

# 基于光声光谱结合LS-SVR的稻种活力快速无损检测方法研究

李欢欢<sup>1</sup> 卢伟<sup>1,2</sup> 杜昌文<sup>3</sup> 马菲<sup>3</sup> 罗慧<sup>1</sup>

<sup>1</sup>南京农业大学工学院江苏省现代设施农业技术与装备工程实验室, 江苏 南京 210031

<sup>2</sup>远程测控技术江苏省重点实验室, 江苏 南京 210096

<sup>3</sup>中国科学院南京土壤研究所土壤与农业可持续发展国家重点实验室, 江苏 南京 210008

**摘要** 传统活力检测方法存在操作复杂、耗时长、可重复性差、对种子造成损伤且不可逆等不足,基于此,提出一种基于光声光谱结合最小二乘支持向量机回归(LS-SVR)的稻种活力快速、无损检测方法。在温度为45℃、相对湿度为90%的条件下,对南粳46(粳稻)和内5优8015(杂交稻)进行高温高湿人工老化处理,依次老化0,24,48,72,96h,获得不同活力的稻种;采集2类稻种光声光谱数据,总计100份,其中校正集样本60个,预测集样本40个;采用小波包对原始光谱数据进行预处理,通过协方差分析和主成分分析(PCA)对光谱进行降维;分别通过偏最小二乘回归(PLSR)、反向传播神经网络(BPNN)和LS-SVR建立稻种活力预测模型。其中,采用协方差分析结合LS-SVR建立的模型性能最优,该模型不仅适用于单一稻种,而且适用于不同种类稻种活力的预测。研究表明,采用光声光谱技术结合LS-SVR对稻种活力进行测定是可行的,且所建模型在稻种活力预测方面具有较好的预测精度,为便携式水稻活力光声光谱仪的研制提供了理论依据。

**关键词** 光谱学;光声光谱;稻种;活力;小波包;最小二乘支持向量机回归

中图分类号 S511;S339.3+1;TH744.1

文献标识码 A

doi: 10.3788/CJL201542.1115003

## Study on Rapid and Non-Destructive Detection of Rice Seed Vigor Based on Photoacoustic Spectroscopy Combined with LS-SVR

Li Huanhuan<sup>1</sup> Lu Wei<sup>1,2</sup> Du Changwen<sup>3</sup> Ma Fei<sup>3</sup> Luo Hui<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Jiangsu Provincial Laboratory of Modern Facility Agriculture Technology and Equipment Engineering, College of Engineering, Nanjing Agricultural University, Nanjing, Jiangsu 210031, China

<sup>2</sup>Jiangsu Provincial Key Laboratory of Remote Measurement and Control Technology, Nanjing, Jiangsu 210096, China

<sup>3</sup>State Key Laboratory of Soil and Sustainable Agriculture, Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing, Jiangsu 210008, China

**Abstract** Considering that the traditional method for vigor test is complex, time-consuming, with poor reproducibility, irreversible, and likely to cause damage to the seed, a rapid and non-destructive testing method of rice seed vigor based on photoacoustic spectroscopy technology and least squares support vector regression (LS-SVR) is proposed. Under the condition of temperature of 45℃ and relative humidity of 90%, Nanjing46 (japonica rice) and Nei5you 8015 (hybrid rice) rice seeds are artificially aged for 0, 24, 48, 72, 96 h to get rice seeds with different vigor. Spectral data of 100 samples for the two types of rice seeds are collected and divided into a calibration set (60 samples) and a prediction set (40 samples). Wavelet packet analysis is used in spectral preprocessing. Dimensionality reduction of the spectrum data is realized by covariance analysis and principal

收稿日期: 2015-06-01; 收到修改稿日期: 2015-07-14

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(61401215)、中央高校基本科研业务经费(KYZ201427)、江苏省自然科学基金青年基金(BK20130696)、远程测控技术江苏省重点实验室开放基金(YCCK201501)

作者简介: 李欢欢(1994—),男,本科生,主要从事农产品无损检测技术方面的研究。E-mail: hhljnau@126.com

导师简介: 卢伟(1978—),男,博士,副教授,主要从事农产品无损检测技术与农业机器人等方面的研究。

E-mail: njaurobot@njau.edu.cn(通信联系人)

component analysis (PCA). Prediction models of rice seed vigor are established respectively by partial least squares regression (PLSR), back propagation neural network (BPNN) and LS-SVR. The results show that the optimal model is constructed by covariance analysis and LS-SVR, and the model is not only suitable for single rice species, but also for different types of rice seed in vigor forecast. The experiment shows that it is feasible that rice seed vigor is detected rapidly and non-destructively by photoacoustic spectroscopy technology and LS-SVR. The model has better prediction accuracy in vigor detection, and provides a theoretical basis for the development of portable rice seed vigor spectrometers.

