

基于电子舌检测的橙汁贮藏品质研究

Research on detection for the storage quality of orange juice based on the electronic tongue

史庆瑞¹ 国婷婷¹ 殷廷家¹ 王志强¹

SHI Qing-rui¹ GUO Ting-ting¹ YIN Ting-jia¹ WANG Zhi-qiang¹

李彩虹¹ 郭业民² 孙霞²

LI Cai-hong¹ GUO Ye-min² SUN Xia²

(1. 山东理工大学计算机科学与技术学院, 山东 淄博 255000; 2. 山东理工大学农业工程与食品科学学院, 山东 淄博 255000)

(1. School of Computer Science and Technology, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255000, China;
2. School of Agricultural Engineering and Food Science, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255000, China)

摘要:为实现对不同储存时间的鲜榨橙汁品质进行客观、快速的评价,采用基于虚拟仪器技术的电子舌系统对 6 种不同储存时间下的鲜榨橙汁样本进行定性和定量分析。针对电子舌输出信号特点,分别采用主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)和离散小波变换(Discrete Wavelet Transform, DWT)方法对输出信号进行预处理,以分类效果为依据,确定离散小波变换作为较佳特征提取方法。在此基础上,采用线性判别分析(Linear Discriminant Analysis, LDA)方法对不同储存时间鲜榨橙汁样本进行定性分析,然后采用粒子群优化最小二乘支持向量机(Particle Swarm Optimization Least Squared-Support Vector Machines, PSO-LSSVM)对鲜榨橙汁的不同储存时间进行定量预测。结果表明:LDA 结果中第一判别式(LD1)和第二判别式(LD2)的综合贡献率为 95.7%,6 种储存时间下的鲜榨橙汁样本均得到有效定性辨别;而 PSO-LSSVM 预测模型对鲜榨橙汁的不同储存时间具有较高的定量预测精度,其相关系数(R^2)、均方根误差、平均绝对误差分别为 0.999 1, 0.287 7, 0.232 8。

关键词:电子舌;主成分分析;离散小波变换;线性判别分析;最小二乘支持向量机

Abstract: The aim of this work was to fulfill the objective and rapid assessment of quality and flavor of fresh orange juice with different storage time. An electronic tongue system that based on virtual in-

strument technology was developed and used to the qualitative and quantitative analysis of fresh orange juice samples with six kinds of storage time. According to the characteristics of electronic tongue respond signal, it was first preprocessed by the principal component analysis (PCA) method and discrete wavelet transform (DWT) method, respectively. According to the classification result, the DWT was selected as a recommended feature extraction method. Then the linear discriminant analysis (LDA) was used to the qualitative analysis of fresh orange juice samples with different storage time. Moreover, the least squared-support vector machines based on particle swarm optimization method (PSO-LSSVM) was applied to quantitative forecast the different storage time. The results showed that the cumulative contribution rate of LD1 and LD2 was reached 95.7% when the linear discriminant analysis was employed, and the fresh orange juice samples with the six kinds of storage time were effectively discriminated; The PSO-LSSVM prediction model had high prediction precision for different storage time of fresh orange juice, the correlation coefficient (R^2) root mean square error (RMSE), mean absolute error (MAE) were 0.999 1, 0.287 7, and 0.232 8, respectively. This study could provide technical reference for quality evaluation and monitoring of fresh fruit juice.

Keywords: electronic tongue; principal component analysis; discrete wavelet transform; linear discriminant analysis; least squared-support vector machines

基金项目:国家自然科学基金项目(编号:61473179);国家自然科学基金基金项目(编号:31772068);山东省自然科学基金项目(编号:ZR2015CM016)

作者简介:史庆瑞,男,山东理工大学在读硕士研究生。

通信作者:王志强(1977—),男,山东理工大学副教授,博士。

E-mail: wzq@sdu.edu.cn

收稿日期:2017-09-08

鲜榨果汁以其丰富的营养价值和对人体特殊的生理功效越来越多地出现在人们的日常生活中。长期饮用鲜榨果汁不仅可以促进消化、美白肌肤,而且还可以预防疾病、减缓衰老^[1]。但是,鲜榨果汁氧化一直以来是影响果汁风味和品质的重要因素之一。随着贮藏时间的延长,鲜榨果汁的氧化

程度加剧以及微生物的滋生将会破坏 V_c 、氨基酸、糖类营养物质,并使果汁发生褐变,大大降低果汁中原有的营养成分和生理功效,从而影响鲜榨果汁原有的风味和品质^[2]。所以鲜榨果汁的风味品质能否得以保障已成为生产商之间的竞争以及消费者所关心的重要问题。

