

文章编号:1671-1513(2011)06-0073-05

高光谱图像技术检测梨表面农药残留试验研究

索少增¹, 刘翠玲¹, 吴静珠¹, 陈兴海², 孙晓荣¹, 吴胜男¹

(1. 北京工商大学 计算机与信息工程学院, 北京 100048;

2. 北京卓立汉光仪器有限公司, 北京 101149)

摘要:以滴有不同浓度毒死蜱和炔螨特农药的水晶皇冠梨为研究对象,探讨高光谱图像技术结合人工神经网络方法检测水果表面农药残留量的可行性. 分别配制不同浓度分布的毒死蜱水溶液和炔螨特水溶液样本各20个,按100 μL 和150 μL 取农药溶液滴在梨表面,在835.4678~1648.3568 nm范围采集高光谱图像,提取感兴趣区域数据得到4组样本数据,每组20个,每组随机抽取5个样本作为预测集,利用BP神经网络对每组数据分别建立数学模型. 滴有150 μL 和100 μL 农药溶液区域的建模结果为:两种农药的残留样本相关系数分别都大于0.99和0.95;RMSEC和RMSEP的最大值分别为0.6349,1.3239和1.7425,3.4417. 结果表明:150 μL 农药样本区优于100 μL 农药样本区的建模结果,高光谱图像技术结合人工神经网络法检测梨表面农药残留量是可行的,为水果表面农药残留量检测提供了新方法.

关键词:高光谱图像;BP神经网络;农药残留;毒死蜱;炔螨特

中图分类号:TS207.3

文献标志码:A

自1980年A. F. H. Goetz等人在对机载成像光谱仪改进的遥感技术重要改革中提出高光谱图像的概念以来,高光谱图像技术已经发展为覆盖了上百条光谱通道、像素点携带波谱信息量丰富的高分辨率检测技术^[1]. 高光谱图像系统包括数字摄像机和光谱仪,图像技术和光谱技术的结合使得高光谱图像技术可以同时分析目标样本的物理和化学特征,因此,在食品工业中经常被用来进行样本的识别、分类和瑕疵检测^[2].

近年来,高光谱图像技术被广泛地用于对精度要求高的农产品品质检测和食品安全方面检测的实验室研究. 洪添胜等^[3]探讨了高光谱图像技术在雪花梨品质无损检测应用中的可行性,得到了肯定的结果. 陈全胜等^[4]利用高光谱图像技术对茶叶质量等级进行判别,使用反向传播神经网络建立的模型获得了较高的识别率. 薛利红等^[5]分别使用PLS和PCR方法建立了可见近红外高光谱图像技术检测

菠菜叶片硝酸盐含量的模型,通过相关系数和均方根误差分析证明了此方法的可行性. 邹伟等^[6]使用高光谱图像技术进行油菜籽品种鉴别,得到了分类结果. 薛龙等^[7]针对水果表面农药残留,以滴有较高浓度的脐橙为研究对象,利用光谱范围425~725 nm的高光谱图像系统进行检测,发现对较高浓度的农药残留检测效果较好.

本文使用短波近红外高光谱法结合BP神经网络检测水晶皇冠梨表面微量农药残留量,旨在探讨高光谱图像技术检测微量农药残留量的可行性,并为发现微量农药残留量无损、快速、无接触和无污染的安全检测新方法^[8-9]作出贡献.

1 高光谱图像技术

高光谱图像是一种新兴的集数字摄像机和光谱摄制仪于一体的无接触式检测技术,高光谱图像系

收稿日期:2011-10-30

基金项目:北京市自然科学基金资助项目(4073031);北京市优秀人才资助项目(20081D0500300130).

作者简介:索少增,男,硕士研究生,研究方向为智能检测与数据融合理论及方法、食品安全检测技术;

刘翠玲,女,教授,博士,主要从事智能测量技术与数据处理、系统建模与仿真、智能控制等方面的研究. 通讯作者.

