

基于深度学习的西瓜可见/近红外光谱可溶性固形物预测模型研究

Prediction model research of SSC in watermelon based on deep learning and visible/near infrared spectroscopy

吴爽 李国建 介邓飞

WU Shuang LI Guo-jian JIE Deng-fei

(福建农林大学机电工程学院, 福建 福州 350002)

(College of Mechanical and Electronic Engineering, Fujian Agriculture and Forestry University, Fuzhou, Fujian 350002, China)

摘要:通过可见/近红外光谱技术结合 K 最近邻法回归、随机森林回归、深度卷积神经网络及带有残差块的深度卷积神经网络 4 种化学计量学方法对不同糖度的西瓜进行定量判别,并借鉴适用于图像处理的深度网络模块对可见/近红外光谱进行建模。结果表明,深度学习网络模块一维化在可见/近红外光谱数据处理中体现了巨大潜力,卷积神经网络 CNN 模型在预测集中 R_p 为 0.855 9, RMSEP 为 0.778 1 °Brix,加入 Res-block 后的改进卷积神经网络 Res-CNN 在预测集中 R_p 为 0.893 2, RMSEP 为 0.710 4 °Brix。

关键词:可见/近红外光谱;西瓜;深度学习;残差块;可溶性固形物

Abstract: In this study, near infrared spectroscopy combined with chemometrics building models to was used to detect the soluble solid contents from watermelon, through four methods, K nearest neighbors regression, Random forest regression, convolution neural network, convolution neural network added residual-block. Some deep learning modules with image processing, coding modules in 1-d ways and apply in Visible/Near-infrared spectroscopy for modeling exploration was used. As a result, deep learning modules showed great potential in Visible/Near-infrared spectroscopy data processing, and CNN model got 0.855 9 correlation coefficient and 0.778 1 °Brix RMSEP in prediction-set. The Res-CNN model achieved 0.893 2 correlation coefficient and 0.710 4 °Brix RMSEP in prediction-set. The results of this study

could provide a reference for the rapid and non-destructive model development of watermelon quality.

Keywords: visible/near-infrared spectrum; watermelon; deep-learning; residual-block; soluble solids content

目前,人们对水果内部品质的要求随经济水平的不断提高变得越来越严格^[1],而传统的水果品质检测方法往往属于有损检测,已无法满足对水果内部品质无损检测、实时分级的发展需求。水果内部品质检测过程中,常用可溶性固形物(soluble solid content, SSC)表示其糖度^[2-3]。近红外光谱无损检测技术无需使用化学试剂,具有操作简单、快速无损在线实时检测的特点,已被广泛应用于水果糖度等内部品质检测^[4-7]。韩东海等^[8]利用 Kubota K-BA100R 近红外光谱仪以漫透射光谱检测方式分别获取了西瓜顶部和赤道部位的光谱信息,结合偏最小二乘法(PLS)及主成分回归法(PCR)建立了关于含糖量的预测模型,该模型在预测集顶部和赤道部位采集信息的相关系数分别为 0.952, 0.929, 预测集均方根误差(RMSEP)分别为 0.666, 0.732 °Brix。何洪巨等^[9]选取 639.3 nm 处的光谱反射率与其糖度构建了一次线性模型,其决定系数达 0.951,相对均方根误差为 6.78%。Zhang 等^[10]采用可见/近红外光谱技术构建了适用于厚皮甜瓜的快速、高鲁棒性波段优选模型,该模型预测集相关系数为 0.914 3, RMSEP 为 0.835 9 °Brix。钱曼等^[11]分别采用连续投影算法(SPA)和竞争性自适应重加权算法(CARS)筛出西瓜 SSC 近红外光谱变量特征波长,利用 PLS 得到最佳建模结果为瓜顶处光谱信息,预测集 R^2 为 0.905, RMSEP 为 0.629 °Brix。

传统的光谱建模分析方法往往采用线性建模方法或机器学习中的核算法将部分非线性问题转化为线性问

基金项目:国家自然科学基金(编号:61705037);福建省农业工程高原学科建设项目(编号:712018014)