感官质量分析是果汁品质分析中常用的方法。但此方法易受品评者的主观影响,存在主观性强,重复性差等缺点。传统的分析方法有高效液相色谱法检测果汁中酚类物质^[3]、紫外分光光度法测定 V_c ^[4]等,但果汁的风味以及品质是由内部各组分之间的相互作用产生,传统分析方法只检测果汁单一组分很难表征果汁样本的整体特征信息。同时,其仪器昂贵、体积大、样本制备复杂、分析时间长,不适合快速、实时、准确地检测分析。因此,实际生产中需要一种客观、全面、快速的现代化分析检测仪器,可以从整体上对果汁的风味和品质给予分析和评价。电子舌是一种利用多传感器阵列结合多元统计分析方法对复杂溶液进行定性和定量分析的新型现代化分析检测仪器^[5],具有操作简单、携带方便、检测迅速、重复性好、客观性强等特点。目前,电子舌已经成功应用在食品^[6-7]、医药^[8-9]、环境^[10-11]等领域中。近年来,众多国内外学者在果汁风味和品质检测方面已经成功开展了大量相关研究。如高丽萍等^[12]利用电子舌对不同冷藏时间的草莓鲜榨汁进行了定性和定量分析;张森等^[13]利用电子舌对鲜榨橙汁掺假进行了区分辨别;Baldeon E O等^[14]利用电子舌对果汁的抗氧化性进行了分析研究;Haddi Z等^[15]利用电子舌和电子鼻对不同水果果汁进行了区分辨识。众多研究表明,电子舌在鲜榨果汁检测中具有较大的潜能和实际价值。但是,目前尚未有电子舌用于鲜榨橙汁贮藏品质的相关研究。

本研究以鲜榨橙汁为试验对象,利用基于虚拟仪器技术搭建的电子舌系统对不同贮存时间的鲜榨橙汁风味品质进行检测分析。针对电子舌响应信号的特点,利用 DWT 方法对电子舌原始信号进行预处理,并与传统的 PCA 数据预处理方法相比较,选取较佳的电子舌数据预处理方法,然后结合 LDA、最小二乘支持向量机(Least Squared-Support

Vector Machines, LSSVM)对不同贮存时间鲜榨橙汁的风味品质进行定性和定量分析。旨在为鲜榨果汁风味和品质评价提供理论依据和技术支持。

1 材料与方 法

1.1 材料与仪器

1.1.1 材料与试剂

橙汁:选取由农夫山泉公司生产的 100%非浓缩鲜榨橙汁,该橙汁由江西赣州柑橘橙经冷压榨而成,未添加水、糖、添加剂等其他成分,每瓶共计 330 mL。所有橙汁均冷藏运输,送达实验室后均密封完好,溶液无异样,未超过保质期。

1.1.2 电子舌系统

试验采用本实验室自行设计的一种基于虚拟仪器技术的大幅脉冲伏安电子舌系统。电子舌系统结构见图 1。该系统由传感器阵列模块、信号处理与采集模块、Labview 上位机软件组成。

传感器阵列由 6 个贵金属裸电极(玻碳、镍、钯、钛、铂、钨)组成的交互感应工作电极阵列以及 1 个参比电极(Ag/AgCl)和 1 个辅助电极(铂柱电极)构成(所有电极均由天津艾达恒晟有限公司生产)。信号处理与采集模块由数据采集卡和信号调理模块组成。该仪器工作时,Labview 上位机软件平台产生的大幅脉冲激发信号由美国 National Instruments 公司的 USB6002 数据采集卡对其进行数/模转换后,经信号调理模块中的恒电位电路将其恒定地施加在传感器阵列上。在大幅脉冲激发信号影响下,待测溶液在工作电极表面发生电化学反应并产生微弱的响应电流,为了获得准确的溶液信息,该响应电流经过信号调理模块 I/V 转换、放大、滤波后,送至数据采集卡进行模/数转换,最终到达上位机对其进行模式识别分析。

1.2 试验方法

试验前采用 Al_2O_3 打磨粉和抛光布对每个工作电极进行抛光处理,确保每个电极表面呈镜面为止。试验过程中,从首次启封的果汁瓶中取出 50 mL 的果汁于烧杯中进行电

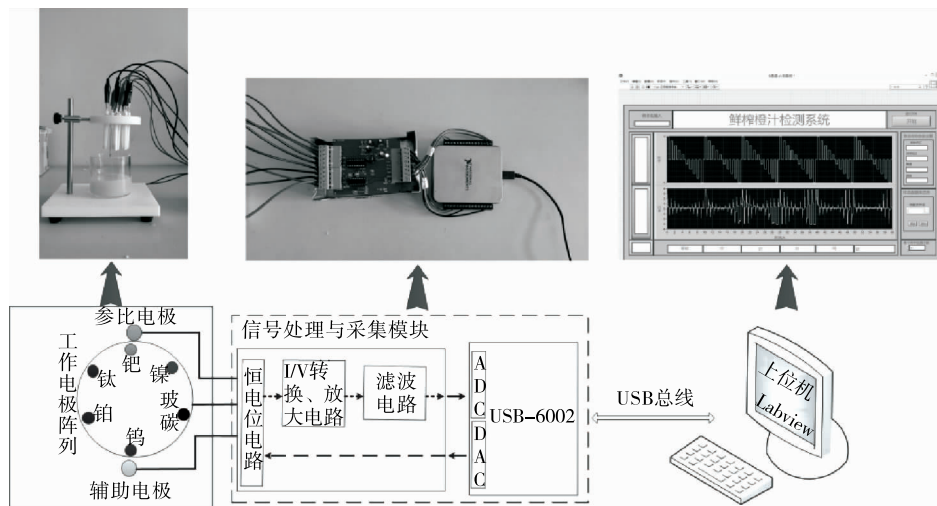


图 1 电子舌系统结构图

Figure 1 Structure diagram of the electronic tongue system

子舌检测,同时标记为 0 h,随后每贮存 2 h 便从瓶中量取 50 mL 果汁进行检测,分别标记为 2,4,6,8,10 h,每次量取之后将瓶盖拧紧。电子舌检测过程中利用上位机软件控制 6 个工作电极依次对鲜榨橙汁样本进行连续 10 次检测,每次检测完一个样本后,采用超纯水依次对工作电极进行超声清洗,去除电极表面残留物以免影响下次检测结果。鲜榨果汁在 0~6 °C 下储存,检测试验在室温下进行。检测一次工作电极阵列共得到 6 000 个数据点,则最终可得到一个 60×6 000 的数据矩阵。

