

doi:10.6041/j.issn.1000-1298.2013.12.030

基于高光谱的酿酒葡萄果皮花色苷含量多元回归分析*

刘旭^{1,2} 吴迪³ 梁曼¹ 杨蜀秦⁴ 张振文¹ 宁纪锋³

(1. 西北农林科技大学葡萄酒学院, 陕西杨凌 712100; 2. 陕西省葡萄与葡萄酒工程中心, 陕西杨凌 712100;
3. 西北农林科技大学信息工程学院, 陕西杨凌 712100; 4. 西北农林科技大学机械与电子工程学院, 陕西杨凌 712100)

摘要: 以酿酒葡萄赤霞珠果实为研究对象, 利用高光谱成像技术检测葡萄果皮中的花色苷含量。采集 60 组样本的 900 ~ 1 700 nm 近红外波段高光谱图像, 并用 pH 示差法测量样本果皮中花色苷含量。选取高光谱图像中葡萄果实区域作为感兴趣区域 (ROI), 计算其平均光谱, 并采用 SG 平滑、归一化、多元散射校正等预处理方法提高光谱的信噪比。然后采用偏最小二乘回归 (PLSR)、支持向量回归 (SVR) 和 BP 神经网络算法建立花色苷含量预测模型。研究表明: 基于 PLSR 模型推荐的 13 个隐含变量建立的 BP 神经网络模型的预测决定系数和预测均方根误差分别为 0.910 2 和 0.379 5。

关键词: 酿酒葡萄 花色苷 高光谱图像 偏最小二乘回归 支持向量回归 BP 神经网络

中图分类号: S663.1; O657.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2013)12-0180-07

Multiple Regression Analysis of Anthocyanin Content of Winegrape Skins Using Hyper-spectral Image Technology

Liu Xu^{1,2} Wu Di³ Liang Man¹ Yang Shuqin⁴ Zhang Zhenwen¹ Ning Jifeng³

(1. College of Enology, Northwest A&F University, Yangling, Shaanxi 712100, China

2. Shaanxi Engineering Research Center for Viti-Viniculture, Yangling, Shaanxi 712100, China

3. College of Information Engineering, Northwest A&F University, Yangling, Shaanxi 712100, China

4. College of Mechanical and Electronic Engineering, Northwest A&F University, Yangling, Shaanxi 712100, China)

Abstract: This work aimed to determine the anthocyanin content in skin based on hyperspectral imaging technology. The grapes of Cabernet Sauvignon (*Vitis vinifera* L.) produced in Shaanxi province were used as experimental materials. Hyperspectral images of 60 groups of grape samples were collected by near infrared hyperspectral camera (900 ~ 1 700 nm). After then, the anthocyanin content of skin was detected by pH-differential method. The grape berry regions of hyperspectral images were extracted as region of interest (ROI) in which its average spectrum was calculated. Moreover, different preprocessing methods were used to improve the signal noise ratio (SNR) including Savitzky - Golay smoothing, normalization and multiplicative scatter correction, et al. Prediction model was established for determining anthocyanin content by the partial least squares regression (PLSR), least squares support vector regression (SVR) and BP neural network (BPNN). It was shown that prediction coefficient of determination ($P-R^2$) of BPNN model built by the thirteen latent variables recommended by PLSR model was 0.910 2 and the root mean square error of prediction (RMSEP) was 0.379 5.

Key words: Winegrape Anthocyanin Hyperspectral image Partial least squares regression Support vector regression BP neural network

收稿日期: 2013-05-02 修回日期: 2013-06-26

* 国家自然科学基金资助项目(61003151)、“十二五”国家科技支撑计划资助项目(2012BAD31B07)、中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(QN2011099、QN2013062、QN2013055)和国家葡萄产业技术体系酿酒葡萄栽培岗位子项目(CARS-30-02A)

作者简介: 刘旭, 讲师, 博士, 主要从事酿酒葡萄果实生理与质量控制研究, E-mail: liuxu@nwsuaf.edu.cn

通讯作者: 宁纪锋, 副教授, 博士, 主要从事计算机视觉、模式识别与农业信息化研究, E-mail: jf_ning@sina.com

引言

花色苷是葡萄与葡萄酒中一类重要的酚类化合物,主要存在于葡萄浆果表皮下 3~4 层细胞的液泡内^[1]。它是赋予葡萄酒颜色的主要物质,并对其风味、口感和营养价值等有重要影响,是决定葡萄酒感官质量的重要因素之一,也是红葡萄酒耐储存的基础^[2-3]。一般而言,葡萄浆果转色后花色苷开始迅速积累,并于果实成熟时达到最大^[4]。因此,葡萄采摘时花色苷的含量很大程度上影响着所酿酒的颜色和其他感官质量。

目前对葡萄果实中花色苷含量的测定主要有:

①光谱法。利用不同 pH 值的有机溶剂提取果实中的花色苷,然后用分光光度计比色获得花色苷含量。这一方法一般需要 4~8 h 的避光浸提,并不断震荡^[5]。②色谱法。主要利用液相色谱、液相色谱-质谱技术直接测定果实中花色苷含量。但是,各种色谱技术都需要昂贵的检测设备,以及复杂的前处理和较长的测试时间^[6]。以上两大类化学检测法都会破坏检测对象,并难以实现快速、大样本量的检测。目前国内外针对酿酒葡萄果实中花色苷含量的快速检测的研究还较少。近年来,高光谱成像技术作为一种无损检测方法引起了广泛的关注^[7]。其最大特点是将成像技术与光谱探测技术相结合,在对目标空间特征成像的同时,对每个空间像元经过色散形成几十个乃至几百个窄波段以进行连续的光谱覆盖。由于其具有检测速度快、效率高、成本低等优点,越来越多地应用于农产品品质与安全的无损检测。国内外学者利用高光谱成像技术对农产品的化学成分进行了无损检测研究^[8-11],但对酿酒葡萄化学成分检测的研究还较少。

