基于特征波长提取的哈密大枣可溶性固形物 的高光谱预测

孙静涛¹,马本学²,董娟¹,杨杰²,徐洁²,蒋伟²

(1.石河子大学食品学院,新疆石河子 832000)(2.石河子大学机械电气工程学院,新疆石河子 832000) 摘要:本文利用高光谱图像技术对干制后的哈密大枣可溶性固形物含量(SSC)进行预测研究。使用多种预处理方法对原始光 谱进行处理,并对原始光谱和预处理后的光谱分别建立PLS模型,对比分析得出均值中心化(MC)处理效果最佳。对MC处理后的光 谱经联合区间偏最小二乘算法(si-PLS)筛选后,再结合遗传算法(GA)和竞争性自适应重加权算法(CARS)提取哈密大枣SSC的特 征波长,将提取的波长变量建立哈密大枣SSC的PLS预测模型。结果显示:利用MC-CARS-GA-si-PLS方法提取的16个关键波长变量(仅 占全光谱变量的2%)所建立的PLS模型性能优于全光谱PLS模型。该模型的预测集相关系数(Rp)、预测均方根误差(RMSEP)和预测(RPD) 分别为0.93、0.48和2.721。该方法提取的波长变量所建立的预测模型,不仅使模型简化,而且增强了模型的预测能力,为高光谱图像 技术对水果及其干制品的定量分析研究提供了参考。

关键词: 高光谱; 哈密大枣; 可溶性固形物; 特征波长提取; 偏最小二乘法 文章篇号: 1673-9078(2016)9-174-179

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2016.9.026

Characteristic Wavelength Selection-based Prediction of Soluble Solids

Content of Hami Big Jujubes using the Hyperspectral Imaging

Technology

SUN Jing-tao¹, MA Ben-xue², DONG Juan¹, YANG Jie², XU Jie², JIANG Wei²

(1.College of Food Science, Shihezi University, Shihezi 832000, China)

(2.College of Mechanical and Electrical Engineering, Shihezi University, Shihezi 832000, China)

Abstract: Prediction of soluble solids content (SSC) of dried Hami big jujubes was studied by means of the hyperspectral imaging technology in this work. Many spectral preprocessing methods were used to preprocess the raw spectra, and the partial least squares (PLS) models were established based on the raw spectra and preprocessed ones. The comparison and analysis showed that the best preprocessing result was achieved by the mean centering (MC) algorithm. MC-pretreated spectra were screened by the synergy interval partial least squares (si-PLS) method, and the characteristic wavelengths of SSC of Hami big jujubes were selected using a combination of a genetic algorithm (GA) and competitive adaptive reweighted sampling algorithm (CARS). The selected wavelength variables were used to build a PLS predictive model for SSC of Hami big jujubes. The results indicated that 16 characteristic wavelengths were selected and accounted for only 2% of full spectral variables in the MC-CARS-GA-si-PLS model. The performance of the newly built PLS model was better than that of the PLS model based on the full spectrum. The correlation coefficient of the prediction set (Rp), the root mean square error of prediction (RMSEP), and the relative prediction deviation (RPD) of this model were 0.93, 0.48, and 2.721, respectively. The results show that this PLS predictive model based on the wavelength selection not only is simpler but also enhances the predictive ability of such models, and can serve as a reference for quantitative analysis and study of fruits and dried fruits by the hyperspectral imaging technology.

Key words: hyperspectral imaging technology; Hami big jujubes; soluble solids content; selection of characteristic wavelengths; partial least squares

收稿日期: 2015–10–23 基金项目: 国家科技支撑项目(2015BAD19B03) 作者简介: 孙静涛(1981–),男,博士,研究方向: 农产品无损检测研究 通讯作者: 马本学(1970–),男,教授,博士生导师,研究方向: 农产品智能化检测与分级装备 哈密大枣是新疆传统名优特产之一,因其个大肉 厚、食之浓郁、外观紫红且有光泽,故有"天下一绝" 的美称。依据国家农业行业标准《哈密大枣》NY/T 871-2004 规定^[1],可溶性固形物是评价哈密大枣内部 品质和划分等级的重要指标,并且可溶性固形物含量 决定了红枣的口感、味道和储藏性能。红枣的鲜食期 较短,大量的红枣采收后进行干制,以便储藏及销售。 为满足干制后红枣的品质检测和分级的需求,采取快 速、无损的检测方法是很有必要的。这不仅可以增加 我国的红枣出口数量,对红枣进行分级管理,也可以 完善对红枣资源的综合利用,产生显著的经济效益及 社会效益。

