

# 基于小波变换的水果糖度近红外光谱检测研究

应义斌, 刘燕德, 傅霞萍

浙江大学生物系统工程与食品科学学院, 浙江 杭州 310029

**摘要** 利用小波变换滤波技术对 90 个水果样品的近红外光谱信号进行了去噪处理, 并结合滤波后重构光谱信号对水果糖度进行逐步线性回归(SMLR)建立其校正模型, 通过 34 个样品的外部检验对校正模型精度进行评价。研究表明: 校正模型的预测精度在小波尺度为 3 时其预测精度最好, 预测集的决定系数由原来的 0.84 提高到 0.85, 预测集相对标准误差由原来的 6.1% 降为 6.0%。因此, 使用小波去噪方法有消除原始光谱噪声作用, 从而使最终的 SMLR 模型更具有代表性和稳健性, 也提高了品质检测时模型预测精度。

**主题词** 小波变换; 近红外光谱分析; 品质无损检测; 多元校正方法; 糖度

**中图分类号:** TG333 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-0593(2006)01-0063-04

## 引言

近红外漫反射光谱技术具有样品处理简单, 分析速度快, 可以同时测定多种组分, 实现非破坏性和无污染性等优点, 在食品和农产品品质检测中得到广泛的应用, 受到分析界的广泛重视<sup>[1, 2]</sup>。

光谱仪采集的水果吸光度光谱信号, 其样品的光谱严重重叠, 吸收较弱, 易受噪声和背景的干扰。此外, 为保证获得最大的信息量, 采样时常采用密集取点, 造成建模时波长点数远远多于样本个数, 如果直接使用原始光谱信号进行定量分析, 必然会影响最终分析结果的准确性与精度。因此, 在使用近红外光谱进行品质检测与分析时, 对光谱信号进行消除噪声等预处理是十分必要的<sup>[3]</sup>。

小波变换及其应用是 20 世纪 80 年代后期发展起来的数学分支, 被称为“Fourier 分析方法”的突破性进展<sup>[4]</sup>。小波变换对分析信号的滤波处理有其独特的优点。本文利用小波变换对水果样品的近红外漫反射光谱进行了滤波处理, 其效果有明显改善, 并对研究结果进行了外部试验验证。

水果内部含有多种成分, 而其近红外光谱是包含着各种组分的倍频和合频信息的复合光谱, 因此在原始吸收光谱中的各种信号交叉重叠严重, 有效信号的信噪比较低, 采用原始吸收光谱直接分析效果不理想, 本研究采用小波变换技术对原始吸收光谱信号进行多尺度分解, 在不同的时-频下进行定性或定量分析, 帮助建立稳定的校正模型。

## 1 基于小波变换的多分辨率分析原理

多分辨率分析在小波变换中占有重要的地位, 其中的 Matlab 算法相当于经典傅里叶分析中的快速傅里叶变换, 是小波分析中的快速算法<sup>[5, 6]</sup>。Matlab 算法的基本原理是对低频反复进行二进小波分解, 直至所需的尺度。在实际使用中, 一般用低通和高通的滤波器组实现, 其分解结构如图 1 所示。图中  $x$  表示原始信号,  $V$  表示近似,  $W$  表示细节, 其