1.3 数据预处理与分析

在大幅脉冲信号的激发下,电子舌系统能够从待测溶液中获得大量整体信息。但是,此信息中包含的数据量较大,若将其直接用于模型输入,不但增加了系统处理时间和难度,而且由于传感器的交互敏感特性使得数据中存在大量冗余信息,从而影响模型的分类和预测效果。因此在对电子舌输出数据进行分析前,分别采用主成分分析和离散小波变换 2 种方法对电子舌原始数据进行预处理。

1.3.1 主成分分析 主成分分析(PCA)是一种无监督的模式识别方法。PCA 通过对相关原始变量进行线性变换得到几个线性无关的综合变量,即主成分,并且将复杂的高维原始变量空间投影到简单的低维综合变量空间内。新的变量空间不仅降低了原始数据维度,压缩了数据量,而且新的综合变量仍可以表征原始变量中绝大多数的特征信息。从而实现特征提取、简化问题、提高模型分类和预测效果的目的^[16]。

1.3.2 离散小波变换 小波变换是一种高效、简单、快捷的时频域联合分析方法,可以对信号进行多分辨率、自适应、时频域局部化的分析,被称为“数字显微镜”^[17]。由于其多分辨能力强、压缩效果好、有效信息保存完整,已成功应用在激光诱导击穿光谱^[18]、电子舌信号^[19]中。离散小波变换(DWT)是在尺度和位移上对小波变换的一种离散化,能够对信号的分析更加准确、高效。本研究根据大幅脉冲响应信号的特点采用离散小波变换对其进行 Mallat 小波分解,计算公式:

$$\begin{cases} P_k^j = \sum_{m \in Z} \alpha_{m-2k} P_m^{j-1} \\ r_k^j = \sum_{m \in Z} \beta_{m-2k} P_m^{j-1} \end{cases}, \quad (1)$$

式中:

P_k^j ——原始信号小波分解后的第 j 层低频分量,即近似系数;

r_k^j ——原始信号小波分解后的第 j 层高频分量,即细节系数;

α ——低通滤波器;

β ——高通滤波器;

α_{m-2k} ——低通滤波系数;

β_{m-2k} ——高通滤波系数;

j ——分解层数;

P_m^{j-1} ——原始信号小波分解后的第 $j-1$ 层低频分量,即近似系数。

经小波分解后,去掉信号中的高频分量,只保留低频分量,不会造成原有信号中有效信息的缺失。因此可以对电子舌数据进行高效压缩和特征提取。

采用 Mallat 重构算法进行反变换可以得到压缩重构信号,此信号与原始信号相比保持了原有信号的基本波形特征和有效信息。Mallat 重构算法:

$$P_k^{j-1} = \sum_{m \in Z} \alpha'_{k-2m} P_m^j + \sum_{m \in Z} \beta'_{k-2m} r_m^j, \quad (2)$$

式中:

P_k^{j-1} ——第 $j-1$ 层小波重构信号;

α'_{k-2m} ——低通滤波系数;

β'_{k-2m} ——高通滤波系数;

P_m^j ——第 j 层近似系数;

r_m^j ——第 j 层细节系数。

离散小波变换对电子舌数据的压缩效果取决于小波基函数和分解层数 2 个重要参数的选择。分解层数决定着最终的数据压缩量,压缩量太大或太小都将影响压缩效果和模型性能。而小波基函数则决定着特征信息的提取,不同正交性、紧支性等特性的小波基函数将会从原始信号中提取出不同的特征信息。为了在保证丢失最少特征信息的前提下,寻求最优的压缩空间。本研究采用波形相似系数对离散小波压缩效果进行可视化评价,并选择最优的小波基函数和分解层数。

波形相似系数公式:

$$f_c = \frac{A \cap B}{A \cup B} = \frac{\sum_{i=1}^N (\max\langle a_i, b_i \rangle - |a_i - b_i|)}{\sum_{i=1}^N (\min\langle a_i, b_i \rangle + |a_i - b_i|)}, \quad (3)$$

式中:

A ——电子舌原始信号数据;

B ——经离散小波变换后的压缩重构信号数据;

a_i —— A 的第 i 个数据;

b_i —— B 的第 i 个数据;

f_c ——波形相似系数(0~1),反映了原始信号与压缩重构信号之间的相似性, f_c 越大表明两波形之间的相似性越高。

1.3.3 数据分析方法 不同储存时间鲜榨橙汁电子舌数据经 PCA 和 DWT 预处理之后,分别采用线性判别分析(LDA)和最小二乘支持向量机(LSSVM)对电子舌特征数据进行定性和定量分析。