本文采用近红外高光谱图像获得酿酒葡萄果皮的光谱数据,利用 pH 值示差法测量的花色苷含量,结合光谱预处理方法和化学计量学建模方法,建立葡萄果皮中花色苷含量的预测模型,并通过预测模型的预测决定系数和预测均方根误差验证近红外高光谱成像技术检测酿酒葡萄果皮中花色苷含量的可行性。

1 材料与方 法

1.1 实验材料

实验材料为陕西省泾阳县种植的酿酒葡萄赤霞珠果实。采样日期为 2012 年 9 月 5 日。为了保证样本具有代表性,从 4 个不同产量水平不同植株随机取下 1 500 粒葡萄。每 25 粒葡萄作为一个样本,共计 60 个样本。将样本随机分为校正集和检验集,

其中校正集 40 个样本,检验集 20 个样本。

1.2 仪器与试剂

高光谱图像采集系统如图 1 所示。该系统由 1 台近红外光谱仪 (ImSpector N17E 型, Spectral Imaging Ltd., 芬兰)、1 台为 320 像素×256 像素的面阵 CCD 相机 (XEVA2616 型, XenICs Ltd., 比利时)、1 套高稳定性的卤钨灯白光光源、1 台高精度的电控平移台装置和计算机等组成。高光谱成像系统采集波长范围为 900~1 700 nm,光谱分辨率 2.8 nm,入射光狭缝宽度为 30 μm。

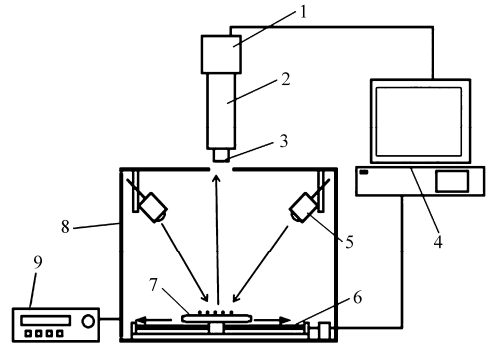


图 1 高光谱图像采集系统示意图

Fig. 1 Schematic diagram of hyperspectral imaging system

1. CCD 相机 2. 光谱仪 3. 镜头 4. 计算机 5. 光源 6. 电动机 7. 载物台 8. 暗箱 9. 光源控制器

花色苷含量测定仪器为紫外-可见分光光度计 (UV2450 型, Shimadzu Ltd., 日本)。主要试剂包括:盐酸、甲醇、氯化钠、醋酸和醋酸钠(均为国药集团化学试剂有限公司生产)。

1.3 高光谱图像采集

高光谱图像数据采集由 Spectral SENS-V17E 软件 (Gilden Photonics Ltd., 英国) 完成,后续的数据处理采用 ENVI 4.7 (Research System Inc., 美国)。为了保证采集图像清晰且不失真,采集前要调整镜头焦距并确保平台移动速度、相机曝光时间和光源的匹配^[12]。经调试,确定相机曝光时间为 10 ms,平台移动速度为 20 mm/s。每次将一个样本 (25 粒葡萄) 放置载物台上,且载物台中心对准相机。当平台移动时,近红外光谱仪从上往下扫描样本,每次扫描得到一行图像的光谱信息,然后平台带动样本运动,获取其他位置的光谱信息,直至获得整个样本的光谱信息。采用同样的方法采集 60 个样本的高光谱图像。

为了消除光源强度在各波段下分布不均以及摄像头中暗电流噪声的影响,需对获得的图像进行黑白标定^[13]。具体方法为对反射率为 99% 标准白色校正板进行图像采集,得到全白标定图像 R_{ref} ,然后拧上镜头盖,关闭光源,采集得到全黑标定图像

R_{dark} 。计算校正后的高光谱图像 $R^{[14]}$ 为

$$R = \frac{R_{\text{img}} - R_{\text{dark}}}{R_{\text{ref}} - R_{\text{dark}}} \quad (1)$$

式中 R_{img} ——原始高光谱图像灰度

1.4 光谱提取和预处理

由于高频随机噪声、基线漂移、样本不均匀、表面散射等干扰因素影响建模效果,需要对样本平均光谱曲线进行预处理^[15]。本研究采用的预处理方法有中心化变换(Mean-centering correction)、SG平滑(Savitzky - Golay smoothing, SG)、归一化处理(Normalization)、变量标准化(Standard normal variate, SNV)、多元散射校正(Multiplicative scatter correction, MSC)、一阶求导(First derivative, 1-Der)和二阶求导(Second derivative, 2-Der)。

从高光谱图像中获得的光谱数据变量多,变量之间存在冗余信息。因此,在进行模型训练之前,进行去冗余和降噪的高维矢量降维处理。降维的基本原则是:投影降维后数据不失真,降维过程去除数据噪声或冗余信息,从而降低后续建模复杂度,提高模型的精度^[16]。本研究分别采用主成分分析法(Principle component analysis, PCA)和偏最小二乘法(Partial least square, PLS),通过评估建立模型的效果,确定出最佳的降维方法。

