

DOI: 10.13652/j.spjx.1003.5788.2025.81070

近红外光谱技术在果蔬农药残留检测中的研究进展

麦馨允^{1,2,3} 胡方洋^{1,2,3} 何玲玲^{1,2,3} 牛俊乐¹ 韦兰洁^{1,2,3}

(1. 百色学院农业与食品工程学院, 广西 百色 533000; 2. 百色学院亚热带特色农产品保鲜及综合利用广西高校工程研究中心, 广西 百色 533000; 3. 百色学院广西芒果生物学重点实验室, 广西 百色 533000)

摘要:近红外光谱技术凭借其无损、快速、高效的特点,在果蔬农药残留检测中具有重要应用价值。文章系统综述了该领域的研究现状,对比了不同光谱波段与成像技术的适用性,分析单一与混合农残检测的难点及富集策略;探讨了光谱预处理与特征波长选择方法,对比了化学计量学与深度学习模型的性能差异;阐述了校准迁移与迁移学习在提升模型跨设备、跨品种泛化能力方面的作用。随着光谱设备与智能算法的持续发展,该技术有望实现从实验室向现场监测的过渡,为农产品安全监管提供绿色高效的解决方案。

关键词:果蔬;近红外光谱技术;农药残留;高光谱成像;深度学习;校准迁移

A review of near-infrared spectroscopy for pesticide residue detection in fruits and vegetables

Mai Xinyun^{1,2,3} Hu Fangyang^{1,2,3} He Lingling^{1,2,3} Niu Junle¹ Wei Lanjie^{1,2,3}

(1. College of Agriculture and Food Engineering, Baise University, Baise, Guangxi 533000, China; 2. University Engineering Research Center for Preservation and Comprehensive Utilization of Subtropical Characteristic Agricultural Products in Guangxi, Baise University, Baise, Guangxi 533000, China; 3. Guangxi Key Laboratory of Biology for Mango, Baise University, Baise, Guangxi 533000, China)

Abstract: Near-infrared spectroscopy (NIRS) is valuable in pesticide residue detection for fruits and vegetables due to its nondestructive, rapid, and efficient nature. This review summarizes current research status in this field, compares the applicability of different spectral bands and imaging techniques, and analyzes challenges in single and mixed pesticide residue detection alongside enhancement strategies. Additionally, approaches to spectral preprocessing and feature wavelength selection are examined, with performance comparisons between chemometrics and deep learning models. Furthermore, the role of calibration transfer and transfer learning is discussed in improving model generalization across instruments and crop varieties. With continuous advancements in spectral instrumentation and intelligent algorithms, NIRS is expected to transition from laboratory analysis to on-site monitoring, offering a green and efficient solution for agricultural product safety supervision.

Keywords: fruits and vegetables; near-infrared spectroscopy; pesticide residue; hyperspectral imaging; deep learning; calibration transfer

农药在果蔬中的残留问题直接关乎食品安全。传统 谱—质谱(LC-MS)^[2]等实验室分析方法,虽然灵敏度高,农残检测多依赖气相色谱—质谱(GC-MS)^[1]、液相色谱 但前处理繁琐、耗时费力、成本高且会破坏样品^[3],不适合

基金项目:教育部产学研合作协同育人项目(编号:230815374207279);广西一流学科建设资助项目(编号:桂教科研[2022]1号);广西高校中青年教师科研基础能力提升项目(编号:2023KY0765)

通信作者:韦兰洁(1987—),女,百色学院高级实验师,硕士。E-mail:119706485@qq.com

收稿日期:2025-11-17 **改回日期:**2026-04-20

引用格式:麦馨允,胡方洋,何玲玲,等. 近红外光谱技术在果蔬农药残留检测中的研究进展[J]. 食品与机械, 2026, 42(9): 236-242.

Citation: Mai Xinyun, Hu Fangyang, He Lingling, et al. A review of near-infrared spectroscopy for pesticide residue detection in fruits and vegetables[J]. Food & Machinery, 2026, 42(9): 236-242.

用于大量样品的快速筛查。随着公众对食品安全关注度的提升,亟需开发快速、低成本、无损的检测技术,以实现果蔬农残的智能监测^[3]。近红外光谱(near-infrared spectroscopy, NIRS)技术是契合此需求的有力工具,其基于分子振动原理,通过检测近红外光(near-infrared, NIR)辐射引发样品分子能级跃迁产生的信号实现成分定性定量分析^[4],具有无需化学试剂、无损、快速的优势^[5];因对有机化合物中C—H、N—H、O—H等官能团振动吸收敏感^[6-7],理论上可检测有机类农药。该技术已被应用于食品品质分级^[8]、品种鉴定^[9]、辨别掺假^[10]等领域,随着光谱仪小型化与机器学习(machine learning, ML)的发展,其检测果蔬农残的研究取得显著进展^[11-12]。文章拟梳理NIRS的相关研究进展,按“检测与采集—数据处理与建模—性能提升”的NIRS技术实施流程展开论述,分析核心问题与挑战,为该领域技术突破及产业化发展提供依据。