**Key words** spectroscopy; photoacoustic spectroscopy; rice seed; vigor; wavelet packet; least squares support vector regression

**OCIS codes** 300.6300; 300.6170; 300.6340

## 1 引 言

我国是水稻生产大国,也是水稻消费强国,全国65%以上的人口以大米为主食,水稻是我国最主要的粮食作物之一,水稻产量的波动会直接影响粮食供给,威胁我国粮食安全<sup>[1]</sup>。种子活力是衡量种子质量优劣的重要指标之一,是种子发芽速率和生长量的综合反映。高活力种子具有明显的生长优势和生产潜力,对种子经营和农业生产有着极其重要的意义。传统种子活力的检测方法有三磷酸腺苷(ATP)含量测定、电导率法、氯化三苯基四氮唑法等<sup>[2]</sup>,虽然能够准确直观地预测种子活力,但存在操作复杂、耗时长、可重复性差、容易对种子造成损伤等缺点。为了解决这一问题,需要找到一种快速、无损检测水稻活力的方法<sup>[3]</sup>。

种子质量的快速无损检测已成为种子质量检测的发展趋势,无损检测技术在种子检测方面的应用国内外已有研究。韩亮亮等<sup>[4]</sup>利用近红外光谱分析技术对3种不同老化程度的燕麦种子进行研究,得到特征光谱,通过主成分分析(PCA)结合马氏距离的模式识别方法分析光谱,证明近红外光谱技术在燕麦种子活力测定方面的可行性;Pourreza等<sup>[5]</sup>利用机器视觉技术,获取小麦种子图像的几种纹理特征组,以评估鉴定9种常用伊朗小麦种子的品种,平均分类精度达98.1%。徐赛等<sup>[6]</sup>利用电子鼻对常规稻与杂交稻稻谷进行分类识别,识别率达90%以上,实现了常规稻与杂交稻的快速、无损分类识别;Kranter等<sup>[7]</sup>利用红外热成像技术对豌豆种子质量进行检测,区分不同活力的种子。

光声光谱(PAS)技术是基于光声理论和现代热量转换的一种新技术。相对于红外透射或反射光谱,光声光谱分析不需要或者需要很少的样品前处理,而且能够直接探测样品不同深度的信息,不受样品表面形态限制,具有速度快、效率高、无污染、便于实现在线分析等优点。近年来,光声光谱技术在物理、化学、土壤、生物医学、故障诊断和无损检测等领域有广泛的应用<sup>[8-9]</sup>。

本文以两类不同活力的稻种为材料,利用光声光谱技术分析不同活力稻种之间的光声光谱差异,建立稻种活力光声光谱预测模型,探究光声光谱技术在稻种活力快速、无损检测方面的可行性。

## 2 材料与方 法

### 2.1 实验材料

实验稻种为南京农业大学作物遗传与种质创新国家重点实验室提供的2014年收获的南粳46稻种(粳稻)和浙江农科种业公司2014年生产的内5优8015稻种(杂交稻),人工挑选颗粒饱满、无霉变、大小形状基本相同的稻种2 kg,剔除夹杂物和杂种子。

### 2.2 水稻种子老化

将筛选的种子破休眠处理后分为5份,进行高温高湿人工老化实验。将每组样品放入玻璃托盘中均匀排布,然后放入RXZ型(多段编程)智能人工气候箱(宁波江南仪器厂制造),在温度为45℃、相对湿度为90%的条件下,依次老化0,24,48,72,96 h,按时从智能人工气候箱中取出老化后的水稻种子,晒干后装入密封袋中。将获得的稻种按种类和不同老化天数进行分类、编号。

### 2.3 实 验

光声光谱基本原理如图1所示。光声光谱是基于光声效应,即媒质吸收调制或脉冲的光辐射,温度的升降会引起媒质的体积涨缩而产生声波。一束调制光通过KBr窗口照射到光声池中的样品,样品受到光照后

产生热效应,并将热传导给样品池中的气体,气体膨胀与收缩产生热波,热波可被灵敏的微音器检测,即为光声信号,光声信号经放大后得到光声光谱。

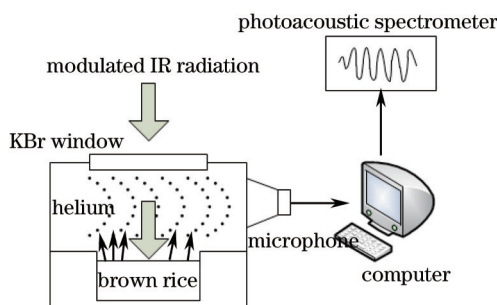


图1 光声光谱原理示意图

Fig.1 Schematic of photoacoustic spectroscopy

实验采用傅里叶变换红外光谱仪 Nicolet6700 (Thermo Elemental, 美国), 配合 PA300 光声附件 (MTEC Photoacoustics, 美国)。开机预热 0.5 h 后, 采集碳黑背景的光声光谱, 对仪器进行标定, 以保证测量数据的准确性和可靠性。将老化不同天数的稻种样品分别放入光声池 (直径为 10 mm, 高为 5 mm) 中, 排布均匀后用干燥的氦气连续吹扫 10 s (10 mL/min), 然后进行光谱数据的采集。光谱扫描范围为 4000~500  $\text{cm}^{-1}$ , 动镜速率为 0.32  $\text{cm/s}$ , 扫描分辨率为 4  $\text{cm}^{-1}$ , 扫描 32 次的平均光谱记为样品光谱, 碳黑作为背景对照。

