

基于高光谱成像的加料烟叶丙二醇含量无损检测与可视化分析

杨忠泮^{1,2} 靳伍银¹ 吴恋恋² 张新新³ 堵劲松³

(1. 兰州理工大学机电工程学院, 兰州 730050; 2. 甘肃烟草工业有限责任公司技术研发中心, 兰州 730050;

3. 中国烟草总公司郑州烟草研究院烟草行业烟草工艺重点实验室, 郑州 450001)

摘要: 烟叶加料作为烟草加工制丝工艺中的关键环节,对改善烟叶的物理和化学特性,以及提升产品品质具有重要意义,但现有加料精度检测主要集中在用量监控,缺乏加料后效果的评估。本文针对加料后烟叶的微量添加物含量的无损检测及可视化分析,构建了基于高光谱成像和卷积神经网络(CNN)方法的烟叶微量添加物含量检测模型、光谱预处理方法与特征波长选择技术优化开展建模探究。通过高光谱成像系统采集添加不同比例丙二醇烟叶样本的光谱数据,分别采用标准正态变换(SNV)、多元散射校正(MSC)、Savitzky-Golay滤波平滑3种数据预处理方法对比,并通过竞争性自适应重加权算法(CARS)、主成分分析(PCA)筛选特征波长以及光谱曲线波谷点对应波长,确定了1146、1614、2511、2517、2522、1941 nm 6个共同的一致关键波长。分别构建CNN、随机森林(RF)、偏最小二乘回归(PLSR)模型进行加料烟叶微量添加物丙二醇含量的检测。结果表明,SNV-PCA-CNN模型在训练集和测试集中的检测效果最佳,取前4个主成分数量累计贡献率可达99%,训练集决定系数 R_c^2 为0.9880、均方根误差RMSE为0.0020 kg/kg,测试集决定系数 R_p^2 为0.9896、均方根误差RMSE为0.0021 kg/kg,具备优良的拟合与泛化能力,深度学习CNN模型在测试集上的表现显著优于机器学习RF和PLSR方法。因此基于高光谱成像的CNN模型能够对加料烟叶微量添加物丙二醇含量及可视化进行准确检测及评估。

关键词: 加料烟叶; 丙二醇含量; 无损检测; 高光谱成像; 卷积神经网络; CARS算法

中图分类号: TS452

文献标识码: A

文章编号: 1000-1298(2025)04-0335-09

OSID:



Non-destructive Detection and Visualization Analysis of Propylene Glycol Content in Processed Tobacco Leaves Using Hyperspectral Imaging

YANG Zhongpan^{1,2} JIN Wuyin¹ WU Lianlian² ZHANG Xinxin³ DU Jinsong³

(1. School of Mechanical and Electromechanical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China

2. Technology R&D Center, Gansu Tobacco Industrial Co., Ltd., Lanzhou 730050, China

3. Key Laboratory of Tobacco Processing Technology, Zhengzhou Tobacco Research Institute of CNTC, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: The application of trace amounts of sugar solution additives to tobacco leaves is a critical step in the tobacco processing and cutting technology, significantly impacting the physical and chemical properties of the leaves and enhancing cigarette quality. However, current precision detection methods for sugar solution additives primarily focus on dosage monitoring, lacking an evaluation of the post-application effects. The hyperspectral imaging technology and deep learning methods were utilized to perform non-destructive detection and visualization analysis of trace additives in tobacco leaves after sugar solution application. A prediction system based on a deep learning convolutional neural network (CNN) model was developed, incorporating multiple spectral preprocessing methods and feature band selection techniques to optimize model performance and improve the detection accuracy of additive content in tobacco leaves. Spectral data from tobacco samples with varying proportions of propylene glycol were collected by using a hyperspectral imaging system. The data were preprocessed by using three methods: standard normal variate (SNV), multiplicative scatter correction (MSC), and Savitzky-Golay filtering,

收稿日期: 2024-10-12 修回日期: 2024-11-27

基金项目: 中国烟草总公司重大科技项目(110202401040(YJ-03))、中国烟草实业发展中心科技计划项目(ZYSYQ-2023-09)和甘肃烟草工业有限责任公司科技项目(KJXM-2023-09)

作者简介: 杨忠泮(1990—),男,博士生,甘肃烟草工业有限责任公司工程师,主要从事烟草工艺等研究,E-mail: 363583280@qq.com

通信作者: 靳伍银(1969—),男,研究员,博士生导师,主要从事机器视觉与图像处理等研究,E-mail: jinwy@lut.edu.cn

which were employed for data preprocessing respectively. Feature bands were selected through competitive adaptive reweighted sampling (CARS), principal component analysis (PCA), and identification of spectral trough points, resulting in six common consistent key wavelengths at 1 146 nm, 1 614 nm, 2 511 nm, 2 517 nm, 2 522 nm, and 1 941 nm. CNN, random forest (RF), and partial least squares regression (PLSR) models were constructed to predict the additive content, with hyperspectral data visualization conducted by using the CNN method. The results showed that the SNV – PCA – CNN model achieved the best predictive performance for both the training set (R_c^2 was 0.988 0, RMSE was 0.002 0 kg/kg) and the test set (R_p^2 was 0.989 6, RMSE was 0.002 1 kg/kg), and the cumulative contribution rate was close to 99% by taking the first-four principal components, demonstrating excellent fitting and generalization capabilities. The predictive ability of the deep learning CNN model significantly outperformed the performance of traditional machine learning methods RF and PLSR, reflecting the CNN model sufficient generalization capabilities for hyperspectral data of tobacco samples with sugar solution additives. The combination of hyperspectral imaging and the CNN model showed great potential for detecting trace additives in tobacco leaves, providing technical support for non-destructive testing and precise control in the tobacco processing industry.

