

基于改进 ResNet 的马铃薯黑心病近红外光谱检测方法

李禧龙^{1,2} 韩亚芬^{1,2} 潘宇轩^{1,2} 吕黄珍^{1,2} 王飞云^{1,2} 吕程序^{1,2}

(1. 中国农业机械化科学研究院集团有限公司, 北京 100083;

2. 农业装备技术全国重点实验室, 北京 100083)

摘要: 马铃薯在存储过程中, 极易产生黑心病等内部缺陷, 严重影响市场价值和食品安全。探索深度学习用于挖掘马铃薯黑心病光谱数据深层特征, 将近红外光谱数据二维化, 基于残差神经网络 (Residual neural network, ResNet), 引入卷积注意力模块 (Convolutional block attention module, CBAM) 增强特征, 加入阈值处理模块去除噪声, 实现了马铃薯黑心病的快速无损检测。探索适用于马铃薯黑心病检测的光谱二维化方法, 通过对比格拉米角场 (Gramian angular field, GAF)、马尔可夫转移场 (Markov transition field, MTF)、递归图 (Recurrence plot, RP) 和波长顺序转换 4 种方法, 发现 GAF、MTF 和 RP 这 3 种方法与波长顺序转换相比效果更好, 经过 MTF 处理后建模效果最佳, 训练集准确率达到 99.60%。通过比较不同模型性能, 发现改进 ResNet 模型测试集准确率为 97.65%, 比偏最小二乘判别分析 (Partial least squares discriminant analysis, PLS-DA)、支持向量机 (Support vector machines, SVM)、MobileNet、ResNet 分别提高 5.89、7.07、3.53、2.36 个百分点, MobileNet、ResNet 和改进 ResNet 神经网络模型建模效果优于传统化学计量学方法 PLS-DA 和 SVM。

关键词: 马铃薯黑心病; 近红外光谱; 残差神经网络; 光谱数据二维化

中图分类号: S123 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2024)12-0470-10

OSID:



Detection on Potato Black Heart Disease by Near Infrared Spectroscopy Based on Improved ResNet

LI Xilong^{1,2} HAN Yafen^{1,2} PAN Yuxuan^{1,2} LÜ Huangzhen^{1,2} WANG Feiyun^{1,2} LÜ Chengxu^{1,2}

(1. Chinese Academy of Agricultural Mechanization Sciences Group Co., Ltd., Beijing 100083, China

2. State Key Laboratory of Agricultural Equipment Technology, Beijing 100083, China)

Abstract: Potatoes are highly susceptible to internal defects such as black heart disease during storage, which seriously affects market value and food safety. To explore the problem of deep learning in mining the deep features of potato black heart disease spectral data, the near-infrared spectral data were two-dimensionalized, based on residual neural network (ResNet), convolutional block attention module (CBAM) was introduced to enhance the features, and a threshold processing module was added to remove the noise. The features were enhanced by introducing the CBAM, and the noise was removed by adding the thresholding module, which realized the rapid and nondestructive detection of black heart disease in potato. To explore the spectral two-dimensionalization method applicable to the detection of potato black heart disease, four methods, namely, Gramian angular field (GAF), Markov transition field (MTF), recurrence plot (RP) and wavelength-order conversion, were compared and analyzed. It was found that the three methods GAF, MTF and RP were better compared with wavelength-order transformation, and the best modeling effect was achieved after MTF processing, and the accuracy of the training set reached 99.60%. By comparing the performance differences of different models, it was found that the test set accuracy of the improved ResNet model was 97.65%, which was better than that of partial least squares discriminant analysis (PLS-DA), support vector machines (SVM), MobileNet and

收稿日期: 2024-01-17 修回日期: 2024-02-28

基金项目: 财政部和农业农村部: 国家现代农业产业技术体系项目 (CARS-10) 和北京市科学技术协会青年人才托举工程项目 (BYESS2023431)

作者简介: 李禧龙 (2000—), 男, 硕士生, 主要从事近红外光谱检测研究, E-mail: lx1879684795@163.com

通信作者: 吕程序 (1985—), 女, 正高级工程师, 博士, 主要从事智能农业光学检测研究, E-mail: lvchengxu1026@163.com

ResNet by 5.89, 7.07, 3.53 and 2.36 percentage points, respectively, and the traditional chemometrics methods PLS-DA and SVM were not as effective as neural network models such as MobileNet and ResNet in modeling.

Key words: potato black heart disease; near infrared spectroscopy; ResNet; spectral data two-dimensionalization

0 引言

马铃薯在我国种植面积广泛,产量高,具有高经济价值,与小麦、玉米、水稻并称为世界四大粮食作物^[1]。黑心病等内部缺陷严重影响马铃薯鲜食、加工品的品质和原料加工利用率,甚至会影响消费者健康。黑心病马铃薯难以直接通过外观进行判断,目前检测采用的方法只有将马铃薯切开判定,破坏性大,耗时长、效率低,不适用于快速大批量检测^[2]。因此,研究一种快速、低成本、高精度的马铃薯黑心病检测方法至关重要,这对提高马铃薯检测分级效率、促进马铃薯产品增值和推动马铃薯产业技术进步等具有重要意义。

近年来无损检测技术在果蔬品质检测领域得到快速发展和广泛应用,如高光谱成像(Hyperspectral imaging, HSI)、近红外光谱(Near infrared spectroscopy, NIRS)等光谱技术。光谱技术是根据果蔬和光之间的作用关系,利用不同光学特性所对应的特征光谱进行果蔬理化特性检测研究的技术^[3]。高光谱技术能够获取果蔬三维空间任意点的光谱和图像信息,能可视化各组分的分布情况,常用于果蔬成分定量分析^[4-5]和内部缺陷定性分析^[6-7]。国内基于高光谱检测黑心病马铃薯的研究仅选择采集到的光谱信息进行模型构建,并没有结合图像信息来优化模型^[8-9]。同时高光谱技术存在大量冗余,数据获取与处理速度慢且设备昂贵,在实时检测中存在一定难度。近红外光谱技术具有无损、操作简单、客观、无污染等优点^[10-11],已被广泛用于苹果^[12-13]、梨^[14]、柑橘^[15]、芒果^[16]等水果的内部缺陷检测。崔丽霞^[17]使用偏最小二乘判别分析(Partial least squares discriminant analysis, PLS-DA)、软独立建模聚类分析(Soft independent modeling of class analogy, SIMCA)和主成分分析(Principal components analysis, PCA)结合SG卷积平滑、多元散射校正数据预处理方法和竞争性自适应重加权采样、连续投影算法、无信息变量去除特征选择算法来区分马铃薯的健康、黑心病、环腐病的光谱。ALANDER等^[18]研究PCA和支持向量机(Support vector machines, SVM)在马铃薯的健康、空心、内部变色分类的效果。丁继刚等^[19]基于漫透射

