

# 苹果糖度近红外光谱检测波段试验研究

孙元昊, 刘璿瑛\*, 丁永前, 黄煜博, 陈继猛

(南京农业大学工学院, 江苏省智能化农业装备重点实验室, 南京 210031)

**摘要:** **目的** 通过近红外光谱技术对苹果进行无损检测, 具有快速、非破坏性、无试剂分析、安全、高效、低成本等特点。**方法** 本文运用 Matlab7.1, 对苹果的糖度与光谱曲线在不同波段处的相对光强进行多元线性回归分析, 建立了最佳单波长、最佳双波长组合、最佳三波长组合和最佳四波长组合的校正方程。**结果** 校正方程的相关系数分别为 0.621、0.715、0.797 和 0.822, 标准校正误差分别为 1.325、1.218、1.074 和 0.997Brix°, 相对校正误差分别为 11.28%、10.42%、9.63%和 9.26%。**结论** 试验表明用近红外光谱技术无损检测苹果糖度是可行性的, 为今后进一步检测苹果的其他品质奠定基础。

**关键词:** 近红外光谱法; 苹果糖度; 多元线性回归

## Experimental study on near infrared spectroscopy detection of sugar degree of apple

SUN Yuan-Hao, LIU Ying-Ying\*, DING Yong-Qian, HUANG Yu-Bo, CHEN Ji-Meng

(Key Laboratory of Intelligent Agricultural Equipment in Jiangsu Province, College of Engineering, Nanjing Agricultural University, Nanjing 210031, China)

**ABSTRACT: Objective** Using near infrared spectroscopy technology to detect apple quality. **Methods** Using Matlab7.1, apple Brix and the spectral curve in different band relative intensity were analyzed with multiple linear regression to establish the best single wavelength, a combination of the best dual wavelength combination, the best three wavelength combination and the best four wavelength calibration equation. **Results** The result showed that correlation coefficient of the calibration equations were 0.621, 0.715, 0.797 and 0.822, the standard error of calibration were 1.325, 1.218, 1.074 and 0.997 Brix°, respectively, and the relative error correction were 11.28%, 10.42%, 9.63% and 9.26%, respectively. **Conclusion** The study showed that the method of near infrared spectroscopy detection of sugar degree of apple in nondestructive testing was feasible, it could also provide a basis for further detection of other qualities of apple.

**KEY WORDS:** near infrared spectroscopy; sugar degree of apple; multiple linear regression

## 1 引言

在苹果生长过程中, 对苹果糖度进行跟踪检测, 可以随时掌握其内部糖度的变化, 指导果农合理科

学地施用化肥, 这样既能提高苹果质量, 又能减少化肥使用量, 间接减少了果农的费用支出。在采摘时, 农业部门和质检部门对苹果进行抽检, 可以在不损坏苹果的前提下, 增加抽样数量, 提高检验速度, 更

\*通讯作者: 刘璿瑛, 副教授, 主要研究方向为农产品无损检测。E-mail: lyy@njau.edu.cn

\*Corresponding author: LIU Ying -Ying, Associate Professor, Key Laboratory of Intelligent Agricultural Equipment in Jiangsu Province, College of Engineering, Nanjing Agricultural University, Nanjing 210031, China. E-mail: lyy@njau.edu.cn

可有效避免浪费。另外,也可根据苹果糖度的等级对苹果进行分级管理。这样不仅可以完善对苹果资源的综合利用,也可以增加我国的苹果出口数量,产生显著的经济效益及社会效益。

