

doi:10.6041/j.issn.1000-1298.2013.09.025

基于 CARS 算法的脐橙可溶性固形物近红外在线检测*

刘燕德 施宇 蔡丽君 周延睿

(华东交通大学机电工程学院,南昌 330013)

摘要:采用可见/近红外光谱在线检测装置进行赣南脐橙可溶性固形物含量在线检测模型优化研究。样品以 5 个/s 的速度运动,采集可见/近红外漫透射光谱。光谱经过预处理后,分别应用向后区间偏最小二乘法(BiPLS)、遗传算法(GA)和正自适应加权算法(CARS)筛选特征变量,并通过外部验证评价 PLS 模型预测能力。一阶微分处理后经 CARS 筛选特征变量建立的 PLS 模型预测结果最优,预测相关系数和预测均方根误差分别为 0.94 和 0.42%。结果表明 CARS 算法可有效简化赣南脐橙可溶性固形物可见/近红外光谱在线检测模型并提高模型的预测精度。

关键词:赣南脐橙 近红外光谱 在线检测 CARS 变量筛选法

中图分类号: O657.33; S666.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2013)09-0138-07

On-line NIR Detection Model Optimization of Soluble Solids Content in Navel Orange Based on CARS

Liu Yande Shi Yu Cai Lijun Zhou Yanrui

(School of Mechatronical and Electrical Engineering, East China Jiaotong University, Nanchang 330013, China)

Abstract: In order to improve the predictive precision for on-line determination of soluble solids content (SSC) of Gannan navel orange, the dynamic detecting system was applied to optimize online detection model by visible and near-infrared reflectance spectroscopy. The spectra were obtained at the constant velocity of 5 navel oranges per second. After employing various preprocessing methods, the sensitive spectral regions were analyzed by different variable selection methods, including backward interval partial least-squares (BiPLS), genetic algorithm (GA), and competitive adaptive reweighted sampling (CARS). The predictive abilities of the models were evaluated by prediction set. The results indicated that the best model was obtained by CARS with the first derivative. The correlation coefficient (R_p) and root mean square error of prediction (RMSEP) was 0.94 and 0.42% for SSC respectively. The results showed that the proposed method of CARS could effectively simplify the online detection model of SSC of Gannan navel orange based on visible/near-infrared (Vis/NIR) diffuse transmittance spectroscopy, and enhance the predictive precision. The study can provide a reference for optimizing online detecting system of Gannan navel orange.

Key words: 'Gannan' navel orange NIR On-line determination Competitive adaptive reweighted sampling

引言

可溶性固形物含量(Soluble solids content, SSC)

是评价赣南脐橙品质的重要指标^[1]。近红外光谱技术因其无损、高效、样品无需前处理等优点,被广泛用于水果品质检测。

收稿日期:2012-07-31 修回日期:2013-03-12

* 科技部农业科技成果转化资金资助项目(2011GB2C500008)、赣鄱英才555工程领军人才培养计划资助项目和江西省光电检测工程技术研究中心资助项目(赣科发财字[2012]155号)

作者简介:刘燕德,教授,博士,主要从事农产品智能无损检测技术研究,E-mail: jxliuyd@163.com

传统的破坏式可溶性固形物检测方法因制样繁琐、检测时间长等问题,难以满足大批量水果在线检测与分级的需求。现代近红外光谱技术具有速度快、不破坏样品、操作简单、稳定性好、效率高等特点,适于水果品质的在线检测分析^[2~5],国内外众多专家已开始利用近红外光谱进行水果的品质自动化在线分选技术研究^[6~13]。近红外光谱反映了被检测物的基本特征信息,但同时也受到许多非目标信息的干扰,导致近红外光谱建模受到无关变量的干扰,降低模型预测能力和稳定性。可见/近红外光谱在线检测过程中,样品始终处于运动状态,样品位置变化、尺寸差异、光强浮动以及杂散光等因素将大量噪声引入到光谱中,应用适当的预处理和变量筛选方法进行数学模型的优化尤为重要。因此,近红外光谱分析中,常进行信息区间及变量筛选以简化模型和提高模型的预测精确度和稳定性^[14~17]。变量筛选主要以某种目标函数为基准,采取不同函数运算,选取与浓度矩阵相关性较好的信息区间或变量。其主要方法有:向后区间偏最小二乘法(Backward interval partial least-squares, BiPLS)、遗传算法(Genetic algorithm, GA)、正自适应加权算法(Competitive adaptive reweighted sampling, CARS)等^[18~24]。