无损检测系统采集马铃薯光谱,结合SG卷积平滑、一阶导数(First derivation, FD)预处理方法和CARS特征筛选方法,建立了PLS-DA模型实现马铃薯的黑心病检测。PLS-DA、SIMCA和SVM是传统化学计量学近红外光谱定性分析的常用方法。

随着深度学习的快速发展,卷积神经网络(Convolutional neural networks, CNN)在数据特征深度提取方面展现了很好的效果^[20]。许多学者开始将CNN与光谱分析相结合,将神经网络卷积核转换成一维形式^[21-23]。目前CNN在图像领域应用广、模型架构成熟,更多二维化光谱研究与深度学习相结合。YANG等^[24]提出了包括TeaNet、TeaResNet和TeaMobilenet在内的一系列新型神经网络,并将800维矢量光谱数据转换为2×20×20的伪图像作为网络输入,用于茶叶近红外光谱的等级分类,克服了传统机器学习算法精度瓶颈。通过波段的直接顺序将光谱数据转换为伪图像并作为网络的输入,这样可能导致不同波段转换为伪图像而引起的误差和变异性,使得神经网络无法完全提取反映光谱中物质性质的有效信息^[25]。光谱数据二维化方法可以从一个新的角度直观反映近红外光谱的特征,为深度学习模型提供更丰富的光谱信息。探索适用于将光谱数据二维化的方法以及将它与深度学习相结合提高模型泛化性能是目前研究的热点方向。

本文基于残差神经网络(Residual neural network, ResNet)架构,通过格拉米角场^[26](Gramian angular field, GAF)、马尔可夫转移场^[27](Markov transition field, MTF)和递归图^[28](Recurrence plot, RP)这3种方式优化一维光谱转换二维图像,研究光谱二维化方法在近红外光谱分析中的有效性,探索深度残余收缩网络(Deep residual shrinkage network, DSRN)的软阈值模块降低二维光谱图像噪声可能性,并利用注意力机制来提高马铃薯黑心病定性分析的准确性。

1 材料与方法

1.1 材料制备

马铃薯样本分批次采购于北京市不同超市,以确保样本具有代表性。挑选表明无损伤、无虫眼样

品,共计 392 个。其中 176 个用于采集健康马铃薯光谱,其余 216 个用于制备黑心马铃薯。在试验前将样本清洗干净,室温(20℃)储存 1 d,消除样本表面泥土等因素的影响。黑心马铃薯制备前用 75%乙醇进行表面消毒处理,防止密封过程中微生物导致的表面病变,对消毒完成后的马铃薯进行密封包

装,制造厌氧环境,将包装好的马铃薯放入 37.5℃恒温箱培养 3 d,使马铃薯自然发病,取出后立即放入 4℃冰箱冷藏 3 d^[29]加速病变,最终得到 162 个表皮完好、内部黑心的病薯。健康、黑心马铃薯纵切剖面图如图 1 所示,黑心病斑面积分布范围为 10% ~ 70%,表示不同黑心病变程度。

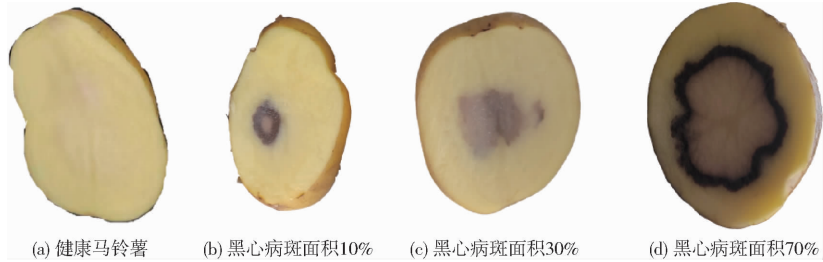


图 1 健康、黑心病马铃薯纵切剖面图

Fig. 1 Longitudinal section of healthy and black heart-diseased potatoes

1.2 光谱采集

试验采用德国布鲁克公司的 MPA 傅里叶变换型近红外光谱仪,应用近红外专用积分球(内径 10 cm,采样光斑 1.5 cm)及 PbS 检测器采集样品近红外漫反射光谱,扫描波长范围为 3 600 ~ 12 500 cm⁻¹,分辨率为 8 cm⁻¹,扫描次数为 64 次,扫描速度 10 kHz。

光谱采集前,将马铃薯放置室温(20℃)中 24 h。采集时置马铃薯块茎于积分球上方,最大限度覆盖采样光斑,于样品外围加一金属盖避免光线溢出。共采集健康薯光谱 176 条,黑心病薯光谱 162 条,数据集按比例 3:1 分为训练集和测试集。采用 OPUS 7.2 软件、Pycharm 2023.1 和 Python 3.7 进行光谱数据处理与模型分析。

1.3 模型构建

1.3.1 模型架构

本研究构建了 PLS - DA、SVM、MobileNet 和 ResNet^[30] 共 4 种模型架构,对 ResNet 模型进行改进。PLS - DA 方法对光谱矩阵和类别矩阵进行分解,以提取出与样本类别最相关的光谱信息,即最大化提取不同类别光谱之间的差异。SVM 方法通过核函数将输入数据映射到高维特征空间,在高维特征空间中构造最优分类超平面实现类别区分。ResNet 模型通过快捷连接极大地消除了深度过大的神经网络训练困难问题。MobileNet 模型通过深度可分离卷积降低参数量。

本研究 ResNet 的基础架构选用 ResNet50; MobileNet 选用 Mobile v1 架构;PLS - DA 模型交叉验证迭代次数为 10,最大主成分数为 8;SVM 模型通过迭代进行核函数寻优,核函数类别为线性、多项式、高斯、Sigmoid 核函数。

1.3.2 模型评价

预测概率 $\check{y}_i$ 和真实概率 y_i 之间存在偏差,使用交叉熵损失作为评估偏差的指标,计算公式为

$$H_{loss} = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y_i \lg \check{y}_i + (1 - y_i) \lg (1 - \check{y}_i)] \quad (1)$$

式中 H_{loss} ——损失值
 n ——样本数量

选用准确率 A、精确率 P、召回率 R 和 F1 值作为性能评估指标,评估改进 ResNet 网络在马铃薯黑心病分类上的性能表现。

1.4 模型改进

1.4.1 改进 ResNet 总体架构

本研究将一维光谱数据映射到二维图像数据,增强波长之间的相关性,通过引入注意力机制增强光谱图像的关键信息和抑制无关信息,改进残差块提高模型非线性表达能力,修改阈值处理函数消除光谱数据量过多带来的噪声,建立了适用于马铃薯黑心病近红外光谱定性分析的改进 ResNet 模型架构(图 2),该架构主要由光谱二维化、初卷积层、注意力模块、残差块、阈值处理模块、输出层组成。

