



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 114112981 A

(43) 申请公布日 2022. 03. 01

(21) 申请号 202010878139.1

(22) 申请日 2020.08.27

(71) 申请人 广东省林业科学研究院

地址 510000 广东省广州市天河区广汕一路233号

申请人 广东省林业科技推广总站

(72) 发明人 连辉明 伍观娣 何波祥 蔡燕灵

汪迎利 梁东成 叶龙华 张春花

莫云豹 李兵 侯晨

(74) 专利代理机构 北京高沃律师事务所 11569

代理人 杨媛媛

(51) Int. Cl.

G01N 21/359 (2014.01)

G01N 21/3563 (2014.01)

G01N 1/28 (2006.01)

权利要求书2页 说明书11页 附图6页

(54) 发明名称

一种阴香叶片精油含量快速检测方法及系统

(57) 摘要

本发明涉及一种阴香叶片精油含量快速检测方法及系统。该方法包括：采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据；将阴香个体叶片研磨制粉，获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线；将近红外光谱曲线进行预处理；将排除噪音干扰的近红外光谱数据分为校正集数据和验证集数据；根据精油含量数据和所述校正集数据，建立近红外阴香叶片精油含量预测模型；根据验证集数据对所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的准确性进行评价；将待预测阴香叶片研磨制粉，获取待预测阴香叶片粉末；将待预测阴香叶片粉末放入导入了近红外阴香叶片精油含量预测模型的近红外光谱仪中进行扫描，得到待测阴香叶片精油含量结果。本发明能够快速、高效、环保的得到阴香叶片精油含量数据。



1. 一种阴香叶片精油含量快速检测方法,其特征在于,包括:
  - 采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据;
  - 将所述阴香个体叶片研磨制粉,获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线;
  - 将所述近红外光谱曲线进行预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据;
  - 将所述排除噪音干扰的近红外光谱数据分为校正集数据和验证集数据;
  - 根据所述精油含量数据和所述校正集数据,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型;
  - 根据所述验证集数据对所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的准确性进行评价;
  - 将待预测阴香叶片研磨制粉,获取待预测阴香叶片粉末;
  - 将所述待预测阴香叶片粉末放入导入了所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的近红外光谱仪中进行扫描,得到待测阴香叶片精油含量结果。
2. 根据权利要求1所述的阴香叶片精油含量快速检测方法,其特征在于,所述采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据,具体包括:
  - 在实验室运用化学方法测定设定数量的阴香个体叶片精油含量数据。
3. 根据权利要求1所述的阴香叶片精油含量快速检测方法,其特征在于,所述将所述阴香个体叶片研磨制粉,获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线,具体包括:
  - 将所述设定数量的阴香个体叶片用硅胶干燥后,分别采用全自动样品快速研磨仪研磨制粉,得到多个单株阴香叶片粉末;
  - 通过近红外仪测量各所述阴香叶片粉末,得到多条近红外光谱曲线。
4. 根据权利要求1所述的阴香叶片精油含量快速检测方法,其特征在于,所述将所述近红外光谱曲线进行预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据,具体包括:
  - 采用一阶导数处理方法、卷积平滑处理方法和标准正态转换法组合法进行光谱预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据。
5. 根据权利要求1所述的阴香叶片精油含量快速检测方法,其特征在于,所述根据所述精油含量数据和所述校正集数据,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型,具体包括:
  - 对所述校正集数据中的异常样品数据进行剔除;
  - 根据所述精油含量数据和剔除异常样品数据后的校正集数据,采用偏最小二乘法,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型。
6. 一种阴香叶片精油含量快速检测系统,其特征在于,包括:
  - 精油含量数据采集模块,用于采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据;
  - 近红外光谱曲线获取模块,用于将所述阴香个体叶片研磨制粉,获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线;
  - 预处理模块,用于将所述近红外光谱曲线进行预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据;
  - 划分模块,用于将所述排除噪音干扰的近红外光谱数据分为校正集数据和验证集数据;
  - 预测模型建立模块,用于根据所述精油含量数据和所述校正集数据,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型;
  - 模型评价模块,用于根据所述验证集数据对所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的准确性进行评价;

粉末制造模块,用于将待预测阴香叶片研磨制粉,获取待预测阴香叶片粉末;

预测模块,用于将所述待预测阴香叶片粉末放入导入了所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的近红外光谱仪中进行扫描,得到待测阴香叶片精油含量结果。

7. 根据权利要求6所述的阴香叶片精油含量快速检测系统,其特征在于,所述精油含量数据采集模块,具体包括:

精油含量数据采集单元,用于在实验室运用化学方法测定设定数量的阴香个体叶片精油含量数据。

8. 根据权利要求6所述的阴香叶片精油含量快速检测系统,其特征在于,所述近红外光谱曲线获取模块,具体包括:

研磨制粉单元,用于将所述设定数量的阴香个体叶片用硅胶干燥后,分别采用全自动样品快速研磨仪研磨制粉,得到多个单株阴香叶片粉末;

近红外光谱曲线确定单元,用于通过近红外仪测量各所述阴香叶片粉末,得到多条近红外光谱曲线。

9. 根据权利要求6所述的阴香叶片精油含量快速检测系统,其特征在于,所述预处理模块,具体包括:

预处理单元,用于采用一阶导数处理方法、卷积平滑处理方法和标准正态转换法组合法进行光谱预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据。

10. 根据权利要求6所述的阴香叶片精油含量快速检测系统,其特征在于,所述预测模型建立模块,具体包括:

异常数据剔除单元,用于对所述校正集数据中的异常样品数据进行剔除;

预测模型建立单元,用于根据所述精油含量数据和剔除异常样品数据后的校正集数据,采用偏最小二乘法,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型。

## 一种阴香叶片精油含量快速检测方法及系统

### 技术领域

[0001] 本发明涉及阴香叶片精油含量检测领域,特别是涉及一种阴香叶片精油含量快速检测方法及系统。

### 背景技术

[0002] 天然右旋龙脑(亦称冰片、梅片)自古作为一种珍贵药材和名贵香料,广泛应用于医药、香料、化妆品和食品工业上。其药用主要功能是开窍醒神、清热止痛之功能,我国复方丹参滴丸、双料喉风散等六十多种中成药的重要成分。我国历史上不产天然右旋龙脑,依赖于从东南亚的印度尼西亚进口。阴香(*Cinnamomum burmannii*)是樟科樟属树种,在我国南方广泛分布。在上世纪70年代,我国科研人员发现阴香叶片提取的精油中含有右旋龙脑,这为我国冰片的自给自足开启的道路。近几年,我国天然右旋龙脑产业兴起,产业的发展急需生物量大、含油率高以及右旋龙脑含量高的良种作为支撑。