在国内,刘燕德<sup>[1]</sup>等采用近红外漫反射结合 MATLAB6.1 和主成分分析 PCA 算法对吸收峰的光谱吸光度与苹果糖度进行相关性分析,建立了苹果糖度预测模型,得出糖度与原始光谱吸光度的最大相关系数为-0.621,最小相关系数为-0.365;刘燕德等<sup>[2]</sup>又建立了红富士苹果糖度的近红外漫反射主成分回归 PCR 多元校正模型,得出相关系数  $r=0.844$ 、标准校正误差  $SEC=0.729$ 、标准预测误差  $SEP=0.864$ 、偏差  $s=0.318$ 。韩东海等<sup>[3]</sup>采用正交信号校正法 OSC 并结合偏最小二乘法 PLS 建立苹果糖度模型,得到  $r=0.92644$ 、 $SEC=0.40250$ 、 $SEP=0.50229$ ;又利用近红外光谱结合混合线性分析法的一种变形算法 HLA/XS 建立苹果糖度校正模型,得出  $r=0.87611$ 、标准预测误差  $SEP=0.48480$ <sup>[4]</sup>。王加华等<sup>[5,6]</sup>利用近红外漫反射光谱结合主成分回归 PCR 和偏最小二乘法 PLS 研究了苹果糖度无损检测,通过比较二者的相关系数、标准校正误差和预测标准误差,得出偏最小二乘法 PLS 模型更优。应义斌等<sup>[7-9]</sup>利用小波变换滤波技术并结合重构光谱信号对苹果糖度进行逐步线性回归 SLR 建立校正模型,预测集决定系数  $R$  提高到 0.85、SEP 降为 6%,线性  $r$  提高到 0.919。本文所论述的是采用近红外光谱技术进行苹果糖度的检测,结合有损检测方法预测苹果的糖度,并在近红外短波中找出测量糖度的最佳光源波段,运用多元线性回归建立糖度与苹果光谱特性之间的相关方程。

## 2 材料与方法

### 2.1 试验材料

试验所用的 40 个红富士苹果采购于水果超市。通过查询苹果信息:这些苹果收获于 2014 年 9 月,具有相近的成熟度。试验前,先将购得苹果的外表皮清理干净,然后分为 2 组,其中 1 组 30 个,用于建模试验;另外 1 组 10 个,用于验证试验。

### 2.2 仪器

近红外光谱仪 FLA4000(杭州晶飞科技有限公司);ATC 型手持糖度计(上海天垒仪器仪表有限公司,糖度检测范围 0%~80%)。

### 2.3 光谱仪无损检测

苹果的近红外漫反射光谱是用光谱仪及所带的智能光纤接收输出漫反射附件测量的。对苹果光谱测量的基本参数设置为:测量波长范围为 380~1133 nm,采样间隔为  $0.1\text{ cm}^{-1}$ ,积分时间为 2 ms,扫描次数为 32,仪器分辨率为  $4.0\text{ cm}^{-1}$ ,动镜速度为  $0.949\text{ cm/s}$ ,光圈大小为 15,采样平均次数为 1 次,滑动平均次数为 4 次。在测量苹果光谱之前,要先测量标准白板在相同设置参数下的光谱,并作为实验时的背景参比。

测量完整苹果的漫反射光谱时,将苹果置于实验台上,果柄-果蒂轴线呈水平放置,光纤输出的光线进行照射之后在果肉中发生漫反射,反射出的近红外光再由光纤接收发送回光谱仪。每个苹果取赤道位置的 4 个点(间隔  $90^\circ$  左右)进行测量,测量时用马克笔对每个苹果个体及 4 个面进行编号(为了排除马克笔迹对光线的影响),同时注意避开表面缺陷部位(如病变、伤疤等)。为了提高测量的准确性,在实验台上放置海绵垫块,这样对光线的表面反射起到密封圈的作用,同时也可以适应表面不规则的苹果。

### 2.4 糖度计有损检测

将每个苹果按照光谱测量标记的顺序依次测 4 次。测量时,把每个位置进行切块、研磨、利用吸管将汁液滴在棱镜台上进行读数,把读得的数据记录在预制的试验表格中。试验过程中,每完成一组数据的测量后,都要对糖度计进行清洗并干燥,以此保证试验数据的准确性。

### 2.5 数据处理

把试验获得数据输入到 Excel 表当中去。分别对苹果的相对光强和糖度进行处理,具体为:用 4 个截面相对光强的平均值作为该样品的相对光强值,4 个截面糖度的平均值作为该样品的糖度值。

## 3 结果与分析

分别对每个苹果的 4 个面进行无损检测和有损检测,因此,共得到 160 幅光谱图和 160 组糖度数据。试验选用的是近红外短波波段(380~1133 nm),通过分析各波长处糖度与相对光强的相关性,选取合适的波长进行多元线性回归,得到最佳单波长、最佳组合双波长、最佳组合三波长和最佳组合四波长的校正方程。此外,本试验中所有数据都是通过 matlab7.1 软件编程进行处理分析。

