余两段与之同构。模型关键结构与训练超参数见表1。

表1 4种深度学习模型的结构与训练参数

Table 1 Structural and training parameters of the four deep learning models used for GABA content prediction

Parameter	Abbreviation	CNN	RCNN	GCNN	PCNN
Input data format	IDF	(1, 256, 1)	(1, 256, 1)	(1, 256, 1)	(1, 256, 1)
Kernel size	KS	(1, 2)	(1, 2)	(1, 2)	(1, 2)
Stride	STR	2	2	2	2
Number of filters	NF	64→64→128	32→64→128	64→32→64→128	32→32, 64→64, 128→128
Number of conv layers	NCL	3	3	4	6
Pooling type	Pool	max	max	max	-
Pooling size	PS	(1, 2)	(1, 2)	(1, 2)	-
Pooling stride	PStr	2	2	2	-
Fully connected layers	FC	128→128→1	256→128→128→1	256→128→128→1	256→128→128→1
Activation function	AF	ReLU	ReLU	ReLU	ReLU
Batch normalization	BN	True	True	True	True
Optimizer	OPT	SGD	SGD	SGD	SGD
Initial learning rate	LR	0.0005	0.0002	0.0002	0.0002
Max epochs	Epoch	2500	5000	5000	5000
Mini-batch size	MB	128	256	256	256
Shuffle strategy	SS	every_epoch	every_epoch	every_epoch	every_epoch

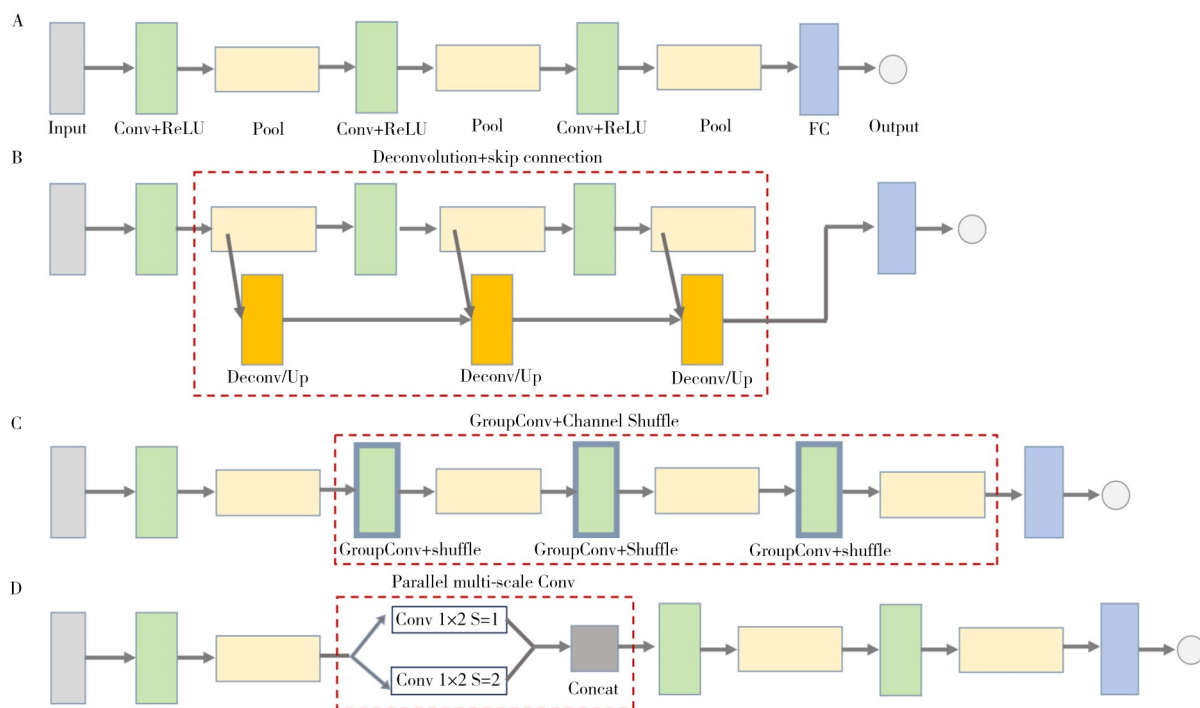


图1 卷积神经网络的结构流程图：卷积神经网络(A)、卷积递归神经网络(B)、分组卷积神经网络(C)与并行卷积神经网络(D)

Fig. 1 Structural diagrams of convolutional neural networks(A), recurrent convolutional neural networks(B), group convolutional neural networks(C), parallel convolutional neural networks(D)

Input: input layer; Pool: pooling layer; Conv+ReLU: convolution layer with ReLU activation; Deconv/Up: transposed convolution/upsampling layer; GroupConv + Shuffle: group convolution with channel shuffle; Concat: feature concatenation layer; FC: fully connected layer; Output: output nodes

