

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

史波林^{1,2}, 庆兆坤¹, 籍保平^{1*}, 屠振华¹, 朱大洲¹, 尹京苑²

1. 中国农业大学食品科学与营养工程学院, 北京 100083
2. 上海大学通信与信息工程学院, 上海 200072

摘要 通过偏最小二乘法(PLS)分别建立去皮前后苹果硬度的近红外回归模型。采用光谱附加散射校正(MSC)、微分处理(Derivative)、直接正交信号校正(DOSC)等预处理方法和基于遗传算法(GA)的有效波段选择方法来消除果皮对模型精度的影响。结果表明,苹果果皮对近红外光谱分析模型的预测能力有很大影响,但仅通过常规的光谱预处理方法(MSC、Derivative)很难有效消除。文章提出的遗传算法结合直接正交信号校正(GA-DOSC)方法能有效消除果皮的影响,不但使所建模型的波长点和最佳主因子数分别由1480和5降到36和1;其相关系数 r 由0.753提高到0.805,更重要的是模型的预测相对误差 RSD_p 从16.71%显著下降到12.89%,并接近采用苹果果肉建模的预测性能(12.36%),达到了对苹果硬度的近红外无损检测要求。

关键词 近红外漫反射光谱; 苹果; 硬度; 果皮; 遗传算法; 直接正交信号校正

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)03-0665-06

引言

水果硬度是一种反映细胞间结合力的物理指标,表现为咀嚼时使样品达到一定变形所需的力。此参数常用来确定果品的成熟度和采摘时间,并对制定储藏、保鲜、包装和运输等方案提供重要依据。目前检测水果硬度的常用方法为戳穿果肉实验,其果肉抗压能力的强弱即为硬度;然而此方法损伤水果品质,大批量实验也不易实现^[1]。由于近红外检测技术具有速度快、成本低、测试重现性好、无需样品预处理等特点,并结合化学计量学方法提取光谱有效信息进行样品定性或定量分析,被广泛应用于水果的内部品质检测^[2]。

目前国外已有一些学者研究了苹果硬度的无损检测^[3-5],但预测精度都不是很理想。通过近红外漫反射方式采集苹果光谱的过程中,除了果皮镜面反射的影响,还有果皮的透射和吸收作用,这一切都会对硬度模型精度产生一定的误差。虽然很多研究者为了消除果皮对苹果硬度建模的影响做了一定研究^[6-8],但仍存在不少缺点,主要是没有从根本上提高硬度模型的预测能力。原则上应该单独由代表苹果内部信息的果肉散射光与其硬度参数建立预测模型更加科学。但是由于

近红外光谱分析的最大特点是无损伤检测,因此在目前研究水果硬度检测中,都采用带皮果品的漫反射光谱来实验。本实验为了提高苹果硬度模型的预测能力,研究消除果皮对硬度预测模型的影响,寻找并建立用于带皮苹果近红外光无损检测硬度的新方法。

1 实验材料和方法

1.1 样品准备

从市场上购买山东烟台产红富士,挑选37个苹果样品,依次做好标记,置于4℃冰柜中贮藏。实验前,将冰柜中取出的苹果置于实验室中12h,以使苹果整体温度达到与环境温度一致。

1.2 样品光谱采集和硬度标准值测定

本实验利用ANTARIS傅里叶变换近红外光谱仪(Thermo Nicolet, 美国),使用自带的智能光纤枪采集漫反射光谱。所用参数设置为,光谱采集范围 $10\,000\sim 4\,275\text{ cm}^{-1}$,采样间隔 8.0 cm^{-1} ,扫描16次取平均,仪器使用InGaAs检测器。仪器预热30min后,先采集标准白板的光谱作为实验的背景参比。实验时,每个带皮苹果进行4次光谱测量,分别

收稿日期: 2007-11-16, 修订日期: 2008-02-18

基金项目: 国家“十五”重大科技专项项目(2001BA501A16B)资助

作者简介: 史波林, 1981年生, 上海大学通信与信息工程学院博士生

e-mail: spring0214@163.com

*通讯联系人 e-mail: jbp@cau.edu.cn

位于苹果赤道等距离的 4 个位置, 尽可能避免明显的表面缺陷(擦伤、伤疤等)^[9]。全部带皮苹果采集完后, 在原先 4 个位置上削去果皮, 分别采集果肉光谱。

光谱采集后, 在对应的光谱采集位置, 根据 GB 10651-89 用 GY-1 型硬度压力计(牡丹江市机械研究所)测量果实硬度(kgf·cm⁻²)。这样, 实验样本数为 37 × 4 = 148, 且每个样本都对应各自测量点的带皮、去皮光谱和硬度。根据硬度值梯度法, 每隔 3 个样本选取一个作为预测集, 将剩下的作为校正集, 同时保证最小值和最大值保留在校正集中, 最终选取 112 个作为校正集, 36 个作为预测集。其具体的苹果硬度测定结果如表 1。

