

红外光谱结合基于小波变换的 LDA 和 BPNN 研究 甜橙炭疽病

赵兴祥 刘 刚 李伟星 郝建明 周湘萍 汪小华

(云南师范大学物理与电子信息学院, 云南 昆明 650500)

摘要 傅里叶变换红外 (FTIR) 光谱结合基于小波变换 (WT) 的线性判别分析 (LDA) 和反向传播网络 (BPNN) 研究了甜橙炭疽病和正常果皮。样品的红外光谱经多尺度一维连续小波变换 (CWT), 发现第 10 尺度的小波系数存在着明显的差异, 提取该尺度三个区域的系数作为特征参数建立 LDA 和 BPNN 模型, 结果表明 LDA 模型对样品的识别效果比 BPNN 模型好。选取 $1750\sim 950\text{ cm}^{-1}$ 范围内的 FTIR 光谱进行 5 尺度离散小波变换 (DWT), 选取第 5 尺度的逼近系数 (DWTAC) 和细节系数 (DWTDC) 建立 LDA 和 BPNN 模型, 结果显示利用细节系数建立的模型比逼近系数识别效果好, LDA 和 BPNN 模型对样品的识别正确率均为 95%。结果表明小波变换结合 LDA 和 BPNN 用于傅里叶变换红外光谱技术能够准确地识别甜橙炭疽病和正常果皮, 为甜橙病害检测提供快速和有效的方法。

关键词 光谱学; 傅里叶变换红外光谱; 小波变换; 线性判别分析; 反向传播网络; 炭疽病

中图分类号 O657.3 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL201441.s115003

Infrared Spectroscopy Combined with LDA and BPNN Based on Wavelet Transform to Detect Citrus Osbeck Anthracnose

Zhao Xingxiang Liu Gang Li Weixing Hao Jianming Zhou Xiangping Wang Xiaohua

(School of Physics and Electronic Information, Yunnan Normal University, Kunming, Yunnan 650500, China)

Abstract Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy combined with linear discriminant analysis (LDA) and back propagation neural network (BPNN) based on wavelet transform (WT) is applied to study citrus osbeck anthracnose and healthy peel. Continuous wavelet transform (CWT) is implemented to the FTIR spectra of anthracnose and healthy peel. By comparison, the decomposition level 10 is obviously different and proposed to extract feature vectors, then three feature regions of level 10 are used to train LDA and BPNN models. The performance of LDA algorithm is better than BPNN. On the other hand, in order to extrude the differences between anthracnose and healthy peel, discrete wavelet transform (DWT) is used to compose all spectra in $1750\sim 950\text{ cm}^{-1}$ range. Wavelet transform approximation coefficients (DWTAC) and discrete wavelet transform detail coefficients (DWTDC) of level 5 are used to train LDA and BPNN models. Results show that accuracy of both LDA and BPNN based on DWTDC (95%) is better than DWTAC. LDA and BPNN algorithms based on wavelet transform can be successfully used for identifying citrus osbeck anthracnose and healthy peel with FTIR spectroscopy. It also provides technology support to detect citrus anthracnose in early stage quickly and effectively.

Key words spectroscopy; Fourier transform infrared spectroscopy; wavelet transform; linear discriminant analysis; back propagation neural network; anthracnose

OCIS codes 140.3070; 300.6300; 300.6340; 300.6360

1 引 言

柑橘类包括柑、橘、甜橙、柚子、柠檬等品种, 是世界一大水果产业, 每年有大量柑橘新鲜果实及其

制成品出口。柑橘皮中的类黄酮、柠檬苦素、类胡萝卜素、生物碱等物质具有很高的药用价值, 其中类黄酮具有清除自由基、抗氧化、抗癌、调节心血管、抗血

收稿日期: 2013-09-01; **收到修改稿日期**: 2013-10-01

基金项目: 国家自然科学基金(30960179)

作者简介: 赵兴祥(1987—), 男, 硕士研究生, 主要从事生物光谱学方面的研究。E-mail: zhaoxxiang1987@sina.com

导师简介: 刘 刚(1966—), 男, 博士, 教授, 主要从事生物光谱学、生物医学光子学等方面的研究。

E-mail: gliu66@163.com(通信联系人)