本文通过 BiPLS、GA 和 CARS 算法筛选在线检测装置上采集的赣南脐橙可溶性固形物的可见/近红外光谱变量,探讨预处理和变量筛选方法对赣南脐橙可溶性固形物在线预测模型精度的影响,优化赣南脐橙可溶性固形物可见/近红外光谱在线检测数学模型,以期对赣南脐橙可溶性固形物可见/近红外在线检测装备的改进提供参考。

1 材料与方 法

1.1 试验材料

赣南脐橙样品采自江西省兴国县某果园,采摘后运送至实验室中,并在 6℃ 下保存。进行光谱采集前,将赣南脐橙样品表皮灰尘和污迹清理干净,剔除有损伤和表面缺陷的样品,选择质量 170~265 g、赤道方向直径 75~85 mm、形状规则的赣南脐橙,共得到样品 160 个。将待测样品依次编号,并置于温度 20℃、相对湿度 60% 的室内环境中 24 h,每个样品在相同参数下重复采集赤道部位光谱,最后按可溶性固形物含量梯度,以 3:1 将其分成校正集和预测集,即 120 个样品作为校正集,剩余 40 个作为预测集用于评价模型的预测能力和稳定性。

1.2 试验装置与样品光谱采集

试验采用自行搭建的脐橙可见/近红外光谱在线检测装置,如图 1 所示。该装置由机械传送装置和光谱采集处理系统 2 部分组成^[25]。其中机械传送装置由一台商业机器视觉分级装置(北京福润美农科技有限公司)改造而成,由变频器控制电动机转速,通过电动机拖动链轮转动,带动链条在导轨上运动。水果托盘通过固定架卡装在链条上,随链条同步运动,实现水果的输送。为尽量减少因速度过快导致的水果托盘振动,并保证触发装置能准确可靠地触发光谱采集系统采集到脐橙的可见/近红外光谱,由前期试验工作得到,将机械传送系统的传送速度调整为约 5 个/s(即每秒过 5 个脐橙,线速度约 0.45 m/s)能较好地满足赣南脐橙可见/近红外光谱在线检测^[26]。光谱采集处理系统主要包括 USB 2000+ 型可见/近红外光谱仪(美国海洋光学公司)、4 个 100 W 卤钨灯组成的光源、光纤、光电接近开关、编码盘、可编程控制器 PLC、计算机。由编码盘触发电接近开关,将形成位置信号传入 PLC 中,由上位机(计算机)和下位机(PLC)对整个光谱采集过程进行控制。

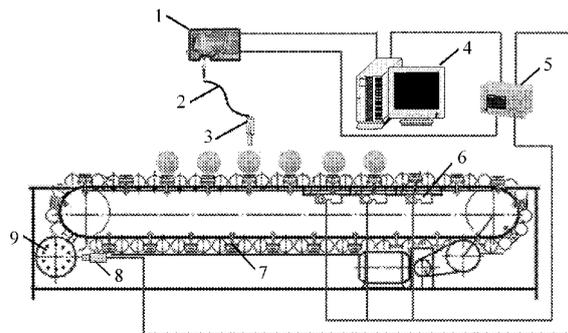


图 1 脐橙在线检测装置示意图

Fig. 1 Schematic of online detection system for navel orange

1. 光谱仪 2. 光纤 3. 探头 4. 计算机 5. PLC 6. 电磁阀
7. 执行机构 8. 传感器 9. 编码盘

试验采用漫透射方式采集可见/近红外光谱,其光路系统结构如图 2 所示。4 个 100 W/12 V 卤钨灯均布在机械传送系统的两侧,卤钨灯与垂直方向有一斜角而倾向导轨,同时挡板遮蔽作用避免了光直接由光源进入探头影响试验结果,样品顶部形成了一个阴影区,阴影区内有足够的空间为采光区,有效地避免了未经过样品内部的镜面反射光。4 个卤钨灯成环形布置,使得样品赤道部位都受到光的辐射,保证了探头收集到携带样品内部品质信息的大部分光。由处于采光区的光纤探头接收透过水果内部的光,探头至机械传送系统的垂直距离约为 120 mm。