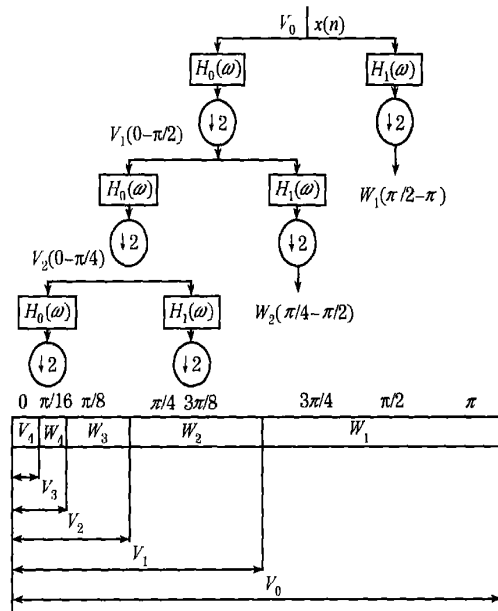


Fig 1 Construct of wavelet transform

收稿日期: 2004-11-03, 修订日期: 2005-03-18

基金项目: 国家自然科学基金(60468002, 30370371)和教育部新世纪优秀人才支持计划(NCEF-04-0524)资助

作者简介: 应义斌, 1964 年生, 浙江大学生物系统工程与食品科学学院教授

下标表示分解的尺度数;  $H_0, H_1$  分别为低通、高通滤波器,  $\downarrow 2$  表示二抽取。分析过程是重复迭代的, 分解的最大尺度依据信号的特性而定。

通过小波变换可把各种频率组成的混合信号按不同分辨率尺度分解成一系列不同频率的块信号。根据这一特点, 依先验知识可对特殊频率范围的噪声或慢背景进行滤波处理。本文所采用的小波母函数为正交小波基 DB4。

2 试验设备与方法

2.1 近红外光谱检测仪器

试验使用 Nexus 傅里叶快速变换近红外光谱分析仪(美国 Nicolet 公司)来采集水果光谱, 光谱检测系统的参数为: 测量波长范围为:  $12\,500\sim 3\,800\text{ cm}^{-1}$ , 扫描次数: 64, 仪器分辨率:  $16.0\text{ cm}^{-1}$ , 检测器为铟镓砷(InGaAs)。每个苹果需进行 3 次光谱测量, 分别位于苹果赤道等间隔的 3 个位置, 尽可能避免明显的表面缺陷(擦伤、伤疤等)<sup>[7]</sup>, 把 3 次测量中反射光谱进行平均, 那么就能得到每个苹果的平均光谱。

2.2 样本及化学成分测定

试验用样本均为从批发市场上购买的山东富士苹果, 分为校正组和预测组两组, 样品数分别为 90 和 34 个, 在  $26\text{ }^{\circ}\text{C}$  环境温度和相对湿度为 68% 的条件下放置 2 d 后测量, 用于建立近红外漫反射光谱和进行小波变换。每个苹果在相应光谱扫描的 3 个位置测量其糖度值, 3 个位置糖度的测量平均值作为每个苹果的糖度值。苹果的糖度测定具体参照食品卫生检验方法理化部分总则(GB/T 5009.1-2003), 用 WYT-4 型手持糖量计(福建省泉州光学仪器厂)测定。具体糖度的测定结果见表 1。

Table 1 Statistic data of sugar content in samples

| Samples | Calibration set                         | Prediction set |
|---------|-----------------------------------------|----------------|
| Indexes | Sugar content ( $^{\circ}\text{Brix}$ ) |                |
| No      | 90                                      | 34             |
| Mean    | 12.41                                   | 12.61          |
| Range   | 15.90~ 7.60                             | 15.00~ 8.20    |

2.3 数据处理

采用自编的程序并结合使用了 Matlab 和国际流行统计软件 SAS 中的多元校正方法-逐步线性回归法, 并通过预测样本的标准误差(SEP)来评价校正模型的精度。

$$SEP = \sqrt{\frac{1}{n_p - 1} \sum_{i=1}^{n_p} (\hat{y}_i - y_i)^2}$$

式中:  $n_p$  为样本个数;  $y_i$  为第  $i$  个样本实测值;  $\hat{y}_i$  为第  $i$  个样本预测值。

3 结果与讨论

3.1 近红外漫反射光谱的去噪处理

124 个样品的近红外漫反射原始光谱如图 2 所示。从图 2

可知, 同一个水果由于其内部组织有所差异, 其光谱图稍有变化, 但其光谱形状具有相似性, 位置的差异性不明显。这些图谱在  $11\,000\sim 4\,000\text{ cm}^{-1}$  范围内较为明显, 包含信息丰富。在  $5\,162.00, 6\,888.60, 8\,313.76$  和  $10\,195.97\text{ cm}^{-1}$ , 波数的峰随着含量的不同, 波峰强度有较明显的变化。不同水果由于其内部组织有差异, 其光谱图有变化, 但其光谱形状具有相似性, 且也在  $5\,162.0, 6\,888.60, 8\,313.76$  和  $10\,195.97\text{ cm}^{-1}$ , 波峰强度有较明显的变化。由图 2 可以看出原始光谱有噪声, 本研究取适当分解尺度对水果的原始光谱进行有限离散二进小波分解, 得到各尺度下小波变换近似信号 A1, A2, A3(见图 3)。