1.4.2 一维光谱二维化

通过 GAF、MTF 和 RP 等图像数据编码技术将一维光谱转换成二维图像,保持了近红外光谱中吸光度和波长点之间的对应关系,从新的角度反映近红外光谱的特征,充分利用神经网络在图像分类中的优势,建立光谱定性分析模型。

(1) 格拉米角场

光谱数据为 $[x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_m]$, x_i 表示吸光度, i 表示波长。将吸光度进行缩放并表示为 X_i , $X_i \in [-1, 1]$,计算式为^[31]

$$X_i = \frac{x_i - \max(x) + x_i - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad (2)$$

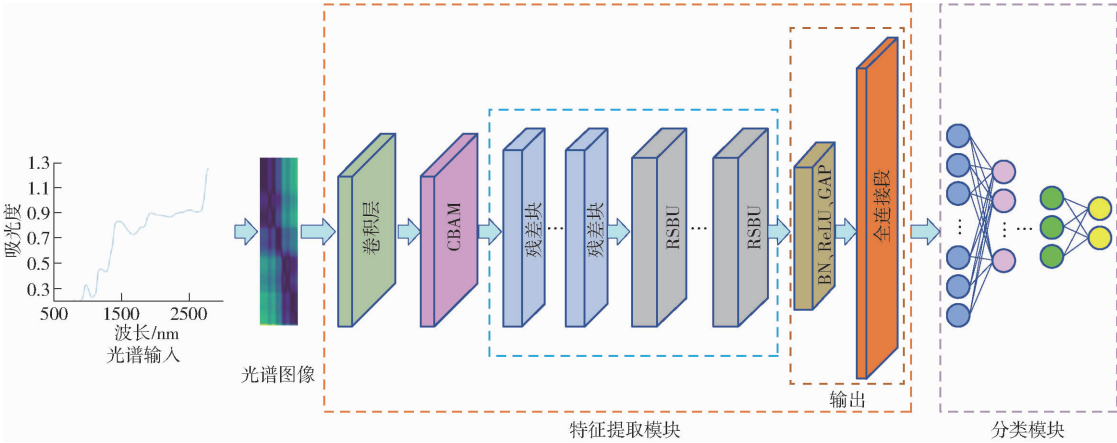


图 2 改进的残差神经网络架构

Fig. 2 Improved residual neural network architecture

通过反余弦函数 $\arccos(\cdot)$ 将缩放后的序列数据转换到极坐标,用反余弦序列 $[\theta_1 \ \theta_2 \ \cdots \ \theta_m]$ 表示光谱序列,计算公式为

$$\theta_i = \arccos X_i \tag{3}$$

将光谱序列转换为极坐标后,通过三角和生成沿对角线对称的二维光谱图像,定义为

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1 + \theta_1) & \cos(\theta_1 + \theta_2) & \cdots & \cos(\theta_1 + \theta_m) \\ \cos(\theta_2 + \theta_1) & \cos(\theta_2 + \theta_2) & \cdots & \cos(\theta_2 + \theta_m) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \cos(\theta_m + \theta_1) & \cos(\theta_m + \theta_2) & \cdots & \cos(\theta_m + \theta_m) \end{bmatrix} \tag{4}$$

式中 $\mathbf{G}$ ——格拉米矩阵

(2) 马尔可夫转换场

将光谱数据 $[x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_m]$ 每一个值放在一个分位数中,采用四分位数 (25%、50%、75%、100%) 把所有的值放置到其属于的分位桶中。类似于直方图中的 bin 值,可以把每一个桶作为马尔可夫模型中的一种状态^[32],即

$$\omega_{ij} = P'(x_m = j | x_{m-1} = i) \tag{5}$$

式中 ω_{ij} ——从状态 i 转到状态 j 的转移概率,通常采用最大似然法估计转移概率

其次构造马尔可夫转移矩阵 $\mathbf{W}$,即

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \cdots & \omega_{1Q} \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \cdots & \omega_{2Q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \omega_{Q1} & \omega_{Q2} & \cdots & \omega_{QQ} \end{bmatrix} \quad \left(\sum_j \omega_{ij} = 1 \right) \tag{6}$$

下角标 Q 表示四分位数。

构造马尔可夫转换场记作 $\mathbf{M}$,为 $m \times m$ 矩阵,即

$$M_{kl} = A_{q_k q_l} \tag{7}$$

下角标 q_k 表示 x_k 的分位桶; q_l 表示 x_l 的分位桶。

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \omega_{ij} | x_1 \in q_i, x_1 \in q_j & \cdots & \omega_{ij} | x_1 \in q_i, x_m \in q_j \\ \omega_{ij} | x_2 \in q_i, x_2 \in q_j & \cdots & \omega_{ij} | x_2 \in q_i, x_m \in q_j \\ \vdots & & \vdots \\ \omega_{ij} | x_m \in q_i, x_m \in q_j & \cdots & \omega_{ij} | x_m \in q_i, x_m \in q_j \end{bmatrix} \tag{8}$$

这里 $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{A}$ 不同, $\mathbf{A}$ 的下标是状态,而 $\mathbf{M}$ 的下标是波长。相对于 $\mathbf{A}$ 的意义, M_{kl} 是 x_k 所在的分位桶转移到 x_l 所在的分位桶的概率,即

$$M_{i,j|i-j|=k} = k \tag{9}$$

式(9)表示波长间隔为 k 个点转移概率。当 $k=0$ 时,对角线上 M_{ii} 表示在波长 i 每一个分位桶转移到自身的概率。 $\mathbf{M}$ 表示光谱数据中的任意两个波长点数据之间的关系。

(3) 递归图

首先将光谱数据 $[x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_m]$ 变换到相空间,每个波长对应的吸光度 x_i 变换成相空间的对应状态 s_i ;然后计算每两个状态 (向量) 之间的距离 (向量范数),进行阈值二值化,得到递归图矩阵,公式为

$$\mathbf{R}(\varepsilon) = \mathbf{H}(\varepsilon - \|\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j\|) \tag{10}$$

式中 $\mathbf{R}$ —— $m \times m$ 的矩阵

$\|\cdot\|$ ——向量范数

ε ——距离阈值,使得 $R_{i,j} \in \{0,1\}$

$\mathbf{H}(\cdot)$ ——Heaviside 函数

1.4.3 初卷积层

初卷积层对输入的马铃薯光谱图像进行卷积操作,提取输入数据的不同特征。转换后的近红外光谱图像作为神经网络的数据集,即

$$\text{Train} = \{ (P_1, Y_n), (P_2, Y_n), \cdots, (P_m, Y_n) \} \tag{11}$$

P_k 是样品的光谱图像, $k = 1, 2, \cdots, m$; Y_n 是对应的类标签, n 为 0 或 1。光谱图像首先经过一个卷积层,卷积层有多个卷积核,不同的卷积核卷积并提

