

基于 Trace Pro 仿真的橙果品质光谱检测 托盘参数设计与试验

Parameter design and experiment of spectral detection tray for orange
fruit quality based on Trace Pro simulation

张倩倩¹ 徐 赛² 陆华忠³

ZHANG Qian-qian¹ XU Sai² LU Hua-zhong³

(1. 华南农业大学工程学院, 广东 广州 516042; 2. 广东省农业科学院农产品公共监测中心,

广东 广州 516042; 3. 广东省农业科学院, 广东 广州 516042)

(1. College of Engineering, South China Agricultural University, Guangzhou, Guangdong 516042, China; 2. Public Monitoring Center for Agro-Product of Guangdong Academy of Agricultural Sciences, Guangzhou, Guangdong 516042, China; 3. Guangdong Academy of Agricultural Sciences, Guangzhou, Guangdong 516042, China)

摘要:为了实现橙果的内部品质可见/近红外光谱无损检测,采用 Trace Pro 软件对设计的橙果在线检测传送托盘模型进行光学仿真分析,参考仿真结果中的辉度/照度值,对值较高的托盘模型进行实物加工,结合实际光谱检测平台进行试验验证。仿真结果表明,成果传送托盘的最优外形参数为:外径 80 mm、内横径 55 mm、内纵径 50 mm、厚度 20 mm。采用不同材料对托盘进行加工,用于实际橙果可溶性固形物含量(SSC)检测,光谱数据经预处理后,建立偏最小二乘回归法(PLSR)的预测模型,其中亚克力托盘预测结果最优。为进一步优化检测模型,分别用遗传算法(GA)、稳定性竞争自适应重加权采样(SCARS)算法提取光谱特征波段,建立橙果 SSC 的 PLSR 的预测模型,其中 SCARS 算法特征提取方法最佳,预测决定系数 R^2_{pre} 为 0.920 9;预测均方根误差(RMSEP)为 0.468 3。

关键词:可见/近红外光谱;检测;托盘;可溶性固形物含量;橙果;仿真

Abstract: In order to realize the visible/near infrared spectroscopy

nondestructive testing of the internal quality of orange fruits, Trace pro software is used to carry out optical simulation analysis on the designed orange fruit online testing and conveying tray model, referring to the luminance/illuminance value in the simulation result, the tray model with higher value is processed in kind, and is tested and verified by combining with the actual spectrum testing platform. The simulation results show that the optimal shape parameters of the achievement transfer tray were: outer diameter 80 mm, inner transverse diameter 55 mm, inner longitudinal diameter 50 mm, and thickness 20 mm. Different materials were used to process the tray for the detection of soluble solids content (SSC) of actual orange fruits. After the spectral data were preprocessed, the partial least squares regression (PLSR) prediction model was used, among which acrylic tray had the best prediction result. In order to further optimize the detection model, genetic algorithm (GA) and stability competition adaptive re-weighted sampling (SCARS) algorithms are used to extract spectral characteristic bands respectively, and a prediction model of PLSR of orange SSC is established. The SCARS algorithm has the best feature extraction method, and the prediction decision coefficient R^2_{pre} is 0.920 9. The predicted rms error (RMSEP) is 0.468 3.

Keywords: VIS/NIR spectroscopy; detection; tray; soluble solids content; orange; simulation

基金项目:广州市科创委项目(编号:201904010199);国家自然科学基金项目(编号:31901404);广东省农业科学院新兴学科团队建设项目(编号:201802XX);广东省农业科学院院长基金面上项目(编号:201920);广东省农业科学院院长基金重点项目(编号:202034);广东省重点领域研发计划项目(编号:2018B020240001);科技创新战略专项资金(高水平农科院建设项目)

作者简介:张倩倩,女,华南农业大学在读硕士研究生。

通信作者:徐赛(1991—),男,广东省农业科学院农产品公共监测中心副研究员,博士。E-mail:294504658@qq.com

收稿日期:2020-01-23

近年来,随着人工智能技术的进步和发展,水果外部品质智能识别已得到了较好解决,但内部品质检测精度仍不够理想。可见/近红外光谱无损检测技术是目前应用较广泛的水果内部品质无损检测技术,已在苹果^[1-4]、西瓜^[5-7]、梨^[8]、桃^[9]等水果上得到应用。已有的可见/