作者简介:吴爽,男,福建农林大学在读硕士研究生。

通信作者:介邓飞(1982—),男,福建农林大学副教授,博士。

E-mail: dfjie@fafu.edu.cn

收稿日期:2020-05-23

题。实际上,水果果实的结构特性和果皮对光的反射和散射是非常复杂的,对自变量间非线性关系的深度探讨可能有助于进一步提高模型的预测准确率。近年来快速发展的深度学习神经网络^[12-13]也普遍应用于可见/近红外光谱建模分析。Zhou 等^[14]针对生菜叶片的可见/近红外高光谱图像,使用了支撑向量回归(SVR)结合小波变换—堆栈自编码器(WT-SAE)建模训练,其预测集的最高决定系数达 0.959 0, RMSEP 为 0.055 87 mg/kg。Yu 等^[15]采用堆栈自编码器(SAE)处理梨的可见/近红外反射高光谱图像(380~1 030 nm),并结合全连接神经网络(FNN)实现了 SSC 含量的预测,其预测集的果实 SSC 含量决定系数为 0.921,相较于 PLSR 提高了 0.089,相较于 LS-SVM 提高了 0.114。

目前,光谱建模研究往往使用线性模型或基于深度学习模型的简单应用,但近年来深度学习在图像领域的研究中,通过改变模型结构、变换卷积顺序使模型变得更快速、更准确,但在—维光谱建模研究中应用相对较少,往往停留在简单的卷积模型应用上,并未对先进的图像处理模型结构进行学习。因此,为推测图像处理深度学习模块是否同样适用于—维卷积神经网络,试验拟选取不同时期、不同糖度的大批量西瓜作为模型建模对象,分别采用 K 最近邻法回归、随机森林回归以及两种不同深度卷积神经网络模型对西瓜糖度构建预测模型,其中针对深度卷积神经网络,选取同样计算复杂度下的常规卷积神经网络 CNN 与带有残差块结构的卷积神经网络 Res-CNN 进行探讨,旨在为西瓜糖度无损快速检测装置的开发以及提升深度学习结构—维化的模型性能提供依据。

1 材料与方法

1.1 试验样本

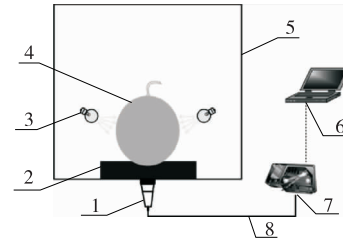
选取 6~7 月不同成熟期西瓜(购买于杭州余杭地区,品种为“麒麟瓜”)共 510 个样本,并于当日送回实验室,去除形状不规则样品后剩余 500 个样本,并对样本进行编号,22 ℃ 实验室环境下放置 24 h,分别采集西瓜样品的漫透射光谱和测定可溶性固形物含量。

1.2 光谱检测装置

光谱采集装置(图 1)由微型光谱仪、笔记本电脑、光纤、光源等组成。检测器采用美国海洋光学公司的 USB400 商用微型光谱仪,光谱分辨率为 1 cm^{-1} ,采样范围为 220~1 020 nm,数据点为 1 044。对西瓜样品瓜脐位置采用漫透射方式采集光谱,样本相对检测器和光源的角度为 120° 。光源采用 8 盏 150 W 卤钨灯,总功率 1.2 kW,积分时长 200 ms,采用 SpectraSuite (Ocean Optics Inc, USA)软件进行光谱采集。

1.3 可溶性固形物含量的测定

使用数字式糖度计(PR-101 型,日本 ATAGO 公司)进行测定,仪器精度为 0.1°Brix ,测量范围为 $0\sim45^\circ\text{Brix}$ 。去除西瓜样本非可食部分,将可食部分切碎后榨汁,滤纸



1. 透镜 2. 托盘 3. 光源 4. 西瓜 5. 光照箱 6. 计算机
7. 微型光谱仪 8. 光纤

图 1 光谱采集系统原理图^[16]

Figure 1 Schematic diagram of spectrum measurement system

过滤得西瓜样本汁液,测定汁液可溶性固形物含量。

1.4 数据处理与分析方法

西瓜校正集与预测集样本分布及对应糖度值见表 1,校正集与预测集比例为 7:3。针对 K 最近邻法回归和随机森林回归,对原始数据中 680~920 nm 范围的采用 PCA 算法降维,采取不同主元素数量保留最佳建模结果。对于神经网络选取原始数据中 680~920 nm 范围的采用式(1)进行标准差标准化处理。

$$x^* = \frac{x - u}{\sigma}, \quad (1)$$

式中:

x^* ——标准化后的数值;

x ——输入光谱;

u ——自变量 x 的平均值;