[0003] 龙脑型阴香良种选育首先是在自然界中寻找精油含量高的优良单株,然后再从中筛选精油中右旋龙脑含量高的单株。选育过程中需要完成大量单株精油的提取,以检测精油含量。传统的叶片精油含量检测方法是水蒸气蒸馏法。工作量大、效率低,寻找新的精油含量检测方法,加快龙脑型阴香良种选育,以推动生产的发展,成为科研和产业关注的重点。

[0004] 水蒸气蒸馏法是指将含有挥发性成分的植物材料与水共同蒸馏,使挥发性成分随水蒸气一并馏出,经冷凝后与水分层提取挥发性成分的浸提方法。该法适用于具有挥发性、能随水蒸气蒸馏而不被破坏、在水中稳定且难溶或不溶于水的植物活性成分的提取。操作方法是将盛有一定量水的漏斗置于克氏蒸馏头上,2000mL水和400-500g叶片放入蒸馏瓶中并置于热源上,装好冷凝管和接收瓶。将烧瓶中的水和待蒸馏的物质存在下加热至沸,产生蒸汽。当水蒸汽与化合物一起蒸出时,开通冷凝管进水,使得蒸汽经过冷凝管时凝结成液状后进入分液漏斗。蒸馏过程中,混浊液中油状物质与水因密度不同而分层,上层是目标物质精油,下层是水。分液漏斗液体将充满时,可以打开下部阀门放出底层水份。当蒸馏将近结束时,蒸出液由混浊变澄清。当被蒸物质全部蒸出后,蒸出液由混浊变澄清,此时可停止加热结束蒸馏,让馏出液在分液漏斗中静置5-15分钟,使油水完全分层,然后打开下部阀门慢速放出水份,接近油层时接上受器,快速让油层流出。少量的水份可用移液枪中受器中移出即可目标物质精油。整个过程视投料多少及不同物种,大约需要1-8个小时。蒸馏结束后,先去掉热源,拆下接受瓶后,再按顺序拆卸其它部分。

[0005] 检测所需仪器:电热套、圆底烧瓶(反应釜)、安全管、T型管、螺旋夹、导气管、玻璃塞、蒸馏弯头、冷凝管、分液漏斗、接液管、锥形瓶等。

[0006] 水蒸气蒸馏法的有如下几个缺点:

[0007] 1. 采样量大:一般材料需要大概400g以上的叶量,如果含油率低的物种,为了获得一定量的精油则需加大投量。

[0008] 2. 能耗大水耗高:蒸馏的热源是可控温的电热套,电热套容量在50-20000mL,其功

率一般在200W-3000W之间。以5000mL容量功率1500W蒸馏一次平均2小时计算需要用电3.0kW·h。

[0009] 3.耗水量大:在蒸馏过程中需要自来水冷凝蒸气,经测定每秒需进水30多mL,蒸馏1-2小时需耗水108-216kg。

[0010] 4.有机溶剂使用对环境有一定污染:蒸馏结束后,为减少检测误差,必须用酒精、丙酮或乙醚等有机溶剂对反应釜、冷凝管、分液漏斗、连接管等器物进行反复清洗2-3次,有机溶剂使用对环境有一定污染。

[0011] 5.操作烦琐:操作过程较为繁杂,从采样、进样、加水、连接导管、加热、放出底部冷凝水份、收集精油,以及后面为了避免试验误差,需要清洗整个蒸馏系统器具等等,整个过程需要专人看管,费时费工。

### 发明内容

[0012] 针对上述问题,本发明提供一种阴香叶片精油含量快速检测方法及系统。

[0013] 为实现上述目的,本发明提供了如下方案:

[0014] 一种阴香叶片精油含量快速检测方法,包括:

[0015] 采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据;

[0016] 将所述阴香个体叶片研磨制粉,获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线;

[0017] 将所述近红外光谱曲线进行预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据;

[0018] 将所述排除噪音干扰的近红外光谱数据分为校正集数据和验证集数据;

[0019] 根据所述精油含量数据和所述校正集数据,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型;

[0020] 根据所述验证集数据对所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的准确性进行评价;

[0021] 将待预测阴香叶片研磨制粉,获取待预测阴香叶片粉末;

[0022] 将所述待预测阴香叶片粉末放入导入了所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的近红外光谱仪中进行扫描,得到待测阴香叶片精油含量结果。

[0023] 可选地,所述采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据,具体包括:

[0024] 在实验室运用化学方法测定设定数量的阴香个体叶片精油含量数据。

[0025] 可选地,所述将所述阴香个体叶片研磨制粉,获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线,具体包括:

[0026] 将所述设定数量的阴香个体叶片用硅胶干燥后,分别采用全自动样品快速研磨仪研磨制粉,得到多个单株阴香叶片粉末;

[0027] 通过近红外仪测量各所述阴香叶片粉末,得到多条近红外光谱曲线。

[0028] 可选地,所述将所述近红外光谱曲线进行预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据,具体包括:

[0029] 采用一阶导数处理方法、卷积平滑处理方法和标准正态转换法组合法进行光谱预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据。

[0030] 可选地,所述根据所述精油含量数据和所述校正集数据,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型,具体包括:

- [0031] 对所述校正集数据中的异常样品数据进行剔除；
- [0032] 根据所述精油含量数据和剔除异常样品数据后的校正集数据，采用偏最小二乘法，建立近红外阴香叶片精油含量预测模型。
- [0033] 一种阴香叶片精油含量快速检测系统，包括：
- [0034] 精油含量数据采集模块，用于采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据；
- [0035] 近红外光谱曲线获取模块，用于将所述阴香个体叶片研磨制粉，获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线；
- [0036] 预处理模块，用于将所述近红外光谱曲线进行预处理，得到排除噪音干扰的近红外光谱数据；
- [0037] 划分模块，用于将所述排除噪音干扰的近红外光谱数据分为校正集数据和验证集数据；
- [0038] 预测模型建立模块，用于根据所述精油含量数据和所述校正集数据，建立近红外阴香叶片精油含量预测模型；
- [0039] 模型评价模块，用于根据所述验证集数据对所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的准确性进行评价；
- [0040] 粉末制造模块，用于将待预测阴香叶片研磨制粉，获取待预测阴香叶片粉末；
- [0041] 预测模块，用于将所述待预测阴香叶片粉末放入导入了所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的近红外光谱仪中进行扫描，得到待测阴香叶片精油含量结果。
- [0042] 可选地，所述精油含量数据采集模块，具体包括：
- [0043] 精油含量数据采集单元，用于在实验室运用化学方法测定设定数量的阴香个体叶片精油含量数据。
- [0044] 可选地，所述近红外光谱曲线获取模块，具体包括：
- [0045] 研磨制粉单元，用于将所述设定数量的阴香个体叶片用硅胶干燥后，分别采用全自动样品快速研磨仪研磨制粉，得到多个单株阴香叶片粉末；
- [0046] 近红外光谱曲线确定单元，用于通过近红外仪测量各所述阴香叶片粉末，得到多条近红外光谱曲线。
- [0047] 可选地，所述预处理模块，具体包括：
- [0048] 预处理单元，用于采用一阶导数处理方法、卷积平滑处理方法和标准正态转换法组合法进行光谱预处理，得到排除噪音干扰的近红外光谱数据。
- [0049] 可选地，所述预测模型建立模块，具体包括：
- [0050] 异常数据剔除单元，用于对所述校正集数据中的异常样品数据进行剔除；
- [0051] 预测模型建立单元，用于根据所述精油含量数据和剔除异常样品数据后的校正集数据，采用偏最小二乘法，建立近红外阴香叶片精油含量预测模型。
- [0052] 根据本发明提供的具体实施例，本发明公开了以下技术效果：
- [0053] 本发明技术利用近红外光谱分析技术，通过利用传统检测手段（水蒸气蒸馏法）获得样品数据，然后利用近红外光谱分析仪获得对应样品的近红外光谱曲线数据，再利用化学计量分析软件对数据进行处理优化，利用回归分析方法，建立阴香叶片精油含量与光谱曲线的回归模型，将所得模型导入近红外光谱仪。采集20克鲜叶，利用硅胶密封干燥后，将其研磨成粉，利用近红外光谱仪扫描，约1分钟即可快速、高效、环保的得到阴香叶片精油含

