壶瓶枣轻微损伤可见/近红外光谱动态判别模型研究

王斌, 张淑娟, 赵聪慧

(山西农业大学工学院,山西太谷 030801)

摘要:为了研究快速识别轻微损伤壶瓶枣与完好壶瓶枣的有效方法,本文以轻微损伤壶瓶枣和完好壶瓶枣为研究对象,动态采 集轻微损伤壶瓶枣和完好壶瓶枣的近红外光谱数据。采用S-G平滑与多元散射校正(MSC)相结合的方法预处理光谱数据,分别以预处 理后的全光谱(FS)数据和采用主成分分析(PCA)法提取主成分、采用连续投影算法(SPA)提取特征波长作为输入变量,建立偏最小二乘 判别分析(PLS-DA)和最小二乘支持向量机(LS-SVM)模型,比较4种损伤壶瓶枣及完好壶瓶枣的判别准确性。结果表明:采用PCA 提 取主成分有较明显的优势,对4种损伤壶瓶枣的判别准确性均能满足实际要求,且采用PCA-LS-SVM模型对4种轻微损伤壶瓶枣和完好 壶瓶枣的正确判别率最佳,分别达到100%、86%、100%、100%和100%,总的正确判别率为97.2%。该研究为轻微损伤壶瓶枣的动态 判别提供了新的理论基础。

关键词: 可见/近红外光谱; 轻微损伤; 壶瓶枣; 主成分分析; 连续投影算法; 偏最小二乘判别分析; 最小二乘支持向量机 文章篇号: 1673-9078(2015)4-258-263 DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2015.4.042

Dynamic Discriminant Models for the Detection of Subtle Bruising in

Huping Jujube Constructed Based on Their Visible/near-infrared Spectral

Data

WANG Bin, ZHANG Shu-juan, ZHAO Cong-hui

(College of Engineering Shanxi Agricultural University, Taigu 030801, China)

Abstract: This study aimed to identify a rapid effective method to distinguish intact and subtly bruised Huping jujubes by the dynamic collection of their near infrared (NIR) spectral data. A combination of the Savitzky-Golay (S-G) and multiplicative scatter correction (MSC) methods were used for the preprocessing of spectral data. Full spectrum (FS) data obtained after preprocessing, major component data extracted by principal component analysis (PCA), and characteristic wavelength data extracted by successive projections algorithm (SPA) were used as input variables for the construction of models by partial least squares discriminant analysis (PLS-DA), or using the least squares-support vector machine (LS-SVM). The accuracy of these models in discriminating between the four types of intact and subtly bruised Huping jujubes was determined. The results of these analyses revealed the obvious advantages of PCA use for the extraction of the major components of Huping jujubes; in addition, this (PCA) data fulfilled all practical requirements for the accurate discrimination of all four types of subtly bruised samples. The PCA-LS-SVM model demonstrated optimal accuracy in the discrimination of four types of subtly bruised and intact Huping jujubes (100%, 86%, 100%, 100%, and 100%, respectively), resulting in a total discrimination accuracy of 97.2%). In conclusion, this study provides a new theoretical basis for the dynamic discrimination of subtly bruised Huping Jujube.

Key words: visible/near infrared spectrum; subtle bruising; Huping jujube; principal component analysis; successive projections algorithm; partial least squares discriminant analysis; least squares-support vector machine

收稿日期: 2014-08-07

基金项目:国家自然科学基金资助项目 (31271973);高等学校博士学科点专 项科研基金资助项目 (20101403110003);山西省自然科学基金资助项目 (2012011030-3)

- 作者简介:王斌(1988-),男,硕士研究生,研究方向为农产品无损检测技 术与装备
- 通讯作者:张淑娟(1963-),女,博士,教授,研究方向为农产品无损检测 技术与装备

壶瓶枣是山西十大名枣之一,果大、皮薄、肉厚、 极具营养滋补功能和药用价值。壶瓶枣在采摘、贮藏、 包装及运输等诸多环节中常因碰撞、挤压、摔伤等造 成果实不同程度的损伤,有些轻微损伤仅凭肉眼难以 识别,若损伤果实不及时剔除,随着其腐烂程度的不 断加重,将会造成极大的浪费。因此,采用快捷、有 效的方法实现损伤壶瓶枣的早期检测具有重要的意 义。