探头与脐橙之间距离的变化所引起的光谱变

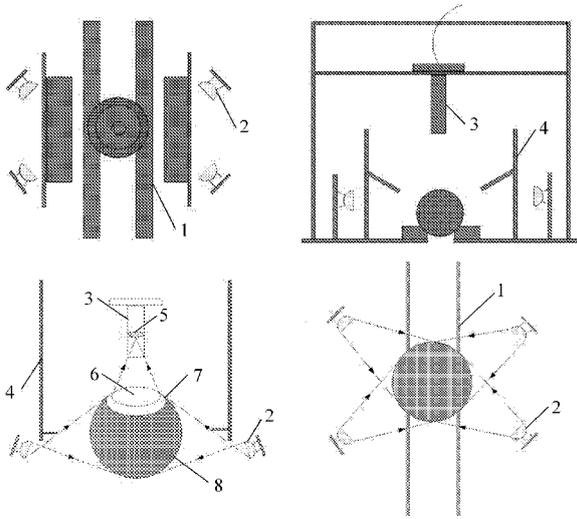


图2 光路系统结构示意图

Fig. 2 Structural diagram of optical system

1. 导轨 2. 光源 3. 探头 4. 挡板 5. 聚光镜 6. 采光区
7. 阴影区 8. 受光区

化,可以通过采集标准参比的方式进行一定程度的剔除,并通过光谱预处理和建模变量的筛选进一步消除其影响。在采集样品光谱之前,先采集参比和暗电流光谱,以 6.5 mm 厚聚四氟乙烯白板为标准参比。样品随机放置在均匀呈单列的输送台上,每个样品重复 3 次放入脐橙在线检测装置中采集其赤道部位的可见近红外光谱,再对这 3 条光谱取平均值并作为每个样品的最终光谱,以保证采集的光谱中包含有脐橙各个部位的信息。样品、参比和暗电流的采集参数均为:积分时间 30 ms、扫描次数 1、平滑窗口宽度 15,且光谱仪参数设置、数据采集和存储均使用美国海洋光学公司的 Spectrasuite 光谱仪软件。样品的可见/近红外漫透射光谱在低于 550 nm 和高于 1000 nm 的波段信号微弱且含有大量噪声,因此选取 550 ~ 1000 nm 为样品光谱的有效范围。图 3 为 160 个脐橙样品在该波长范围内的原始光谱。

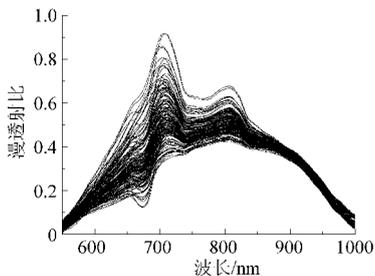


图3 160个脐橙可见/近红外原始光谱

Fig. 3 Original Vis/NIR spectra of 160 navel oranges

本试验所获取的光谱以漫透射比表示,公式为

$$R_{\lambda} = \frac{R_s - R_d}{R_e - R_d}$$

式中 R_{λ} ——波长 λ 下样品的漫透射比值

R_s ——波长 λ 下样品的光谱强度

R_e ——波长 λ 下参比的光谱强度

R_d ——波长 λ 下暗电流的光谱强度

1.3 可溶性固形物含量测量

赣南脐橙可溶性固形物含量的测定使用 PR-101 α 型折射式数字糖度仪(日本 ATAGO 公司),测量所得值以质量分数表示。光谱采集完成后,将每个样品切块放入榨汁机(成都每时乐电器有限公司)进行榨汁,过滤后取一滴果汁滴于数字式折射仪的测试窗口上,重复取样测量 3 次取其平均值作为该样品可溶性固形物含量的真实值。

1.4 数据处理及模型评价

利用 BiPLS 工具包、GA 工具包和 CARS (Version 2.0) 工具包进行变量筛选,并在 Matlab 7.10 软件(美国 Mathworks 公司)中实现。光谱预处理方法及 PLS 建模在 Unscrambler 8.0 软件(挪威 CAMO 公司)中实现。由建模集及预测集相关系数 (R_c 和 R_p)、建模集均方根误差、预测集均方根误差进行模型评价。模型的预测相关系数越高,预测均方根误差越小,模型的预测能力越强;建模和预测均方根误差越接近,模型的稳健性越好。

2 结果与分析

2.1 光谱预处理

表 1 为赣南脐橙样品可溶性固形物含量真实值的统计结果,其中 120 个校正集样品的可溶性固形物质量分数为 9.6% ~ 14.6%,且预测集 40 个样本的 SSC 都处在校正集样本范围之内,可见样品的校正集所建立的模型能较好地用于样品预测。

表1 赣南脐橙样品可溶性固形物质量分数标准值统计

Tab.1 Statistics of SSC mass fraction measured by standard method for Gannan navel orange

样品集	数量	最大值 /%	最小值 /%	平均值 /%	标准差 /%	变异系 数/%
校正集	120	14.6	9.6	12.08	1.49	1.22
预测集	40	14.5	9.8	12.01	1.57	1.25

