

张震,刘跃峰,李晓荣,等.不同气候区苹果酸度高光谱监测研究[J].陕西气象,2024(4):39-44.

文章编号:1006-4354(2024)04-0039-06

# 不同气候区苹果酸度高光谱监测研究

张震<sup>1,2</sup>,刘跃峰<sup>1,2</sup>,李晓荣<sup>3</sup>,刘璐<sup>1,2</sup>,梁轶<sup>1,2</sup>

(1. 陕西省农业遥感与经济作物气象服务中心,西安 710014;

2. 陕西省气象局秦岭和黄土高原生态环境气象重点实验室,西安 710014;

3. 陕西省农业农村厅技术推广总站,西安 710003)

**摘要:**酸度是衡量苹果品质的重要指标,建立不同气候区苹果酸度的快速、无损估算模型对果品检测具有重要意义。通过测定不同气候区苹果酸度及果实光谱,系统分析 350~2 500 nm 波段范围内任意两波段组合而成的归一化光谱指数(normalized difference spectral indices, NDSI,用  $I_{NDS}$  表示)、比值光谱指数(ratio spectral indices, RSI)和差值光谱指数(difference spectral indices, DSI)与苹果酸度的量化关系。结果表明:苹果酸度的敏感波段主要位于近红外区域;新开发的两波段归一化光谱指数  $I_{NDS}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  在估算苹果酸度效果最佳,可用于不同气候区苹果酸度定量监测,其与苹果酸度呈现二次多项式关系,拟合决定系数为 0.755。基于验证集数据对所建立的模型进行测试检验表明,预测值与实测值的拟合决定系数为 0.782,均方根误差为 0.057%,预测偏差为 2.1。

**关键词:**苹果;酸度;光谱指数

**中图分类号:** TN219

**文献标识码:** A

苹果因其营养价值高、生态适应强、耐储性好等优点,已成为我国国民膳食结构中的重要组成部分<sup>[1]</sup>。近年来,随着人民生活水平的提高和消费多元化的需求,消费者对苹果品质的要求越来越高<sup>[2]</sup>。消费者对苹果口感、风味、营养价值等方面的需求决定了苹果品质检测的重要性。酸度是苹果重要的品质指标。传统的苹果酸度检测方法要对待测样品进行破坏处理<sup>[3]</sup>,检测结果虽有较高精度,但测试方法繁冗复杂,时效性差<sup>[4]</sup>。在开展大批量苹果酸度检测时,耗时费力。我国作为苹果生产和消费大国,苹果种植区域广阔,有着巨大的果品检测需求<sup>[5]</sup>,迫切需要快速无损的苹果酸度检测技术手段。

高光谱技术于 20 世纪 80 年代初兴起,是新一代的光电无损检测技术<sup>[4]</sup>。近年来,高光谱成

像技术已被用于水果品质检测<sup>[6-7]</sup>,其原理是基于某些化合物对特定波长光谱具有吸收特性而进行的定量和定性分析<sup>[8-9]</sup>。然而,高光谱成像系统采集速度慢,海量数据无法实时处理<sup>[10]</sup>,在线检测仍存在一定局限性<sup>[11-12]</sup>。相比于高光谱成像系统,地物高光谱仪(FiledSpec3 型)因便携、数据处理量少等优点,已被用于水果品质检测<sup>[13]</sup>。如,杨一等<sup>[13]</sup>利用 FiledSpec3 实现了鲜枣品种的分类检测,并估算了可溶性糖含量。目前,利用 FiledSpec3 对不同气候区苹果酸度研究鲜见报道,因此,开展基于 FiledSpec3 的全国苹果酸度检测对苹果商品化处理具有重要意义。鉴于全国不同气候区苹果酸度快速监测手段的不足,本研究综合分析苹果光谱数据与苹果酸度之间的定量关系,以期构建普适性较强的苹果酸度估算模型,