Key words: processed tobacco leaves; propylene glycol content; non-destructive detection; hyperspectral imaging; convolutional neural network; competitive adaptive reweighted sampling algorithm

0 引言

烟叶加料是烟草工业生产制丝工艺中的一个重要环节,它通过将特制调配的料液体(如糖料液)施加于烟叶表面,以改善烟草原料的物理特性、调整化学组分,进而提升用户体验、改善烟气的调和性和余味的舒适性^[1]。糖料液施加于烟叶原料的比例一般控制在微量,加料比例的准确性及效果直接影响产品整体品质。现有的加料精度检测技术主要集中于料液施加的用量监测,但缺乏对烟叶加料后的实时在线料液比例检测、判定以及加料效果评估的相关方法。现行的行业标准 YC/T 353—2010《卷烟加料均匀性的测定》是利用气相色谱法检测烟草加工过程中添加的丙二醇标记物质以评估加料比例及均匀性,而且作为主要有机溶剂的丙二醇(α -Propylene Glycol,PG)在糖料液的质量占比较高。在单批次烟叶制丝工艺的加料工序生产时,传统的行业标准方法由于样本预处理繁琐、测试周期长且不适合连续批量检测,已逐渐不能满足现代企业更高水平生产的需求。

高光谱成像技术通过采集样本的多波段光谱及图像数据,能够精确识别和区分目标区域内的细微差别,它已在食品安全、肉类加工以及农作物鉴别等领域得到应用^[2-4]。与传统成像技术相比,高光谱成像技术提供了更丰富且兼具图谱数据的多维信息,从而在精准判别和分析物质特性上拥有独特优势,可有效解决相似物质的区分和微量成分预测等问题^[5]。由于高光谱数据的高维度和冗余度增加了分析的复杂性,因此从研究对象的物理和化学特

点出发构建合适的模型至关重要。在对食品及农作物的成分预测回归分析中,特征波长选择和机器学习模型研究是最为关键的内容之一^[6],其中以采用竞争性自适应重加权算法(Competitive adaptive reweighted sampling, CARS)^[7]和卷积神经网络(Convolutional neural network, CNN)模型^[8]等对动植物食用原料品质的无损检测与分布可视化研究都取得了较好效果。运用高光谱成像技术可在烟叶样品无损前提下迅速获取其空间与光谱数据,其中对制丝生产中烟叶原料在不同工序的含水率实现了高光谱技术的实时在线检测^[9-10]。烟叶微量添加物含量及可视化研究尚未见相关报道。上述研究都为加料烟叶微量添加物含量及可视化研究提供了思路。此外,丙二醇在糖料液中兼具溶剂、烟丝保润保湿剂及质量示踪剂功能,其微量施加比例直接影响预测模型的精度与鲁棒性。为此应通过构建不同施加比例下的预测模型,系统评估模型在实际工业场景中的泛化能力。

本文利用自主搭建的高光谱成像系统,在短波红外波段采集不同丙二醇含量的烟叶高光谱数据。数据经 Savitzky – Golay (S – G) 滤波平滑、多元散射校正 (Multiplicative scatter correction, MSC)、标准正态变换 (Standard normal variate transformation, SNV) 预处理后,结合 CARS 算法和主成分分析 (Principal component analysis, PCA) 进行特征选择和数据降维。通过对比 CNN 网络与传统机器学习模型随机森林 (Random forest, RF) 和偏最小二乘回归 (Partial least squares regression, PLSR) 的预测性能,建立对烟叶中添加微量丙二醇样本的最佳预测模型以及高光谱数

据的可视化,为烟草加工中烟叶微量添加物的无损高效检测提供借鉴。

1 实验

1.1 样品制备

实验材料包括某牌号全配方片烟烟叶及纯度大于等于 99.0% 的丙二醇(购自天津市百世化工有限公司)。取 72 kg 未加料片烟烟叶,分为 6 组,每组 12 kg。按丙二醇质量分数(1%、1.5%、2%、3%、4%、5%)人工均匀喷洒于烟叶上,确保充分混合与吸收。之后,将烟叶松散置于载物箱内,于 22℃、相对湿度 60% 的恒温恒湿箱(Pharma600 型,德国)中平衡 48 h。每组取 500 g 烟叶,共采集 120 个样品(每组 20 个)用于后续数据采集,样品丙二醇质量分数如表 1 所示。

表 1 添加丙二醇各比例梯度烟叶样品质量分数

Tab.1 Quality percentage of tobacco leaf samples with different proportions of added propylene glycol

样本名称	丙二醇施加 质量/kg	烟叶质量/kg	独立采样数量
1% 丙二醇	0.12	12	20
1.5% 丙二醇	0.18	12	20
2% 丙二醇	0.24	12	20
3% 丙二醇	0.36	12	20
4% 丙二醇	0.48	12	20
5% 丙二醇	0.60	12	20
总计	1.98	72	120

1.2 高光谱数据采集系统

搭建的高光谱成像系统如图 1 所示。主要包括载物台单元、高光谱相机单元、计算机处理单元和立式主机单元等。高光谱成像系统使用 GaiaField-V10E-AZ4 型短波红外扫帚式线扫描成像光谱仪,

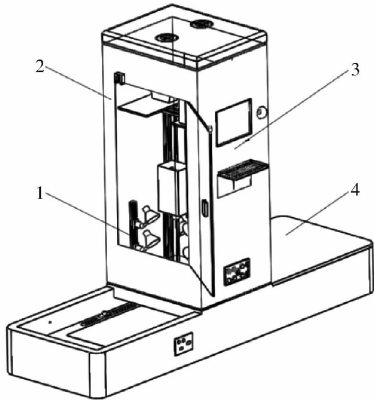


图 1 短波红外高光谱成像系统示意图

Fig.1 Schematic of shortwave infrared hyperspectral imaging system

1. 高光谱相机单元 2. 立式主机单元 3. 计算机处理单元 4. 载物台单元

设置于拍摄物体的正上方,用于获取物体的空间维度和光谱维度信息,同时配备了暗箱、消色差镜头、电动移动平台、卤素灯及计算机等装置,其中电动移动平台用来承载测试物体,多个卤素灯呈梯形结构以调节光照强度,光照均匀度高于 90%,设备主要参数与性能指标如表 2 所示。

