

班兆军, 高喧翔, 马肆恒, 等. 基于高光谱和深度学习的苹果品质无损检测方法[J]. 江苏农业学报, 2024, 40(8): 1446-1454.
doi: 10.3969/j.issn.1000-4440.2024.08.009

基于高光谱和深度学习的苹果品质无损检测方法

班兆军¹, 高喧翔¹, 马肆恒¹, 张 爽¹, 方晨羽¹, 王俊博², 朱 艺²

(1. 浙江科技学院生物与化学工程学院/浙江省农产品化学与生物加工技术重点实验室/浙江省农业生物资源生化制造协同创新中心, 浙江 杭州 310023; 2. 阿克苏优能农业科技股份有限公司, 新疆 阿克苏 843100)

摘要: 本研究使用近红外高光谱成像技术获取苹果的高光谱数据, 对苹果糖度、酸度指标进行无损检测。针对高光谱数据量大、信息冗余多的特点, 分别采用标准化 (Standardization, SS)、标准正态变换 (Standard normal variate, SNV)、最小二乘平滑滤波 (Savitzky-Golay smoothing filtering, SG) 和多元散射校正 (Multiplicative scatter correction, MSC) 对苹果的光谱数据进行预处理。针对高光谱图像波段多的特点, 分别采用连续投影 (Successive projections algorithm, SPA) 算法、竞争性自适应加权 (Competitive adaptive reweighted sampling, CARS) 算法和随机蛙跳 (Random frog, RF) 算法选取苹果的特征波长。对提取的特征波长分别用支持向量机 (Support vector machine, SVM) 模型、卷积神经网络 (Convolutional neural networks, CNN) 模型和基于深度学习的定量光谱数据分析 (DeepSpectra) 模型对苹果的糖酸比进行预测。结果表明, 基于深度学习的定量光谱数据分析 (DeepSpectra) 模型预测的正确率达到 93.70%, 有较高的精确度, 可以较好地对苹果糖酸比进行预测。本研究将高光谱成像技术与基于深度学习的定量光谱数据分析模型相结合, 实现了无损检测苹果糖酸比。

关键词: 高光谱; 苹果; 糖酸比; 无损检测

中图分类号: S661.1

文献标识码: A

文章编号: 1000-4440(2024)08-1446-09

Non-destructive detection method of apple quality based on hyperspectral and deep learning

BAN Zhaojun¹, GAO Xuanxiang¹, MA Yiheng¹, ZHANG Shuang¹, FANG Chenyu¹, WANG Junbo², ZHU Yi²

(1. School of Biological and Chemical Engineering, Zhejiang University of Science and Technology/Zhejiang Provincial Key Laboratory of Chemical and Biological Processing Technology of Farm Products/Zhejiang Provincial Collaborative Innovation Center of Agricultural Biological Resources Biochemical Manufacturing, Hangzhou 310023, China; 2. Aksu Youneng Agricultural Technology Co., Ltd., Aksu 843100, China)

Abstract: The hyperspectral data of apples were obtained by using near-infrared hyperspectral imaging technology, and the indexes of sugar content and acidity were detected nondestructively. For the characteristics of large amount of hyperspectral data and information redundancy, standardization (SS), standard normal variate (SNV), Savitzky-Golay smoothing filtering (SG) and multiplicative scatter correction (MSC) were used to preprocess the spectra of apples. According to the characteristic of hyperspectral images with many bands, successive projections algorithm (SPA), competitive adaptive reweighted sampling (CARS) algorithm and random frog (RF) algorithm were used to select the characteristic wavelengths of apples. Support vector machine (SVM) model, convolutional neural networks (CNN) model and quantitative spectral data analysis based on deep learning (DeepSpectra) model were used to predict the sugar-acid ratio of apples. The results showed that the prediction accuracy of DeepSpectra model was 93.70%, which had high

收稿日期: 2023-06-21

基金项目: 浙江省“尖兵”“领雁”重点科技计划项目 (2022C04039)

作者简介: 班兆军 (1980-), 男, 辽宁大石桥人, 博士, 教授, 主要从事农产品采后品质及标准化研究。 (E-mail) banzhaojun@zust.edu.cn

accuracy and could be used to predict the sugar-acid ratio of apples. In this study, hyperspectral imaging technology and DeepSpectra model were combined to realize the non-destructive detection of the sugar-acid ratio of apples.

Key words: hyperspectral; apple; sugar acid ratio; nondestructive testing

苹果是人们日常生活中最常见的水果之一,它富含维生素和无机盐,而且价格实惠,口感酸甜^[1]。此外,苹果还含有大量的钾、铁、钙等营养元素,是最有营养的水果之一^[2]。苹果含糖量的高低决定了人们对苹果口感的评价以及营养价值的评估,含糖量是衡量苹果品质的主要指标,因此在分级环节快速无损检测苹果的含糖量十分关键^[3]。苹果品质可以分为内在品质与外在品质,其中苹果的内在品质包括苹果的糖度、酸度、糖酸比、硬度、含水率等,这些指标可以判定苹果的营养成分、口感及储存时间。但对苹果的内在品质的检测会对果实造成破坏,且检测效率较低。