**收稿日期:** 2023-05-19

**作者简介:** 张震(1991—),女,汉族,山西五台人,博士,高工,从事农业气象研究。

**通信作者:** 刘跃峰(1967—),男,汉族,陕西榆林人,学士,高工,从事农业气象研究。

**基金项目:** 陕西省气象局秦岭和黄土高原生态环境气象重点实验室开放基金课题(2022Y-18;2022G-16);陕西省自然科学基金基础研究计划项目(2024JC-YBMS-208;2022JQ-262)

为实现苹果酸度的即时检测提供理论基础。

## 1 材料与方法

### 1.1 试验设计

试验在陕西省农业遥感与经济作物气象服务中心实验室进行。苹果品种选取云南“王林”、“红露”、“玉华早富”、“华硕”、“中秋王”，四川“玉华早富”，陕西“红嘎啦”、“巴克艾”，甘肃“皇家嘎啦”，贵州“米奇拉”，山东“鲁丽”等，共 132 个样品果。通过获取全国不同气候区苹果光谱数据，提取不同气候区苹果酸度敏感的光谱波段，构建光谱指数，建立基于光谱指数的苹果酸度估算模型，实现苹果酸度的快速、无损监测。鉴于气候区划分的复杂性、数据获取和处理的难度以及构建苹果酸度监测模型的普适性的综合考虑，研究中没有对不同气候区的苹果品种进行分区研究。

### 1.2 研究方法

1.2.1 苹果光谱数据测定 利用美国 Analytical Spectral Device (ASD) 公司的 FieldSpec 3 型地物高光谱辐射仪进行苹果光谱数据的采集。该光谱仪的波段测量范围为 350~2 500 nm，其中在 350~1 000 nm 的光谱采样间隔为 1.4 nm，光谱分辨率为 3 nm；在 1 000~2 500 nm 的光谱采样间隔为 2 nm，光谱分辨率为 10 nm。350~2 500 nm 共计 2 151 个波段，由于设备在数据输出前进行了某种形式的插值或重采样，使得数据点之间的间隔是 1 nm。测量时，将苹果样品水平放置在反射率近似为零的黑色橡胶上，光纤视场角度为 25°，传感器探头垂直向下，距苹果表面垂直高度约 3 cm。光谱仪电源为 50 W 卤化灯，距苹果样品表面约 60 cm。每个苹果沿赤道均匀分布测量 5 个点，每个点以 5 条光谱为一采样光谱，以其均值作为该苹果的光谱数据，每次采集目标光谱前后都用白板校正<sup>[5]</sup>。完成所有点的测量后，通过光谱处理软件 ViewSpec Pr 对每个点的 5 条光谱数据进行平均处理，然后将 5 个点的光谱反射率进行平均作为一个样品果的光谱数据。

1.2.2 酸度的测定 苹果酸度测量使用 GMK-835N 型数显水果酸度计。使用时分稀释和酸度测量两部分。①稀释：将蒸馏水倒入稀释瓶 30 ml 刻度线，用移液枪吸取 0.3 ml 果汁样品于稀释

瓶，盖上稀释瓶盖，将果汁和蒸馏水混合均匀约 10 s。②测量：将适量待测样品放入“样品井”中，按苹果酸度测量按钮，苹果酸度值的百分比会立刻显示出来；测量完成后，用清水冲洗“样品井”并用纸巾擦干，保持“样品井”表面清洁，待下次测试。

### 1.3 数据处理

采用 Microsoft Excel 2007、Matlab 2014a 及 SPSS 21.0 软件进行数据处理及方差分析，利用 Origin 9.0 软件作图。本研究将苹果光谱数据以 2:1 的比例分为校正集 ( $n=88$ ) 和验证集 ( $n=44$ ) 两部分，且校准和验证数据集中均包含 11 个不同品种的苹果。基于校正集数据构建 350~2 500 nm 波段的任意两波段归一化光谱指数 (normalized difference spectral indices, NDSI, 用  $I_{NDS}$  表示)、比值光谱指数 (ratio spectral indices, RSI, 用  $I_{RS}$  表示) 和差值光谱指数 (difference spectral indices, DSI, 用  $I_{DS}$  表示)，分析其与苹果酸度的关系，建立估算苹果酸度的模型。模型的准确性和适用性采用预测值和实测值的预测精度 (the coefficient of determination,  $R^2$ )、均方根误差 (root mean square error, RMSE, 用  $E_{RMS}$  表示) 和预测偏差 (residual prediction deviation, RPD, 用  $D_{RP}$  表示) 进行评定。 $R^2$  表征模型的拟合度或预测值和实测值的拟合度， $E_{RMS}$  可以表示模型的预测能力， $D_{RP}$  可以体现模型的准确度和稳健性。通常认为，具有较低  $E_{RMS}$  和较高  $R^2$ 、 $D_{RP}$  的模型精度较高<sup>[5]</sup>。其中：