近红外光谱分析技术的主要信息来源是有机物分 子中C-H、N-H和O-H等含氢基团的倍频与合频振动, 其光谱特性稳定,具有简捷、环保、检测速度快、稳 定性好和可实现在线分析等优点,已被广泛地应用于 农业、食品工业等领域[1~3]。国内外学者已采用近红外 光谱技术和高光谱技术结合多种化学计量学方法,进 行了枸杞的掺杂及化学成分的分析⁴¹、沙棘汁品牌识 别^[5]、品种产地识别^[6-7]、榛子核仁缺陷检测^[8]及腐烂、 病害及正常梨枣的检测^[9]。Xing 等^[10]提出利用可见/ 近红外光谱结合软化指标快速检测刚受瘀伤苹果的化 学组织,基于采集的光谱数据建立 PLS 检测模型。结 果表明,对刚受瘀伤的苹果检测准确性达到95%以上。 Lee 等^[11]采用近红外成像技术对表面有瘀伤损害的梨 进行无损检测分类,利用 F-value 分类算法与图像分 析相结合寻找最优波段比,以此对表面有瘀伤损害的 梨进行检测分类。研究结果表明当波段比阈值为 1.19 时,该方法对梨表面瘀伤处检测正确率为 92%。 Pholpho 等^[12]利用可见光谱对轻微擦伤龙眼水果进行 分类,建立了 PCA、PLS-DA 和 SIMCA 模型进行识 别和分析。结果表明, PLS-DA 模型识别率最高, 可 达 100%。张淑娟等[13]针对鲜枣挤压轻微损伤这种情 况的样本,基于近红外光谱建立静态识别模型。结果 表明 MSC-SPA-PCA-LS-SVM 判别模型对轻微损伤鲜 枣准确识别率达100%。

本文以壶瓶枣为研究对象,动态采集完好壶瓶枣

与距离水泥地 2 m、3 m 和距离土地 3 m 进行自由落体损伤,以及经过机械挤压损伤的 4 种损伤方式的壶瓶枣样本近红外光谱数据。提取全部壶瓶枣样本的全波段可见/近红外漫反射光谱数据有效信息,建立包含各种损伤方式样本的偏最小二乘判别分析(PLS-DA)和最小二乘支持向量机(LS-SVM)的通用判别模型,以及相应的全光谱(FS)通用判别模型,并分别对每一种损伤样本进行判别精度比较。为快速、无损在线检测轻微损伤壶瓶枣提供有效的建模方法。

1 材料与方法

1.1 试验样本

试验样本于 2013 年 9 月 30 日采摘于山西太谷北 张村一枣园的 120 个无损伤、成熟良好、形状大小均 等的壶瓶枣。依次随机选取 25 个壶瓶枣样本分别从高 度为 2 m、3 m 自然落到水泥地面,高度为 3 m 自然 落到土地地面;再随机选取 20 个壶瓶枣样本,利用万 能材料物理试验机以速度为 3 mm/s,探头直径为 11 mm,深度 3.5 mm,对每个样本进行机械损伤,共包 含 4 种损伤方式的样本。按照 Kennard-Stone (K-S)算 法^{[141}以 3:1 的比例分别对包括完好和损伤的 5 种试验 样本进行划分,将各自划分结果汇总后形成主体样本 的校正集与预测集,划分结果见表 1。

Table 1 The sample sets selected by the Kennard-Stone algorithm												
实验样本	А		В		С		D		Е		总和	
	校正集	预测集										
样本划分个数	18	7	18	7	18	7	18	7	15	5	87	33

表 1 Kennard-Stone 算法划分样本结果

注: A-距水泥地2 m损伤; B-距水泥地3 m损伤; C-距土地3 m损伤; D-机械挤压损伤; E-完好无损。

1.2 光谱数据采集



图 1 可见-近红外光谱在线检测装置示意图

Fig.1 Sketch diagram of the linked Vis-NIR spectroscopy detection equipment

注: 1-链轮; 2-双锥形托辊; 3- 卤素灯; 4-光谱采集箱; 5-光纤探头; 6-光纤; 7-微型光纤光谱仪; 8-计算机; 9-鲜枣; 10-传送链条; 11-摩擦带; 12-驱动轴; 13-电动机。