近红外光谱无损检测装备主要由可见/近红外光谱无损检测以及配套传送装置共同组成,采用透射光^[10]的检测结构获取水果内部信息,采用托盘承载进行传送,智能运算无损得出检测结果。但课题组前期研究发现,传送托盘在承载、固定和传输水果的同时,对光谱信号的采集会造成一定遮蔽影响,这是阻碍检测精度提高的重要原因之一,需要进行多因素考虑与优化。

目前已有的无损检测研究较多集中在检测模型与光路参数上,对实际应用中存在的干扰因素研究较少。传统的无损检测传送托盘参数通常只通过粗略的水果尺寸进行设计,较难接近托盘参数的最优化^[11]。课题组^[12]前期研究对柚果托盘进行参数设计与光学仿真,但不同水果的果形、大小、内部结构有所差异,需要有针对性的设计。但目前并未见对橙果的托盘进行参数设计、仿真分析等深入研究的报道。

研究拟从橙果的形态特征入手,通过光学仿真和光谱采集试验相结合的方法,选择仿真结果最佳的托盘进行加工并采集橙果的透射光谱,运用遗传 GA 算法^[13]、稳定性竞争自适应重加权采样(SCARS)算法^[14]进行光谱特征选取,建立橙果可溶性固形物(SSC)的偏最小二乘法回归(PLSR)^[15]预测模型,进行橙果无损检测,以期为厚皮类水果的品质流水线无损检测提供参考。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

1.1.1 试验材料

橙果:美国新奇士橙,市售。随机取果,去除有外表损伤、伤疤或不规则的样品后保留 120 个,用湿毛巾将橙果擦净,于室温(24~26 ℃)下放 1 h 自然晾干。120 个橙果的外形参数如表 1 所示。

1.1.2 主要仪器

光谱仪:QE-Pro 型,测量波长范围 400~1 100 nm,美国海洋光学公司;

光谱仪:NIR-QUEST 型,测量波长范围 900~1 700 nm,美国海洋光学公司;

糖度仪:PAL-Grape Must(Brix)型,ATAGO(爱拓)中国分公司;

天平:HTP312 型,上海花潮电器有限公司。

表 1 120 个橙果的形态特征

Table 1 Morphological characteristics of 120 orange fruits

形态特征	横径/mm	纵径/mm	质量/g
平均值	80.45	83.93	270.56
标准差	3.48	4.20	22.13
最大值	86.79	93.32	334.48
最小值	69.91	71.34	227.88

1.2 橙果传送托盘初步设计

参考橙果的外形尺寸对托盘厚度、内横径、内纵径参数进行确定与梯度试验,初步确定,托盘外径 D 为 80 mm,橙果横径平均值为 80.45 mm;厚度不低于橙子横径纵径平均值的 1/4,即 20 mm,因此设计试验梯度为 20,25,30,35 mm;孔径以横径平均值的 1/2 取值,一次增加 5 mm(见图 1),进行如上的梯度设计,最大孔径取值为纵径最大值的 0.6 倍,这是为了保证橙果放置在托盘上不会掉在传送带上,导致托盘功能失效,设定托盘内径(D_1 , D_2)(其中 D_1 为内横径, D_2 为内纵径)的试验梯度设置为 (40,40), (45,40), (50,50), (55,50), (55,55);此外,根据实际生产应用托盘分别选择亚克力、ABS 树脂、PC 塑料、橡胶 4 种材料。

1.3 橙果托盘光学仿真平台的建立

1.3.1 建立光源模型 SolidWorks 软件采用参数化设计,在相似零件的结构设计和零件尺寸修改方面具有很大的技术优势。工具栏中的命令具有设计相关性,使得零件的设计修改更加可靠、准确和快速^[16]。因此,采用 Solidworks 软件设计光源的外部结构。

在 Solidworks 软件中画出自主搭建光谱实验平台顶灯的三维模型,顶灯照明机构(见图 2)使用 100 W 石英卤素灯(共 13 组)的光源,其中包括环形光源 12 盏石英卤素灯,入射角均为 45°;中间光源 1 盏石英卤素灯,垂直照射。