近年来,将高光谱图像技术应用在农产品品质检 测中已成为研究热点,高光谱图像技术集中了光学、 电子学、信息处理以及计算机科学技术,将二维成像 技术和光谱技术有机的结合在一起,可对农产品和食 品的内、外部品质进行快速、简捷的无损检测^[2]。由 于高光谱分辨率较高,所以其原始光谱数据量较大, 其中包含有大量与被测组分不相关或无用的信息,这 些信息会削弱光谱模型的预测能力,为了剔除不相关 的变量,得到预测能力更好、性能更稳定的模型,提 取光谱特征波长是非常必要的[3-4]。因此,许多学者对 农产品品质无损检测及其特征波长提取做了很多的研 究。Jian-guo He^[5]等采用高光谱图像技术对灵武长枣 的 SSC 进行了预测研究, 使用人工神经网络建立了灵 武长枣 SSC 的预测模型,其决定系数 R²为 0.9027; 徐爽^[6]等利用高光谱图像技术预测了长枣的糖度,结 果表明,采用 BP 神经网络预测长枣糖度的效果优于 PLS 预测结果,模型的预测相关系数 Rp为 0.9274; 彭 云发^[4]等采用遗传算法(GA)从全波段中提取了 12 个 特征波长建立了红枣总糖的 PLS 模型,有效的提高了 模型的预测能力,其预测相关系数 Rp为 0.9379。李江 波^门等采用近红外高光谱图像技术对鸭梨 SSC 进行了 预测, 使用 CARS 算法从全光谱中提取了 37 个特征 变量用于建立 PLS 模型, 预测结果优于全波段, 其预 测决定系数 R² 为 0.908。

综上所述,在利用高光谱图像技术检测枣类果实的报道中,所选用的研究对象为区域性较强的鲜枣, 而对干枣品质检测的方法却鲜有报道。鉴于此,本试 验尝试以干制后的哈密大枣为研究对象,采用不同的 方法对光谱进行处理,并优选出最佳的光谱预处理方 法。先经过联合区间偏最小二乘法(si-PLS)筛选后, 再结合遗传算法(GA)和竞争性自适应重加权算法 (CARS)进一步筛选特征波长,然后分别建立全光 谱和提取的特征波长的可溶性固形物 PLS 预测模型, 并对所建立的模型进行比较分析,最后选出最优模型。

1 材料与方法

1.1 试验材料

实验所用 90 颗新疆哈密大枣样本均从石河子干 果批发市场选购。对样本擦拭以去除表面污垢并进行 依次编号后在室温下(25±1 ℃,50~55% RH)放置 24 h 后进行光谱数据采集,以便避免温度和湿度对模 型性能的影响。试验样本大小均匀,其横、纵径变化 范围为 30.62~41.64 mm,而样本重量差异较大,其变 化范围为 9.22~16.24 g。SPXY 是一种高效的样本集划 分方法,由于该方法在计算样本之间的距离时兼顾光 谱向量和浓度向量,能够有效的利用于光谱定量模型 的建立^[8]。本实验采用 SPXY 方法选取 68 个样本作为 校正集,剩余 22 个样本做为预测集。

1.2 试验仪器

高光谱图像系统(图 1 所示)主要由 CCD 摄像机 (C8484-05G01 型,日本 Hamamatsu 公司);成像光 谱仪(V10E-QE 型),芬兰 Spectral Imaging Ltd.;1 套光纤卤素灯(DCR III型),150 W,美国 Schott 公 司;输送装置(PSA200-11-X 型),北京卓立汉光公司; 图像采集软件(Isuzu Optics Corp. Taiwan)、计算机 (DELL 9020MT, Intel core i7-4790@3.6 GHz, RAW 8G)和暗箱组成。高光谱图像波长范围为 400~1000 nm,像素光谱分别率为 0.6,共 953 个波段。