1 检测与采集

1.1 光谱范围选择

波段选择对农残检测性能至关重要,当前主流为可见—近红外(VNIR, 350~1 000 nm)与短波红外(SWIR, 1 000~2 500 nm)波段^[13-14]。两者的技术特性存在明显差异, VNIR波段覆盖可见光以及近红外的第三振动泛频区^[6],光谱信号易受到样品色素和某些有机官能团吸收干扰^[15];而SWIR波段涵盖更高泛频和合频振动,能捕捉更丰富的有机分子特征吸收信号,使其在农残检测中理论上具备更高灵敏度^[16]。Hu等^[15]构建了集成VNIR和SWIR双传感器系统检测哈密瓜表面4种农残的方法, SWIR单独建模准确率显著高于VNIR的。Tan等^[17]以啮虫脒为对象,用生成对抗网络(GAN)扩充数据后,分别构建了支持向量机回归(SVR)和偏最小二乘回归(PLSR)模型。结果表明, SWIR-SVR模型预测集决定系数(R^2)达0.878、性能与偏差比(RPD)为2.79, 远优于VNIR模型。

SWIR的关键瓶颈在于设备体积大、成本高^[18],与现场检测需求不符。900~1 700 nm手持式光谱仪可平衡性能与便携性^[18],多数场景下与全波段结果差异较小^[19],但可能遗漏1 700 nm以上农药特征峰^[20]。“双波段融合”成为突破方向, Hu等^[15]采用的VNIR-SWIR融合技术对哈密瓜农残分类准确率可从84.50%提升到94.00%。全波段利用可增强检测能力,但核心挑战在于设计高效融合算法以平衡信息提取与冗余控制。随着探测器技术进步与成本下降, VNIR-SWIR协同体系有望实现现场检测“高灵敏度—高便携性”的平衡。

1.2 检测方式对比

NIRS技术从点测光谱向成像光谱演进。点测技术以光纤探头或积分球采集单点光谱,设备小巧、检测快速,但农残分布不均会导致准确率受限^[14]。高光谱成像(HSI)融合光谱与成像技术,以“空间—光谱双重信息”弥补点测短板,成为研究热点^[15]。Hu等^[14]针对哈密瓜表皮4种农残,采用SWIR-HSI结合蜜獾算法(HBA)及自适应 t 分布突变策略优化的极限学习机(ELM)模型,以智能算法提升收敛速度并避免局部最优,最终测试集准确率、精密度和灵敏度均超93.5%, F_1 值达0.935 5。Semyalo等^[16]则聚焦紫苏叶氯虫脒与啮菌酯的定量分析,以SWIR-HSI结合多曲线分辨率交替最小二乘法(MCR-ALS)与高斯过程回归(GPR),通过MCR-ALS实现混合光谱解混(SU),模型双重交叉验证均方根误差(RMSECV)低至0.001 2%,双交叉验证决定系数(R_{CV}^2)达0.99,较PLSR等传统方法RMSECV降低67%, R_{CV}^2 提高2.06%。二者虽均证实HSI的可行性,但定位不同。前者侧重定性分类与检测速度,算法轻量化且适配快速检测场景;后者聚焦定量精度与光谱解混,解决了叶片基质异质性带来的光谱干扰,但其GPR模型计算成本较高。共同局限在于均为模型解释性不足,实验室受控环境,未涉及田间光照、表面污渍等实际干扰,样品类型单一,鲁棒性待验证。HSI的核心瓶颈是高维数据处理。主成分分析(PCA)、线性判别分析(LDA)等传统方法难以应对光谱混合问题,现有解决方案一是以SU技术分解混合像元^[16,21],二是借助ML挖掘非线性特征,但均需平衡信息提取效率与计算成本。

尽管HSI性能优于点测,但其现场应用的简便性仍不可替代。未来需开发微型化HSI或智能多点系统集成二者优势,优化算法降低成本;同时,还需加强实验室结果向实际场景的迁移验证与适用性提升,以推动NIRS技术产业化。