LDA 是一种有监督的多元统计分析方法。目前已成功并广泛地应用在了电子舌领域^[20-21]。LDA 利用已知的样本类别通过计算寻找几个可以实现最好分类效果的线性判别函数,同时将高维样本空间投影到由判别函数构成的低维特征空间中,使得新空间中组与组之间差异性更明显,同一组内聚集性更显著。从而实现降低分类空间维数,抽取有效分类信息,以达到最优分类效果的目的^[22]。

LSSVM 是在支持向量机结构风险最小化理论上改进扩展的一种非线性模式识别方法^[23]。在水质检测^[24]、电子舌^[25]等众多领域得到成功应用。基本思想是通过一种非

线性的映射方式,将线性不可分的原始样本空间映射到一个高维的特征空间内,并从中找到一个最优超平面,使得各样本之间线性可分。LSSVM在此理论上结合最小二乘方法,将支持向量机中的不敏感损失函数用二次损失函数进行替代,并将不等式约束条件改成等式约束条件,优化问题则变为:

$$\begin{cases} \min J(\omega, \xi) = \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + c \sum_{i=1}^l \zeta_i^2 \\ s.t. y_i = \varphi(x_i)\omega + b + \xi_i, i = 1, 2, \dots, l \end{cases}, \quad (4)$$

式中:

c ——正则化参数,即惩罚因子,调节训练误差样本的惩罚力度;

b ——偏差;

ξ_i ——训练样本的预测误差向量;

ω ——权重向量;

$J(\omega, \xi)$ ——损失函数;

$\varphi(x_i)$ ——非线性函数,将系统输入向量映射到高维特征空间。

为了解决此优化问题,可将求解二次规划问题变为求解线性方程组的问题,通过求解线性方程组最终可得到LSSVM非线性预测模型:

$$f(x) = \sum_{i=1}^l K(x, x_k) + b, \quad (5)$$

式中:

$K(x, x_k)$ ——径向基核函数;

b ——偏差。

式(5)中 $K(x_1, x_i)$ 为符合 Mercer 理论条件的核函数。

因径向基核函数学习能力强,拟合效果好,操作简单等特点,本研究将以径向基函数作为核函数建立 LSSVM 模型,其算法如下:

$$K(x, x_k) = \exp\left(-\frac{\|x - x_k\|^2}{2\sigma^2}\right), \quad (6)$$

式中:

x ——输入变量;

x_k ——径向基核函数中心;

σ ——径向基核参数,即核函数宽度。

正则化参数 c 和核参数 σ 是影响 LSSVM 模型预测能力和泛化能力的 2 个重要因素。正则化参数 c 可以实现最小化训练误差和模型复杂度之间的均衡;核参数 σ 决定了从样本空间到高维特征空间的非线性映射关系。因此寻找正则化参数 c 和核参数 σ 的最佳优化方法成为建立 LSSVM 预测模型的首要任务。分别采用留一法交叉验证和 PSO 算法结合训练集样本对 2 个参数进行优化并建立相关模型。PSO 算法是一种借助群体并行搜索的全局寻优算法,通过反复迭代递推的方式,搜索多个参数组合的最优解。其公式:

$$v_i = v_i + c_1 \gamma_1 (p_i - x_i) + c_2 r_2 (p_g - x_i), \quad (7)$$

$$x_i = x_i + v_i, \quad (8)$$

式中:

x_i ——第 i 个粒子在搜索空间中的位置;

v_i ——第 i 个粒子的更新速度;

p_i ——第 i 个粒子搜索到的最优位置;

p_g ——群体最优位置;

c_1, c_2 ——学习因子;

r_1, r_2 ——随机数(0~1)。

通过式(7)、(8)对粒子进行操作,不断更新搜索位置和速度,最终得到参数组合在搜索空间内的最优解。

本研究中 PCA、DWT 以及 LSSVM 分析由 Matlab2014a 软件实现,LDA 由 SPSSv19.0 软件完成。

2 结果与讨论

2.1 电子舌响应信号

6 个工作电极在大幅脉冲信号激励下的单个鲜榨橙汁样本响应信号,见图 2。由图 2 可知,同一激励信号下 6 个工作电极的响应信号之间存在着较大差异。这是由于不同贵金属电极在激励信号的影响下对溶液中的不同组分呈现出了不同的电响应。因此由多个贵金属电极组成的工作电极阵列可以更加全面地反映溶液的整体特性信息。每次检测可以从鲜榨橙汁样本中获得 6 000 个数据点。

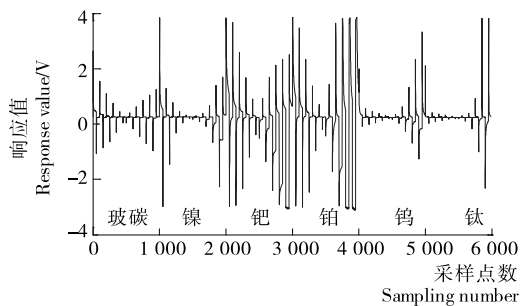


图 2 工作电极阵列响应信号

Figure 2 Respond signal of working electrodes array

2.2 数据预处理

针对大幅脉冲伏安电子舌输出数据量大、冗余信息多等特点,本研究分别采用主成分分析和离散小波变换 2 种方法进行数据预处理,以实现较好的分类效果。

2.2.1 PCA 预处理 主成分分析作为一种数据压缩和特征提取的方法,在文献[26~27]中得到成功应用。本研究采用 PCA 对 60×6000 的电子舌原始数据矩阵进行压缩以及特征提取后,选取主成分累积贡献率超过 95% 的 9 个主成分作为模型输入,最终得到一个 60×9 的数据矩阵,大大减少了数据量,其中行为样本数,列为主成分数。