$$I_{NDS} = \frac{(\lambda_i - \lambda_j)}{(\lambda_i + \lambda_j)}, \quad (1)$$

$$I_{DS} = \lambda_i - \lambda_j, \quad (2)$$

$$I_{RS} = \frac{\lambda_i}{\lambda_j}. \quad (3)$$

式中， $\lambda_i$ 、 $\lambda_j$  分别是波段  $i$ 、 $j$  处的光谱反射率， $i$ 、 $j$  代表 350~2 500 nm 范围内的随机波段。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{mi} - y_{pi})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{mi} - \bar{y})^2}, \quad (4)$$

$$E_{RMS} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{pi} - y_{mi})^2}{n}}, \quad (5)$$

$$D_{RP} = \frac{D_S}{E_{RMS}}. \quad (6)$$

式中,  $y_{mi}$ 、 $y_{pi}$  和  $\bar{y}$  分别为实测值、预测值和平均值,  $n$  为样本数,  $D_S$  (standard deviation) 为数据集的标准差。

## 2 结果分析

### 2.1 苹果酸度描述性统计分析

表 1 为苹果酸度的描述性统计分析。由表 1 可见, 苹果酸度的校正集和验证集数据有着相似的统计特征。其中, 校正集的苹果酸度中值、均值、最大值、最小值、标准差分别为 0.29%、0.31%、0.59%、0.08% 和 0.12%; 验证集的苹果酸度中值、均值、最大值、最小值、标准差分别为 0.27%、0.29%、0.58%、0.08% 和 0.11%。表明校正集和验证集的苹果酸度样本有较好的代表性。

表 1 苹果酸度校正集和验证集的分析 %

| 数据集               | 中值   | 均值   | 最大值  | 最小值  | 标准差  | 偏度   |
|-------------------|------|------|------|------|------|------|
| 校正集<br>( $n=88$ ) | 0.29 | 0.31 | 0.59 | 0.08 | 0.12 | 0.54 |
| 验证集<br>( $n=44$ ) | 0.27 | 0.29 | 0.58 | 0.08 | 0.11 | 0.58 |

### 2.2 基于单波段光谱指数的苹果酸度估算

图 1 为不同气候区的苹果酸度与苹果高光谱反射率的相关分析。结果显示, 在 637~730 nm、

764~949 nm、1 019~1 124 nm 区域, 苹果原始光谱反射率与苹果酸度呈负相关, 相关性均通过 0.05 显著性水平检验; 在 647~707 nm 区域, 苹果原始光谱反射率与苹果酸度的相关性通过 0.01 显著性水平检验。原始光谱的最大相关系数波长位于 686 nm, 基于最优单波段光谱指数  $R_{686}$  的苹果酸度模型验证精度为  $R^2 = 0.18$ ,  $E_{RMS} = 0.1\%$ ,  $D_{RP} = 1.14$ 。

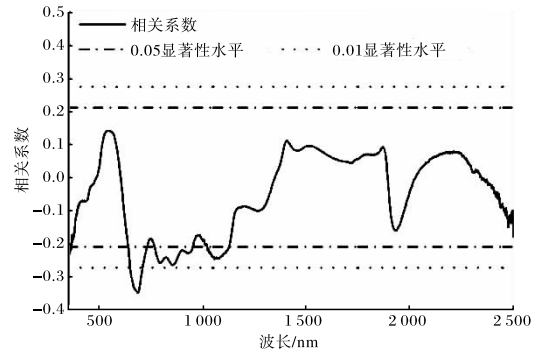
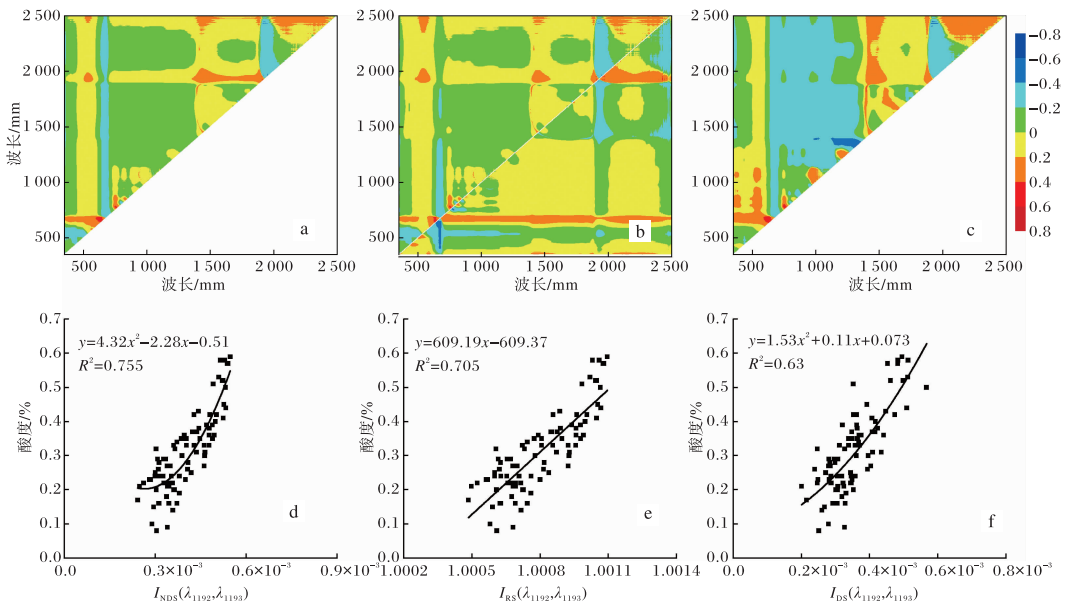