模型性能采用校正/预测相关系数(R_c/R_p)、校正/预测均方根误差(RMSEC/RMSEP)以及残差预测偏差(RPD)进行评估, 数值计算公式见公式(3)~(5)。一般地, R_c 、 R_p 越大, RMSEC、RMSEP越小, RPD越大表明性能越优; RPD的经验判据为: $RPD < 1.4$, 表明模型不可靠; $RPD = 1.5 \sim 2.0$, 表明模型可用; $RPD > 2.0$, 模型表现较强。上述指标用于比较不同模型的拟合能力、外推能力与可靠性, 并据此筛选最优模型。

$$R_c, R_p = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - y_m)^2}} \quad (3)$$

$$RMSEC, RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}} \quad (4)$$

$$RPD = \frac{1}{\sqrt{1 - R_p^2}} \quad (5)$$

式中, $\hat{y}_i$ 是第*i*个样本的预测值, y_i 是第*i*个样本的实测值, n 是样本总数, y_m 是所有样本的实测值均值。

1.3.5 模型预测结果可视化 依据模型评价指标选取最优模型, 并以此实现樱桃番茄中GABA含量的可视化预测, 以验证模型的预测能力, 同时展现不同樱桃番茄品种在空间分布上GABA含量的差异。

2 结果与讨论

2.1 GABA含量的统计特性分析

在建模前, 对500个多品种樱桃番茄进行GABA真实含量的统计分析。结果显示, 其平均值为 $(17.37 \pm 5.09) \mu\text{mol/g}$, 含量范围为 $7.19 \sim 27.54 \mu\text{mol/g}$, 整体相对标准偏差(RSD)为29%。该波动主要来源于5个番茄品种间天然差异, GABA含量在不同品种间分布明显。整体数据分布集中, 未见明显异常值, 具备良好的差异性, 为后续模型的泛化建模提供了数据支持。

2.2 番茄果实光谱分析

图2为樱桃番茄的全样本近红外光谱曲线和5个品种的平均光谱曲线。从整体来看,所有样本在900~1 700 nm区域的光谱趋势基本一致,不同品种的反射率出现略微差别。在900~1 000 nm区域,出现一个明显的上升与下降趋势,主要与水的第二倍频(O—H)吸收有关^[23];在1 000~1 100 nm区域的明显反射峰,可能是果实中糖类(C—H)与水(O—H)的倍频吸收重叠区,也与氨基酸(N—H、C—H)的吸收有关;在1 200~1 300 nm区域出现一个较小波峰,与C—H、O—H拉伸振动的合频吸收相关;在1 400 nm附近的波谷则主要由水(O—H)的一阶吸收引起^[24]。

GABA含有氨基(—NH₂)和羧基(—COOH),在900~960 nm波段,可能存在N—H、C—H第二倍频的弱吸收;1 100~1 250 nm波段为N—H、C—H及部分O—H倍频吸收重叠区域;1 400~1 460 nm波段为水(O—H)的强吸收区域,需通过光谱预处理减少其对GABA信号的干扰;1 500~1 600 nm波段则对应GABA分子中N—H及—CH₂的组合振动吸收,是GABA含量预测的重要贡献区域。这些波段的物质吸收特性与樱桃番茄自身含有的水分、糖类和氨基酸成分密切相关^[25-26]。这些波段特征表现了样品间在水分、糖类、氨基酸等成分上的内在差异,为后续统一建模的特征波段提取及模型泛化性能提供了理论支撑。

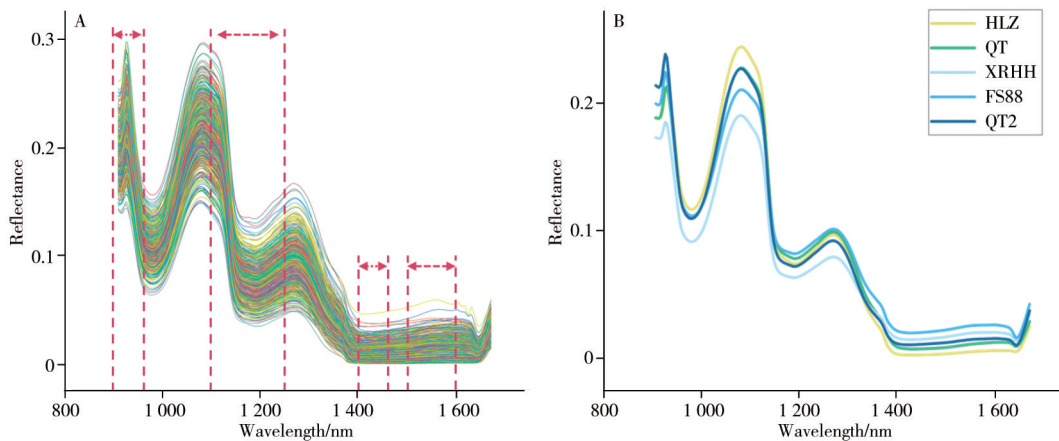


图2 5个品种樱桃番茄的近红外高光谱原始光谱图(A)和平均光谱图(B)

