

基于近红外光谱与多品质指标的苹果出库评价模型研究

赵娟^{1,2} 沈懋生^{1,2} 浦育歌^{1,2} 陈昂^{1,2} 李豪^{1,2}

(1. 西北农林科技大学机械与工程学院, 陕西杨凌 712100; 2. 农业农村部农业物联网重点实验室, 陕西杨凌 712100)

摘要: 富士苹果在贮藏期后熟过程中其生理特性发生变化, 不适宜的贮藏会影响出库品质和售卖价格。为使贮藏期果实以较好的品质出库销售, 开展对贮藏后熟苹果品质模型研究, 并在此基础上对苹果出库进行评价和预测。采集了全贮藏期不同时间苹果样本的近红外光谱和品质指标(可溶性固形物含量、硬度和失重率), 分析贮藏期间果实漫反射光谱和品质指标变化规律, 基于波长 1 000 ~ 2 400 nm 范围内的漫反射光谱结合预处理和特征波长提取方法, 建立贮藏期苹果品质的偏最小二乘(PLS)和带有反馈的非线性自回归(NARX)预测模型, 根据行业标准确定苹果出库品质判断依据, 采用基于熵权的 TOPSIS 法对果实出库品质进行综合评价, 实现 PLS 对品质得分和 NARX 对多品质指标的预测。结果表明, 在预测 SSC 含量、硬度和失重率时, 最优模型分别为 CARS-SPA-PLS、CARS-NARX 和 SPA-NARX, 相关系数分别为 0.914、0.796 和 0.918, 均方根误差分别为 0.511°Brix、0.475 kg/cm² 和 0.682%; 在预测品质得分时, PLS 模型的相关系数与均方根误差分别为 0.896 和 0.043 4, NARX 多输出模型的相关系数分别为 0.794、0.785 和 0.905, 均方根误差分别为 0.308°Brix、0.492 kg/cm² 和 0.714%。应用近红外光谱技术能对果实贮藏品质监测和出库品质筛选, 可为高效贮藏管理技术提供方法。

关键词: 苹果; 近红外光谱; 气调贮藏期; 非线性自回归; 综合评价

中图分类号: S123; O657.33 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2023)02-0386-10 OSID: 

Out-of-warehouse Evaluation and Prediction Model of Apple Based on Near-infrared Spectroscopy Combined with Multiple Quality Indexes

ZHAO Juan^{1,2} SHEN Maosheng^{1,2} PU Yuge^{1,2} CHEN Ang^{1,2} LI Hao^{1,2}

(1. College of Mechanical and Electronic Engineering, Northwest A&F University, Yangling, Shaanxi 712100, China
2. Key Laboratory of Agricultural Internet of Things, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Yangling, Shaanxi 712100, China)

Abstract: The physiological characteristics of Fuji apples change during the post-ripening process of storage. If the storage time is too short, the best edible quality cannot be achieved. Excessive storage will seriously reduce the quality, then affects the quality of out-of-warehouse and the selling price. In order to make the fruits during the storage period with better quality for sale, the study on the quality prediction model of apple during storage was carried out, and on this basis, the out-of-warehouse quality of apple was evaluated and predicted. The near-infrared spectrum and quality indexes (soluble solid content (SSC), hardness and weight loss rate) of apple at different times during the whole storage period were collected. The variation rule of fruit diffuse reflectance spectrum and quality index during storage was analyzed. Partial least squares (PLS) and nonlinear autoregressive with external input (NARX) prediction model for apple quality during storage was established based on the diffuse reflectance spectrum in the wavelength range of 1 000 ~ 2 400 nm, combined with pretreatment and feature wavelength extraction. According to apple industry standards, the judgment basis of apple out-of-warehouse quality was determined, and the TOPSIS method based on entropy weight was used to comprehensively evaluate the fruit out-of-warehouse quality, and realize the prediction of the quality score by PLS and the prediction of multiple quality indexes by NARX. The results showed that when predicting SSC, hardness and weight loss rate, the optimal models were CARS-SPA-PLS, CARS-NARX and SPA-NARX, respectively, the correlation coefficients were 0.914, 0.796 and 0.918, and the root mean square errors were 0.511°Brix, 0.475 kg/cm² and 0.682%. When predicting quality scores, the correlation coefficient and root mean

square error of the PLS model were 0.896 and 0.043 4, respectively, the correlation coefficient of the NARX multi-output model were 0.794, 0.785 and 0.905, and the root mean square errors were 0.308° Brix, 0.492 kg/cm² and 0.714%. The application of near-infrared spectroscopy technology can realize the detection of fruit storage quality and the screening of quality of out-of-warehouse, and the research result can provide a method for efficient storage management technology.

Key words: apple; near infrared spectroscopy; controlled atmosphere storage; nonlinear autoregression; comprehensive assessment

0 引言

我国是苹果种植面积最大、产量最高的国家。为延长果实保质期,采后苹果大部分需要进行贮藏^[1]。苹果的可溶性固形物(Soluble solids contents,SSC)含量和硬度是决定消费者喜好的最重要属性^[2],然而在长期贮藏期间,苹果的SSC含量和硬度的变化(硬度下降,SSC含量先增加后减少)会影响其食用价值,过度贮藏会造成出库品质不佳,影响其经济价值^[3]。为使后熟果实以较好品质销售,保证经济效益,有必要对贮藏期果实品质进行实时监测,基于品质对果实出库进行评价预测,对保障果实品质和提高贮藏管理水平具有重要意义。

近红外光谱技术通过透射或者反射光谱特性反映内部组织的物理或化学信息^[4-5],具有快速、易于操作和无损特点,广泛地应用于水果品质无损检测领域^[6-7]。许多学者使用近红外光谱技术对贮藏期苹果品质进行了深入研究,BEGHI等^[8]评估可见-近红外光谱对监测长期储藏期苹果的适用性,采集波长600~1200nm范围光谱并依据SSC含量对金冠和红冠两种苹果进行分类,研究表明近红外光谱技术能够预测贮藏期苹果内部化学组分。NYASORDZI等^[9]利用 I_{AD} 指数(波长670nm和720nm的吸收差异指数)测量3个苹果品种的品质属性,发现在收获时和贮藏时测量的 I_{AD} 指数与苹果的SSC含量、TA含量、硬度有关,并用于对收获时或贮藏时果实分类,但是 I_{AD} 指数与硬度的决定系数较小($R^2=0.51$),均方根误差较大。GIOVANELLI等^[10]使用FT-NIR系统采集波长800~2700nm范围内的漫反射光谱,建立PLS模型对贮藏期的Golden Delicious苹果的干物质含量、SSC含量、颜色值和硬度进行预测,SSC含量预测模型的均方根误差为0.40°Brix。GUO等^[11]采用便携式近红外透射光谱结合温度补偿法对苹果的贮藏品质进行预测,但是贮藏时间较短,约为53d。匡立学等^[12]应用近红外透射光谱建立PLS模型对贮藏期寒富苹果的SSC含量进行预测,但是仅选取了贮藏期4个时间节点,贮藏间隔较长。李光辉等^[13]采集了