1.3.2 设置模型参数 Trace Pro 是一款具有强大光学分析功能及数据转换能力的实体模型光学分析软件,广

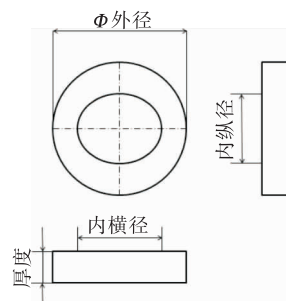


图 1 托盘三视图

Figure 1 Three views of the tray

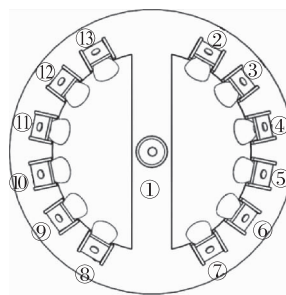


图 2 顶灯照明机构示意图

Figure 2 Schematic diagram of dome lamp lighting mechanism

泛应用于照明系统、辐射分析、光学分析和光度分析^[17]。模型中,设定灯泡表面光源发射形式为光源特性,总光线数为 200,光源在软件中的名称 C460TR2432。

经试验初步探索发现,橙果果皮较薄,如果打开全部光源,容易造成光谱数据过饱和。本着尽可能保证仿真设定与实际试验一致原则,正式仿真前先对比探究灯泡数量/光能对仿真结果的影响,对比梯度设置为:1 盏灯(100 W,图 2 中的 1 号灯泡),7 盏灯(700 W,图 2 中的 2、4、6、8、10、12 号灯泡),13 盏灯(1 300 W),并设定所有灯泡的发光表面参数一致。图 3 是光学仿真模型及效果图。

1.4 托盘的光谱验证

1.4.1 获取光谱数据 启动光谱仪器并预热 15 min,使设备达到稳定的工作状态,积分时间、平均次数等参数可采用 Spectra Suite(Ocean Optics Ins., USA)软件设置。将优选出的托盘置于光谱平台上,分别采用标准黑板和标准白板紧贴积分球以校正光谱仪,光谱仪校正后将橙果放置在托盘上,进行橙果样本的光谱数据采集。检测橙果的内部品质是基于透射光谱,因此选择光谱的透射率作为光谱信息的研究参数。在光谱平台内,使用试验结果最优的传送托盘,进行 120 个橙果样本在 400~1 700 nm 波长下的透射光谱数据的采集。

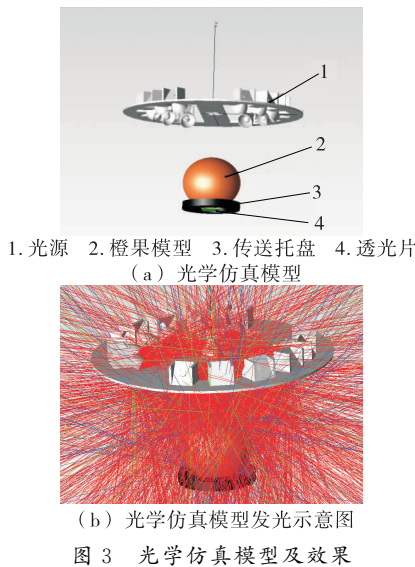


Figure 3 Optical simulation model and effect

1.4.2 可溶性固形物含量测定 采用糖度仪对橙果的可溶性固形物含量(SSC)进行测量。取每个样本全部果肉,用手动压榨机挤出果汁,并用 3 层纱布过滤将果汁滴于糖度仪镜面,记录数据,每个橙果样本测量 3 次并取平均值,其中可溶性固形物测量结果如表 2 所示。

1.5 建模方法

偏最小二乘法(PLSR)是集主成分分析,普通多元线性回归和典型相关分析于一体的回归分析方法。在光谱分析中应用广泛。利用 Matlab 软件建立可溶性固形物含量 Y 与光谱矩阵 X 之间的相关模型,PLSR 将 Y 引入 X 矩阵分解过程,并对 X 和 Y 同时进行分解,使 X 、 Y 两者最大程度相关,为提取有效信息,并考虑两者间的相关性,其中自变量矩阵方差尽可能大,从而获得最佳校正模型。其中随机选择 80 个样本作为校正集用于建立模型,剩余 40 个样本则作为预测集进行模型验证。

PLSR 模型以校正均方根误差(RMSEC)、决定系数(R^2)及预测均方根误差(RMSEP)作为评价指标。 R^2 值越接近 1,表明模型的回归或预测结果越好;RMSEP 越小,表明模型的预测能力越强。