Fig. 2 Raw near-infrared hyperspectral spectra (A) and average spectra (B) of five cherry tomato cultivars

2.3 样本集划分

样本量为500,按4:1比例划分为校正集(400个)与预测集(100个)。采用SPXY法划分校正预测集,在此基础上,通过扰动样本顺序的方式进行了5次随机划分并建立PLSR模型。由表2可知,模型性能在5次不同划分中的变化较小,划分结果的均值和标准差进一步验证了模型的稳定性,表明SPXY方法对样本划分的稳健性较好。

表2 在SPXY法5次样本划分下的PLSR模型性能指标稳定性统计

Table 2 Stability statistics of the PLSR model performance indicators under the five sample divisions of the SPXY method

Shuffle round	R_c	RMSEC/($\mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$)	R_{cv}	RMSECV/($\mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$)	R_p	RMSEP/($\mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$)	RPD
1	0.848	4.041	0.814	4.412	0.862	3.406	1.97
2	0.850	4.019	0.816	4.377	0.865	3.322	1.99
3	0.851	4.023	0.819	4.264	0.866	3.294	2.00
4	0.846	4.075	0.813	4.387	0.858	3.565	1.95
5	0.847	4.062	0.814	4.443	0.861	3.451	1.96
Mean $\pm$ SD	0.848 $\pm$ 0.002	4.044 $\pm$ 0.024	0.815 $\pm$ 0.002	4.377 $\pm$ 0.07	0.862 $\pm$ 0.003	3.408 $\pm$ 0.108	1.97 $\pm$ 0.02

2.4 光谱预处理

为降低光谱基线漂移与散射干扰,提升模型稳健性,采用MF、SG、Normalize、Baseline、SNV、Detrending 6种常用预处理方法对光谱预处理,并进行了PLSR建模比较,结果见表3。整体来看,不同方法在建模性能上的差异较小,但Detrending方法在预测集上表现最佳, R_p 为0.877, RMSEP为3.349 $\mu\text{mol/g}$, RPD为2.08,表明Detrending方法能够有效削弱近红外高光谱数据易受基线漂移和散射

对番茄果实光谱的非线性干扰^[25]，从而提升拟合性能和预测精度。因此，选定 Detrending 作为后续特征波长提取及深度学习建模的预处理方法。

表 3 不同预处理方法 PLSR 模型统计

Table 3 PLSR model statistics of different preprocessing methods

Method	PCs	R_c	RMSEC/($\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}$)	R_{cv}	RMSECV/($\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}$)	R_p	RMSEP/($\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}$)	RPD
Raw	10	0.847	4.064	0.814	4.450	0.868	3.464	2.01
MF Smoothing	10	0.844	4.102	0.815	4.444	0.871	3.434	2.04
SG Smoothing	10	0.842	4.127	0.816	4.431	0.871	3.578	2.04
Normalize	9	0.843	4.120	0.819	4.397	0.859	3.593	1.95
Baseline	11	0.848	4.055	0.808	4.517	0.860	3.531	1.96
SNV	11	0.844	4.108	0.809	4.503	0.853	3.616	1.92
Detrending	10	0.848	4.058	0.812	4.476	0.877	3.349	2.08

2.5 特征波长提取

为了从全波段中筛选出与目标成分最相关的少数波长，降低数据维度、提高建模效率和预测精度，需对预处理后的光谱进行特征波长提取。采用 CARS、VCPA、iVISSA、IRIV、UVE 5 种算法对光谱进行分析提取。图 3 为 5 种特征波长提取的运行过程。