量数据。在高含油量阴香优良品系良种选育过程中,需要检测大量重复不同个体含油量,无疑可以节省大量的人力物力和财力。

### 附图说明

[0054] 为了更清楚地说明本发明实施例或现有技术中的技术方案,下面将对实施例中所需要使用的附图作简单地介绍,显而易见地,下面描述中的附图仅仅是本发明的一些实施例,对于本领域普通技术人员来讲,在不付出创造性劳动性的前提下,还可以根据这些附图获得其他的附图。

[0055] 图1为阴香叶片样品的NIR原始光谱图;

[0056] 图2为校正集样品的阴香叶片含油率分布图;

[0057] 图3为未剔除异常样品时阴香叶片精油含量近红外模型的建模结果示意图;

[0058] 图4为学生化残差图;

[0059] 图5为Y的杠杆值影响图;

[0060] 图6为X-Y的杠杆值影响图;

[0061] 图7为阴香叶片含油率近红外模型的RMSEV随主成分数变化图;

[0062] 图8为阴香叶片含油率近红外校正模型;

[0063] 图9为外部验证集阴香叶片含油率预测结果;

[0064] 图10为阴香叶片精油含量快速检测方法流程图;

[0065] 图11为阴香叶片精油含量快速检测系统结构图。

### 具体实施方式

[0066] 下面将结合本发明实施例中的附图,对本发明实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述,显然,所描述的实施例仅仅是本发明一部分实施例,而不是全部的实施例。基于本发明中的实施例,本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例,都属于本发明保护的范围。

[0067] 为使本发明的上述目的、特征和优点能够更加明显易懂,下面结合附图和具体实施方式对本发明作进一步详细的说明。

[0068] 近红外光谱(Near Infrared Spectra,简称NIRS)分析技术是20世纪80年代后期迅速发展起来的一项测试技术。该技术利用几乎所有有机物的一些主要结构和组成都可以在其近红外光谱中找到信号,且图谱稳定,获取光谱容易,因此也被誉为分析的巨人。该技术作为一项绿色、环保、高效的新型分析技术具有以下几个特点:样品不需特殊预处理,可进行快速、无损分析;适合在线(现场)分析、速度快;分析过程中不需要大量破坏性取样,不消耗化学试剂,不会造成污染,不会对检验者造成伤害。近年来,该项分析技术已经在农业、林业、医药、石油化工、纺织、造纸、化妆品、烟草、酿酒和宝石鉴定等诸多领域广泛应用。

[0069] 本发明技术利用近红外光谱分析技术,通过利用传统检测手段(水蒸气蒸馏法)获得样品数据,然后利用近红外光谱分析仪获得对应样品的近红外光谱曲线数据,再利用化学计量分析软件对数据进行处理优化,利用回归分析方法,建立阴香叶片精油含量与光谱曲线的回归模型,将所得模型导入近红外光谱仪。采集10-20克鲜叶干燥后,将其研磨成粉,利用近红外光谱仪扫描,约1分钟即可快速、高效、环保的得到阴香叶片精油含量数据。在高

含油量阴香优良品系良种选育过程中,需要检测大量重复不同个体含油量,无疑可以节省大量的人力物力和财力。

[0070] 图10为阴香叶片精油含量快速检测方法流程图。如图10所示,一种阴香叶片精油含量快速检测方法包括:

[0071] 步骤101:采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据,具体包括:

[0072] 在实验室运用化学方法测定设定数量的阴香个体叶片精油含量数据。

[0073] 进一步地,根据《中国药典》(2010版)中提供的水蒸汽蒸馏法对阴香叶片精油进行测定,测定98个植株的精油含量,其结果如表1所示:

[0074] 表1阴香样品的精油含量统计信息

样品数	最小值	最大值	平均值	标准差	变异系数
	/%	/%	/%	/%	/%
98	0.000	1.285	0.441	0.270	61.199

[0076] 由表1可以看出88份阴香叶片样品的精油含量变幅为0.00%~1.285%,平均值为0.442%,变异系数为62.227%,说明所取阴香叶片样品精油含量具有较大的代表性,可以用于建立模型。

[0077] 步骤102:将所述阴香个体叶片研磨制粉,获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线,具体包括:

[0078] 将所述设定数量的阴香个体叶片用硅胶干燥后,分别采用全自动样品快速研磨仪研磨制粉,得到多个单株阴香叶片粉末。

[0079] 通过近红外仪测量各所述阴香叶片粉末,得到多条近红外光谱曲线。

[0080] 进一步地,采用近红外分析仪对样品叶片粉末时行近红外光谱扫描:将20g阴香叶片放入装有200g硅胶的密封袋中,静置24小时以上,约除去叶片重量50%的水分时,用研磨仪(型号:JXFSTPRP-24L,国产)对干燥叶片进行磨粉,取出来迅速装入近红外仪(型号DA7250,瑞典)样品盘中,用塑料直尺轻轻刮平表面,然后进行近红外扫描,获得近红外光谱曲线。所采用的近红外光谱数据的采集条件为:测样方式为漫反射,光斑直径为3.5cm,光谱扫描范围为950nm-1650nm,分辨率为5nm,环境温度控制在22~23℃,环境湿度控制在30%~70%,每一个样品都采用扫描3次和重复装样3次取平均的光谱收集方式,获得阴香叶片样品的近红外(NIR)光谱数据如图1所示。