#### 2.4 发芽实验与活力测定

参照 GB/T3543.4-1995<sup>[10]</sup> 农作物种子检验规程进行发芽实验。从不同老化天数的稻种材料中各取 100 粒放入 150 mL 烧杯, 加入适量的自来水, 在 30  $^{\circ}\text{C}$  恒温条件下, 浸种 2 d。将材料均匀放置在内铺两层滤纸的玻璃培养皿中, 用滴管滴入适量自来水, 然后放入发芽箱, 在光照 8 h、温度 30  $^{\circ}\text{C}$  和黑暗 16 h、温度 20  $^{\circ}\text{C}$  条件下, 进行发芽实验。第 3~7 d 统计实验样品的发芽数, 第 7 天测量种苗生长量 (幼苗长度), 计算实验样品的发芽指数和活力指数。发芽指数计算公式为

$$f_{G_t} = \sum \frac{G_t}{D}, \quad (1)$$

式中  $G_t$  为第  $t$  天的发芽数,  $D$  为发芽实验天数。活力指数计算公式为

$$f_{V_t} = S \sum \frac{G_t}{D} = S \times f_{G_t}, \quad (2)$$

式中  $S$  为种苗生长量 (长度)。

#### 2.5 活力定量模型的建立与评价指标

100 组光声光谱数据中每类按 3:2 随机分为校正集和预测集, 其中校正集 60 组用于模型的建立, 预测集 40 组用于模型的验证与评估。分别通过主成分分析和协方差处理 (CP) 进行光谱数据的降维, 然后利用最小二乘支持向量机回归 (LS-SVR) 建立粳稻和杂交稻的活力预测模型。用校正集来建立模型, 模型的评价指标分别为校正集相关系数 ( $R_c$ ) 和标准偏差 (SEC),  $R_c$  越大, SEC 越小, 模型的性能越好。建立模型后, 用预测集对模型进行验证和预测, 预测集相关系数 ( $R_p$ ) 越大、标准偏差 (SEP) 越小, 预测效果越好。

### 3 结果与分析

#### 3.1 稻种的活力指数和光声光谱

通过发芽实验测得不同人工老化时间的稻种活力指数如表 1 所示。由表 1 可见, 随着老化天数的增加, 2 种稻种的活力指数均不断降低, 说明稻种老化过程中内部发生一系列生理变化, 导致种子的活力降低<sup>[11]</sup>。

南粳 46 和内 5 优 8015 稻种的原始光声光谱如图 2 所示。由图 2 可见, 不同老化天数的同种稻种光声光谱之间呈现出十分相似的谱型, 总的趋势基本一致, 但光声光谱存在一定的噪声干扰, 影响模型的建立。因此, 需要对原始光声光谱进行去噪处理。

表1 不同老化时间的稻种活力指数

Table 1 Vigor index of rice seeds with different aging time

Material	Aging time /h	Vigor index	Number of samples
Nanjing46	0	12.57	10
	24	10.68	10
	48	8.96	10
	72	6.27	10
	96	4.02	10
Nei5you8015	0	14.82	10
	24	13.02	10
	48	9.94	10
	72	7.27	10
	96	5.68	10

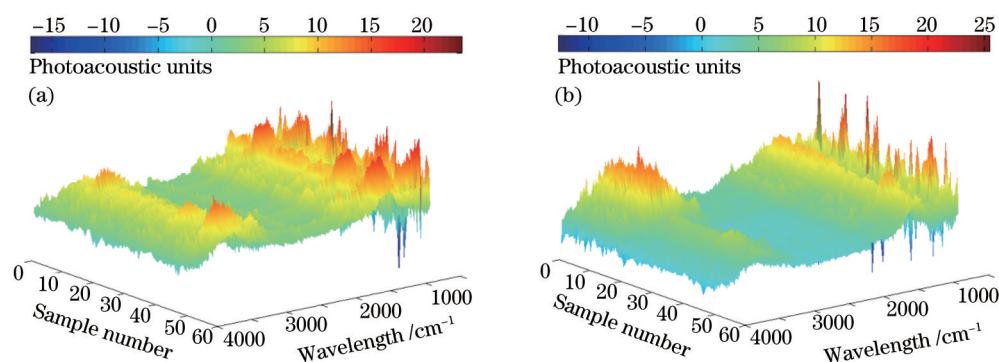


图2 稻种的原始光声光谱。(a) 南粳46; (b) 内5优8015

Fig.2 Original photoacoustic spectra of rice seeds. (a) Nanjing46; (b) Nei5you8015

### 3.2 小波包分析

小波包变换是基于小波变换的进一步发展,由 Wickhauser 等<sup>[12]</sup>引入,能够提供比小波变换更高的分辨率。克服了短时傅里叶变换在频带划分时线性等间隔和多分辨率分析在高频段频率分辨率较差、低频段时间分辨率较差的缺点。小波包分析能够为信号提供一种更精细的分析方法,将频带进行多层次划分,对低频部分和低频部分进一步分解,提高时频分辨率,使得小波包具有更广泛的应用价值<sup>[13]</sup>。采用小波包对光声光谱进行分解与重构,能够在一定程度上剔除由光谱仪精度、测试条件、水分等不确定因素导致的噪声。实验中利用 db5 对 2 类稻种的原始光声光谱进行五层小波包分解与重构,使得光声光谱信息能够更精确地表达。重构后的光声光谱如图 3 所示。