图 3A 为 CARS 算法特征变量筛选过程，CARS 在特征选择时，随着采样迭代次数增加，所保留的光谱变量数目从最初的 200 个逐渐减少，在最初的迭代中，RMSECV 大体保持在较低水平，但当变量数目被大量削减后，其值明显上升，说明过度剔除使模型性能下降，同时不同波长的回归系数在迭代中出现分化，有的系数被不断趋零剔除，有的则在范围内趋于稳定，最终选出在迭代后期仍保留具有较大贡献的波长。图中蓝色竖线显示，当迭代次数为 212 时，筛选出 24 个特征波段，此时模型的 RMSECV 最小。图 3B 为 VCPA 算法对光谱数据进行变量筛选的过程，在 50 次迭代中，随着迭代次数的增加，RMSECV 整体呈下降趋势，并在 27 次迭代时达到最小值，选出的 10 个波段序号为 30、121、131、133、148、152、162、164、180、212，其对应的实际波长均位于 1 200~1 450 nm 与 1 500~1 550 nm 区间。图 3C 为 IRIV 算法对光谱数据进行变量筛选的过程，图中横坐标是迭代轮次，纵坐标是每轮迭代剩余的变量个数，第 1 轮有 256 个波段，之后每 1 轮通过 IRIV 算法会去除部分不重要的波段，数目最终下降为 45，在第 6、7 轮均稳定在 45 个波段，说明算法已基本收敛，不再继续剔除，同时在 45 个波长中做二次筛选，最终留下 35 个特征波长。图 3D 为 UVE 算法对光谱数据进行变量筛选的过程，该图的横轴为 1~381，竖直黄线在 256 处将真实与随机变量区分开，粉色曲线对应随机变量，其 t 值整体分布接近 0，表示其在模型没有显著作用，图中两条红色水平虚线，是基于随机变量分布来确定的置信区间阈值，超出此上下阈值的变量则对模型有显著效果，即保留的特征波段，UVE 算法最终筛选掉 t 值在阈值区间内的波段，保留 109 个对模型最有贡献的波段。图 3E 为 iVISSA 算法对光谱数据进行变量筛选的过程，图中颜色标尺从 0 到 1 (从绿到蓝)，数值越高，说明该变量在当前迭代所反映的重要性越大，图中整体上随着迭代次数增加，不同变量的权重在不断更新，特征波段的权重逐渐在后期收敛到较高水平，形成了最终的最优波长子集，而不重要的波段会被逐步淘汰或权重变得很低。该算法在第 31 轮迭代时得到当前最小的 RMSECV，为 4.673 3 $\mu\text{mol/g}$ ，最终在 256 个原始波段中筛选出 114 个作为有效特征波长。

2.6 特征波长提取结果比较分析

分别基于 5 种特征波长建立 PLSR 模型，评价结果见表 4。由表可知，校正集中，IRIV 算法 $R_c=0.849$ ，RMSEC=4.046 $\mu\text{mol/g}$ ，略优于其他算法，表现出最佳的拟合能力。交叉验证中，IRIV 算法仍保持最高 R_{cv} (0.832) 与最低 RMSECV (4.245 $\mu\text{mol/g}$)，模型的稳定性最优；CARS 算法略次于 IRIV ($R_{cv}=0.831$)。同时，外部预测能力中，IRIV 取得最高 R_p (0.885)，最低 RMSEP (3.185 $\mu\text{mol/g}$)；CARS 算法略次于 IRIV ($R_p=0.882$)。在模型可靠性方面，IRIV 取得最佳残差预测偏差 (RPD=2.15)。IRIV 与 CARS 的差异不大，但 IRIV 算法的校正集、交叉验证、外部预测以及模型可靠性均最优，且在 RMSEP 上最显著。所以后续深度学习建模采用 IRIV 提取的特征波长。

由表 5 可见，5 种特征波长提取算法选择的波长点数量存在差异。每种算法选择的波段分布也不同：CARS 主要集中在 920~930 nm、1 050~1 130 nm、1 200~1 400 nm 等区域，与水分和糖类的吸收特

征相关；VCPA 的波段分布较窄，主要集中在 1 200~1 450 nm 和 1 500~1 550 nm，与糖类和氨基酸的吸收特性相关；iVISSA 和 UVE 则选择了更广泛的波段，主要在 900~1 060 nm、1 100~1 250 nm 和 1 400~1 600 nm 区间，涵盖了大部分与 GABA 分子中 N—H、C—H 吸收峰相关的波段。IRIV 波段主要集中在 920~940 nm、1 100~1 240 nm、1 310~1 380 nm、1 500~1 590 nm，该区段对应 GABA 分子 N—H、C—H 及—CH₂ 的倍频或组合振动吸收峰^[27]，这与前文光谱机理分析中 GABA 分子的吸收峰一致。进一步表明 IRIV 能够降低维度，同时保留 GABA 含量强相关的光谱信息，有效提升了模型的泛化能力和预测准确度。