[0081] 步骤103:将所述近红外光谱曲线进行预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据,具体包括:

[0082] 采用一阶导数处理方法、卷积平滑处理方法和标准正态转换法组合法进行光谱预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据。

[0083] 挑选精油含量范围内符合正态分布的数据,通过一阶导数处理+卷积平滑+标准正态转换的组合方法预处理消除随机噪声的同时提高光谱信噪比。

[0084] 步骤104:将所述排除噪音干扰的近红外光谱数据分为校正集数据和验证集数据。

[0085] 将光谱曲线数据导入UNSCRAMBLE(X10.4)化学计量软件中,将个体数据分成校正集和验证集两部分。校正集样品的样本性质具有代表性,要尽可能覆盖待测样品的性质参



数或组分范围而且服从正态分布。校正集用于模型建立,验证集用于模型验证。

[0086] 将样品集分为校正样品集和外部验证样品集两部分:依据随机选取的方法在98个阴香叶片样品中10个样品作为外部验证集,其余88个样品作为本次实验的建模校正集,各样品集的具体统计信息如表2所示:

[0087] 表2阴香叶片精油含量两个样品集统计信息

样品集	样品数	最小值/%	最大值/%	平均值/%	标准差/%	变异系数/%
校正集	82	0.000	0.9125	0.395	0.217	54.923
验证集	10	0.115	0.672	0.4072	0.230	56.43

[0089] 从表2中可以看出校正集和外部验证集样品的油含量分布范围比较广,代表性较强,并且校正集的阴香叶片精油含量范围大于外部验证集。

[0090] 从图2中可以看出所选择的校正集样品的精油含量的偏度Skewness数值为0.9509,小于1,说明建模的阴香校正集样品基本符合正态分布,可以用于建立阴香呈片精油含量的近红外模型。

[0091] 步骤105:根据所述精油含量数据和所述校正集数据,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型,具体包括:

[0092] 对所述校正集数据中的异常样品数据进行剔除。

[0093] 根据所述精油含量数据和剔除异常样品数据后的校正集数据,采用偏最小二乘法,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型。

[0094] 在利用校正样品集的数据建立校正模型时,对异常样品进行剔除,提高校正模型的精度,异常样品的剔除方法为:利用化学计量学软件The Unscrambler(X10.4)中的杠杆值影响图和学生化残差功能对异常样品判断,剔除分布异常的样品数据,利用剔除异常样品后剩余的校正集样品数据进行建模,反复操作,直至所建模型的相关系数较剔除前得到提高,交互验证方根误差较剔除前得到降低。建立校正模型过程中,采用交互验证集的均方根误差RMSEV最小的原则来确定模型的最佳主成分数。

[0095] 对异常样品进行剔除,提高校正模型的精度:将校正样品集中样品的原始光谱数据转化为JCAMP-DX的格式导入The UnscramblerX(10.4)软件中,然后将阴香叶片精油含量数据与相对应的样品的近红外光谱数据进行关联,采用偏最小二乘法(PLS)结合交互验证法(cross-validation)建立模型。图3为未剔除异常样品时阴香叶片精油含量近红外模型的建模结果示意图,结果表明在未剔除异常样品前所建模型的校正集相关系数仅为0.9544,方根误差为0.1728,满足实际预测的需要仍有一定差距,所以考虑对异常样品进行剔除。

[0096] 利用化学计量学软件The UnscramblerX(10.4)中的杠杆值影响图和学生化残差功能对异常样品判断,如附图4、图5、图6所示。经过分析,自阴香校正样品集中共剔除6个异常样品,利用剩余的82个样品建立阴香叶片精油含量近红外模型。

[0097] 最佳主成分数确定:根据交互验证集的均方根误差RMSEV最小的原则来确定最佳主成分数。由图7可以看出,阴香叶片精油含量近红外模型的RMSEV随着主成分数的增加呈现出一直降低的趋势,另外由表3看出,当主成分数为20时,其模型所对应的RMSEV最小,所以根据RMSEV越小则模型的预测能力越强的原则,建模所选择的最佳主成分数为20。

[0098] 表3不同主成分数下阴香叶片精油含量PLS建模结果

主成分数	校正集	交互验证集	校正集	交互验证集
	相关系数	相关系数	均方根误差	均方根误差
[0099] 1	0.2307	0.1523	0.2645	0.2698
5	0.4520	0.1863	0.2424	0.2768
19	0.9661	0.8151	0.0701	0.1648
20	0.9723	0.8330	0.0635	0.1564

[0100] 步骤106:根据所述验证集数据对所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的准确性进行评价。

[0101] 步骤106用统计量校正集RC(相关系数)、RMSECV(均方根误差)和验证集的RC(相关系数)、RMSEP(预测均方根误差)对模型准确性作出评价。

[0102] 进一步地,采用内部交互验证法和外部验证法,利用未参与建模的10个外部验证集样品对步骤105所校正建模的准确性进行验证和评价,结果如下:图9为利用所建立的阴香叶片精油含量近红外校正模型(图8所示)对10个外部验证集阴香样品的阴香叶片精油含量进行预测的结果。在去除2个预测超限的异常样品后,余下8个阴香样品的精油含量常规测定值与模型预测值的统计分析结果如表4所示,结果表明模型的预测值与常规测定值之间的绝对误差不超过0.2422%,其相关系数为0.7728,预测均方根误差为0.1281,比较接近于校正集均方根误差0.0635,另外对于给定的显著性水平0.05,将8个外部验证集样品的阴香叶片精油含量常规测定值与模型的预测值进行成对数据配对T检验,结果表明两者之间差异不显著( $P=0.5506>0.05$ ),说明该模型的预测准确度较高,可以对未知精油含量的阴香叶片样品进行实际预测。

[0103] 表4阴香叶片外部验证集精油含量常规测定值与模型预测值的统计分析

样品号	预测值	实测值	绝对误差	样品号	预测值	实测值	绝对误差
	/%	/%	/%		/%	/%	差/%
[0104] 165	0.2678	0.51	0.2422	168	0.5177	0.6725	0.1548
125	0.3941	0.5325	0.1384	80	0.3128	0.135	-0.1778
104	0.7109	0.568	-0.1429	210	0.1474	0.175	0.0276
107	0.5124	0.583	0.0706	187	0.4703	0.6225	0.1522

[0105] 步骤107:将待预测阴香叶片研磨制粉,获取待预测阴香叶片粉末。

[0106] 进一步地,自然界中采集阴香样叶,每株20g,同样使用硅胶干燥24小时后,此时样叶约剩下原重一半,即干燥剂吸收50%左右的水分,用研磨仪研磨制粉,将粉装入近红外仪样本盘,轻轻用塑料直尺将样粉刮平表面,获取待预测阴香叶片粉末的近红外光谱曲线。