赣南脐橙可溶性固形物的可见/近红外光谱在线检测中,样品始终处于运动状态,样品位置变化、尺寸差异、光强浮动以及杂散光等因素导致大量噪声被引入光谱中。为了减少各种非目标因素对光谱的影响,分别采用多元散射校正 (Multiplicative scatter correction, MSC)、移动窗口平滑、Savitzky-Golay 平滑 (S-G 平滑)、一阶微分和二阶微分共 5 种方法对原始光谱进行预处理,然后使用 PLS 方法建立赣南脐橙可溶性固形物的数

学模型,并采用40个未参与建模的样品预测模型的性能。预处理方法的窗口宽度为3~50点、间隔为2点,按预测均方根误差最小值进行选取,表2中列出的预处理参数(窗口宽度及因子数)均为优选后的结果。

平滑是光谱处理中改善信噪比最常用的方法,对滤除高频噪声非常有效,但由图3可以看出,本试验采集的光谱中高频噪声并不明显,因此光谱平滑效果不佳,由表2中也可以看出,移动窗口平滑和Savitzky-Golay平滑处理对建模结果的影响不大,多元散射校正对模型预测能力有一定的提高,是由于它可以有效地消除样品间散射影响所导致的基线平移和偏移现象,提高光谱的信噪比。而采用一阶微分预处理后,模型预测能力有较大提高。微分光谱可以有效地消除基线和其他背景的干扰,分辨重叠峰,提高分辨率。光谱经一阶微分处理可以使样品位置、尺寸以及其他非目标因素的干扰得到较好地消除,对本文所使用的赣南脐橙在线检测装置上采集的脐橙可见/近红外光谱中混入的大量噪声的消除作用更加明显,对提高在线检测模型的预测精度比其他预处理方法更加明显。由表2可知,经过一阶微分(窗口宽度5点)处理的模型预测结果最优,其预测集相关系数和均方根误差分别为0.85和0.65%。

表2 不同光谱预处理方法的建模和预测结果

Tab.2 Results of calibration and prediction with different pre-processing methods of SSC

预处理方法	因子数	校正集		预测集	
		相关系数	均方根误差/%	相关系数	均方根误差/%
原始光谱	8	0.85	0.63	0.84	0.67
移动窗口平滑(5点)	7	0.86	0.66	0.84	0.68
多元散射校正	8	0.88	0.59	0.85	0.67
Savitzky-Golay平滑(25点)	7	0.86	0.62	0.84	0.67
一阶微分(5点)	4	0.91	0.56	0.85	0.65
二阶微分(11点)	2	0.82	0.68	0.77	0.80

2.2 变量筛选

2.2.1 BiPLS 算法

BiPLS采用几个子区间联合建模,可以很方便确定建模区间数,同时能够在不同的区间划分中搜索到最佳的联合区间,剔除无信息或噪声过大的变量区间,建立更优的预测模型。

使用BiPLS定位在光谱信息区间时,应考察区间分割数对波长选择及模型预测性能影响。本文将一阶微分后的光谱数据(共1278个数据点)划分为等长度的波段子区间,表3列出了划分子区间数为

20~45的BiPLS建模结果。将一阶微分光谱(550~1000nm)划分为40个区间,经过逐步剔除交互验证均方根误差较大的子区间,最终确立以24个子区间(9、7、16、5、10、12、8、19、25、1、4、24、31、36、21、34、14、38、23、2、17、35、11、13)联合建立的模型较优,对应的模型预测集相关系数和均方根误差分别为0.87和0.64%。优化后的模型所用变量为767个,仅为原始光谱变量数的60%。

表3 BiPLS建模和预测结果

Tab.3 Results of calibration and prediction with BiPLS method

区间数	被选区间数量	变量数	因子数	校正集		预测集	
				相关系数	均方根误差/%	相关系数	均方根误差/%
20	13	830	4	0.89	0.56	0.85	0.66
25	10	511	5	0.92	0.57	0.83	0.67
30	15	640	5	0.92	0.54	0.86	0.66
35	17	622	4	0.91	0.52	0.81	0.72
40	24	767	5	0.92	0.55	0.87	0.64
45	22	626	4	0.89	0.56	0.82	0.68