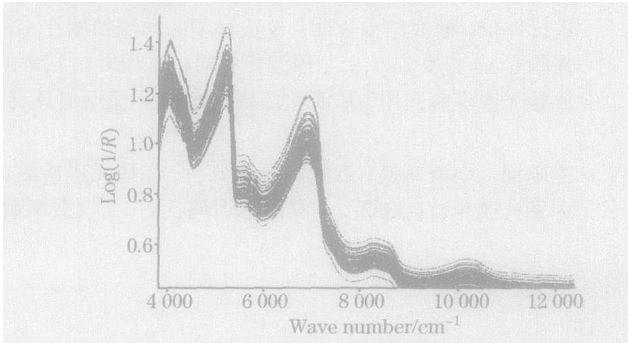


Fig 2 Original spectra of 124 apple samples

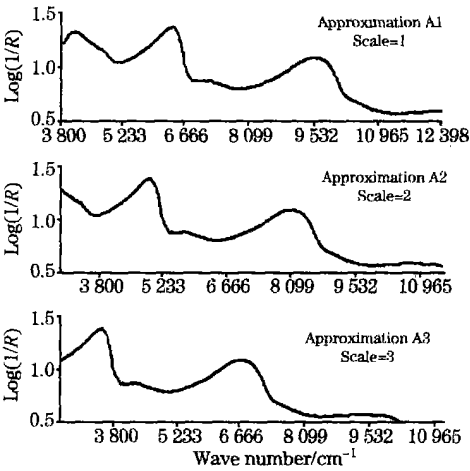


Fig 3 The approximation components of fruit NIR data corresponding to different scales (DB4)

3.2 小波变换去噪处理效果的评价

表 2 为采用逐步线性回归(SMLR)法和小波变换与逐步线性回归(WT-SMLR)相结合建立校正模型的预测结果比较。由表 2 可知, 在采用小波变换尺度为 3 时 WT-SMLR 法建立的校正模型精度明显优于采用 SMLR 法建立的校正模型精度。本次研究结果为预测样本的相对标准误差由原来的 0.61% 降为 0.60%, 线性相关系数也有由原来的 0.911 提高到 0.919。图 4(a) 为 90 个校正样品经过小波变换(DB4, 最大分解层数  $J=3$ )滤波后重构光谱经过 SMLR 建立模型后的预测值与测量值的相关关系图。图 4(b) 为 90 个校正样品原始光谱经 SMLR 建立模型后的预测值与标准测量值的相关关系图。

Table 2 Calibration and prediction results of 5-element variables regression models for original spectra and wavelet transform spectra with scale of 3

| Types                   | Wave numbers<br>/ $\text{cm}^{-1}$        | Calibration set            |                                           | Prediction set            |                                          |
|-------------------------|-------------------------------------------|----------------------------|-------------------------------------------|---------------------------|------------------------------------------|
|                         |                                           | Coefficient of calibration | Relative standard error of calibration/ % | Coefficient of prediction | Relative standard error of prediction/ % |
| Original<br>$\log(1/R)$ | 4 003, 7 212,<br>8 593, 10 560,<br>12 234 | 0. 854                     | 8. 53                                     | 0. 911                    | 6. 10                                    |
| Wavelet<br>transform    | 4 003, 7 212,<br>8 593, 10 560,<br>12 234 | 0. 874                     | 7. 95                                     | 0. 919                    | 6. 00                                    |