本试验使用动态光谱采集系统采集完好和4种损

伤壶瓶枣样本的反射光谱。动态光谱采集装置示意图,如图1所示,壶瓶枣以4.5 r/min 的速度旋转,光谱采样间隔为1nm,采样范围为350~2500 nm,光谱仪的探头垂直于壶瓶枣上表面,距壶瓶枣上表面100 mm,每间隔120°采集一次壶瓶枣样本的光谱数据,取其平均值作为最终的实验数据。在动态光谱采集过程中只包括每个壶瓶枣样本的三个检测部位处无损伤或有1处损伤的情况。

1.3 数据分析与处理

1.3.1 光谱数据预处理方法

在原始光谱数据采集过程中常会受到高频随机噪 声、光散射、样本不均匀等导致的基线漂移的影响, 对光谱数据分析前,本文采用 S-G 多项式卷积平滑法 (Savitzky-Golay)、多元散射校正(Multiplicative Scatter Correction, MSC)对原始光谱数据进行预处理。

1.3.2 主成分分析

主成分分析(PCA)是将原来具有一定相关性的多 维变量协方差结构进行重新组合,利用降维法实现了 把原来多个变量划为少数几个综合指标;不仅可以避 免信息间的互相重叠,而且进行了数据简化,从而提 取了最具代表性的变量子集,且变量之间互不相关。

1.3.3 连续投影算法

连续投影算法(SPA)主要进行波长变量间共线性 影响的有效消除。其提取的特征波长能够表示大多数 样品的光谱信息,降低模型的复杂程度,最大限度的 避免光谱信息重叠。

1.3.4 偏最小二乘法判别分析

偏最小二乘法判别分析(PLS-DA)是基于 PLS 回 归的一种判别方法,将光谱数据和分类变量的信息进 行关联分析,应用几何表达式提供许多模型参数和残 差诊断工具,用于解释和建立回归模型,并对回归模 型进行诊断的一种方法。

1.3.5 最小二乘支持向量机

最小二乘支持向量机(LS-SVM)是在经典 SVM (Support Vector Machine)上的一种改进,对函数的求解 实质上是二次凸规划问题,将经典 SVM 中较复杂的 二次优化问题代替为求解一组线性方程。该方法促使 计算复杂度和求解速度分别降低与加快。

1.3.6 光谱数据分析软件

试验数据分析软件为 ASD View Spec Pro V5.0 (Analytical Spectral Device, USA), The Unscrambler X10.1(CAMO AS, Trondheim, Norway) 和 Matlab R2012a(The Math Works, Natick, USA)。

2 结果与分析

2.1 光谱曲线与特征分析

本试验采集的完好与4种损伤壶瓶枣样本的平均 光谱图如图2所示。由于存在系统误差,光谱曲线在 首、尾两端有较大的噪声,会直接影响实验的准确性, 所以本研究只取450~2450 nm 波段的光谱数据用于分 析。

由图2可见,不同损伤方式和完好壶瓶枣的近红 外光谱曲线趋势基本相似,并没有太明显的差异,但 在可见近红外光谱区完好壶瓶枣的光谱反射值高于其 他4种损伤的壶瓶枣,这可能是由于壶瓶枣受损后样 本的表皮颜色、纹理及内部化学成分和组织结构等发 生了一定的变化,导致光谱图的波峰强度产生差异。



Fig.2 Vis-NIR spectra of intact and subtly-damaged Huping

jujube samples

由光谱图可以看出,4 种损伤壶瓶枣和完好壶瓶 枣的光谱图主要吸收峰位于 960、1180、1300、1590 和 2000 nm,这些吸收峰均是由于水的吸收所导致。 其中 2000 nm 是 O-H键的合频吸收峰,1300 nm 是 O-H键一级倍频峰,960 nm 和 1180 nm 是 O-H键的二 级倍频峰。2000~2500 nm 是可溶性固形物分子中 C-H、N-H 和 O-H 键的合频近红外图谱带所在区,4 种损伤壶瓶枣和完好壶瓶枣在 680 nm 处有明显的吸 收峰,这是由于壶瓶枣果肉细胞中叶绿素对光谱吸收 引起的。