### 3.1 苹果糖度与光谱特性的数据处理

通过观察测量苹果近红外原始光谱曲线, 将同一苹果不同测量位置的近红外光谱进行分析比较, 如图 1 所示。

从图 1 中可以发现苹果在不同测量位置下的光谱曲线是基本一致的, 不同的只是相对光强值的差别。

### 3.2 苹果糖度与光谱特性的相关性分析

前人在相关研究中指出, 水果内部品质与光谱特性往往在波峰处具有较大的相关性, 所以在 780~1133 nm 范围内寻找波峰<sup>[10-16]</sup>。因为不同截面对应的波峰略有差别, 需要进行必要的近似取值, 故得到的波峰为 780、820、860、900、940、980、1020、1060、1100 nm。运用 matlab7.1 进行编程分别求取在不同波长处苹果糖度与对应的相对光强的相关系数  $r$ , 进而分析在该波长处是否适合建立线性模型。

从表 1 可以看出: 在 940~1100 nm 处二者的相关系数具有较大的绝对值, 相关系数分别达到 0.646、0.662、0.673、0.654、0.637, 可以用线性模型进行建模, 因此, 也可以确定出在近红外短波区域内, 检测苹果糖度的最佳波段为 940~1100 nm。

### 3.3 多元线性回归求最佳组合波段

多元线性回归是对有 2 个或 2 个以上的自变量进

行线性回归的计算方法。相对校正误差( $SEC$ )和相对校正误差( $RSEC$ )作为衡量回归方程性能好坏的依据。

根据 3.2 中获得的波长在 matlab7.1 中编程, 进行苹果糖度和相对光强的多元线性回归拟合, 得到最佳单波长、最佳组合双波长、最佳组合三波长、最佳组合四波长的校正方程。如下:

$$Brix^\circ = \sum_{i=1}^n k_i R_{\lambda} + k_0 \quad (1)$$

最佳单波长组合:

$$Brix^\circ = 11.2094 + 0.0032R_{980 \text{ nm}} \quad (2)$$

最佳双波长组合:

$$Brix^\circ = 13.1030 + 0.0076R_{980 \text{ nm}} + 0.0076R_{1020 \text{ nm}} \quad (3)$$

最佳三波长组合:

$$Brix^\circ = 12.8297 + 0.0012R_{980 \text{ nm}} + 0.0284R_{1020 \text{ nm}} - 0.0514R_{1060 \text{ nm}} \quad (4)$$

最佳四波长组合:

$$Brix^\circ = 10.7623 + 0.0149R_{940 \text{ nm}} + 0.0042R_{980 \text{ nm}} + 0.0163R_{1020 \text{ nm}} - 0.0651R_{1060 \text{ nm}} \quad (5)$$

式(1)中  $Brix^\circ$  代表糖度,  $R_{\lambda}$  代表波长在  $\lambda$  处的相对光强。

### 3.4 试验验证及误差分析

利用剩余的 10 个苹果进行试验验证。将这些苹果按照光谱采集的方法进行数据采集处理, 再将处理后的结果带入所建立的模型中计算得到糖度的校正值, 通过公式(6)和(7)计算相关指标参数, 如表 2。

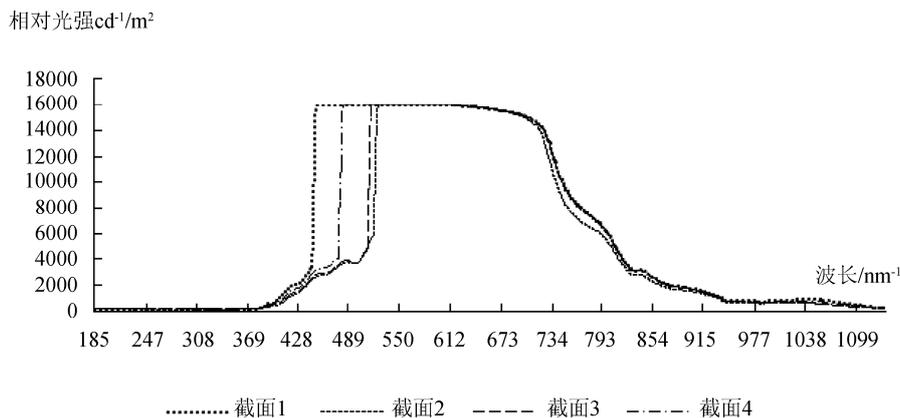


图 1 同一苹果不同测量位置的近红外光谱

Fig. 1 The same apple different measuring location of the near infrared spectrum

表 1 不同波长处苹果糖度与相对光强的相关系数分析表

Table 1 Correlation coefficient analysis of apple sugar content and relative light intensity at different wavelengths