统采集的数据是由图像平面坐标轴和波谱空间坐标轴组成的三维的数据立方体空间,其中,图像坐标中的每个像素点都由数百张甚至更多不同波段信息的灰度图像堆叠在一起而形成完整的波谱信息^[10].

高光谱图像系统用二维阵列传感器以一条窄带扫描传送带上样本平面图像的同时获得波谱信息,从而构成三维数据空间体^[11].其中 x 轴和 y 轴确定平面可视图像的坐标,纵轴 λ 为波长信息的坐标轴.兼图像处理和光谱分析的优点,利用每个像素点都包含系统所覆盖整个波段光谱数据的原理,通过在灰度图像上选择任何感兴趣区域(region of interest, ROI)可提取波谱信息分析样本,高光谱图像原理如图1.克服了传统NIR检测方法不能精确检测到样本ROI或对样本扫描不均匀的缺点.

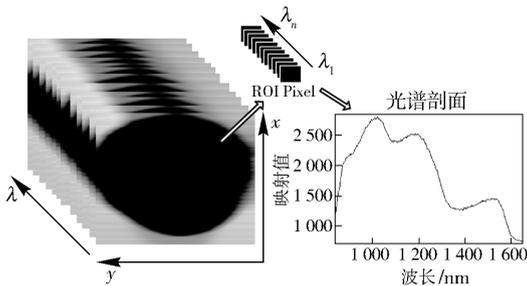


图1 高光谱图像原理

Fig.1 Principle of hyperspectral imaging

2 材料与方法

2.1 试验试剂

农药炔螨特标准物质(标准值1.00 mg/mL,以乙腈为溶剂)购自中国计量科学研究院,根据中华人民共和国农业行业标准:NY1500.41.3~1500.41.6—2009, NY1500.50~1500.92—2009规定,炔螨特最大残留量为5 mg/kg.使用标准物质在浓度范围2~20 mg/kg配制20个样本.

农药毒死蜱标准物质(标准值1.01 mg/mL,以甲醇为溶剂)同样购自中国计量科学研究院,根据中华人民共和国农业行业标准:NY1500.41.3~1500.41.6—2009, NY1500.50~1500.92—2009规定,毒死蜱最大残留量为1 mg/kg.使用标准物质在浓度范围0.03~6 mg/kg配制20个样本.

分别用移液枪取每种浓度的农药样本150 μ L和100 μ L滴在购买的可无公害水晶梨表面,放置8小时后进行数据采集.在每个水晶梨样本表面都滴有150 μ L和100 μ L的农业标准规定的最大

残留量农药样本与其他浓度农药样品进行比对.

2.2 仪器及参数设置

高光谱图像数据采集使用北京卓立汉光仪器有限公司 HyperSIS-NIR 近红外增强型高光谱成像系统.该系统主要由高光谱成像仪、CCD相机、光源、暗箱、计算机组成,如图2.光谱扫描范围:835.4678~1648.3568 nm,光谱分辨率为6.3 nm,扫描速度:60 images/s,焦平面阵列为320 \times 256,曝光时间0.03 s,传送带的传输速度为:2.35 mm/s.

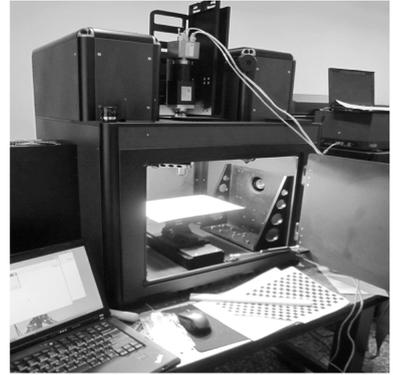


图2 北京卓立汉光仪器有限公司 HyperSIS-NIR 高光谱成像系统

Fig.2 HyperSIS-NIR hyperspectral imaging system of Zolix Instruments CO. LTD

2.3 高光谱图像采集

高光谱图像数据的采集使用 spectraSENS 高光谱软件.高光谱图像数据分析软件使用 ENVI(environment for visualizing images) 4.7, MATLAB 7.7 和 OPUS 6.5.