2.2.2 DWT 预处理 为了压缩原始数据量,减小数据分析处理难度,分别采用 Symlets、Daubechies、Haar、Coiflets 小波函数对鲜榨橙汁电子舌响应信号进行 6~8 层分解。将得到的近似系数重构信号与原信号进行对比,依据波形系数 f_c (见表 1),选择最佳的小波分解层数和小波基函数。由表 1 可知,不同小波基函数对 f_c 的影响不同,表明不同小波基函数从原信号中提取了不同的特征信息。同时随着分解层数的不断增加, f_c 的变化均呈现下降的趋势,说明小波压缩过程中,随着分解层数增加虽能够大大减少数据量,但也造成

了有效特征信息的过度丢失,无法全面地表征原始信号特征。为了尽可能保持原有信号特征信息的同时获得最优的压缩空间,选择 f_c 尽可能大并且分解层数尽可能多的情况作为最佳的参数组合。通过观察,最终选择 coif2 为小波基函数进行 7 层分解作为离散小波变换的最佳参数组合,其 $f_c = 0.7948$ 。经过 DWT 预处理后原始数据矩阵压缩 60×57 ,大大减少了数据量。

表 1 不同小波基和分解层数下的波形相似系数统计

Table 1 Waveform similarity coefficient statistics based on different wavelet basis and decomposition level

小波函数	小波基	波形相似系数		
		6	7	8
Symlets	sym2	0.743 6	0.738 2	0.712 5
	sym3	0.753 7	0.705 5	0.690 8
	sym4	0.755 4	0.712 0	0.699 6
	sym5	0.742 5	0.720 1	0.695 5
Daubechies	db2	0.743 6	0.738 2	0.712 5
	db3	0.753 7	0.705 5	0.690 8
	db4	0.756 5	0.720 5	0.705 4
	db5	0.733 9	0.712 6	0.698 5
Coiflets	coif2	0.795 0	0.794 8	0.758 0
	coif3	0.790 1	0.758 8	0.754 8
	coif5	0.766 1	0.754 5	0.754 0
Haar	0.742 5	0.720 1	0.695 5	

2.3 数据分析

2.3.1 LDA 定性分析 针对 PCA 和 DWT 2 种数据预处理方法,分别采用 LDA 对不同储存时间鲜榨橙汁电子舌数据进行判别分析,以 LDA 结果图中各样本之间的分类情况为依据,考察 PCA 和 DWT 对电子舌原始数据的压缩以及特征提取的效果。

图 3(a)为经 PCA 数据预处理后的 LDA 结果图。第一判别式(LD1)、第二判别式(LD2)贡献率分别为 75.8%和 16.3%,2 个判别式总的贡献率为 92.1%,所以前 2 个判别式可以较好地反映原始数据的整体特征信息,各样本在前 2 个判别式构成的空间内的分布情况可以基本代表样本在原空间的分布情况。由图 3(a)可知,刚拆封时的样本(0 h)与其它储存时间下的样本相距较远,说明鲜榨橙汁在接触外界环境后内部的风味品质发生了明显变化。0 h 与 2 h 相距较远,可能是鲜榨橙汁与外界接触后,原有的内部组分环境被打破导致其品质迅速下降。2 h 与 4 h 相距较远,可能是外界的氧气和微生物等进入样本中相互作用,逐渐消耗糖、酸并破坏维生素等营养成分使其品质进一步下降。6,8,10 h 相距较近,具有重叠趋势,可能是在外界氧气和微生物等的持续作用下,使得鲜榨橙汁中的维生素、糖、酸含量逐渐下降到一个新的平衡,随着时间的延长,其内部整体品质不再发生明显的变化,即完全变质。但鲜榨橙汁在 6 h 时就过早地发生完全变质不符合产品保质期(45 d)要求,所以此结果中

未能对不同储存时间下鲜榨橙汁的品质变化进行准确客观的分析。

图 3(b)为经 DWT 数据预处理后的 LDA 结果图。第一判别式(LD1)、第二判别式(LD2)贡献率分别为 76%和 19.7%,2 个判别式总的贡献率为 95.7%,相比 PCA 预处理后的 LD1 和 LD2 总贡献率提高了 3.6%,因此前两个判别式可以更好地反映原始数据的整体特征信息。从图 3(b)中可以看出,0 h 与 2 h 及 2 h 与 4 h 的间距较远,与图 3(a)中样本排布大体一致。而 4,6,8,10 h 间距逐渐增大,与图 3(a)分析结果存在明显差异,可能是 DWT 法提取的特征信息能够更好地体现不同储存时间下鲜榨橙汁样本的差异性,使得分类效果得到了明显提升。