波长(nm)	780	820	860	900	940	980	1020	1060	1100
相关系数 $r$	-0.065	-0.013	-0.235	0.073	0.646	0.662	0.673	0.654	0.637

表2 苹果原始光谱与糖度的多元线性回归结果  
Table 2 The MLR results of the original spectra and sugar content of apples

波长个数	最佳组合波长 nm <sup>-1</sup>	相关系数	SEC/Brix°	RSEC/%
1	980	0.662	1.325	11.28
2	980, 1060	0.715	1.218	10.42
3	980, 1020, 1060	0.797	1.074	9.63
4	940, 980, 1020, 1060	0.822	0.977	9.26

其中 SEC(Standard error of calibration)为标准校正误差, RSEC(Relative standard error of calibration)为相对校正误差, 它们的计算公式如式(6)和(7)所示( $y_i$ 、 $y_c$  分别表示糖度的测量值和校正值):

$$SEC = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_c - y_i)^2}{n-1}} \quad (6)$$

$$RSEC = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n [(y_c - y_i) / y_i]^2}{n-1}} \quad (7)$$

从表2中可以看出: 通过多元线性回归拟合得到的组合校正方程能够比较准确的反映苹果糖度和相对光强之间存在的定量关系。且选用的组合波长越多, 相关系数、标准校正误差和相对校正误差这些指标参数的数值越好。

## 4 结论

本试验通过有损检测和无损检测相结合的方式, 在近红外短波处建立了苹果糖度与光谱特性之间的相关方程。通过试验的数据采集, 共获得160张光谱图和160组糖度值。试验用到的波长是从780~1133 nm之间选取的, 分别在780、820、860、900、940、980、1020、1060、1100 nm处对光谱曲线的相对光强与苹果糖度进行了相关性分析, 得出在940、980、1020、1060、1100 nm处适合线性建模, 故在这5个波长处进行多元线性回归的拟合, 并求出由最佳单波长、最佳双波长组合、最佳三波长组合和最佳四波长组合建立的糖度与相对光强的校正方程, 得到相关系数  $r$  分别为0.621、0.715、0.797和0.822, 标准校正误差 SEC 分别为1.325、1.218、1.074和0.997 Brix°, 相对校正误差 RSEC 分别为11.28%、10.42%、9.63%和9.26%, 经过分析得出: 最佳四波长组合具有更好的线性相关性和准确性, 故以此作为最终的模型。通

过本试验研究结果表明, 利用近红外光谱技术能够比较有效地无损检测苹果糖度, 今后可以进一步建立苹果内部其他品质预测模型。

## 参考文献

- [1] 刘燕德, 高荣杰, 孙旭东. 便携式水果内部品质近红外检测仪研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(10): 2874-2878.  
Liu YD, Gao RJ, Sun XD. Research progress of spectroscopy and spectral analysis [J]. Spectrosc Spect Anal, 2010, 30(10): 2874-2878.
- [2] 刘燕德, 彭彦颖, 高荣杰, 等. 基于LED组合光源的水晶梨可溶性固形物和大小在线检测[J]. 农业工程学报, 2010, 26(11): 338-343.  
Liu YD, Peng YY, Gao RJ, et al. The soluble solid content and size of the crystal pear based on LED combination light source [J]. Chin J Agr Eng, 2010, 26(11): 338-343.
- [3] 韩东海, 王加华. 水果内部品质近红外光谱无损检测研究进展[J]. 中国激光, 2008, 35(8): 1123-1131.  
Han DH, Wang JH. Review of nondestructive measurement of fruit quality by means of near infrared spectroscopy [J]. Chin J Lasers, 2008, 35(8): 1123-1131.
- [4] 吉纳玉, 韩东海. 苹果近红外预测模型的传递研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2014, 5(3): 712-717.  
Ji NY, Han DH. Study on near-infrared prediction model transfer for apples [J]. J Food Saf Qual, 2014, 5(3): 712-717.
- [5] 王加华, 戚淑叶, 汤智辉, 等. 便携式近红外光谱仪的苹果糖度模型温度修正[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(5): 1431-1434.  
Wang JH, Qi SY, Tang ZH, et al. Analysis of the temperature correction of the apple sugar content model of the near infrared spectrometer [J]. Spectrosc Spect Anal, 2012, 32(5): 1431-1434.
- [6] 王加华, 潘璐, 李鹏飞, 等. 苹果糖度近红外光谱分析模型的温度补偿[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(6): 1517-1520.  
Wang JH, Pan L, Li PF, et al. Temperature compensation for calibration model of apple fruit soluble solids contents by near