在采集高光谱图像数据之前,为了克服光强分布弱的波段存在的图像噪声和暗电流的影响,首先扫描标准白板采集反射率为100%的全白标定图像 D_{white} ,然后盖上摄像头盖采集反射率为0的全黑标定图像 D_{dark} ,进行黑白标定后再进行样本光谱图像 D_{sample} 的采集,由此可根据公式1得到黑白标定后的相对样本光谱图像的感兴趣像素区域 c 或波段 i 处的反射率 R :

$$R(ci) = \frac{D_{sample}(ci) - D_{dark}(ci)}{D_{white}(ci) - D_{dark}(ci)}. \quad (1)$$

3 结果与分析

3.1 感兴趣区域波谱信息的提取

采集高光谱图像数据之后,根据特征波段灰度图中明显可见的滴有农药样本的区域,以面积为80

个像素的椭圆形提取感兴趣区域,如图3。另外,在没有滴农药的皇冠梨表面区域,可以用同样的方法提取农药含量为0 mg/kg的光谱曲线。

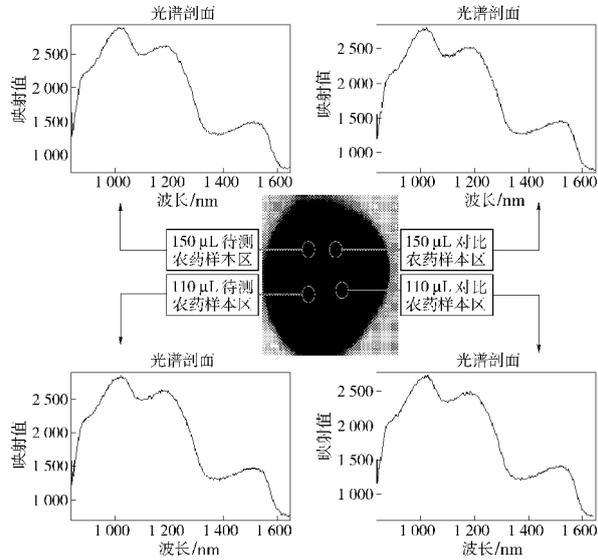


图3 感兴趣区域的光谱信息提取

Fig. 3 Drawing spectrum data from RIO of hyperspectral imaging

3.2 建立模型

提取到感兴趣区域的波谱数据后,对数据进行21点平滑和矢量归一化处理,处理后的谱图如图4。根据OPUS6.5软件分析得出的波段贡献率,毒死蜱农残样本特征波段选择为1 323.201 2~1 406.084 0。蚜螨特农残样本特征波段选取1 313.637 8~1 453.901 0和1 479.403 4~1 552.722 8两个波段。

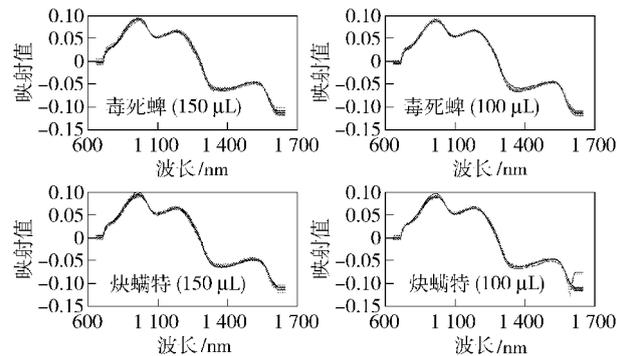


图4 预处理后4组样本的波谱图

Fig. 4 Spectra of four sample groups after Pre-Processing

3.2.1 毒死蜱样本的BP神经网络模型

把每组校正集中的16个样本做训练样本,使用MATLAB7.7神经网络工具箱中Powell-Beale共轭梯度反向传播算法训练函数(traincgb)分别为150 μL和100 μL两组毒死蜱样本的ROI波谱信息建立