图 1 苹果酸度与原始光谱反射率之间的相关系数

### 2.3 基于两波段光谱指数的苹果酸度估算

系统分析了 350~2 500 nm 范围内任意两波段归一化 ( $I_{NDS}$ )、比值 ( $I_{RS}$ )、差值 ( $I_{DS}$ ) 光谱指数与苹果酸度之间的关系。图 2 为苹果酸度与任意两波段归一化 ( $I_{NDS}$ )、比值 ( $I_{RS}$ )、差值 ( $I_{DS}$ ) 光谱



$\lambda_{1192}$ 、 $\lambda_{1193}$  分别为 1 192、1 193 nm 波段的光谱反射率。

图 2 两波段组合的归一化光谱指数(a)、比值光谱指数(b)和差值光谱指数(c)估算苹果酸度的相关系数等势图, 苹果酸度与  $I_{NDS}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  (d)、 $I_{RS}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  (e) 和  $I_{DS}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  (f) 的关系

指数的相关系数等势图,颜色的深浅代表决定系数的高低。由此可选出估算苹果酸度的最佳波段组合区域和组合波段。由图2可见,近红外波段组成的  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$ 、 $I_{\text{RS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  和  $I_{\text{DS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  分别为用于估算苹果酸度效果最好的两波段光谱指数。 $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$ 、 $I_{\text{DS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  与苹果酸度的拟合方程为二次多项式形式,而  $I_{\text{RS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  与苹果酸度的拟合方程为线性形式。

利用验证集数据对苹果酸度的估算模型进行

验证,采用验证精度  $R^2$ 、 $E_{\text{RMS}}$  和  $D_{\text{RP}}$  进行定量评价。结果表明,基于  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$ 、 $I_{\text{RS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  和  $I_{\text{DS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  的估算模型的  $R^2$  分别为 0.782、0.765 和 0.69,  $E_{\text{RMS}}$  分别为 0.057%、0.059% 和 0.12%,  $D_{\text{RP}}$  分别为 2.1、1.9 和 0.92 (图3)。可见,  $I_{\text{DS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  在估算苹果酸度上的验证精度明显低于其他两个指数,表明  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  和  $I_{\text{RS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  在估算苹果酸度时有较高的敏感性和稳定性,以  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  效果最好。