Table 1 Statistic data of firmness in 148 samples

Samples indexes	No.	Mean / (kgf·cm ⁻²)	Range / (kgf·cm ⁻²)	Std / (kgf·cm ⁻²)
Calibration	112	7.39	4.18 ~ 11.79	1.642
Prediction	36	7.17	4.20 ~ 10.06	1.506

1.3 近红外光谱的预处理方法

为了消除光谱数据中与苹果硬度无关的信息和噪音, 减少果皮光谱信号对果肉信号的干扰。本文采用的光谱预处理方法有附加散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)^[10], 微分处理(Derivative treating)^[11], 直接正交信号校正(direct orthogonal signal correction, DOSC)^[12]和遗传算法(genetic algorithms, GA)^[13]。

2 结果与讨论

2.1 近红外图谱分析

为了便于分析去皮前后光谱的差异性, 实验在相同的条件下采集光谱, 即保持去皮前后光谱仪的参数设置一致。图 1 为 7 号样本点去皮前后的光谱图。从图 1(a)中可以看出, 果皮对所采光谱有明显的影响, 这是由于没有果皮的镜面反射, 果肉对光谱的吸收显著增加。另外, 苹果带皮和去皮光谱的形状具有相似性, 但位置存在上下漂移。通过一阶求导[图 1(b)]在一定程度上消除了光谱间的平移, 但在特征波长处差异明显。图谱中有明显的水吸收峰: 8 400 cm⁻¹ (1 190 nm), 6 897 cm⁻¹ (1 450 nm), 5 155 cm⁻¹ (1 940 nm)。6 897 cm⁻¹是 O—H 的一级伸缩振动倍频吸收峰, 8 400 和 5 155 cm⁻¹是 O—H 伸缩振动和变形振动的合频吸收峰^[14]。因水的强烈吸收, 对果胶在 7 000 和 5 000 cm⁻¹波段附近处的吸收峰有很大干扰^[15, 16]。

2.2 苹果硬度的定量预测

2.2.1 去皮前后苹果硬度建模

对于校正集为 112 个, 预测集为 36 个的样本群, 先进行初步建模。然后利用样品化学值学生化残差(Studentized residual)与马氏距离值(Leverage)的关系图^[17]剔除 2 个异常样本点。在分析异常形成原因时, 发现这 2 点在各自苹果中所测硬度比其他 3 面都要高得多, 所以此 2 个样本点为化学测量异常。下一步研究中, 校正集为 110 个, 预测集为 36

个。为了比较去皮前后建模的效果, 对带皮和去皮光谱直接分别进行 PLS 建模, 结果见表 2。

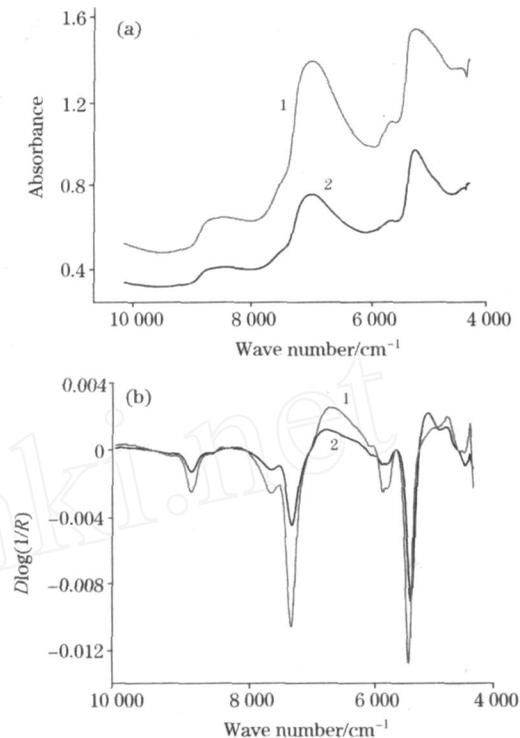


Fig 1 No. 7 sample's spectra of peel and peeled

(a): Original spectra; (b): Spectra after 1st derivative;