1.5 花色苷含量的测定

样本采集完高光谱图像后,立即测定其果皮中花色苷的含量。首先,小心撕取每个样本的果皮,超纯水冲洗干净后用吸水纸吸干水分,称量。然后用液氮研磨成粉,转入 50 mL 离心管中,加入 30 mL 酸化甲醇溶液,25℃ 下超声辅助提取 30 min。离心(转速 8 000 r/min)15 min,收集上清液。向残渣中继续加入 30 mL 酸化甲醇,按上述过程再重复提取 3 次,合并所有上清液,-20℃ 贮藏备用。

花色苷含量采用 pH 值示差法测定。提取液分别用 pH 值为 1.0 的盐酸-氯化钠缓冲液及 pH 值为 4.5 的醋酸-醋酸钠缓冲液稀释 20 倍。然后分别在波长 510 nm 与 700 nm 下测定这两种稀释液的吸光度。吸光度为

$$A = (A_{510 \text{ nmpH}1.0} - A_{700 \text{ nmpH}1.0}) - (A_{510 \text{ nmpH}4.5} - A_{700 \text{ nmpH}4.5}) \quad (2)$$

花色苷含量用矢车菊素-3-葡萄糖苷(含量 R_{CGE} , mg/g)表示,即

$$R_{\text{CGE}} = \frac{1\ 000AM_w D_F V_e}{M_E} \quad (3)$$

式中 M_w ——矢车菊素-3-葡萄糖苷相对分子量,取 449

D_F ——稀释倍数

V_e ——提取液总体积, mL

M ——葡萄皮质量, g

ε ——摩尔吸光系数,取 29 600

1.6 预测模型的建立方法

偏最小二乘回归法(Partial least square regression, PLSR)是一种多元统计数据分析方法,它主要研究的是多因变量对多自变量的回归建模^[17]。当各变量内部高度线性相关时,用 PLSR 法更有效。而且,PLSR 方法较好地解决了样本个数少于变量个数等问题。偏最小二乘回归分析在建模过程中,集成了主成分分析、典型相关分析和线性回归分析方法的特点,因此可以提供更为合理的回归模型。

人工神经网络是目前常用的非线性模型,目前应用较广的是基于误差反向传播算法的 BP 神经网络(Back propagation neural network, BPNN)。由于具有显著非线性处理信息的能力,已在各领域得到了广泛应用^[18]。

支持向量回归(Support vector regression, SVR)是一个专门针对有限样本的学习机器,其优化的基本思想是结构风险最小化,即在数据逼近精度与逼近函数复杂性之间寻求折中,以期获得最好的模型泛化能力。SVR 最终转换为凸二次规划问题,从理论上说,得到的将是全局最优解,解决了神经网络等方法中无法避免的局部极值问题。SVR 优化中巧妙地利用核函数,将复杂实际问题通过非线性变换转换到高维特征空间,在高维空间中构造线性决策函数来实现原空间中的非线性决策。核函数的引进,巧妙地规避高维映射定义和高维空间内积运算问题,并保证模型有较好的推广能力^[15]。考虑到葡萄高光谱数据和预测变量花色苷含量之间映射关系的复杂性和非线性性,利用基于核函数的通用学习算法 SVR 建模,在一定程度上规避了过拟风险,用核函数代替线性方程中的线性项,使原来的线性算法“非线性化”,从而完成非线性回归分析。本实验中所有模型的建立均采用 Matlab 8.0(The Mathworks Inc., 美国)实现。

2 实验结果与分析

2.1 总花色苷测定结果

将总花色苷含量作为样品的化学描述值,所有样本的总花色苷含量的测定统计结果如表 1 所示。可以看出,检验集的样本具有较好的代表性。

2.2 葡萄果实区域的高光谱图像及感兴趣区域的平均光谱

根据葡萄果实和背景不同的光谱特性,选择波

表 1 花色苷质量比统计

Tab. 1 Descriptive statistics of total anthocyanin

	content in samples		mg/g
	范围	平均值	方差
校正集	1.82 ~ 5.93	3.50	1.30
检验集	1.83 ~ 5.72	3.48	1.52

长 1 060 nm 和 1 400 nm 的图像波进行波段比处理, 得到一幅波段比图像。通过分析波段比发现葡萄果实区域的灰度值大于 6, 而背景噪声的灰度值在 1 左右, 因此将阈值选为 6。获得一幅背景区域为 0、果实区域为 1 的二值图像。将二值图像作为掩膜, 提取高光谱图像中的葡萄果实区域(图 2), 将其选为感兴趣区域(Region of interest, ROI)。然后计算出所有 ROI 的平均光谱。

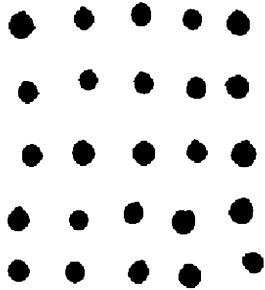


图 2 葡萄果实区域在 1 060 nm 波长处的图像

Fig. 2 Hyperspectral image(1 060 nm) of grape region

图 3 为获得的 60 条样本高光谱图像感兴趣区域(ROI)的平均光谱曲线。由于光谱包含很多高频噪声, 在数据分析中只采用 931 ~ 1 700 nm 间的数据。且由于光照影响, 光谱之间的差异变大, 因此需要对原始光谱进行预处理。