1.3 检测任务

农残检测分为定性判别与定量回归两类任务,分别适配法规监管与风险评估需求。基于最大残留限量(MRL)的阈值判别将检测转化为二分类问题,模型简单且误判风险低,虽无法提供具体量,但适合监管筛查。Steidle Neto等^[22]以VNIR结合偏最小二乘判别分析(PLS-DA)模型,判定生菜中二硫代氨基甲酸盐是否超过国际标准限量值(3.5, 5.0, 7.0 mg/kg),独立验证集识别率达94.5%~100.0%,证实了其监管价值。定量回归更有利于风险评估与降解研究,但其精度依赖残留水平。高浓度下NIRS定量已获突破:冯镇等^[23]用PLSR对小麦中毒死蜃建模,验证集 R^2 达99.46%, RMSECV仅1.15 mg/kg,检测限(LOD)为1 mg/kg,证明“mg/kg”级定量可行,尤其

在 MRL 较高 (>1 mg/kg) 或样品富集时更优。但该研究未涉及“ $\mu\text{g/kg}$ ”级痕量检测, 仍受制于 NIRS 灵敏度瓶颈。

相较于上述场景, $\text{MRL} < 0.1$ mg/kg 的直接定量检测仍是难点, 微弱信号易被果蔬复杂基质尤其是高水分特点掩盖。为此, 研究者开发了多类增敏策略。首先, 仪器改进与多光谱融合是直接提升灵敏度的思路。Yaemsuk 等^[24]开发了 410~940 nm 便携式 VNIR 光谱仪, 内置光谱传感器和微处理器实时分析归一化光谱信号, 检测罗勒叶、辣椒表面 4 种农残时, 0.05~0.10 mg/L 质量浓度下预测准确率超 98%, 稳定性优异 (总体标准差 < 0.013), 优势在于低成本便携, 适配现场检测, 但波段较窄限制了农药适配性。Yan 等^[25]则将 NIR 与表面增强拉曼散射 (SERS) 融合, 经 Hilbert-Schmidt 独立准则可变空间迭代优化 (HSIC-VSIO) 算法筛选特征波长后建模, 预测集 R^2 达 0.988, 10^{-6} mol/L 低浓度仍能捕获特征峰, 有效减轻基质干扰, 但仪器复杂昂贵, 难以普及。其次, 样品富集通过信号放大可突破瓶颈。Sankom 等^[26]将傅立叶变换近红外 (FT-NIR) 与干提取红外分析 (DESIR) 技术结合, 样品经粉碎、丙酮萃取、玻璃纤维滤纸富集干燥后检测甘蓝等作物的丙溴磷残留, 预测集 R^2 提升至 0.88~0.97, RMSE 降至 5.25~11.00 mg/kg, LOD 降至 0.53 mg/kg, 较直接测定显著增敏, 但前处理耗时, 与快速检测需求矛盾。Xu 等^[27]设计了 Ag/Au 纳米 SERS 传感器, 虽实现了甲基对硫磷 5×10^{-9} ~ 5×10^{-4} mol/L 的线性响应范围, LOD 低至 1.7×10^{-9} mol/L, 却未与 NIRS 联用, 需依赖特殊试剂, 实用性不足。此外, “水光组学”提供了颠覆性思路, 将水分从干扰项转化为信号介质, 痕量溶质通过氢键扰动水分子簇结构, 使水的光谱模式 (WAMACS) 产生特异性变化^[28]。Appaw 等^[29]以此原理检测玉米黄曲霉毒素, VNIR-PLSR 模型验证集 R^2 达 0.99, RMSECV 为 1.70 ng/g, LOD 低至 0.60 ng/g, LOQ 为 1.81 ng/g, 实现了“ng/g”级检测。该技术虽未应用于 NIRS 农残检测, 却为 NIRS 痕量分析提供了新方向。

综上, 阈值判别模型因适配监管最接近实用, 定量模型支撑深度研究, 而痕量检测需多策略融合突破。未来需聚焦增敏技术轻量化, 如 DESIR 与便携仪器结合、探索水光组学与 NIRS 的适配性, 推动技术走向现场监测。

1.4 检测对象

早期农残检测多聚焦单一目标农药, 虽在受控条件下准确率较高, 但因真实光谱叠加干扰, 使单一农药模型失效^[12], 促使研究转向多种农药“多分类识别”与“联合定量”两大技术路径。多分类识别技术相对成熟, Hu 等^[15]融合 VNIR 与 SWIR 高光谱数据, 构建了一维卷积神经网络 (1D-CNN) 模型识别哈密瓜中 4 种农药 (准确率 94%), 证实了深度学习 (DL) 挖掘跨波段特征的潜力, 但仍受限