1: Peeled; 2: Peel

Table 2 Results of calibration models for 'Fuji' apple firmness of peel and peeled

Skin treating	LV	r	RMSECV / (kgf·cm ⁻²)	RMSEP / (kgf·cm ⁻²)	RSD _p / %
Peel	5	0.753	1.019	1.197	16.71
Peeled	7	0.837	0.846	0.886	12.36

由表可知, 虽然带皮模型的最佳主因子数(5)低于去皮的(7), 即变量减少, 模型的复杂度有所降低。但是预测能力才是考察模型性能的最重要指标。对于反映模型对未知样本的预测误差 RMSEP 和 RSD_p, 带皮比去皮的分别高 0.311 kgf·cm⁻² 和 4.35%, 并且带皮模型对苹果硬度的预测能力很低(RSD_p = 16.71%)。这充分说明果皮对近红外光谱无损检测苹果硬度的影响不可忽略。

实验中, 为了最大程度的消除镜面反射^[6], 采用 Y 型光纤垂直接触果面来采集, 但对硬度的预测结果也没得到很大改善。由此说明果皮的吸收作用是果皮影响苹果硬度预测能力的主要因素。曾有研究表明^[18], 苹果皮约占苹果质量的 10%, 其中果胶含量较高。刘铁铮等^[19]曾报道红富士苹果皮中果胶含量(可溶性果胶和原果胶)明显高于果肉中含量。由于带皮苹果的近红外光谱信息中既含有果肉中的果胶, 也含有果皮中的果胶, 同时苹果果肉中果胶含量的高低直接反映苹果的硬度。因此, 果皮中化学成分对近红外光谱的吸收

收,为硬度建模带来了相对更多的干扰,使得无损检测苹果硬度的带皮模型的预测精度不高。

2.2.2 不同光谱预处理建立带皮苹果模型

(1) MSC 和微分处理

本实验中所应用的一、二阶求导,都采用 S-G 二项式拟合卷积平滑处理,通过最小二乘法计算得到与平滑系数相似的导数系数^[20]。对 MSC、一、二阶求导处理后的数据分别建立 PLS 模型,其结果见表 3。结果显示, MSC 处理后的模型预测能力略有提高(RMSEP 从 1.197 降到 1.177 kgf·cm⁻²),但不是很明显; r 与未进行光谱预处理的很接近(0.755 vs 0.753)。由此说明,应用高性能、高精度的傅里叶

近红外光谱仪所采集的光谱图,其散射程度不是特别大,原光谱信息具有高信噪比。同时,从表中看出经微分处理后,模型的预测误差均方根(RMSEP)明显减小。一阶与二阶微分处理结果相比,一阶微分(RSD_p = 14.62%)好于二阶微分(RSD_p = 15.71%),主要是由于微分处理在消除光谱平移和漂移影响的同时也会放大光谱噪声,而二阶微分放大噪声的程度更明显。相对于原始吸收光谱(RSD_p = 16.71%),采用一阶求导光谱建模(RSD_p = 14.62%)很大程度上提高了预测精度。这是由于经求导后,细化了主因子,吸收光谱中重叠波峰得以分开,使得光谱信息的表达更清晰。

Table 3 Results of models after different spectra pretreatment

No.	pre-treatment	LV	r	RMSECV/(kgf·cm ⁻²)	RMSEP/(kgf·cm ⁻²)	RSD _c /%	RSD _p /%
1	None	5	0.753	1.019	1.197	13.94	16.71
2	MSC	5	0.755	1.014	1.177	13.88	16.42
3	29,2,1-derivative	6	0.837	0.846	1.048	11.58	14.62
4	51,2,2-derivative	4	0.811	0.906	1.126	12.40	15.71
5	DOSC(1,2E-2)	1	0.814	0.900	1.015	12.31	14.16
6	GA	6	0.811	0.906	0.965	12.39	13.46
7	GA + DOSC(1,5E-3)	1	0.805	0.919	0.924	12.58	12.89