取多个通道的光谱图像,卷积过程表示为

$$s_j = \sum_{i \in M_j} \omega_{ij} * p_i + \beta_j \tag{12}$$

式中 p_i ——第 i 个输入映射
 s_j ——第 j 个输出映射
 M_j ——输入数据集
 β_j ——第 j 个特征图偏置参数

1.4.4 注意力模块

卷积注意力模块 (Convolutional block attention module, CBAM) 是一种用于前馈卷积神经网络的注意力模块^[33-34],有着轻量级设计,可以有效减少模型计算量和参数数量。CBAM 就是将通道注意力模块和空间注意力模块的输出特征逐元素相乘,得到最终的注意力增强特征。这个增强的特征将用作后续网络层的输入,以在保留关键信息的同时,抑制噪声和无关信息。CBAM 注意力模块如图 3 所示。

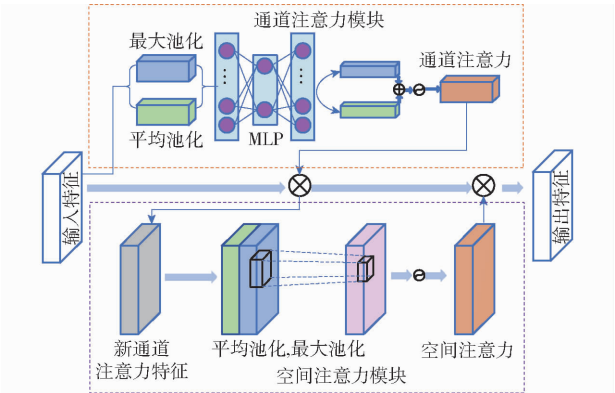


图 3 卷积注意力模块

Fig. 3 Convolutional block attention module

CBAM 依次沿通道 (channel) 和空间 (spatial) 两个独立的维度推断注意力图,然后将注意力图乘以输入特征图进行自适应特征优化。通道注意力机制汇总光谱特征图的空间信息 $X \in R^{C \times H \times W}$,通过使用平均池化和最大池化操作,生成 2 个 $C \times 1 \times 1$ 的空间特征向量,分别表示平均池化要素和最大池化要素。将两个向量送入多层感知器 (MLP),在该模块中,将通道数压缩为原来的 $1/r$ 倍,再扩张到原通道数,经过 ReLU 激活函数得到两个激活后的结果,将输出结果进行逐元素相加,再经过 Sigmoid 激活函数得到通道注意力图 $M_c \in R^{C \times 1 \times 1}$ 。最后, M_c 乘以输入光谱特征图 X 得到输出通道特征图 X' 。通道注意力的计算公式为

$$M_c(X) = \sigma(MLP(MaxP(X)) + MLP(AvgP(X))) \tag{13}$$

$$X' = M_c(X) \otimes X \tag{14}$$

式中 σ ——Sigmoid 函数

MaxP——最大池化函数

AvgP——平均池化函数

为了汇总特征图的通道信息,使用基于通道的全局平均池化和全局最大池化生成 2 个 $1 \times H \times W$ 特征图,通过 concat 操作对两个特征图进行拼接。然后通过 5×5 卷积变为 1 通道的特征图,再经过 Sigmoid 激活函数得到空间注意力图 M_s 。最后, M_s 乘以输出通道特征图 X' 得到注意力增强特征图 X'' 。空间注意力的计算公式为

$$M_s(X') = \sigma(f^{5 \times 5}(AvgP(X')), MaxP(X')) \tag{15}$$

$$X'' = M_s(X') \otimes X' \tag{16}$$

式中 $f^{5 \times 5}$ ——滤波器 5×5 的卷积运算函数

1.4.5 残差块

残差块由卷积层、批量归一化层以及激活函数 ReLU 构成,该结构使得模型更容易训练,解决了卷积神经网络模型训练过程中随网络层次结构的加深而导致梯度消失问题。

在原始残差块的基础上,引入激活函数参数修正线性单元 (Parametric rectified linear unit, PReLU),得到改进的残差块 (图 4)。相比 ReLU, PReLU 具有更强的非线性表达能力,可以自适应地学习每个神经元的激活函数形状,更易于学习到光谱数据中的特征信息,以适应不同的数据分布和任务要求。定义为

$$PReLU(p_k) = \begin{cases} p_k & (p_k > 0) \\ a_k p_k & (p_k \leq 0) \end{cases} \tag{17}$$

式中 p_k ——第 k 个通道输入
 a_k ——学习参数

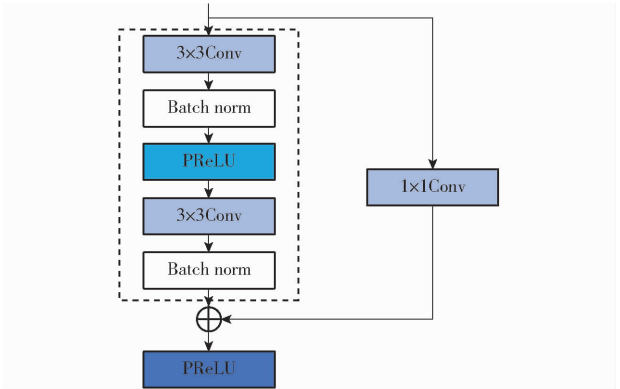


图 4 残差单元结构

Fig. 4 Residual cell structure

PReLU 通过调节 a_k 以改进整个网络,使输入值小于零时,梯度不为零;当 $a_k = 0$ 时, PReLU 退化为 ReLU。

1.4.6 阈值处理模块

光谱噪声是在光谱测量和数据采集过程中引

入的随机变量,导致测量值波动以及模型分类性能下降。本研究采集的马铃薯光谱由 2 224 个数据点构成,测量时会产生光谱噪声,将 DSRN 的残余收缩构建单元 (Residual shrinkage building unit, RSBU) 作为可训练模块集成到 ResNet 中,以自动确定阈值,然后通过软阈值函数消除噪声特征^[35]。该模块基于图像像素与预先设定的阈值之间的差异来判断该像素是否为噪声。对于每个像素,阈值处理模块会计算该像素与其周围像素的差异,并与设定的阈值进行比较。如果差异小于阈值,则该像素被认为是噪声,反之则被认为是有效信号。对于被标记为噪声的像素,阈值处理模块将其替换为周围像素的平均值或者使用其他合适的修复算法进行修复,这样可以有效地减少图像中的噪声。RSBU 如图 5 所示,由软阈值模块、恒等映射分支和卷积层组成。

