

翠冠梨坚实度可见/近红外光谱在线检测^{*}

马 广¹ 孙 通²

(1. 金华职业技术学院机电工程学院, 金华 321017; 2. 浙江大学生物系统工程与食品科学学院, 杭州 310058)

摘要: 采用可见/近红外光谱技术对翠冠梨的坚实度进行在线检测研究,并对不同预处理方法和不同平滑点数的影响进行研究。试验采用 USB4000 微型光纤光谱仪在 0.5 m/s 的水果运动速度下采集翠冠梨的透射光谱,并应用偏最小二乘(PLS)算法建立预测模型。试验样品为 176 个,119 个样品作为校正集,57 个样品作为预测集。研究结果表明,应用可见/近红外光谱技术检测翠冠梨的坚实度是可行的,确定 580 ~ 840 nm 为较合适的建模波段;光谱经一阶微分和变量标准化(SNV)处理后建立的预测模型性能最优,其相关系数 R 为 0.820,校正标准差为 2.50 N,预测标准差为 3.02 N;对于 S-G 平滑处理,5 点 S-G 平滑的效果最好,其相关系数 R 为 0.848,校正标准差为 2.31 N,预测标准差为 2.85 N。

关键词: 梨 坚实度 可见/近红外光谱 在线检测

中图分类号: S123 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2013)07-0170-04

On-line Detection of Firmness of 'Cuiguan' Pear Using Visible/Near Infrared Spectrum

Ma Guang¹ Sun Tong²

(1. College of Mechanical and Electrical Engineering, Jinhua Polytechnic, Jinhua 321017, China

2. School of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China)

Abstract: The objective of this research was to measure firmness of 'Cuiguan' pears on-line by using visible/near infrared spectrum, also the effect of different pretreatment methods and different points of smoothness on calibration performance were studied. The spectrometer of USB4000 was used to acquire the spectra of 'Cuiguan' pears at fruit moving speed of 0.5 m/s, and partial least squares (PLS) was used to develop calibration. The total number of samples used was 176, and 119 samples were used as calibration set, 57 samples were used as validation set. The results indicated that it was feasible to measure firmness of 'Cuiguan' pears by using visible/near infrared spectrum, and wavelength range of 580 ~ 840 nm was suitable for calibration. The best calibration performance was obtained when using spectra pretreated by first derivative combined with SNV, the correlation coefficient, root mean square error of calibration (RMSEC) and root mean square error of validation (RMSEP) were 0.820, 2.50 N and 3.02 N, respectively. For Savitzky - Golay method, the five data points obtained the best calibration, the correlation coefficient, RMSEC and RMSEP were 0.848, 2.31 N and 2.85 N, respectively.

Key words: Pear Firmness Visible/near infrared spectrum On-line detection

引言

果实坚实度是指果肉抗压力的强弱,是水果内

部品质的一个重要指标,可以用来判断水果的成熟度。目前,国内外学者应用近红外光谱分析技术对水果坚实度作了一定的研究^[1~15]。

本文研究可见/近红外光谱技术在线快速获取翠冠梨的透射光谱信息,寻找光谱透射率与坚实度之间的相关关系,并分析不同光谱预处理方法对模型预测性能的影响。

1 材料与方法

1.1 试验材料

试验所用的翠冠梨来自金华果园,于试验前一天采摘并置于 20℃ 下存放 24 h 左右。将翠冠梨依次编号,并测量其外观参数(质量、横径、纵径)。每个翠冠梨在赤道部位标记 3 点(间隔约 120°),进行光谱和坚实度测量。试验样本总数为 176 个,其中 119 个样本作为校正集,用于建模,57 个样本为预测集,用于模型预测。坚实度最大和最小的样本作为校正集,其他样本则按比例随机分配到校正集和预测集。