近红外光谱分析方法是一种检测苹果内在品质的手段,可以快速、无损、便捷地检测苹果内在品质^[4-7]。高光谱成像技术是将成像技术与光谱技术相结合,检测二维几何空间及一维光谱信息,从中提取出高光谱分辨率的连续、窄波段的图像数据。高光谱成像技术可以用于芒果、梨、柿子等水果品质的快速无损分析、分级以及生产监控、质量控制等方面^[8-10]。近年来,高光谱成像技术被用于苹果内在品质的检测。Fernando 等^[11]利用高光谱成像技术对 Red Delicious、Golden Delicious 和 Jonagold 3 种苹果的可溶性固体含量和硬度进行了检测,发现在融合了高光谱数据特征和图像特征后,可以更有效地提高偏最小二乘回归(PLS)模型的准确度。冯迪^[7]将标准正态变换(SNV)与二阶导数(SD)这 2 种预处理方法相结合,并用连续投影算法(SPA)提取其中的特征波段,最后采用经过优化的反向传播神经网络(BPNN)搭建高光谱数据与苹果硬度之间的回归模型。

深度学习技术不仅可以提取出更多的深层特征,还可以将一维光谱特征与二维空间特征相结合。将深度学习方法应用于光谱数据分析,可以减少对专家经验和已有知识的依赖,让人们能够更精确、更有层次地从原始光谱数据的信息中提取出有效信息。Acquarelli 等^[12]提出了具有一个卷积层的卷积神经网络(CNN)模型,利用 10 个数据集验证该模型的精度,并在原始光谱数据和经过预处理的光谱

数据上同时应用了该模型。

在上述研究中均提取了不同的特征波长,但特征波长的有效性尚未得到确认^[13]。此外,大部分研究集中于预测苹果糖度,对苹果酸度和糖酸比预测的研究较少,缺少苹果品质与酸度之间的关系的考虑^[7,11]。本研究采用高光谱成像技术对苹果进行高光谱成像,提取苹果赤道面上感兴趣区域(Region of interest, ROI)的光谱数据,从而获得光谱曲线。对苹果光谱数据进行预处理,并评估各种数据预处理方法的效果,选取合适的光谱数据预处理方法。进一步通过对比特征波长提取方法的优化情况,选取较好的特征波长提取手段,最后采用支持向量机(SVM)、卷积神经网络(CNN)和基于深度学习的定量光谱数据分析处理(DeepSpectra)优化预测模型,选取决定系数(R^2)较大、均方根误差(RMSE)较小的模型预测苹果糖酸比。本研究拟将高光谱分析方法与深度学习技术相结合,以期快速、准确、无损地预测苹果糖度、酸度、糖酸比,为苹果内在品质无损检测的研究提供参考。

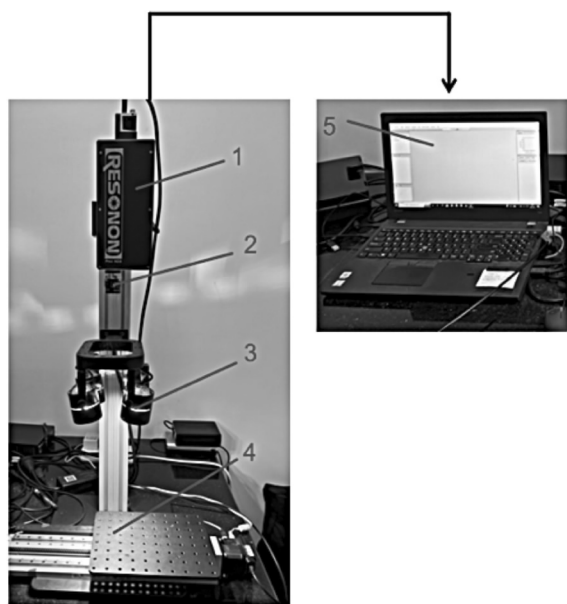
1 材料与方法

1.1 试验材料

选取新疆阿克苏地区红旗坡农场中 12 年树龄的苹果树,采摘无病虫害、无机械损伤的阿克苏富士苹果 220 个,平均果重 233.42 g,平均果径 77.41 mm,擦去苹果表面果霜、果蜡,依次编号。利用 Kennard-Stone 算法^[14]将苹果以 4:1 的比例分成校正集和预测集,。校正集苹果 176 个,预测集苹果 44 个。

1.2 仪器与设备

PAL-BX1 ACID1 Master Kit 便携式糖酸一体机(日本爱拓公司产品),Resonon Pika KC2 成像光谱仪(北京理加联合科技有限公司产品),线性移动平台,安装塔,照明装置,云台,NB 单相电流智能检测仪,GST36U12-P1JW 电源供感器(中国台湾明纬公司产品),DMX-J-SA-17 步进电机(美国阿卡斯公司产品),acA1920-155um 面阵相机(德国巴斯勒公司产品)(图 1)。



1:光谱仪;2:面阵相机;3:卤素灯光源;4:载物移动平台;5:计算机。

图1 供试仪器及设备

Fig.1 Test instruments and equipment

1.3 光谱采集

采集 400~1 000 nm 波段的苹果光谱信息。设置光谱分辨率为 1.3 nm,帧频率为 20.0 Hz,曝光时间为 20.0 ms,平台的运行速率达到 355 pps,增益 (Gain) 达到 3 dB,且苹果和摄像机之间的距离设置为 20.0 cm。在所拍摄到的苹果光谱图像中,选取位于苹果赤道面附近的150×150个像素点大小的感兴趣区域(ROI),提取其中的光谱数据。为了减少光线分布不均匀,准确测量出被测物体的相对反射率,在对苹果进行光谱信息采集前,使用黑板校正光谱信息^[15],按照公式(1)计算苹果的高光谱数据:

$$R_{\lambda,n} = \frac{S_{\lambda,n} - D_{\lambda,n}}{W_{\lambda,n} - D_{\lambda,n}} \quad (1)$$