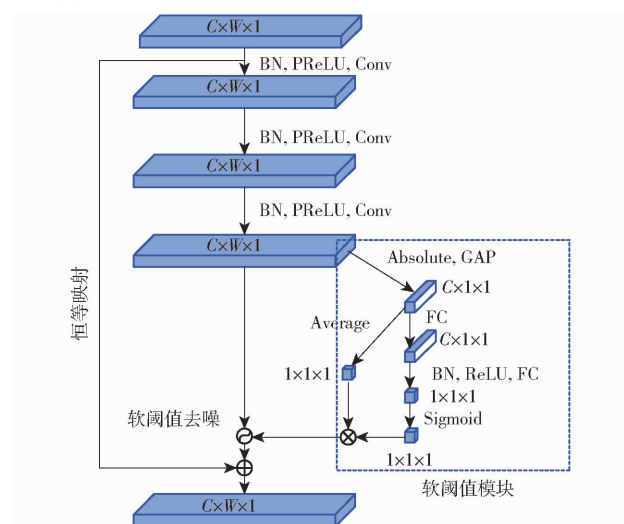


图 5 残余收缩构建单元

Fig. 5 Residual shrinkage building unit

在软阈值模块中,传统 RSBU 计算一个单独的阈值使特征图的每个通道实现阈值的自适应选择^[36]。然后通过软阈值函数处理各通道的特征数据,定义为

$$f(x) = \begin{cases} x - \tau & (x > \tau) \\ 0 & (-\tau \leq x \leq \tau) \\ x + \tau & (x < -\tau) \end{cases} \quad (18)$$

式中 τ ——阈值,约为 0

软阈值设置将接近零的要素设置为 0,大于或小于此范围的值将缩小到接近 0。

虽然 RSBU 中使用的软阈值是一种能够处理噪声的方法,但它在降噪过程中具有恒定的偏差,这将直接影响模型的分类效果。光谱数据的降噪是提高学习性能的重要手段,为了降低噪声并保留光谱中的有用特征,使用公式

$$f(x) = \begin{cases} \operatorname{sgn}\left(|x| - \frac{p\tau}{1 + e^{q(|x| - \tau)}}\right) & (|x| \geq \tau) \\ 0 & (|x| < \tau) \end{cases} \quad (19)$$

式中 p, q ——调整因子

参数 p, q 共同决定阈值处理过程与结果,其中 $p \in [0, 1], q \geq 0$ 。随着 p, q 在各自固定的取值区间内波动,该阈值函数发挥着不同的作用。当 $p = 0$ 时,此函数为硬阈值函数;当 $p \in [0, 1], q = 0$ 时,此函数为软阈值函数;当 $p \in [0, 1], q \rightarrow \infty$ 时,此函数为类似软阈值的函数,参数 p 可以调节阈值函数来控制噪声去除的程度,弥补了传统软阈值函数在这方面的不足,增加了阈值函数实用性,并且可以在不丢失特征信息的情况下实现降噪。

1.4.7 输出层

输出层由批量归一化 (Batch normalization, BN) 层、激活函数、全局平均池化 (Global average pooling, GAP) 层和全连接层组成,通过 BN 层的正则化机制和 GAP 降低参数量,提高网络的泛化性能,减小过拟合风险,加速网络的训练收敛,减小梯度消失问题,全连接层允许网络学习全局特征表示,提高分类准确性。

对每个通道上学习的数据特征进行批量归一化并激活。批量归一化用于解决更改数据分布导致的梯度消失或爆炸问题。BN 层首先使每个特征图归一化以产生标准正态分布,然后学习每个特征图参数 γ 和 μ ,稳定原始分布和正态分布,使网络在增强梯度反向传播的同时更充分地提取特征,计算公式为

$$\check{p}_k = \frac{p_k - u}{\delta} \quad (20)$$

$$y_k = \gamma \check{p}_k + \mu \quad (21)$$

式中 u ——特征图平均值

δ ——特征图标准偏差

γ ——可训练缩放比

μ ——可训练平移值

引入激活函数 ReLU 是为了防止网络训练过程中梯度消失,使各通道的数据能够适应复杂函数的波动,定义为

$$f(x) = \begin{cases} p & (p \geq 0) \\ 0 & (p < 0) \end{cases} \quad (22)$$

RSBU 将近红外光谱数据映射到深层特征空间后,全连接层压缩每个通道的深度特征数据,并在整个神经网络中充当分类器。全连接层连接所有通道的深层特征,并将特征图压缩为一列。隐藏层中的每个神经元接收并传输特征向量,在输

出层中使用 softmax 函数来预测训练样本每一个类别的概率。

2 结果与讨论

2.1 光谱二维化模型建立与评价

为验证不同的一维数据转换成二维图像方法的优势,将 GAF、MTF 和 RP 转换后的二维图像(图 6)进行改进的 ResNet 模型训练,并与波段直接顺序转换的伪图像 PI 进行对比,损失函数下降采用 Adam

优化器,选择训练过程中最佳梯度下降方向加速模型收敛,学习率为 0.001,迭代次数为 50 次,训练集的损失函数和准确率变化曲线如图 7 所示。4 种图像转换方法的损失函数曲线随迭代次数增加而下降,可以看出经过 MTF 转换的图像在模型训练中的收敛效果最好。GAF、MTF、RP 和 PI 这 4 种方法转换图像在模型训练中准确率分别达到 99.21%、99.60%、97.63% 和 96.74%,经过 MTF 方法转换图像在模型训练中分类效果最好。MTF 将光谱波长

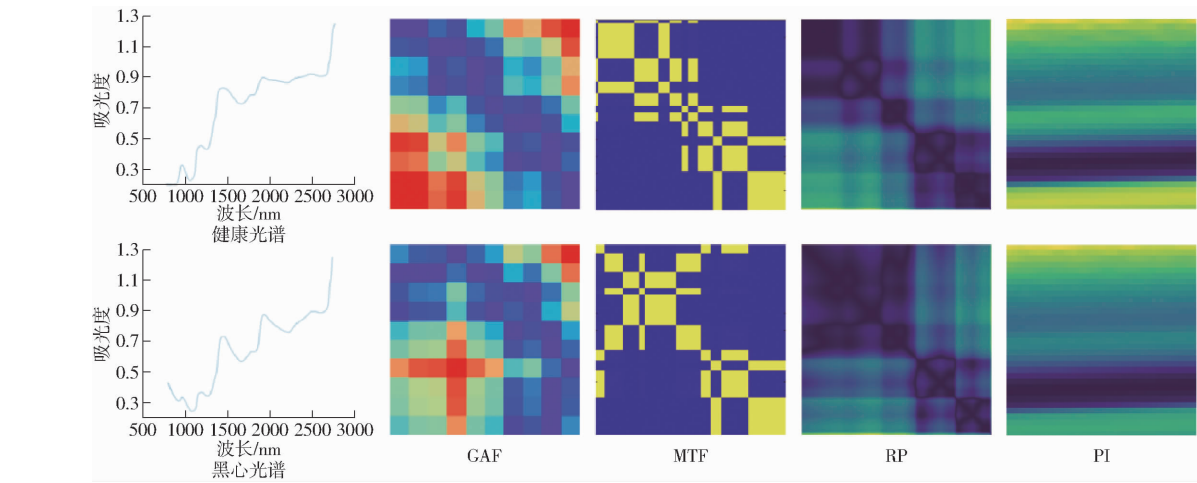


图 6 不同图像转换方法获得的马铃薯光谱数据图像

Fig. 6 Spectral data images of potato obtained by different image transformation methods