2.2 光谱数据预处理

本试验中采取 S-G 多项式卷积平滑法,选用平滑 窗口为 5,此时能很好滤除各种因素产生的高频噪声; 再对光谱进行多元散射校正(MSC)处理,进而消除基 线漂移的影响。图 3 为预处理后的平均光谱曲线。



图 3 SG+MSC 方法预处理后完好和损伤壶瓶枣可见-近红外光谱 曲线图

Fig.3 Vis-NIR spectra of intact and damaged Huping jujubes, following pretreatment by the Savitzky-Golay and MSC

methods

2.3 光谱数据提取

2.3.1 光谱数据的主成分提取

对经过SG+MSC方法预处理后的120个壶瓶枣样 本光谱数据进行主成分分析 (PCA), 得到5类壶瓶枣 样本前三个主成分的散点分布图如图4所示。



图 4 前 3 个主成分的散点分布图



present in Huping Jujube samples

由图 4 可以看出, 5 类壶瓶枣样本的聚类中心相 近,只有少数几个偏离,且不易区分。提取的前9个 主成分对原始光谱数据的累积信用度见表 2。

由表 2 可知, 前 5 个主成分累计信用度已达到 99%, 表示前5个主成分能够解释原始光谱量99%的 信息,但因4种损伤方式和完好壶瓶枣样本的光谱差 异性较小、重叠部分严重,若选取的主成分相对过少, 会造成有效信息的丢失,影响模型的判别效果。因此 选取前9个主成分建立判别模型,以保证模型具有较 好的判别性能。

2.3.2 基于连续投影算法提取特征波长

利用连续投影算法(SPA)对经过 SG+MSC 方法 预处理后的 120 个壶瓶枣样本的光谱数据进行特征波 长提取,结果见图 5 和图 6。从图 5 可知当选取 7 个 特征变量时,其均方根误差达到最小为0.27566。从图 6可知提取的7个特征波长分别是2225 nm、1390 nm、 552 nm、783 nm、688 nm、2197 nm 和 1931 nm, 其 中 2225 nm 最为重要,其次为 1390 nm。

表 2 前 9 个主成分的累积信用度		
Fable 2 The accumulated credibility of the first nine principal	components	



由表3可知,分别将SG+MSC方法预处理后的完 好和4种损伤壶瓶枣样本校正集全光谱数据(FS)、 主成分分析 (PCA) 得到的 9 个主成分和连续投影算 法(SPA)选取的7个特征波长作为PLS-DA模型的 输入量,在所建立的校正模型中,FS-PLS-DA 判别分 析模型(Rc=0.8395, RMSEC=0.5561)明显优于 PCA-PLS-DA和 SPA-PLS-DA 判别分析模型。 2.4.2 建立最小二乘支持向量机判别模型





0.5561

0.8637

1.1696

表 4 LS−SVM 模型参数	
Table 1 Parameters of the IS SVM model	c

参数	FS-LS-SVM	PCA-LS-SVM	SPA-LS-SVM							
γ	4.4252	3.8276	2.0577×103							
σ^2	4.5333×103	28.2930	170.8511							

建立最小二乘支持向量机(LS-SVM)判别模型, 采用径向基核函数(Radial Basis Function,RBF),其中 正则化参数 γ 和 RBF 核函数的核宽带 σ^2 的选取采 用 基 于 交 叉 验证(Cross-validation)的 网络 搜 索 (Grid-search),寻优过程经过粗选和精选两个步骤,参 数优化结果如图 7 所示,图中网格点"•"反映了第一 步格点搜索范围及步长,曲线反映了误差等高线,网 络点"×"反映了第二步格点搜索范围及步长。各判 别模型参数 γ 和 σ^2 的选取结果见表 4。 基于 PLS-DA、LS-SVM 所建的各种判别模型分别 对完好及4种损伤壶瓶枣的33个预测集样本进行判别分 析,结果见表5。