栓等作用^[1-3]。柑橘因其营养价值及保健价值高而深受消费者亲睐,新鲜果实及果汁已成为日常饮食必不可少的一部分。然而植株生长过程中经常受到病虫害的侵袭,造成产量下降和品质降低。

炭疽病是常见柑橘病害之一,病原菌属于炭疽菌属的两个种,分别为胶孢刺盘孢和尖孢刺盘孢,可危害叶片、枝梢、幼果、果梗和成熟果实,轻则减产,重则导致植株死亡。炭疽病造成采前大量落果,潜伏的病原菌继续危害运输和贮藏期果实,引起大量的经济损失,阻碍着柑橘产业高产、稳产和优质发展。目前炭疽病主要通过化学药剂防治,残留的农药对人体有害且污染环境,破坏生态系统平衡,生物防治具有安全、有效、无毒、无残留等优点,已经用于柑橘炭疽病的防治^[4]。

柑橘炭疽病病原体的鉴定和检测工作受到人们重视,常规的鉴定标准和方法如繁殖体的显微形态、菌落形态、半选择性培养基等,但此类技术容易受到环境的影响。随着分子生物学技术的发展,特异引物聚合酶链反应(PCR),同工酶(致病基因产物)分析、脉冲场电泳、DNA 序列分析、限制性酶切分析、分子标记用于柑橘炭疽病病原菌分子鉴定结果可靠,但需要大量的实验材料和繁重的实验操作过程^[5-7]。光谱和成像技术具有快速、无损、操作简单等优点,结合化学计量学已经用于果树病虫害检测。Qin 等^[8]利用高光谱成像技术结合主成分分析识别柑橘溃疡病果实的正确率达到了 92.7%。Sankaran 等^[9]基于可见近红外光谱技术结合二次判别分析和相似分析法对柑橘黄龙病和正常叶进行判别分析,识别正确率超过 85%。傅里叶变换红外(FTIR)光谱技术具有样品制备简单、重复性好、测量结果准确等优点,根据不同样品的指纹特征与模式识别结合已经广泛应用于微生物的鉴别、中药材真伪鉴别、基因工程等领域^[10-11]。然而,分子生物学技术检测甜橙炭疽病复杂耗时且成本较高,本文利用傅里叶变换红外光谱技术结合基于小波变换的线性判别分析和反向传播网络(BPNN)研究甜橙炭疽病和正常果皮,为炭疽病的早期诊断提供快速和有效的方法。

2 实验部分

2.1 仪器设备

红外光谱仪为 Perkin Elmer 公司的 Frontier-IR 傅里叶变换红外光谱仪,配备氘化三甘氨酸硫酸酯(DTGS)探测器,数据采集软件为 Spectrum 10.0,扫描范围为 4000~400 cm⁻¹,分辨

率为 4 cm⁻¹,扫描次数为 16 次,压片机为上海山岳科学仪器有限公司生产的 YP-2 型压片机。

2.2 样品来源和处理

从水果超市收集贮藏期炭疽病不同严重程度的甜橙果实 30 个,炭疽病症状明显,可以通过肉眼判定,通过取病害果实的果皮病变部位放在空气中晾干,30 个正常果实作为对照组,共计 60 个样品。

2.3 红外光谱测定

每个样品取 1 mg 加入适量溴化钾研磨均匀,压片测定样品的傅里叶变换红外光谱,纯溴化钾片为背景进行扫描,所有光谱都已扣除溴化钾背景光谱。

2.4 数据处理

红外光谱经 Omnic 8.0 基线校正和归一化后保存为 CSV 格式,利用 Matlab7.1 软件对红外光谱进行连续小波变换(CWT)和离散小波变换(DWT),选取不同的小波系数建立线性判别分析和反向传播网络模型。