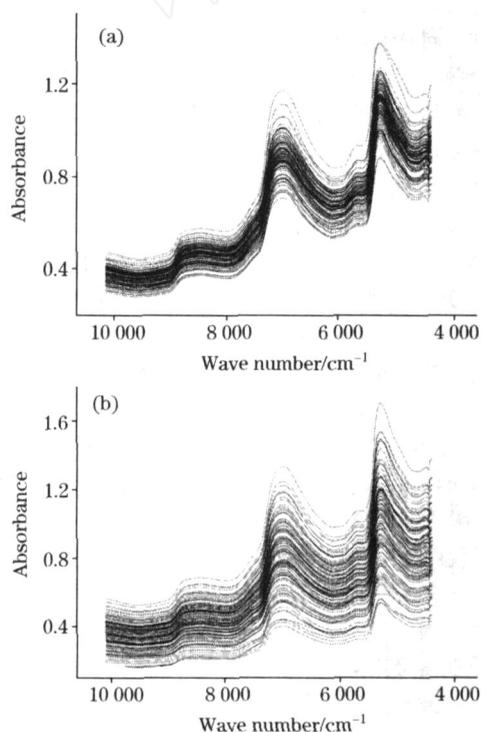


Fig 2 Spectra of calibration samples

(a); Original spectra; (b): Spectra after DOSC

(2) DOSC 处理

上面所采用的常用光谱数据预处理方法,只是对光谱数据进行处理,并未考虑硬度矩阵的影响。这些预处理方法在消除噪声的同时也损失了部分与苹果硬度相关的光谱信息,又有可能对噪声滤除得不完全。DOSC 能确保在保留有效信

号的同时滤除与硬度无关的信息,将真正包含硬度的光谱信息用于建模,并使模型主因子数显著降低,简化模型、提高模型的预测能力和稳健性。图 2(b)为 DOSC 处理中滤除 1 个 DOSC 因子后的光谱图,与图 2(a)相比,经 DOSC 法预处理后,光谱形状总体与原始光谱没有太大差别,只是处理后的光谱变得更为光滑,排列更为整齐,特别是在纵坐标方向上光谱的差异性变大,更加体现苹果内部成分的含量差异。这说明 DOSC 滤除了原始光谱中的部分系统噪声,但仍保留光谱中的主要信息。

对实验数据分别建立苹果硬度在 DOSC 处理前后的 PLS 模型,光谱的得分 t 和参考硬度的得分 u 在第一主因子上的相关性如图 3 所示。显然,经 DOSC 处理后,光谱数据与硬度在第一主因子上的相关性得到了很大的提高。主要原因是,近红外光谱中的确存在着与苹果硬度参考值 Y 正交的变异信息。DOSC 在成分提取过程中,剔除了这些与 Y 的变异无关的光谱信息,从而增强了 Y 的变异与 X 的变异之间的相关性,为建立稳定、可靠的校正模型奠定了基础。

将 DOSC 处理后的光谱矩阵作为新的自变量矩阵,利用 PLS 建立校正模型,其结果见表 3。从表中可知, DOSC 光谱预处理后所建模型的预测精度(14.16%)高于采用原始光谱所建的模型(16.71%),并且也好于 MSC(16.42%)和微分(一阶求导 14.62%,二阶求导 15.71%)处理后的。同时 DOSC 使校正模型的最佳主因子数明显降低(LV = 1),简化了模型的复杂性。以上实验数据均说明经过 DOSC 可以从复杂重叠光谱中提取有效信息,滤除噪音,有效改善模型的预测性能。

(3) GA 处理

本文参考 Leardi 等^[21]所提出的改进遗传算法。此算法

中所用的三大算子,选择算子采用轮盘赌法,交叉算子采用单点交叉法,变异算子采用基本位变异。其算法的具体参数设定为,初始群体大小为 30,最大繁殖代数 100,交叉概率 0.5,变异概率 0.01。本实验对包含 1 480 个波长点的 $10\ 000 \sim 4\ 275\ \text{cm}^{-1}$ 波长段进行遗传算法处理后,最终挑选出 36 个特征波长点(图 4)为 $4\ 421 \sim 4\ 408\ \text{cm}^{-1}$ ($2\ 261 \sim 2\ 268\ \text{nm}$), $6\ 156 \sim 6\ 128\ \text{cm}^{-1}$ ($1\ 624 \sim 1\ 632\ \text{nm}$), $6\ 665 \sim 6\ 645\ \text{cm}^{-1}$ ($1\ 500 \sim 1\ 505\ \text{nm}$), $7\ 036 \sim 7\ 015\ \text{cm}^{-1}$ ($1\ 421 \sim 1\ 426\ \text{nm}$), $7\ 498 \sim 7\ 478\ \text{cm}^{-1}$ ($1\ 333 \sim 1\ 338\ \text{nm}$), $8\ 285 \sim 8\ 265\ \text{cm}^{-1}$ ($1\ 207 \sim 1\ 210\ \text{nm}$)。