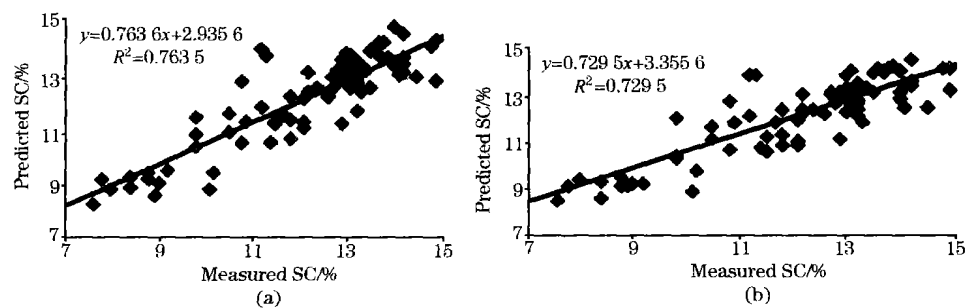


Fig. 4 Correlativity of 90 apple sugar contents measured and predicted by SMLR with (DB4,  $J=3$ ) denoising reconstruction spectra (a) and original spectra (b)

4 结 论

小波变换是一种新兴的信号处理方法，在光谱分析特别是在农产品品质近红外光谱分析中有着越来越广泛的应用前景<sup>[8-9]</sup>。但在使用的过程中必须结合具体的分析对象光谱来选择合适的波变换尺度。利用小波变换滤波技术可以有效

地消除水果近红外光谱信号中的噪声，在采用小波变换尺度为 3 时 WT-SMLR 法建立的校正模型精度明显优于采用 SMLR 法建立校正的模型精度。其中预测样本的相对标准误差由原来的 0.61% 降为 0.60%，线性相关系数也有由原来的 0.911 提高到 0.919。本研究建立的 SMLR 模型更具有代表性和稳健性。

## 参 考 文 献

- [1] Weyer L G. Applied Spectroscopy Reviews, 1985, 21(1, 2): 1.
- [2] Stark E, Luchter K, Margoshes M. Applied Spectroscopy Reviews, 1986, 22(4): 335.
- [3] ZHU Shi-ping, WANG Yi-ming, ZHANG Xiao-chao(祝诗平, 王一鸣, 张小超). Journal of South West Agricultural University( Natural Science)(西南农业大学学报·自然科学版), 2003, 25(6): 522.
- [4] PENG Yu-hua(彭玉华). Wavelet Transform and Application in Engineering(小波变换及其在工程中的应用). Beijing: Science Press(北京: 科学出版社), 1999. 115.
- [5] Daubenchies I. (Eds.). Ten Lectures on Wavelets, Philadelphia: SIM Press, 1992. 1.
- [6] SHAO Xue-guang, CAI Wen-sheng, SUN Pei-yan et al. Anal. Chem., 1997, 69: 1722.
- [7] LIU Yan-de, YING Yi-bin, FU Xia-ping(刘燕德, 应义斌, 傅霞萍). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2005, 25(11): 1793.
- [8] Mallat S. IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1989, 11(7): 674.
- [9] Oliver R, Pierre D. IEEE Trans. on Information Theory, 1992, 38(2): 569.

## Sugar Content Prediction of Apple Using Near-Infrared Spectroscopy Treated by Wavelet Transform

YING Yi-bin, LIU Yan-de, FU Xia-ping

College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, Hangzhou 310029, China

**Abstract** Based on wavelet transform (WT) by using the difference in wavelet modulus maxima evolution behaviors between singular signals and random noises in multi-scale space, the near infrared spectroscopic signals of 90 fruit samples were denoised by wavelet transform. The sugar content in intact apple was calculated by stepwise regression method. The result of calibration model after noise filtering was satisfactory. The relative standard error of prediction is reduced to 6.0% from 6.1% of original spectra. It is concluded that wavelet transform is an useful method to eliminate noise of NIR signals, as it makes the final calibration model more representative and stable and robust.

**Keywords** Wavelet transform; NIR spectroscopy; Nondestructive measurement; Multiple calibration technique; Sugar content

(Received Nov. 3, 2004; accepted Mar. 18, 2005)