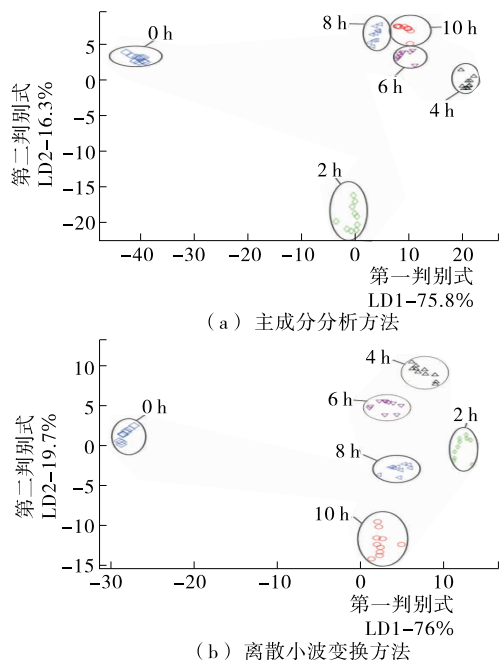


图 3 两种预处理方法下的 LDA 得分图
Figure 3 LDA score plot based on two kinds of preprocessing methods

综合上述试验结果,从 DWT 预处理方法下的 LDA 结果[图 3(b)]中可以基本观察出鲜榨橙汁在不同储存时间下其风味品质的变化情况。但经 PCA 数据预处理后的 LDA 分析结果却与鲜榨橙汁实际的保质期相差较大,未能较好地得到其风味品质的分析结果。同时从区分角度来看,PCA 下的 LD1 和 LD2 综合贡献率较小,且样本间有重叠趋势,未能达到较好的分类效果。而经过 DWT 后的 LD1 和 LD2 综合贡献率达到 95.7%,样本之间的区分效果得到提升,可以更加明显地对不同储存时间的鲜榨橙汁的风味品质进行判别分析,说明 DWT 可以提取更加有效的特征信息来解释原始鲜榨橙汁数据,同时可为定量分析提供更大的可能性。所以本研究采用 DWT 处理后的数据对不同储存时间的鲜榨橙汁做进一步的定量分析。

2.3.2 PSO-LSSVM 定量分析 为了实现对不同储存时间鲜榨橙汁的定量分析,采用 LSSVM 方法建立鲜榨橙汁不同储存时间的定量预测模型。离散小波变换后的数据作为模

型输入。选取 42 个样本(每组时间 7 个,共 6 组时间)作为训练集,用于模型建立和参数优化。剩余的 18 组(每组时间 3 个,共 6 组时间)作为测试集,用于验证建立模型的性能。

为了验证留一法交叉验证和 PSO 2 种不同参数优化算法下建立模型的预测性能,分别采用相关系数(R^2)、均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)对 LSSVM 模型进行评价。评价指标公式:

$$R^2 = \frac{[\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})(\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})]^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \times \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2}, \quad (9)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (10)$$

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|, \quad (11)$$

式中:

N —— 样本量;

y_i —— 各样本的目标值;

\hat{y}_i —— 各样本的预测值;

$\bar{\hat{y}}$ —— \hat{y}_i 的平均值。

R^2 、RMSE、MAE 的值均在 0~1。 R^2 越接近于 1, RMSE、MAE 越接近于 0,则表明模型的预测性能和精度越好。不同参数优化算法下各模型预测精度见表 2。

表 2 2 种参数优化方法下的 LSSVM 模型性能指标对比

Table 2 Performance comparison of LSSVM model based on two parameter optimization methods

参数优化方法	R^2	RMSE	MAE
留一法交叉验证	0.999 5	0.040 6	0.027 3
粒子群优化算法	0.999 8	0.012 3	0.008 1

综合上述 2 种参数优化方法下的模型预测结果可以看出,粒子群优化算法下的 LSSVM 模型的预测精度要比留一法交叉验证下的 LSSVM 模型预测精度高,评价指标 R^2 、RMSE、MAE 分别高 0.03%,2.83%,1.92%,虽各评价指标之间的差距不大,但已很好地提高了 LSSVM 模型对鲜榨橙汁不同储存时间的预测精度。这可能是因为粒子群优化算法具有较强的全局搜索和优化特性,同时兼具参数量少、操作简便等特点,相比留一法交叉验证方法计算成本较高、寻优过程复杂等特点可以更快、更准确地寻找最优的(c, σ)参数组合。因此选取 PSO 算法作为 LSSVM 模型的最佳建模方法。

为了验证建立模型对未知样本的预测能力,利用测试集样本对 LSSVM 预测模型进行评估。图 4 为鲜榨橙汁不同储存时间的 LSSVM 预测模型。由图 4 可知,LSSVM 预测模型能够给出鲜榨橙汁储存时间的实际值和预测值之间的相关关系。测试集的模型评价指标 R^2 为 0.999 1、RMSE 为 0.287 7、MAE 为 0.232 8,说明鲜榨橙汁储存时间的实际值与测试集之间具有较好的相关性,同时表明 LSSVM 预测模