3层BP神经网络模型,以神经网络输出和实际化学值的平均绝对误差(mean squared error, MSE)为其性能函数,经多次调试,根据最优结果将隐含层选为16个神经元,将训练目标误差设为0.01,训练1 000次,训练好网络后对每组的5个预测样本进行预测,模型的运行结果如下。150 μL组: $R=0.992 4$, $RMSEC=0.268 3$, $RMSEP=1.742 5$ 。100 μL组: $R=0.953 0$, $RMSEC=0.652 9$, $RMSEP=3.441 7$ 。模型的拟合结果如图5和图6,预测结果如表1和表2。

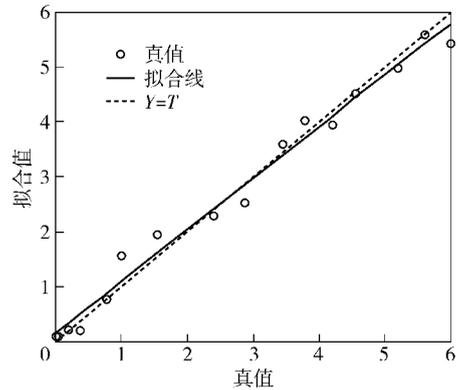


图5 毒死蜱150 μL感兴趣区域组样本拟合结果

Fig. 5 Correlation plots between prediction and actual values of 150 μL ROI for Chlorpyrifos solution

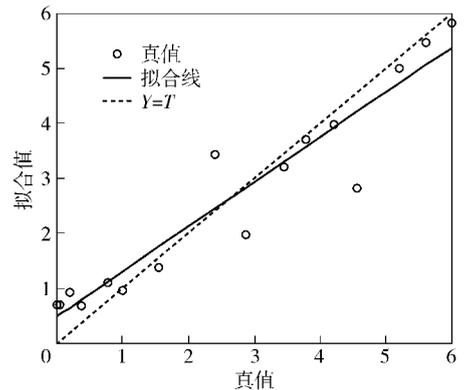


图6 毒死蜱100 μL感兴趣区域组样本拟合结果

Fig. 6 Correlation plots between prediction and actual values of 100 μL ROI for Chlorpyrifos solution

表1 毒死蜱150 μL感兴趣区域BP神经网络模型预测结果

Tab. 1 Predicting result of 150 μL ROI for Chlorpyrifos solution samples

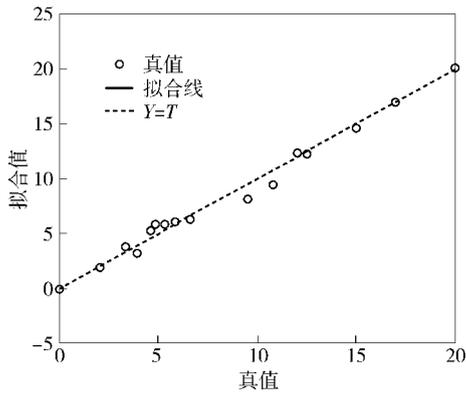
化学值/(mg·kg ⁻¹)	0.090 0	0.500 0	2.000 0	3.200 0	4.880 0
预测值/(mg·kg ⁻¹)	1.158 6	-2.720 5	2.109 7	5.103 9	4.701 2
RMSEP					1.742 5

表2 毒死蜱 100 μL 感兴趣区域 BP 神经网络模型预测结果

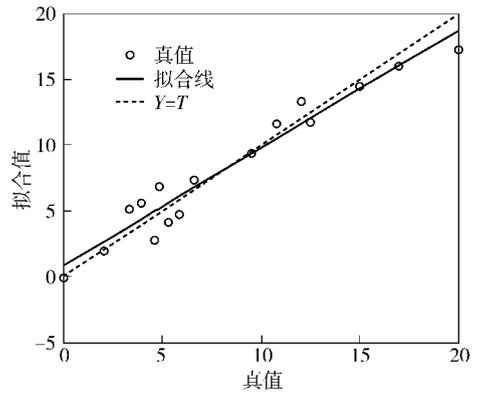
Tab. 2 Predicting result of 100 μL ROI for Chlorpyrifos solution samples	
化学值/($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	0.090 0 0.500 0 2.000 0 3.200 0 4.880 0
预测值/($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	0.978 4 0.459 2 4.806 7 8.343 2 9.789 8
RMSEP	3.441 7