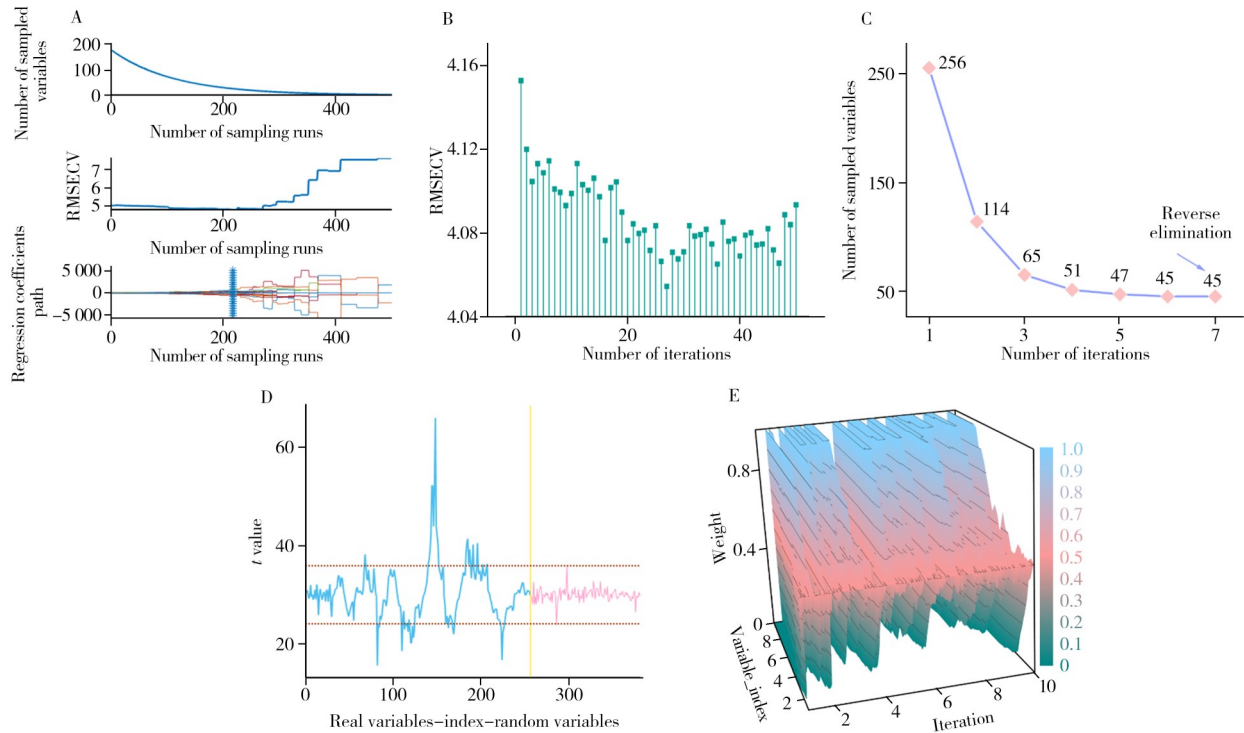


图3 CARS(A)、VCPA(B)、IRIV(C)、UVE(D)、iVISSA(E)5种算法提取特征波长的运行过程

Fig. 3 The process of feature wavelength extraction using five algorithms: CARS(A), VCPA(B), IRIV(C), UVE(D), and iVISSA(E)

表4 不同特征波长提取算法构建的PLSR模型

Table 4 PLSR model under different characteristic wavelengths

Algorithm	PCs	R_c	RMSEC/($\mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$)	R_{cv}	RMSECV/($\mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$)	R_p	RMSEP/($\mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$)	RPD
CARS	11	0.848	4.060	0.831	4.261	0.882	3.203	2.12
VCPA	7	0.822	4.353	0.813	4.459	0.869	3.368	2.02
iVISSA	12	0.848	4.056	0.819	4.401	0.857	3.585	1.94
IRIV	11	0.849	4.046	0.832	4.245	0.885	3.185	2.15
UVE	10	0.839	4.157	0.821	4.375	0.874	3.330	2.06

表5 不同特征波长提取算法筛选的波长数量与分布

Table 5 Numbers and distribution of wavelengths selected by different feature wavelength extraction algorithms

Algorithm	Number of selected wavelength	Distribution of principal wavelengths/nm
CARS	24	920~930, 1 050~1 130, 1 200~1 400
VCPA	10	1 200~1 450, 1 500~1 550
iVISSA	114	900~1 060, 1 140~1 320, 1 400~1 570
IRIV	35	920~940, 1 100~1 240, 1 310~1 380, 1 500~1 590
UVE	109	950~990, 1 100~1 390, 1 450~1 600

2.7 预测模型比较分析

基于 IRIV 提取的特征波长，分别构建 4 种深度学习模型，评价结果见表 6。从拟合能力来看，GCNN 和 PCNN 的 R_c 均为 0.919，高于其他模型，但 PCNN 的 RMSEC 最低 (3.042 $\mu\text{mol/g}$)，说明其对训练数据拟合更好。在预测能力方面，GCNN 有最高的 R_p (0.896) 和最低的 RMSEP (3.022 $\mu\text{mol/g}$)，表明

其外部预测能力最强。PCNN 虽然训练误差最小, 但 RMSEP ($3.250 \mu\text{mol/g}$) 最大。CNN 的预测性能 ($R_p=0.892$, RMSEP= $3.102 \mu\text{mol/g}$) 仅次于 GCNN, 说明 CNN 结构虽然简单, 但基础卷积结构对高光谱数据仍有良好适应性。RCNN 综合表现最弱 ($R_p=0.884$, RMSEP= $3.234 \mu\text{mol/g}$), 可能是递归单元更适用于时序数据, 高维高光谱数据经特征波长提取后无法发挥其优势。此外, GCNN 有最高的 RPD (2.25), 说明其模型可靠性强, 适用于大规模数据的稳定预测。