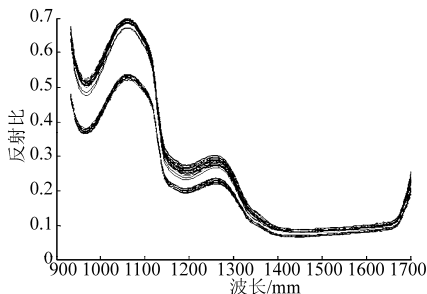


图 3 高光谱图像感兴趣区域的平均光谱曲线

Fig. 3 Averaged spectral profile of hyperspectral image of ROI region

2.3 预测模型的评价

为评估回归模型的有效性, 试验以模型校正决定系数(Calibration R^2 , $C-R^2$)、校正均方根误差(Root mean square error of calibration set, RMSEC)、预测决定系数(Prediction R^2 , $P-R^2$)、预测均方根误差(Root mean square error of prediction set, RMSEP)等指标作为依据, 对所建模型进行比较分析, 并对模

型的预测结果进行评价^[19]。

2.3.1 偏最小二乘回归建模

为了得到可靠稳定的模型, 采用 10 折交互验证法确定独立隐含变量的个数^[20]。将校正集分割成 10 个子样本, 其中 1 个子样本作为验证模型的数据, 其他 9 个子样本用来校正模型。每个子样本验证一次, 此过程共重复 10 次。选取合适的隐含变量的个数, 使得模型的预测误差平方和(Predicted residual sums of squares, PRESS)达到最小, 以保证模型具有较好的泛化能力。

实验采用 SG 平滑、归一化处理、变量标准化、多元散射校正、一阶求导和二阶求导等处理方法。所有用于建模的数据都应进行中心化变换^[21]。然后把各种预处理后的数据分别作为自变量, 并基于 PLSR 建立花色苷含量的预测模型, 通过比较各个模型的结果对各种预处理的信息提取效果进行评价(表 2)。

表 2 不同光谱预处理下 PLSR 模型的预测结果

Tab. 2 Prediction results of PLSR models with different pretreatments

预处理方法	隐含变量个数	评价指标			
		$C-R^2$	RMSEC	$P-R^2$	RMSEP
中心化变换	15	0.957 0	0.239 5	0.789 0	0.580 5
SG 平滑	16	0.961 1	0.228 0	0.728 7	0.659 6
归一化	18	0.997 9	0.052 9	0.663 4	0.734 7
SNV	14	0.956 8	0.240 2	0.778 0	0.596 7
MSC	13	0.935 8	0.292 7	0.888 7	0.422 4
1-Der	11	0.980 8	0.160 0	0.669 4	0.728 2
2-Der	8	0.960 6	0.229 6	0.450 8	0.938 5

从表 2 可以看出, 基于 MSC 处理的光谱数据建立的模型具有最高的预测决定系数和最小的预测均方根误差, $C-R^2$ 和 $P-R^2$ 分别为 0.935 8 和 0.888 7。RMSEC 和 RMSEP 分别为 0.292 7 和 0.422 4。经过 10 折交互验证得出交互验证均方根误差为 0.485 5。其模型预测效果如图 4 所示。

这是因为经过 MSC 处理后得到的光谱数据, 有效地消除散射影响所导致的基线平移或偏移现象^[22], 使样本之间反射比的差异明显减小。这种差异可以近似认为仅由物质成分含量的差异造成的^[23], 是葡萄果皮中所有成分对光照反射共同作用的结果, 故后续分析都是基于此预处理后的光谱数据。

2.3.2 BP 神经网络建模

BP 神经网络建模过程中, 根据模型最佳预测性能的原则, 分别采用 PCA 和 PLS 对预处理后的数据进行降维处理。使用 PCA 时, 按照协方差矩阵分解

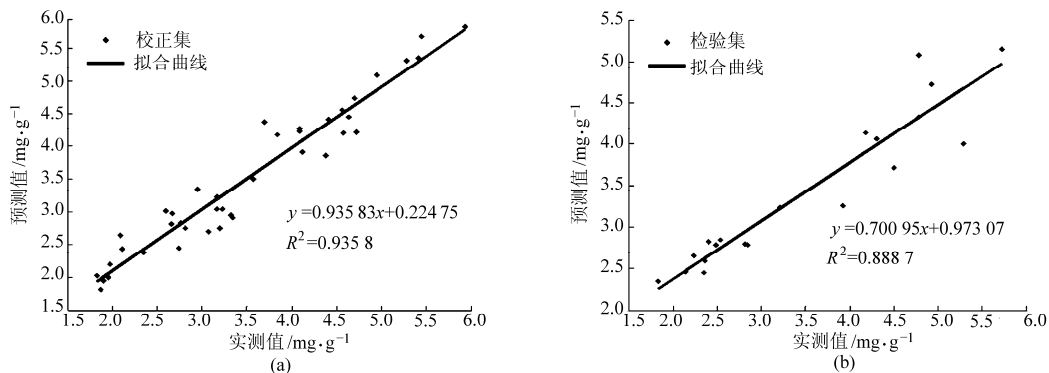


图 4 PLSR 建模方法下葡萄中花色苷质量比预测值与实际值的比较

Fig. 4 Predicted vs observed values of anthocyanin content of grapes using PLSR modeling method

(a) 校正集 (b) 检验集

后特征值所占能量比来确定独立主成分数目^[16]。当独立主成分个数为 8 时,降维后能量比为 99.98%。而当主成分个数为 13 时,降维后能量比达到 99.999%。使用 PLS 时,隐含变量个数由累计贡献率来确定^[24]。隐含变量个数为 13 时,贡献率为 91.92%。当隐含变量为 20 时,贡献率达到 99.82%。