表 2 高光谱成像系统设备参数

Tab.2 Equipment parameters of hyperspectral imaging system

参数	数值
光谱范围/nm	967.05 ~ 2 561.33
光谱分辨率/nm	5.4
光谱波段数	288
实际像元尺寸/(mm × mm)	0.67 × 0.67
探测器尺寸/(像素 × 像素)	384 × 871
镜头焦距/mm	23
最大帧率/(f · s ⁻¹)	400
位深度/bit	16
信噪比/dB	900
曝光时间/ms	0.1 ~ 20

1.3 数据分析软件

采用 ENVI 5.6、PyCharm 和 SpecView 图像采集软件进行图像处理及数据分析。使用高性能计算机安装深度学习框架 PyTorch 和 Anaconda 3 进行虚拟环境配置。CUDA 版本为 11.6,Python 版本为 3.8,PyTorch 版本为 1.13.1。为提高实验结果的可靠性,所有测试结果均为 10 次独立运行的平均值,以消除实验中的偶然性影响。

1.4 高光谱数据校正与采集

1.4.1 数据校正

在样本高光谱数据采集前,采用黑白板校正方法来消除各波段光强度不均匀性及由暗电流引起的噪声干扰。 r_{raw} 为初始的高光谱数据,使用反射率 99% 的标准白色校正板获取白板校正所需的高光谱数据 r_{white} ,然后在关闭光源并覆盖镜头盖的条件下进行黑色校正数据采集,以获取反射率为零环境下黑色校正高光谱数据 r_{dark} ,校正处理的高光谱数据 r_0 计算式^[11]为

$$r_0 = \frac{r_{\text{raw}} - r_{\text{dark}}}{r_{\text{white}} - r_{\text{dark}}}$$

经过黑白板校正的烟叶样品高光谱图像如图 2 所示。可以看出,通过黑白板校正后烟叶样品图像数据明暗强度均匀,且受噪声影响小。

1.4.2 数据采集

高光谱图像数据的采集过程为:①打开设备系统电源,设置数据存储路径,并预热约 20 min。②为消除环境光噪声和相机波长偏差的影响,每 2 h 进行一次黑白板校正数据采集。③在采集样品时,每

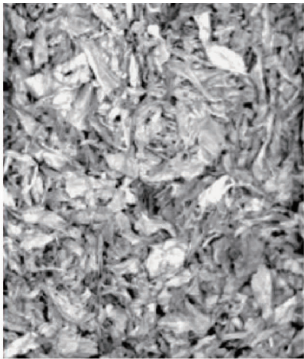


图2 经过黑白板校正的烟叶施加微量丙二醇后样品在短波红外波段下的局部视图

Fig.2 View of sample after applying trace amounts of propylene glycol in shortwave infrared range, corrected by black-and-white board

组样品均以厚度不少于 5 mm 的矩形形态铺放在黑色无反射绒布上,确保绒布平铺在传输控制台的运动方向上。为了保证数据的准确性与稳定性,实验装置的参数设置为:曝光时间 12 ms,电动位移台前进速度 1.5 cm/s,回退速度 2.0 cm/s。

在选择采集样品图像数据时,首先确定感兴趣区域(Region of interest, ROI),以便将样品与背景环境区分开来,从而降低背景信息的干扰并简化数据处理。采用形态学技术去除图像中的小噪声区域,并通过检测图像中的最大值(纯白)与最小值(纯黑)区域生成掩膜,从而忽略这些无效数据在后续计算中的影响。随后,选取烟叶的高光谱数据所在区域作为感兴趣区域,计算该区域的光谱反射率平均值,作为每组样本的代表性光谱反射率。最终,将所有样本的光谱反射率数据按比例 8:2 划分为训练集和测试集。

1.4.3 数据预处理

光谱数据预处理是提高模型性能的关键步骤,能够显著影响特征波长选择、预测误差及潜变量的数量。目前,烟草高光谱数据常用的预处理方法包括 Savitzky – Golay 滤波平滑、MSC 和 SNV 等^[12]。采用这 3 种方法对光谱数据进行处理,以修正由噪声或散射效应引起的误差。

1.4.4 特征波长选择及数据降维

为减少数据冗余并提高辨识度,采用特征提取方法对高光谱数据进行降维,这不仅有助于提升分类或回归精度,还能加速模型训练过程。分别使用竞争性自适应重加权算法(CARS)和主成分分析(PCA)对不同丙二醇添加比例的烟叶样本进行特征提取。CARS 基于偏最小二乘回归(PLSR),通过迭代筛选特征变量,并结合逐步降采样策略以减少冗余信息^[13]。其优势在于能够有效降低高维数据的

复杂性,突出关键变量,进而提高模型的预测准确性和泛化能力。PCA 是一种经典的降维技术,通过线性变换将高维数据投影至低维空间,旨在寻找能够最大程度解释数据方差的方向(即主成分)^[14],PCA 在数据降维、去噪及可视化等方面具有明显优势,有助于简化复杂数据的分析并提升模型性能。