Fig.1 Schematic illustration of the hyperspectral imaging system and hyperspectral imaging data cube

^{1.3} 高光谱数据采集

采集光谱数据前先将高光谱仪器预热 30 min,为 了消除仪器中存在的暗电流和光源强度分布不均所产 生的噪声,需要根据公式(1)对高光谱图像进行黑白 校正。式(1)中 *I* 为校正后图像; *W* 为扫描标准白色 校正板得到的标定图像; *B* 为扫描黑色校正板得到得 标定图像; *R* 为原始的高光谱图像; *DN* 为本高光谱 系统光照强度的最高值 4095。

$$I = \frac{R - B}{W - B} \times DN \tag{1}$$

经过多次实验调整及参数优化,当曝光时间为 32 ms、物距为 390 mm 和图像采集速度为 1.05 mm/s 时可得到清晰且不失真的样本图像。每个样本经过 180 ° 翻转后分别采集 2 幅图像,图像数据采集完成后,使用 ENVI 4.5 软件在避开样本亮度最高的区域选取 50×50 Pixels 的正方形区域做为感兴趣区域(ROI)^[9],再计算每个样本 2 幅图像的感兴趣区域的平均反射值做为样本的原始光谱曲线(如图 1 所示)。经分析研究发现,小于 500 nm 的波段范围内的光谱噪声较大,因此选取 500~1000 nm 波段范围来进行分析研究,共 783 个波段。

1.4 哈密大枣可溶性固形物测量

按照 GB 12295《水果、蔬菜制品可溶性固形物含量的测定》中规定的方法来测定哈密大枣可溶性固形物的含量, 仪器选用数字式折射仪(PR-101型, Atago, Japan)。90个哈密大枣样本的可溶性固形物含量统计结果如表 1 所示。

表 1 哈密大枣可溶性固形物含量统计 Table 1 Statistical analysis of SSC of Hami big jujube samples

样本集	数量 -	可溶性固形物				
		范围/°Bx	平均值/°Bx	标准偏差/°Bx		
校正集	68	71.1~78.6	74.57	1.51		
预测集	22	72.1~77.8	74.62	1.33		

1.5 评价模型参数

模型的准确性和可靠性由校正集相关系数 Rc、预测集相关系数 Rp、校正均方根误差(RMSEC)、预测均方根误差(RMSEP)^[10]和预测相对偏差(RPD)值来评价。一个性能好的模型具有高的 Rc、Rp 和 RPD 值,低的 RMSEC 和 RMSEP 值,且 RMSEC 和 RMSEP 值差异越小越好。当模型的 RPD 值在 1.5~2 之间时,代表具有一定的预测能力;在 2~2.5 之间,代表可以粗略定量;在 2.5~3 之间,代表具有较好预测精度^[11]。

2 结果与讨论

2.1 基于全光谱哈密大枣 SSC 的 PLS 建模分

利用MATLAB2014a软件(The MathWorks, Natick, USA)完成对原始光谱(RAW)的处理、特征波长的 筛选和 PLS 建模。由于原始光谱(图 2a 所示)中通 常除包含样品品质信息外,还包含有仪器、电噪声、 样品背景和环境杂散光等无关信息,为减弱或消除这 些干扰因素要对原始光谱作预处理。分别使用多元散 射校正(MSC)、标准正态变换(SNV)、均值中心化 (Mean Centering)、Savitzky-Golay(SG)卷积分平滑、 一阶导数(1st Der)和多种预处理方法相结合的方法 对原始光谱进行处理,并分别建立哈密大枣 SSC 的 PLS 预测模型,其最优预测结果见表 2。



Fig.2 Spectral of Hami big jujubes

注: a, 原始光谱; b, MC处理后光谱。

表 2 所示,通过对不同方法处理光谱后的 PLS 建 模结果比较,利用 MC (图 2b 所示)对原始光谱处理 后的 PLS 建模效果最优,其 R_C、R_P和 RPD 分别为 0.91、0.88 和 2.105,均为最高; RMSEC 和 RMSEP 较低,并且因子数最低。然而,由于全波段的光谱信 息具有较多的冗余数据和共享性变量,势必会影响模 型的预测精度和建模速度,因此将经 MC 处理后的光 谱作为的研究光谱进行提取特征波长。