BP 神经网络模型的隐层节点数参照输入变量个数并参考

$$n_1 = \sqrt{n + m + a} \quad (4)$$

式中 n_1 ——隐层节点数
 n ——输入神经元个数
 m ——输出神经元个数
 a ——1 到 10 间的整数

从表 3 可以看出,使用 PLS 方法降维,隐含变量个数为 13,隐层节点个数选择 13 时,花色苷含量预测效果最佳,模型校正决定系数和预测决定系数分别为 0.925 4 和 0.910 2,校正均方根误差和预测均

方根误差分别为 0.315 7 和 0.379 5。经过 10 折交互验证得出交互验证均方根误差为 0.405 7,可见模型较为可靠。

预测效果如图 5 所示。当隐含变量选择 20 时,虽然模型校正决定系数有明显升高,但是预测决定系数反而降低,这说明数据之间出现了过拟合现象。PLS 降维效果整体上明显优于 PCA。这是由于 PCA 在对光谱信息做综合提取时,只注重最好的概括光谱信息,而不考虑主成分对花色苷含量的解释性。而 PLS 提取隐含变量时,不但考虑尽可能地概括光谱信息,而且所提取的隐含变量对花色苷含量有最强的解释性。因此所建立的模型具有很高的解释和

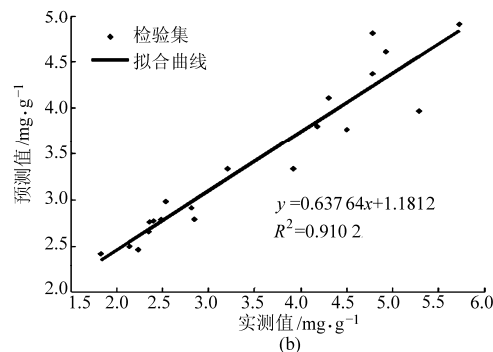
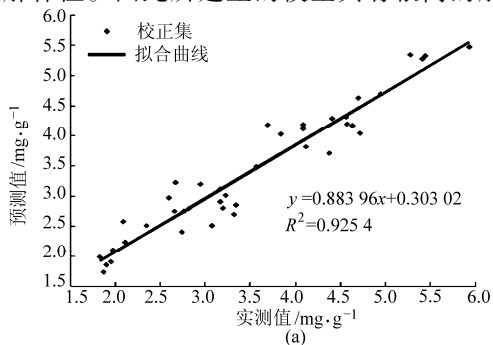


图 5 BPNN 建模方法下葡萄中花色苷预测值与实际值的比较

Fig. 5 Predicted vs observed values of anthocyanin content of grapes using BPNN modeling method

(a) 校正集 (b) 检验集

表 3 不同降维处理下 BPNN 模型的预测结果

Tab. 3 Prediction results of BPNN models with different treatments of dimensionality reduction

降维方法	变量数目	隐层节点数	评价指标			
			C-R ²	RMSEC	P-R ²	RMSEP
PCA	8	6	0.655 0	0.678 9	0.547 5	0.851 9
PCA	8	9	0.630 4	0.702 7	0.575 2	0.825 4
PCA	8	12	0.795 2	0.523 1	0.548 9	0.850 5
PCA	13	7	0.640 8	0.692 7	0.517 1	0.880 1
PCA	13	10	0.672 1	0.661 8	0.451 8	0.937 6
PCA	13	13	0.641 0	0.692 6	0.598 3	0.802 7
PLS	13	7	0.899 0	0.367 3	0.896 5	0.407 5
PLS	13	10	0.912 9	0.341 1	0.895 5	0.409 5
PLS	13	13	0.925 4	0.315 7	0.910 2	0.379 5
PLS	20	8	0.996 8	0.065 8	0.870 7	0.455 5
PLS	20	11	0.983 4	0.149 1	0.885 4	0.428 6
PLS	20	14	0.990 3	0.113 9	0.884 9	0.429 6

预测能力^[25]。

2.3.3 支持向量回归建模

SVR 核函数包括线性核、多项式核、径向基核 (Radial basis function, RBF) 的结构, 因而对拟合效果有较大影响。另一方面, SVR 回归模型的参数决定了模型的泛化效果, 包括核函数参数 g 和惩罚系数 C 等。其中 g 反映了训练样本数据的分布或范围特性, 确定局部邻域的宽度。 C 可以在模型复杂度和训练误差之间得到一个折中, 使模型有一个好的泛化能力。本实验将 PLS 降维后的 13 个隐含变量作为输入变量, 采用 5 折交叉验证和网格搜索的方法获得最佳参数。

由于网格搜索较为耗时, 为降低搜索难度, 分两步进行^[19]: 第 1 步以较大的搜索步长界定取值范围, 第 2 步则根据第 1 步的结果以较小的步长确定最佳取值^[19]。搜索结果如表 4 所示, 由表可见当惩罚系数 C 为 4.56×10^5 、核函数参数 g 为 3.32×10^{-6} 时, 模型可取得最佳结果。

实验结果如表 5 所示。从表中可以看出, 在多项式核函数情况下, 支持向量回归模型最好, 性能最稳定, 模型校正决定系数和预测决定系数分别为

0.900 3 和 0.862 0, 校正均方根误差和预测均方根误差分别为 0.365 0 和 0.470 4。经过 10 折交互验证得出交互验证均方根误差为 0.502 9。预测效果如图 6 所示。在 RBF 核函数情况下也取得较好的预测效果。性能最差的是在线性核函数情况下, 其 $P-R^2$ 仅为 0.118 1, 而 RMESP 却高达 1.031 8。