1.5 预测模型构建

采用深度学习方法的 CNN 模型进行建模研究。该模型运用权值共享池化机制和自动提取特征等优势,能够提升模型的效果^[15]。由于对样本的高光谱数据计算属于一维图像数据,本文采用的 CNN 模型卷积核为一维卷积核,采用最大池化方法来降低特征图的维度、减小计算复杂度及保留关键特征。该模型主要由输入层、卷积层、池化层、全连接层及预测回归层组成,其中输入层用于接收光谱数据,数据尺寸根据特征选择结果(全波段、CARS 或 PCA 提取的特征)有所不同;卷积层提取输入光谱数据中的局部特征,分别使用不同卷积核,逐步提取相应层次特征;池化层在每个卷积层之后执行池化操作,以减少特征图尺寸和提高计算效率,并进一步避免过拟合现象;全连接层则将卷积层提取的特征展平,并通过全连接层进行回归预测;在每个卷积层后配合应用激活函数,能够进一步提升网络非线性能力,避免梯度消失问题;最后由输出层输出样本光谱反射率的预测回归值,实现光谱数据的预测回归任务。

另外,传统的机器学习方法,如 RF 和 PLSR 一直是高光谱成像技术应用研究中的重要组成部分^[16-17]。这些方法通过基准对比验证了深度学习模型在烟叶检测等任务中的性能提升。其中,RF 能够有效处理高维数据并评估特征重要性,为深度学习模型的优化提供指导;而 PLSR 则通过降维技术提取关键特征,结合主成分分析或回归分析,有效地降维并提取高维数据中的重要信息。由于传统模型具有较强的可解释性,它不仅有助于理解决策依据,还能通过与深度学习方法的融合与对比,提升预测准确性。通过综合分析,可以确定最优的预测模型,并实现烟叶中丙二醇含量预测结果的可视化。

2 结果与讨论

2.1 反射率数据预处理

首先使用不同的光谱预处理方法对所有数据进行预处理,每个样品的光谱反射率变化对应一条曲线,即每个图中的曲线都是由 120 个独立采样样本的平均光谱反射率构成,原始光谱数据和 3 种预处理数据的曲线如图 3 所示。

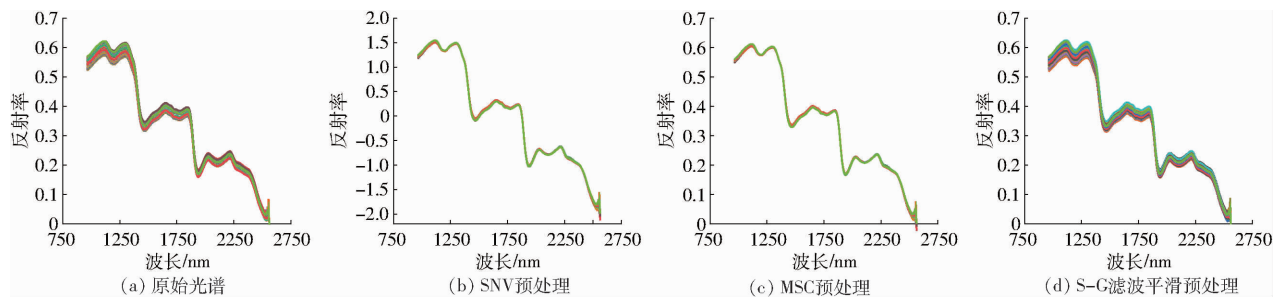


图3 原始光谱与3种预处理光谱曲线

Fig. 3 Curves of original spectrum and three preprocessed spectral curves

通过分析原始光谱与3种预处理光谱数据可知:针对不同丙二醇添加比例的烟叶样本,原始数据与预处理数据的变化趋势基本一致。SNV能够有效校正因散射引起的样品间差异,集中数据特征;MSC进一步减少因样本不均匀或粒度差异导致的散射影响,增强光谱特性;S-G滤波在去除噪声时,保留了光谱的细节,提升了曲线的平滑度和连续性^[18]。同时,光谱在波长1 196、1 470、1 775、1 941、2 107 nm等处表现出显著的反射率下降,形成局部波谷,表明这些波段的光能被有效吸收,可能与分子的振动模式匹配。特别是在波长1 450 nm附近,水和丙二醇的O—H键反映第1伸缩泛音吸收极值;在波长1 190 nm附近,碳水化合物的C—H键反映出第2伸缩泛音的吸收极值^[19]。此外,光谱在2 533 nm以后的波长显示出明显的反射率上升。

为了区分添加不同比例丙二醇的烟叶,分别计算6种比例样本平均光谱,结果如图4所示。每个添加比例对应一条平均光谱曲线。在非下降波长区间,各比例样本光谱反射率曲线具有显著的区分性,线位置点由高到低分别为3%、1%(或1.5%)、2%、5%和4%的5种比例样本。尽管1%和1.5%的样本在部分波长区间曲线有轻微重叠或交替,但整体上各光谱曲线的可区分性稳定且明显。因此表明添加不同丙二醇比例的烟叶具有明显的光谱差异,证明基于高光谱成像技术预测烟叶中丙二醇含量是一种可行的技术方案。

2.2 特征波长选择

2.2.1 CARS选择特征波长

利用CARS算法对光谱数据进行特征选择,主要是通过偏最小二乘回归算法递归移除不重要的波段,并基于重采样和加权操作,保留对目标变量最重要的波段,以提高模型预测的准确性和效率^[20]。选取交互验证均方根误差(Root mean square error with cross-validation, RMSECV)最小的PLSR模型所对应的波长作为特征波长。结果如图5所示,最终最佳迭代次数为19,此时RMSECV值最小,对应获取

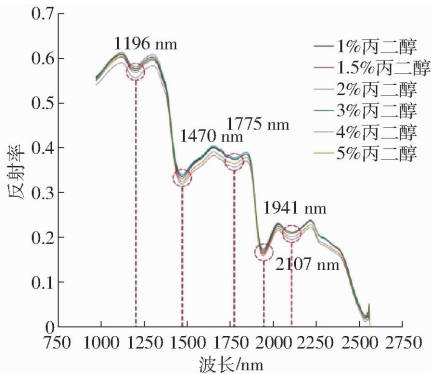


图4 施加不同比例丙二醇烟叶样本平均光谱曲线

Fig. 4 Average spectral curves of tobacco samples with different gradients of trace propylene glycol application