Fig.7 Optimization of the parameters γ and σ^2 for LS-SVM models

2.4.3 各种判别模型判别结果分析

表 5 各种模型对 5 类壶瓶枣预测集样本判别结果

Table 5 Discriminant results for the five types of Huping jujubes obtain	ined by	the pr	ediction s	et sample me	odels
--	---------	--------	------------	--------------	-------

	不叫兴	距 2m 水泥地损伤		距 3m 水泥地损伤		距 3m 土地损伤		机械损伤		完好壶瓶枣		국 파 미
建模方法	顶测杆 本数	错误样 本数/个	正确率 /%	错误样本 数/个	正确率 /%	错误样本 数/个	正确率 /%	错误样本 数/个	正确率 /%	错误样本 数/个	正确率 /%	忌判别 正确率/%
FS-PLS-DA	33	3	57	2	72	1	86	3	57	1	86	71.6
PCA-PLS-DA	33	1	86	3	57	0	100	1	86	1	86	83
SPA-PLS-DA	33	1	86	1	86	0	100	2	72	1	86	86
FS-LS-SVM	33	2	72	2	72	3	57	1	86	2	72	72.4
PCA-LS-SVM	33	0	100	1	86	0	100	0	100	0	100	97.2
SPA-LS-SVM	33	0	100	2	72	1	86	1	86	0	100	88.9

注: 表中正确判别率为判别正确的样品个数除以总样品个数再乘以100%。

由表 5 可知,基于完好和 4 种损伤壶瓶枣样本的 全光谱数(FS)据分别建立 FS-PLS-DA、FS-LS-SVM 判 别模型,FS-PLS-DA 判别模型对预测集 4 种损伤样本, 包括距离水泥地 2 m、3 m,距离土地 3 m进行自由落体 损伤和机械挤压损伤及完好壶瓶枣样本的正确判别率略 好于 FS-LS-SVM 判别模型,正确判别率分别达到 72%、 72%、57%、86%、72%,总的正确判别率为 72.4%。

利用 PCA 对完好和 4 种损伤壶瓶枣样本光谱数据 提取的 9 个主成分分别建立 PCA-PLS-DA、

PCA-LS-SVM 判别模型, PCA-LS-SVM 判别模型对预 测集4种损伤样本,包括距离水泥地2m、3m,距离土 地3m进行自由落体损伤和机械挤压损伤及完好壶瓶枣 样本的正确判别率明显优于 PCA-PLS-DA 判别模型,正 确判别率分别达到100%、86%、100%、100%、100%, 总的正确判别率为 97.2%。

采用 SPA 算法对完好和 4 种损伤壶瓶枣样本光谱数据提取的 7 个特征波长分别建立 SPA-PLS-DA、SPA-LS-SVM 判别模型, SPA-LS-SVM 判别模型对预

测集 4 种损伤样本,包括距离水泥地 2 m、3 m,距离土 地 3 m 进行自由落体损伤和机械挤压损伤及完好壶瓶枣 样本的正确判别率略优于 SPA-PLS-DA 判别模型,正确 判别率分别达到 100%、72%、86%、86%、100%,总的 正确判别率为 88.9%。

3 结论

本文分别建立了包含完好和4种损伤方式下壶瓶枣 样本的 PLS-DA 和 LS-SVM 动态判别模型,并且比较了 全光谱波长、PCA 提取主成分和 SPA 算法优选特征波长 作为各两种动态判别模型的输入变量时,所建各判别模 型的判别效果。研究表明,PCA 提取主成分方法能够有 效减少模型输入量、提高建模效率并且能很好的满足预 测要求;两种动态判别模型均可满足识别早期轻微损伤 壶瓶枣的实际需要,而 LS-SVM 模型的判别效果最好, 其中 PCA-LS-SVM 判别模型对预测集的4种损伤样本, 包括距离水泥地2m、3m,距离土地3m进行自由落体 损伤和机械挤压损伤及完好壶瓶枣的正确判别率分别达 到 100%、86%、100%、100%、100%,总的正确判别率 达到 97.2%。该研究为无损、快速、准确动态识别早期 轻微损伤壶瓶枣提供了的理论基础。