式中, R 为经过黑板校正的苹果高光谱数据; S 为未经黑板校正的苹果原始光谱数据; W 为黑暗环境下采集的光谱数据; D 为全反射环境下采集的光谱数据; λ 为 λ 波长; n 为像素。

1.4 可溶性固形物含量、可滴定酸含量测定及糖酸比计算

在苹果样品赤道面三处等角度切 10 mm×10 mm×10 mm 果肉,放入手动榨汁器中,挤压获取果汁,使用 PAL-BX/ACID1 Master Kit 便携式糖酸一

体机测量所测苹果的可溶性固形物(SS)含量和可滴定酸(TA)含量,重复测量 3 次,取平均值^[16]。按公式(2)计算苹果的糖酸比(RST):

$$RST = SS/TA \quad (2)$$

式中, RST 为糖酸比; SS 为可溶性固形物含量(%); TA 为可滴定酸含量(%)。

1.5 光谱数据预处理

采用标准正态变换(SNV)、多元散射校正(MSC)、最小二乘平滑滤波(SG)和标准化(SS)对苹果光谱数据进行预处理,可以减少背景干扰、光线干扰和噪声干扰等,剔除冗余无效信息,增加精准率^[17]。分别利用原始光谱数据(RW)以及标准正态变换(SNV)、多元散射校正(MSC)、最小二乘平滑滤波(SG)和标准化(SS)预处理后的光谱数据建立偏最小二乘回归模型(PLS)。选取其中 R^2 较大且均方根误差(RMSE)较小的方案为较优方案。评价指标 R^2 和 RMSE 计算方法分别如公式(3)和公式(4)所示:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{n=1}^N (\hat{y}_n - y_n)^2}{\sum_{n=1}^N (y_n - \bar{y})^2} \quad (3)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N (y_n - \hat{y}_n)^2}{N}} \quad (4)$$

式中, R^2 为决定系数; $RMSE$ 为均方根误差; y_n 为苹果糖酸比的真实值; \hat{y}_n 为苹果糖酸比的预测值; \bar{y} 为苹果糖酸比的真实值的平均数; N 为数据集中苹果的个数。

1.6 特征波长的提取

在高光谱数据中蕴含着大量化学信息和物理信息,所以高光谱数据具有高维性和同线性问题。光谱数据中相关性弱的信息会延长建模所需的时间,降低整个模型的精度^[18-19],所以需要提取光谱数据的特征波长,使预测模型更加精确。选用连续投影(SPA)算法^[20]、竞争性自适应加权(CARS)算法^[21]和随机蛙跳(RF)算法^[22]分别提取高光谱数据的特征波长,并使用提取出的特征波长建立 PLS 模型进行效果的对比。采用 CARS 算法,设置蒙特卡罗采样次数为 500 次,交叉验证对折次数为 10。RF 算法是基于后启发式粒子群算法,结合可逆跳转马尔科夫链蒙特卡罗算法优势而优化出的一种特征变量提取算法,其迭代过程更加简单直观,它以计算出的服从稳态分布的

马尔科夫链为基础来计算变量的选择概率^[22]。为了减少 RF 算法在建模中所产生的随机性,设定最大迭代为3 000次,初始蛙群数量设置为6,最大主成分分数为10。

1.7 预测模型的建立

深度学习是一种数据驱动的方法,采用端到端的特征提取方法,可以在数据集中提取出所需要的隐含特征^[23-24]。深度学习通过使用多层神经网络作为结构来获取多个抽象、复杂的数据集特征^[25]。选用支持向量机(SVM)^[26]、卷积神经网络(CNN)^[27]和基于深度学习的定量光谱数据分析处理(DeepSpectra)^[28]建立预测模型,输入经过处理的数据集来训练模型,不断调整模型的超参数获取最优模型,通过对比 R^2 和 RMSE 评估不同预测模型的效果。

在 SVM 模型中,使用网格搜索的方法确定核函数的惩罚系数和核宽度参数,惩罚系数的优化范围为 $[1, 10, 50, 100]$,核宽度参数的优化范围为 $[1 \times 10^{-8}, 1 \times 10^8]$ 。在 CNN 模型中,使用了2个卷积层,1个全连接层和1个输出层,卷积层1有8个大小为7且步进为3的卷积核,卷积层2含有12个大小分别为1、3、5且步进为2的卷积核。在 DeepSpectra 模型中,使用了3个卷积层,1个拉伸层,1个全连接层和1个输出层,卷积层1有8个大小为7且步进为3的卷积核,卷积层2有16个大小分别为1、3且步进为2的卷积核,卷积层3有16个大小分别为1、3、5且步进为1的卷积核,并且利用初始模块(Inception)在第二层卷积层与第三层卷积层之间进行并行连接,使模型的深度更深、宽度更宽^[29],这样可以在数据集中提取到更加抽象的复杂特征,进而优化所构建的光谱分析预测模型的拟合效果。