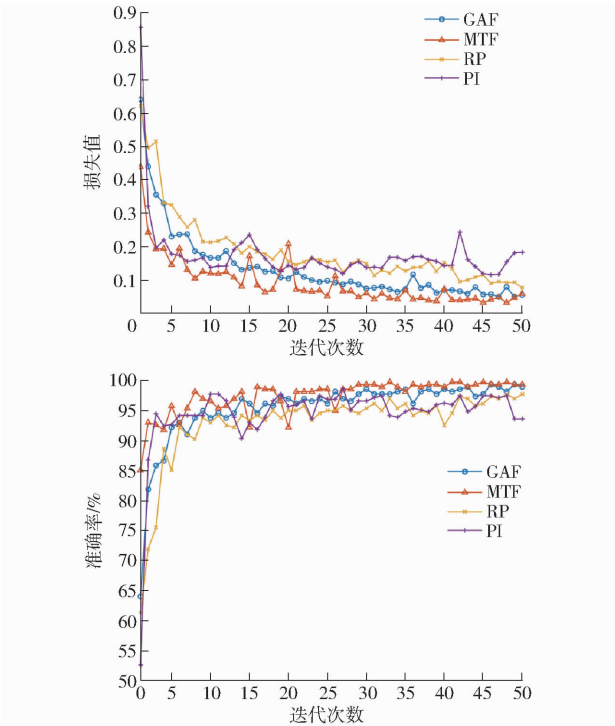


图 7 GAF、MTF、RP、PI 训练集结果

Fig. 7 Results of GAF, MTF, RP and PI for training set

状态之间的转移关系直观地呈现为图像,更容易发现状态间的联系和规律,并且由于异常状态的转移可能会在转移场中呈现出特殊的模式,这样可以发

现黑心光谱图像和健康光谱图像不同的状态转移关系。

图 8 为测试集损失值和准确率变化曲线。由图 8a 可以看出,第 6 次迭代开始,MTF 和 RP 损失函数收敛速度比 GAF 和 PI 快,收敛效果也更好。由图 8b 看出,MTF 和 RP 准确率从第 17 次迭代开始基本保持不变,GAF 和 PI 的准确率曲线从第 14 次迭代开始变化较大,MTF 和 RP 模型效果明显优于 GAF 和 PI。GAF、MTF、RP、PI 这 4 种方法测试集准确率分别达到 94.12%、97.65%、97.65%、96.34%。对比测试集 GAF、MTF、RP、PI 这 4 种图像转换方法在改进的 ResNet 网络上的马铃薯黑心病分类综合性能(表 1),模型综合效果从优到劣依次为 MTF、GAF、RP、PI,这说明 MTF、GAF、RP 这 3 种方法转换的图像建模效果比 PI 好。MTF、GAF 和 RP 转换图像可以提取出更丰富的特征并进行可视化分析,有助于提高复杂数据分析的准确性。

2.2 不同模型性能比较

为了保证研究的一致性,选用不经过预处理且使用 MTF 转换方法的马铃薯光谱图像进行建模,对比其他深度学习模型和机器学习方法,在马铃薯测试集上验证。表 2 显示了各分类模型性能指标。

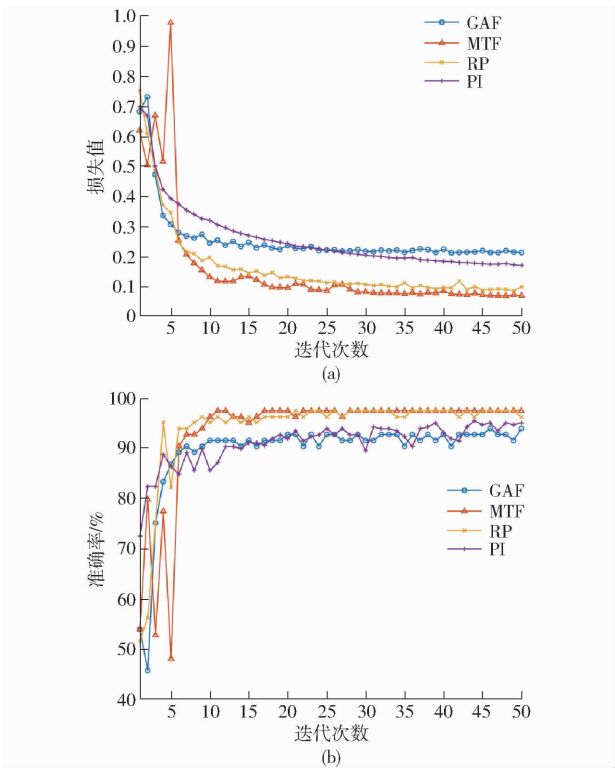


图 8 GAF、MTF、RP、PI 测试集结果

Fig. 8 Results of GAF, MTF, RP and PI for testing set

表 1 图像转换方法在改进 ResNet 模型中的评估指标

Tab.1 Evaluation metrics of image transformation method in improved ResNet model				%
图像转换方法	准确率	精确率	召回率	F1 值
GAF	99.21	99.38	98.77	99.07
MTF	99.60	99.38	99.38	99.38
RP	97.63	98.14	97.56	97.85
PI	96.74	98.71	94.44	96.53

表 2 各分类模型性能指标

Tab.2 Performance metrics of each classification mode					
分类模型	准确率/ %	精确率/ %	召回率/ %	F1 值/ %	预测时 间/ms
PLS-DA	91.76	87.50	94.59	90.91	23
SVM	90.58	91.44	86.49	88.90	25
MobileNet	94.12	94.54	91.89	93.20	41
ResNet	95.29	97.57	93.02	95.24	46
改进 ResNet	97.65	100	95.00	97.44	51

由表 2 可以看出,传统化学计量学方法 PLS-DA、SVM 模型准确率、精确率、召回率、F1 值均低于 MobileNet、ResNet 和改进 ResNet 模型。其中,改进 ResNet 模型 4 个性能指标比 PLS-DA 和 SVM 模型分别提高 5.89、12.5、0.41、6.53 个百分点和 7.07、8.56、8.51、8.54 个百分点。这是由于卷积神经网络模型具有多层结构,通过卷积模块和非线性映射将特征精确表达,并且神经网络可