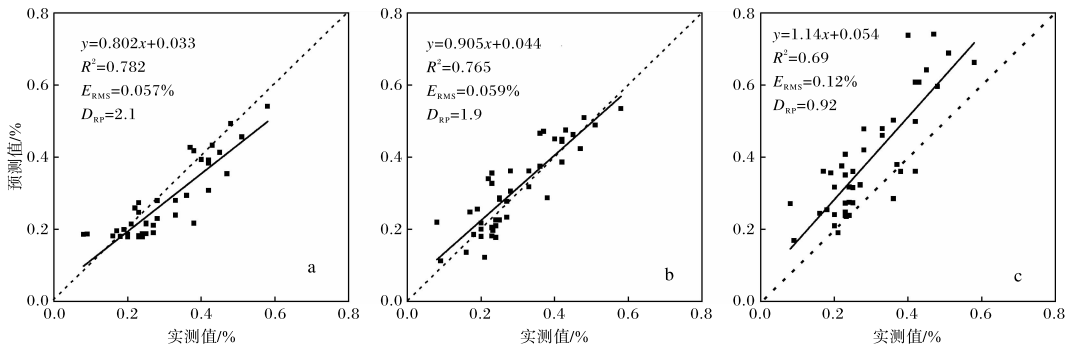


图3 基于归一化光谱指数  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  (a)、比值光谱指数  $I_{\text{RS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  (b)、差值光谱指数  $I_{\text{DS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  (c) 的苹果酸度实测值与预测值的比较

#### 2.4 基于已有光谱指数的苹果酸度估算

考虑到目前估算不同气候区苹果酸度的光谱指数存在不足,利用校正集数据,系统测试了一些已有光谱指数与苹果酸度的相关关系。研究发现,基于已有光谱指数<sup>[14-17]</sup>所构建的苹果酸度估算模型效果较差,模型验证  $R^2$  均低于 0.5,其中以 Curvature ( $\lambda_{683}, \lambda_{675}, \lambda_{691}$ ) 估算效果最好(表2),但模型验证精度远低于新构建的最优两波段光谱指数  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  ( $R^2 = 0.782$ 、 $E_{\text{RMS}} =$

0.057%、 $D_{\text{RP}} = 2.1$ )。综合比较新构建的光谱指数和已有光谱指数在苹果酸度估算中的精度,发现两波段归一化光谱指数  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  为估算苹果酸度效果最好的光谱指数。前人研究认为,有机酸存在的波段与 O-H 基团有关,这些波段与水分波段(1 157~1 364 nm)相重叠<sup>[18-19]</sup>。本研究发现,估算苹果酸度的最优波段位于水分波段(1 157~1 364 nm)区域,该结果这与前人研究结果相似。

表2 基于已有光谱指数定量估算苹果酸度的模型验证结果

| 光谱指数  | 方程                    | 验证集   |                  |                 |
|---|-----------------------|-------|------------------|-----------------|
|   |                       | $R^2$ | $E_{\text{RMS}}$ | $D_{\text{RP}}$ |
| PSRI ( $\lambda_{678}, \lambda_{500}, \lambda_{750}$ )      | $y = -0.163x + 0.39$  | 0.172 | 0.103            | 1.14            |
| MCARI ( $\lambda_{700}, \lambda_{670}, \lambda_{550}$ )     | $y = 0.095x + 0.283$  | 0.188 | 0.102            | 1.15            |
| Curvature ( $\lambda_{683}, \lambda_{675}, \lambda_{691}$ ) | $y = -0.356x + 0.617$ | 0.202 | 0.101            | 1.16            |
| NDSI ( $\lambda_{800}, \lambda_{670}$ )                     | $y = 0.178x + 0.266$  | 0.176 | 0.103            | 1.14            |

注:  $\lambda_{678}$ 、 $\lambda_{500}$ 、 $\lambda_{750}$ 、 $\lambda_{700}$ 、 $\lambda_{670}$ 、 $\lambda_{550}$ 、 $\lambda_{683}$ 、 $\lambda_{675}$ 、 $\lambda_{691}$ 、 $\lambda_{800}$  分别为相应波段的光谱反射率。

### 3 结论与讨论

新开发的两波段指数  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$  与苹果酸度间的相关性好,且预测性较好。该指数可有效估测苹果酸度。相比于新开发的两波段指数  $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$ ,已有光谱指数在估算苹果酸度时效果较差。这可能是由于本研究选取的已有光谱指数是用于估算作物叶绿素、纤维素吸收特性的光谱指数,而苹果与作物光谱在可见光/近红外区存在差异,且研究中使用的苹果为早熟品种,一定程度上影响了已有光谱指数的应用。本研究中, $I_{\text{NDS}}(\lambda_{1192}, \lambda_{1193})$ 的波段非常接近,这使得其机制难以解释。因此,今后应进一步开展相关研究解释潜在机制的合理性。此外,不同苹果品种的光谱的反射、吸收特性,可能直接或间接影响模型的稳定性。为获得更准确的监测模型,后期将加大苹果品种的样本量选取,以校正模型精度。同时,开展分品种的苹果酸度监测研究,构建不同品种的苹果酸度监测模型。