2 结果与分析

2.1 原始光谱数据

在苹果的高光谱图像中提取的所有苹果原始光谱数据如图2所示。由图2可以看出,所有苹果的光谱曲线整体趋势基本一致,在苹果光谱曲线上光谱波段为386.82~1 004.50 nm,在670 nm和960 nm波长附近有明显的特征峰,670 nm波长附近的特征峰是叶绿素的吸收峰^[30],720 nm波长附近的特征峰与氮含量有关^[31],960 nm波长附近的特征峰来自 O-H 键的伸缩振动,与水分子的结构

有关^[32-34]。

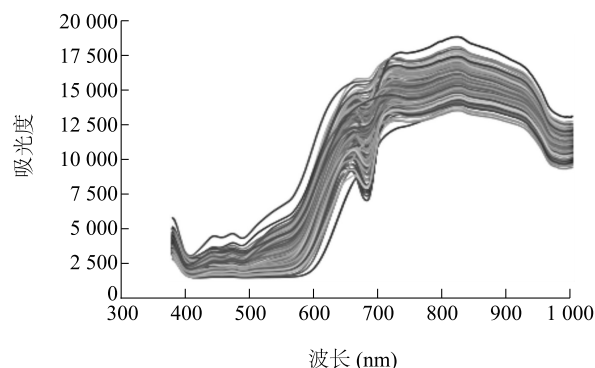


图2 所有苹果的光谱图像

Fig.2 Spectral images of all apples

2.2 苹果糖酸比的描述统计

利用 PAL-BX|ACID1 Master Kit 便携式糖酸一体机测定苹果的可溶性固形物含量、可滴定酸含量,并计算糖酸比。从图3和表1可以看出,苹果的糖酸比为35.38~88.24,糖酸比的均值、中值都在52.50左右,糖酸比大致符合正态分布。

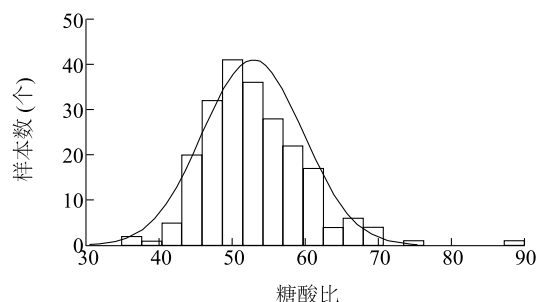


图3 苹果糖酸比频率直方图

Fig.3 Frequency histogram of sugar-acid ratio of apples

2.3 光谱预处理

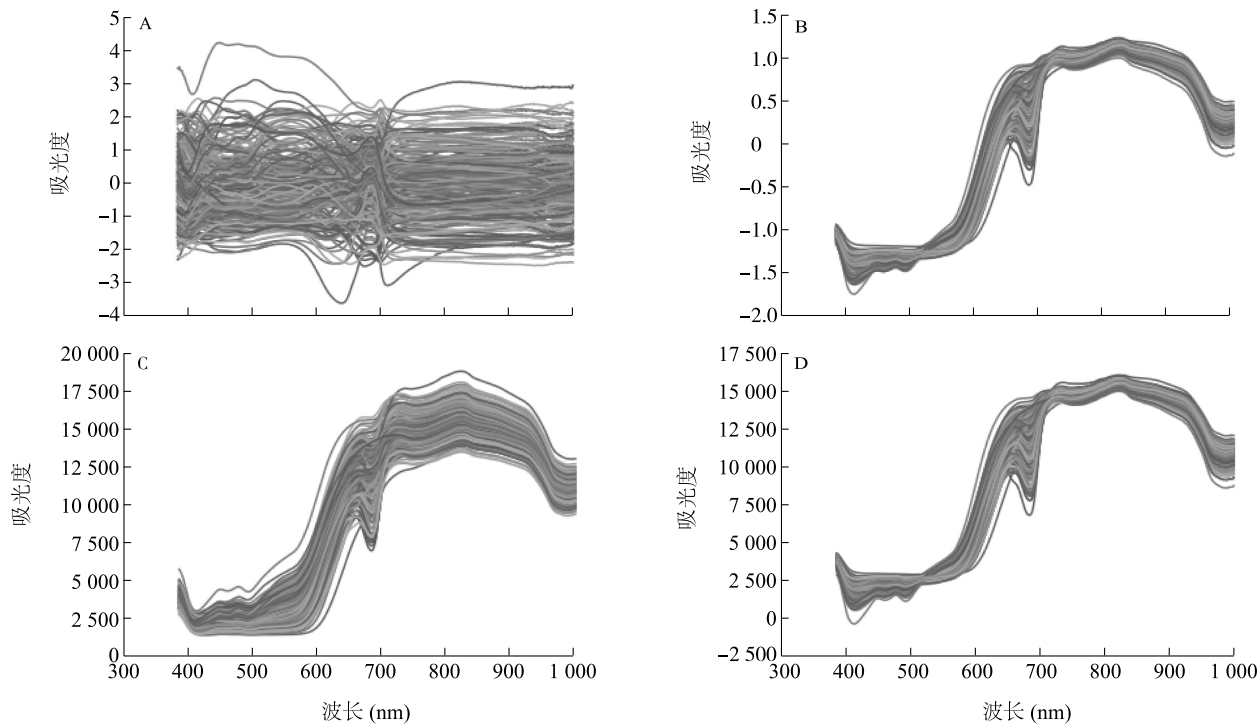
如图4所示,使用预处理后的光谱数据和原始光谱数据(RW)分别建立偏最小二乘回归(PLS)模型,可以更好地分析光谱预处理的效果。由表2可知,SS、SNV、SG和MSC这4种光谱预处理方法可能会在对原始光谱预处理的过程中丢失一些重要信息,影响到所建模型的预测准确性。与其他预处理方法相比,MSC预处理后的光谱数据的模型预测精度较高,其校正集的决定系数(R_c^2)达到0.791 7,均方根误差(RMSEC)为0.602 3;预测集的决定系数(R_p^2)达到了0.794 9,均方根误差(RMESP)为0.599 7。因此可以得出MSC预处理效果最佳。