5个不同贮藏时间2个品种苹果的波长范围为840~2500nm的光谱,用偏最小二乘法建立2个品种苹果的TA含量、pH值和SSC含量预测模型,但是贮藏时间为120d,与实际更长的贮藏时间不符。由研究现状可以看出,现有研究大多使用冷藏环境并且贮藏时间较短,不符合当前苹果长达半年甚至更久的贮藏时间,研究使用的模型大多为PLS等线性模型,关于贮藏期非线性模型的研究报道较少。

针对上述问题,本文以富士苹果为研究对象,采集果实7个月气调贮藏期间,波长1000~2400nm范围内的光谱数据与品质指标(SSC含量、硬度和果实失重率),分析贮藏期间果实光谱特性和品质的变化,基于全贮藏期的光谱,建立线性PLS模型和非线性NARX模型对苹果气调贮藏期品质进行无损预测,最后根据行业标准确定苹果出库判断依据,并建立出库品质评价与预测模型,以期为提高苹果产业管理水平与合理规划库存提供理论依据与方法。

1 评价模型构建

1.1 实验材料

于2020年10月在陕西省扶风县西权村某果园共采摘350个富士苹果,分为50个0时刻样本与300个贮藏期样本,挑选大小一致、无磕碰伤害和病虫害的样本并于当天放入气调保鲜箱(GQ-300型,广州标际有限公司)进行贮藏,气调箱环境参数设置为:97% N₂、2% O₂、1% CO₂,箱内温度1℃,相对湿度85%^[14],0时刻样本于当天采摘后进行实验数据采集,贮藏期实验从10月15日开始共持续7个月,每隔7d取出10个样本进行一次实验,待样本恢复到室温后进行实验数据采集,共进行30次实验。

1.2 实验方法

1.2.1 光谱数据获取

使用NIR Quest光谱仪(Ocean Optics,美国)采集光谱数据,波长范围为900~2500nm,共512个波长点,积分时间为65ms,平滑次数为5,平均次数为10,实验在室温下进行,测量前将光谱仪预热

30 min,光谱数据由软件 OceanView (Ocean Optics, 美国) 获得,测量时沿样本赤道以 120° 间隔测量 3 次取平均值作为最终光谱数据值。使用 Matlab 2019a (MathWorks, 美国) 处理光谱数据并进行后续建模分析。

1.2.2 理化指标测量

对样本标号并使用电子天平 (T500Y 型, 常熟双杰测试仪器厂) 称量后进行贮藏,每次实验测量光谱数据前,再次测量实验样本的质量,由此得到果实的失重率,随后使用质地分析仪 (TA.XT Express 型, Stable Micro Systems, 英国) 测量果肉硬度,测量探头直径为 2 mm (P/2), 穿刺深度为 10 mm, 穿刺速度为 1 mm/s, 测量前对质构仪进行力量和高度校准。

根据 GB/T 12295—1990 测量苹果的 SSC 含量,测量时要求沿着半个苹果的赤道部分获取 3 个 $1.0\text{ cm} \times 1.0\text{ cm} \times 1.0\text{ cm}$ 尺寸的苹果切块,挤压榨汁后滴入便携式数字折光仪 (PAL-BX/ACID5 型, ATAGO, 日本), 得到 SSC 含量的参考值。同时,使用色差仪 (NH310 型, 深圳三恩时科技公司) 测量果皮颜色指标,包括 L^* 、 a^* 、 b^* 、 c^* 和 h^* , 使用酸度计 (GMK-835F 型 (apple), G-WON, 韩国) 测量可滴定酸 (Titratable acid, TA) 含量,每个样本测量 3 次,将测量结果取平均值作为最终品质指标的参考值。

1.3 数据分析与建模方法

1.3.1 样本划分方法

SPXY 算法 (Sample set portion based on joint x-y distance)^[15] 是基于 K-S 算法同时考虑光谱特征与理化指标的样本选择方法,有效提升了模型预测能力,使用该方法时需要准确的光谱与理化测量值。

1.3.2 光谱预处理方法

为了消除光谱仪产生的噪声、补偿颗粒分布不均匀及颗粒尺寸不同产生的散射影响,尽可能突出光谱有效信息,提高信噪比,使用 S-G (Savitzky-Golay)^[16] 平滑和多元散射校正 (Multiplicative scatter correction, MSC)^[17] 对光谱数据进行预处理。

1.3.3 光谱特征波长提取方法

对特征波长进行提取可以减少建模变量个数,提高模型运行速度。本研究使用竞争自适应重加权采样 (Competitive adaptive reweighted sampling, CARS)^[18] 法和连续投影算法 (Successive projections algorithm, SPA)^[19] 进行特征波长提取。CARS 法通过多次采样运行选择一些变量子集,然后选择交叉验证均方根误差最低的子集作为最佳波长组合。SPA 是一种多变量校准的前向选择方法,用于获得

所选波长中拥有最小共线性的波长,其原理为新选择的变量是所有剩余变量中在前一个选定变量的正交子空间上拥有最大投影值的变量。

1.3.4 建模方法

偏最小二乘法 (Partial least square, PLS)^[20] 是一种基于因子分析的多元校准方法,可以同时考虑理化值和光谱之间的基本关系。原始光谱数据经历线性变换后的新变量称为隐形变量,隐形变量对模型结果有重要影响,普遍采用交互验证法来获取。

非线性自回归模型 (Nonlinear autoregressive with external input, NARX)^[21] 是具有外部输入和记忆功能的动态神经网络。该网络的输出与过去的输入以及过去的输出有关, NARX 不仅模拟了时间序列,还描述了非线性关系, NARX 对非平稳或非线性时间序列有很好的预测能力。

1.3.5 模型评价参数

使用校正集均方根误差 (Root mean square error of calibration set, RMSEC)、预测集均方根误差 (Root mean square error of prediction set, RMSEP)、校正集相关系数 (Correlation coefficient of calibration set, R_c) 和预测集相关系数 (Correlation coefficient of prediction set, R_p) 来评估校准模型。模型的 R_c 和 R_p 越高并且 RMSEC、RMSEP 越低时,说明模型的性能越好^[22]。

1.3.6 综合评价方法

基于熵权的 TOPSIS (Technique for order preference by similarity to an ideal solution) 法^[23] 在工程、经济及农业领域应用广泛^[24], 是一种常用的综合评价方法, 简称为优劣解距离法, 能充分利用原始数据的信息, 其结果能精确地反映各评价方案之间的差距, 是一种高效率的多目标决策方法, 本研究采用基于熵权的 TOPSIS 法对苹果出库品质进行评价。

