



质量快检特性数据采集与分析实验项目设计

张正勇

(南京财经大学 管理科学与工程学院, 南京 210023)

摘要: 该文设计了一个面向质量管理工程专业学生的综合快检实验。实验以便携式光谱快速采集样品质量特性数据, 运用质量统计工具和智能学习算法实现数据快速分析和规律揭示。通过拉曼光谱仪照射乳品获得样品的散射特征信号, 每个实验样品数据采集仅需 60 s。选取特征峰值, 结合质量统计控制分析工具绘制样品质量控制图, 可描述样品质量波动情况。运用极限学习机算法结合数据预处理方法, 优化实现样品品牌快速判别, 识别率可达 97.3%, 算法运行时间仅需 1 s。

关键词: 实验教学; 质量快检; 质量控制; 质量分析; 智能识别

中图分类号: G642.0; TU201.2

文献标志码: A

DOI: 10.12179/1672-4550.20230445

Design of an Experimental Project for Data Collection and Analysis of Quality Rapid Inspection Characteristics

ZHANG Zhengyong

(School of Management Science and Engineering, Nanjing University of Finance and Economics, Nanjing 210023, China)

Abstract: A comprehensive rapid inspection experiment for students majoring in quality management engineering is designed. The experiment uses a portable spectrometer to quickly collect sample quality characteristic data, and then uses a quality statistical tool and an intelligent learning algorithm to achieve rapid data analysis and pattern revelation. By irradiating dairy products with a Raman spectrometer, scattering characteristic signals of the samples are obtained, and the data collection for each experimental sample only takes 60 seconds. Feature peaks are selected and quality statistical control analysis tools are used to draw a sample quality control chart, which can describe the fluctuation of sample quality. Furthermore, by combining an extreme learning machine algorithm with data preprocessing methods, the rapid identification of sample brands can be optimized, with a recognition rate of 97.3% and an algorithm running time of only 1 s.

Key words: experimental teaching; quick quality inspection; quality control; quality analysis; intelligent recognition

质量管理工程专业是服务国家质量强国战略的重要人才供给, 以培养熟悉质量经济与管理、标准化与体系认证、质量数据统计、计量检验检测等相关理论与方法, 具备分析和解决产品质量、服务质量、工程质量相关领域问题能力的复合应用型人才为目标^[1-3]。质量快检实验作为本专业的一门实验实践课程, 旨在通过实验项目训练强化学生对质量检验概念的理解、质量分析工具的使用、质量创新能力的培养, 促进学生对理论课程知识的融会贯通, 以及锻炼实践动手技能。较之传统的质量检验方法, 该课程更加强调面向

时代需求的快速检测技术^[4-5]。

当前, 南京财经大学正着力实施“财经底色”“粮食特色”“工科亮色”“文体增色”4大特色工程建设。围绕学校和专业人才培养目标, 本实验通过食品质量快检特性数据采集与分析, 开展了实验项目设计与实践研究工作。

1 实验教学设计

从质量控制与分析的角度, 质量的概念被赋予统计的内涵, 即质量与可变性成反比。采用质量特性值对质量进行描述表征, 以快速检测表征

收稿日期: 2023-09-19

基金项目: 南京财经大学教学改革项目(JGY202270, JGZ2023003, JGY2023081); 南京财经大学高等教育及改革发展研究项目(GJGF202136); 南京财经大学《仪器分析概论》产教融合一流课程建设项目(南财教字[2023]88号); 江苏省高等教育学会高校实验室研究委员会项目(GS2022BZZ19); 江苏高校“青蓝工程”资助项目(苏教师函[2021]11号)。

作者简介: 张正勇, 博士, 副教授, 主要从事质量管理工程实验教学研究。E-mail: zyzzhang@nufe.edu.cn

工具获得对象的质量特性数据，如反映食品的理化属性。进一步结合质量统计分析工具和智能学习算法实现质量数据快速分析和规律揭示^[6-9]。本文以乳品质量分析为实验项目展开教学设计与论证，以拉曼光谱仪为检测工具采集乳品表征信息，随后开展质量特性数据的统计控制图分析、极限学习机智能识别等处理，并结合判别规则进行结果讨论。