表 1 苹果可溶性固形物含量、可滴定酸含量及糖酸比描述性统计数据

Table 1 Descriptive statistical data of soluble solids content, titratable acid content and sugar-acid ratio of apples

指标	均值	标准差	中值	众数	最小值	最大值	指标	偏度	峰度
SS(%)	15.95	1.77	16.00	14.70	11.10	20.80	SS	0.07	-0.43
TA(%)	0.31	0.05	0.31	0.32	0.17	0.45	TA	0.10	-0.25
RST	52.91	6.88	52.10	60.00	35.38	88.24	RST	0.94	2.71

SS:可溶性固形物含量;TA:可滴定酸含量;RST:糖酸比。



A: 标准化预处理;B: 标准正态变换预处理;C: 最小二乘平滑滤波预处理;D: 多元散射校正预处理。

图 4 预处理后的苹果光谱图像

Fig.4 Spectral images of apples after pretreatment

表 2 不同预处理后的光谱偏最小二乘回归 (PLS) 模型效果

Table 2 Effects of partial least squares regression (PLS) models based on spectra processed with different pretreatment methods

预处理方法	校正集		预测集	
	R_c^2	RMSEC	R_p^2	RMSEP
RW	0.799 8	0.588 6	0.791 5	0.606 7
SS	0.785 0	0.634 7	0.771 3	0.673 0
SNV	0.780 5	0.647 5	0.788 5	0.621 1
SG	0.796 9	0.595 7	0.670 0	0.826 9
MSC	0.791 7	0.602 3	0.794 9	0.599 7

RW:原始光谱数据;SS:标准化预处理;SNV:标准正态变换预处理;SG:最小二乘平滑滤波预处理;MSC:多元散射校正预处理。 R_c^2 :校正集的决定系数;RMSEC:校正集的均方根误差; R_p^2 :预测集的决定系数;RMSEP:预测集的均方根误差。

2.4 光谱特征波长的提取

2.4.1 SPA 算法提取特征波长 使用 SPA 算法对特征波长进行提取,由图 5 可知,当所选的特征波长数量为 20 时交叉验证均方根误差 (RMSECV) 最小,因此提取 20 个特征波长,分别为 418.43 nm、451.41 nm、479.17 nm、495.05 nm、548.10 nm、570.70 nm、618.65 nm、644.02 nm、668.08 nm、670.76 nm、680.13 nm、681.47 nm、686.82 nm、692.18 nm、733.77 nm、825.34 nm、830.74 nm、913.33 nm、947.30 nm、993.59 nm。

2.4.2 CARS 算法提取特征波长 使用 CARS 算法对特征波长进行提取,如图 6 所示,随着蒙特卡罗采样次数从 1 增加到 500,所选特征波长的数量从 462

个减少到 1 个,在第 238 次采样时 RMSECV 最小。使用 CARS 算法提取出的特征波长有 34 个,分别为 407.89 nm、414.47 nm、465.94 nm、487.11 nm、509.62 nm、521.55 nm、522.88 nm、537.48 nm、538.80 nm、588.00 nm、589.33 nm、603.98 nm、605.32 nm、622.65 nm、685.48 nm、697.54 nm、

728.39 nm、745.86 nm、794.31 nm、868.61 nm、871.31 nm、878.08 nm、880.79 nm、913.33 nm、917.41 nm、929.63 nm、944.58 nm、950.02 nm、970.43 nm、971.79 nm、992.23 nm、994.96 nm、996.32 nm、999.05 nm。

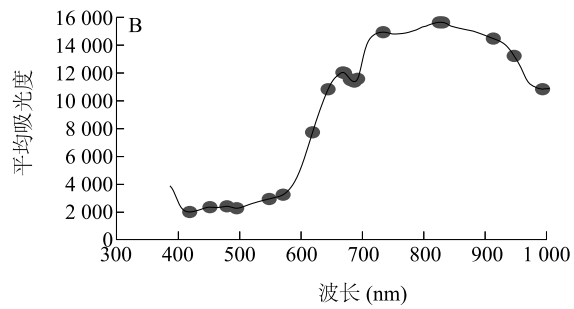
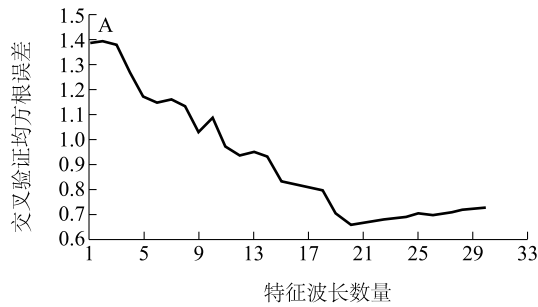