由图 3 可见,在 4000~500  $\text{cm}^{-1}$  之间有丰富的吸收信息,总的趋势基本一致。同一种类不同活力的稻种

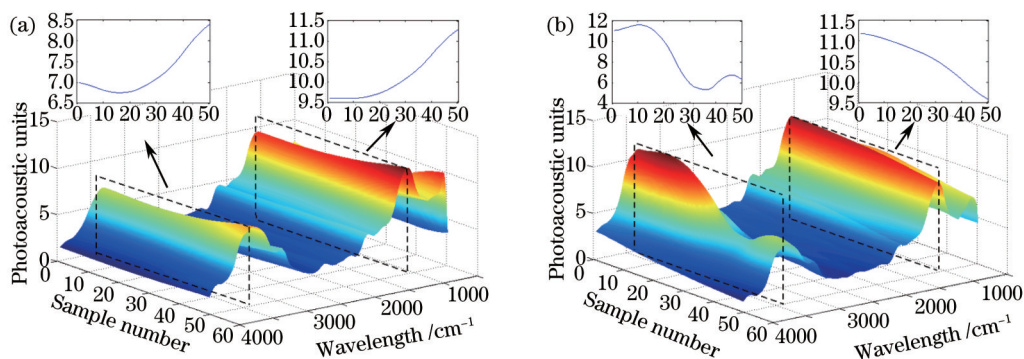


图3 小波包重构后的光声光谱。(a) 南粳46; (b) 内5优8015

Fig.3 Photoacoustic spectra of rice seeds after wavelet packet reconstruction. (a) Nanjing46; (b) Nei5you8015

具有相似的吸收特性,出现相似度较强的吸收峰。3500~3100  $\text{cm}^{-1}$ 处的宽吸收峰主要由蛋白质中N—H键和水中O—H键的伸缩振动叠加导致<sup>[14]</sup>。3000~2850  $\text{cm}^{-1}$ 处的尖峰主要为纤维素和油脂等物质中C—H键的伸缩振动导致<sup>[14]</sup>。2350  $\text{cm}^{-1}$ 处的小峰为光声池中残余的CO<sub>2</sub>气体所致<sup>[15]</sup>。1650  $\text{cm}^{-1}$ 处的小峰主要由水的O—H键弯曲振动和蛋白质C—O键伸缩振动(酰胺I)<sup>[16]</sup>以及不饱和油脂中C=C键伸缩振动叠加导致。1500~1200  $\text{cm}^{-1}$ 处是蛋白质和多糖的混合振动吸收区<sup>[17]</sup>;1440~1317  $\text{cm}^{-1}$ 附近为甲基和亚甲基对称弯曲振动及CH<sub>3</sub>剪式振动吸收<sup>[17]</sup>;1412  $\text{cm}^{-1}$ 附近的吸收峰为淀粉中C—O—O、CH<sub>2</sub>伸缩振动吸收区<sup>[17]</sup>。指纹区1060  $\text{cm}^{-1}$ 附近强而宽的吸收峰归属为纤维素和油脂等C—C键和C—O键的伸缩振动。1160~1000  $\text{cm}^{-1}$ 范围主要为C—N键、C—O键伸缩振动所致<sup>[18]</sup>。880~680  $\text{cm}^{-1}$ 相对较宽的区域主要由芳环C—H面外弯曲振动和烯烃C—H面外弯曲振动所致<sup>[18]</sup>。575  $\text{cm}^{-1}$ 附近的谱峰由淀粉的骨架模式振动所致<sup>[17]</sup>。

### 3.3 光声光谱数据降维

光谱属于典型的高维度、非线性、重叠、冗余数据,为提取光谱特征以及定性定量分析带来一定的挑战和困难,尤其是在光声光谱分析中。稻种中各物质基团的吸收常常出现非线性叠加,光谱测量中测试环境(如温度、光照等)和仪器状态的变化也会导致光谱的非线性变化<sup>[19]</sup>。需要一种非线性降维方法来减少冗余和过度拟合的可能性。目前,最常用的数据降维方法是主成分分析<sup>[20-21]</sup>,其思想是将 $n$ 维特征映射到 $k$ 维度空间上( $k < n$ ), $k$ 维空间是全新的正交特征,不是从 $n$ 维空间中去除 $n-k$ 维度特征,而是重新构造出来的 $k$ 维特征。PCA是线性变换, $k$ 维特征是 $n$ 维特征的线性组合,无法保证低维空间数据的非线性结构。

本文分别采用主成分分析和基于协方差的特征光谱提取方法,对光谱数据进行降维处理。通过主成分分析将高维度光谱线性组合映射到低维度空间;通过对光谱进行协方差处理提取光声光谱特征波波数。协方差光谱如图4所示。

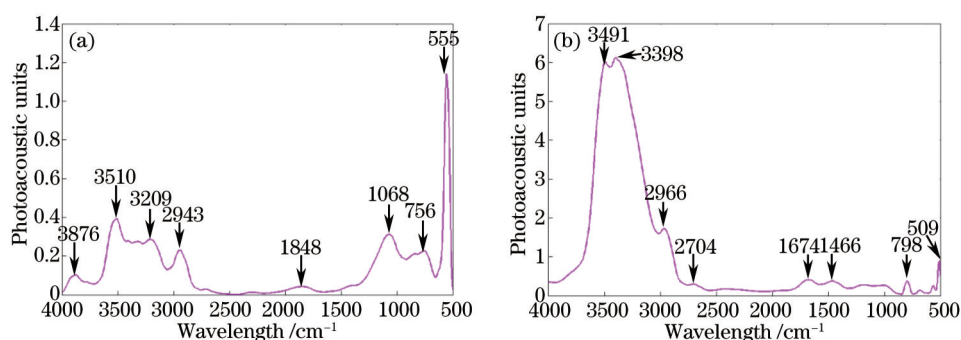


图4 光声光谱协方差处理。(a) 南粳46; (b) 内5优8015

Fig.4 Covariance processing results of rice seed photoacoustic spectra. (a) Nanjing46; (b) Nei5you8015