2.2.2 GA 算法

遗传算法(GA)的主要参数设置为:最大选取变量数200,初始种群大小为30,最大进化代数为100,交叉概率0.5,变异概率0.01。对一阶微分后的120个校正集样品的光谱经GA算法分析选取特征变量后建立PLS模型,连续进行5次重复遗传迭代过程的PLS建模,将每次所选中波长点都从光谱中挑出,组合后再进行一次遗传算法,最终获得174个波长点,利用这些波长点所建立的PLS模型的建模集相关系数和均方根误差分别为0.88和0.57%,预测集相关系数和均方根误差分别为0.88和0.60%,其结果优于一阶微分全光谱PLS模型。图4是脐橙样品的一阶微分光谱与遗传算法选取的脐橙可溶性固形物含量建模变量分布图,优选后的变量主要集中在660~760nm和940~1000nm这2个区域,其包含了可溶性固形物主要成分官能团的吸收区,如740~760nm的C-H官能团的第四倍频区,953~1000nm为C-H官能团的第三合频区^[27]。在940~960nm波段包含了赣南脐橙可溶性固形物的重要信息,在该区域有很重要的一部分波长被选中,去除该波段后所建立的PLS模型建模集相关系数和均方根误差分别为0.76和0.79%。

图4中灰色竖线代表经GA算法优选出的特征波长所对应的区域,从中可以看出所选波长几乎都不在吸收峰上,而是分布在吸收峰的两侧,这些波长可能对噪声不敏感,对于有大量噪声被引入的在线

检测装置上,用这些波长建立的赣南脐橙可溶性固形物含量在线检测模型更加稳健。

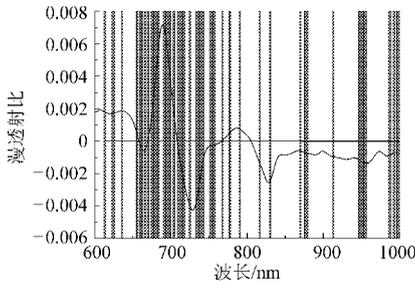


图4 一阶微分光谱与 GA-PLS 选取的建模变量分布图

Fig. 4 Contrast of first derivative spectral and variable selection by GA-PLS for SSC

2.2.3 CARS 算法

通过正自适应加权算法(CARS)对 PLS 模型中回归系数绝对值大的变量进行筛选,同时去除权重小的变量,多次重复筛选后,选出交互验证均方根误差值最低的变量子集。这种算法可有效选择与所测组分性质密切相关的变量,以利于简化模型。由图 5 中保留波长数与运行次数的变化关系图可知,每运行一次都会有一定数量的波长变量被淘汰。波长变量被淘汰的速度随着运行次数的增加逐渐减慢,在运行次数较少时,变量被淘汰的速度很快,在运行 10 次时,仅有 20% 的变量被保留下来,体现了 CARS 算法对变量粗选的过程;在运行次数大于 10 次以后,波长变量在每次运行中被淘汰的数量越来越少,体现了 CARS 算法对变量精选的过程。由交互验证均方根误差的变化趋势图可知,在前 45 次运行中交互验证均方根误差随着运行次数的增加而逐渐减小,在运行 45 次后开始增大。可见在运行 45 次时,已经基本把与可溶性固形物含量无关的变量剔除了,之后的运行可能是在剔除关键变量,导致残差变大,此时对应的保留波长变量数为 72 个。由运行次数与各变量回归系数的变化关系可知,在运行次数为 45 时,交互验证均方根误差出现最低点 0.39%,即竖线所对应的点,保留波长变量数 72 个。

与全光谱建立的 PLS 模型相比,利用 CARS 算法进行变量筛选后,所建 PLS 模型的质量有明显的提高,变量数仅为 72 个,脐橙可溶性固形物含量的建模集相关系数和均方根误差分别提升到 0.95 和 0.39%,且明显优于 BiPLS 和 GA 变量筛选后的建模结果。可见在进行有大量数据参与的光谱建模中,CARS 算法可以筛选出关键变量,减少无关变量,并提高模型的预测能力。