图5 连续投影(SPA)算法提取的特征波长

Fig.5 Feature wavelengths extracted by successive projections algorithm (SPA)

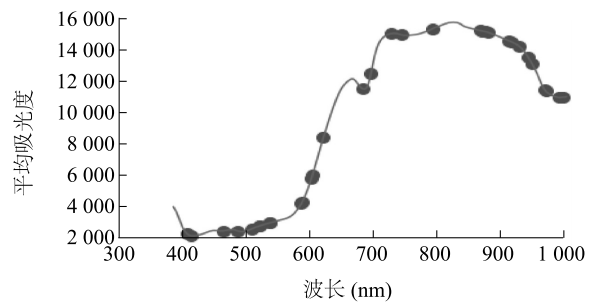
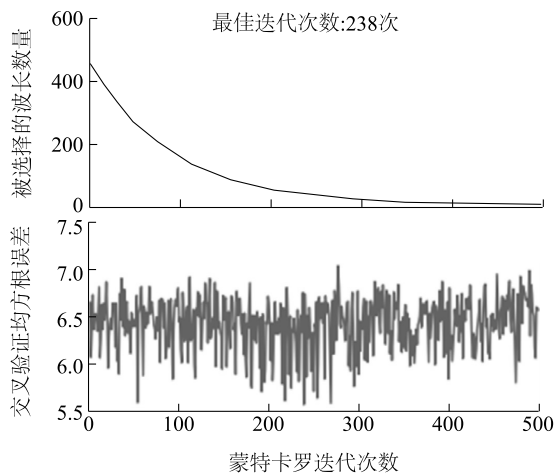


图6 竞争性自适应加权(CARS)算法提取的特征波长

Fig.6 Feature wavelengths extracted by competitive adaptive reweighted sampling (CARS) algorithm

2.4.3 RF 算法提取特征波长 使用 RF 算法对特征波长进行提取,如图 7 所示,选择概率为 0~0.35。大多数变量的选择概率较低,仅有少数变量能够显著识别出特征波长,取 RMSE 最低为 0.118,这一区间内包含 30 个特征波长,分别为 389.46 nm、396.04 nm、397.35 nm、398.67 nm、399.98 nm、401.30 nm、402.62 nm、410.52 nm、413.16 nm、417.11 nm、421.06 nm、426.34 nm、428.97 nm、430.29 nm、435.57 nm、436.89 nm、456.69 nm、458.01 nm、459.34 nm、467.26 nm、469.91 nm、

473.88 nm、673.43 nm、688.16 nm、688.16 nm、689.50 nm、690.84 nm、694.86 nm、697.54 nm、1 004.50 nm。这些波长的选择概率较高,这表明这些波长对建模的影响也较大。

2.4.4 特征波长提取效果与分析 利用多元散射校正预处理后的光谱数据,比较未经过特征波长提取的全波段 PLS 模型和使用 3 种特征波长提取法提取的特征波长 PLS 模型。由表 3 可以看出,与全波段 PLS 模型相比,经过 SPA 算法和 RF 算法提取的特征波长 PLS 模型(SPA-PLS、RF-PLS 模型)校正

集的 R_c^2 和预测集的 R_p^2 均较低,校正集的 RMSEC 和预测集的 RMSEP 较高,表明 SPA-PLS 和 RF-PLS 模型去除了一些具有高度相关性的有效区域,导致预测性能略差。而经过 CARS 算法提取的特征波长 PLS 模型(CARS-PLS 模型)的相关波段变量数仅占全波段 PLS 模型的 7.36%,但是经过 CARS 算法提取的特征波长模型校正集的 R_c^2 是 0.854 4,校正集的

RMSEC 为 0.552 3,预测集的 R_p^2 为 0.835 0,预测集的 RMSEP 为 0.574 0。表明经过 CARS 算法提取的特征波长 PLS 模型去除了相关性低的区域,大大降低了模型的冗余度,并有效地保持了有效区域,减少检测时间,因此,选择 CARS 算法作为特征波长最佳提取方法。