3 结果与讨论

3.1 甜橙果皮的红外光谱特征分析

炭疽病和正常果皮的傅里叶变换红外光谱如图 1 所示,从图 1 看出炭疽病和正常果皮的红外光谱有一些共同特征峰,3400 cm⁻¹附近强且宽的吸收峰归属为 O-H 伸缩振动,2923 cm⁻¹是亚甲基 C-H 反对称伸缩振动吸收峰,2851 cm⁻¹是亚甲基 C-H 对称伸缩振动吸收峰,1732 cm⁻¹是酯羰基 C=O 伸缩振动吸收峰^[12-13]。1630 cm⁻¹附近主要是共轭羰基 C=O 的伸缩振动吸收峰,同时也可能含有 O-H 的弯曲振动吸收^[14-15]。

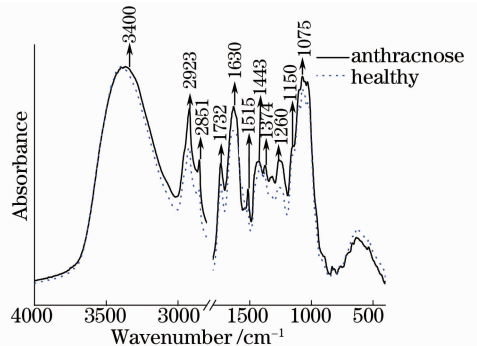


图 1 炭疽病和正常果皮 4000~400 cm⁻¹范围内的傅里叶变换红外光谱

Fig.1 FTIR spectra of citrus osbeck anthracnose and healthy peel in the range of 4000~400 cm⁻¹

1515 cm⁻¹和 1443 cm⁻¹是芳环骨架振动吸收峰,1374 cm⁻¹附近是 C-H 的弯曲振动吸收峰,

1630、1515、1443、1260 cm^{-1} 附近吸收峰较强,说明橙皮中含有较多的黄酮类^[15-17]。2923、1630、1440、1376、892 cm^{-1} 是橙皮挥发油中柠檬烯吸收峰,而 1260 cm^{-1} 和 1024 cm^{-1} 是橙皮挥发油中 α -蒎烯吸收峰^[17-18]。1200~700 cm^{-1} 主要是多糖及其糖类异构体的吸收,1150 cm^{-1} 归属为 β -1,4 葡萄糖单元的振动吸收,1075 cm^{-1} 是 β -半乳糖的吸收峰^[19-22]。

从图 1 看出,3400 cm^{-1} 附近炭疽病吸收峰比正常果皮宽且往低波数方向移动,正常果皮亚甲基反对称伸缩振动吸收峰在 2923 cm^{-1} ,而炭疽病在 2920 cm^{-1} ,降低了 3 cm^{-1} ,且强度较强。炭疽病果皮在 1732 cm^{-1} 吸收峰比正常果皮强很多,即酯类含量比正常果皮高。炭疽病果皮在 1374 cm^{-1} 出现中等强度吸收峰,正常果皮在 1370 cm^{-1} 出现,往低波数方向移动了 4 cm^{-1} 。

3.2 傅里叶变换红外光谱连续小波变换分析

傅里叶变换红外光谱进行连续小波变换需根据实际情况选择不同的小波基,分解不同的尺度,连续小波变换分解的标准是突出原始光谱中的若干特征峰,并选取平滑性好的小波基。因 Morlet 小波具有频域能量集中,通频带窄,频率混叠影响小,变换后信号不失真等特点,选择 Morlet 小波做小波母函数,对 60 个样品的傅里叶变换红外光谱进行 30 尺度一维连续小波变换,经比较发现炭疽病和正常果皮第 10 尺度连续小波变换系数的差异最明显,如图 2 所示,选取图中三个区域内的数据进行分析。两种样品在 1515、1443、1374、1260、1075 cm^{-1} 特征峰具有明显的差异,这些特征峰主要来自黄酮类和多糖的吸收。