2.3 模型预测结果对比分析

向后区间偏最小二乘法(BiPLS)、遗传算法

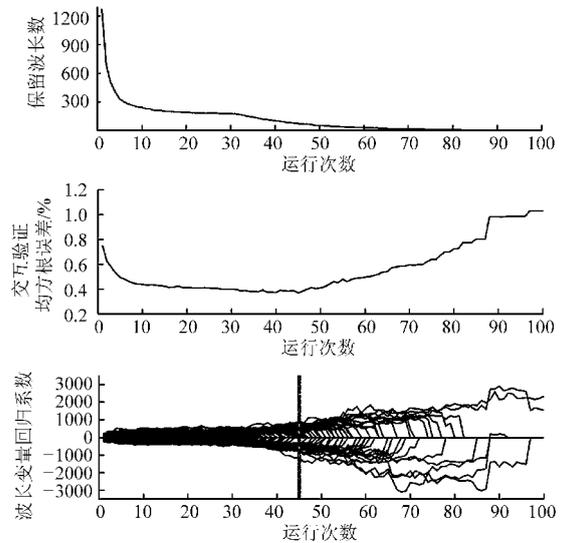


图5 CARS-PLS 变量筛选图

Fig. 5 Plot of variable selection by CARS-PLS for SSC

(GA)和正自适应加权算法(CARS)3种变量筛选算法对赣南脐橙可见/近红外光谱进行特征波段优选所用时间的比例约为 100:5.5:1(BiPLS 算法执行所用时间 4 201 s,GA 算法执行所用时间 228 s,CARS 算法执行所用时间 42 s),可见 CARS 算法的执行时间更优于另外 2 种。将这 3 种算法所筛选出的波长变量建立的 PLS 模型移植到在线检测装置的光谱处理系统中进行在线试验,这 3 个 PLS 模型所用时间基本相同,能够满足本试验所设定的 5 个/s 的在线检测速度的要求。采用外部验证方式,用 40 个样品组成的验证集对 3 种算法进行波段筛选后建立的 PLS 模型进行预测。全谱段、BiPLS、GA 和 CARS 波长筛选方法的最优建模预测结果如图 6 所示,其相关系数和预测均方根误差分别为 0.85、0.87、0.88、0.94 和 0.65%、0.64%、0.60%、0.42%,从中可以看出这 3 种方法的分析结果有一定的差别,但验证集相关系数高于全波段建模,均方根误差均低于全波段建模,表明波长筛选方法结合 PLS 建立的模型都可用于对未知样品进行预测。CARS 进行波段筛选后 PLS 模型预测结果明显改善,如图 6d 所示预测相关系数和预测均方根误差分别为 0.94 和 0.42%。

3 结束语

本文应用近红外光谱技术,在自行搭建的赣南脐橙可见/近红外光谱在线检测装置上实现了以 5 个/s 速度运动的赣南脐橙可溶性固形物含量在线无损检测。通过对比不同预处理方法和不同变量选择方法对建模效果的影响,得到最优预处理为一阶微分,最优变量选择法为 CARS 方法,其运行次数为 45,建模变量数为 72 个时,预测相关系数和预测均

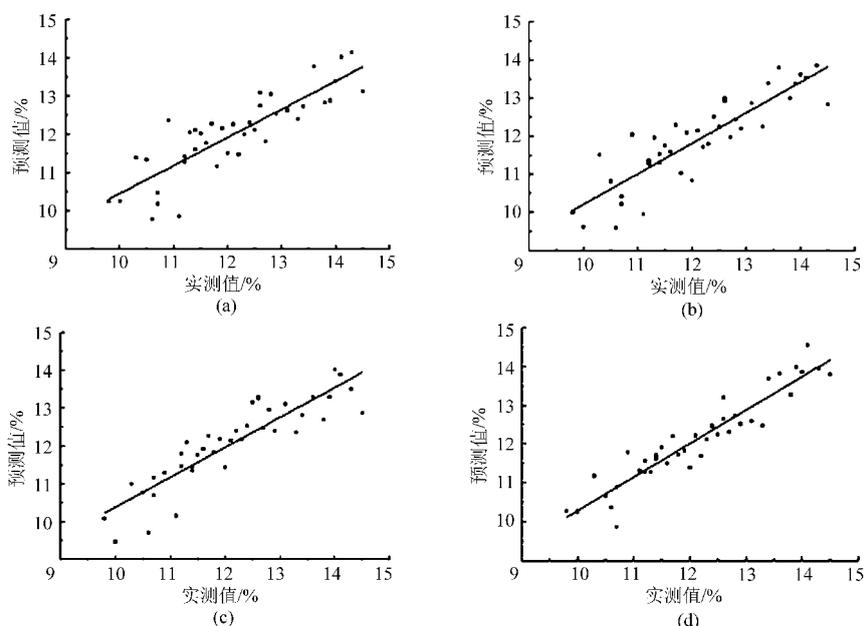


图6 不同变量选择模型下可溶性固形物质量分数预测值与实测值相关图

Fig. 6 Correlation of predicted values and measured values in prediction set for soluble solids content (SSC) using different variable selection methods