2 结果与分析

2.1 托盘参数的仿真结果

2.1.1 托盘尺寸参数的优化 从表 3 可以看出,只打开 1 号灯泡辐照度平均值较小,13 盏灯泡全部打开辐照度值较大,但前期摸索试验中打开全部灯会造成橙果被照射部位表皮烫伤(如图 4),因此仿真试验选择打开 1、2、4、6、8、10、12 号灯泡。

从表 4 可以看出,辐照度最小值虽然小有差异,由于数量级太小,不足以判别托盘优劣,最大辐照度以内横径 55 mm,内纵径 50 mm 最高。从表 5 可以看出,4 种厚度辐照度最大值均相同,辐照度平均值以厚度 20 mm 为最高。因此托盘的尺寸参数确定为:内横径 55 mm,内纵径 50 mm,厚度为 20 mm。

表 2 橙果可溶性固形物含量统计

Table 2 Statistics of orange's soluble solids

样本组	数量	平均值/°Brix	标准差/°Brix
校正集	80	10.77	0.85
预测集	40	10.53	0.91

表 3 顶灯数量与辉度/照度的关系

Table 3 Relation between number of dome lamps and irradiance/illumination value

灯泡数量/盏	厚度/mm	内横径/mm	内纵径/mm	材料	最小辐照度/($W \cdot m^{-2}$)	最大辐照度/($W \cdot m^{-2}$)	平均值/($W \cdot m^{-2}$)
1	20	50	50	PC 塑料	1.845 9E-013	1 815.1	16.041
7	20	50	50	PC 塑料	2.154 8E-012	1 815.1	26.355
13	20	50	50	PC 塑料	5.647 8E-009	1 815.1	49.109



图 4 试验损伤橙果

Figure 4 Experimental damage to orange fruit

2.1.2 托盘的材质优化 从表 6 可以看出,亚克力材料的托盘,辐照度最大值、平均值均为最大,表明亚克力材料优于其他 3 种材料。因此选择加工厚度为 20 mm、内横径为 55 mm,内纵径为 50 mm 的亚克力托盘进行后续试验。

同种材料下,尺寸上的变化对光强影响可以通过 Trace Pro 仿真较好的表达。但材料的变化在实际应用中会因为加工工艺、材料纯度等影响与仿真结果存在一定差异。为了验证此仿真结果,将 4 种材料托盘进行加工,分别进行光谱试验。对比光谱数据(见图 5),托盘波形没有太大差别。因此对 ABS 树脂、橡胶、PC 塑料、亚克

力 4 种托盘分别进行橙果的光谱数据采集试验。

2.2 建模结果及分析

2.2.1 光谱预处理及建模 受环境、仪器稳定性等因素影响,橙果可见/近红外光谱不可避免地含有一定噪声。样品的可见/近红外透射光谱在低于 560 nm 和高于 940 nm 的波段信号微弱且含有大量噪声,因此选取 560~940 nm 波长范围的光谱数据进行预处理。图 6 为 120 个橙果在该波长范围内的原始光谱。

多元散射校正法(MSC)可消除因样品表面的不均匀性产生散射引起的光谱差异。采用多元散射校正(MSC)方法对光谱进行预处理。光谱预处理后,建立偏最小二乘回归模型,建模结果如表 7 所示。

PLSR 模型的最佳预测结果 R^2_{cal} 为 0.952 9, RMSEC 为 0.256 8, R^2_{pre} 为 0.805 2, RMSEP 为 0.653 9。这与仿真结果一致,在相同参数下亚克力材料的托盘效果最佳。但是预测模型还需要进一步优化。

2.2.2 优化预测模型 由于原始光谱特征中既包含分类识别的有效信息(SSC 差异特征),又包含分类识别的干扰信息(非 SSC 差异特征),这些干扰信息可以通过特征提取去除。在遗传(GA)算法中,将光谱分成 102 个区域,前

表 4 托盘内径与辉度/照度的关系

Table 4 Relation between inner diameter of tray and irradiance/illumination value

内横径/ mm	内纵径/ mm	灯泡数 量/盏	材料	厚度/ mm	最小辐照度/ ($W \cdot m^{-2}$)	最大辐照度/ ($W \cdot m^{-2}$)	平均值/ ($W \cdot m^{-2}$)
40	40	7	PC 塑料	20	1.638 2E-010	1 815.1	25.643
45	40	7	PC 塑料	20	2.965 9E-011	1 815.1	27.609
50	50	7	PC 塑料	20	2.154 8E-012	1 815.1	26.355
55	50	7	PC 塑料	20	1.456 6E-012	1 944.2	26.865
55	55	7	PC 塑料	20	1.173 2E-014	1 815.1	24.877