σ ——自变量 x 的方差。

1.4.1 CNN 模型的构建 常规卷积神经网络结构示意图如图 2 所示,该模型由 3 个卷积层、3 个批归一化层、2 个全连接层及 1 个池化层组成,共含有 533 217 个训练参数。

1.4.2 Res-CNN 模型的构建 Res-CNN 模型结构示意图如图 3 所示,该模型由 4 个卷积核、5 个批归一化层、

表 1 校正集/预测集样本分布

Table 1 Sample allocation in calibration-set/prediction-set

来源	样本数	最大值/ $^\circ\text{Brix}$	最小值/ $^\circ\text{Brix}$	平均值/ $^\circ\text{Brix}$
校正集	350	11.7	3.8	8.5
预测集	150	11.8	4.0	8.6

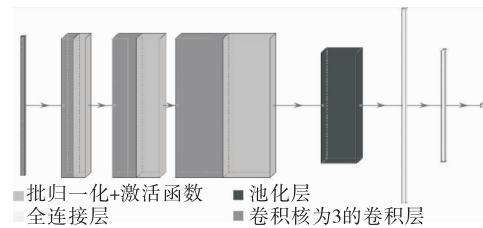


图 2 卷积神经网络结构

Figure 2 Architecture of convolutional neural network

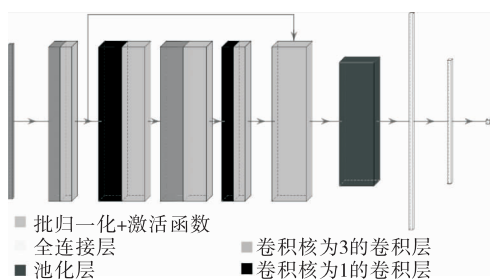


图 3 含有残差块的卷积神经网络结构

Figure 3 Architecture of convolution neural network added Residual-block

2个全连接层及1个池化层组成。Resnet等^[17-18]提出bottleneck会导致经Res-block的特征数急剧上升,因此试验使用的Res-block为轻量级开发网络的Inverted Residual^[19],其结构包含 1×1 卷积、 1×3 卷积以及shortcut连接。残差结构在神经网络中的使用可以提高模型的学习效率,减缓模型因深度或迭代轮次造成的网络退化, 1×1 卷积核则可以改变通道数量并加强通道间信息的交互,该模型共含有545 505个训练参数。

1.4.3 KNN 回归 KNN^[20-21] 是一种既可以用于分类又可以用于回归的算法。对于给定测试样本,基于距离度量找出校正集中与选定测试样本最靠近的 K 个训练样本,试验所选近邻评价标准为欧式距离[式(2)], K 值为 10,然后基于这 K 个“邻居”的信息来进行预测。在回归任务中可使用平均法,将 K 个样本的实值输出标记的平均值作为预测结果。由于 KNN 的 KD 树展开方法为对每个输入变量求方差做节点展开并不断递归,因此使用 PCA 降维减小计算量。

$$d(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + \dots + (x_n - y_n)^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}. \quad (2)$$

表 2 不同模型采集光谱建模预测结果
Table 2 Prediction result of different model

模型	校正集		预测集	
	相关系数	均方根误差/ $^{\circ}$ Brix	相关系数	均方根误差/ $^{\circ}$ Brix
K 最近邻法回归(KNN)	0.697 7	0.965 0	0.518 8	1.081 0
随机森林回归	0.962 5	0.629 3	0.676 5	0.999 5
卷积神经网络(CNN)	0.813 2	0.770 1	0.855 9	0.778 1
含有残差块的卷积神经网络(Res-CNN)	0.875 0	0.654 0	0.893 2	0.710 4

3 结论

试验主要利用可见/近红外光谱结合 K 最近邻法回归、随机森林回归以及卷积神经网络与含有残差块的卷积神经网络两类深度学习卷积神经网络对西瓜可溶性固形物含量进行定量分析,并建立模型。其中含有残差块的卷积神经网络的校正集均方根误差为 $0.6540^{\circ}\text{Brix}$,预