1.2 光谱测量

试验采用的光谱仪为美国海洋光学公司的 USB4000 型微型光纤光谱仪。光谱仪波长范围为 345 ~ 1 040 nm,3648 像素东芝 TCD1304AP 型线性 CCD 阵列,16 位 A/D 转换器,信噪比为 300。光源为卤钨灯,环行分布,功率为 600 W。试验以空气为参比,采用半透射方式采集翠冠梨样本的光谱,翠冠梨放置于托盘中进行传输,放置方式为果柄果梗与水果运动方向平行。光谱采集软件为美国海洋光学公司的 OOIBase32 光谱采集软件。在采集样本光谱之前,先采集参比和暗场光谱。每个样本按赤道标记位置朝下放置采集光谱,将每个样本所获得的 3 条光谱取平均作为该样本的光谱。样本光谱积分时间为 80 ms,Boxcar 点数为 6,运动速度为 0.5 m/s。将样本光谱转换为透射光谱,公式为

$$T_{\lambda} = \frac{S_{\lambda} - D_{\lambda}}{R_{\lambda} - D_{\lambda}} \times 100\%$$
 (1)

式中 S_{λ} ——波长 λ 下样品光谱的强度
 R_{λ} ——波长 λ 下参比光谱的强度
 D_{λ} ——波长 λ 下暗场光谱的强度
 T_{λ} ——波长 λ 下样品光谱的透射率

1.3 坚实度测量

采用 Instron5534 型生物材料万能试验机测量翠冠梨的坚实度。试验时加载速度为 20 mm/min,探头直径为 6 mm,刺入方向由表面指向果心,测量过程中自动采集并记录刺入力和刺入深度。每个样本测量赤道 3 个标记点的坚实度,并以 3 点坚实度的平均值作为该样本的坚实度测量值。

1.4 数据分析

采用光谱平滑、一阶微分、二阶微分、多元散射

校正(MSC)、变量标准化(SNV)等光谱预处理方法。应用偏最小二乘回归建立翠冠梨坚实度的在线预测模型并采用预测标准差、校正标准差以及相关系数 R 来判断预测模型的好坏。

2 结果与讨论

2.1 样本坚实度和外观参数测量结果

表 1 为翠冠梨校正集和预测集坚实度和外观参数的统计结果。从表 1 可知,校正集样本的坚实度范围为 30.79 ~ 52.48 N,预测集样本的坚实度范围为 32.40 ~ 48.40 N。图 1 为校正集和预测集样本的平均光谱。

表 1 翠冠梨坚实度和外观参数
Tab.1 Statistic of firmness and apparent parameters of pears

		样本数	最大值	最小值	平均值	标准差
坚实度/N	校正集	119	30.79	52.48	40.23	4.380
	预测集	57	32.40	48.40	39.90	3.759
横径/mm	校正集	119	94.40	69.60	81.91	5.135
	预测集	57	93.10	71.20	81.96	4.967
纵径/mm	校正集	119	91.10	70.20	80.71	4.901
	预测集	57	90.80	72.30	80.96	4.786
质量/g	校正集	119	408	182	292.6	53.64
	预测集	57	398	193	294.5	50.37

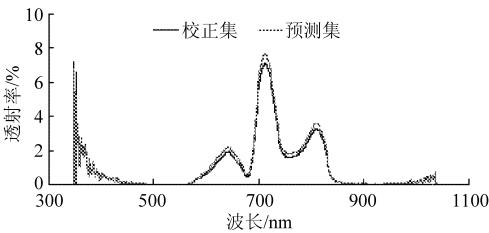


图 1 翠冠梨校正集和预测集样本的平均光谱
Fig.1 Average spectra of ‘Cuiguan’ pears for calibration and validation sets

2.2 建模波段范围选择

从图 1 可知,透射光谱在 570 ~ 850 nm 之间存在着有效信息。为了不丢失有用信息、避免引入噪声,在 570 ~ 850 nm 两端分别延伸 10 nm 或缩小 10 nm,并采用 PLS 建模比较,以确定合适的建模波段。从表 2 可知,当 570 nm 固定不动而 850 nm 延伸 10 nm 时,预测标准差略有上升,表明有噪声引入,缩小 10 nm 时,相关系数 R 以及校正标准差、预测标准差都没有变化,表明 840 ~ 850 nm 之间没有包含有用信息;当 850 nm 固定不动而 570 nm 延伸或缩小 10 nm 时,相关系数 R 以及校正标准差、预测标准差都没有变化,表明 560 ~ 580 nm 之间没有包含有用信息,因此建模波段选择为 580 ~ 840 nm。

表 2 不同波段 PLS 的建模结果

Tab.2 Results of PLS in different wavelength ranges				
波段/nm	因子数	<i>R</i>	校正标准差/N	预测标准差/N
570 ~ 840	2	0.606	3.76	3.73
570 ~ 850	2	0.606	3.76	3.73
570 ~ 860	2	0.602	3.76	3.75
560 ~ 850	2	0.606	3.76	3.73
580 ~ 850	2	0.606	3.76	3.73