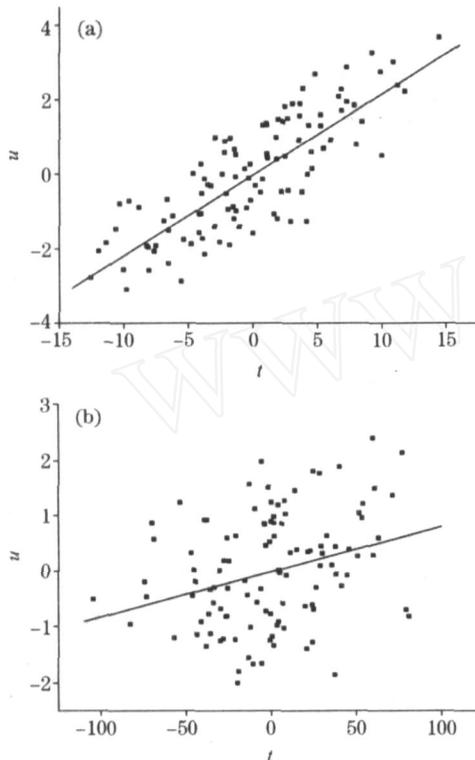


Fig. 3 Correlation of first score between spectra and firmness

(a): After DOSC; (b): Before DOSC

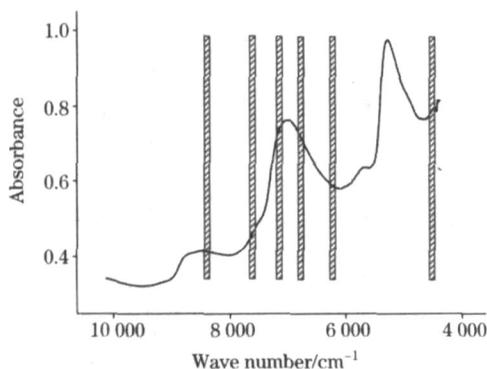


Fig. 4 Wave number selected by GA of No. 7 sample

1: Selected wave number

因为近红外图谱重叠严重,特征吸收区域不明显,若采用原始 1 480 个变量建立苹果硬度模型,虽然携带的有用信

息最多,但由此带来的冗余信息也随之增加,再加上部分波段的信噪比低,而波长之间的多重相关也不可避免,因此使用全波长并不一定能取得最佳的效果。最重要的是如果大部分波长的信息与苹果硬度并不相关,就会增加建模的最佳主因子数和模型的复杂度,导致近红外光谱模型计算量大、模型解释非常困难。采用遗传算法选取的 36 个变量建模大大减小建模和预测运算时间。其具体建模结果见表 3。虽然 GA-PLS 后的 RSD_c (12.39%) 与 DOSC 和二阶求导处理后的很接近,但值得关注的是 RSD_p (13.46%) 不仅比原始光谱建模的要低得多,而且比其他光谱预处理的都要低。可以看出,遗传算法剔除了噪声污染过大的谱区和对模型效果不好的波长点,保留了信噪比(SNR)高的波段,有效提取了被水吸收峰覆盖的特征波长段,及体现苹果硬度的果胶和纤维素的强烈吸收波段 $4\ 421 \sim 4\ 408\ \text{cm}^{-1}$ [15], 达到了提高模型预测精度和简化模型的目的。

(4) GA-DOSC 处理

在波长选择和 DOSC 的处理中,都分别进行了尝试,并得到不错的模型预测结果。由于样品的近红外光谱重叠严重,以致在样品光谱中看不到组分的特征吸收。并且苹果的成分较复杂,含水量高达 80% 左右,要分析体现苹果硬度的果胶和纤维素成分含量相对较低,而水在近红外区吸收强烈,通常掩盖了果胶和纤维素的吸收,这些问题需要波长选择来解决。同时近红外光谱中含有一些结构化的噪声,这些噪声与待测苹果的硬度正交,不仅对待测苹果硬度不具有解释作用,而且增加模型的复杂度,因此有必要消除这些无用的信息,而这些又需要 DOSC 来解决。综合以上所述,在此提出基于遗传算法的波长选择结合直接正交信号校正方法(GA-DOSC)进行建模前的光谱预处理。首先通过 GA 选择跟硬度建模相关性大的特征波长区域,然后对所选的波段信息进行 DOSC 处理,这样可以进一步去除特征波段中包含的来自各方面因素所产生的噪声信号,例如一些系统误差或随机误差等,最后再建立 PLS 校正模型。该模型与传统 PLS 方法建立的模型相比,其预测能力大大提高,具体结果见表 3。