1.4.4.4 随机森林回归 随机森林^[24]为集成学习中的一个算法,其思想为使用多个弱学习器对样本学习后共同预测结果。随机森林算法不仅可以用于分类,还可以用于回归。使用弱学习器为分类与回归树(CART),该算法以方差作为评价指标,假设输入样本含有 m 个特征,将样本通过某一特征的特定数值划分为方差较小的两个含有 $(m-1)$ 个特征的子集,并使用同样的方法对两个子集进行迭代,每次将一个子集划分为两个方差最小的子集,以此通过划分子类空间的方式将数据划分到预测更准的叶节点中,最后输出的回归值为叶节点平均值。

2 结果与分析

由表 2 可知,KNN 在 PCA 降维数为 8 时效果最好,此时 8 个主成分贡献率高达 99%。KNN 回归使用了保留超过 99%信息的主元素进行建模,但无论是在相关系数、RMSEC 以及 RMSEP 的表现上都差强人意,校正集中 R_c 为 0.697 7, RMSEC 为 $0.965\ 0\ ^\circ\text{Brix}$,该算法在校正集中难以实现较好的收敛效果,可能由于输入数据维度不足导致无法实现有效回归,但由于 KNN 法是一种依赖距离选取邻居的算法,过多的维度会导致维度灾难同样不利于模型训练。随机森林模型出现了较大的过拟合现象,校正集中 R_c 为 0.962 5, RMSEC 为 $0.629\ 3\ ^\circ\text{Brix}$,但预测集中 $R_p=0.676\ 5$ 且 RMSEP 接近 $1.000\ 0\ ^\circ\text{Brix}$,可能是随机森林回归算法中的 CART 弱学习器在 bagging 过程中每次选取不同训练样本导致模型的误差期望难以收敛,并且未进行剪枝操作导致模型出现过拟合现象。CNN 模型与 Res-CNN 模型在校正集中的相关系数均 >0.8 ,分别为 0.813 2,0.875 0,校正集和预测集中的相关系数比较接近,CNN 差值为 0.042 7,Res-CNN 差值为 0.018 2,均方根误差也比较稳定,其差值分别为 0.008, $0.564\ ^\circ\text{Brix}$,其中 Res-CNN 的表现均优于 CNN,两个模型的计算量近乎相等,说明通过改变模型结构,Res-block 在一定程度上提高了模型性能。

测集均方根误差为 0.710 4 °Brix, 其相关系数分别为 0.875 0、0.893 2。后续将进一步深入研究图像深度学习结构一维化, 并不断优化其光谱建模算法。

参考文献

- [1] 杨念, 文长存, 吴敬学. 世界西瓜产业发展现状与展望[J]. 农业展望, 2016, 12(1): 45-48.