上述分析得出, GCNN 与 PCNN 的预测性能最为接近, 为充分证明 GCNN 优于 PCNN, 在结构机理与实验结果两个层面进行了对比分析 (见表 7)。结构上, GCNN 在每一卷积模块中引入 Group Convolution 与 Channel Shuffle, 先将 256 个波段按通道分组仅在组内学习卷积核, 再通过通道重排实现跨组信息融合, 这种设计显著降低了模型复杂度 (总参数量 0.38 M, 仅约为 PCNN 的 34%), 可防止过拟合。通过试验, 在原始预测集与叠加 5% 高斯白噪声的预测集上分别推理, GCNN 的基准 R_p 为 0.896, 噪声干扰后仅下降 2.8%, 而 PCNN 的 R_p 由 0.882 下降至 0.820, 降幅达 7.1%。同时, GCNN 的 RMSEP 优于 PCNN。可见, GCNN 在参数效率、抗噪声的稳健性方面均优于 PCNN, 更契合近红外高光谱中 GABA 含量的快速定量检测需求。

表 7 GCNN 与 PCNN 在参数效率与抗噪能力方面的对比

Table 7 Comparative performance of GCNN and PCNN in parameter efficiency and noise resistance

Model	Convolution strategy	Total parameters/M	Inference time/ms	Baseline R_p	R_p (5% noise)	$\Delta R_p/\%$	Baseline RMSEP/ ($\mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}$)
GCNN	1×1 Conv + Group Conv (2 groups)	0.38	0.71	0.896	0.871	-2.8	3.022
PCNN	Sequential + Parallel Conv (stride 2)	1.12	1.89	0.882	0.820	-7.1	3.274

inference time denotes per-sample forward-pass latency (batch size=1), excluding data loading and preprocessing

基于上述结果, 本研究选择 IRIV-GCNN 为樱桃番茄 GABA 含量的最佳预测模型, 其预测可视化结果见图 4, 校正集和预测集散点整体贴近 1:1 直线, 说明该模型预测误差较小, 拟合与预测能力较好。

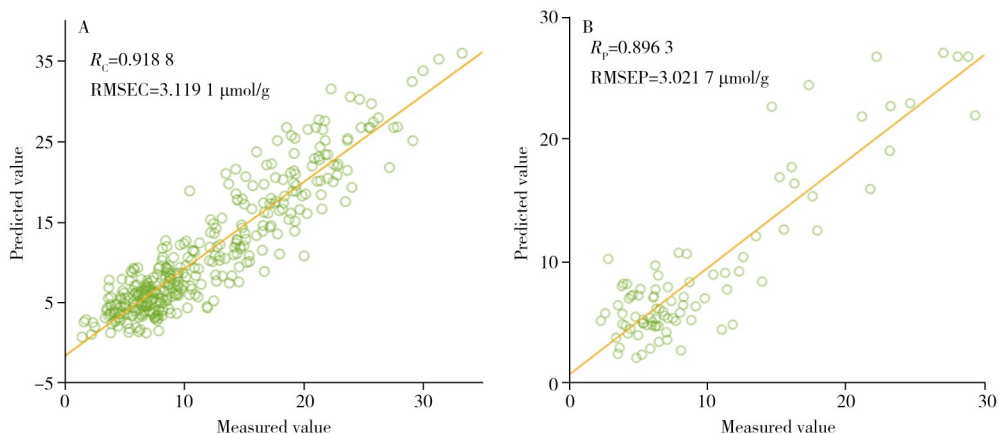


图 4 基于 IRIV-GCNN 建立的校正集预测模型(A)和预测集预测模型(B)的预测效果

Fig. 4 Prediction performance of the calibration set model(A) and the prediction set model(B) established by IRIV-GCNN

2.8 樱桃番茄 GABA 含量可视化

基于 IRIV-GCNN 建立的预测模型对樱桃番茄样本进行像素级建模, 并实现 GABA 含量的空间可视化, 结果见图 5。图 5A 展示了 5 个不同品种樱桃番茄的 RGB 图像, 仅用于辅助展示不同品种在果实颜色与形态上的外观差异; 图 5B 为基于 IRIV-GCNN 模型预测的 GABA 含量空间分布图。由图 5B 可见, 其空间分布特征亦呈现多样性, 这与统计分析基本一致, 不同品种 GABA 含量上的遗传背景差异, 也直接体现在图中整体颜色分布的明显区分上。其中, HLZ 表现为“整体含量高、局部高值集中、分布均匀”, QT 与 QT2 呈现“边缘有显著高值斑块、中心相对偏低”, 而 XRHH 与 FS88 则属“低值均匀分