以进行端对端的训练,这是 PLS-DA、SVM 不具备的。但在预测时间上,PLS-DA、SVM 低于 MobileNet、ResNet 模型。

卷积神经网络 MobileNet 模型准确率、精确率、召回率、F1 值分别为 94.12%、94.54%、91.89%、93.20%,而 ResNet 和改进 ResNet 模型 4 个性能指标比 MobileNet 分别高 1.17、3.03、1.13、1.96 个百分点和 3.53、5.46、3.11、4.24 个百分点。ResNet、MobileNet 模型分别采用 ResNet50、MobileNet v1 架构,ResNet50 的模型参数量远大于 MobileNet v1。ResNet 通过深层网络结构获得更高模型性能,MobileNet 模型通过深度可分离卷积降低计算量。

与 ResNet 模型相比,改进的 ResNet 模型准确率、精确率、召回率、F1 值分别提升 2.36、2.43、1.98、2.2 个百分点,这说明改进后的 ResNet 模型可以提高对马铃薯黑心病的预测精度,但模型添加了注意力模块和阈值处理,导致模型预测时间略微上升。

总体而言,卷积神经网络相比传统化学计量学方法,有多层结构的自动学习功能,可以挖掘深层特征,提高模型的分类精度。但牺牲了预测时间,由于光谱数据量不大,预测时间在毫秒级,卷积神经网络在预测时间上的增多不会影响模型在实际中的应用。

3 结论

(1)采用图像转换方法进行光谱数据二维化,经过初卷积层对光谱图像不同特征提取后,引入 CBAM 注意力模块的通道和空间两个维度对图像进行特征增强,再将增强后的特征输入残差块和阈值处理模块,最终通过输出层实现马铃薯黑心病检测。

(2)通过 GAF、MTF、RP、PI 这 4 种方法进行光谱二维化,将转换的光谱图像进行改进 ResNet 建模,准确率分别为 99.21%、99.60%、97.63%、96.74%,其中 MTF 效果最好。

(3)原始光谱数据的 PLS-DA、SVM 模型准确率分别为 91.76%、90.58%。经过 MTF 光谱二维化后的 MobileNet、ResNet 模型准确率分别为 94.12%、95.29%。改进 ResNet 模型准确率为 97.65%,比 PLS-DA、SVM、MobileNet、ResNet 分别提高 5.89、7.07、3.53、2.36 个百分点。

(4)光谱二维化方法可以提高建模效果,改进 ResNet 模型可以提取到近红外光谱的深层特征,对近红外光谱定性模型具有较高的分类精度,有助于进一步的化学计量学研究和定性分析的应用。

参考文献

- [1] 黄爱珍. 马铃薯产业发展现状及对策[J]. 农业开发与装备, 2021(8): 42–43.
- [2] 韩亚芬, 赵庆亮, 吕程序, 等. 基于能量谱和吸光度谱的马铃薯黑心病判别模型优化[J]. 农业机械学报, 2021, 52(9): 376–382.
HAN Yafen, ZHAO Qingliang, LÜ Chengxu, et al. Discriminant analysis on potato black heart defect based on energy spectrum and absorbance spectrum[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021, 52(9): 376–382. (in Chinese)
- [3] 孙海霞, 张淑娟, 薛建新, 等. 基于光谱和成像技术的果蔬质量检测研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(6): 1779–1785.
SUN Haixia, ZHANG Shujuan, XUE Jianxin, et al. Application of spectral and imaging technique to detect quality and safety of fruits and vegetables: a review[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 52(9): 376–382. (in Chinese)
- [4] 李岚涛, 申凤敏, 马文连, 等. 镉胁迫下菊苣叶片原位高光谱响应特征与定量监测研究[J]. 农业机械学报, 2020, 51(3): 146–155.
LI Lantao, SHEN Fengmin, MA Wenlian, et al. Response characteristics and quantitative monitoring models analyzed using in situ leaf hyperspectra under different Cd stress conditions[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2020, 51(3): 146–155. (in Chinese)
- [5] 吴静珠, 张乐, 李江波, 等. 基于高光谱与集成学习的单粒玉米种子水分检测模型[J]. 农业机械学报, 2022, 53(5): 302–308.
WU Jingzhu, ZHANG Le, LI Jiangbo, et al. Detection model of moisture content of single maize seed based on hyperspectral image and ensemble learning[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2022, 53(5): 302–308. (in Chinese)
- [6] 田有文, 吴伟, 林磊, 等. 基于深度学习与高光谱成像的蓝莓果蝇虫害无损检测[J]. 农业机械学报, 2023, 54(1): 393–401.
TIAN Youwen, WU Wei, LIN Lei, et al. Nondestructive detection of blueberry fruit fly pests based on deep learning and hyperspectral imaging[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2023, 54(1): 393–401. (in Chinese)
- [7] 秦立峰, 张熹, 张晓茜. 基于高光谱病害特征提取的温室黄瓜霜霉病早期检测[J]. 农业机械学报, 2020, 51(11): 212–220.
QIN Lifeng, ZHANG Xi, ZHANG Xiaoqian. Early detection of cucumber downy mildew in greenhouse by hyperspectral disease differential feature extraction[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2020, 51(11): 212–220. (in Chinese)
- [8] 高海龙, 李小昱, 徐森森, 等. 马铃薯黑心病和单薯质量的透射高光谱检测方法[J]. 农业工程学报, 2013, 29(15): 279–285.
GAO Hailong, LI Xiaoyu, XU Senmiao, et al. Transmission hyperspectral detection method for weight and black heart of potato[J]. Transactions of the CSAE, 2013, 29(15): 279–285. (in Chinese)
- [9] 徐梦玲, 李小昱, 库静, 等. 半透射高光谱多指标同时检测马铃薯内外部缺陷[J]. 食品安全质量检测学报, 2015, 6(8): 2988–2993.
XU Mengling, LI Xiaoyu, KU Jing, et al. Simultaneous detection of multiple index for internal and external defects of potato based on semi-transmission hyperspectral[J]. Journal of Food Safety and Quality, 2015, 6(8): 2988–2993. (in Chinese)
- [10] 朱珂郁, 曹长林, 杨松伟, 等. 近红外光谱技术原理及其在废杂塑料识别分选中的应用进展[J]. 福建师范大学学报(自然科学版), 2021, 37(5): 109–116.
ZHU Keyu, CAO Changlin, YANG Songwei, et al. Principle of near infrared spectroscopy and its application in the identification and sorting of waste plastics[J]. Journal of Fujian Normal University (Natural Science Edition), 2021, 37(5): 109–116. (in Chinese)
- [11] 徐惠荣, 李青青. 皇冠梨糖度可见/近红外光谱在线检测模型传递研究[J]. 农业机械学报, 2017, 48(9): 312–317.
XU Huirong, LI Qingqing. Calibration model transfer between visible/NIR spectrometers in sugar content on-line detection of crown pears[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2017, 48(9): 312–317. (in Chinese)
- [12] 赵龙莲, 邵志明, 薛金丹, 等. 基于近红外稳态空间的苹果病变检测系统设计与试验[J]. 农业机械学报, 2021, 52(增刊): 140–147.
ZHAO Longlian, SHAO Zhiming, XUE Jindan, et al. Design and experiment of apple lesion detection system based on near-infrared steady-state spatial resolution[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2021, 52(Supp.): 140–147. (in Chinese)
- [13] WANG J, HUO Y J, WANG Y T, et al. Grading detection of red Fuji apple in Luochuan based on machine vision and near-infrared spectroscopy[J]. PloS One, 2022, 17(8): e0271352.
- [14] 郝勇, 王起明, 张书敏. 可见-近红外光谱的鸭梨黑心缺陷在线检测 AdaBoost 集成模型研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(9): 2764–2769.
HAO Yong, WANG Qiming, ZHANG Shumin. Study on online detection method of “Yali” pear black heart disease based on vis-near infrared spectroscopy and AdaBoost integrated model[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41(9): 2764–2769. (in Chinese)
- [15] 李轶凡. 水果缺陷和内部品质同时在线检测方法研究[D]. 南昌: 华东交通大学, 2016.
LI Yifan. Simultaneous and online detection of fruit defect and internal quality based on visible-near infrared transmittance