- infrared reflectance [J]. *Spectrosc Spect Analysis*, 2009, 29(6): 1517–1520.
- [7] 潘圆媛, 刘燕德, 孙旭东. 水果内部品质近红外动态在线检测研究进展[J]. *激光与红外*, 2010, (8): 68–72.  
Pan YY, Liu YD, Sun XD. Research progress of internal quality of fruit near infrared detection [J]. *Laser & Infrared*, 2010, (8): 68–72.
- [8] 刘燕德, 应义斌. 基于 matlab 语言的苹果糖度近红外光谱定量分析[J]. *浙江大学学报(工学版)*, 2004, 38(10): 1371–1374.  
Liu YD, Ying YB. Based on matlab language apple sugar degree of near infrared spectroscopy quantitative analysis [J]. *Zhejiang Univ J (Eng Technol Edit)*, 2004, 38(10): 1371–1374.
- [9] 马本学, 应义斌, 饶秀勤, 等. 高光谱成像在水果内部品质无损检测中的研究进展[J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, 29(6): 1611–1615.  
Ma BX, Ying YB, Rao XQ, *et al.* Research progress of hyperspectral imaging in nondestructive the detection of fruit internal quality [J]. *Spectrosc Spect Anal*, 2009, 29(6): 1611–1615.
- [10] 栾鑫. 近红外水果糖度检测方法研究[D]. 吉林大学, 2007.  
Luan X. Near infrared konfyt degree detection method [D]. Jilin University, 2007.
- [11] 王丽, 郑小林, 郑群雄. 基于近红外光谱技术的桃品质指标快速检测方法研究[J]. *中国食品学报*, 2011, 11(3): 205–209.  
Wang L, Zheng XL, Zheng QX. Research on the rapid detection method of peach quality index based on near infrared spectroscopy [J]. *J Chin Food Sci Technol*, 2011, 11(3): 205–209.
- [12] 马毅, 汪西原. 基于近红外光谱无损检测的水果品质定量分析与预测[J]. *农业科学研究*, 2010, (03): 64–66.  
Ma Y, Wang XY. Quantitative analysis and forecasting of fruit quality based on near infrared spectroscopy [J]. *Agr Sci Res*, 2010, (03): 64–66.
- [13] 袁雷明, 高海宁, 吕松, 等. 可见/近红外光谱半透射法检测苹果中可溶性固形物含量[J]. *食品安全质量检测学报*, 2012, 3(5): 448–452.  
Yuan LM, Gao HN, Lv S, *et al.* Visible/near infrared spectroscopy (semi transparent) method for detection of soluble solids content in apples [J]. *J Food Saf Qual*, 2012, 3(5): 448–452.
- [14] 史波林, 赵镭, 刘文, 等. 苹果内部品质近红外光谱检测的异常样本分析[J]. *农业机械学报*, 2010, 41(2): 132–137.  
Shi BL, Zhao L, Liu W, *et al.* Analysing abnormal samples of apple internal quality near infrared spectroscopy [J]. *J Agr Mach*, 2010, 41 (2): 132–137.
- [15] 李桂峰. 苹果果肉褐变机理和近红外无损检测技术研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2008.  
Li GF. Study on the mechanism of apple flesh browning mechanism and near infrared nondestructive testing technology [D]. Yangling: Northwest Agriculture and Forestry University, 2008.
- [16] 孔静, 谢鸣. 无损检测技术在农产品品质检测方面的应用[J]. *消费导刊*, 2009, (16): 210.  
Kong J, Xie M. Nondestructive testing technology in quality inspection of agricultural products by [J]. *Consumer Guide*, 2009, (16): 210.

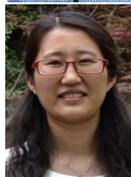
(责任编辑: 李振飞)

## 作者简介



孙元昊, 本科生, 主要研究方向为农产品检测与控制技术。

E-mail: 279674941@qq.com



刘璿瑛, 博士, 副教授, 主要研究方向为农产品检测与控制技术。

E-mail: lyy@njau.edu.cn