2 结果与分析

2.1 苹果贮藏期光谱特性

采集波长 1 000 ~ 2 400 nm 范围内不同贮藏时间苹果的平均漫反射光谱曲线如图 1 所示。在波长 1 100 ~ 1 800 nm 范围处反射率下降, 在波长 1 180、1 450、1 940 nm 处存在明显的吸收峰, 其中在波长 1 180 nm 处吸收峰是含有 C—H 键的官能团吸收形成; 波长 1 450 nm 和 1 940 nm 处吸收峰是 O—H 键伸缩、弯曲振动形成^[25]。由图 1 可知, 不同贮藏时间的苹果光谱总体趋势一致, 但反射率存在明显差异。在波长 1 100 ~ 1 300 nm、1 550 ~ 1 800 nm 和 2 200 ~ 2 250 nm 处, 贮藏初期果实光谱反射率基

本一致,在贮藏中后期果实光谱反射率明显低于贮藏初期,随着贮藏时间延长,光谱反射率明显下降,这说明贮藏期间样本内部化学物质基本相同,但是含量存在差异,光谱反射率的差异为回归预测模型的建立提供了前提^[25]。

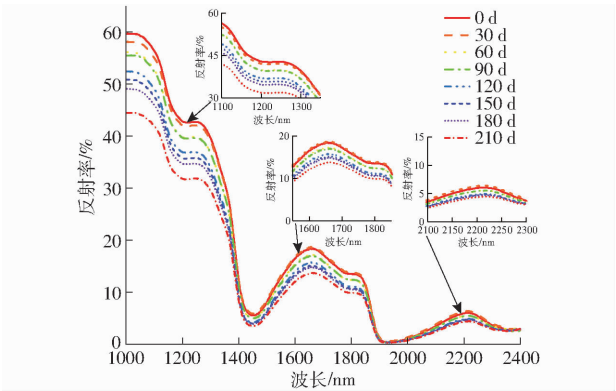


图 1 不同贮藏时间苹果漫反射光谱曲线
Fig. 1 Diffuse reflectance spectra of apples at different storage times

2.2 苹果贮藏期品质指标

测量不同贮藏时间苹果的平均品质指标结果如表 1 所示(表中数据形式为平均值 ± 标准差)。随着贮藏时间的延长,果实的 SSC 含量呈现先上升后下降的趋势,硬度呈现逐渐下降的趋势,失重率逐渐上升。苹果在贮藏前期,内部淀粉等糖类物质分解,转化为可溶性碳水化合物^[26],在贮藏后期糖被呼吸作用消耗,使 SSC 含量呈现逐渐上升到峰值后缓慢下降的趋势。苹果发育阶段的硬度较大,当贮藏时间变长,可溶性果胶会增加,果实硬度开始下降,淀粉水解会导致细胞内膨压下降,果实成熟软化,硬度下降^[27]。果实采摘后水分含量高,细胞汁液饱满,随着脱离母体的时间变长,失去母体和土壤的养分和水分供给,持续的蒸腾作用使细胞膨压降低,组织水分丢失得不到补充,果实出现皱缩萎蔫,呼吸作用使细胞内贮藏物质不断消耗,果实失重的主要原因为蒸腾作用失水^[28],失重率是评定果实鲜度基础的指标,能够直接影响果实出库后的货架期,气调贮藏目的是尽

表 1 不同贮藏时间苹果品质指标平均测量结果

Tab. 1 Average measurement results of apple quality indexes at different storage times

时间/d	SSC 含量/°Brix	硬度/(kg·cm ⁻²)	失重率/%
0	10.28 ± 1.07	8.71 ± 0.66	0 ± 0
40	11.89 ± 1.41	8.33 ± 0.93	0.58 ± 0.07
80	12.72 ± 1.04	7.56 ± 1.09	1.26 ± 0.25
120	13.73 ± 1.17	7.45 ± 0.82	2.16 ± 0.66
160	12.90 ± 0.52	7.14 ± 0.63	3.04 ± 0.52
210	12.63 ± 0.87	6.48 ± 0.78	5.02 ± 0.89

可能延长果实贮藏时间,并且保证果实新鲜程度,从而延长果实的货架期。因此,研究果实的失重率能间接反映水分的丢失程度。

2.3 苹果贮藏期表型变化与品质指标相关性

采集不同贮藏时间果实的表型如图 2 所示。随着贮藏时间的增加,果皮的色泽由贮藏前期着色较少较浅、大面积着色,到贮藏中后期的鲜红色、紫红色等不一样的色泽。果实的生理活动导致内部多种酶含量的变化,引起色素含量的变化,果皮中花青苷、类胡萝卜素和叶绿素决定了最终的果皮色泽变化^[28],果实从初期的条红逐渐变为鲜红色,并且在贮藏后期会出现果皮褶皱失水现象,与失重率上升相对应。

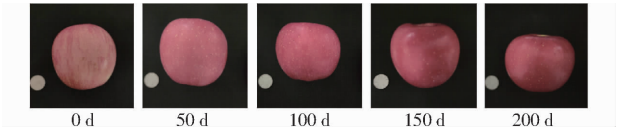


图 2 不同贮藏时间苹果表型变化
Fig. 2 Phenotypic changes of apples at different storage times

对贮藏期重要品质指标进行可视化相关分析,得到相关系数矩阵如图 3 所示,SSC 含量与其他指标无明显相关性,相关系数绝对值均小于 0.2,TA 含量与 b^* 、失重率 $loss$ 呈负相关,硬度 F 与 SSC 含量、 h^* 、失重率 $loss$ 呈负相关,与 TA 含量呈正相关, L^* 与 a^* 、 c^* 明显负相关,与 b^* 、 h^* 明显正相关。苹果贮藏期生理变化复杂且指标种类多,没有必要将所有指标建立预测模型,经过可视化分析并考虑实际生产情况,颜色指标一般作为参考,且在贮藏期变化不明显,TA 含量在整个贮藏期均小于 0.2%,且变化幅度小,因此后续建模过程中不使用颜色指标和 TA 含量建模,经过上述分析,拟选取 SSC 含量、