2.3 光谱预处理对预测结果的影响

试验采用原始光谱、一阶微分、二阶微分、MSC、SNV 等预处理方法,建模波段选用 580 ~ 840 nm,并应用 PLS 进行建模比较,以确定合适的光谱预处理方法。从表 3 可知,二阶微分和 MSC 预处理方法不能有效地提高模型的预测性能,而一阶微分和 SNV 预处理方法则改善了模型的性能,一阶微分与 SNV 结合的预处理方法所获得的模型性能最优,其预测模型相关系数 *R* 为 0.820,校正标准差为 2.50 N,预测标准差为 3.02 N。

表 3 不同预处理方法的 PLS 建模结果

Tab.3 Results of PLS with different pretreatment methods				
预处理方法	因子数	<i>R</i>	校正标准差/N	预测标准差/N
原始光谱	2	0.606	3.76	3.73
一阶微分	4	0.705	3.09	3.42
二阶微分	1	0.456	3.88	3.85
MSC	2	0.432	4.05	3.95
SNV	4	0.682	3.38	3.58
一阶微分 + MSC	1	0.352	4.21	4.19
一阶微分 + SNV	5	0.820	2.50	3.02
二阶微分 + MSC	1	0.254	4.32	4.25
二阶微分 + SNV	2	0.634	3.69	3.60

2.4 光谱平滑处理对预测结果的影响

光谱平滑能在一定程度上去除一部分随机噪声,本试验采用 3、5、7、9、11 以及 13 点 S - G 平滑,多项式阶数为 3,对一阶微分结合 SNV 预处理后的光谱进行平滑处理,并应用 PLS 算法进行建模比

较,以确定平滑处理对模型性能的影响。从表 4 可知,平滑点数为 3 点和 5 点时,模型性能比未平滑处理的结果要好;而平滑点数为 7、9、11 以及 13 点时,模型性能则比未平滑处理的结果要差。最好的平滑点数为 5 点,其相关系数 *R* 为 0.848,校正标准差为 2.31 N,预测标准差为 2.85 N。

表 4 不同平滑点数处理的 PLS 建模结果

Tab.4 Results of PLS combined with different points of smoothness				
平滑点数	因子数	<i>R</i>	校正标准差/N	预测标准差/N
0	5	0.820	2.50	3.02
3	5	0.831	2.42	2.95
5	5	0.848	2.31	2.85
7	5	0.804	2.59	3.11
9	5	0.763	2.82	3.33
11	5	0.749	2.89	3.38
13	5	0.737	2.95	3.42

3 结束语

采用可见/近红外光谱在 345 ~ 1 040 nm 波段内对翠冠梨的坚实度进行在线检测,并研究确定了合适的建模波段,以及不同预处理方法和不同平滑点数处理方法对预测模型性能的影响。研究结果表明,采用可见/近红外光谱技术在线检测翠冠梨的坚实度是可行的。一阶微分结合 SNV 预处理方法能比较有效地改善模型性能,其预测模型相关系数 *R* 为 0.820,校正标准差为 2.50 N,预测标准差为 3.02 N。随着平滑点数的上升,模型预测性能先上升而后下降,其中以 5 点 S - G 平滑所获得的模型预测性能最优,其相关系数 *R* 为 0.848,校正标准差为 2.31 N,预测标准差为 2.85 N。整个在线检测坚实度的结果相比于其他静态检测来说,其结果要差一些,所用的波段范围也比较窄,本研究中只采用了 580 ~ 840 nm 用于建模,因此可以尝试拓宽光谱波段范围进行进一步研究。

参 考 文 献

1 Kavdir I, Lu R, Ariana D, et al. Visible and near-infrared spectroscopy for nondestructive quality assessment of pickling cucumbers[J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 44(2): 165 ~ 174.

2 Paz P, Sanchez M T, Perez-Marin D, et al. Nondestructive determination of total soluble solid content and firmness in plums using near-infrared reflectance spectroscopy[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2008, 56(8): 2 565 ~ 2 570.

3 Cavaco A M, Pinto P, Antunes M D, et al. ‘Rocha’ pear firmness predicted by a Vis/NIR segmented model [J]. Postharvest Biology and Technology, 2009, 51(3): 311 ~ 319.