本文建立的苹果酸度估算模型是基于相同成熟度和储存条件的未剥皮早熟苹果样品,该模型用于削皮和晚熟的苹果品种酸度估算时可能存在一定局限性。由于水果酸度与外部特征(如颜色成分、含糖量)有关。因此,后期采用削皮苹果(将颜色成分的影响降至最低)、不同成熟度的苹果品种样本等,可能会进一步提高模型的准确性和稳定性。

#### 参考文献:

- [1] 陈学森,韩明玉,苏桂林. 当今世界苹果产业发展趋势及我国苹果产业优质高效发展意见[J]. 果树学报,2010,27(4):598-604.
- [2] 赵磊,吕丹. 千阳苹果种植气象条件及其变化分析[J]. 陕西气象,2021(1):56-59.
- [3] 李芳红,张晓煜,陈仁伟,等. 宁夏各产地‘红嘎啦’苹果品质分析[J]. 山东农业科学,2021,53(4):23-28.
- [4] 任显丞,张晓,彭步迅,等. 高光谱技术在苹果品质检测中的应用[J]. 安徽农学通报,2021,27(1):132-133.
- [5] ZHANG Z, LIU Y F, LIU L, et al. Estimation of apple firmness using hyperspectral spectral indices [J]. Spectroscopy Letters, 2022, 55(2): 146-156.
- [6] 徐璐. 基于可见—近红外光谱及成像技术的水果可溶性固形物含量检测[D]. 合肥:安徽大学,2019.
- [7] 王永贤. 基于高光谱成像技术的水果品质无损检测研究[D]. 泰安:山东农业大学,2020.
- [8] MA T, XIA Y, INAGAKI T, et al. Rapid and non-destructive evaluation of soluble solids content (SSC) and firmness in apple using Vis-NIR spatially resolved spectroscopy[J/OL]. Postharvest Biology and Technology, 2021, 173 [2023-04-20]. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2020.111417>.
- [9] LI B, HOU B, ZHANG D, et al. Pears characteristics (soluble solids content and firmness prediction, varieties) testing methods based on visible-near infrared hyperspectral imaging [J]. Optik, 2016, 127(5):2624-2630.
- [10] 郭志明. 基于近红外光谱及成像的苹果品质无损检测方法和装置研究[D]. 北京:中国农业大学,2015.
- [11] 杨茗淇,于济菲,黄玉萍. 近红外光谱技术在苹果品质检测中的研究进展[J]. 林业机械与木工设备,2021,49(9):4-8.
- [12] BURGER J, GOWEN A. Data handling in hyperspectral image analysis[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2011, 108(1):13-22.
- [13] 杨一,张淑娟,何勇. 基于ELM和可见/近红外光谱的鲜枣动态分类检测[J]. 光谱学与光谱分析,2015,35(7):1870-1874.
- [14] SIMS D A, GAMON J A. Relationships between leaf pigment content and spectral reflectance across a wide range of species, leaf structures and developmental stages[J]. Remote Sensing of Environment, 2002, 81(2-3):337-354.
- [15] SANTANA D C, TEIXEIRA F M C M, SILVA D M R, et al. Machine learning in the classification of soybean genotypes for primary macronutrients' content using UAV-multispectral sensor[J/OL]. Remote Sensing, 2023, 15(5) [2023-04-20]. <https://doi.org/10.3390/rs15051457>.
- [16] PONTIUS J, HALLETT R, MARTIN M. Assessing hemlock decline using visible and near-infrared spectroscopy: indices comparison and algorithm development[J]. Applied Spectroscopy, 2005, 59

- (6):836-843.
- [17] CHEN D, HUANG J, JACKSON T J. Vegetation water content estimation for corn and soybeans using spectral indices derived from MODIS near- and short-wave infrared bands[J]. *Remote Sensing of Environment*, 2005, 98:225-236.
- [18] PISSARD A, MARQUES E, DARDENNE P, et al. Evaluation of a handheld ultra-compact NIR spectrometer for rapid and non-destructive determination of apple fruit quality[J/OL]. *Postharvest Biology and Technology*, 2021, 172[2023-04-20]. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2020.111375>.
- [19] IGNAT T, LURIE S, NYASORDZI J, et al. Forecast of apple internal quality indices at harvest and during storage by VIS-NIR spectroscopy[J]. *Food and Bioprocess Technology*, 2014, 7(10):2951-2961.