967、1 011、1 146、1 475、1 481、1 531、1 553、1 598、1 614、1 625、1 670、1 692、1 697、1 703、1 886、1 891、1 975、1 980、2 058、2 141、2 168、2 174、2 179、2 190、2 196、2 201、2 246、2 257、2 279、2 301、2 356、2 367、2 373、2 411、2 428、2 445、2 456、2 478、2 494、2 511、2 517、2 522 nm共42个特征波长。

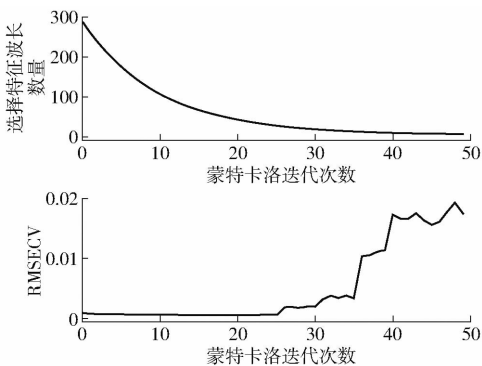


图5 CARS选择特征波长

Fig. 5 CARS selected feature bands

2.2.2 PCA提取特征波长

PCA通过降维有效减少高维波段数据的冗余性,且保留大部分信息^[21]。为确保在降维过程中保留关键数据,通过分析主成分系数矩阵选取每个主成分中贡献最大的10个波长,这些波长对应绝对值最大的系数,代表降维中最具影响力的特征波长。而且这些特征波长用于基于偏最小二乘回归算法的

回归分析,以评估模型预测性能并揭示主成分与输入数据特征的关系。如图 6 所示,前 4 个主成分累计贡献率达 99%。对应贡献度最大的特征波长主要集中在波长序号 24 ~ 33、169 ~ 176、278 ~ 287 的 3 个波段区间,实际波长为 1 096、1 101、1 107、1 112、1 118、1 124、1 129、1 135、1 140、1 146、1 614、1 903、1 908、1 914、1 919、1 925、1 930、1 936、1 941、2 295、2 506、2 511、2 517、2 522、2 528、2 533、2 539、2 544、2 550、2 555 nm,共 30 个特征波长。

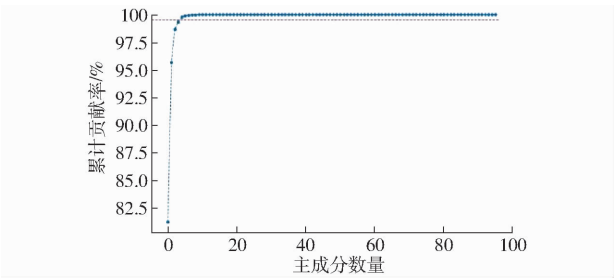


图 6 PCA 主成分数量与累计贡献率关系曲线
Fig. 6 Relationship between number of PCA principal components and cumulative contribution rate

对比分析发现,CARS 和 PCA 方法筛选出的特征波长在 1 146、1 614、2 511、2 517、2 522 nm 处具有一致性。此外,PCA 选取波长 1 941 nm 与光谱曲线第 4 波谷波长 1 941 nm 相符。综上所述,所筛选的特征波长在多个关键波段上表现出较高一致性,特别是在 1 146、1 614、2 511、2 517、2 522、1 941 nm 这

6 个波长,表明它们对烟叶微量丙二醇添加物成分的特性具有重要影响。

2.3 预测模型

2.3.1 卷积神经网络

卷积神经网络(CNN)用于处理光谱数据并输出回归预测结果,其中网络结构的卷积层与池化层提取光谱数据的时序特征,经过多层处理后,通过全连接层实现回归任务^[22]。模型包括 3 层卷积层,每层卷积核大小为 3,步长为 1,且每层卷积后特征映射维度逐步增加;第 1 层输出 16 个特征映射,第 2 层输出 32 个,第 3 层输出 64 个。每个卷积层后接最大池化层,旨在降低数据维度、控制模型复杂度并提升计算效率。全连接层用于展平卷积和池化后的特征图,并进行后续处理。第 1 层全连接层将输入维度映射为 32,第 2 层输出回归值 1。在每层卷积及全连接层后应用 ReLU 激活函数,以增强模型的非线性表示能力。最后使用 MSE 损失函数和 Adam 优化器评估回归任务的效果,模型结构及参数设置见表 3。

将 120 个样本按照比例 8:2 划分为训练集和测试集,96 个样本被选为训练集,24 个样本被选为测试集,利用决定系数 (Coefficient of determination, R^2) 和均方根误差 (Root mean square error, RMSE) 等性能指标评估回归预测能力, R^2 越大、RMSE 越小,则模型预测效果越好。将原始光谱数据和 3 种预处理后光谱数据经过不同特征波长选择后导入 CNN