(a) 全谱段 PLS (b) BiPLS (c) GA-PLS (d) CARS-PLS

方根误差为最优,分别为 0.94 和 0.42%,样品在运动状态下由位置、尺寸、光强浮动以及杂散光等引入

的噪声得到了较好的消除,并获得了满意的预测精度。

参 考 文 献

- 1 朱伟兴,江辉,陈全胜,等. 梨可溶性固形物含量 NIR 与变量筛选无损检测[J]. 农业机械学报,2010,41(10): 129~133.
Zhu Weixing, Jiang Hui, Chen Quansheng, et al. Measurement of soluble solids content in pear by FT-NIR spectroscopy and variable selection[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2010, 41(10): 129~133. (in Chinese)
- 2 McGlone V A, Martinsen P J. Online detection of brownheart in Braeburn apples using near infrared transmission measurements [J]. Postharvest Biology and Technology, 2005, 37(2): 142~151.
- 3 黄星奕,钱媚,徐富斌,等. 基于机器视觉和近红外光谱技术的杏仁品质无损检测[J]. 农业工程学报,2012,28(7):260~265.
Huang Xingyi, Qian Mei, Xu Fubin, et al. Nondestructive detection of dried apricots quality based on machine vision and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy technology[J]. Transactions of the CSAE, 2012, 28(7): 260~265. (in Chinese)
- 4 洪涯,洪添胜,代芬,等. 连续投影算法在砂糖橘总酸无损检测中的应用[J]. 农业工程学报,2010,26(2):380~384.
Hong Ya, Hong Tiansheng, Dai Fen, et al. Successive projections algorithm for variable selection in nondestructive measurement of citrus total acidity[J]. Transactions of the CSAE, 2010, 26(2): 380~384. (in Chinese)
- 5 Shenderoy C, Shmulevich I, Alchanatis V, et al. NIRs detection of moldy core in apples[J]. Food and Bioprocess Technology, 2010, 3(1): 79~86.
- 6 Cayuela J A. Vis/NIR soluble solids prediction in intact oranges (*Citrus sinensis* L.) cv. Valencia Late by reflectance [J]. Postharvest Biology and Technology, 2008, 47(1): 75~80.
- 7 Liu Yande, Sun Xudong, Ouyang Aiguo. Nondestructive measurement of soluble solid content of navel orange fruit by visible-NIR spectrometric technique with PLSR and PCA-BPNN[J]. LWT-Food Science and Technology, 2010, 43(4): 602~607.
- 8 田海清,应义斌,徐惠荣,等. 运动西瓜可见/近红外光谱采集系统及品质检测试验研究[J]. 光谱学与光谱分析,2009,29(6):1536~1540.
Tian Haiqing, Ying Yibin, Xu Huirong, et al. Study on Vis/NIR spectra detecting system for watermelons and quality predicting in motion[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(6): 1536~1540. (in Chinese)
- 9 代芬,洪添胜,岳学军,等. 砂糖橘可溶性总糖可见近红外光谱无损检测[J]. 农业机械学报,2011,42(4):133~138.
Dai Fen, Hong Tiansheng, Yue Xuejun, et al. Nondestructive examination of sugar content of intact 'Shatangju' with visible-near infrared spectroscopy based on variables selection[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2011, 42(4): 133~138. (in Chinese)
- 10 郝勇,孙旭东,高荣杰,等. 基于可见/近红外光谱与 SIMCA 和 PLS-DA 的脐橙品种识别[J]. 农业工程学报,2010,26(12):373~377.