- spectroscopy[D]. Nanchang: East China Jiaotong University, 2016. (in Chinese)
- [16] ANITHA R, GRUR D S, RAO M K. Mango internal defect detection based on optimal wavelength selection method using NIR spectroscopy[J]. *Artificial Intelligence in Agriculture*, 2021, 5: 41–45.
- [17] 崔丽霞. 基于近红外光谱技术的马铃薯内部病害检测及试验分析[D]. 淄博: 山东理工大学, 2021.
CUI Lixia. Detection and experimental analysis of potato diseases based on near infrared spectroscopy[D]. Zibo: Shandong University of Technology, 2021. (in Chinese)
- [18] ALANDER J, BOCHKO V, MARTINKAUPPI J B, et al. Optical sensing of internal hollow heart related defects of potatoes[J]. *IFAC Proceedings Volumes*, 2013, 46(18): 24–28.
- [19] 丁继刚, 韩东海, 李永玉, 等. 基于可见/近红外漫透射光谱的马铃薯黑心病及淀粉含量同时在线无损检测[J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(6): 1909–1915.
DING Jigang, HAN Donghai, LI Yongyu, et al. Simultaneous non-destructive on-line detection of potato black-heart disease and starch content based on visible/near infrared diffuse transmission spectroscopy[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2020, 40(6): 1909–1915. (in Chinese)
- [20] YANG Z, XIAO H, ZHANG L, et al. Fast determination of oxides content in cement raw meal using nir spectroscopy combined with synergy interval partial least square and different preprocessing methods[J]. *Measurement*, 2020, 149: 106990.
- [21] GOH G B, HODAS N O, VISHNU A. Deep learning for computational chemistry[J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2017, 38(16): 1291–1307.
- [22] GHOSH K, STUKE A, TODOROVIC M, et al. Deep learning spectroscopy: neural networks for molecular excitation spectra[J]. *Advanced Science*, 2019, 6(9): 1801367.
- [23] 徐铭. 基于 AW-1DCNN-XGBoost 的稻瘟病抗性近红外分类识别方法研究[D]. 大庆: 黑龙江八一农垦大学, 2023.
XU Ming. Research on near-infrared classification and identification method of rice blast resistance based on AW-1DCNN-XGBoost[D]. Daqing: Heilongjiang Bayi Agricultural University, 2023. (in Chinese)
- [24] YANG J, WANG J, LU G, et al. TeaNet: deep learning on near-infrared spectroscopy (NIR) data for the assurance of tea quality[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2021, 190: 106431.
- [25] ZHAO N, WU Z, CHENG Y, et al. MDL and RMSEP assessment of spectral pretreatments by adding different noises in calibration/validation datasets[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2016, 163: 20–27.
- [26] ZHANG G, SI Y, WANG D, et al. Automated detection of myocardial infarction using a Gramian angular field and principal component analysis network[J]. *IEEE Access*, 2019, 7: 171570–171583.
- [27] HAN B, ZHANG H, SUN M, et al. A new bearing fault diagnosis method based on capsule network and Markov transition field/Gramian angular field[J]. *Sensors*, 2021, 21(22): 7762.
- [28] ECKMANN J P, KAMPHORST S O, RUELE D. Recurrence plots of dynamical systems[J]. *World Scientific Series on Nonlinear Science Series A*, 1995, 16: 441–446.
- [29] 田芳, 彭彦昆, 魏文松, 等. 基于机器视觉的马铃薯黑心病检测机构设计与试验[J]. *农业工程学报*, 2017, 33(5): 287–294.
TIAN Fang, PENG Yankun, WEI Wensong, et al. Design and experiment of detection mechanism for potato black heart based on machine vision[J]. *Transactions of the CSAE*, 2017, 33(5): 287–294. (in Chinese)
- [30] HE K, ZHANG X, REN S, et al. Deep residual learning for image recognition[C]//*Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 2016: 770–778.
- [31] PAN X, YU Z, YANG Z. A deep learning multimodal fusion framework for wood species identification using near-infrared spectroscopy GADF and RGB image[J]. *Holzforschung*, 2023, 77(11–12): 816–827.
- [32] WANG B, DENG J, JIANG H. Markov transition field combined with convolutional neural network improved the predictive performance of near-infrared spectroscopy models for determination of Aflatoxin B1 in maize[J]. *Foods*, 2022, 11(15): 2210.
- [33] WOO S, PARK J, LEE J Y, et al. Cbam: convolutional block attention module[C]//*Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV)*, 2018: 3–19.
- [34] QING Y, LIU W. Hyperspectral image classification based on multi-scale residual network with attention mechanism[J]. *Remote Sensing*, 2021, 13(3): 335.
- [35] ZHAO M, ZHONG S, FU X, et al. Deep residual shrinkage networks for fault diagnosis[J]. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2019, 16(7): 4681–4690.
- [36] REN Z, LIU G, XIONG Z. Photoacoustic signals denoising of the glucose aqueous solutions using an improved wavelet threshold method[C]//*Advanced Laser Manufacturing Technology*, 2016, 10153: 63–71.