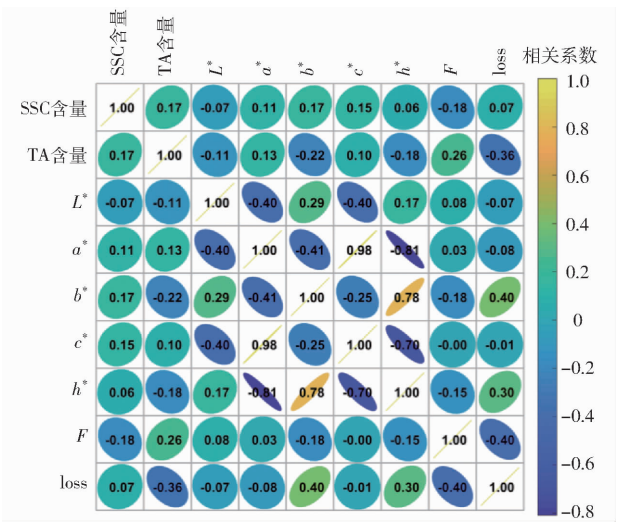


图 3 相关系数矩阵
Fig. 3 Correlation coefficient matrix

硬度和失重率建立品质预测模型。

2.4 品质预测模型建立与对比

2.4.1 样本划分与光谱数据预处理

为实现对贮藏期果实品质进行实时监控,使用300个全贮藏期样本建立品质预测模型,获取样本

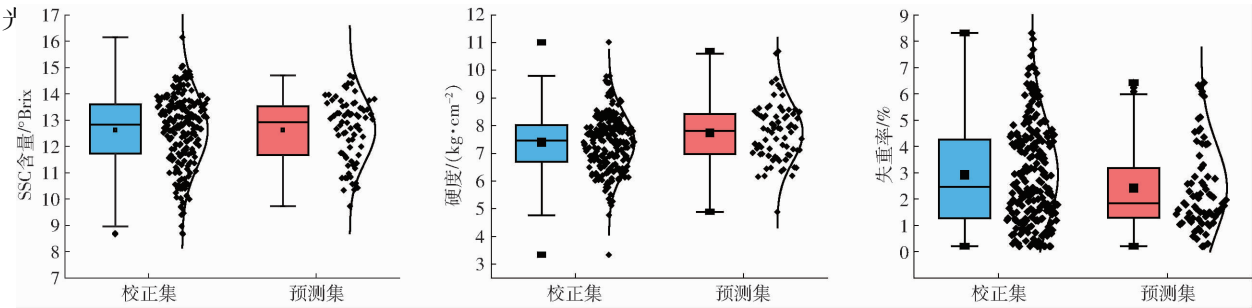


图4 样本集划分结果
Fig.4 Sample set division results

数据进行预处理。

2.4.2 特征波长提取与 PLS 预测模型建立

为建立快速、准确的预测模型,使用 CARS、SPA 和 CARS-SPA 方法对光谱数据进行特征波长提取,挑选出共线性最小、冗余信息最少且包含主要有效信息的波长,不同品质指标特征波长提取结果如

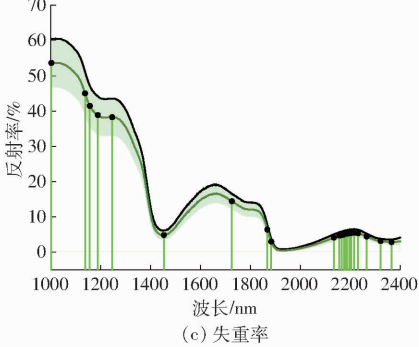
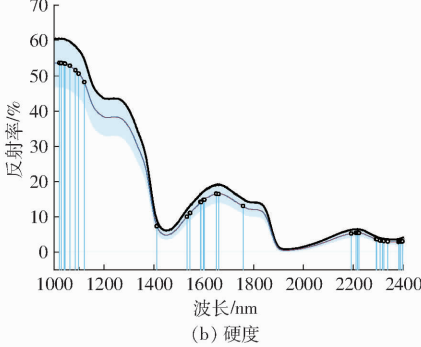
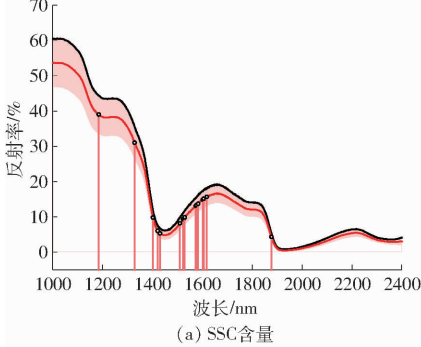


图5 特征波长提取结果
Fig.5 Feature wavelength extraction results

划分为校正集和预测集,校正集个数为 225,预测集个数为 75,不同指标的样本集划分结果如图 4 所示,SSC 含量、硬度和失重率的数据范围较宽,表明数据具有一定的代表性,样本划分较为合理,为了消除噪声和背景信息,使用 S-G 平滑和 MSC 对光谱

图 5 所示,其中阴影部分为误差带,以样本光谱数据作为输入,以内部品质指标(SSC 含量、硬度和失重率)作为预测对象,分别建立针对 SSC 含量、硬度和失重率的 PLS 预测模型,表 2 为不同特征波长提取方式下 PLS 模型预测结果。

由表 2 可知,在预测 SSC 含量时,CARS-SPA

表 2 不同特征波长提取方法下 PLS 模型预测结果

Tab.2 PLS model prediction results by different feature wavelength extraction methods						
品质指标	特征波长提取方法	变量数	R_c	RMSEC	R_p	RMSEP
SSC 含量	全波长	512	0.938	0.472° Brix	0.911	0.509° Brix
	CARS	16	0.919	0.540° Brix	0.912	0.512° Brix
	SPA	22	0.878	0.657° Brix	0.821	0.695° Brix
	CARS-SPA	12	0.919	0.541° Brix	0.914	0.511° Brix
硬度	全波长	512	0.842	0.552 kg/cm ²	0.607	0.882 kg/cm ²
	CARS	32	0.761	0.664 kg/cm ²	0.648	0.831 kg/cm ²
	SPA	18	0.668	0.761 kg/cm ²	0.633	0.839 kg/cm ²
	CARS-SPA	12	0.663	0.791 kg/cm ²	0.634	0.813 kg/cm ²
失重率	全波长	512	0.910	0.743%	0.907	0.835%
	CARS	10	0.877	0.850%	0.856	1.025%
	SPA	22	0.873	0.864%	0.872	0.968%
	CARS-SPA	8	0.870	0.871%	0.852	1.038%

提取的特征波长数量最少且精度最好,特征波长个数为 12 个,仅占全波长数量的 2.3%,在使用 CARS

的基础上再使用 SPA 对精度的提升并不明显,这是由于 CARS 法的提取原理是基于模型精度最优,而

SPA 是基于各变量的重复性最小^[29]，而单独使用 SPA 时会使模型精度从 0.9 下降至 0.8；在预测硬度时，发现使用 PLS 预测贮藏期果实硬度模型的精度要明显低于 SSC 含量预测模型，以往研究表明在利用光谱技术预测苹果硬度的结果存在多样性^[10-11]，贮藏期间苹果细胞结构的逐渐变化使果肉硬度和漫反射光谱反射率降低^[30]；在预测失重率时，发现模型的 R_p 结果较好，但是 RMSEP 较高，使用全波长的建模效果最好，但是模型的变量数过多，使用 SPA 的模型精度次之，提取变量个数为 22 个，占全波长数量的 4.3%，CARS 和 CARS-SPA 的模型精度接近，提取的波长数量更少。

基于 PLS 算法建立的 SSC 含量和失重率模型预测精度较好，但是 RMSEP 较高，硬度预测模型的精度需要提高。由于在长期贮藏环境下，果实的品质指标（如 SSC 含量、硬度和含水率）与光谱特性发生了非线性变化，线性模型无法消除贮藏时间对模型的影响，PLS 模型没有将过去的时间信息重新输入到当前时间进行反馈校正，而时序模型将贮藏期视为连续时间序列，将过去的时间信息进行反馈修正，能更好地削弱时间对模型的影响，降低预测误差。