[0107] 步骤108:将所述待预测阴香叶片粉末放入导入了所述近红外阴香叶片精油含量预测模型近红外光谱仪中进行扫描,得到待测阴香叶片精油含量结果。

[0108] 在预测时,对于待测的阴香,采集其叶片样品,以近红外光谱仪扫描叶片粉末的近红外光谱图,将采集到的特征光谱数据输入到预测模型中,即可得到该待测阴香叶片的精油含量预测值。

[0109] 图11为阴香叶片精油含量快速检测系统结构图。如图11所示,一种阴香叶片精油含量快速检测系统包括:

[0110] 精油含量数据采集模块201,用于采集设定数量的阴香个体叶片的精油含量数据。

[0111] 近红外光谱曲线获取模块202,用于将所述阴香个体叶片研磨制粉,获取阴香叶片粉末的近红外光谱曲线。

[0112] 预处理模块203,用于将所述近红外光谱曲线进行预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据。

[0113] 划分模块204,用于将所述排除噪音干扰的近红外光谱数据分为校正集数据和验证集数据。

[0114] 预测模型建立模块205,用于根据所述精油含量数据和所述校正集数据,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型。

[0115] 模型评价模块206,用于根据所述验证集数据对所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的准确性进行评价。

[0116] 粉末制造模块207,用于将待预测阴香叶片研磨制粉,获取待预测阴香叶片粉末。

[0117] 预测模块208,用于将所述待预测阴香叶片粉末放入导入了所述近红外阴香叶片精油含量预测模型的近红外光谱仪中进行扫描,得到待测阴香叶片精油含量结果。

[0118] 所述精油含量数据采集模块201,具体包括:

[0119] 精油含量数据采集单元,用于在实验室运用化学方法测定设定数量的阴香个体叶片精油含量数据。

[0120] 所述近红外光谱曲线获取模块202,具体包括:

[0121] 研磨制粉单元,用于将所述设定数量的阴香个体叶片用硅胶干燥后,分别采用全自动样品快速研磨仪研磨制粉,得到多个单株阴香叶片粉末。

[0122] 近红外光谱曲线确定单元,用于通过近红外仪测量各所述阴香叶片粉末,得到多条近红外光谱曲线。

[0123] 所述预处理模块203,具体包括:

[0124] 预处理单元,用于采用一阶导数处理方法、卷积平滑处理方法和标准正态转换法组合法进行光谱预处理,得到排除噪音干扰的近红外光谱数据。

[0125] 所述预测模型建立模块205,具体包括:

[0126] 异常数据剔除单元,用于对所述校正集数据中的异常样品数据进行剔除。

[0127] 预测模型建立单元,用于根据所述精油含量数据和剔除异常样品数据后的校正集数据,采用偏最小二乘法,建立近红外阴香叶片精油含量预测模型。

[0128] 本发明的检测方法具有以下优点:

[0129] A. 采样少:传统蒸馏技术需要鲜叶400克以上,本技术仅需20克,对植物损伤小;

[0130] B. 能耗低:传蒸馏1个样需耗水108kg,耗电约3.0kW·h,本发明不需耗水,耗电量极少;

[0131] C. 检测速度快高效:传统蒸馏技术检测1个样需2-6小时不等,本发明鲜叶采下

后用硅胶干燥去水后,研磨制粉约1分钟,然后装入近红外样品盘扫描约1分钟可出结果。

[0132] D. 环保:节水、电耗低、产生废叶少,不需要有机溶剂清洗器具。

[0133] 实施例1:

[0134] 2019年3月进行建模并对模型进行验证,从88个单株数据中剔除6个数据异常个体。利用82个单株实测与近红外光谱数据,应用近红外光谱技术结合偏最小二乘法建立了阴香叶片精油含量的预测模型。通过选择不同的光谱区间、不同的光谱数据预处理方法和不同的主成分数对所建预测模型进行比较分析,结果表明选择全波段光谱、一阶导数处理(FD)加卷积平滑法(SG)加标准正态变换法(SNV)相结合的光谱预处理法和主成分数为8时所建的阴香精油含量预测模型的效果最佳,其校正集相关系数和交互验证集相关系数分别为0.9454和0.8246。校正集均方根误差和交互验证集均方根误差分别为0.0635和0.1564。认为本模型可以满足对未知样品进行快速预测的要求。得到阴香叶片精油评价指标如下表5。

[0135] 表5阴香叶片精油含量近红外预模型准确性评价

预处理方法	主成分数	校正集		验证集	
		R <sub>c</sub>	RMSEC	R <sub>v</sub>	RMSEV
FD+SG+SNV	20	0.9454	0.0635	0.8246	0.1564

[0137] 实施例2:

[0138] 2019年10月进行对模型进行实际应用验证,在梅州市梅县区采集16个无性系,每个无性系1个单株,分别采用传统蒸馏实测和所建模型预测16个阴香单株叶片精油含量,结果显示预测值与实测值之间具有较好的相关性,其相关系数R为0.9247,预测均方根误差RMSE为0.2683。采用SAS软件对于给定的显著性水平0.05,将模型的预测结果与实测值进行配对T检验,结果表明两者差异不显著( $t=0.53, P=0.5978>0.05$ ),说明该模型的预测准确度较高。结果如表6。

[0139] 表6阴香叶片精油含量近红外预模型实际应用结果

样品号	实测 出油率 /%	预测 出油率 /%	绝对 误差	样品号	实测 出油率 /%	预测 出油率 /%	绝对 误差
CB434	0.78	0.96	0.18	CB652	0.83	1.44	0.61
CB743	2.53	2.31	-0.22	CB674	0.34	0.21	-0.13
[0140] CB450	0.84	1.03	0.19	CB679	0.52	0.36	-0.16
CB713	0.10	0.34	0.24	CB662	0.63	0.97	0.35
CB669	0.39	0.55	0.17	CB723	1.14	1.72	0.58
CB525	0.30	0.18	-0.12	CB647	0.25	0.36	0.12
CB544	0.11	0.07	-0.04	CB665	0.18	0.26	0.09
CB613	0.27	0.46	0.19	CB666	0.20	0.08	-0.12

[0141] 实施例3:

[0142] 2019年11月进行对模型进行实际应用验证,在梅州市平远县采集12个阴香单株叶片样品,同样分别采用传统蒸馏实测和所建模型预测其精油含量,结果显示预测值与实测值之间具有较好的相关性,其相关系数R为0.8936,预测均方根误差RMSE为0.1656。采用SAS软件对于给定的显著性水平0.05,将模型的预测结果与实测值进行配对T检验,结果表明两者差异不显著( $t=0.33, P=0.7421>0.05$ ),说明该模型的预测准确度较高。结果如表7。