由图4可见,光谱在某些波数处有明显的吸收峰,包含了丰富的光声光谱信息。提取3876、3510、3209、2943、1848、1068、756、555  $\text{cm}^{-1}$ 为南粳46稻种的特征波数,3491、3398、2966、2704、1674、1466、798、509  $\text{cm}^{-1}$ 为内5优8015稻种的特征波数。

利用主成分分析对稻种光声光谱进行分析,获得前3个主成分为  $f_{PC_1}$ 、 $f_{PC_2}$ 、 $f_{PC_3}$ ,其表达式为

$$\begin{cases} f_{PC_1} = a_{1,1}v_1 + a_{1,2}v_2 + \cdots + a_{1,908}v_{908} = \sum_{i=1}^{908} a_{1,i}v_i \\ f_{PC_2} = a_{2,1}v_1 + a_{2,2}v_2 + \cdots + a_{2,908}v_{908} = \sum_{i=1}^{908} a_{2,i}v_i \\ f_{PC_3} = a_{3,1}v_1 + a_{3,2}v_2 + \cdots + a_{3,908}v_{908} = \sum_{i=1}^{908} a_{3,i}v_i \end{cases} \quad (3)$$

式中  $a_{1,i}$ ,  $a_{2,i}$ ,  $a_{3,i}$  ( $1 \leq i \leq 908$ ) 分别为前3个主成分的权重系数,  $v_i$  ( $1 \leq i \leq 908$ ) 为波数对应的光谱值。南粳46和内5优8015前3个主成分累积贡献率分别为97.18%和95.65%,均大于95%,包含了光声光谱的绝大部分信息<sup>[22]</sup>,可以用这3个主成分代替原光谱。

### 3.4 稻种活力预测模型的构建与评价

偏最小二乘回归(PLSR)是一种经典的校正方法,能够提取光谱中与因变量相关的潜变量,建立回归方程<sup>[23]</sup>。反向传播神经网络(BPNN)是一种误差反向传播的前馈神经网络,具有广泛的适应性和有效性<sup>[24]</sup>。LS-SVR是由 Suykens 等<sup>[25]</sup>提出的一种基于结构风险最小化原则的通用数据驱动学习方法,构建稻种活力光声光谱 LS-SVR 预测模型的原理如下。

设训练集样本为  $\{(x_i, y_k) | i = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots, n\}$ ,  $x \in R^d, y \in R$ 。用一个非线性映射  $\Phi$  将样本输入空间  $R^d$  映射到高维 Hilbert 空间  $\psi$ , 从而取得在原空间非线性回归的效果。在高维空间中构造决策函数

$$f(x) = \omega^T \varphi(x) + b, \tag{4}$$

式中  $\varphi(x)$  为数据空间到特征空间的非线性映射,  $\omega$  为权矢量,  $b$  为阈值。

以最小结构风险为原则进行模型参数的确定, 结构风险计算式为

$$R = \frac{1}{2} \|w\|^2 + cR_{emp}, \tag{5}$$

式中  $c$  为正规化参数, 损失函数  $R_{emp} = \sum_{i=1}^n e_i^2$ , 其中  $e_i$  为训练集的预测误差。

约束条件为

$$y_k = \omega^T \varphi(x_i) + b + e_i, \tag{6}$$

相应的拉格朗日函数为

$$L(\omega, b, e, \alpha) = R - \sum_{i=1}^n \alpha_i [\omega^T \varphi(x_i) + b + e_i - y_i], \tag{7}$$

式中  $\alpha_i$  为拉格朗日乘子。

根据 Karush-Kuhn-Tucher 最优条件

$$\frac{\partial L}{\partial \omega} = 0, \frac{\partial L}{\partial b} = 0, \frac{\partial L}{\partial e_i} = 0, \frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = 0, \tag{8}$$

可得

$$\begin{cases} \omega = \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi(x_i) \\ \sum_{i=1}^n \alpha_i = 0 \\ \alpha_i = 2ce_i \\ \omega^T \varphi(x_i) + b + e_i - y_i = 0 \end{cases}, \tag{9}$$

由(9)式可得

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & K(x_1, x_1) + \frac{1}{2c} & K(x_1, x_2) & \cdots & K(x_1, x_n) \\ 1 & K(x_1, x_2) & K(x_1, x_1) + \frac{1}{2c} & \cdots & K(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & K(x_n, x_1) & K(x_n, x_1) & \cdots & K(x_n, x_n) + \frac{1}{2c} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} b \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \tag{10}$$

式中  $K(x, x_i)$  为核函数, 最终确定决策函数为

$$f(x) = \sum_{j=1}^n [\alpha_j K(x, x_j)] + b. \tag{11}$$

鉴于径向基函数具有较好的性能<sup>[26]</sup>, 选用径向基函数  $K(x_i, x_j)$  作为 LS-SVR 的核函数, 其中

$$K(x_i, x_j) = \exp\left(-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{2\sigma^2}\right).$$

在训练活力模型前, 需要先确定该模型的核参数  $\sigma$  和正规化参数  $c$ , 这两个参数的确定对模型的性能有很大的影响。为确定最优核参数  $\sigma$  和正规化参数  $c$ , 采用 7 层交叉验证法, 不断调整参数  $\sigma$  和  $c$  值, 选择