4 傅霞萍, 应义斌, 陆辉山, 等. 应用多种近红外建模方法分析梨的坚实度[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(5): 911 ~ 915.

5 Fu Xiaping, Ying Yibin, Lu Huishan, et al. Application of some different modeling algorithms to pear MT-firmness detection using NIR spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(5): 911 ~ 915. (in Chinese)

6 史波林, 庆兆, 籍保平, 等. 应用 GA-DOSC 算法消除果皮影响近红外漫反射光谱分析苹果硬度的研究[J]. 光谱学与光谱

分析, 2009, 29(3): 665 ~ 670.

Shi Bolin, Qing Zhaoshen, Ji Baoping, et al. Using GA-DOSC method to eliminate interference of peel with prediction of apple firmness based on near infrared diffuse reflection spectra[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(3): 665 ~ 670. (in Chinese)

6 Fan G Q, Zha J W, Du R, et al. Determination of soluble solids and firmness of apples by Vis/NIR transmittance [J]. Journal of Food Engineering, 2009, 93(4): 416 ~ 420.

7 Miller A R, Kelley T J, White B D. Nondestructive evaluation of pickling cucumbers using visible-infrared light transmission[J]. Journal of the American Society for Horticultural Science, 1995, 120(6): 1 063 ~ 1 068.

8 Lu R. Predicting firmness and soluble solids content of sweet cherries using near-infrared reflectance spectrometer [J]. Transactions of the ASAE, 2001, 44(5): 1 265 ~ 1 271.

9 傅霞萍, 应义斌, 刘燕德, 等. 水果坚实度的近红外光谱检测分析试验研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2006, 26(6): 1 038 ~ 1 041.

Fu Xiaping, Ying Yibin, Liu Yande, et al. Detection of pear firmness using near infrared diffuse reflectance spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2006, 26(6): 1 038 ~ 1 041. (in Chinese)

10 田海清, 应义斌, 陆辉山, 等. 可见/近红外光谱漫透射技术检测西瓜坚实度的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(6): 1 113 ~ 1 117.

Tian Haiqing, Ying Yibin, Lu Huishan, et al. Study on predicting firmness of watermelon by Vis/NIR diffuse transmittance technique[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27(6): 1 113 ~ 1 117. (in Chinese)

11 吕强, 汤明杰, 赵杰文, 等. 近红外光谱预测猕猴桃硬度模型的简化研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(7): 1 768 ~ 1 771.

Lü Qiang, Tang Mingjie, Zhao Jiewen, et al. Study of simplification of prediction model for kiwifruit firmness using near infrared spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(7): 1 768 ~ 1 771. (in Chinese)

12 王加华, 陈卓, 李振茹, 等. 洋梨硬度的便携式可见/近红外漫透射检测技术[J]. 农业机械学报, 2010, 41(11): 129 ~ 133.

Wang Jiahua, Chen Zhuo, Li Zhenru, et al. Evaluation of European pear (*Pyrus communis* L.) firmness based on portable Vis / NIR transmittance technique [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2010, 41(11): 129 ~ 133. (in Chinese)

13 刘卉, 郭文川, 岳绒. 猕猴桃硬度近红外漫反射光谱无损检测[J]. 农业机械学报, 2011, 42(3): 145 ~ 149.

Liu Hui, Guo Wenchuan, Yue Rong. Non-destructive detection of kiwifruit firmness based on near-infrared diffused spectroscopy [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2011, 42(3): 145 ~ 149. (in Chinese)

14 张海云, 彭彦昆, 王伟, 等. 生鲜猪肉主要品质系数无损在线检测系统[J]. 农业机械学报, 2013, 44(4): 146 ~ 151.

Zhang Haiyun, Peng Yankun, Wang Wei, et al. Nondestructive real-time detection system for assessing main quality parameters of fresh pork[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(4): 146 ~ 151. (in Chinese)

15 郭文川, 王铭海, 岳绒. 基于近红外漫反射光谱的损伤猕猴桃早期识别[J]. 农业机械学报, 2013, 44(2): 142 ~ 146.

Guo Wenchuan, Wang Minghai, Yue Rong. Early recognition of bruised kiwifruit based on near infrared diffuse reflectance spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(2): 142 ~ 146. (in Chinese)