[0143] 表7阴香叶片精油含量近红外预模型实际应用结果

样品号	实测出	预测出	绝对	样品号	实测出	预测出	绝对
	油率/%	油率/%	误差		油率/%	油率/%	误差
PY001	0.62	0.48	-0.1350	PY007	0.74	0.92	0.1800
PY002	0.09	0.21	0.1225	PY008	0.54	0.77	0.2275
[0145] PY003	0.30	0.45	0.1525	PY009	1.27	1.35	0.0825
PY004	0.35	0.38	0.0325	PY010	0.28	0.46	0.1825
PY005	0.04	0.11	0.0700	PY011	0.17	0.33	0.1625
PY006	0.27	0.05	-0.2225	PY012	0.67	0.41	-0.2575

[0146] 实施例4:

[0147] 2020年5月进行对模型进行实际应用验证,在广州市天河区采集6个阴香单株叶片样品,同样分别采用传统蒸馏实测和所建模型预测其精油含量,结果显示预测值与实测值之间具有较好的相关性,其相关系数R为0.9147,预测均方根误差RMSE为0.2421。采用SAS软件对于给定的显著性水平0.05,将模型的预测结果与实测值进行配对T检验,结果表明两者差异不显著( $t=1.13, P=0.2712>0.05$ ),说明该模型的预测准确度较高。结果如表8。

[0148] 表8阴香叶片精油含量近红外预模型实际应用结果

样品号	实测出油率/%	预测出油率/%	绝对误差	样品号	实测出油率/%	预测出油率/%	绝对误差
GZ001	0.7750	0.9800	0.2050	GZ007	0.4975	0.3600	-0.1375
GZ002	0.2325	0.3600	0.1275	GZ008	0.2650	0.3300	0.0650
GZ003	0.3700	0.4500	0.0800	GZ009	1.2200	1.6000	0.3800
GZ004	0.1875	0.6600	0.4725	GZ010	0.2025	0.3600	0.1575
GZ005	0.0475	0.2200	0.1725	GZ011	0.1225	0.1800	0.0575
GZ006	0.0525	0.1300	0.0775	GZ012	0.3350	0.7500	0.4150

[0150] 本说明书中各个实施例采用递进的方式描述,每个实施例重点说明的都是与其他实施例的不同之处,各个实施例之间相同相似部分互相参见即可。对于实施例公开的系统而言,由于其与实施例公开的方法相对应,所以描述的比较简单,相关之处参见方法部分说明即可。

[0151] 本文中应用了具体个例对本发明的原理及实施方式进行了阐述,以上实施例的说明只是用于帮助理解本发明的方法及其核心思想;同时,对于本领域的一般技术人员,依据本发明的思想,在具体实施方式及应用范围上均会有改变之处。综上所述,本说明书内容不应理解为对本发明的限制。