- Hao Yong, Sun Xudong, Gao Rongjie, et al. Application of visible and near infrared spectroscopy to identification of navel orange varieties using SIMCA and PLS-DA methods[J]. Transactions of the CSAE, 2010, 26(12): 373 ~ 377. (in Chinese)
- 11 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 Yande, Peng Yanying, Gao Rongjie, et al. Online detection of soluble solids content and size of crystal pear based on LEDs light source-detector[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2010, 26(11): 338 ~ 343. (in Chinese)
- 12 Fan Guoqiang, Zha Jianwen, Du Ran, et al. Determination of soluble solids and firmness of apples by Vis/NIR transmittance [J]. Journal of Food Engineering, 2009, 93(4): 416 ~ 420.
- 13 孙通,应义斌,刘魁武,等. 梨可溶性固形物含量的在线近红外光谱检测[J]. 光谱学与光谱分析,2008,28(11):2 536 ~ 2 539.
- Sun Tong, Ying Yibin, Liu Kuiwu, et al. Online detection of soluble solids content of pear by near infrared transmission spectrum[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(11): 2 536 ~ 2 539. (in Chinese)
- 14 Natalia S, Eleuterio A, Santiago A B, et al. Visible/near infrared-partial least-squares analysis of Brix in sugar cane juice: a test field for variable selection methods[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2010, 102(2): 100 ~ 109.
- 15 李桂峰,赵国建,王向东,等. 苹果质地品质近红外无损检测和指纹分析[J]. 农业工程学报,2008,24(6):169 ~ 173.
- Li Guifeng, Zhao Guojian, Wang Xiangdong, et al. Nondestructive measurement and fingerprint analysis of apple texture quality based on NIR spectra[J]. Transactions of the CSAE, 2008, 24(6): 169 ~ 173. (in Chinese)
- 16 李晓丽,程术希,何勇. 基于漫反射光谱的初制绿茶含水率无损检测方法[J]. 农业工程学报,2010,26(5):195 ~ 201.
- Li Xiaoli, Cheng Shuxi, He Yong. Nondestructive measurement of moisture content of green tea in primary processing based on diffuse reflectance spectroscopy[J]. Transactions of the CSAE, 2010, 26(5): 195 ~ 201. (in Chinese)
- 17 吕强,何绍兰,刘斌,等. 班菲尔脐橙可溶性固形物近红外光谱特征谱区选择[J]. 农业机械学报,2012,43(增刊):211 ~ 214.
- Lü Qiang, He Shaolan, Liu Bin, et al. Selection of NIR efficient regions for total soluble solids of *Bamfield* navel orange[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2012, 43(Supp.): 211 ~ 214. (in Chinese)
- 18 Márcio J C, Alexandre M J, Maria F P, et al. Determining the quality of insulating oils using near infrared spectroscopy and wavelength selection[J]. Microchemical Journal, 2011, 98(2): 254 ~ 259.
- 19 Roman M B, Sergey V S. Variable selection in near-infrared spectroscopy: benchmarking of feature selection methods on biodiesel data[J]. Analytica Chimica Acta, 2011, 692(1): 63 ~ 72.
- 20 Chen Quansheng, Jiang Pei, Zhao Jiewen. Measurement of total flavone content in snow lotus (*Saussurea involucrate*) using near infrared spectroscopy combined with interval PLS and genetic algorithm [J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2010, 76(1): 50 ~ 55.
- 21 Ferrand M, Huquet B, Barbey S, et al. Determination of fatty acid profile in cow's milk using mid-infrared spectrometry: interest of applying a variable selection by genetic algorithms before a PLS regression [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2009, 106(2): 183 ~ 189.
- 22 张华秀,李晓宁,范伟,等. 近红外光谱结合 CARS 变量筛选方法用于液态奶中蛋白质与脂肪含量的测定[J]. 分析测试学报,2010,29(5):430 ~ 434.
- Zhang Huaxiu, Li Xiaoning, Fan Wei, et al. Determination of protein and fat in liquid milk by NIR combined with CARS variables screening method[J]. Journal of Instrumental Analysis, 2010, 29(5): 430 ~ 434. (in Chinese)
- 23 吴静珠,徐云. 基于 CARS-PLS 的食用油脂脂肪酸近红外定量分析模型优化[J]. 农业机械学报,2011,42(10):162 ~ 166.
- Wu Jingzhu, Xu Yun. NIR quantitative model optimization of fatty acid in edible oil based on CARS-PLS[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2011, 42(10): 162 ~ 166. (in Chinese)
- 24 Li Hongdong, Liang Yizeng, Xu Qingsong, et al. Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration[J]. Analytica Chimica Acta, 2009, 648(1): 77 ~ 84.
- 25 Pan Yuanyuan, Sun Xudong, Dong Xiaoling, et al. Nondestructive measuring soluble solid contents and weight of intact pears based on online near-infrared spectroscopy[C]//5th International Symposium on Advanced Optical Manufacturing and Testing, Dalian, 2010: 7 656.
- 26 Liu Yande, Pan Yuanyuan, Gao Rongjie, et al. On-line NIR predicting soluble solids content of intact pears combination with wavelet transform and support vector regression[C]//6th International Conference on Natural Computation, Yantai, 2010:461 ~ 465.
- 27 李鹏飞,王加华,曹楠宁,等. BiPLS 结合 GA 优选可见/近红外光谱 MLR 变量[J]. 光谱学与光谱分析,2009,29(10): 2 637 ~ 2 641.
- Li Pengfei, Wang Jiahua, Cao Nanning, et al. Selection of variables for MLR in Vis/NIR spectroscopy based on BiPLS combined with GA[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(10): 2 637 ~ 2 641. (in Chinese)