表 4 SVR 模型参数 C 与 g 寻优结果

Tab. 4 Optimal parameters C and g of SVR model

参数名称	参数取值	
	步骤 1	步骤 2
惩罚系数 C	$32 \leq C \leq 3.35 \times 10^7$	$2.62 \times 10^6 \leq C \leq 4.19 \times 10^6$
核函数参数 g	$10^{-9} \leq g \leq 10^{-3}$	$2.38 \times 10^{-7} \leq g \leq 3.81 \times 10^{-6}$
搜索步长	1	0.1
寻优结果	$C = 1.20 \times 10^6$ $g = 4.15 \times 10^{-7}$	$C = 4.56 \times 10^5$ $g = 3.32 \times 10^{-6}$

表 5 不同核函数情况下的模型性能评估

Tab. 5 Model evaluation with different kernel function

核函数	评价指标			
	C-R ²	RMSEC	P-R ²	RMSEP
线性核	0.517 3	0.879 8	0.118 1	1.031 8
径向基核	0.890 6	0.382 2	0.859 3	0.475 0
多项式核	0.900 3	0.365 0	0.862 0	0.470 4

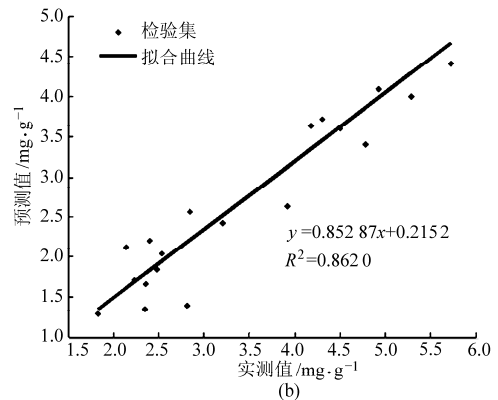
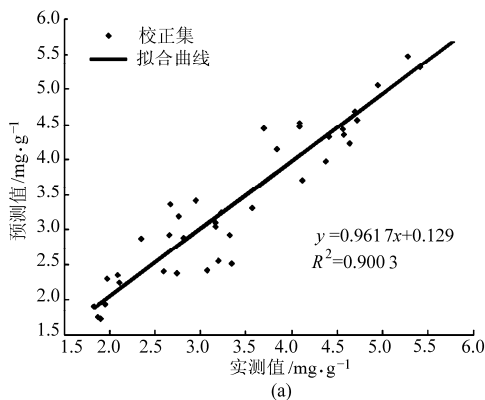


图 6 SVR 建模方法下葡萄中花色苷预测值与实际值的比较

Fig. 6 Predicted vs observed values of anthocyanin content of grapes using SVR modeling method

(a) 校正集 (b) 检验集

3 结论

(1) 酿酒葡萄浆果的光谱数据与果皮中花色苷的含量相关性高, 利用近红外高光谱成像技术检测酿酒葡萄果皮中花色苷含量是可行的。

(2) 与 SG 归一化、SNV、1-Der 和 2-Der 预处理方法相比, MSC 效果最佳。

(3) 在 PLSR、SVR 和 BPNN 这 3 个预测模型中, BPNN 模型的预测效果最好, 其 $P-R^2$ 和 RMSEP 分别为 0.910 2 和 0.379 5。

参 考 文 献

- Hardie W J, O'Brien T P, Jaudzems V G. Morphology, anatomy and development of the pericarp after anthesis in grape, *Vitis vinifera* L. [J]. Australian Journal of Grape and Wine Research, 1996, 2(2): 97 ~ 142.
- Downey M O, Dokoozlian N K, Krstic M P. Cultural practice and environmental impacts on the flavonoid composition of grapes and wine: a review of recent research [J]. American Journal of Enology and Viticulture, 2006, 57(3): 257 ~ 268.
- Ribereau-Gayon P, Glories Y, Maujean A, et al. Handbook of enology: the chemistry of wine stabilization and treatments [M]. Chichester: Wiley, 2006: 136 ~ 139.