2.4.3 时间序列分析与光谱信息扩充

与传统时间序列相比，苹果贮藏过程也是一种时间序列。贮藏期间果实的光谱和品质会发生变化，苹果当前时间节点的光谱和品质由上一时间节点的光谱和品质决定；贮藏期苹果受多种因素的影响，如温度、相对湿度、空气成分、样本自身变化等，贮藏过程具有随机性，因此，果实贮藏具有时间序列变化的延续性与随机性特点。为了建立完整的时序模型，样本的初始状态至关重要，使用 0 时刻 50 个样本与贮藏期 300 个样本建立时序模型，将 0 时刻样本漫反射光谱数据和品质指标进行平均作为初始状态（ T_0 时刻），将贮藏期 30 次实验样本漫反射光谱数据和品质指标每次进行平均作为贮藏期状态（ $T_1 \sim T_{30}$ 时刻），共计 31 个贮藏时间节点。

考虑到苹果贮藏期是一个长期保鲜和“休眠”过程，贮藏期间苹果本身品质变化不明显，高频率的测量可能会由于样本的问题产生误差，因此，本研究中每隔 7 d 的时间间隔合理，为了增强模型的适用性，对 31 个时间节点的光谱进行二维插值，插值前、后光谱曲线如图 6 所示，插值间隔为 4 d，即用 31 个时间节点的光谱插值生成每 2 个相邻节点间的光谱以扩增更多贮藏期的信息，共生成 30 个时间节点，插值结果的光谱数据均在两相邻节点间，能够有效表示未测量时间的样本贮藏状态。

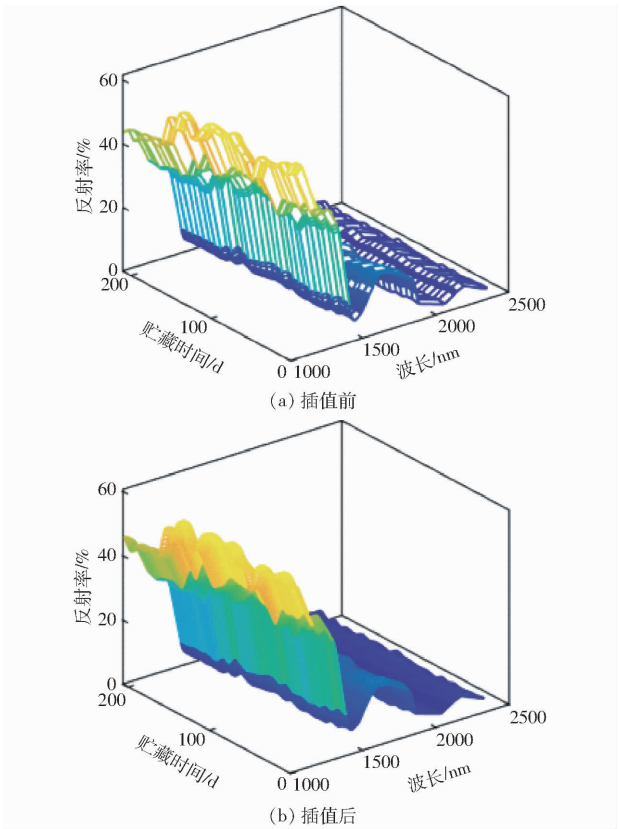


图 6 插值前、后光谱曲线

Fig. 6 Spectra before and after interpolation

2.4.4 非线性自回归预测模型建立

由于全光谱数据作为输入的预测模型运行速度极慢，无法快速预测果实品质，因此在保证模型精度前提下对光谱数据进行特征波长提取，在预测 SSC 含量、硬度和失重率时分别使用经 CARS-SPA、CARS 和 SPA 提取特征波长后的光谱数据作为输入，以品质指标作为输出，考虑到苹果贮藏期品质变化缓慢，故确定延迟阶数 $d = 3$ ，隐层神经元个数设置为 10，网络训练函数设置为“Levenberg-Marquardt”，样本划分函数设置为“divideint”，校正集、预测集和验证集的划分比例分别为 0.7、0.15 和 0.15，误差函数设置为“mse”，设置完成后建立非线性自回归模型，由于相同的网络结构计算误差有一定的差异，为了降低误差对网络测试 50 次，50 次 NARX 网络建模结果和平均值如图 7 和表 3 所示。由图 7 可知，SSC 含量与硬度预测模型的 R_p 和 RMESP 较为稳定，失重率预测模型的 RMSEP 变化范围较大，但基本都低于 1%。

由表 3 可知，NARX 在预测 SSC 含量时精度比 PLS 模型降低 0.088° Brix，但是模型 RMSEP 降低 0.220° Brix，下降 43.0%，明显低于 PLS 模型，在预测硬度和失重率时模型的精度与 PLS 模型相比均有所提升， R_p 分别增加 0.163 和 0.046，RMSEP 分别减少 0.338 kg/cm² 和 0.286 个百分点，分别下降

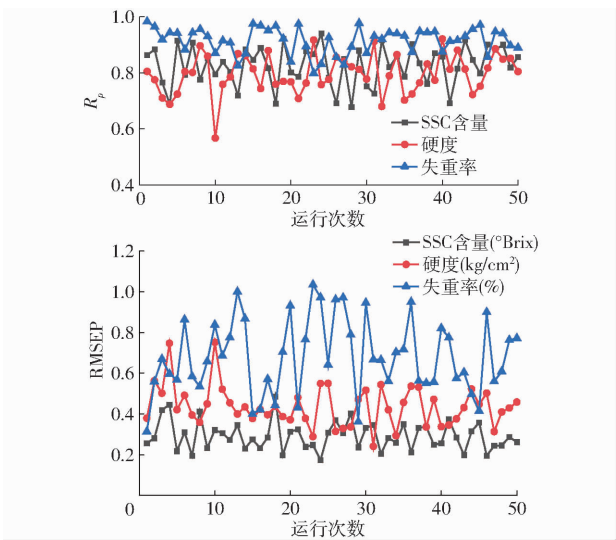


图 7 模型运行 50 次结果
Fig. 7 Results of model run 50 times

表 3 NARX 模型预测结果

Tab.3 Prediction results of NARX model

品质指标	特征波长 提取方法	变量数	校正集		预测集		验证集	
			R_c	RMSEC	R_p	RMSEP	R_e	RMSEV
SSC 含量	CARS-SPA	12	0.912	0.216°Brix	0.826	0.291°Brix	0.869	0.271°Brix
硬度	CARS	32	0.828	0.443 kg/cm ²	0.796	0.475 kg/cm ²	0.815	0.456 kg/cm ²
失重率	SPA	38	0.932	0.613%	0.918	0.682%	0.923	0.620%