表 5 托盘厚度与辉度/照度的关系

Table 5 Relation between thickness of tray and irradiance/illumination value

厚度/ mm	内横径/ mm	内纵径/ mm	灯泡数 量/盏	材料	最小辐照度/ ($W \cdot m^{-2}$)	最大辐照度/ ($W \cdot m^{-2}$)	平均值/ ($W \cdot m^{-2}$)
20	50	50	7	PC 塑料	2.154 8E-012	1 815.1	26.355
25	50	50	7	PC 塑料	6.163 6E-014	1 815.1	23.555
30	50	50	7	PC 塑料	6.163 0E-014	1 815.1	23.555
35	50	50	7	PC 塑料	2.241 7E-012	1 815.1	26.142

表 6 托盘材料与辉度/照度的关系

Table 6 Relation between material type of tray and irradiance/illumination value

材料类型	内径/mm	厚度/mm	最小辐照度/ ($W \cdot m^{-2}$)	最大辐照度/ ($W \cdot m^{-2}$)	平均值/ ($W \cdot m^{-2}$)
亚克力	55~50	20	2.328 4E-012	1 965.8	29.035
ABS 树脂	55~50	20	1.332 2E-012	1 815.1	25.572
PC 塑料	55~50	20	1.456 6E-012	1 944.2	26.865
橡胶	55~50	20	2.602 4E-013	1 815.1	24.217

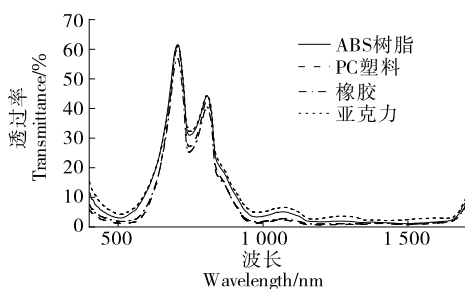


图 5 4 种不同材料托盘的光谱图

Figure 5 Spectra of trays made of four different materials

101 个区域包含 5 个波段,最后一个包含 4 个波段,算法中群体数目、交叉概率、变异概率、迭代次数分别为:50、0.5、0.1、100;优选预处理后的 560~940 nm 光谱数据。GA 遗传算法最终优选出共计 140 个波长变量:560.342~562.639,571.818~574.112,587.094~600.816,606.146~612.233,617.556~619.835,632.742~635.017,640.324~642.597,647.898~650.169,655.465~657.734,666.801~669.067,681.890~691.682,708.223~710.476,730.721~732.967,738.205~747.923,749.417~751.657,753.151~759.120,771.790~777.744,790.381~792.609,820.028~822.247,834.806~837.020,864.269~870.146,886.285~888.483,919.178~930.108,930.836~932.292 nm。

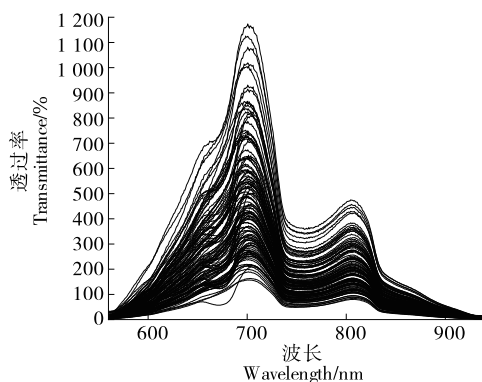


图 6 120 颗橙果的可见/近红外透射原始光谱

Figure 6 The original spectrum of visible/near-infrared diffuse transmission of 120 orange fruits

表 7 基于不同托盘的 PLSR 建模及预测结果

Table 7 PLSR modeling and forecast results based on different trays

材料类型	校正集		预测集	
	R^2_{cal}	RMSE	R^2_{pre}	RMSE
ABS 树脂	0.952 2	0.221 2	0.662 7	0.583 3
橡胶	0.769 2	0.600 7	0.537 4	0.906 7
PC 塑料	0.803 5	0.385 5	0.750 9	0.433 9
亚克力	0.952 9	0.256 8	0.805 2	0.653 9