布、边缘少数点状高值区域”型,这种品种上的空间结构差异可能与品种间遗传背景有关。5个品种的GABA含量整体上呈现边缘高、中心相对低的规律,可能与果实的代谢活动及组织结构密切相关。已有研究从多个层面为该现象提供了潜在的机制依据。GABA的合成主要依赖于谷氨酸脱羧酶(GAD)催化谷氨酸生成;番茄中两个关键的GAD基因(SIGAD2和SIGAD3)被证实与果实中GABA含量呈显著正相关^[28];而高分辨率的空间转录组研究发现,SIGAD3在番茄果皮的特定组织(如内表皮与维管束)中具有较高的表达水平^[29]。这表明GAD的空间表达差异,可能直接影响果实内不同区域GABA的积累能力,说明果实边缘区域具有更强的GABA合成潜力。此外,GABA的合成常受到盐胁迫、低氧、机械损伤等环境刺激诱导^[30],由于果皮部位直接暴露在外部环境中,相对于中心果肉更易受到应激因子的影响,所以更容易促进GABA的合成。综上所述,GAD基因的区域表达差异、果皮更强的应激感应能力共同构成了GABA在番茄果实中“边缘高、中心低”空间分布的重要生理基础。这一空间分布规律的生理基础与模型预测结果一致,进一步证明了IRIV-GCNN模型在GABA含量预测中的有效性与可靠性。

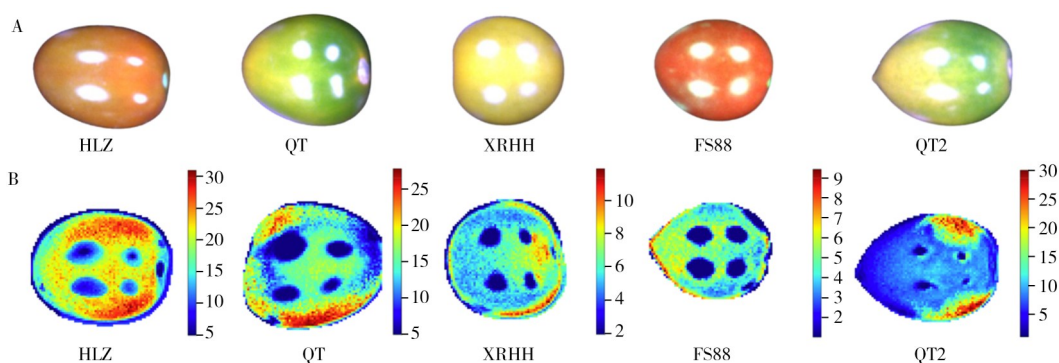


图5 不同品种樱桃番茄的RGB图像(A)及基于IRIV-GCNN模型的GABA含量预测可视化图(B)

Fig. 5 RGB images of five cherry tomato cultivars(A), and visualization maps of predicted GABA content based on the IRIV-GCNN model(B)

dark circular regions in the images correspond to specular reflections on the fruit surface, which distort hyperspectral signals and may reduce model prediction accuracy; hence, these regions do not indicate the true GABA concentration

3 结 论

本文通过近红外高光谱成像结合深度学习实现了樱桃番茄GABA含量的快速无损检测。基于IRIV波长的GCNN表现最佳(预测集 $R_p=0.896$, $RMSEP=3.022 \mu\text{mol/g}$, $RPD=2.25$),并能够进行GABA的可视化,揭示不同品种番茄及果实内GABA含量的空间差异。该方法为果蔬功能性品质的快速分级与规模化监测提供了无损检测技术路径。

参考文献:

- [1] Hou D Z, Tang J, Feng Q Q, Niu Z T, Shen Q, Wang L, Zhou S M. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.*, **2023**, 64(24): 8852-8874.
- [2] Koubaa M, Delbecq F, Roohinejad S, Mallikarjunan K. *Encycl. Food Chem.*, **2019**, 3: 528-534.
- [3] Hepsomali P, Groeger J A, Nishihira J, Scholey A. *Front. Neurosci.*, **2020**, 14: 559962.
- [4] Xu R J, Jiang C, Liu M C, Wang F F, Liu R. *Food Ind.* (许芮菁, 姜铖, 刘明川, 王飞飞, 刘锐.食品工业), **2025**, 46(2): 150-155.
- [5] Guo Z M, Sang W X, Yang C, Zou X B. *Packag. Food Mach.* (郭志明, 桑伟兴, 杨忱, 邹小波.包装与食品机械), **2024**, 42(5): 1-14.
- [6] Hu S Q, Hong W J, Xie J J, Zhou H R, Wang L, Zhou H B. *Food Meas.*, **2024**, 18: 8063-8077.
- [7] Laroche-Pinel E, Vasquez K R, Brillante L. *Precis. Agric.*, **2024**, 25: 2356-2374.
- [8] Wu L G, Ma L, Zhang Y, Tian Y, Zhu Y Z, Zhang Y Y. *J. Instrum. Anal.* (吴龙国, 马玲, 张瑶, 田雨, 朱彦哲, 张祎洋.分析测试学报), **2025**, 44(3): 454-463.
- [9] Ma L, Ma Q, Li Y J, Zhang Y Y, Wang J, Ma S Y, Ma Y, Du M H, Wu L G. *J. Instrum. Anal.* (马玲, 马倩, 李亚娇, 张祎洋, 王静, 马思艳, 马燕, 杜明华, 吴龙国.分析测试学报), **2023**, 42(2): 210-215.
- [10] Zhang L X, Nie P C, Zhang S J, Zhang L Y, Sun T Y. *Foods*, **2023**, 12(19): 3593.