3.2.2 块螨特样本的 BP 神经网络模型

用两组校正集中的 16 个样本做训练样本,利用 MATLAB7.7 神经网络工具箱中量化共轭梯度(scaled conjugate gradient, SCG)反向传播算法训练函数(trainscg 训练函数)分别为 150 μL 和 100 μL 两组块螨特样本的 ROI 波谱信息建立三层 BP 神经网络模型,以神经网络输出和实际化学值的平均绝对误差(mean squared error, MSE)为性能函数,经多次调试,根据最优结果将隐含层选为 16 个神经元,将训练目标误差设为 0.01,训练 1 000 次,训练好网络后对每组的 5 个预测样本进行预测,模型的运行结果如下. 150 μL 组: $R = 0.993 5$, $\text{RMSEC} = 0.634 9$, $\text{RMSEP} = 1.593 2$. 100 μL 组: $R = 0.972 4$, $\text{RMSEC} = 1.323 9$, $\text{RMSEP} = 2.722 7$. 模型的拟合结果如图 7 和图 8,预测结果如表 3 和表 4.

图7 块螨特 150 μL 感兴趣区域组样本拟合结果Fig. 7 Correlation plots between prediction and actual values of 150 μL ROI for Propargite solution表3 块螨特 150 μL 感兴趣区域 BP 神经网络模型预测结果

Tab. 3 Predicting result of 150 μL ROI for Propargite solution samples	
化学值/($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	2.50 0 4.300 0 5.000 0 8.000 0 13.500 0
预测值/($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	4.120 3 6.455 0 6.799 1 7.934 3 12.023 3
RMSEP	1.593 2

图8 块螨特 100 μL 感兴趣区域组样本拟合结果
Fig. 8 Correlation plots between prediction and actual values of 100 μL ROI for Propargite solution表4 块螨特 100 μL 感兴趣区域 BP 神经网络模型预测结果

Tab. 4 Predicting result of 100 μL ROI for Propargite solution samples	
化学值/($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	2.500 0 4.300 0 5.000 0 8.000 0 13.500 0
预测值/($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$)	0.175 4 4.398 0 8.021 0 6.430 5 9.020 8
RMSEP	2.722 7

4 结 论

农药残留检测问题是食品安全领域的重要内容. 由于农产品农药残留为微量检测,对仪器精度和检测方法的选择有较高的要求. 本文对高光谱图像技术检测水晶皇冠梨表面农药残留量进行了研究,充分利用人工神经网络强大的非线性映射和泛化能力建立复杂定量分析模型,对分析结果总结如下.

1) 特征波长的选取在通过主成分分析按贡献确定的波段中仍需从多波段中筛选选择农药物质的特征波段,选择过程比较繁琐,这就需要建立所有农药品种的谱库,确定特征波段,由于农药品种极多,此任务需耗费大量的时间和经费.

2) 根据建模结果,尤其对预测集的预测结果(RMSEP)来看,滴有较多农药溶液的水晶皇冠梨的建模效果较好,此方法所建立模型的适用性仍然在一定程度上受到农药残留量的制约,因此,如何优化模型提高预测能力仍需要进一步研究.