根据实验教学设计，学生通过本实验训练将达到以下实践目的：

1) 进一步深入理解质量的统计内涵，理解质量特性与可变性的辩证关系；

2) 通过质量表征工具拉曼光谱仪的测试练习，掌握快检设备的操作使用；

3) 通过质量特性数据的分析处理练习，掌握控制图的绘制与判断，掌握极限学习机算法的软件编程各项操作；

4) 培养同学查阅相关文献、进行数据挖掘、解决类似问题的基本能力，理解现代智能质量快检发展趋势，为后续开展科学探索、毕业论文设计与实施夯实基础。

2 实验方法

2.1 实验材料与设备

实验用乳品均购置于南京苏果超市，原味口味，选取了3个品牌，分别标记为品牌 α 、品牌 β 和品牌 γ ，每个品牌25个样品，共计75个样品。便携式拉曼光谱仪为美国Enwave Optronics公司的Prott-ezRaman-D3。

2.2 质量快检特性数据采集

打开拉曼光谱仪，设置测试参数：激光波长750 nm、激光功率450 mW、电荷耦合元件探测器工作温度-85 ℃。而后分别取适量乳品样品置于96孔板小孔内，将拉曼光谱仪激光检测探头置于样品上方，照射60 s，收集各样品的拉曼光谱表征信号，光谱范围为250~2 000 cm^{-1} ，光谱分辨率为1 cm^{-1} 。

2.3 质量快检特性数据处理

实验采集的拉曼光谱数据采用Origin软件(美国OriginLab公司)进行可视化谱图绘制，控制图计算及图像绘制使用Minitab软件(美国Minitab公司)，小波降噪、数据归一化、主成分分析与极限学习机算法处理及图像绘制使用MATLAB软件

(美国MathWorks公司)。

3 结果与讨论

3.1 乳品拉曼光谱质量特性数据解析

实验采集的3个品牌乳品拉曼光谱图如图1所示，通过查阅文献可以对图示中的各个主要谱峰进行物质振动归属解析^[10-12]。如与糖类有关的拉曼谱峰主要包括856 cm^{-1} 、1079 cm^{-1} 和1142 cm^{-1} ，其中856 cm^{-1} 主要可归属C—C—H变形振动和C—O—C变形振动，1079 cm^{-1} 和1142 cm^{-1} 主要可归属于C—O—H变形振动、C—O伸缩振动以及C—C伸缩振动。与脂肪有关的拉曼谱峰主要有1313 cm^{-1} 和1763 cm^{-1} ，其中1313 cm^{-1} 主要源自脂肪酸的—CH₂扭曲振动，1763 cm^{-1} 主要源自C=O伸缩振动。与蛋白质有关的拉曼谱峰出现在1020 cm^{-1} ，其主要源自苯丙氨酸的环振动，即环内C—C对称伸缩振动。最高拉曼谱峰出现在1460 cm^{-1} ，主要来自糖类和脂肪分子—CH₂变形振动，此外，拉曼谱峰1670 cm^{-1} 则主要来自蛋白质的酰胺I键C=O伸缩振动和不饱和脂肪酸C=C伸缩振动。据此，学生可以发现实验采集的样品各拉曼谱峰与其物质组成间有着紧密的对应关系，乳品的营养成分主要是脂肪、糖类和蛋白质。拉曼光谱是一种表征分子振动能级变化的散射光谱，因此表征数据展现了乳品各组成物质分子特征振动，在一定程度上反映了乳品的理化质量特性。同时，由图示可见，尽管这些乳品来自3个不同生产厂家，且各品牌乳品的营养组分配比有少许差异，但3个品牌乳品的拉曼光谱质量特性数据非常相似，仅凭视觉难以进行质量区分。