Table 2 Results of	f PLS modeling	for SSC by differe	nt spectral preprocess	ing methods
外理云注	因子粉 —	校正集	预测集	- 000

ムロント	因子数 -	1 = 11=			DDD	
处理方法		R _C	RMSEC	R _P	RMSEP	RPD
RAW	10	0.91	0.54	0.86	0.66	1.959
MC	9	0.91	0.56	0.88	0.62	2.105
SNV+SG(7、2)	10	0.9	0.65	0.85	0.74	1.898
MSC+1stDer	10	0.89	0.71	0.81	0.77	1.705

2.2 基于特征波长提取的建模研究

2.2.1 si-PLS 特征波长提取及建模分析

联合区间偏最小二乘法是由 Norgaard¹¹²¹提出的 一种在光谱数据中运用局部区域建立回归模型的方 法,它将同一次区间划分中精度较高的几个局部模型 所在的子区间联合起来,共同预测待测样本品质指 标。在所有联合模型中,当其校正模型的交互验证均 方根误差(RMSECV)最小时,所对应的子区间组合即 为最佳组合。

本研究中使用 si-PLS 将光谱数据划分为 20 个子 区间,尝试联合4个子区间建立哈密大枣可溶性固形 物的校正模型。如图 3a 中所示,当 2、12、17 和 20 这四个区间组合时,取8个主成分时建立的哈密大枣 可溶性固形物 PLS 模型的 RMSECV 值最小 (0.7411), 即为筛选的最优的光谱区间组合。如图 3b 所示, 该 4 个区间所对应的波段分别为 524.96~ 549.11 nm、771.94~796.39 nm、898.34~923.25 nm 和 975.32~1000.5 nm, 共157个波长变量, 所选取的波 长变量占全波段的 20%, 其 PLS 建模结果见表 3。 结果显示,其 Rc 比全光谱 PLS 模型提高了 1%,但 是 R_P和 RPD 低于全光谱 PLS 模型。说明 si-PLS 模 型的预测能力和稳定性比全光谱 PLS 模型差, si-PLS 没有提取出足够的与 SSC 相关的波长变量,虽然该 方法相对于全波段建模减少了波长变量,但是在这4 个区间里仍然有一些共线波长变量。因此,还需从这 4个最优子区间中再次筛选有效的波长变量。





Fig.3 Wavelengths selected by the si-PLS method

注: a, 联合区间 PLS 主成分对应的 RMSECV 值; b, si-PLS 选择的最佳子。



Fig.4 Selection of wavelengths by the GA-si-PLS method

注: a, 波长变量被选用的频次图; b, 选用的变量数对应 的 RMSECV 值。

遗传算法^[13]是一种通过模拟自然进化过程搜索

最优解的方法。从任意一个初始群体出发,通过随机选择交叉和变异操作,产生一群新的更适应环境的个体,使群体进化到搜索空间中越来越好的区域。本研究中,遗传算法的参数设定为:初始种群 50,变异概率 0.005,遗传迭代次数为 100 和收敛率为 0.5。在遗传迭代终止后,将被选用频次最多的波段按频次高低顺序逐一加入 PLS 模型中,以最小的 RMSECV 确定出最佳的建模变量。

在本研究中,采用遗传算法(GA)对 si-PLS 所 选出的4个最优子区间联合的波长变量再进一步进行 筛选。图 4a 为 GA 迭代所选光谱变量的频率图,表示 了对应波长在遗传迭代过程中被选中的频次,被选中 的频率越高说明该波长对 SSC 的贡献率越大, 图中绿 色实线以上的波长变量为所筛选的最佳变量(被选频 次超过7次)。图4b表示被选波长变量数所对应的 RMSECV 值的变化,图中绿色圆点表示当选取 48 个 波长变量时,其PLS模型的RMSECV最低(0.7001), 所选取的波长变量占全波段的 6%, 其 PLS 建模结果 见表 3。结果显示,其 R_C 和 R_P 均比全光谱 PLS 模型 有所提高,其中 Rp 较全光模型提高了 3%, RMSEC 和 RMSEP 比全光谱和 si-PLS 模型更低且更接近了, 且 RPD 有很大的提高,说明 GA-si-PLS 模型的预测能 力和稳定性有了较大的提高。另外,从波长频次图中 可看出, 被选用频次最多的波段主要集中在 75~125 之间(对应的波段为782.22~980.61 nm),其与红枣 SSC 不相关的光谱信息还是相对较多,所以再次从这 48个变量中继续筛选有效的波长变量。