据富士系苹果贮藏保鲜技术规程 (DB65/T 3457—2012)^[32] 中的贮藏期间的管理规程,富士系苹果出库时硬度不得低于 6.5 kg/cm²,富士系苹果的气调库贮藏寿命一般在 240 d 左右,贮藏期不能影响苹果的销售品质,必须定期抽检。失重率是评定果实鲜度基础的指标,能够直接影响果实出库后的货架期,气调贮藏目的是尽可能延长果实贮藏时间,并且保证果实新鲜程度,从而延长果实的货架期。因此,本研究定义的出库品质标准为硬度不低于 6.5 kg/cm²,失重率不超过 5% 作为最低参考值,选取苹果在贮藏期间 SSC 含量不低于 12.5°Brix 的区间作为最佳出库品质区间。研究步骤如图 8 所示。

2.5.2 苹果品质指标权重确定

仅凭一种品质指标无法准确评价果实的品质,果实的出库品质由多个指标共同决定,但是各品质指标的重要程度不同,因此出库品质评价的关键在于确定各单一指标的权重,本研究采用客观赋权法对出库重要品质进行赋权,对选取的苹果品质指标真实数据进行向量归一化以消除量纲影响(均视为正向指标),建立指标水平矩阵并采用熵权法计算各指标的客观权重,得到均衡的指标权重,结果表明熵权法确定的权重由大到小依次为 SSC 含量、失重率和硬度,分别为 0.382 0、0.321 4 和 0.296 6。

41.5% 和 29.5%。

2.5 基于品质指标的苹果出库评价与预测模型建立

2.5.1 苹果出库品质评价

苹果在采摘时往往没有达到最好的品质,在贮藏期后熟过程期间,果实发生生理特性变化达到最佳食用品质后会进行衰老过程,为使贮藏期果实做到优质优价销售,需要在气调贮藏期定期抽检监测果实的品质,根据品质指标对后熟果实进行出库判断。

根据红富士苹果中关于富士苹果理化要求 (NY/T 1075—2006)^[31],特级、一级和二级苹果的果实硬度都在 6.5 kg/cm² 以上,SSC 含量要求为 12.5°Brix 以上,此时苹果硬度和 SSC 含量为最低标准,且根据该行业标准所述,理化检验结果可以在感官评价无法判断内部品质时作为品质判断依据。根

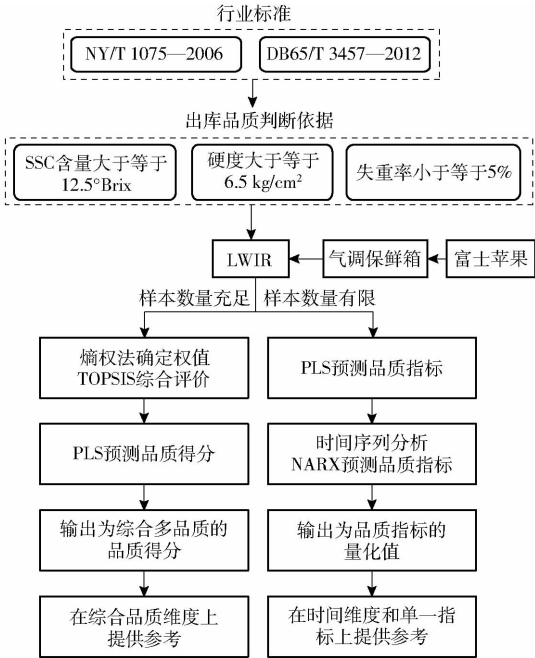


图 8 研究步骤图
Fig. 8 Research steps

2.5.3 基于 TOPSIS 法的苹果出库预测模型

根据归一化矩阵使用 TOPSIS 法求得正理想解和负理想解,结合熵权法计算的权重,最终计算出样本指标值与正负理想解的相对接近程度 C_i 并对品质得分进行排序^[23],其中 $0 < C_i < 1$,且越接近于 1,苹果出库品质越好,贮藏期样本品质得分频数直方

图如图 9 所示。

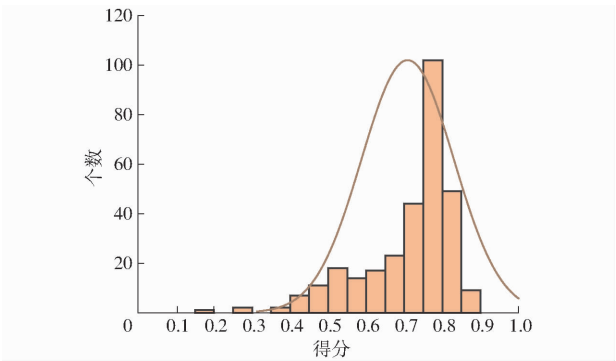


图 9 样本品质得分频数直方图

Fig. 9 Sample quality score frequency histogram

通过建立 PLS 模型实现了对贮藏期单一品质指标的预测,基于熵权法确定权重的 TOPSIS 法对出库品质进行了综合评价,为实现对出库综合品质进行无损预测,因此以光谱为输入,品质得分为输出,剔除极低的异常值,使用 S - G 平滑和 MSC 对光谱数据进行预处理,使用 CARS - SPA 对特征波长进行提取,建立 PLS 预测模型。模型预测结果如图 10 所示,品质得分考虑了 3 个出库重要品质指标表示出库综合品质状态,模型能够实现对出库品质得分的预测。

2.5.4 基于 NARX 的多品质预测模型建立

以往的预测模型大多为单输出,即每次只能预

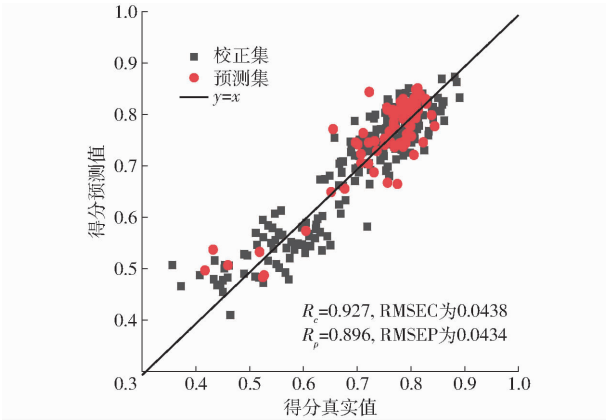


图 10 模型预测结果

Fig. 10 Model prediction result

测一个指标,为实现对贮藏期果实出库的精准快速预测,使用自回归神经网络建立出库品质多输出预测模型,使用 S - G 平滑和 MSC 对光谱进行预处理,提取 3 个指标特征波长共 66 个,以光谱数据为输入,3 个品质指标同时作为输出,通过模型预测样本贮藏期的多项指标,与 2.5.1 节出库判断依据进行对比来确定果实是否应该出库。表 4 为 NARX 多输出模型预测结果,可以看出多输出模型会出现精度低于单输出模型的情况,这是由于部分指标随贮藏时间不是单调变化的趋势,误差属于能接受的范围,通过直接预测品质指标与判断依据进行对比,为苹果精准出库提供方法。