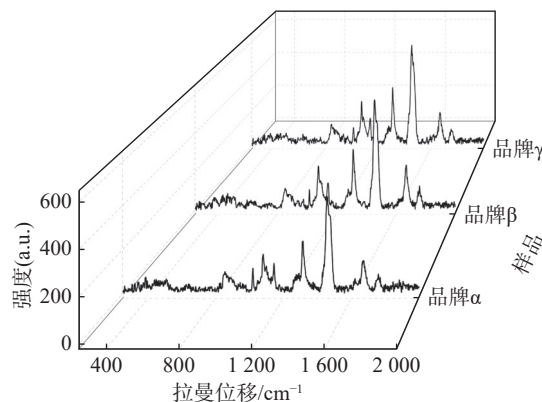


图1 乳品拉曼光谱图

3.2 质量特性数据控制图分析

实验基于品牌 α 乳品拉曼光谱质量特性数据，选取了最高峰 1460 cm^{-1} 所对应的信号强度值为特征输入，借助单值移动极差控制图方法，计算并绘制了品牌 α 的质量控制图，如图 2 所示。通过该控制图可以在一定程度上反映样品的质量波动情况，如品牌 α 乳品单值控制图，图示中上控制限 (upper control limit, UCL) 为 601.9；中心线 (centre line, CL) 为 411.3，即图中 \bar{X} 均值或 \overline{MR} 移动极差值；下控制限 (lower control limit, LCL) 为 220.7。可以看出，品牌 α 的各个乳品样品除 1 个落于下控制限外，其余均位于控制限内，整体围绕中心线波动。移动极差控制图显示品牌 α 的各个乳品样品均位于控制限内，围

绕中心线上下波动，结合单值移动极差控制图判断规则及未发现明显质量变异因素，可粗略认为品牌 α 乳品样品处于可控的质量波动^[13-14]。此外，实验还进一步将品牌 β 和品牌 γ 各个乳品在 1460 cm^{-1} 的强度值绘成控制图，结果显示出品牌 β 的乳品样品单值图中仅有 5 个跃出了控制限，移动极差图中各点均落入品牌 α 控制限内，而品牌 γ 的乳品样品单值图中仅有 3 个跃出了控制限，移动极差图中仅有 1 个跃出了控制限，其余均落入品牌 α 的控制限，由此，直观显示出 3 个品牌乳品样品间具有较高的相似性。通过质量控制图可以在一定程度上直观反映出各品牌乳品样品的质量波动情况，不过本实验中难以直接区分相似品牌。

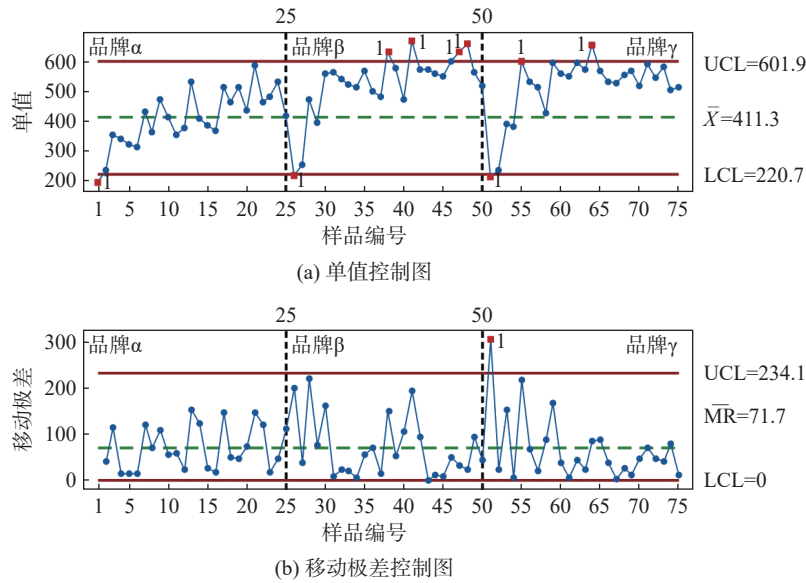


图 2 质量控制图

3.3 数据预处理及极限学习机智能识别

实验采用极限学习机算法对 3 个品牌乳品拉曼光谱质量特性数据进行了判别运算，测试条件为随机选取 80% 的样品作为训练集，余下 20% 的样品作为测试集，运算 10 次取平均值为识别率结果，显示平均识别率仅为 58.7%，表明智能算法有一定的识别能力^[15-17]。进一步进行算法优化，对乳品拉曼光谱质量特性数据进行了小波降噪处理，平均识别率仅为 52.7%^[18]。随后，对乳品拉曼光谱质量特性数据进行了归一化处理，使得信号强度值量纲统一到 [0~1] 区间，平均识别率提升至 86.7%，归一化处理结合小波降噪，平均识别率