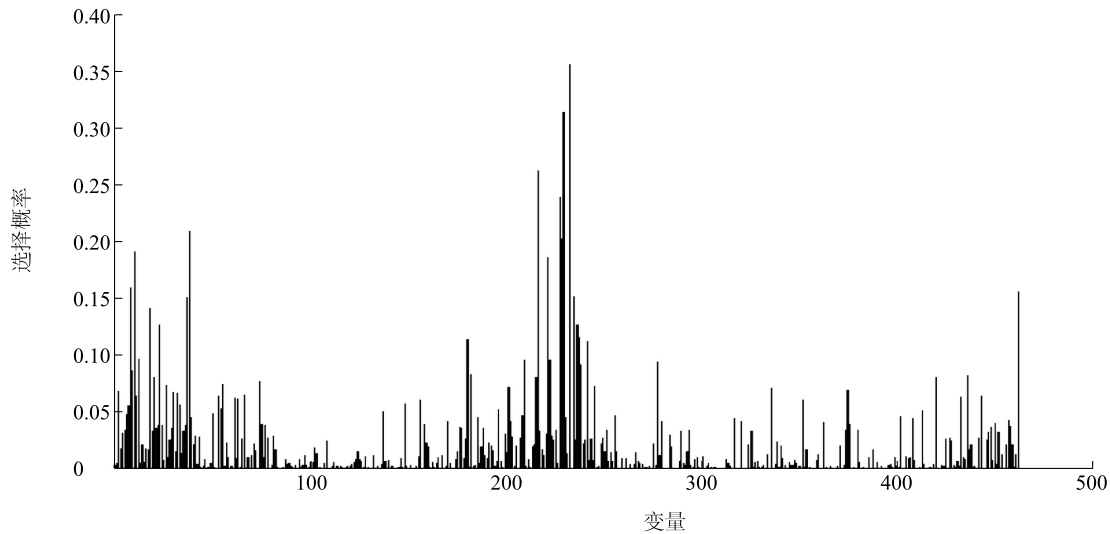


图 7 随机蛙跳 (RF) 算法提取的特征波长

Fig.7 Feature wavelengths extracted by random frog (RF) algorithm

表 3 不同提取方法提取的特征波长 PLS 模型对比

Table 3 Comparison of PLS models based on characteristic wavelengths extracted by different extraction methods

模型	变量数	波段占比 (%)	校正集		预测集	
			R_c^2	RMSEC	R_p^2	RMSEP
PLS	462	100.00	0.791 7	0.604 1	0.794 9	0.599 7
SPA-PLS	20	4.33	0.814 6	0.586 0	0.795 3	0.609 1
CARS-PLS	34	7.36	0.854 4	0.552 3	0.835 0	0.574 0
RF-PLS	30	6.49	0.772 0	0.622 1	0.750 3	0.647 2

PLS: 偏最小二乘回归模型; SPA: 连续投影算法; CARS: 竞争性自适应加权算法; RF: 随机蛙跳算法。 R_c^2 : 校正集的决定系数; RMSEC: 校正集的均方根误差; R_p^2 : 预测集的决定系数; RMSEP: 预测集的均方根误差。

2.5 预测模型对比

如表 4 所, DeepSpectra 模型的效果要优于 PLS、SVM、CNN。DeepSpectra 模型的 R_c^2 为 0.945 2, RMSEC 为 0.387 4, R_p^2 为 0.937 0, RMSEP 为 0.427 0。DeepSpectra 模型的 RMSEP 比其他 3 个模型平均低 9.16%。同时, 预测集的 R_p^2 比其他 3 个模型平均高 6.17%。

3 结论

比较各预处理方法可以看出, MSC 预处理效果更加优异, 预测集的 R_p^2 为 0.794 9, RMESP 为 0.599 7。比较全波段 PLS 模型与 3 种特征波长提取方法提取的特征波长 PLS 模型的效果可以看出, CARS 算法提取的特征波长 PLS 模型效果优于全波

表 4 不同预测模型对比

Table 4 Comparison of different prediction models

模型	R_c^2	RMSEC	R_p^2	RMSEP
PLS	0.854 4	0.500 8	0.835 0	0.524 0
SVM	0.890 5	0.462 4	0.874 4	0.465 0
CNN	0.941 0	0.415 5	0.928 2	0.430 4
DeepSpectra	0.945 2	0.387 4	0.937 0	0.427 0

PLS:偏最小二乘回归模型;SVM:支持向量机模型;CNN:卷积神经网络模型;DeepSpectra:基于深度学习的定量光谱数据分析模型。 R_c^2 :校正集的决定系数;RMSEC:校正集的均方根误差; R_p^2 :预测集的决定系数;RMSEP:预测集的均方根误差。

段 PLS 模型, R_p^2 达到 0.835 0, RMSEP 为 0.574 0, 因此, 选用 CARS 算法进行光谱数据的特征波长提取。将 PLS 模型与 3 种不同的预测模型进行对比, 发现 DeepSpectra 模型预测集的 R_p^2 达到 0.937 0, RMSEP 为 0.427 0, 相较于其他 3 种预测模型, DeepSpectra 模型决定系数更大, 均方根误差更小, 可以更好预测苹果的糖酸比。本研究为基于高光谱和深度学习的苹果内在品质无损检测提供了更多参考。

参考文献:

- [1] 彭彦昆, 孙 晨, 赵 苗. 苹果品质动态无损感知及分级机器手系统[J]. 农业工程学报, 2022, 38(16): 293-303.
- [2] 姜 宏. 烟台苹果化学成分分析及果实品质的初步评价[D]. 烟台: 烟台大学, 2014.
- [3] 孟庆龙, 尚 静, 黄人帅, 等. 苹果可溶性固形物的可见/近红外无损检测[J]. 食品与发酵工业, 2020, 46(16): 205-209.
- [4] 郭志明. 基于近红外光谱及成像的苹果品质无损检测方法和装置研究[D]. 北京: 中国农业大学, 2015.
- [5] 樊书祥. 基于可见/近红外光谱及成像技术的苹果可溶性固形物检测研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2016.
- [6] 查启明. 基于高光谱成像技术的苹果硬度、水分及可溶性固形物含量的无损检测研究[D]. 南京: 南京农业大学, 2017.
- [7] 冯 迪. 基于高光谱成像苹果外观与内部多指标检测研究[D]. 沈阳: 沈阳农业大学, 2017.
- [8] SIVAKUMAR S, QIAO J, WANG N, et al. Detecting maturity parameters of mango using hyperspectral imaging technique[C]// ASABE. Annual international meeting of the american society of agricultural and biological engineers. Michigan, USA: ASABE, 2009.
- [9] 韩如冰. 水果碰伤、糖度和货架期的高光谱成像技术检测[D]. 南昌: 华东交通大学, 2018.
- [10] SANDRA M, CRISTINA B, JOSÉ B, et al. Astringency assessment of persimmon by hyperspectral imaging[J]. Postharvest Biology and Technology, 2017, 125: 35-41.
- [11] FERNANDO M, RENFU L, DIWAN A, et al. Integrated spectral and image analysis of hyperspectral scattering data for prediction of apple fruit firmness and soluble solids content[J]. Postharvest Biology and Technology, 2011, 62(2): 149-160.
- [12] ACQUARELLI J, VAN LAARHOVEN T, GERRETZEN J, et al. Convolutional neural networks for vibrational spectroscopic data analysis[J]. Analytica Chimica Acta, 2017, 954: 22-31.
- [13] 张保华, 黄文倩, 李江波, 等. 基于高光谱成像技术和 MNF 检测苹果的轻微损伤[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(5): 1367-1372.
- [14] KANDPAL L M, LOHUMI S, KIM M S, et al. Near-infrared hyperspectral imaging system coupled with multivariate methods to predict viability and vigor in muskmelon seeds[J]. Sensors & Actuators B: Chemical, 2016, 229: 534-544.
- [15] 袁旭林. 基于高光谱成像技术的苹果糖度无损检测系统研究[D]. 济南: 山东大学, 2021.
- [16] 刘燕德, 吴明明, 孙旭东, 等. 黄桃表面缺陷和可溶性固形物光谱同时在线检测[J]. 农业工程学报, 2016, 32(6): 289-295.
- [17] 张金龙. 基于高光谱成像技术检测柿果货架期的研究[D]. 晋中: 山西农业大学, 2015.
- [18] YANG Q, SUN D W, CHENG W W. Development of simplified models for nondestructive hyperspectral imaging monitoring of TVB-N contents in cured meat during drying process[J]. Journal of Food Engineering, 2017, 192: 53-60.
- [19] HE H J, SUN D W. Toward enhancement in prediction of *Pseudomonas* counts distribution in salmon fillets using NIR hyperspectral imaging[J]. LWT-Food Science and Technology, 2015, 62(1): 11-18.
- [20] ARAUJO M C U, SALDANHA T C B, GALVAO R K H, et al. The successive projections algorithm for variable selection in spectroscopic multicomponent analysis[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2001, 57(2): 65-73.
- [21] LI H, LIANG Y, XU Q, et al. Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration[J]. Analytica Chimica Acta, 2009, 648(1): 77-84.
- [22] CHEN J Y, LI G H. Prediction of moisture content of wood using Modified Random Frog and VIS-NIR hyperspectral imaging[J]. Infrared Physics & Technology, 2020, 105: 103225.
- [23] LECUN Y, BENGIO Y, HINTON G. Deep learning[J]. Nature, 2015, 521(7553): 436-444.
- [24] REICHSTEIN M, CAMPSVALLS G, STEVENS B, et al. Deep learning and process understanding for data-driven Earth system science[J]. Nature, 2019, 566(7743): 195-204.
- [25] BI Y, YUAN K, XIAO W, et al. A local pre-processing method for near-infrared spectra, combined with spectral segmentation and standard normal variate transformation[J]. Analytica Chimica Acta, 2016, 909: 30-40.
- [26] 王立国, 赵 亮, 刘丹凤. SVM 在高光谱图像处理中的应用综述[J]. 哈尔滨工程大学学报, 2018, 39(6): 973-983.
- [27] 周飞燕, 金林鹏, 董 军. 卷积神经网络研究综述[J]. 计算机学报, 2017, 40(6): 1229-1251.

- [28] ZHANG X L, LIN T, XU J F, et al. DeepSpectra: an end-to-end deep learning approach for quantitative spectral analysis[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2019, 1058: 48-57.
- [29] SZEGEDY C, LIU W, JIA Y, et al. Going deeper with convolutions[C]//IEEE. 2015 IEEE conference on computer vision and pattern recognition (CVPR). Boston, USA: IEEE, 2015.
- [30] WANG J, WANG J, CHEN Z, et al. Development of multi-cultivar models for predicting the soluble solid content and firmness of European pear (*Pyrus communis* L.) using portable VIS-NIR spectroscopy[J]. *Sensors (Switzerland)*, 2017, 129: 143-151.
- [31] YU X, LU Q. Deep-learning-based regression mode and hyperspectral imaging for rapid detection of nitrogen concentration in oil-seed rape (*Brassica napuss* L.) leaf[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2018, 172: 188-193.
- [32] YU K Q, ZHAO Y R, LIU Z Y, et al. Application of visible and near-infrared hyperspectral imaging for detection of defective features in loquat [J]. *Food and Bioprocess Technology*, 2014, 7 (11): 3077-3087.
- [33] 孙世鹏, 彭俊, 李瑞, 等. 基于近红外高光谱图像的冬枣损伤早期检测[J]. *食品科学*, 2017, 38(2): 301-305.
- [34] 廉孟茹, 张淑娟, 任锐, 等. 基于高光谱技术的鲜食水果玉米含水率无损检测[J]. *食品与机械*, 2021, 37(9): 127-132.

(责任编辑: 成纾寒)