使交叉验证误差最小的组合作为参数的最佳值。

分别采用PLSR、BPNN、LS-SVR建立稻种活力预测模型,南粳46和内5优8015独立建模的结果分别如表2、3所示,混合建模的结果如表4所示。

表2 南粳46稻种独立建模结果

Table 2 Independent modeling results of Nanjing46 rice seeds

Modeling methods	Calibration set		Prediction set	
	$R_c$	SEC	$R_p$	SEP
PCA+PLSR	0.9349	0.6297	0.9133	1.0596
PCA+BPNN	0.9469	0.7068	0.9250	0.9430
PCA+LS-SVR	0.9549	0.5297	0.9433	0.7963
CP+PLSR	0.9439	0.5374	0.9238	0.8521
CP+BPNN	0.9501	0.5462	0.9358	0.7245
CP+LS-SVR	0.9761	0.4878	0.9544	0.5013

表3 内5优8015稻种独立建模结果

Table 3 Independent modeling results of Nei5you8015 rice seeds

Modeling methods	Calibration set		Prediction set	
	$R_c$	SEC	$R_p$	SEP
PCA+PLSR	0.9313	0.6007	0.9154	1.0576
PCA+BPNN	0.9569	0.7068	0.9382	1.1028
PCA+LS-SVR	0.9529	0.5925	0.9369	0.8040
CP+PLSR	0.9426	0.5792	0.9209	1.1822
CP+BPNN	0.9513	0.4007	0.9354	0.8576
CP+LS-SVR	0.9739	0.3864	0.9638	0.5431

表4 南粳46和内5优8015稻种混合建模结果

Table 4 Hybrid modeling results of Nanjing46 and Nei5you8015 rice seeds

Modeling methods	Calibration set		Prediction set	
	$R_c$	SEC	$R_p$	SEP
PCA+PLSR	0.9271	0.6547	0.9120	0.9720
PCA+BPNN	0.9371	0.6878	0.9044	1.0601
PCA+LS-SVR	0.9386	0.5462	0.9358	0.8245
CP+PLSR	0.9326	0.5704	0.9346	0.9351
CP+BPNN	0.9401	0.4325	0.9415	0.8441
CP+LS-SVR	0.9701	0.4657	0.9562	0.5729

由表2~4可见,采用CP结合LS-SVR建立的活力预测模型最优,因此选用CP结合LS-SVR作为最佳建模方式。通过CP结合LS-SVR建立稻种活力预测模型,南粳46稻种、内5优8015独立建模和混合建模的最优结果如表5所示。

表5 2种稻种独立建模和混合建模的最优结果

Table 5 Optimal results of independent and hybrid modeling of Nanjing46 and Nei5you8015 rice seeds

Rice seeds	Calibration set		Prediction set		Optimal parameters	
	$R_c$	SEC	$R_p$	SEP	$\sigma$	$c$
Nanjing46	0.9761	0.4878	0.9544	0.5013	230	0.44
Nei5you8015	0.9739	0.3864	0.9638	0.5431	837	0.95
Nanjing46+Nei5you8015	0.9701	0.4657	0.9562	0.5729	207	0.49

由表5可见,南粳46(粳稻)和内5优8015(杂交稻)稻种单独建模和混合建模效果均比较理想,相关系数较高且相对偏差较小。该模型不仅适用于单一种类稻种的建模,而且适用于不同类别稻种的建模(粳稻和杂交稻)。混合建模校正集相关系数和标准偏差分别为0.9701和0.4657,预测集相关系数和标准偏差分别为

0.9562和0.5729。混合建模实际值与预测值相关关系如图5所示。

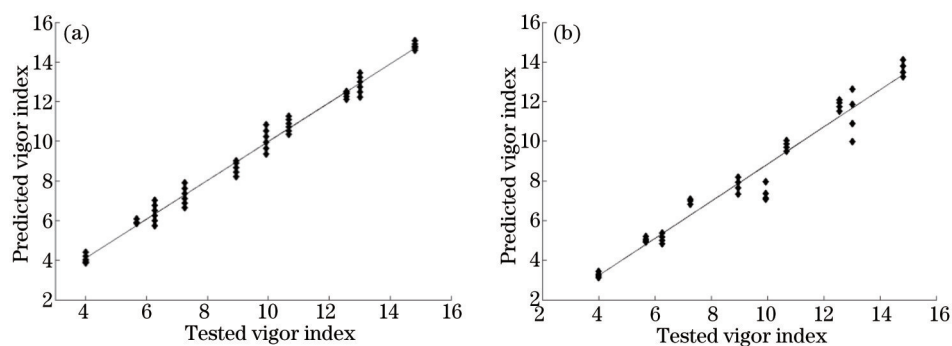


图5 混合建模实际值与预测值之间的关系。(a) 校正集; (b) 预测集

Fig.5 Relationship between actual and predicted values for hybrid modeling. (a) Calibration set; (b) prediction set

## 4 讨论与结论

已有农学研究表明,种子老化后种子的活力降低,胚内发生一系列生理学变化,酶的活性发生变化,合成物质能力下降,有毒物质积累,蛋白质发生变化,稻种膜的结构发生变化,膜系统损伤<sup>[27]</sup>;随着稻种老化时间的增加,稻种的劣变程度加深,种子的活力不断降低,种子的可溶性糖含量也不断增加,超氧化物歧化酶、过氧化物酶、过氧化氢酶(自由基清除酶系统)的活性逐渐降低,丙二醛含量增加,脱氢酶的活性不断降低,且可溶性蛋白的含量不断降低<sup>[28]</sup>。本研究探讨通过光声光谱技术来检测不同活力稻种生理生化特性与光声光谱特性之间的关系,从种子生理学特性和物质的化学特性方面揭示不同活力稻种的光声光谱差异。