于实验室受控样品。

与定性鉴别相比, 混合农药联合定量更具挑战性。Ye 等^[30]利用 HSI 结合残差神经网络 (ResNet) 模型分析 VNIR 与 NIR 数据, 实现葡萄表面 5 种农药混合残留联合检测, 综合准确率超 93%, 并通过显著性图解析 ResNet 的关键波段, 为农药残留光谱特征提供物理解释。Pham 等^[31]基于 SERS 证实“光谱差异特征+多元模型”是多组分定量的有效思路, 实现芒果表面 3 种农药的定量, LOD 达“mg/kg”级及以下, 但其与 NIRS 的融合尚待探索。多种农药残留的检测要求模型具备更强的特征分离和抗干扰能力。DL 是多农药检测的核心工具, 如一维残差神经网络 (1D-ResNet) 可自动聚焦各农药特征波段, 实现成分识别^[3], 但现有研究多基于人工配制的混合样品, 未考虑真实场景中农药浓度波动、基质异质性等干扰。

未来可从 3 个方面进行突破: ① 构建多输出神经网络实现同步预测; ② 引入光谱正则化或纯物质辅助信号分离; ③ 结合预处理技术实现检测前组分分离。该方向虽挑战极高, 但对解决复合污染监管难题意义重大。

2 数据处理与建模

2.1 光谱数据预处理

NIR 光谱易受光散射、背景杂质与仪器噪声影响, 建模前的预处理是提升痕量检测性能的关键环节^[32]。常用预处理可概括为 3 类: ① 平滑去噪/基线校正, 如移动平均 (MA)、高斯平滑 (GS)、Savitzky-Golay (SG)、小波变换 (WT) 等, 主要抑制高频噪声并校正基线漂移; ② 散射校正, 如标准正态变量变换 (SNV)、多元散射校正 (MSC), 用于削弱粒径与表面粗糙度差异导致的散射效应与基线偏移; ③ 背景削弱与尺度统一, 如一阶倒数变换 (FD)、二阶导数变换 (CD)、最大最小归一化 (MMN) 等, 用于增强微弱吸收特征并降低量纲差异^[6, 33-35]。Li 等^[34]以 SNV 结合 PLS 实现菜花农残分类, 准确率 100%, 体现散射校正对提升判别性能的贡献, 但其局限于单一作物与检测场景, 未验证复杂基质适应性; 李伟等^[35]提出 VNIR 全波段平均分组积分预处理并结合反向传播 (BP) 神经网络用于甘蓝毒死蜱定性分析 (准确率 96.7%), 该方法简化了敏感波段筛选流程, 但其效果对分组参数依赖较强, 跨作物、跨农药迁移的稳健性仍需验证。

需要指出的是, 传统“降噪—散射校正—导数处理”更多是在统计层面削弱干扰, 对水分、温度等主导的非残留相关方差难以实现机制性分离。近年来引入的正交化预处理如正交信号校正 (OSC) 和直接正交信号校正 (DOSCO), 可剔除与目标变量正交的谱变化, 旨在提高痕量建模中有效信号占比。Chaudhary 等^[36]利用 OSC 联合 VIP 与 PLSR 实现黑贝鲁加扁豆中草甘膦 (0~20 mg/kg) 定

量,预测性能达到 R_p^2 为 0.916、RMSEP 为 2.294 mg/kg,但在更低残留区间的下探仍受限制;Xie 等^[37]在基质更稳定的农药制剂掺杂体系中,采用 DOSC+BP 获得 R_p^2 为 0.989、RMSEP 为 0.27%,最低检出浓度达 0.5%。可见,OSC、DOSC 为干扰分离提供了有价值的思路,但在果蔬表皮农残信号弱且与背景强耦合的场景中,正交剔除可能同步损耗残留相关信息,导致低剂量区间泛化下降。因而更合理的做法是将其作为可选模块,在嵌套交叉验证、跨批次外部验证与稳定性统计的约束下评估收益,并明确适用边界与潜在信息误删风险,从而避免以单次最优指标替代可推广的真实性能。

2.2 特征波长选择

在 NIRS“高维—强共线—弱效应”的数据结构下,农药残留的细微谱差常被水分吸收与结构散射所主导的背景方差淹没。因此,特征波长筛选并非单纯降维,而是面向弱农药信号的定向增敏,通过压缩冗余变量、抑制噪声,将建模重心聚焦于与残留变化更一致的波段,从而提升灵敏度与泛化性^[15]。据此,近年常用的策略包括回归系数(RC)^[32]、逐步投影算法(SPA)^[38]、竞争性自适应重加权采样(CARS)^[32]、遗传算法(GA)^[15]和随机青蛙(RF)^[15]等。需要强调的是,多算法并行并不意味着存在通用最优解。以花椰菜多农药情境为例,不同筛选方法与分类模型的最优组合因目标农药与基质差异而分化,阿维菌素以 RC+最小二乘支持向量机(LS-SVM)获最高准确率(98.33%),敌百虫以 SPA+LS-SVM 最优(95%),百菌清则以 CARS+PLS-DA 最优(93.33%)^[32]。表明 RC 易捕捉与响应强相关的局部峰段,但对共线冗余较敏感;SPA 通过约束共线性提升稳定性,却可能遗漏分散于多个弱区间的有效信息;CARS 倾向于从全谱竞争中筛出少量高贡献变量,适合信息稀疏或弱效应场景,但对划分策略与噪声扰动更敏感。因此,若缺乏嵌套交叉验证、稳定性统计或外部验证,筛选过程容易将偶然相关误判为关键波段,并在低剂量区间表现为泛化下滑。