稳定性竞争自适应加权采样(SCARS)算法可以有效去除非信息变量,有效压缩共线变量,达到提高模型稳健性的目的。由图 7(a)可知,随着抽样次数的增加,波长变量数由高到低呈递减趋势。由图 7(b)可知,随着抽样次数的增加,交叉验证均方根误差(RMSECV)值减少,这是由于受仪器影响且较敏感的波长变量被剔除;RMSECV 最小时,此时为最佳抽样次数。图 7(c)为波长变量稳定度轨迹图,即随采样次数的增加,每个波长的回归系数变化趋势,可以得到 RMSECV 的最优变量子集,最优变量子集为第 54 个变量子集,最优变量子集中包括 20 个波长变量,即:562.639,577.932,606.908,625.152,632.742,696.949,704.467,731.470,732.967,734.464,735.961,747.176,748.670,753.151,753.897,754.643,755.390,760.612,837.020,846.606 nm。

由图 8、9 可知,与 PLSR 相比,GA-PLSR 和 SCARS-PLSR 大大提高了预测精度。其中 SCARS-PLSR 模型对于预测集的 $R^2_{pre}=0.920\ 9$;RMSEP=0.468 3,预测精度优于 PLSR 和 GA-PLSR。

3 结论

采用 Trace Pro 仿真,结合实际可见/近红外光谱平台实验验证的手段,确定了橙果内部品质光谱无损在线

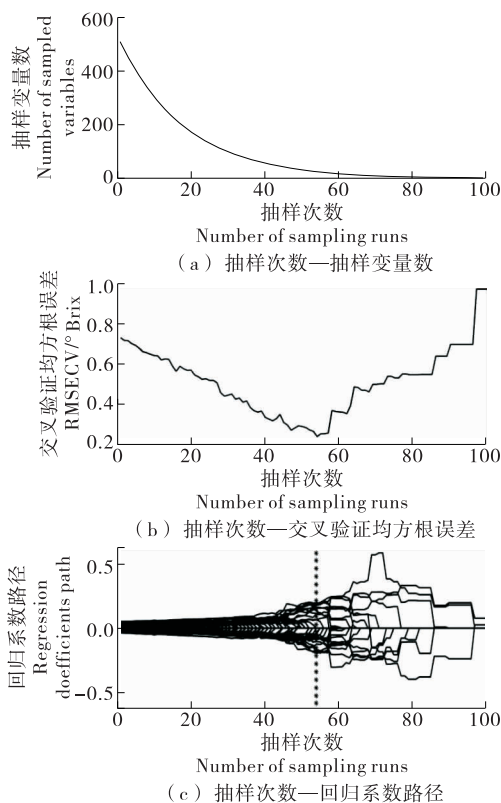


图 7 SCARS 算法选择特征变量

Figure 7 SCARS algorithm selects characteristic variables

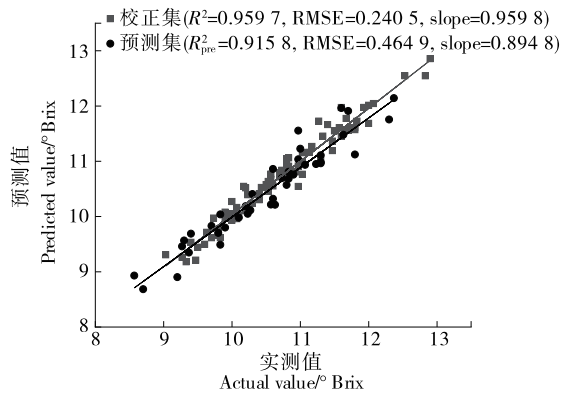


图8 基于 GA 算法特征提取方法的橙果 SSC 检测结果
Figure 8 SSC detection results of orange fruit based on GA algorithm feature extraction method

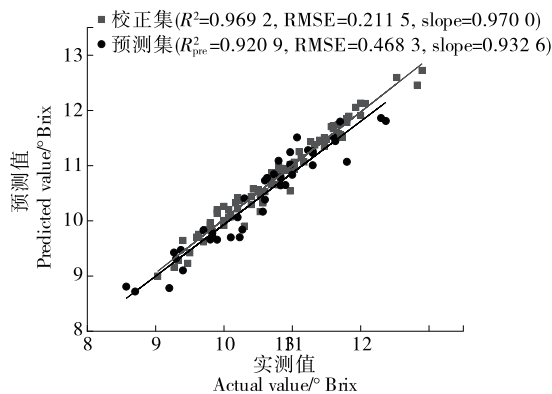


图9 基于 SCARS 算法特征提取方法的橙果 SSC 检测结果

Figure 9 SSC detection results of orange fruit based on SCARS algorithm feature extraction method