- 4 Revilla E, García-Beneytez E, Cabello F. Anthocyanin fingerprint of clones of Tempranillo grapes and wines made with them[J]. Australian Journal of Grape and Wine Research, 2009, 15(1): 70~78.
- 5 Saint-Cricq de Gaulejac N, Vivas N, Glories Y. Maturation phénolique des raisins rouges relation avec la qualité des vins comparaison des cépages Merlot et Tempranillo[J]. Progrès Agricole et Viticole, 1998, 115(2): 306~318.
- 6 Liang Z C, Wu B H, Fan P G, et al. Anthocyanin composition and content in grape berry skin in *Vitis germplasm*[J]. Food Chemistry, 2008, 111(4): 837~844.
- 7 Sun D. Hyperspectral imaging for food quality analysis and control[M]. Massachusetts: Academic Press, 2010.
- 8 罗阳,何建国,贺晓光,等. 农产品无损检测中高光谱成像技术的应用研究[J]. 农机化研究, 2013(6): 1~7.
Luo Yang, He Jianguo, He Xiaoguang, et al. Applied research of agricultural product non-destructive detection using hyperpectral Imaging technology[J]. Journal of Agricultural Mechanization Research, 2013(6): 1~7. (in Chinese)
- 9 Monteiro S T, Minekawa Y, Kosugi Y, et al. Prediction of sweetness and amino acid content in soybean crops from hyperspectral imagery[J]. ISPRS Journal of Photogrammetry & Remote Sensing, 2007, 62(1): 2~12.
- 10 吴静珠, 吴胜男, 刘翠玲, 等. 近红外和高光谱技术用于小麦籽粒蛋白含量预测探索[J]. 传感器与微系统, 2013, 32(2): 60~62.
Wu Jingzhu, Wu Shengnan, Liu Cuiling. et al. Explorations of wheat grain protein content prediction using NIR and hyperspectrum technology[J]. Transducer and Microsystem Technologies, 2013, 32(2): 60~62. (in Chinese)
- 11 Fernandes A M, Oliveira P, Moura J P, et al. Determination of anthocyanin concentration in whole grape skins using hyperspectral imaging and adaptive boosting neural networks[J]. Journal of Food Engineering, 2011, 105(2): 216~226.
- 12 黄文倩, 陈立平, 李江波, 等. 基于高光谱成像的苹果轻微损伤检测有效波长选取[J]. 农业工程学报, 2013, 29(1): 272~277.
Huang Wenqian, Chen Liping, Li Jiangbo, et al. Effective wavelengths determination for detection of slight bruises on apples based on hyperspectral imaging[J]. Transactions of the CSAE, 2013, 29(1): 272~277. (in Chinese)
- 13 邹小波, 陈正伟, 石吉勇, 等. 基于近红外高光谱图像的黄瓜叶片色素含量快速检测[J]. 农业机械学报, 2012, 43(5): 152~156.
Zou Xiaobo, Chen Zhengwei, Shi Jiyong, et al. Rapid detection of cucumber leaves pigments based on near infrared hyperspectral image technology[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2012, 43(5): 152~156. (in Chinese)
- 14 赵杰文, 刘剑华, 陈全胜, 等. 利用高光谱图像技术检测水果轻微损伤[J]. 农业机械学报, 2008, 39(1): 106~109.
Zhao Jiewen, Liu Jianhua, Chen Quansheng, et al. Detecting subtle bruises on fruits with hyperspectral imaging[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2008, 39(1): 106~109. (in Chinese)
- 15 谢传奇, 冯雷, 冯斌, 等. 茄子灰霉病叶片过氧化氢酶活性与高光谱图像特征关联方法[J]. 农业工程学报, 2012, 28(18): 177~184.
Xie Chuanqi, Feng Lei, Feng Bin, et al. Relevance of hyperspectral image feature to catalase activity in eggplant leaves with grey mold disease[J]. Transactions of the CSAE, 2012, 28(18): 177~184. (in Chinese)
- 16 黄双萍, 洪添胜, 岳学军, 等. 基于高光谱的柑橘叶片氮素含量多元回归分析[J]. 农业工程学报, 2013, 29(5): 132~138.
Huang Shuangping, Hong Tiansheng, Yue Xuejun, et al. Multiple regression analysis of citrus leaf nitrogen content using hyperspectral technology[J]. Transactions of the CSAE, 2013, 29(5): 132~138. (in Chinese)
- 17 Wold S, Ruhe A, Wold H, et al. The collinearity problem in linear regression. The partial least squares (PLS) approach to generalized inverses[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1984, 5(3): 735~743.
- 18 吴桂芳, 黄凌霞, 何勇. 葡萄浆果糖度可见/近红外光谱检测的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(9): 2090~2093.
Wu Guifang, Huang Lingxia, He Yong. Research on the sugar content measurement of grape and berries by using vis/NIR spectroscopy technique[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(9): 2090~2093. (in Chinese)
- 19 梁亮, 杨敏华, 张连蓬, 等. 基于SVR算法的小麦冠层叶绿素含量高光谱反演[J]. 农业工程学报, 2012, 28(20): 162~171.
Liang Liang, Yang Minhua, Zhang Lianpeng, et al. Chlorophyll content inversion with hyperspectral technology for wheat canopy based on support vector regression algorithm[J]. Transactions of the CSAE, 2012, 28(20): 162~171. (in Chinese)
- 20 Baiano A, Terracone C, Peric G, et al. Application of hyperspectral imaging for prediction of physico-chemical and sensory characteristics of table grapes[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2012, 87: 142~151.
- 21 李桂峰, 赵国建, 刘兴华, 等. 苹果硬度的傅里叶变换近红外光谱无损检测[J]. 农业机械学报, 2009, 40(1): 120~123.
Li Guifeng, Zhao Guojian, Liu Xinghua, et al. Using FT-NIR spectra in noninvasive measurements of apple firmness[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2009, 40(1): 120~123. (in Chinese)
- 22 张雷蕾, 李永玉, 彭彦昆, 等. 基于高光谱成像技术的猪肉新鲜度评价[J]. 农业工程学报, 2012, 28(7): 254~259.
Zhang Leilei, Li Yongyu, Peng Yankun, et al. Determination of pork freshness attributes by hyperspectral imaging technique[J]. Transactions of the CSAE, 2012, 28(7): 254~259. (in Chinese)
- 23 赵强, 张工力, 陈星旦. 多元散射校正对近红外光谱分析定标模型的影响[J]. 光学精密工程, 2005, 13(1): 53~58.
Zhao Qiang, Zhang Gongli, Chen Xingdan. Effects of multiplicative scatter correction on a calibration model of near infrared spectral analysis[J]. Optics and Precision Engineering, 2005, 13(1): 53~58. (in Chinese)