近期研究进一步转向模型性能驱动的变量选择策略,通过包裹式方法如递归特征消除(RFE)、递归特征消除交叉验证(RFECV)与序列前向选择(SFS),将变量筛选与模型结构耦合,以更有效凸显复杂基质中与农残相关的微弱变化^[39]。与此同时,跨模态增敏将特征提取推进至融合层面。Yan 等^[25]基于 HSIC-VSIO 实现 NIRS 与 SERS 的特征层融合,并以 PLSR 建模使预测集 R^2 达到 0.988,显著优于单一光谱来源;提示单一 NIR 受限于吸收弱与背景强时,引入互补谱学并在特征层去冗余融合,可能较单一光谱内反复筛波段更接近痕量检测的可行路径。然而,融合策略亦带来新的方法学瓶颈,包括系统复

杂度上升、跨设备一致性与校准迁移难度增加,以及模型可解释性。

2.3 建模方法

在获得高质量光谱与稳定特征后,建模策略直接决定痕量农残的可检出性与跨批次泛化能力。化学计量学中的 PLSR 因兼具降维与处理共线性优势,仍是近红外定量分析的基础方法^[25]。但在复杂基质中,线性假设往往难以刻画残留变化与光谱响应间的非线性耦合。为此,ML 被广泛用于提升弱信号识别能力,例如支持向量机(SVM)因其间隔最大化与核函数映射在小样本、非线性分类中表现稳定^[11];ELM 等轻量神经网络在引入智能优化后亦可获得较高精度,例如 tHBA-ELM 可将多农药识别总体准确率提升至 93.5%^[14]。

近年,DL 在 NIRS 建模中进展迅速,端到端网络可自动学习多尺度特征并强化对微弱差异的表征。Ye 等^[30]以 ResNet 完成葡萄农残分级,准确率达 93%,整体优于 LR、SVM 与 RF 等传统方法。进一步地,多谱段/多传感器融合成为提高痕量检测灵敏度的重要路径,Hu 等^[15]融合 VNIR-HSI、SWIR-HSI,并采用带注意力机制的 1D-CNN,在 1:1 000 稀释条件下对甜瓜表面 4 种农药仍实现 94% 分类准确率,显著高于 KNN 与 RF(约 80%),说明“谱段互补+注意力加权”有助于在弱效应区间压制背景干扰并放大残留差异。需要指出的是,DL 对样本规模与分布漂移更敏感,小样本下易过拟合,已有研究引入 GAN 扩充数据以改善稳健性^[17];同时,ML 和 DL 普遍存在可解释性瓶颈,“黑箱”特征削弱了方法学可验证性与监管可接受性^[40]。因此,结合可解释人工智能(XAI)为模型提供波段贡献证据与机理一致性支撑,正成为由“高指标”走向“可信检测”的关键环节^[41]。

总体而言,线性模型可解释性强但对弱非线性效应敏感度有限,ML、DL 更擅长挖掘微弱差异、提升痕量识别性能。未来可进一步引入 Transformer 等结构以增强长波段依赖建模^[42],并融合化学先验与严格外部验证框架,协同解决数据规模与可解释性难题,推动技术从实验室验证走向现场应用。

3 性能提升

模型的迁移能力与鲁棒性是 NIRS 农残检测落地的关键。特定模型跨场景(仪器、品种、环境)应用性能常因光谱偏移而下降^[43]。校准迁移(CT)和迁移学习(TL)成为突破核心,相关研究为方法优化提供了实证支撑。

跨仪器迁移中,传统 CT 方法通过函数映射校正光谱差异,如直接标准化(DS)的线性校正、分段直接标准化(PDS)的分段调整^[44],但依赖“主一次仪器光谱存在明确函数关系”的假设,难以补偿不同果蔬基质、本底干扰等

复杂条件下的非线性偏移。Mishra 等^[43]提出的深度校准传递(DCT)通过参数微调实现跨仪器模型共享,无需标准样品,简化了流程,但研究未针对农残检测场景验证,复杂基质下的迁移效果存疑。