表 4 NARX 多输出模型预测结果

Tab. 4 NARX multi-output model prediction results

指标类型	R_c	RMSEC	R_p	RMSEP	R_e	RMSEV
SSC 含量	0.896	0.256°Brix	0.794	0.308°Brix	0.842	0.290°Brix
硬度	0.821	0.458 kg/cm ²	0.785	0.492 kg/cm ²	0.817	0.485 kg/cm ²
失重率	0.922	0.633%	0.905	0.714%	0.911	0.660%

2.6 模型验证与结果比较

为了检验模型性能,于 2021 年 10 月在陕西省扶风县相同的果园采摘了 100 个样本放入气调贮藏箱中进行贮藏,贮藏环境与 2020 年实验环境相同,样本光谱和理化指标获取方法与 1.2 节相同,对贮藏期 PLS 品质预测模型、贮藏期 NARX 预测模型、基于 TOPSIS 法的苹果出库品质预测模型和 NARX 多输出品质预测模型进行验证,其中 NARX 模型运行 50 次取平均值,模型验证结果如表 5 所示,与 2020 年预测集数据进行验证的结果对比,模型对验证集的预测性能低于 2020 年的模型,主要原因是受季节因素和样本生物变异性的影响^[30],结果可以满足实际生产需求,后续的研究应考虑模型迁移和继续增加样本数以增强模型预测能力和稳定性。

对 PLS 和 NARX 模型进行比较,由表 2 可知,除预测失重率外,使用特征波长提取可以有效降低维度的同时提升模型的精度,NARX 模型考虑了贮

表 5 模型验证结果

Tab. 5 Model validation results

模型	指标类型	R_e	RMSEV
PLS 模型	SSC 含量	0.878	0.504°Brix
	硬度	0.604	0.851 kg/cm ²
	失重率	0.816	1.140%
NARX 模型	SSC 含量	0.809	0.317°Brix
	硬度	0.767	0.542 kg/cm ²
	失重率	0.906	0.728%
TOPSIS 评价模型	品质得分	0.817	0.064
NARX 多输出模型	SSC 含量	0.783	0.342°Brix
	硬度	0.772	0.550 kg/cm ²
	失重率	0.921	0.733%

藏时间对模型的影响,在预测 SSC 含量时的精度低于 PLS 模型,其余指标预测精度高于 PLS 模型,但是 PLS 模型的 RMSEP 均高于 NARX 模型。NARX 模型对于随贮藏时间单调变化的指标(如硬度和失重率)与 PLS 模型相比具有更好的预测优势,说明

NARX 模型将过去时间的光谱与品质指标作为反馈重新进行输入,与当前时间的输入光谱共同预测当前时间的品质指标,有效降低了 RMSEP。由表 4 可知,TOPSIS 评价模型的验证集精度降低,这是由于评价时选取的是同一批样本理化实测值,为提高模型的适用性,后续应该增加大量样本保证评价合理性。NARX 多输出模型的验证结果与 2020 年模型精度接近,通过直接预测品质指标能够有效减少二次预测的误差,为苹果精准出库提供方法。

3 结 论

- (1)富士苹果的光谱特性与品质指标在气调贮藏期会发生明显变化。光谱反射率随着贮藏时间的延长逐渐降低,贮藏期间果实的 SSC 含量呈现先上升后下降趋势,果肉硬度随时间逐渐下降,失重率逐渐上升。
- (2)应用化学计量法和非线性自回归网络能够实现

- 对贮藏期果实 SSC 含量、硬度和失重率进行预测。PLS 模型在预测 SSC 含量、硬度和失重率时,CARS-SPA、CARS 和 SPA 模型分别取得了最好的效果, R_p 分别为 0.914、0.648 和 0.872,RMSEP 分别为 0.511°Brix、0.831 kg/cm² 和 0.968%。NARX 模型的 R_p 分别为 0.826、0.796 和 0.918,RMSEP 分别为 0.291°Brix、0.475 kg/cm² 和 0.682%,能够有效降低模型 RMSEP,提升随时间单调变化指标的预测精度。
- (3)根据行业标准确定苹果出库品质判断依据,采用基于熵权的 TOPSIS 法对苹果出库综合品质进行评价,采用 PLS 对出库品质得分进行预测, R_p 与 RMSEP 分别为 0.896 2 和 0.043 4,并采用 NARX 模型对多品质指标同时输出,模型精度低于单输出模型。
- (4)对模型性能进行验证。NARX 模型能有效减弱时间对模型影响,对随时间单调变化的指标有较好的预测性能,TOPSIS 综合评价需要更多的样本数据进行支撑。本研究为贮藏期苹果品质无损检测和出库品质评价提供理论依据与方法。

参 考 文 献

[1] 莫润阳,王公正,刘丽丽. 苹果在储藏过程中物理特性的变化[J]. 西北农林科技大学学报(自然科学版), 2007, 35(10): 49-54.
MO Runyang, WANG Gongzheng, LIU Lili. Quality evaluation of the apple based on physics character[J]. Journal of Northwest A&F University (Natural Science Edition), 2007, 35(10): 49-54. (in Chinese)

[2] HARKER F R, GUNSON F A, JAEGER S R. The case for fruit quality: an interpretive review of consumer attitudes, and preferences for apples[J]. Postharvest Biology and Technology, 2003, 28(3): 333-347.

[3] JAN I, RAB A, SAJID M. Storage performance of apple cultivars harvested at different stages of maturity[J]. Journal of Animal and Plant Sciences, 2012, 22: 438-447.

[4] MOGOLLÓN M R, CONTRERAS C, DE FREITAS S T, et al. NIR spectral models for early detection of bitter pit in asymptomatic ‘Fuji’ apples[J]. Scientia Horticulturae, 2021, 280: 109945.

[5] TIAN S, ZHANG J, ZHANG Z X, et al. Effective modification through transmission Vis/NIR spectra affected by fruit size to improve the prediction of moldy apple core[J]. Infrared Physics & Technology, 2019, 100: 117-124.

[6] 田潇瑜,黄星奕,白竣文,等. 基于近红外光谱技术的紫薯贮藏期间花青素含量检测[J]. 农业机械学报, 2019, 50(2): 350-355.
TIAN Xiaoyu, HUANG Xingyi, BAI Junwen, et al. Detection of anthocyanin content of purple sweet potato during storage period based on near infrared spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2019, 50(2): 350-355. (in Chinese)

[7] 孙旭东,刘燕德,李轶凡,等. 鸭梨黑心病和可溶性固形物含量同时在线检测研究[J]. 农业机械学报, 2016, 47(1): 227-233.
SUN Xudong, LIU Yande, LI Yifan, et al. Simultaneous and online detection of blackheart and soluble solids content for ‘Yali’ pear by visible-near infrared transmittance spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2016, 47(1): 227-233. (in Chinese)

[8] BEGHI R, GIOVANELLI G, MALEGORI C, et al. Testing of a VIS-NIR system for the monitoring of long-term apple storage[J]. Food and Bioprocess Technology, 2014, 7(7): 2134-2143.