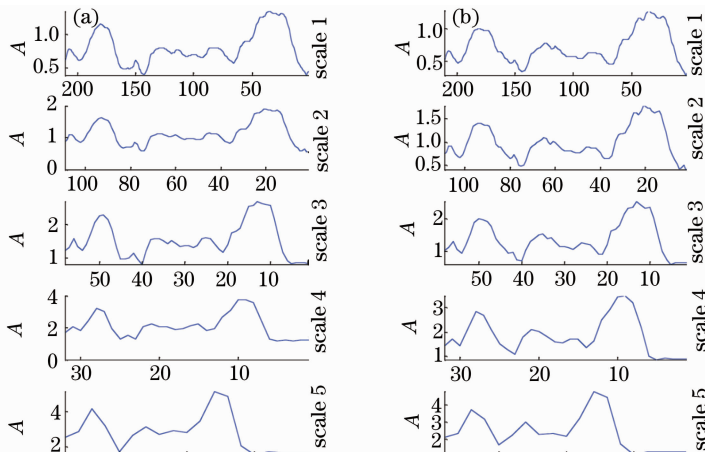


图 3 离散小波变换甜橙(a)炭疽病和(b)正常果皮傅里叶变换红外光谱的逼近系数

Fig. 3 Approximation coefficients of FTIR spectra of citrus osbeck (a) anthracnose and (b) healthy peel with DWT

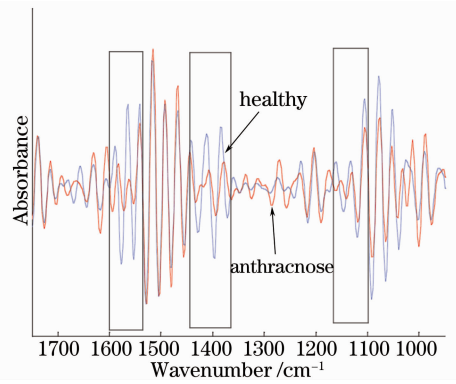


图 2 连续小波变换多分辨率分解炭疽病和正常果皮的傅里叶变换红外光谱结果

Fig. 2 Result of multi-resolution decomposition FTIR spectra of citrus osbeck anthracnose and healthy peel with CWT

3.3 傅里叶变换红外光谱离散小波变换分析

离散小波变换用于红外光谱分析结果表明背景信息主要分布在低频部分,噪声主要分布在高频部分,有用信息主要分布在中间细节部分。1750~950 cm^{-1} 范围内红外光谱用 4 阶的 Daubechies 小波(Db4)为母小波进行了 5 次压缩,即分解水平数为 5,按照 Mallat 算法,每分解一次,数据维数降低一半,并不影响红外吸收信号的位置,去除了干扰信号,能够提高分辨率。炭疽病和正常果皮傅里叶变换红外光谱第 1~5 尺度离散小波变换逼近系数和细节系数分别如图 3,4 所示。比较图 3 和图 4 可以看出,逼近系数是红外光谱的“骨架”信息,轮廓上逼近原始信号,而细节系数为红外光谱“局部”的细微信息。炭疽病和正常果皮的各尺度逼近系数很相似,几乎没有什么差别,而第 4 和第 5 尺度细节系数存在明显的差异。

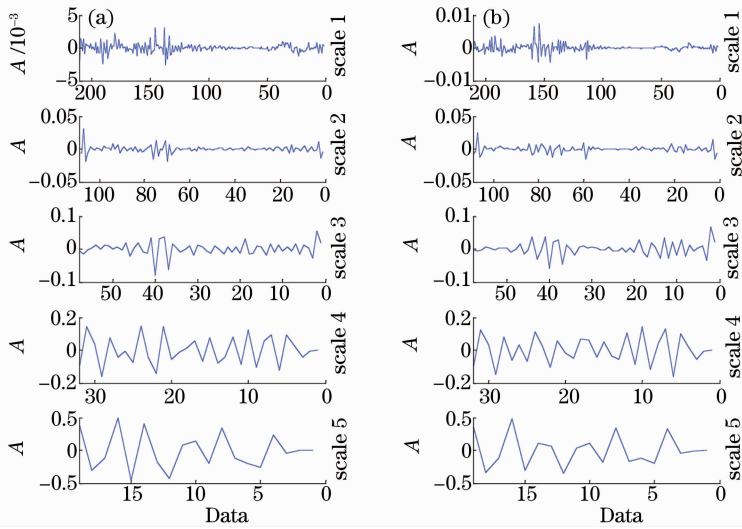


图 4 离散小波变换甜橙(a)炭疽病和(b)正常果皮红外光谱的细节系数

Fig. 4 Detail coefficients of FTIR spectra of citrus osbeck(a) anthracnose and (b) healthy peel with DWT