针对传统活力检测方法存在操作复杂、耗时长、可重复性差、对种子造成损伤且不可逆等不足,提出了一种基于光声光谱结合LS-SVR的稻种活力快速无损检测方法。采用小波包分析进行预处理,通过特征提取,提取贡献率大的特征波数;提取3876、3510、3209、2943、1848、1068、756、555  $\text{cm}^{-1}$ 为南粳46稻种的特征波数,3491、3398、2966、2704、1674、1466、798、509  $\text{cm}^{-1}$ 为内5优8015稻种的特征波数,特征波数与稻种光声光谱化学键振动特性有较好的一致性;通过LS-SVR建立的模型最优,南粳46(粳稻)和内5优8015(杂交稻)稻种单独建模和混合建模效果均较优,校正集和预测集相关系数均超过95%且标准偏差较小。混合建模校正集相关系数和标准偏差分别为0.9701和0.4657,预测集相关系数与标准偏差分别为0.9562和0.5729,表明光声光谱检测技术在稻种活力测定方面具有较高的精度。

随着发光二极管(LED)技术的快速发展,各种超高亮、不同波长的窄带LED不断涌现,红外LED渐渐应用于光谱检测<sup>[29]</sup>。提出的基于特征波数的降维方法,通过LS-SVR实现稻种活力快速无损检测,为基于光声光谱的便携式水稻活力检测仪的研制提供了理论依据。

## 参考文献

- 1 Xin Liangjie, Li Xiubin. Changes of multiple cropping in double cropping rice area of southern China and its policy implications[J]. Journal of Natural Resources, 2009, 24(1): 58-65.  
辛良杰, 李秀彬. 近年来我国南方双季稻区复种的变化及其政策启示[J]. 自然资源学报, 2009, 24(1): 58-65.
- 2 Yu Zheng, Fang Fang, Peng Zuodeng, *et al.*. New technologies for detecting seed vigor[J]. Seed, 2012, 31(8): 52-55.  
于征, 方芳, 彭祚登, 等. 基于新兴技术的种子活力检测方法研究[J]. 种子, 2012, 31(8): 52-55.
- 3 Sun Qun, Wang Qing, Xue Weiqing, *et al.*. Advances in nondestructive detection of seed quality[J]. Journal of China Agricultural University, 2012, 17(3): 1-6.  
孙群, 王庆, 薛卫青, 等. 无损检测技术在种子质量检验上的应用进展[J]. 中国农业大学学报, 2012, 17(3): 1-6.
- 4 Han Liangliang, Mao Peisheng, Wang Xinguo, *et al.*. Study on vigour test of oat seeds with near infrared reflectance spectroscopy[J]. Journal of Infrared Millimeter Waves, 2008, 27(2): 86-90.  
韩亮亮, 毛培胜, 王新国, 等. 近红外光谱技术在燕麦种子活力测定中的应用研究[J]. 红外与毫米波学报, 2008, 27(2): 86-90.
- 5 Pourreza A, Pourreza H, Abbaspour-Fard M H, *et al.*. Identification of nine Iranian wheat seed varieties by textural analysis with image