表 3 CNN 模型参数设置
Tab. 3 Parameter settings of CNN model

组成部分	结构/函数	参数说明	功能特点
卷积层 1 (Conv1d)	nn. Conv1d(1,16,3,1)	输入通道数: 1,输出通道数: 16,卷积核大小: 3,步长: 1	提取一维输入数据的局部特征,输出 16 个特征映射
池化层 1 (MaxPool1d)	nn. MaxPool1d(1,1)	池化核大小: 1,步长: 1	最大池化,用于减少特征图的大小和避免过拟合
卷积层 2 (Conv1d)	nn. Conv1d(16,32,3,1)	输入通道数: 16,输出通道数: 32,卷积核大小: 3,步长: 1	提取特征,增加特征映射的维度至 32
池化层 2 (MaxPool1d)	nn. MaxPool1d(2,1)	池化核大小: 2,步长: 1	最大池化,用于压缩特征图尺寸并保持特征不变
卷积层 3 (Conv1d)	nn. Conv1d(32,64,3,1)	输入通道数: 32,输出通道数: 64,卷积核大小: 3,步长: 1	提取更深层的特征信息,特征映射维度扩展为 64
池化层 3 (MaxPool1d)	nn. MaxPool1d(2,1)	池化核大小: 2,步长: 1	进一步池化,减少特征图尺寸和提高模型的空间效率
全连接层 1 (Linear)	nn. Linear(x.size(1),32)	动态定义,输入维度取决于前一层输出的维度,输出维度: 32	将卷积层提取的特征转换为低维向量以便分类或回归
全连接层 2 (Linear)	nn. Linear(32,1)	输入维度: 32,输出维度: 1	生成回归预测值
激活函数 (ReLU)	F.relu(x)		非线性激活函数,增加网络的表达能力和避免线性模型问题
损失函数 (MSELoss)	nn. MSELoss()	均方误差 (MSE),用于回归问题的损失计算	衡量预测值与真实值之间的误差
优化器 (Adam)	optim.Adam(model.parameters(),lr=0.001)	学习率 0.001	使用自适应动量估计的 Adam 优化器,适合稀疏梯度的优化

模型,结果如表 4 所示。

表 4 基于 CNN 的各模型预测结果

Tab.4 Prediction results of various models based on CNN

选择特 征波长 方法	数据 预处理 方法	训练集		测试集	
		R_c^2	RMSE/ ($\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	R_p^2	RMSE/ ($\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$)
全波段	原始数据	0.967 6	0.003 6	0.859 5	0.003 7
	SNV	0.908 6	0.005 6	0.857 5	0.007 0
	MSC	0.977 5	0.002 7	0.971 9	0.003 4
	S-G	0.807 0	0.008 2	0.752 3	0.009 2
CARS	原始数据	0.859 0	0.007 2	0.812 9	0.007 1
	SNV	0.949 3	0.004 3	0.968 1	0.002 9
	MSC	0.941 8	0.004 5	0.903 9	0.005 7
	S-G	0.863 0	0.006 5	0.899 0	0.006 9
PCA	原始数据	0.905 3	0.005 4	0.896 7	0.006 9
	SNV	0.988 0	0.002 0	0.989 6	0.002 1
	MSC	0.986 7	0.002 1	0.985 3	0.002 5
	S-G	0.889 7	0.006 5	0.786 1	0.006 4

结果表明 SNV-PCA-CNN 模型的预测效果最好,训练集 R_c^2 为 0.988 0、RMSE 为 0.002 0 kg/kg,测试集 R_p^2 为 0.989 6、RMSE 为 0.002 1 kg/kg。MSC-PCA-CNN 模型预测效果其次,训练集 R_c^2 为 0.986 7、RMSE 为 0.002 1 kg/kg,测试集 R_p^2 为 0.985 3、RMSE 为 0.002 5 kg/kg。不同特征波长选择方法中,预测水平由高到低依次为 PCA、CARS、全波段。在数据预处理方面,SNV 能够有效校正样品间的散射效应,提高数据一致性;MSC 进一步减少了因样本不均匀或粒度差异引起的光谱散射效应,增强了光谱数据集中性和特征提取能力。相比之下,S-G 滤波尽管在平滑光谱曲线和去除噪声方面发挥了作用,但其对模型预测精度提升较为有限。因此,SNV 和 MSC 较为适合处理本研究对象的光谱数据。

2.3.2 不同模型比较

为进一步验证 CNN 模型性能,选择传统机器学习方法 RF 和 PLSR^[23] 作为对比。将原始数据与 3 种预处理算法,CARS 和 PCA 的 2 种波长选择降维算法进行组合,从 24 种组合算法中得到每类方法综合最优的前 2 个预测结果与 CNN 方法中最优前 2 个的预测模型进行对比,结果如表 5 所示。

通过分析对比 CNN、RF 和 PLSR 3 种模型,CNN 模型预测效果最佳。其中,采用深度学习网络的 SNV-PCA-CNN 模型在训练集上表现最佳。在使用传统机器学习算法的模型中,原始数据-CARS-RF 和原始数据-PCA-RF 的训练集性能表现中等,但在测试集上均显示出显著下降,尤其是原始数据-PCA-RF 测试集效果最低,反映了模型对未见数据泛化能力不足。原始数据-全波段-PLSR 的训练集

表 5 不同模型预测效果对比

Tab.5 Comparison of prediction accuracy between different models

模型	训练集		测试集	
	R_c^2	RMSE/ ($\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	R_p^2	RMSE/ ($\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$)
SNV-PCA-CNN	0.988 0	0.002 0	0.989 6	0.002 1
MSC-PCA-CNN	0.986 7	0.002 1	0.985 3	0.002 5
原始数据-CARS-RF	0.975 6	0.002 2	0.941 0	0.003 4
原始数据-PCA-RF	0.971 4	0.002 4	0.922 3	0.003 8
原始数据-全波段-PLSR	0.960 2	0.002 8	0.942 0	0.003 3
SG-全波段-PLSR	0.985 3	0.021 5	0.984 7	0.021 0

决定系数 R^2 虽然略低,但在测试集的表现则相对稳定,表明该方法在一定条件下仍具备一定的实用性。最后,SG-全波段-PLSR 的训练集表现良好,但其较高 RMSE 表明在处理数据时存在一定的稳定性不足。