3.4 线性判别分析判别结果

判别分析先根据已知类别事物的性质,利用某种技术建立函数式,然后对未知类别的新事物进行判别并归入已知的类别中。线性判别分析是特征提取中最为经典和广泛使用的方法之一,基本思想是在最小均方下选择最能分开各类数据特征,样本在特征空间中类间尽可能彼此远离,类内尽可能紧凑,从而使样本具有最佳的可分离性。随机选取炭疽病和正常果皮各 20 个样本作为训练集,剩余 20 个样本作为测试集,其中 1~10 样本为炭疽病,11~20 样本为正常果皮,用 1 和 0 分别代表炭疽病和正常果皮。选取第 10 尺度连续小波变换系数(CWTC)、第 5 尺度离散小波变换逼近系数(DWTAC)和细节系数(DWTDC)作为变量对 20 个未知样品进行判别,判别的正确率均为 95%。

3.5 BPNN 识别结果

反向传播网络在结构上类似于多层感知器,理论上三层网络可以很好的解决一般的模式识别问题,而对于模式识别问题一般采用多节点输出。本文确定的三层网络为一个输入层、一个隐含层和一个输出层。隐含层节点数的多少对 BPNN 的识别效果有很大影响,隐含层节点数一般不大于输入信号的个数,隐含层节点数过多,网络易于区分各样本之间的细微差别,但网络的复杂程度增加,收敛速度减慢,增加网络训练时间,隐含层节点数参考公式

$$n_1 = \sqrt{n + m} + a, \quad (1)$$

式中 n, m 分别为输入层和输出层神经元个数, a 为 1~10 之间的常数。

选取第 10 尺度连续小波变换系数,第 5 尺度离

散小波变换逼近系数和细节系数各 19 个变量作为网络输入值,输出层神经元个数为 2,以(1,0)和(0,1)分别代表炭疽病和正常果皮,隐含层的神经元个数分别设定为从 5 到 16 之间的整数,通过比较分类正确率,最终确定隐含层神经元个数。网络的输入向量范围为[-1 1],隐含层神经元的传递函数采用 S 型正切函数 tansig,输出模式为 0-1,输出层神经元传递函数采用 S 型对数函数 logsig。网络训练函数采用 trainlm,学习函数为 learnngdm,最大次数为 1000,训练目标为 0.01,学习速率为 0.1。连续小波变换系数、离散小波变换逼近系数和细节系数建立 BPNN 模型的识别正确率随隐含层节点数变化情况如图 5 所示。从图 5 看出,连续小波变换系数和离散小波变换逼近系数神经网络最佳隐含层节点数分别为 7 和 9,而离散小波变换细节系数隐含层节点数对网络识别正确率没有影响,考虑网络训

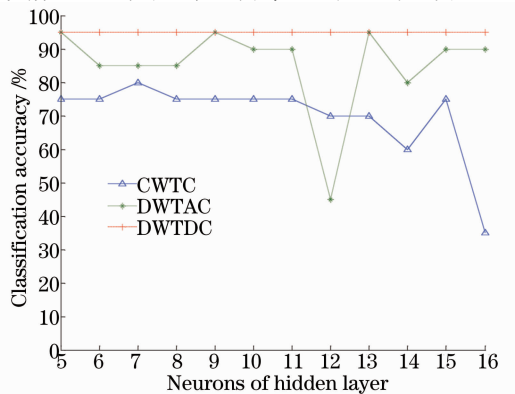


图 5 BPNN 隐含层不同节点数的识别正确率

Fig. 5 Recognition accuracy of different number of nodes in BPNN hidden layer

练时间,最佳隐含层节点数确定为 5。利用连续小波变换系数建立 BPNN 模型识别正确率为 80%,而利用离散小波变换逼近系数和细节系数建立 BPNN 模型识别正确率均为 95%。