6 结论

(1) 简化了文献[10]提出的流量偏差率计算公式,建立了综合流量偏差率 q_v 与水力流量偏差率 q_{hv} 及灌水器制造偏差系数 c_v 之间的函数关系,并通过对灌水小区综合流量偏差率的统计分析,对理论公式进行了验证,结果表明由理论推导出的公式基

本能够反映综合流量偏差率与水力流量偏差率及灌水器制造偏差之间的本质联系。

(2) 对 180 个不同灌水小区的流量偏差率进行了模拟计算,通过统计分析初步确定了不同灌水器制造偏差下的灌水均匀性保证率 P ;分析了制造偏差对综合流量偏差率的影响,提出了灌水小区综合流量偏差率允许值的建议。

参 考 文 献

- Zhang L, Merkley G P. Relationships between common irrigation application uniformity indicators[J]. Irrigation Science, 2012, 30(2):83~88.
- Styles S W, Burt C M, Gaudi F, et al. Accuracy of global microirrigation distribution uniformity estimates[J]. Journal of Irrigation and Drainage Engineering, 2008, 134(3):292~297.
- GB/T 50485—2009 微灌工程技术规范[S]. 2009.
GB/T 50485—2009 Technical code for microirrigation engineering[S]. 2009. (in Chinese)
- Keller J, Bliesner R D. Sprinkler and trickle irrigation[M]. New York: van Nostrand Reinhold, 1990.
- 张国祥. 考虑三偏差因素的滴灌系统流量总偏差率[J]. 农业工程学报, 2006, 22(11):27~29.
Zhang Guoxiang. Calculating the total flow deviation rate of drip-irrigation system based on three deviation rates [J]. Transactions of the CSAE, 2006, 22(11):27~29. (in Chinese)
- 牛文全, 吴普特, 范兴科. 微灌系统综合流量偏差率的计算方法[J]. 农业工程学报, 2004, 20(6):85~88.
Niu Wenquan, Wu Pute, Fan Xingke. Method for calculating integrated flux deviation rate of micro-irrigation system [J]. Transactions of the CSAE, 2004, 20(6):85~88. (in Chinese)
- 朱德兰, 吴普特, 张青峰, 等. 微地形影响下滴灌均匀度设计指标研究[J]. 排灌机械, 2006, 24(1):22~26.
Zhu Delan, Wu Pute, Zhang Qingfeng, et al. Study on the emission uniformity for the emitter under the condition of farmland micro-terrain action[J]. Drainage and Irrigation Machinery, 2006, 24(1):22~26. (in Chinese)
- Zhu D L, Wu P T, Merkley G P, et al. Drip irrigation lateral design procedure based on emission uniformity and field topography [J]. Irrigation and Drainage, 2010, 59(5):535~546.
- 张林, 吴普特, 牛文全, 等. 均匀坡度下滴灌系统流量偏差率的计算方法 [J]. 农业工程学报, 2007, 23(8):40~44.
Zhang Lin, Wu Pute, Niu Wenquan, et al. Method for calculating flow deviation in drip irrigation system under uniform slope [J]. Transactions of the CSAE, 2007, 23(8):40~44. (in Chinese)
- 张林, 范兴科, 吴普特, 等. 均匀坡度下考虑三偏差的滴灌系统流量偏差率的计算[J]. 农业工程学报, 2009, 25(4):7~14.
Zhang Lin, Fan Xingke, Wu Pute, et al. Calculation of flow deviation rate of drip irrigation system taking three deviation rates into account on uniform slopes[J]. Transactions of the CSAE, 2009, 25(4):7~14. (in Chinese)
- Zhang Lin, Wu Pute, Zhu Delan. Hydraulic design procedure for drip irrigation submain unit based on relative flow difference [J]. Irrigation Science, 2013, 31(5):1 065~1 073.
- 张国祥. 微灌毛管水力设计的经验系数法[J]. 节水灌溉, 1991(1):4~8.
Zhang Guoxiang. Empirical coefficient method of hydraulic design for microirrigation lateral [J]. Water Saving Irrigation, 1991(1):4~8. (in Chinese)
- 郑耀泉, 宁堆虎. 滴头制造偏差的模拟与微灌系统随机设计方法的研究[J]. 水利学报, 1991, 22(7):1~6.
Zheng Yaoquan, Ning Duihu. Simulation of emitter manufacturing deviation and development of stochastic design method for trickle irrigation system [J]. Journal of Hydraulic Engineering, 1991, 22(7):1~6. (in Chinese)
- 张志新. 滴灌工程规划设计原理与应用[M]. 北京:中国水利水电出版社, 2007.
- 卢黎霞, 陈云玲. 统计学原理[M]. 武汉:武汉理工大学出版社, 2006.

(上接第 186 页)

- 方慧, 邹强, 何勇, 等. 基于高光谱的番茄叶片过氧化物酶活力测定[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(8):2 228~2 233.
Fang Hui, Zou Qiang, He Yong, et al. Detection of activity of POD in tomato leaves based on hyperspectral imaging technology [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2012, 32(8):2 228~2 233. (in Chinese)
- 尹小君, 李满春, 赵思峰, 等. PLS 算法在高光谱估测加工番茄白粉病色素含量中的应用[J]. 农业机械学报, 2012, 43(2):175~180.
Yin Xiaojun, Li Manchun, Zhao Sifeng, et al. PLS algorithm application in hyperspectral estimation of pigment contents in processing tomato leaves under powdery mildew [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2012, 43(2):175~180. (in Chinese)