3) 在使用 BP 神经网络建模过程中,确定隐含层神经元的数目是难点之一,隐含层神经元数目太多,会出现过拟合,导致泛化能力很弱;隐含层数目太少,拟合不充分,模型质量差. 因此,需要多次调

试确定隐含层神经元。

结果表明,高光谱图像技术结合BP神经网络可用于农药残留量的检测,无需对样本进行任何预处理即可进行数据采集,高光谱图像技术是农药残留量无损、高精度和快速的检测方法。

参考文献:

- [1] Antonio P, Jon A B, Joseph W B, et al. Recent advances in techniques for hyperspectral image processing [J]. *Remote Sensing of Environment*, 2009(113):110-122.
- [2] Mohammed K, Gamal E, Sun D W, et al. Application of NIR hyperspectral imaging for discrimination of lamb muscles[J]. *Journal of Food Engineering*, 2011(104):332-340.
- [3] 洪添胜, 乔军, Wang Ning, 等. 基于高光谱图像技术的雪花梨品质无损检测[J]. *农业工程学报*, 2007, 23(2):151-155.
- [4] 陈全胜, 赵杰文, 蔡健荣, 等. 利用高光谱图像技术评判茶叶的质量等级[J]. *光学学报*, 2008, 28(4):669-674.
- [5] 薛利红, 杨林章. 基于可见近红外高光谱的菠菜硝酸盐快速无损测定研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, 29(4):926-930.
- [6] 邹伟, 方慧, 刘飞, 等. 基于高光谱图像技术的油菜籽品种鉴别方法研究[J]. *浙江大学学报: 农业与生命科学版*, 2011, 37(2):175-180.
- [7] 薛龙, 黎静, 刘木华. 基于高光谱图像技术的水果表面农药残留检测试验研究[J]. *光学学报*, 2008, 28(12):2277-2280.
- [8] 刘翠玲, 隋淑霞, 孙晓荣, 等. 近红外光谱技术用于菠菜中毒死蜃残留的定量分析研究[J]. *食品科学*, 2008, 29(7):356-358.
- [9] 刘翠玲, 隋淑霞, 吴静珠, 等. 近红外光谱技术检测溶液中中毒死蜃含量试验[J]. *农业机械学报*, 2009, 40(1):129-131.
- [10] Govindarajan K N, Lauren M G, Jeyamkondan S, et al. Visible/near-infrared hyperspectral imaging for beef tenderness prediction [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2008(64):225-233.
- [11] Millar S J, Whitworth M B, Chau A, et al. Mapping food composition using NIR hyperspectral imaging [J]. *New Food, ISSUE*, 2008(3):34-39.

Detecting Pesticide Residue on Crystal Crown Pear Surface by Hyperspectral Imaging Technology Combined with Artificial Neural Network

SUO Shao-zeng¹, LIU Cui-ling¹, WU Jing-zhu¹, CHEN Xing-hai², SUN Xiao-rong¹, WU Sheng-nan¹

(1. *School of Computer Science and Information Engineering, Beijing Technology and Business University, Beijing 100048, China*; 2. *Zolix Instruments Co. Ltd., Beijing 101149, China*)

Abstract: The hyperspectral imaging technology combined with BP neural network was used to detect pesticide residues on surface of fruit, crystal crown pears, such as chlorpyrifos and propargite pesticide. Twenty samples were prepared for both chlorpyrifos and propargite with different concentrations. Dropping the 100 μL and 150 μL pesticide solution droplets in pear surface, the hyperspectral images were scanned in 835.4678 ~ 1648.3568 nm band range. Twenty regions of interest (ROI) were available for four sample groups, from which five samples were randomly selected as predictor set. The results of models built by BP neural network for 100 μL and 150 μL pesticide solution region showed that correlation coefficient of the samples was greater than 0.99 and 0.95 respectively. RMSEC and RMSEP maximum value was respectively 0.6349, 1.3239 and 1.7425, 3.4417. The results indicated that 150 μL pesticide solution region was better than 100 μL in the modeling. Hyperspectral image technology combined with BP neural network method is feasible for detection of pesticide residues on pear surface. which provide a new method for detection of pesticide residues on fruit surface.

Key words: hyperspectral imaging; BP neural network; pesticide residue; Chlorpyrifos; propargite

(责任编辑:王 宽)