型对未知样本具有较好的预测效果和较高的预测精度。

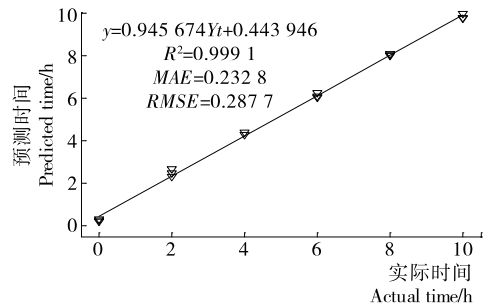


图 4 鲜榨橙汁储存时间的 LSSVM 预测模型

Figure 4 LSSVM prediction model for storage time of fresh orange juice

3 结论

采用基于虚拟仪器技术的电子舌系统对不同储存时间下的鲜榨橙汁进行定性和定量分析。首先分别采用 PCA 和 DWT 2 种方法对电子舌输出信号进行预处理,通过比较 LDA 定性分析结果确定了以 coif2 为小波基函数进行的 7 层 DWT 更适合于鲜榨橙汁电子舌数据的特征提取,同时 DWT-LDA 结果中实现了对 6 种不同储存时间鲜榨橙汁样本的有效区分,并能够对各样本的变化给予实际客观的评价。利用 DWT 特征数据作为模型输入建立 LSSVM 预测模型,测试集样本验证得到,PSO-LSSVM 预测模型可以有效地预测鲜榨橙汁的不同储存时间。电子舌系统对不同储存时间鲜榨橙汁的检测分析具有可行性,同时可为果汁类产品的品质监测、控制和评价提供技术支持和新的研究思路。

参考文献

- [1] 陈学红,贺菊萍. 草莓采后生理和品质变化及保鲜技术[J]. 河北农业科学, 2008, 12(9): 19-22.
- [2] 马清河,胡常英,刘丽娜,等. 葡萄糖氧化酶在果汁保鲜中的应用[J]. 中国食品添加剂, 2005(1): 83-85.
- [3] 吴燕华,刘文力,阎红,等. 高效液相色谱法测定苹果中的酚类物质[J]. 分析化学, 2002, 30(7): 826-828.
- [4] 王海佳. 紫外分光光度法研究维生素 C 的稳定性及蔬果和果汁中含量的测定[D]. 太原: 山西医科大学, 2015: 1-5.
- [5] 赵煜,韦真博,王俊. 电子舌信号与理化指标的信息融合区分不同养殖水的研究[J]. 农业工程学报, 2012, 28(1): 153-160.
- [6] 曹仲文,张晓燕,周晓燕. 电子舌对鸡汤和人工勾兑高汤及其混合样品的识别[J]. 食品与机械, 2015, 31(1): 14-17.
- [7] 易宇文,范文教,贾洪峰,等. 基于电子舌的微冻鲢鱼新鲜度识别研究[J]. 食品与机械, 2014, 30(2): 142-145.
- [8] LORENZ J K, REO J P, HENDL O, et al. Evaluation of a taste sensor instrument (electronic tongue) for use in formulation development[J]. International Journal of Pharmaceutics, 2009, 367(1/2): 65-72.
- [9] 杜瑞超,王优杰,吴飞,等. 电子舌对中药滋味的区分辨识[J]. 中国中药杂志, 2013, 38(2): 154-160.
- [10] 王志强,王辉,张志豪,等. 基于电化学和虚拟仪器的土壤重金属检测系统研究[J]. 农业机械学报, 2015, 46(1): 119-126.

(下转第 203 页)

3 结论

在线激光打孔参数是影响细支卷烟品质的关键因素,本试验围绕细支卷烟打孔位置、打孔数量及激光脉冲持续时间等在线打孔参数开展研究,对比评价了不同在线打孔参数对细支卷烟物理化学指标的影响,并探讨分析了造成差异的原因。试验结果表明在线激光打孔位置对细支卷烟理化指标的影响较小,明显小于对正常圆周卷烟的影响,且打孔位置位于滤嘴中间时细支卷烟通风率最大,主流烟气排放量最小;与在线激光打孔位置相比,打孔数量及激光脉冲持续时间对细支卷烟理化指标的影响显著增大,随打孔数量和激光脉冲持续时间的增加,细支卷烟通风率提高,主流烟气排放量降低。综上,可适当调整在线打孔参数达到细支卷烟设计目标。

参考文献

- [1] 张宇. 聊聊细支烟[J]. 新烟草, 2014(11): 6-7.
- [2] 君宇. 细支烟的新概念[J]. 中国烟草, 2014(5): 15-16.
- [3] 梁建, 苏健凌. 烟支在线激光打孔技术降焦分析[J]. 广西轻工业, 2008(8): 48-49.
- [4] 陈慧斌. 接装纸打孔对卷烟质量的影响研究[C]// 中国烟草学会工业专业委员会. 中国烟草学会工业专业委员会烟草工艺学术研讨会论文集. 北京: 中国烟草学会工业专业委员会, 2010: 7.
- [5] 冯文, 廖臻, 徐世涛, 等. 接装纸激光、静电打孔方式对卷烟烟气影响的对比研究[J]. 云南大学学报: 自然科学版, 2010, 32

(S1): 115-117, 123.