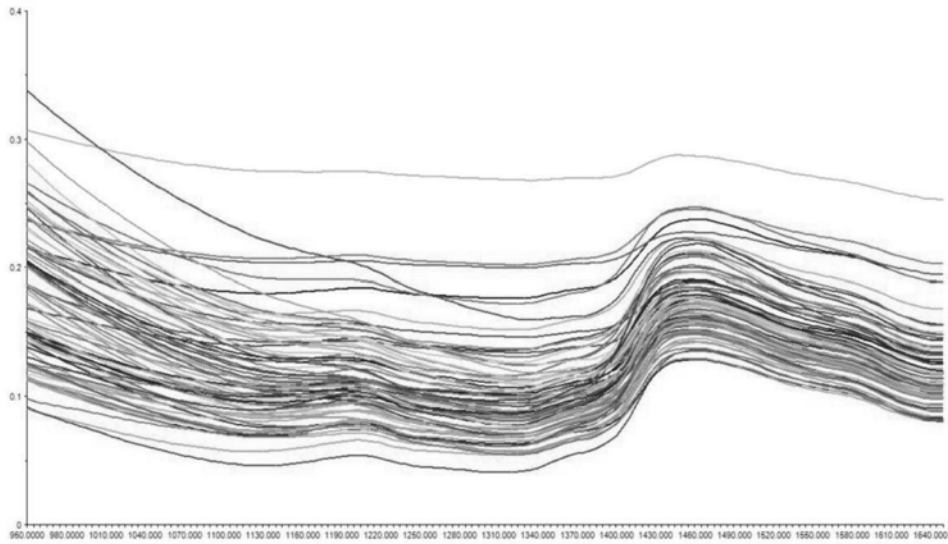


图1

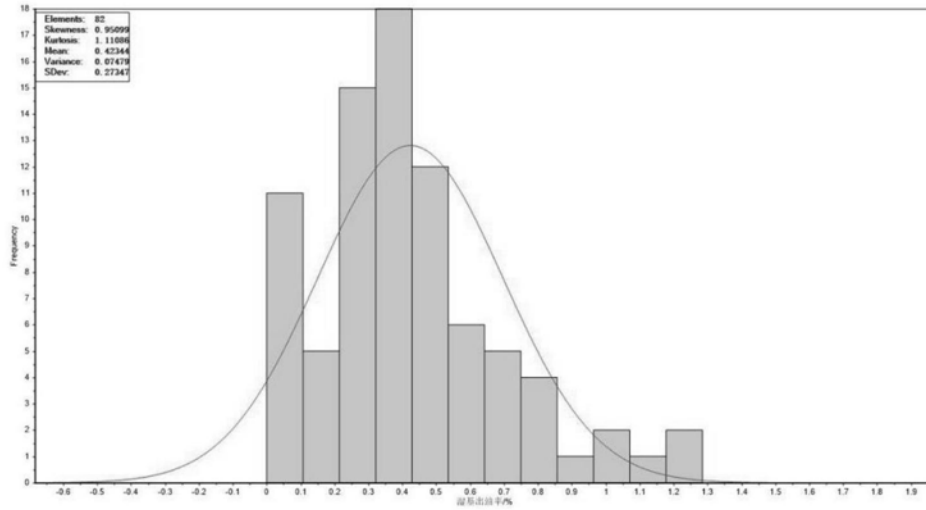


图2

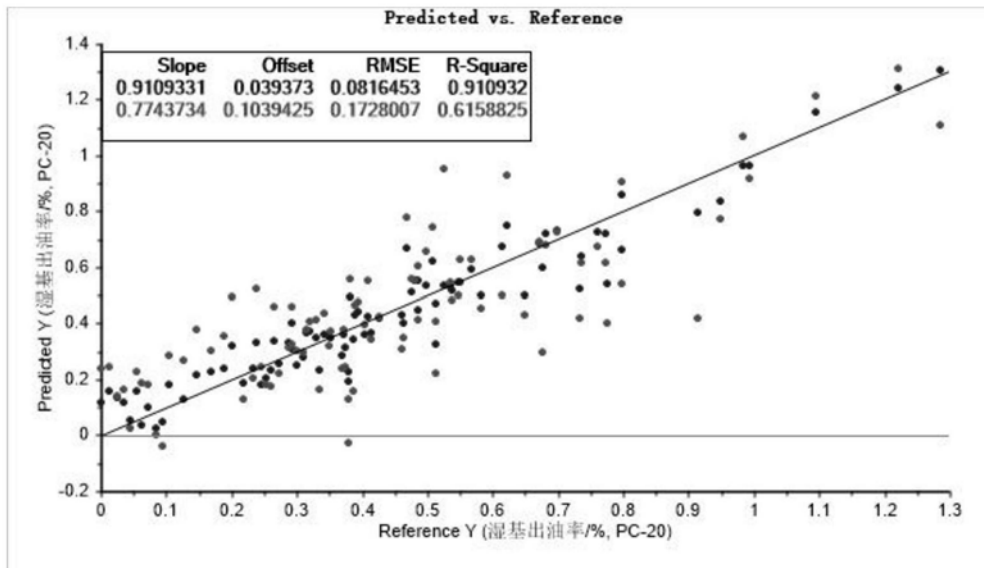


图3

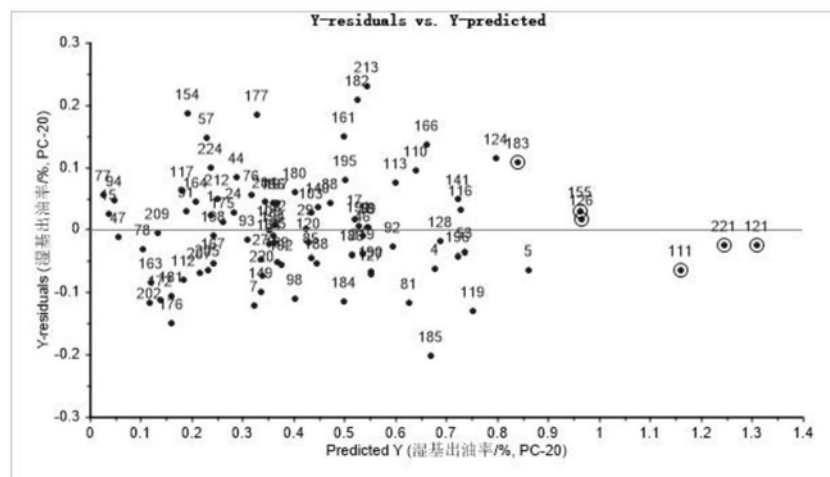


图4



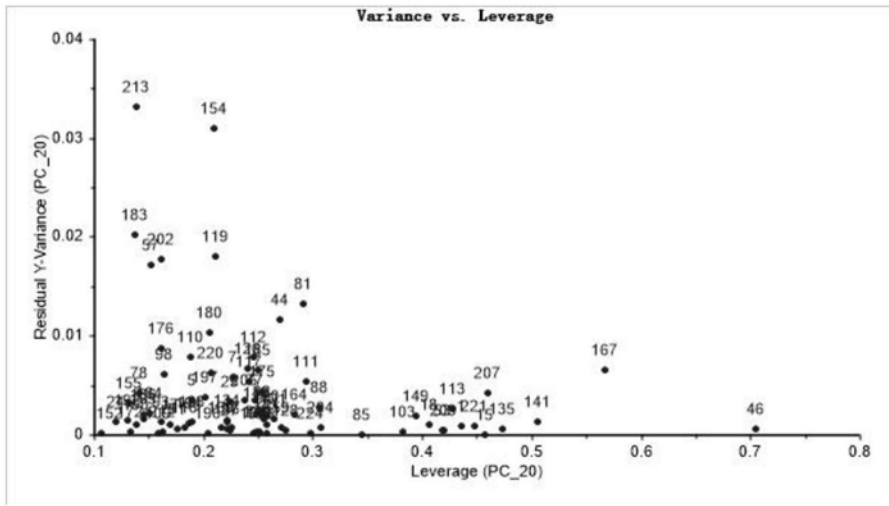


图5