[9] NYASORDZI J, FRIEDMAN H, SCHMILOVITCH Z, et al. Utilizing the I_{AD} index to determine internal quality attributes of apples at harvest and after storage[J]. Postharvest Biology and Technology, 2013, 77: 80-86.

[10] GIOVANELLI G, SINELLI N, BEGHI R, et al. NIR spectroscopy for the optimization of postharvest apple management[J]. Postharvest Biology and Technology, 2014, 87: 13-20.

[11] GUO Z, WANG M, SHUJAT A, et al. Nondestructive monitoring storage quality of apples at different temperatures by near-infrared transmittance spectroscopy[J]. Food Science & Nutrition, 2020, 8(7): 3793-3805.

[12] 匡立学,裴继云,闫震,等. 样品尺寸、温度和贮藏期对寒富苹果近红外模型的影响[J]. 农产品质量与安全, 2019 (4): 36-40.
KUANG Lixue, NIE Jiyun, YAN Zhen, et al. Effects of sample size, temperature and storage period on near infrared model of Hanfu apple[J]. Quality and Safety of Agro-Products, 2019(4): 36-40. (in Chinese)

- [13] 李光辉, 任亚梅, 任小林, 等. 贮藏期内富士和粉红女士苹果品质的 FT-NIR 无损检测[J]. 食品科学, 2012, 33(8): 171-175.
LI Guanghui, REN Yamei, REN Xiaolin, et al. Non-destructive quality evaluation of Fuji and Pink Lady apples by FT-NIR during storage period[J]. Food Science, 2012, 33(8): 171-175. (in Chinese)
- [14] 任小林, 李倩倩. 苹果贮藏保鲜关键技术[J]. 保鲜与加工, 2013, 13(1): 1-8.
REN Xiaolin, LI Qianqian. The key technique of preservation of apples[J]. Storage and Process, 2013, 13(1): 1-8. (in Chinese)
- [15] 毛博慧, 孙红, 刘豪杰, 等. 基于正交变换与 SPXY 样本划分的冬小麦叶绿素诊断[J]. 农业机械学报, 2017, 48(增刊): 160-165.
MAO Bohui, SUN Hong, LIU Haojie, et al. Prediction of winter wheat chlorophyll content based on gram-schmidt and SPXY algorithm[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017, 48(Supp.): 160-165. (in Chinese)
- [16] SAVITZKY A, GOLAY M J. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures[J]. Analytical Chemistry, 1964, 36(8): 1627-1639.
- [17] RINNAN Å, BERG F V D, ENGELSEN S B. Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra[J]. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2009, 28(10): 1201-1222.
- [18] 刘燕德, 施宇, 蔡丽君, 等. 基于 CARS 算法的脐橙可溶性固形物近红外在线检测[J]. 农业机械学报, 2013, 44(9): 138-144.
LIU Yande, SHI Yu, CAI Lijun, et al. On-line NIR detection model optimization of soluble solids content in navel orange based on CARS[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(9): 138-144. (in Chinese)
- [19] 张淑娟, 张海红, 赵艳茹, 等. 鲜枣可溶性固形物可见/近红外光谱检测建模方法比较[J]. 农业机械学报, 2012, 43(3): 108-112.
ZHANG Shujuan, ZHANG Haihong, ZHAO Yanru, et al. Comparison of modeling methods of fresh jujube soluble solids measurement by NIR spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2012, 43(3): 108-112. (in Chinese)
- [20] WOLD S, SJÖSTRÖM M, ERIKSSON L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2001, 58(2): 109-130.
- [21] CHENG J, JI Z, LI M, et al. Study of a noninvasive blood glucose detection model using the near-infrared light based on SA-NARX[J]. Biomedical Signal Processing and Control, 2020, 56: 101694.
- [22] 赵娟, 全朋坤, 马敏娟, 等. 富士苹果采收成熟度光谱无损预测模型对比分析[J]. 农业机械学报, 2018, 49(12): 347-354.
ZHAO Juan, QUAN Pengkun, MA Minjuan, et al. Comparative analysis of harvest maturity model for Fuji apple based on visible/near spectral nondestructive detection[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2018, 49(12): 347-354. (in Chinese)
- [23] 吴雪, 王坤元, 牛晓丽, 等. 番茄综合营养品质指标构建及其对水肥供应的响应[J]. 农业工程学报, 2014, 30(7): 119-127.
WU Xue, WANG Kunyuan, NIU Xiaoli, et al. Construction of comprehensive nutritional quality index for tomato and its response to water and fertilizer supply[J]. Transactions of the CSAE, 2014, 30(7): 119-127. (in Chinese)
- [24] 张智, 杨志, 黎景来, 等. 基于灰色关联与 TOPSIS 耦合模型的甜瓜水肥灌溉决策[J]. 农业机械学报, 2021, 52(9): 302-311, 330.
ZHANG Zhi, YANG Zhi, LI Jinglai, et al. Water and fertilizer irrigation decision of melon based on grey relation analysis and TOPSIS coupling model[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021, 52(9): 302-311, 330. (in Chinese)
- [25] ZHANG D, XU Y, HUANG W, et al. Nondestructive measurement of soluble solids content in apple using near infrared hyperspectral imaging coupled with wavelength selection algorithm[J]. Infrared Physics & Technology, 2019, 98: 297-304.
- [26] BLAŽEK J, HLUŠIČKOVÁ I, VARGA A. Changes in quality characteristics of Golden Delicious apples under different storage conditions and correlations between them[J]. Horticultural Science, 2003, 30(3): 81-89.
- [27] JOHNSTON J W, HEWETT E W, HERTOG M L. Postharvest softening of apple (*Malus domestica*) fruit: a review[J]. New Zealand Journal of Crop and Horticultural Science, 2002, 30(3): 145-160.
- [28] 苏青青. 富士苹果贮藏期间果实品质的研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2014.
SU Qingqing. Study of fruit quality during storage on Fuji apple[D]. Yangling: Northwest A&F University, 2014. (in Chinese)
- [29] 李斌, 高攀, 冯盼, 等. 基于可见-近红外光谱的茄子叶绿素荧光参数 Fv/Fm 预测方法[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(9): 2834-2839.
LI Bin, GAO Pan, FENG Pan, et al. Prediction of eggplant leaf Fv/Fm based on VIS-NIR spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(9): 2834-2839. (in Chinese)
- [30] BOBELYN E, SERBAN A S, NICU M, et al. Postharvest quality of apple predicted by NIR-spectroscopy: study of the effect of biological variability on spectra and model performance[J]. Postharvest Biology and Technology, 2010, 55(3): 133-143.
- [31] 中华人民共和国农业部. 红富士苹果: NY/T 1075—2006[S].
- [32] 新疆维吾尔自治区质量技术监督局. 富士系苹果贮藏保鲜技术规程: DB65/T 3457—2012[S].