进一步提升，达到 93.3%。而后，对乳品拉曼光谱质量特性数据进行了主成分分析降维，即对原始数据进行线性变换，选择少量的特征即可代表原始数据大量的信息^[19]，如第一主成分即可代表原始数据 38.3% 的信息，第二主成分可代表原始数据 8.2% 的信息，第三主成分可代表原始数据 7.6% 的信息。3 个品牌乳品样品分布散点图如图 3 所示，可以看出经过处理后，呈现出同品牌样品趋向聚类，不同品牌样品有所远离。取前 74 个主成分可代表 1751 维原始数据 100% 的信息，运算后平均识别率进一步可达到 97.3%。在优化条件下，最高识别率可达到 100%，如图 4 所示。

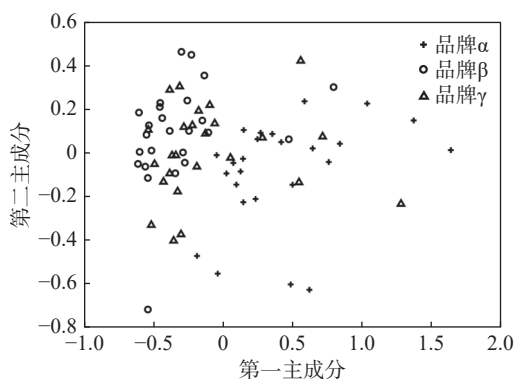


图3 主成分分析散点图

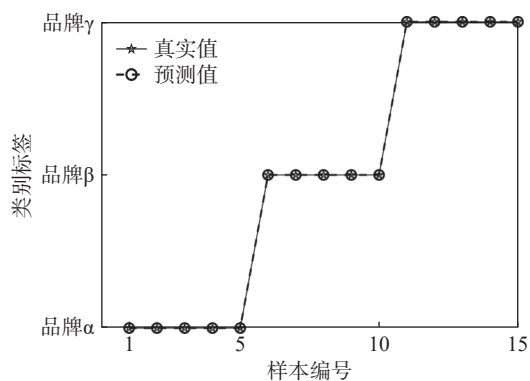


图4 极限学习机识别结果图

4 教学改革特色

本实验设计主要面向质量管理工程专业，实验分为准备阶段、质量特性数据采集阶段和数据处理分析阶段、总结汇报与反馈评价阶段，整个实验是一个集成硬件操作和软件处理的综合性实验项目，实施阶段以2~3名同学组成团队小组为宜，完成时间一周左右^[20-21]。

1) 实验准备阶段

学生需要完成实验主题相关的文献调研和作业指导书预习工作。文献调研内容包括了解质量快检技术发展现状、工作原理、主要特征、优缺点等，涉及快检方法主要有比色法、试纸条法、快检仪器、智能算法。针对将开展的实验项目所涉及的仪器设备、软件平台、安全注意事项等开展预习工作，并可以结合调研文献尝试提出实验设计改进方案，形成预习报告。教师针对学生预习报告及时批改并反馈修改建议。

2) 质量特性数据采集阶段

该阶段主要是锻炼学生操作质量快检硬件检测仪器获取实验样品质量特性数据的能力。学生需要了解便携式光谱仪等采集设备以及载物台等

辅助装置的工作原理、操作步骤、注意事项，并能够对获取的数据进行必要的校正、格式转换、保存等处理工作。培养同学们理解检测设备与样品对象间的表征关系。

3) 数据处理与分析阶段

针对实验采集的食品质量特性表征数据，根据实验目的，学生能够理解质量分析工具的选择，掌握多种软件工具处理方法，包括数据绘图、特征提取、统计控制、智能识别等多个步骤，并能够进行结果可视化呈现与分析、方法改进等工作。在实验训练中，充分认识到质量问题解决的一种新处理方式，增加对质量判别工具使用的认知，拓宽解决实践问题的思路。

4) 实验总结汇报与反馈评价阶段

学生在完成实验后，需要及时对结果总结，提交实验报告及小组汇报交流材料，综合纸质报告与口头汇报的情况，形成一个评价结果并及时反馈学生个性化的修订指导。引导学生根据实验训练结合现实问题开拓思路，进一步凝练科学问题，开展实验设计，为实验项目持续改进积累素材，同时，鼓励学生积极申报大学生创新创业训练计划项目，近年来已分别有4组学生在本实验训练的基础上提出了不同的改进思路，获批了4项国家级大学生创新创业训练计划项目，取得了多项研究成果，促进了实验课程的深化迭代。