与其他单独预处理方法得出的预测相对标准差相比,采用 GA-DOSC 得到的 RSD_p (12.89%) 显著降低,几乎接近果肉所建的模型 ($RSD_p = 12.36\%$), 并且 RSD_p 与 RSD_c 数据很接近,说明模型的稳定性相当好,性能明显优于原始光谱及其他预处理方法,同时波长点从 1 480 个减少到 36 个,模型的最佳主因子数从 5 降为 1,大大简化了模型的复杂性。遗传算法加直接正交信号校正处理,既选择了包含所测样品信息的特征波长点,又排除了光谱信息间存在共线性对模型预测精度的影响及光谱信息中跟苹果硬度正交的无关信号,很好的消除了果皮对光谱信息的影响,充分说明此方法完全可以用于苹果硬度的近红外无损检测。

3 结 论

本研究通过比较不同光谱预处理方法对苹果硬度建模的影响,最终得到利用遗传算法结合直接正交信号校正对带皮苹果的漫反射光谱进行有效信息提取,采用 PLS 所建立的苹

果硬度定量分析模型效果最佳。此方法不但使波长点从1480个减少到36个,模型的最佳主因子数降为1,并且其建模效果明显好于原始光谱建模(RSD_p : 12.89% vs 16.71%),也优于其他光谱预处理。该方法很好的消除了果皮对建模结果的影响,建模结果接近苹果果肉的近红外光谱建模(RSD_p : 12.89% vs 12.36%),其中相关系数为0.805, RM-

SECV和RMSEP分别为0.919和0.924 $\text{kgf} \cdot \text{cm}^{-2}$,且非常接近,说明该模型稳健性较好。本文采用遗传算法结合直接正交信号校正的方法,在选取特征波长段的基础上,剔除了与硬度无关的信息,同时保留了重要光谱信息,有效消除果皮对近红外检测苹果硬度的影响,提高了模型的预测分析精度,简化了模型的复杂度,具有很高的实际使用价值。

参 考 文 献

- [1] JIAO Qun-ying, WANG Shu-mao(焦群英,王书茂). *Advances in Mechanics(力学进展)*, 1999, 29(4): 583.
- [2] WANG Duo-jia, ZHOU Xiang-yang, JIN Tong-ming, et al(王多加,周向阳,金同铭,等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2004, 24(4): 447.
- [3] Elridge C D. *International Journal of Remote Sensing*, 1995, 11(6): 1175.
- [4] Lammertyn J, Nicolai B, Ooms K, et al. *Transactions of the American Society Agricultural Engineers(ASAE)*, 1998, 41(4): 1089.
- [5] Park B, Abbott J A, Lee K J, et al. *Transactions of the American Society Agricultural Engineers(ASAE)*, 2003, 46(6): 1721.
- [6] Lammertyn J, Peirs A, Baerdemaeker J D, et al. *Postharvest Biology and Technology*, 2000, 18: 121.
- [7] Krivoshev G P, Chalucova R P, Moukarev M I. *Lebensmittel-Wissenschaft und Technologie-Food and Technology*, 2000, 33: 344.
- [8] Fraser D G, Jordan B R, Kunemeyer R, et al. *Postharvest Biology and Technology*, 2003, 27: 185.
- [9] 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.
- [10] Geladi P, McDougall D, Martens H. *Applied Spectroscopy*, 1985, 39: 491.
- [11] GAO Rong-qiang, FAN Shi-fu, YAN Yan-lu, et al(高荣强,范世福,严衍禄,等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2004, 24(12): 1563.
- [12] Westerhuis J A, De J S, Smilde A K. *Chemometrics and Intelligent Lab Systems*, 2001, 56(1): 13.
- [13] Bangalore A S, Shafer R E, Small G W. *Analytica Chimica Acta*, 1996, 68: 4200.
- [14] YAN Yan-lu, ZHAO Long-lian, HAN Dong-hai, et al(严衍禄,赵龙莲,韩东海,等). *Elements and Application of Near-Infrared Spectra Analysis(近红外光谱分析基础与应用)*. Beijing: China Light Industry Press(北京:中国轻工业出版社), 2005. 1.
- [15] Boeriu C G, Stolle-Smits T, Van D C. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 1998, 6: A299.
- [16] Sohn M R, Cho R K. *Journal of the Korean Society for Horticulture Science*, 2000, 41(1): 65.
- [17] MIN Shun-geng, LI Ning, ZHANG Ming-xiang(闵顺耕,李 宁,张明祥). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2004, 24(10): 1205.
- [18] ZHANG Xue, WEI Qing-bao(张 雪,魏庆葆). *The Food Industry(食品工业)*, 2007, (2): 35.
- [19] LIU Tie-zheng, XU Ji-zhong, FU Ya-li, et al(刘铁铮,徐继忠,付雅丽,等). *Yantai Fruit Tree(烟台果树)*, 2004, (4): 4.
- [20] Savitzky A, Golay M J E. *Analytical Chemistry*, 1964, 36: 1627.
- [21] Leardi R, Seasholtz M B, Pell R J. *Analytica Chimica Acta*, 2002, 461: 189.