- [11] Ma L, Du M H, Meng L, Yang T, Wu L G. *Jiangsu Agric. Sci.* (马玲, 杜明华, 孟露, 杨甜, 吴龙国. 江苏农业科学), **2023**, 51(11): 167–174.
- [12] Zhang T Y, Zhang X L, Liu S H, Lü P F, Song Y, Gao W W, Xue J L. *J. Nanjing Agric. Univ.* (张田煜, 张晓蕾, 刘少华, 吕鹏飞, 宋悦, 高维炜, 薛金林. 南京农业大学学报), **2025**: 1–11. <https://link.cnki.net/urlid/32.1148.S.20250318.1717.002>.
- [13] Ban Z J, Gao X X, Ma Y H, Zhang S, Fang C Y, Wang J B, Zhu Y. *Jiangsu J. Agric. Sci.* (班兆军, 高喧翔, 马肆恒, 张爽, 方晨羽, 王俊博, 朱艺. 江苏农业学报), **2024**, 40(8): 1446–1454.
- [14] Zhang F, Deng Z L, Tian Y W, Gao X, Wang K T, Xu Z Y. *J. Shenyang Agric. Univ.* (张芳, 邓照龙, 田有文, 高鑫, 王开田, 徐正玉. 沈阳农业大学学报), **2024**, 55(2): 231–239.
- [15] Zhou C X, Liu Y, Xia H F, Yang Y T. *J. Fore. Eng.* (周晨昕, 刘英, 夏海飞, 杨雨图. 林业工程学报), **2025**, 10(3): 146–153.
- [16] Viveros E L D, Gómez-Espinosa A, Escobedo C J A. *Agriculture*, **2024**, 14(3): 331.
- [17] Peng D D, Jin C, Wang J, Zhai Y N, Qi H N, Zhou L. *Microchem. J.*, **2024**, 201: 110521.
- [18] Tian Y, Sun J, Zhou X, Yao K S, Tang N Q. *J. Food Process. Preserv.*, **2024**, 46(4): e16414.
- [19] Cui J R, Zhang Y, Hao J, Ma Y, Men J L, Pan S B, Wu L G. *LWT*, **2024**, 206: 116585.
- [20] Lan W J, Xiao H, Bart N, Pieter V, Qin J W, Catherine M R, Benoit J, Tu K, Sylvie B, Pan L Q. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.*, **2024**, 24: 1–25.
- [21] Wang C Y, Liu B H, Liu L P, Zhu Y J, Hou J L, Liu P, Li X. *Artif. Intell. Rev.*, **2021**, 54(7): 5205–5253.
- [22] Tian H, Zhang L N, Li M, Wang Y, Sheng D J, Liu J, Wang C M. *Infrared Phys. Technol.*, **2018**, 95: 88–92.
- [23] Ye W X, Xu W, Yan T Y, Yan J K, Gao P, Zhang C. *Foods*, **2023**, 12(1): 132.
- [24] Wang X Y, Chen X D, Gong R G, Wang T, Huang Y. *J. Food Comp. Anal.*, **2025**, 140: 107243.
- [25] Chang Y L, Zhang X D, Wang C, Ma N, Xie J M, Zhang J. *Foods*, **2024**, 13(12): 1898.
- [26] Chu X L, Yuan H F, Lu W Z. *Prog. Chem.* (褚小立, 袁洪福, 陆婉珍. 化学进展), **2004**, (4): 528–542.
- [27] Wang T Y, Tan Y, Chen Y Z, Tan C. *J. Chem. Inf. Model.*, **2023**, 63(15): 4615–4622.
- [28] Akihiro T, Koike S, Tani R, Tominaga T, Watanabe S, Iijima Y, Aoki K, Shibata D, Ashihara H, Matsukura C, Akama K, Fujimura T, Ezura H. *Plant Cell Physiol.*, **2008**, 49(9): 1378–1389.
- [29] Shinozaki Y, Nicolas P, Fernandez-Pozo N, Ma Q, Evanich D J, Shi Y N, Xu Y M, Zheng Y, Snyder S I, Martin L B, Ruiz-May E, Thannhauser T W, Chen K S, Domozych D S, Catalá C, Fei Z J, Mueller L A, Giovannoni J J, Rose J K. *Nat. Commun.*, **2018**, 9(1): 364.
- [30] Gramazio P, Takayama M, Ezura H. *Front. Plant Sci.*, **2020**, 11: 577980.

(责任编辑: 丁 岩)