综上,SNV-PCA-CNN 模型所有指标均表现优异,验证了卷积神经网络在高光谱数据分析中的优势,尤其是在复杂特征提取与预测能力方面。其他模型虽然在训练集上表现可观,但在测试集上表现显著不如 CNN 模型,显示出其在高光谱数据处理中的局限性。

2.3.3 烟叶中微量添加物比例可视化

为充分利用高光谱图像中的形态、纹理等空间信息,仅以 ROI 平均光谱反射率代表烟叶样品组不足。故采用 SNV-PCA-CNN 最优模型预测高光谱图像各像素点的微量添加物比例,实现其分布可视化。首先,加载并预处理 ENVI 格式高光谱数据,以匹配 CNN 模型输入。模型通过前向传播提取光谱特征并预测。随后,批量处理图像数据,将预测结果转换为灰度及伪彩色图,颜色条指示预测值范围:红色表示高比例添加物,蓝色表示低比例,2.5% 与 9% 丙二醇比例如图 7 所示。

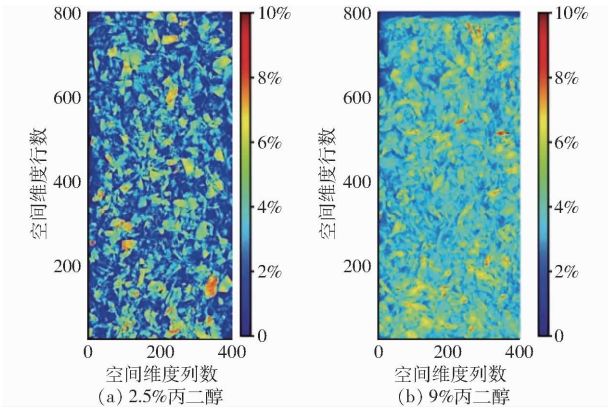


图 7 不同丙二醇微量施加比例烟叶可视化图

Fig. 7 Visualizations of tobacco leaf distribution with different micro-application ratios of propylene glycol

3 结束语

提出了基于高光谱成像的烟叶加料微量添加物无损检测方法。采用短波红外波段光谱数据,结合 SNV、MSC、S-G 滤波 3 种预处理方法及 CARS、PCA 特征选择算法,对比分析了 CNN、RF、PLSR 模型。结果表明,SNV 和 MSC 预处理效果最佳;基于光谱曲线变化,选定 5 个吸收波谷点波长,CARS 选择 42 个特征波长,PCA 提取 30 个贡献度最大波长;综合筛选得到 1 146、1 614、2 511、2 517、2 522、1 941 nm 6

个关键波长对模型建立至关重要。预测模型 SNV-PCA-CNN 前 4 个主成分累计贡献率达 99%,展现了最优预测精度和泛化能力,其训练集 R_c^2 为 0.988 0、RMSE 为 0.002 0 kg/kg,测试集 R_p^2 为 0.989 6、RMSE 为 0.002 1 kg/kg,并可实现烟叶微量添加物丙二醇含量的可视化分析,为滚筒加料机工艺参数优化提供依据。该模型显著优于传统机器学习模型,验证了卷积神经网络在高光谱数据分析中的优势,为烟草等特种经济作物高光谱无损检测提供了应用范例。

参 考 文 献

[1] 林敏,温延,刘兴乐,等.片烟加料筛分工序过程优化研究与应用[J].中国烟草学报,2019,25(5):40-43.
LIN Min, WEN Yan, LIU Xingle, et al. Optimization of tobacco strips casing and sieving process[J]. Acta Tabacaria Sinica, 2019, 25(5):40-43. (in Chinese)

[2] 赵昕,马竞一,陈晗,等.婴幼儿奶粉中多种掺假物近红外高光谱图像检测方法[J].农业机械学报,2024,55(4):368-375.
ZHAO Xin, MA Jingyi, CHEN Han, et al. Feature analysis of detection of multiple adulterants simultaneously in infant milk powder using hyperspectral images[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2024, 55(4):368-375. (in Chinese)

[3] 赵茂程,宋瑞,汪希伟,等.基于高光谱成像的肉品检测去条带噪声方法[J].农业工程学报,2022,38(8):271-280.
ZHAO Maocheng, SONG Rui, WANG Xiwei, et al. Striping noise removal method in meat detection based on hyperspectral imaging[J]. Transactions of the CSAE, 2022, 38(8):271-280. (in Chinese)

[4] 王子轩,杨良,黄凌霞,等.高光谱结合深度学习的桑椹采后 TSS 含量无损检测[J].光谱学与光谱分析,2024,44(6):1724-1730.
WANG Zixuan, YANG Liang, HUANG Lingxia, et al. Nondestructive determination of TSS content in postharvest mulberry fruits using hyperspectral imaging and deep learning[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2024, 44(6):1724-1730. (in Chinese)

[5] JIA B, WANG W, NI X, et al. Essential processing methods of hyperspectral images of agricultural and food products[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2020, 198:103936.

[6] ELMASRY G, KAMRUZZAMAN M, SUN D W, et al. Principles and applications of hyperspectral imaging in quality evaluation of agro-food products: a review[J]. Critical Reviews in Food Science & Nutrition, 2012, 52(11):999-1023.

[7] 孙宗保,李君奎,梁黎明,等.高光谱成像技术的三文鱼多品质指标的预测与分布可视化研究[J].光谱学与光谱分析,2021,41(8):2591-2597.
SUN Zongbao, LI Junkui, LIANG Liming, et al. Prediction and distribution visualization of salmon quality based on hyperspectral imaging technology[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41(8):2591-2597. (in Chinese)

[8] CHEN S Y, WANG M Y, KUO Y M, et al. Almond defect and freshness inspection system using hyperspectral imaging and deep learning techniques[J]. Postharvest Biology and Technology, 2024, 211:112837.