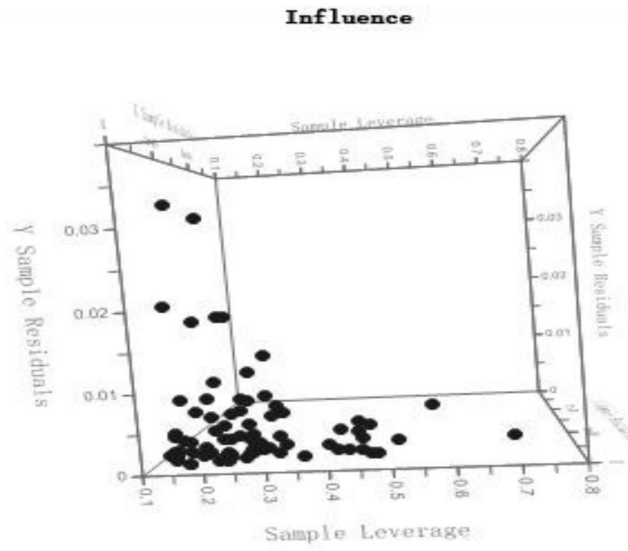


图6

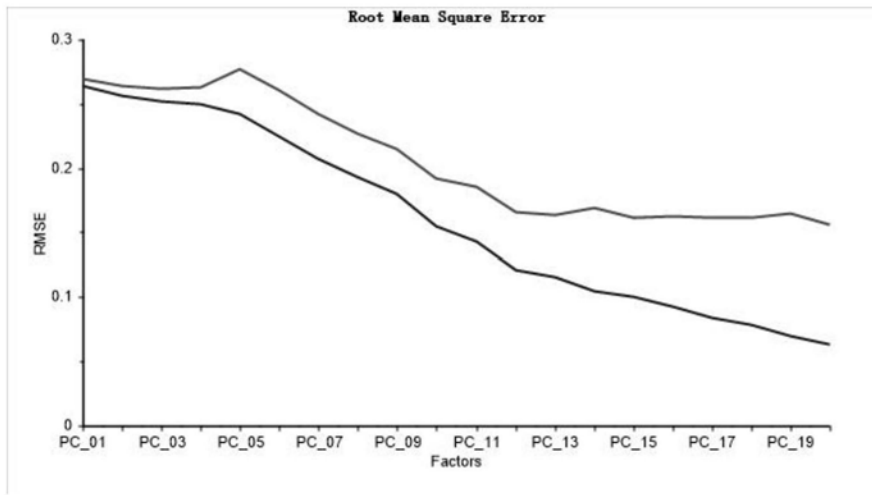


图7

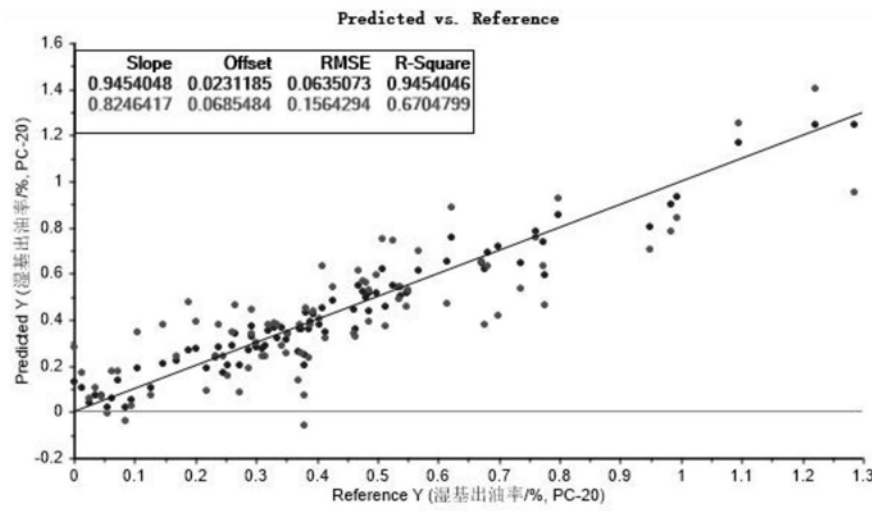


图8

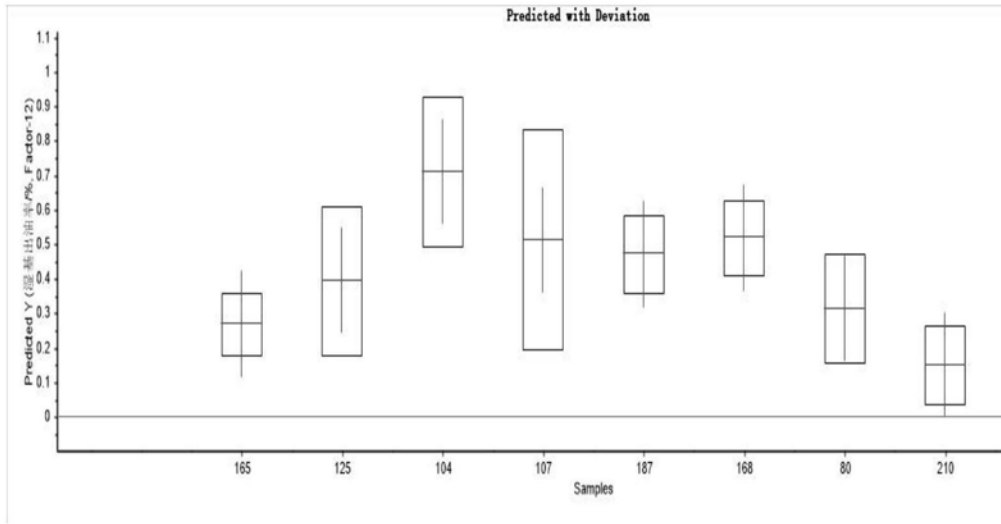


图9

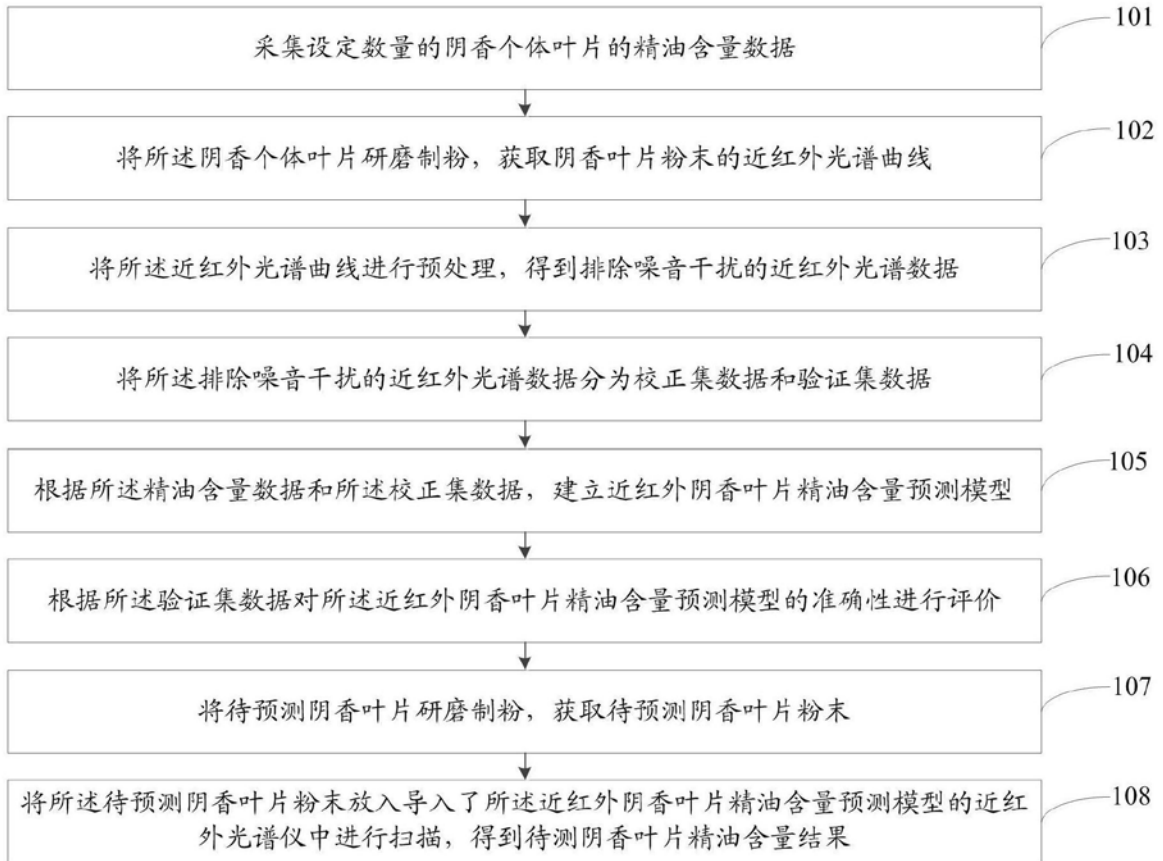


图10



图11