针对跨品种、跨环境场景,领域自适应(DA)更具优势,核心是通过 TL 微调源域模型,使其在目标域上表现提升。Deng 等^[45]证实,即便源域与目标域的污染物(赤霉烯酮 vs 黄曲霉毒素)、物种(小麦 vs 花生)均不同,DL 模型仍可通过微调有效迁移,拓展了模型适用边界,但未涉及农残检测。Xiao 等^[46]将 FD+SNV 预处理与深度迁移学习(DTL)结合,微调后 CNN 模型在棉花品种互换测试中 RMSE 均 <3.5 ,显著优于 PLS 和 SVR,证实“预处理+迁移学习”的协同效应,为农残检测提供借鉴。然而,目前农残检测领域仍缺乏专属 TL 案例。DL 模型的泛化瓶颈需靠构建大规模多样化训练集解决^[43]。田间应用虽有硬件优化抗环境因素干扰,但实际可靠性仍缺乏广泛验证。He 等^[12]提出的“Transformer+DL”联合训练思路可实现多领域数据隐私保护下的联合训练,为培育高泛化模型提供了新方向。

综上,传统 CT 适配简单场景,DL 技术更具复杂场景潜力,但农残检测领域的应用空白亟待填补。未来应聚焦构建专属迁移学习数据集、验证 DCT 有效性、结合 Transformer 及强化硬件田间验证,推动技术实用化。

4 结论

近红外光谱在果蔬农残检测领域已形成完整技术链且成效显著。光谱采集上,可见—近红外与短波红外融合优势互补成为主流;数据处理中,预处理结合特征提取方法是提升模型性能的关键;建模方法上,传统模型奠定应用基础,深度学习模型可自提取特征、非线性建模以及适应复杂基质。同时,多农药混合检测、富集增敏及模型迁移等实用化问题已进入研究视野。

尽管实验室成果显著,但技术落地仍面临瓶颈:① 极低浓度检测限未达监管要求;② 跨场景模型通用性不足,缺乏系统校准迁移与领域自适应策略;③ 深度学习模型“黑箱”特性降低了信任度与法规接受度;④ 实验室条件与田间复杂干扰的适配性未充分验证。针对上述瓶颈,结合发展趋势,未来需聚焦三大前瞻性方向:① 多模态融合(近红外光谱+表面增强拉曼散射/高光谱成像)突破痕量检测灵敏度瓶颈;② 开发智能迁移框架,提升复杂场景泛化能力;③ 推进现场标准化与自动化,集成机动光源、自动校准及云端分析模块,构建田间与生产线专属的标准化检测流程。随着上述方向的突破,近红外光谱技术有望以“快速、无损、精准”优势逐步融入常规农药监测体系,为果蔬食品安全筑牢技术屏障。

参考文献

- [1] 吴汉彬. QuEChERS-气相色谱串联质谱法同时测定茶叶中 6 种农药残留[J]. 食品与机械, 2023, 39(6): 55-58, 111.
Wu H B. Simultaneous determination of 6 pesticide residues in tea by QuEChERS-GS-MS/MS[J]. Food & Machinery, 2023, 39(6): 55-58, 111.
- [2] 田菊, 李勇, 吕春茂, 等. 桃胶中多农药残留分析及风险评估[J]. 食品与机械, 2023, 39(5): 55-63, 100.
Tian J, Li Y, Lv C M, et al. Analysis and risk assessment of pesticide residues in peach gum[J]. Food & Machinery, 2023, 39(5): 55-63, 100.
- [3] Dai Q F, Luo Z, Li Z, et al. Field-based, non-destructive, and rapid detection of pesticide residues on kumquat (*Citrus japonica*) surfaces using handheld spectrometer and 1D-ResNet[J]. Agronomy, 2025, 15(3): 625.
- [4] Abdul R, Riana L, Fajar Aji L. Near infrared (NIR) and Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy combined with chemometrics for agrifood products analysis[M]// Chemometrics. Amsterdam: Elsevier, 2024: 125-146.
- [5] Chen Y, Gao R Z, Xiang J X, et al. Progress of near infrared spectroscopy in tea research[J]. Food Chemistry, 2025, 487: 144691.
- [6] Caredda M, Dedola A S, Pes M, et al. The use of NIR spectroscopy and chemometrics to identify the thermal treatment of milk in fiore sardo PDO cheese to detect fraud[J]. Foods, 2025, 14(13): 2 288.
- [7] Beć K B, Grabska J, Badzoka J, et al. Spectra-structure correlations in NIR region of polymers from quantum chemical calculations. The cases of aromatic ring, C=O, C≡N and C—Cl functionalities[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2021, 262: 120085.
- [8] 荀拾虎, 咸嘉玮, 王微娜, 等. 基于光谱图像融合技术的蓝莓品质在线评价系统设计与应用[J]. 食品与机械, 2025, 41(12): 82-90.
Xun S H, Xian J W, Wang W N, et al. Design and application of an online evaluation system for blueberry quality based on spectral image fusion technology[J]. Food & Machinery, 2025, 41(12): 82-90.
- [9] Cozzolino D, Bureš D, Hoffman L C. Evaluating the use of a similarity index (SI) combined with near infrared (NIR) spectroscopy as method in meat species authenticity[J]. Foods, 2023, 12(1): 182.
- [10] Calle J L P, Punta-Sánchez I, González-De-Peredo A V, et al. Rapid and automated method for detecting and quantifying adulterations in high-quality honey using vis-NIRs in combination with machine learning[J]. Foods, 2023, 12(13): 2 491.
- [11] Lapcharoensuk R, Phaykamta C, Anurak W, et al. Nondestructive detection of pesticide residue (Chlorpyrifos) on