[9] 马燕玲,赵明霞,李自娟,等.加料回潮工序中烟叶含水率的高光谱在线检测研究[J].农机化研究,2025,47(5):132-137,172.
MA Yanling, ZHAO Mingxia, LI Zijuan, et al. Hyperspectral online detection of moisture content on tobacco leaves in feeding moisture returning process[J]. Journal of Agricultural Mechanization Research, 2025, 47(5):132-137,172. (in Chinese)

[10] 魏雷,徐迎波,曹海兵,等.基于 AE-BiRNN 的片烟含水率高光谱检测[J].烟草科技,2024,57(2):70-78.
WEI Lei, XU Yingbo, CAO Haibing, et al. AE-BiRNN-based hyperspectral detection of moisture content in tobacco strips[J]. Tobacco Science & Technology, 2024, 57(2):70-78. (in Chinese)

[11] SHI Taotao, GAO Yuan, SONG Jingyan, et al. Using VIS-NIR hyperspectral imaging and deep learning for non-destructive high-throughput quantification and visualization of nutrients in wheat grains[J]. Food Chemistry, 2024, 461:140651.

[12] 梅吉帆,李智慧,李嘉康,等.基于高光谱成像技术的配方烟丝组分判别[J].分析测试学报,2021,40(8):1151-1157.
MEI Jifan, LI Zhihui, LI Jiakang, et al. Components discrimination for formula tobacco based on hyperspectral imaging[J]. Journal of Instrumental Analysis, 2021, 40(8):1151-1157. (in Chinese)

[13] GUO P, LI T, GAO H, et al. Evaluating calibration and spectral variable selection methods for predicting three soil nutrients using Vis-NIR spectroscopy[J]. Remote Sensing, 2021, 13(19):4000.

[14] 刘翠玲,秦冬,凌彩金,等.基于高光谱图谱融合技术的英德红茶等级快速无损判别[J].农业机械学报,2023,54(3):402-410.

LIU Cuiling, QIN Dong, LING Caijin, et al. Fast nondestructive discrimination of Yingde black tea grade based on fusion of image spectral features of hyperspectral technique[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2023, 54(3): 402–410. (in Chinese)

[15] 石争浩, 仵晨伟, 李成建, 等. 航空遥感图像深度学习目标检测技术研究进展[J]. 中国图象图形学报, 2023, 28(9): 2616–2643.

SHI Zhenghao, WU Chenwei, LI Chengjian, et al. Object detection techniques based on deep learning for aerial remote sensing images: a survey[J]. Journal of Image and Graphics, 2023, 28(9): 2616–2643. (in Chinese)

[16] 张建栋, 杨忠泮, 吴恋恋, 等. 基于高光谱成像及机器学习的烟叶糖料液施加量判别模型[J]. 轻工学报, 2024, 39(5): 86–94.

ZHANG Jiandong, YANG Zhongpan, WU Lianlian, et al. Discrimination model of tobacco leaf sucrose solution application levels based on hyperspectral imaging and machine learning[J]. Journal of Light Industry, 2024, 39(5): 86–94. (in Chinese)

[17] 徐胜勇, 刘政义, 黄远, 等. 基于 Self-Attention-BiLSTM 网络的西瓜种苗叶片氮磷钾含量高光谱检测方法[J]. 农业机械学报, 2024, 55(8): 243–252.

XU Shengyong, LIU Zhengyi, HUANG Yuan, et al. Hyperspectral non-destructive detection of nitrogen, phosphorus and potassium content of watermelon seedling leaves based on Self-Attention-BiLSTM network[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2024, 55(8): 243–252. (in Chinese)

[18] 沈英, 吴盼, 黄峰, 等. 基于高光谱成像技术的赤潮藻种鉴别和浓度测量方法[J]. 光谱学与光谱分析, 2023, 43(11): 3629–3636.

SHEN Ying, WU Pan, HUANG Feng, et al. Identification of species and concentration measurement of microalgae based on hyperspectral imaging[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2023, 43(11): 3629–3636. (in Chinese)

[19] ZHU N, HUANG W, WU D, et al. Quantitative visualization of pectin distribution maps of peach fruits[J]. Scientific Reports, 2017, 7(1): 9275.

[20] 王东, 孙欣, 张岳阳, 等. 辣椒叶片水分胁迫高光谱特性研究[J]. 农业机械学报, 2024, 55(7): 336–344.

WANG Dong, SUN Xin, ZHANG Yueyang, et al. Spectral characteristics of water stress in chili pepper leaves[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2024, 55(7): 336–344. (in Chinese)

[21] 黄亦其, 刘祥焕, 黄震宇, 等. 基于高光谱成像的甘蔗叶片早期轮斑病与锈病识别技术[J]. 农业机械学报, 2023, 54(4): 259–267.

HUANG Yiqi, LIU Xianghuan, HUANG Zhenyu, et al. Identification of early wheel spot and rust on sugarcane leaves based on spectral analysis[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2023, 54(4): 259–267. (in Chinese)

[22] 孟令峰, 邢富康, 韦克苏, 等. 基于高光谱成像技术和深度学习的烤后烟叶品种分类判别[J]. 中国烟草科学, 2024, 45(4): 83–92.

MENG Lingfeng, XING Fukang, WEI Kesu, et al. Classification and identification of tobacco varieties after curing based on hyperspectral imaging and deep learning[J]. Chinese Tobacco Science, 2024, 45(4): 83–92. (in Chinese)

[23] 齐浩, 吕亮杰, 孙海芳, 等. 基于无人机高光谱遥感与机器学习的小麦品系产量估测研究[J]. 农业机械学报, 2024, 55(7): 260–269.

QI Hao, LÜ Liangjie, SUN Haifang, et al. Yield estimation of wheat lines based on UAV hyperspectral remote sensing and machine learning[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2024, 55(7): 260–269. (in Chinese)