- [6] 曹伏军, 解晓翠, 汪旭, 等. 在线激光打孔参数对卷烟通风率及常规烟气成分释放量的影响[J]. 烟草科技, 2014(11): 45-49, 61.
- [7] 解晓翠. 在线激光打孔卷烟通风率与卷烟理化指标的关系[J]. 郑州轻工业学院学报: 自然科学版, 2015, 30(Z1): 52-56.
- [8] 魏玉玲. 卷烟材料组合搭配对主流烟气量及过滤效率的影响[J]. 烟草科技, 2008(11): 9-13.
- [9] 于川芳, 罗登山, 王芳, 等. 卷烟“三纸一棒”对烟气特征及感官质量的影响(一)[J]. 中国烟草学报, 2001(2): 1-7.
- [10] 于川芳, 罗登山, 王芳, 等. 卷烟“三纸一棒”对烟气特征及感官质量的影响(二)[J]. 中国烟草学报, 2001(3): 6-10.
- [11] 金勇, 王诗太, 李克, 等. 接装纸打孔参数对卷烟烟气焦油及7种有害成分释放量影响的PLS回归分析[J]. 烟草科技, 2016, 49(4): 37-44.
- [12] 谷春亮. ZJ17生产预打孔卷烟通风率影响因素研究[J]. 机械工程师, 2014(10): 257-259.
- [13] 莫远烈, 代建文. LASER 300S在线激光打孔参数的选择[J]. 烟草科技, 2006(10): 10-15.
- [14] 郭丽, 栗志, 王彬. 水松纸透气度检测技术[J]. 中华纸业, 2003(6): 46-48.
- [15] 熊安言, 李善莲, 丁美宙, 等. 卷烟生产过程质量稳定性评价方法的设计及应用[J]. 食品与机械, 2017, 33(2): 183-188.
- [16] DAVIS D L, NIELSEN M T. 烟草——生产, 化学和技术[M]. 国家烟草专卖局科技教育司, 中国烟草科技信息中心, 译. 北京: 化学工业出版社, 2003: 20-30.

(上接第142页)

- [11] KIRSANOV D, ZADOROZHNYAYA O, KRASHENINNIKOV A, et al. Water toxicity evaluation in terms of bioassay with an Electronic Tongue[J]. Sensors & Actuators B Chemical, 2013, 179(4): 282-286.
- [12] 高利萍, 王俊, 崔绍庆. 电子舌检测不同冷藏时间草莓鲜榨汁的品质变化[J]. 农业工程学报, 2012, 28(23): 250-256.
- [13] 张森, 贾洪锋, 李曼昕, 等. 电子舌在鲜橙橙汁掺假识别中的应用研究[J]. 食品与机械, 2015(6): 92-94.
- [14] BALDEÓN E O, ALCANIZ M, MASOT R, et al. Voltammetry pulse array developed to determine the antioxidant activity of camu-camu (Myrciariadubia, [H. B. K.] McVaug) and tumbo (Passiflora mollisima, [Kunth] L.H. Bailey) juices employing voltammetric electronic tongues[J]. Food Control, 2015, 54: 181-187.
- [15] HADDI Z, MABROUK S, BOUGRINI M, et al. E-Nose and e-Tongue combination for improved recognition of fruit juice samples[J]. Food Chemistry, 2014, 150(2): 246-253.
- [16] 王茹. 智舌中智能模式识别单元的实现与应用研究[D]. 杭州: 浙江工商大学, 2009: 7-8.
- [17] 邵婷婷, 白宗文, 周美丽. 基于离散小波变换的信号分解与重构[J]. 计算机技术与发展, 2014(11): 159-161.
- [18] 蒋梅城, 陆继东, 姚顺春, 等. 小波变换在激光诱导击穿光谱压缩中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(10): 2 797-2 801.
- [19] GHOSH A, TUDU B, TAMULY P, et al. Prediction of theaflavin and thearubigin content in black tea using a voltammetric

electronic tongue[J]. Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems, 2012, 116(7): 57-66.

- [20] CETÓ X, GUTIÉRREZ-CAPITÁN M, CALVO D, et al. Beer classification by means of a potentiometric electronic tongue[J]. Food Chemistry, 2013, 141(3): 2 533-2 540.
- [21] 熊萧萧, 王鲁峰, 徐晓云, 等. 基于电子舌技术对不同年份的化橘红的识别[J]. 宁波大学学报: 理工版, 2012, 25(3): 21-24.
- [22] GUTIÉRREZ J M, HADDI Z, AMARI A, et al. Hybrid electronic tongue based on multi-sensor data fusion for discrimination of beers[J]. Sensors & Actuators B Chemical, 2013, 177(1): 989-996.
- [23] 冯学军. 最小二乘支持向量机的研究与应用[J]. 安庆师范学院学报: 自科版, 2009, 15(1): 112-113.
- [24] 刘双印, 徐龙琴, 李振波, 等. 基于PCA-MCAFA-LSSVM的养殖水质pH值预测模型[J]. 农业机械学报, 2014, 45(5): 239-246.
- [25] WEI Zhen-bo, WANG Jun. Tracing floral and geographical origins of honeys by potentiometric and voltammetric electronic tongue[J]. Computers & Electronics in Agriculture, 2014, 108: 112-122.
- [26] 吴瑞梅, 赵杰文, 陈全胜, 等. 基于电子舌技术的绿茶滋味品质评价[J]. 农业工程学报, 2011, 27(11): 378-381.
- [27] LU Lin, HU Xian-qiao, TIAN Shi-yi, et al. Visualized attribute analysis approach for characterization and quantification of rice taste flavor using electronic tongue[J]. Analytica Chimica Acta, 2016, 919: 11-19.