- [2] 赵洪卫, 宋曙辉, 常冬, 等. 小型西瓜果实生长过程中无损检测基础信息的研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2011, 2(6): 273-282.
- [3] 王硕, 袁洪福, 宋春风, 等. 小西瓜糖度表征与漫反射近红外检测方法的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(8): 2122-2127.
- [4] ARENDSE E, FAWOLE O A, MAGWAZA L S, et al. Non-destructive prediction of internal and external quality attributes of fruit with thick rind: A review[J]. Journal of Food Engineering, 2018, 217: 11-23.
- [5] 陈辰, 鲁晓翔, 张鹏, 等. 红提葡萄 Vc 含量的可见/近红外检测模型[J]. 食品与机械, 2015, 31(5): 70-74.
- [6] XU Lu, LI Jiang-bo, ZHANG Dong-yan. Near-infrared light penetration depth analysis inside melon with thick peel by a novel strategy of slicing combining with least square fitting method[J]. Journal of Food Process Engineering, 2018, 41(7): e12886.1-e12886.6.
- [7] ABASI S, MINAE S, JAMSHIDI B, et al. Rapid measurement of apple quality parameters using wavelet de-noising transform with Vis/NIR analysis[J]. Scientia Horticulturae, 2019, 252: 7-13.
- [8] 韩东海, 常冬, 宋曙辉, 等. 小型西瓜品质近红外无损检测的光谱信息采集[J]. 农业机械学报, 2013, 44(7): 174-182.
- [9] 何洪巨, 胡丽萍, 李武, 等. 基于可见/近红外高光谱成像技术的西甜瓜糖度检测[J]. 中国食物与营养, 2016, 22(10): 53-57.
- [10] ZHANG Bao-hua, GU Bao-xing, TIAN Guang-zhao, et al. Challenges and solutions of optical-based nondestructive quality inspection for robotic fruit and vegetable grading systems: A technical review[J]. Trends in Food Science & Technology, 2018, 81: 213-244.
- [11] 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): 1700-1705.
- [12] 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.
- [13] 杨志锐, 郑宏, 郭中原, 等. 基于网中网卷积神经网络的红枣缺陷检测[J]. 食品与机械, 2020, 36(2): 140-145.
- [14] ZHOU Xin, SUN Jun, TIAN Yan, et al. Development of deep learning method for lead content prediction of lettuce leaf using hyperspectral images[J]. Taylor & Francis, 2020, 41(6): 2263-2276.
- [15] YU Xin-jie, LU Huan-da, WU Di. Development of deep learning method for predicting firmness and soluble solid content of postharvest Korla fragrant pear using Vis/NIR hyperspectral reflectance imaging[J]. Postharvest Biology and Technology, 2018, 141: 39-49.
- [16] 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.
- [17] HE Kai-ming, ZHANG Xiang-yu, REN Shao-qing, et al. Deep residual learning for image recognition[J]. IEEE Computer Society, 2016, 1: 770-778.
- [18] WU Zi-feng, SHEN Chun-hua, HENGEL Anton van den. Wider or deeper: Revisiting the resnet model for visual recognition[J]. Pattern Recognition, 2019, 90: 119-133.
- [19] HU Li-da, GE Qi. Automatic facial expression recognition based on MobileNetV2 in Real-time[J]. Journal of Physics Conference Series, 2020, 1549: 022136.
- [20] 于攀, 叶俊勇. 基于谱回归和核空间最近邻的基因表达数据分类[J]. 电子学报, 2011, 39(8): 1955-1960.
- [21] 王鹏新, 齐璇, 李俐, 等. 基于随机森林回归的玉米单产估测[J]. 农业机械学报, 2019, 50(7): 237-245.

(上接第 38 页)

了 4 种重金属元素和 18 种微量元素含量的测定与分析。结果发现俄罗斯桦褐孔菌的原料和制品中重金属含量都符合各项国家标准要求, 且不同桦褐孔菌原料中微量元素含量也存在很大差异, 其中桦褐孔菌原料的外皮和内里中无机元素含量差异较大。

参考文献

- [1] 陈艳秋, 李玉. 桦褐孔菌的研究进展[J]. 微生物学通报, 2005, 32(2): 124-127.
- [2] 周秀梅, 赵静宇, 王美, 等. 药用真菌桦褐孔菌多糖的降糖实验研究[J]. 山西医药杂志, 2019, 48(10): 1163-1166.
- [3] 崔敬爱, 王思霁, 刘畅. 桦褐孔菌多糖对高脂饮食诱导的高血脂大鼠血脂和肝脏的保护作用及机制[J]. 食品科学, 2020, 41(19): 185-190.
- [4] 王蔚, 乔羽, 周忠光, 等. 桦褐孔菌醇提物对胃癌侵袭转移的影响及分子机制探讨[J]. 山西医药杂志, 2020, 48(9): 206-212.
- [5] ZHAO Yan-xia, ZHENG Wei-fa. Deciphering the antitumoral potential of the bioactive metabolites from medicinal mushroom *Inonotus obliquus* [J]. Journal of Ethnopharmacology, 2021, 265: 1-21190.
- [6] BURMASOVA Marina A, UTEBAEVA Aidana A, SYSOEVA Elena V, et al. Melanins of *Inonotus obliquus*: Bifidogenic and antioxidant properties[J]. Biomolecules, 2019, 9(6): 248-257.
- [7] WOLD Christian W, GERWICK William H, WANGENSTEEN Helle, et al. Bioactive triterpenoids and water-soluble melanin from *Inonotus obliquus* (Chaga) with immunomodulatory activity[J]. Journal of Functional Foods, 2020, 71(8): 104025.
- [8] JAECHOL K, YANG Si C, HWANG Ah Y, et al. Composition of triterpenoids in *Inonotus obliquus* and their anti-proliferative activity on cancer cell lines[J]. Molecules, 2020, 25(18): 4066.
- [9] 魏振华, 陈妮, 范秋领, 等. 桦褐孔菌多糖对糖尿病大鼠糖脂代谢水平的影响[J]. 菌物研究, 2020, 18(3): 195-200.