Using GA-DOSC Method to Eliminate Interference of Peel with Prediction of Apple Firmness Based on Near Infrared Diffuse Reflection Spectra

SHI Bo-lin^{1,2}, QING Zhao-shen¹, JI Bao-ping^{1*}, TU Zhen-hua¹, ZHU Da-zhou¹, YIN Jing-yuan²

1. College of Food Science and Nutritional Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China

2. School of Communication and Information Engineering, Shanghai University, Shanghai 200072, China

Abstract In the present work, "Fuji" apples from Shandong Yantai were used to take the diffuse reflection spectra by FT-NIR. PLS components (i.e., factors) were computed by nonlinear iterative partial least squares (NIPALS) and the number of latent factors (LV) was optimized by a leave-one-out cross-validation procedure on the calibration set. On the basis of partial least square (PLS) regression, the models for apples' firmness before and after peeling were compared. In order to eliminate the effect of apple peel on prediction, spectral pretreatments such as multiplicative scatter correction (MSC), derivative, direct orthogonal signal correction (DOSC) and wavelengths selection based on genetic algorithms (GA) were used. Finally, the results of different spectral treatments were compared. In conclusion, the RSDp of models for apples before and after peeling was 16.71% and 12.36%, respectively, suggesting that the apple peel played a negative role in constructing good predictive models. Moreover, the traditional spectral pretreatments (such as MSC, derivative) can hardly resolve the problem. In this research, GA-DOSC played an important role in reducing the interference of apple peel. It not only reduced the wavelength variables from 1480 to 36, but also reduced the latent variables from 5 to 1. The correlation coefficient (r) was improved from 0.753 to 0.805, and the RMSECV and RMESP were reduced from $1.019 \text{ kgf} \cdot \text{cm}^{-2}$ and $1.197 \text{ kgf} \cdot \text{cm}^{-2}$ to $0.919 \text{ kgf} \cdot \text{cm}^{-2}$ and $0.924 \text{ kgf} \cdot \text{cm}^{-2}$, respectively. Especially, the RSDp was decreased remarkably from 16.71% to 12.89%. The performance of the model after GA-DOSC treatment was similar to the model using spectra of apple flesh (12.36%). It was concluded that the prediction precision based on GA-DOSC satisfied the requirement of NIR non-destruction determination of apples firmness.

Keywords Near infrared diffuse reflection spectra; Apple; Firmness; Peel; Genetic algorithms; Direct orthogonal signal correction

(Received Nov. 16, 2007; accepted Feb. 18, 2008)

* Corresponding author

敬告读者——《光谱学与光谱分析》已全文上网

从 2008 年第 7 期开始在《光谱学与光谱分析》网站 (www.gpxygpfx.com)“在线期刊”栏内发布《光谱学与光谱分析》期刊全文,读者可方便地免费下载摘要和 PDF 全文,欢迎浏览、检索本刊当期的全部内容;并陆续刊出自 2006 年以后出版的各期摘要和 PDF 全文内容。2009 年起《光谱学与光谱分析》每期出版日期改为每月 1 日。

光谱学与光谱分析期刊社