- bok choy (*Brassica rapa* subsp. *chinensis*) using a portable NIR spectrometer coupled with a machine learning approach [J]. *Foods*, 2023, 12(5): 955.
- [12] He H Y, Li Z T, Qin Q, et al. Spectroscopic and imaging technologies combined with machine learning for intelligent perception of pesticide residues in fruits and vegetables[J]. *Foods*, 2025, 14(15): 2 679.
- [13] Zohar E, Cohen H, Goldshlager N, et al. Detection of the amitraz pesticide in bee wax by hyperspectral imaging[J]. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 2024, 18 (4): 3 008-3 017.
- [14] Hu Y T, Ma B X, Wang H T, et al. Non-destructive detection of different pesticide residues on the surface of Hami melon classification based on tHBA-ELM algorithm and SWIR hyperspectral imaging[J]. *Foods*, 2023, 12(9): 1 773.
- [15] Hu Y T, Ma B X, Wang H T, et al. Detecting different pesticide residues on Hami melon surface using hyperspectral imaging combined with 1D-CNN and information fusion[J]. *Frontiers in Plant Science*, 2023, 14: 1105601.
- [16] Semyalo D, Joshi R, Kim Y, et al. Short-wavelength infrared hyperspectral imaging and spectral unmixing techniques for detection and distribution of pesticide residues on edible perilla leaves[J]. *Foods*, 2025, 14(16): 2 864.
- [17] Tan H B, Ma B X, Xu Y, et al. An innovative variant based on generative adversarial network (GAN): regression GAN combined with hyperspectral imaging to predict pesticide residue content of Hami melon[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2025, 325: 125086.
- [18] Beć K B, Grabska J, Huck C W. Principles and applications of miniaturized near-infrared (NIR) spectrometers[J]. *Chemistry-A European Journal*, 2021, 27(5): 1 514-1 532.
- [19] Iris Technology Solutions. What is the best handheld NIR analyzer on the market? A comparison between Visum Palm™ and other portable NIR devices[EB/OL]. (2025-07-29) [2025-11-25]. <https://www.iris-eng.com/the-best-handheld-nir-analyzer-visum-palm/>.
- [20] Nasir V, Schimleck L, Abdoli F, et al. Quality control of thermally modified western hemlock wood using near-infrared spectroscopy and explainable machine learning[J]. *Polymers*, 2023, 15(20): 4 147.
- [21] Chen H M, Wang H C, Sung C C, et al. Validation of subpixel target detection and linear spectral unmixing techniques on short-wave infrared hyperspectral images of collagen phantoms [J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2025, 30(2): 023518.
- [22] Steidle Neto A J, De Lima J L M P, Da Rosa Ferraz Jardim A M, et al. Discrimination of fungicide-contaminated lettuces based on maximum residue limits using spectroscopy and chemometrics[J]. *Horticulturae*, 2024, 10(8): 828.
- [23] 冯镇, 刘馨, 张震, 等. 基于近红外光谱技术对小麦中毒死麝农药残留测定方法的研究[J]. *食品工业科技*, 2022, 43(4): 271-277.
- Feng Z, Liu X, Zhang Z, et al. Determination of chlorpyrifos pesticide residues in wheat based on near infrared spectroscopy [J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2022, 43(4): 271-277.
- [24] Yaemsuk N, Yammen S. Development of a portable NIR spectrometer for detecting pesticide residues[J]. *Asian Health, Science and Technology Reports*, 2024, 32(1): 32-48.
- [25] Yan F C, Zhang R, Wang S Q, et al. A pesticide residue detection model for food based on NIR and SERS[J]. *PLoS One*, 2025, 20(4): e0320456.
- [26] Sankom A, Mahakarnchanakul W, Rittiron R, et al. Detection of profenofos in Chinese kale, cabbage, and chili spur pepper using Fourier transform near-infrared and Fourier transform mid-infrared spectroscopies[J]. *ACS Omega*, 2021, 6(40): 26 404-26 415.
- [27] Xu S L, Li M, Li X, et al. Engineering an Ag/Au bimetallic nanoparticle-based acetylcholinesterase SERS biosensor for *in situ* sensitive detection of organophosphorus pesticide residues in food[J]. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2023, 415 (1): 203-210.
- [28] Malegori C, Muncan J, Mustorgi E, et al. Analysing the water spectral pattern by near-infrared spectroscopy and chemometrics as a dynamic multidimensional biomarker in preservation: rice germ storage monitoring[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2022, 265: 120396.
- [29] Appaw W, Zaukuu J Z, Aouadi B, et al. Predicting aflatoxin contamination in white and yellow maize using Vis/NIR spectroscopy combined with PCA-LDA and PLSR models through aquaphotomics approaches[J]. *Applied Food Research*, 2025, 5(1): 100841.
- [30] Ye W X, Yan T Y, Zhang C, et al. Detection of pesticide residue level in grape using hyperspectral imaging with machine learning[J]. *Foods*, 2022, 11(11): 1 609.
- [31] Pham U T, Phan Q H T, Nguyen L P, et al. Rapid quantitative determination of multiple pesticide residues in mango fruits by surface-enhanced Raman spectroscopy[J]. *Processes*, 2022, 10 (3): 442.
- [32] Zhang M Y, Xue J X, Li Y D, et al. Non-destructive detection and recognition of pesticide residue levels on cauliflowers using visible/near-infrared spectroscopy combined with chemometrics[J]. *Journal of Food Science*, 2023, 88(10): 4 327-4 342.
- [33] Nazarloo A S, Sharabiani V R, Gilandeh Y A, et al. Evaluation of different models for non-destructive detection of tomato pesticide residues based on near-infrared spectroscopy[J]. *Sensors*, 2021, 21(9): 3 032.