参考文献

- Oliveri P, Di Egidio V, Woodcock T, et al. Application of class-modelling techniques to near infrared data for food authentication purposes [J]. Food Chemistry, 2011, 125(4): 1450-1456
- [2] 程术希,邵咏妮,吴迪,等.稻叶瘟染病程度的可见-近红外光 谱检测方法[J].浙江大学学报(农业与生命科学版), 2011, 37(3):307-311

CHENG Xi-shu, SHAO Yong-ni, WU Di, et al. Determination of rice leaf disease level based on visible-near infrared spectroscopy [J]. Journal of Zhejiang University (Agriculture and Life Sciences), 2011, 37(3): 307-311

- [3] 刘占宇,王大成,李波,等.基于可见光/近红外光谱技术的倒 伏水稻识别研究[J].红外与毫米波学报,2009,28(5):342-345
 LIU Zhan-you, WANG Da-cheng, LI Bo, et al. Discrimination of lodged rice based on visible/near infrared spectroscopy [J]. Journal of Infrared and Millimeter Waves, 2009, 28(5): 342-345
- [4] 汤丽华,刘敦华. 基于近红外光谱的枸杞化学成分的定量分析[J].现代食品科技,2013,29(9):2306-2310
 TANG Li-hua, LIU Dun-hua. Quantitative analysis of lycium barbarum lcomposition based on near infrared spectrum [J]. Modern Food Science and Technology, 2013, 29(9): 2306-2310
- [5] 张海红,张淑娟,王凤华.应用可见-近红外光谱快速识别沙棘 汁品牌[J].光学学报,2010,30(2):574-578 ZHANG Hai-hong, ZHANG Shu-juan, WANG Feng-hua. Study on fast discrimination of seabuckthom juice varieties using visible-nir spectroscopy [J]. Acta Optica Sinice, 2010, 30(2): 574-528
- [6] Suphamitmongkol W, Nie GL, Liu R, et al. An alternative approach for the classification of orange varieties based on

near infrared spectroscopy [J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2013, 91: 87-93

- [7] 庞艳苹,刘坤,闫军颖,等.近红外光谱法快速鉴别成安草莓[J]. 现代食品科技,2013,29(5):1160-1162
 PANG Yan-ping, LIU Kun, YAN Jun-ying, et al. Rapid identification of cheng'an strawberry with near infrared [J]. Modern Food Science and Technology, 2013, 29(5): 1160-1162
- [8] Moscetti R, Haff R P, Aernouts B, et al. Feasibility of Vis/NIR spectroscopy for detection of flaws in hazelnut kernels [J]. Journal of Food Engineering, 2013, 118(1): 1-7
- [9] 王斌,薛建新,张淑娟.基于高光谱成像技术的腐烂、病害梨 枣检测[J].农业机械学报,2013,44(S1):205-209
 WANG Bin, XUE Jian-xin, ZHANG Shu-juan. Detection of decay and disease pear jujube based on hyperspectral imaging
 [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(S1): 205-209
- [10] Xing J, De Baerdemaeker J. Fresh bruise detection by predicting softening index of apple tissue using VIS/NIR spectroscopy [J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 45(2):176-183
- [11] Lee W H, Kim M S, Lee H, et al. Hyperspectral near-infrared imaging for the detection of physical damages of pear [J]. Journal of Food Engineering, 2014, 130: 1-7
- Pholpho T, Pathaveerat S, Sirisomboon P. Classification of longan fruit bruising using visible spectroscopy [J]. Journal of Food Engineering, 2011, 104(1): 169-172
- [13] ShuJuan Zhang, HaiHong Zhang, YanRu Zhao. A simple identification model for subtle bruises on the fresh jujube based on NIR spectroscopy [J]. Mathematical and Computer Modelling, 2013, 58(3-4): 545-550
- [14] Macho S, Rius A, Callao M P. Monitoring ethylene content in heterophasic copolymers by near-infrared spectroscopy: Standardisation of the calibration model [J]. Analytica Chimica Acta, 2001, 445(2): 213-220