- processing[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2012, 83(4): 102–108.
- 6 Xu Sai, Zhou Zhiyan, Luo Xiwen. Classification and recognition of hybrid and inbred rough rice based on bionic electronic nose[J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2014, 30(9): 133–139.  
徐 赛, 周志艳, 罗锡文. 常规稻与杂交稻谷的仿生电子鼻分类识别[J]. *农业工程学报*, 2014, 30(9): 133–139.
- 7 Kranner I, Kastberger G, Hartbauer M, *et al.*. Noninvasive diagnosis of seed viability using infrared thermography[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2010, 107(8): 3912–3917.
- 8 Zheng Dezhong, Zhao Nan. Design and experimental analysis of new photoacoustic cell[J]. *Chinese J Lasers*, 2014, 41(4): 0415002.  
郑德忠, 赵 南. 新型光声腔的设计及实验分析[J]. *中国激光*, 2014, 41(4): 0415002.
- 9 Du C, Ma Z, Zhou J, *et al.*. Application of mid-infrared photoacoustic spectroscopy in monitoring carbonate content in soils[J]. *Sensors & Actuators B Chemical*, 2013, 188(11): 1167–1175.
- 10 National Standardization Technical Committee. GB/T3543.4–1995 Rules for agricultural seed testing – Germination test[S]. Beijing: China Standard Press, 1995.  
国家标准化技术委员会. GB/T3543.4–1995 农作物种子检验发规程——发芽试验[S]. 北京: 中国标准出版社, 1995.
- 11 Xu Huibin, Wei Yidong, Lian Ling, *et al.*. Comparative analysis of artificial aging and natural aging with rice seeds[J]. *Molecular Plant Breeding*, 2013, 11(5): 552–556.  
许惠滨, 魏毅东, 连 玲, 等. 水稻种子人工老化与自然老化的分析比较[J]. *分子植物育种*, 2013, 11(5): 552–556.
- 12 Wickerhauser M V. INRIA lectures on wavelet packet algorithms[J]. *Lecture Notes Inria*, 1991: 31–99.
- 13 Gao Ling, Li Xiaoping, Ren Shouxin. Simultaneous resolution of overlapped spectra of three kinds of organic compounds using a wavelet packet transform-based generalized regression neural network[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2008, 28(10): 2392–2395.  
高 玲, 李小平, 任守信. 小波包变换广义回归神经网络同时分辨三种有机化合物的重叠光谱[J]. *光谱学与光谱分析*, 2008, 28(10): 2392–2395.
- 14 Yang H, Irudayaraj J. Characterization of semisolid fats and edible oils by Fourier transform infrared photoacoustic spectroscopy[J]. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 2000, 77(3): 291–295.
- 15 Bernstein M P, Cruikshank D P, Sandford S A. Near-infrared laboratory spectra of solid H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> and CH<sub>3</sub>OH/CO<sub>2</sub> ice mixtures[J]. *Icarus*, 2005, 179(2): 527–534.
- 16 Barth A. Infrared spectroscopy of proteins[J]. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)–Bioenergetics*, 2007, 1767(9): 1073–1101.
- 17 Ren Jing, Liu Gang, Zhao Xingxiang, *et al.*. Study of rhizome crops by Fourier transform infrared spectroscopy combined with wavelet analysis[J]. *Chinese Agricultural Science Bulletin*, 2015, 31(3): 149–154.  
任 静, 刘 刚, 赵兴祥, 等. FTIR 结合小波变换分析鉴别 8 种根茎类作物[J]. *中国农学通报*, 2015, 31(3): 149–154.
- 18 Lu Yuzhen, Du Luowen, Yu Changbing, *et al.*. Determination of nitrogen and oil contents in rapeseeds using infrared photoacoustic spectroscopy combined with iPLS and siPLS[J]. *Chinese Journal of Analysis Laboratory*, 2013, 32(9): 78–82.  
陆宇振, 杜罗文, 余常兵, 等. 红外光声光谱技术结合区间, 组合区间偏最小二乘测定油菜籽含氮量和含油量[J]. *分析试验室*, 2013, 32(9): 78–82.
- 19 Zeng Yin, Lu Yuzhen, Du Changwen, *et al.*. Applying infrared photoacoustics spectroscopy and support vector machine model to quantify soil organic matter content[J]. *Acta Pedologica Sinica*, 2014, 51(6): 1262–1269.  
曾 胤, 陆宇振, 杜昌文, 等. 应用红外光声光谱技术及支持向量机模型测定土壤有机质含量[J]. *土壤学报*, 2014, 51(6): 1262–1269.
- 20 Su H J, Sheng Y H. Hyperspectral feature recognition based on kernel PCA and relational perspective map[J]. *Chinese Optics Letters*, 2010, 8(8): 811–814.
- 21 Weng Shizhuang, Zheng Shouguo, Li Pan, *et al.*. Quantitative analysis of fenitrothion based on surface-enhanced Raman spectroscopy [J]. *Chinese J Lasers*, 2013, 40(8): 0815001.  
翁士状, 郑守国, 李 盼, 等. 基于表面增强拉曼光谱的杀螟硫磷定量分析[J]. *中国激光*, 2013, 40(8): 0815001.
- 22 Shokri S, Sadeghi M T, Marvast M A, *et al.*. Integrating principal component analysis and vector quantization with support vector regression for sulfur content prediction in HDS process[J]. *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 2015, 21(3): 379–390.
- 23 Zhang W J, Liu R, Zhang W, *et al.*. Net analyte signal with floating reference theory in non-invasive blood glucose sensing by near-infrared spectroscopy[J]. *Chinese Optics Letters*, 2012, 10(8): 083002.
- 24 Xu Zhaomei, Zhou Jianzhong, Huang Shu, *et al.*. Quality of prediction of laser milling based on optimized back propagation networks by genetic algorithms[J]. *Chinese J Lasers*, 2013, 40(6): 0603004.

- 许兆美, 周建忠, 黄 舒, 等. 基于遗传算法优化反向传播神经网络的激光铣削层质量预测[J]. 中国激光, 2013, 40(6): 0603004.
- 25 Van Gestel T, De Brabanter J, De Moor B, *et al.*. Least Squares Support Vector Machines[M]. Singapore: World Scientific, 2002.
- 26 Keerthi S S, Lin C J. Asymptotic behaviors of support vector machines with Gaussian kernel[J]. Neural Computation, 2003, 15(7): 1667-1689.
- 27 Yang Yaping, Jiang Xiaocheng, Chen Liangbi, *et al.*. Study on physiological mechanism in aging of rice seeds[J]. Journal of Hunan Agricultural University (Natural Sciences), 2008, 34(3): 265-269.
- 杨亚平, 姜孝成, 陈良碧, 等. 水稻种子老化的生理机制[J]. 湖南农业大学学报: 自然科学版, 2008, 34(3): 265-269.
- 28 Zhu Shiyang. Studies on Priming Technology, Its Mechanism of F1 Seed and Genetic Analysis on Anti-Aging in Rice (*Oryza sativa* L) [D]. Nanjing: Nanjing Agricultural University, 2008: 42-49.
- 朱世杨. 水稻 F<sub>1</sub> 种子引发技术及其机理和抗老化遗传的研究[D]. 南京: 南京农业大学, 2008: 42-49.
- 29 Chen Zicong, Gao Zhihui, Cao Zhi, *et al.*. Research on CO<sub>2</sub> gas concentration test system based on mid-infrared LED[J]. Laser & Infrared, 2012, 42(11): 1255-1258.
- 陈子聪, 高致慧, 曹 志, 等. 基于中红外LED的CO<sub>2</sub>气体浓度检测系统研究[J]. 激光与红外, 2012, 42(11): 1255-1258.

栏目编辑: 吴秀娟