- [34] Li R, Wang H W, Shen B B, et al. Study on dissipation law of pesticides in cauliflower based on hyperspectral image technique[J]. *Agriculture*, 2023, 13(12): 2 254.
- [35] 李伟, 张雪莉, 苏勤, 等. 可见近红外光谱的甘蓝叶片毒死蜱农药残留定性分析[J]. *光谱学与光谱分析*, 2022, 42(1): 80-85.
- Li W, Zhang X L, Su Q, et al. Qualitative analysis of chlorpyrifos pesticide residues in cabbage leaves based on visible near infrared spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2022, 42(1): 80-85.
- [36] Chaudhary S, Senthilkumar T, Singh C B, et al. Determination of glyphosate residues in lentils using near-infrared hyperspectral imaging coupled with chemometric regression techniques[J]. *Infrared Physics & Technology*, 2025, 150: 106034.
- [37] Xie L Y, Zhu J G, Wang Y J, et al. Rapid and accurate determination of prohibited components in pesticides based on near infrared spectroscopy[J]. *Infrared Physics & Technology*, 2022, 121: 104038.
- [38] Lu Y, Li X L, Li W J, et al. Detection of chlorpyrifos and carbendazim residues in the cabbage using visible/near-infrared spectroscopy combined with chemometrics[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2021, 257: 119759.
- [39] Ferreira I J S, Dos Santos Costa D, Rolim L A, et al. Monitoring pesticides with portable NIR spectroscopy in different intact fruits[J]. *Journal of Food Composition and Analysis*, 2025, 148: 108024.
- [40] Şahin E, Arslan N N, Özdemir D. Unlocking the black box: an in-depth review on interpretability, explainability, and reliability in deep learning[J]. *Neural Computing and Applications*, 2025, 37(2): 859-965.
- [41] Contreras J, Bocklitz T. Explainable artificial intelligence for spectroscopy data: a review[J]. *Pflügers Archiv-European Journal of Physiology*, 2025, 477(4): 603-615.
- [42] Wu T, Li L, Zhu L H, et al. Nondestructive detection of thiophanate-methyl pesticide content in cherry tomato based on handheld spectrometer and SpecTransformer algorithm[J]. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 2025, 19 (5): 3 048-3 060.
- [43] Mishra P, Passos D. Deep calibration transfer: transferring deep learning models between infrared spectroscopy instruments[J]. *Infrared Physics & Technology*, 2021, 117: 103863.
- [44] Zheng K Y, Shang X W, Qin Z, et al. Recent advances in SERS-based detection of organophosphorus pesticides in food: a critical and comprehensive review[J]. *Foods*, 2025, 14(21): 3 683.
- [45] Deng J H, Mei C L, Jiang H. Enhancing the application of near-infrared spectroscopy in grain mycotoxin detection: an exploration of a transfer learning approach across contaminants and grains[J]. *Food Chemistry*, 2025, 480: 143854.
- [46] Xiao Q L, Tang W T, Zhang C, et al. Spectral preprocessing combined with deep transfer learning to evaluate chlorophyll content in cotton leaves[J]. *Plant Phenomics*, 2022, 2 022: 9813841.