2.2.3 CARS-GA-siPLS 特征波长提取及建模 分析

竞争性自适应重加权算法(CARS)^[14]是模仿达 尔文适者生存进化理论基础上提出的一种新的变量选 择方法,该方法利用自适应重加权采样技术和指数衰 减函数优选出每次循环所构建的PLS模型中回归系数 绝对值大的变量点,利用十折交叉验证选出N个PLS 子集模型中交叉验证均方根误差最小的子集定义为最 优变量子集。





CARS-GA-si-PLS model

本研究中,蒙特卡罗采样次数设定为50。如图5a 所示,采样过程中,在指数衰减函数EDP的作用下,随着采样次数的增加,变量数量减少速度由快至慢, 这表示在变量筛选中算法能够对变量进行"粗选"和 "精选",并提高了算法变量筛选的效率。从图5b中可 看出随着采样次数的增加,PLS预测模型的RMSECV 值逐渐减小,当采样次数达到第17次时RMSECV值 为0.6508最低。这说明在前17次采样运算中删除了 大量与哈密大枣SSC无关的信息。从第17采样之后, PLS预测模型的RMSECV值又逐步增大,说明一些 与哈密大枣SSC相关的重要波长变量被剔除,从而使 模型预测能力下降。图5c表示48个波长变量在每次

Modern Food Science and Technology

2016, Vol.32, No.9

采样中回归系数的变化路径,其中第17次(星号垂线 表示)采样后筛选的波长变量所建立 PLS 模型的 RMSECV 值最低,在第17次采样后所获得的变量确 定为预测哈密大枣 SSC 的关键波长变量,共计16个 变量,所选取的波长变量占全波段的2%,其PLS 建 模结果见表3。结果显示,其R_C、R_P和 RPD 比 si-PLS、 GA-si-PLS 和全光谱 PLS 模型均有较大的提高, R_P较 全光谱提高了 5%, RMSEC 和 RMSEP 均为最低且比 较接近,且 RPD 提高到 2.721,说明 CARS-GA-si-PLS 模型有更高的预测能力和更好的稳定性。其校正集和 验证集样本预测值和实测值的散点图如图 6 所示。最 终将 783 个波长变量减少到 16 个,很大程度上简化了 模型,并且提高了模型的预测能力及稳定性。

表 3 不同波长提取方法的可溶性固形物 PLS 建模结果							
Table 3 Results (on SSC) of PLS modeling with different wavelength selection algorithms							
山田上い	波数	因子数·	校正集		验	证集	DDD
处理方法			R _C	RMSEC	R _P	RMSEP	KPD
MC	783	9	0.91	0.56	0.88	0.62	2.105
MC+si-PLS	157	8	0.92	0.64	0.87	0.64	2.028
MC+GA-si-PLS	48	8	0.92	0.57	0.91	0.53	2.412
MC+CARS-GA-si-PLS	16	8	0.93	0.52	0.93	0.48	2.721

3 结论

利用高光谱图像技术结合不同的特征波长选择方 法对哈密大枣 SSC 进行了定量预测。对原始光谱进行 MC 处理后,结合 si-PLS、GA 和 CARS 算法提取特 征波长,再将所选波长采用 PLS 方法建立预测模型。 结果表明,利用 MC-CARS-GA-si-PLS 方法提取了 16 个关键波长变量,所选变量仅占全光谱变量的 2%, 所建立模型性能优于全光谱 PLS 模型,其 R_C、R_P、 RMSEC、RMSEP 和 RPD 分别为 0.93、0.93、0.52、 0.48 和 2.721。该方法所选取的特征波长能有效反映哈 密大枣可溶性固形物的信息,不仅提高了模型的预测 精度和稳定性,而且还在很大程度上减少了建模所用 的波长变量,使模型简化。该研究结果为采用高光谱 技术对水果及其干制品的定量分析研究提供了参考。