检测托盘的最优参数为:外径 80 mm、内横径 55 mm、内纵径 50 mm、厚度 20 mm、材料采用亚克力。实际检测算法对光谱进行 MSC 预处理,选用 SCARS-PLSR 进行建模。其中检测结果的决定系数为 0.920 9;预测均方根误差为 0.468 3,预测精度最佳。但研究只是以美国新奇士甜橙为研究对象,为了提高托盘与模型的适用性还需要对不同品种的橙果进行进一步研究,通过微调参数,研发可适应多品种橙果光谱无损检测的托盘。

参考文献

- [1] CHOI C H, LEE K J, PARK B. Prediction of soluble solid and firmness in apple by visible/near-infrared spectroscopy[J]. Journal of Biosystems Engineering, 1997, 22: 256-265.
- [2] YUAN Lei-ming, CAI Jian-rong, SUN Li, et al. Nondestructive measurement of soluble solids content in apples by a portable fruit analyzer[J]. Food Analytical Methods, 2016, 9: 785-794.
- [3] FAN Shu-xiang, GUO Zhi-ming, ZHANG Bao-hua, et al.

- Using Vis/NIR diffuse transmittance spectroscopy and multivariate analysis to predicate soluble solids content of apple[J]. Food Analytical Methods, 2016, 9: 1 333-1 343.
- [4] LUO Xuan, YE Zun-zhong, XU Hui-rong, et al. Robustness improvement of NIR-based determination of soluble solids in apple fruit by local calibration[J]. Postharvest Biology and Technology, 2018, 139: 82-90.
 - [5] 田海清, 应义斌, 徐惠荣, 等. 西瓜可溶性固形物含量近红外透射检测技术[J]. 农业机械学报, 2007, 38(5): 111-113.
 - [6] 介邓飞, 陈猛, 谢丽娟, 等. 适宜西瓜检测部位提高近红外光谱糖度预测模型精度[J]. 农业工程学报, 2014, 30(9): 229-234, 272.
 - [7] 钱曼, 黄文倩, 王庆艳, 等. 西瓜检测部位差异对近红外光谱可溶性固形物预测模型的影响[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(6): 1 700-1 705.
 - [8] 樊书祥, 黄文倩, 李江波, 等. LS-SVM 的梨可溶性固形物近红外光谱检测的特征波长筛选[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(8): 2 089-2 093.
 - [9] SHAO Yong-ni, BAO Yi-dan, HE Yong. Visible/near-infrared spectra for linear and nonlinear calibrations: A case to predict soluble solids contents and pH value in peach[J]. Food & Bioprocess Technology, 2011, 4: 1 376-1 383.
 - [10] JIE Deng-fei, XIE Li-juan, RAO Xiu-qin, et al. Using visible and near infrared diffuse transmittance technique to predict soluble solids content of watermelon in an on-line detection system[J]. Postharvest Biology & Technology, 2014, 90: 1-6.
 - [11] 郭志明, 黄文倩, 陈全胜, 等. 苹果腐心病的透射光谱在线检测系统设计及试验[J]. 农业工程学报, 2016, 32(6): 283-288.
 - [12] 孙潇鹏, 徐赛, 陆华忠. 基于光谱技术与光学仿真的柚果在线检测托盘设计与试验[J]. 食品与机械, 2019, 35(12): 56-62.
 - [13] 席裕庚, 柴天佑, 恽为民. 遗传算法综述[J]. 控制理论与应用, 1996(6): 697-708.
 - [14] 刘国海, 夏荣盛, 江辉, 等. 一种基于 SCARS 策略的近红外特征波长选择方法及其应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(8): 2 094-2 097.
 - [15] NANNI M R, CEZAR E, JUNIOR C A D S, et al. Partial least squares regression (PLSR) associated with spectral response to predict soil attributes in transitional lithologies[J]. Archives of Agronomy & Soil Science, 2017, 64: 682-695.
 - [16] 朱金权. SolidWorks 软件在机械设计中的应用与研究[J]. 新技术新工艺, 2009(2): 41-44.
 - [17] 孙健. 基于 TracePro 软件的复合抛物面聚光器光学性能分析[J]. 能源技术, 2010, 31(4): 194-197.