4 结 论

炭疽病引起柑橘落果和果实腐烂,引起大量的经济损失,利用傅里叶变换红外光谱技术结合基于小波变换的线性判别分析和反向传播网络研究了甜橙炭疽病和正常果皮。样品的红外光谱经一维连续小波变换后,1750~950 cm^{-1} 范围内的连续小波变换系数存在明显的差异,选取 1750~950 cm^{-1} 范围内的红外光谱进行 5 尺度离散小波变换,第 5 尺度小波变换细节系数存在明显的差异。选取连续小波变换系数、离散小波变换细节系数和逼近系数建立 LDA 和 BPNN 模型识别未知样品。通过比较发现,利用离散小波变换细节系数建立的 LDA 和 BPNN 模型比其他两种系数建立的模型识别效果好。结果表明小波变换结合线性判别分析和反向传播网络应用于傅里叶变换红外光谱技术中能够准确识别甜橙炭疽病和正常果皮,为甜橙炭疽病的早期检测提供快速和便捷的方法。

参 考 文 献

- Ramful D, Bahoron T, Bourdon E, *et al.*. Bioactive phenolics and antioxidant propensity of flavedo extracts of mauritian citrus fruits: potential prophylactic ingredients for functional foods application[J]. *Toxicology*, 2010, 278(1): 75-87.
- Barreca D, Bellocco E, Caristi C, *et al.*. Elucidation of the flavonoid and furocoumarin composition and radical-scavenging activity of green and ripe chinotto (*Citrus myrtifolia* Raf.) fruit tissues, leaves and seeds[J]. *Food Chemistry*, 2011, 129(4): 1504-1512.
- Su M S, Shyu Y T, Chien P J. Antioxidant activities of citrus herbal product extracts[J]. *Food Chemistry*, 2008, 111(4): 892-896.
- Wang Qian, Hu Chunjin, Ke Fanggang, *et al.*. Characterization of a bacterial strain T132 and its effect on postharvest citrus anthracnose[J]. *Microbiology China*, 2012, 39(9): 1260-1271. 汪茜, 胡春锦, 柯仿钢, 等. 生防细菌 T132 的鉴定及其对采后柑橘炭疽病的抑制效果[J]. *微生物学通报*, 2012, 39(9): 1260-1271.
- Peres N A, Kenzie S J M, Peever T L, *et al.*. Postbloom fruit drop of citrus and key lime anthracnose are caused by distinct phylogenetic lineages of *Colletotrichum acutatum* [J]. *Phytopathology*, 2008, 98(3): 345-352.
- Chung K R, Shilts T, Li W, *et al.*. Engineering a genetic transformation system for *Colletotrichum acutatum*, the causal fungus of lime anthracnose and postbloom fruit drop of citrus[J]. *FEMS Microbiology Letters*, 2002, 213(1): 33-39.
- Wang Zhen, Yang Mei, Yang Yingqing, *et al.*. Morphological and molecular identification of citrus anthracnose pathogen from Guangdong Province[J]. *Mycosystema*, 2010, 29(4): 488-

493.