参考文献

[1] NY/T871-2004,中华人民共和国农业行业标准"哈密大 枣"[S]

NY/T 871-2004, People's republic of China agricultural industry standards "Hami Big Jujubes" [S]

- [2] WU Di, SUN Da-wen. Advanced applications of hyperspectral imaging technology for food quality and safety analysis and assessmen [J]. Innovative Food Science and Emerging Technologies, 2013, 19: 15-28
- [3] 陈斌,卢丙,陆道礼.基于微型近红外光谱仪的油菜籽含油 率模型参数优化研究[J].现代食品科技,2015,31(8):286-292 CHEN Bin, LU Bing, LU Dao-li. Parameter optimization of rapeseed oil content model using a miniature near-infrared spectrometer [J]. Modern Food Science & Technology, 2015,

31(8): 286-292

- [4] 彭云发,詹映,彭海根.用遗传算法提取南疆红枣总糖的近 红外光谱特征波长[J].食品工业科技,2015,36(3):303-307
 PENG Yun-fa, ZHAN Ying, PENG Hai-gen. Analysis of near infrared spectroscopy of jujube sugar content by genetical gorithms [J]. Science and Technology of Food Industry, 2015, 36(3): 303-307
- [5] HE Jian-guo, LUO Yang, LIU Gui-shan, et al. Prediction of soluble solids content of jujube fruit using hyperspectral reflectance imagingI [J]. Advanced Materials Research, 2013, 706-708: 201-204
- [6] 徐爽,何建国,易东,等.基于高光谱图像技术的长枣糖度无 损检测[J].食品与机械,2012,28(10):168-170
 XU Shuang, HE Jian-guo, YI Dong, et al. Nondestructive detection of sugar content in long jujube based on hyperspectral imaging technique [J]. Food & Machinery, 2012, 28(10): 168-170
- [7] 李江波,郭志明,黄文倩,等.应用 CARS 和 SPA 算法对草莓 SSC 含量 NIR 光谱预测模型中变量及样本筛选[J].光谱学 光谱分析,2015,35(2):372-378

LI Jiang-bo, GUO Zhi-ming, HUANG Wen-qian. et al. Near-infrared spectra combining with CARS and SPA algorithms to screen the variables and samples for quantitatively determining the soluble solids content in strawberry [J]. Spectroscopy and Spectra Analysis, 2015, 35(2): 372-378

- [8] Roberto Kawakami Harrop Galvao, Mario Cesat Ugulino Araujo, Gledson Emidio Jose, et al. A method for calibration and validation subset partitioning [J]. Talanta, 2005, 67: 736
- [9] 郭志明,黄文倩,彭彦昆,等.高光谱图像感兴趣区域对苹果

现代食品科技

Modern Food Science and Technology

糖度模型的影响[J].现代食品科技,2014,30(8):59-63

GUO Zhi-ming, HUANG Wen-qian, PENG Yan-kun, et al. Impact of region of interest selection for hyperspectral imaging and modeling of sugar content in apple [J]. Modern Food Science & Technology, 2014, 30(8): 59-63

[10] 褚小立.化学计量学方法与分子光谱分析技术[M].北京:化
 学工业出版社,2011
 CHU Xiao-Li. Molecular spectroscopy analytical technology

combined with chemometrics and its application [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2011

[11] Nicolar B N, Beullens K, Bobelyn E, et al. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy [J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 46: 99

- [12] Norgaard L, Saudland A, Wagner J, et al. Interval partial least squares regression (iPLS); a comparative chemometric study with an example form near-infrared spectroscopy [J]. Applied Spectroscope, 2000, 54(3): 413-419
- [13] Leardi R, Lupiáez A, González. Genetic algorithms applied to feature selection in PLS regression: how and when to use them [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1998, 41(2): 195-207
- [14] Hui Jiang, Hang Zhang, Quan-sheng Chen, et al. Identification of solid state fermentation degree with FT-NIR spectroscopy comparison of wavelength variable selection methods of CARS and SCARS [J]. Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2015, 149(5): 1-7