5 结束语

本实验围绕乳品的拉曼光谱特性数据采集、质量统计控制分析、极限学习机智能识别算法判别，设计了质量快检综合创新实验项目，也是近年来学校科研成果转化为教学案例的典型案列。实验不仅训练了学生操作质量检验光谱仪设备的实践动手能力，还锻炼了学生运用质量分析工具处理实验数据的能力，加深了对质量快检的理解，有助于质量管理工程及相关专业学生综合能力训练和创新能力培养，拓宽解决质量问题的思路和技能。

参考文献

- [1] 孙长敬, 洪涛, 张月义, 等. 质量管理工程专业“自哺式”建设模式研究与实践[J]. 高等工程教育研究, 2017(6): 67-70.
- [2] 沙敏, 张正勇, 张庆民, 等. 以学科交叉推动质量管理工

- 程复合应用型人才培养的探索与实践[J]. 教育现代化, 2019, 6(54): 1-6.
- [3] 曲立, 杨萍, 刘文涛, 等. 基于大数据分析的质量管理工程人才需求分析[J]. 中国质量, 2022(1): 34-38.
- [4] 汤龙飞, 陈炜, 许志红. 快速控制原型技术在智能电器教学中的应用[J]. 实验技术与管理, 2022, 39(7): 136-141.
- [5] 张正勇, 桂冬冬, 马蕴文, 等. 高维激光拉曼光谱的构建与降噪处理评价研究[J]. 应用激光, 2018, 38(3): 468-473.
- [6] ZHANG Z, GUI D, SHA M, et al. Raman chemical feature extraction for quality control of dairy products[J]. *Journal of Dairy Science*, 2019, 102(1): 68-76.
- [7] 胡安明. 基于分布式并行分层极限学习机的大数据多模式质量预测[J]. *计算机应用与软件*, 2022, 39(4): 88-94.
- [8] 汪颢懿, 卞玉芳, 张瑞芳, 等. 基于极限学习机的肉制品质量风险预测研究[J]. *计算机仿真*, 2019, 36(10): 413-418.
- [9] 马立勇, 袁统帅. 基于极限学习机的焊点质量检测[J]. *计算机工程与应用*, 2018, 54(12): 214-218.
- [10] ALMEIDA M R, OLIVEIRA K D S, STEPHANI R, et al. Fourier-transform Raman analysis of milk powder: A potential method for rapid quality screening[J]. *Journal of Raman Spectroscopy*, 2011, 42(7): 1548-1552.
- [11] ZHANG Z, SHA M, WANG H. Laser perturbation two-dimensional correlation Raman spectroscopy for quality control of bovine colostrum products[J]. *Journal of Raman Spectroscopy*, 2017, 48(8): 1111-1115.
- [12] ZHANG Z, YAO A, YUE T, et al. Bayesian discriminant analysis of yogurt products based on Raman spectroscopy[J]. *Journal of AOAC International*, 2020, 103(5): 1435-1439.
- [13] MONTGOMERY D C. Introduction to statistical quality control[M]. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2013.
- [14] 尤洁. 利用统计控制图改进项目挣值管理的研究[J]. 质量技术监督研究, 2018(4): 51-56.
- [15] ZHANG Z, JIANG M, XIONG H. Optimized identification of cheese products based on Raman spectroscopy and an extreme learning machine[J]. *New Journal of Chemistry*, 2023, 47(14): 6889-6894.
- [16] 张正勇, 岳彤彤, 马杰, 等. 基于拉曼光谱与 k 最近邻算法的酸奶鉴别[J]. 分析试验室, 2019, 38(5): 553-557.
- [17] 余霞, 缪亦涵, 张栩嘉, 等. 波导增强拉曼光谱技术在食用油检测中的应用[J]. 实验技术与管理, 2023, 40(4): 69-74.
- [18] 邵帅斌, 刘美含, 石宇晴, 等. 基于卷积神经网络的乳粉掺杂物拉曼光谱分类方法[J]. *食品科学*, 2022, 43(14): 296-301.
- [19] 范贤光, 刘龙, 支瑜亮, 等. 基于样本优化和主成分分析的多通道拉曼光谱重建及其快速成像[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(8): 2495-2499.
- [20] 彭迪, 陈黄梓. 多色荧光碳点应用于潜手印显现的综合创新实验教学设计[J]. 实验技术与管理, 2022, 39(7): 196-201.
- [21] 刘虎, 王勤. 高质量发展背景下高校实验教学育人能力的建设[J]. 实验室研究与探索, 2021, 40(12): 258-261.

编辑 张俊