- 王震, 杨媚, 杨迎青, 等. 广东省柑橘炭疽病原菌的形态与分子鉴定[J]. *菌物学报*, 2010, 29(4): 488-493.
- Qin J W, Burks T F, Kim M S, *et al.*. Citrus canker detection using hyperspectral reflectance imaging and PCA-based image classification method[J]. *Sens & Instrument Food Qual*, 2008, 2(3): 168-177.
- Sankaran S, Ehsani R. Visible-near infrared spectroscopy based citrus greening detection: evaluation of spectral feature extraction techniques[J]. *Crop Protection*, 2011, 30(11): 1508-1513.
- Lai Bo, Qin Hongke, Zhou Yuexi, *et al.*. Rapid detection of the degradation of the typical pollutants from ABS wastewater using Fourier transform infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2011, 31(2): 0230001. 赖波, 秦红科, 周岳溪, 等. 应用红外光谱技术快速检测 ABS 废水中特征污染物的分解转化[J]. *光学学报*, 2011, 31(2): 0230001.
- Huang Furong, Luo Yunhan, Zheng Shifu, *et al.*. Near-infrared spectroscopic analysis and model optimization on cholesterol and triglyceride in whole blood[J]. *Acta optica sinica*, 2011, 31(10): 1030001. 黄富荣, 罗云瀚, 郑仕富, 等. 全血胆固醇、甘油三酯近红外光谱分析与模型优化[J]. *光学学报*, 2011, 31(10): 1030001.
- Hawkins S A, Park B, Poole G H, *et al.*. Comparison of FTIR spectra between Huanglongbing (citrus greening) and other citrus maladies[J]. *J Agric Food Chem*, 2010, 58(10): 6007-6010.
- Monti F, Anna R D, Sanson A, *et al.*. A multivariate statistical analysis approach to highlight molecular processes in plant cell walls through ATR FT-IR microspectroscopy: the role of the α -expansin PhEXPA1 in *Petunia hybrida* [J]. *Vibrational Spectroscopy*, 2013, 65: 36-43.
- Yu Peng, Xu Rui, Cheng Cuigui. Recognition among three kinds of peridophyte plants based on Fourier transform infrared-discrete wavelet feature extraction and artificial neural network classification method [J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2012, 3(40): 371-375. 余鹏, 徐锐, 程存归. 离散小波特征提取及人工神经网络分类法的傅里叶变换红外光谱法识别鳞毛蕨科 3 种植物[J]. *分析化学*, 2012, 3(40): 371-375.
- Sun Suqin, Zhou Qun, Chen Jianbo. Analysis of Traditional Chinese Medicine by Infrared Spectroscopy [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2010. 95. 孙素琴, 周群, 陈建波. 中药红外光谱分析与鉴定[M]. 北京: 化学工业出版社, 2010. 95.
- Bombalska A, Oliwa M M, Kwasny M, *et al.*. Classification of the biological material with use of FTIR spectroscopy and statistical analysis[J]. *Spectrochim Acta (A)*, 2011, 78(4): 1221-1226.
- Zhou Xin, Sun Suqin, Huang Qinghua. Identification of pericarpium citri reticulatae from different regions using FTIR [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2007, 27(12): 2453-2455. 周欣, 孙素琴, 黄庆华. FTIR 对不同产地陈皮的鉴别研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2007, 27(12): 2453-2455.
- Gong Fan, Liang Yiceng, Song Youqun, *et al.*. Determination of the volatile oil of pericarpium citri reticulatae with gas chromatography/mass spectrometry [J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2000, 28(7): 860-864. 龚范, 梁逸曾, 宋又群. 陈皮挥发油的气相色谱/质谱分析[J]. *分析化学*, 2000, 28(7): 860-864.
- Adian M A, Mazura M P. Study on Senna alata and its different extracts by Fourier transform infrared spectroscopy and two-dimensional correlation infrared spectroscopy [J]. *Journal of Molecular Structure*, 2011, 991(1-3): 84-91.
- Mecozzi M, Pietroletti M, Tornambè A. Molecular and

- structural characteristics in toxic algae cultures of *Ostreopsis ovata* and *Ostreopsis* spp. evidenced by FTIR and FTNIR spectroscopy[J]. *Spectrochim Acta (A)*, 2011, 78(5): 1572—1580.
- 21 Gorgulu S T, Dogan M, Severan F. The characterization and differentiation of higher plants by Fourier transform infrared spectroscopy[J]. *Applied Spectroscopy*, 2007, 61(3): 300—308.
- 22 Zhang Yibo, He Huan, Meng Qingfan, *et al.*. Application of near infrared reflectance spectroscopy-radial basis function neural network for non-destructive determination of *coriolus versicolor* [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 30(12): 3552—3557.

栏目编辑:韩 峰