

基于高光谱散射技术的粉体堆密度无损检测

杨宇, 邢永春, 朱启兵

江南大学轻工过程先进控制教育部重点实验室, 江苏 无锡 214122

摘要 粉体的密度作为一项很重要的物性参数,对粉体的流动性能有决定性作用,研究粉体的密度,对粉体加工、包装、输送、存储等具有重要意义。以小麦面粉作为实验对象,采用高光谱散射技术,结合高光谱散射图像特征提取方法中的矩方法,探索了面粉堆密度快速无损的检测方案。实验共采集了474个面粉样本在500~1000 nm范围内的高光谱散射图像,先对图像进行前期预处理,以消除图像噪声,并提取了散射图像的零阶矩特征和一阶矩特征;然后分别利用零阶矩特征、一阶矩特征,及零阶一阶联合特征建立了面粉堆密度的偏最小二乘预测模型。结果表明:相对于单一的零阶矩特征或一阶矩特征,联合特征获得了最好的建模结果;联合特征的预测相关系数 R_P 为0.968,剩余预测偏差为3.95;矩方法可以有效提取高光谱散射图像特征,并可应用于粉体堆密度的高精度无损检测。

关键词 光谱学;无损检测;高光谱散射技术;粉体;堆密度;矩特征

中图分类号 TH741 文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP55.013003

Non-Destructive Detection of Bulk Density of Powder Using Hyperspectral Scattering Technique

Yang Yu, Xing Yongchun, Zhu Qibing

Key Laboratory of Advanced Process Control for Light Industry, Ministry of Education,
Jiangnan University, Wuxi, Jiangsu 214122, China

Abstract Powder density, as a very important physical parameter, has a huge influence on the fluidity of powder, therefore, studying the characteristic of powder density is of great significance to powder processing, packaging, transportation, storage and so on. The hyperspectral scattering technique combined with moment method in hyperspectral scattering image feature extraction is used for non-destructive detection of bulk density of wheat flour. Hyperspectral scattering images of 474 wheat flour samples are acquired at the wavelength of 500-1000 nm. Images are pretreated to eliminate the noises, and the zeroth-order moment (ZOM) and the first-order moment (FOM) of scatter images are extracted. Finally, the ZOM, FOM, and their combination (Z-FOM) are used for developing bulk density prediction models using partial least squares (PLS) algorithm. The results demonstrate that the prediction model developed by Z-FOM achieved the optimal performance compared with ZOM or FOM. The PLS model using Z-FOM obtained 0.968 of the predicted correlation coefficient R_P , and 3.95 of the residual prediction deviation. Experiments show that the moment method is an effective method for extracting features of the hyperspectral scattering images and can be used for high-accuracy detection of bulk density of wheat flour.

Key words spectroscopy; non-destructive detection; hyperspectral scattering technique; powder; bulk density; moment method

OCIS codes 300.6330; 290.5850; 100.2960

收稿日期: 2017-06-30; 收到修改稿日期: 2017-07-31

基金项目: 国家自然科学基金(61271384, 61275155)

作者简介: 杨宇(1991—),男,硕士研究生,主要从事高光谱图像技术分析方面的研究。

E-mail: yangxiangyu1168@163.com

导师简介: 朱启兵(1973—),男,博士,教授,硕士生导师,主要从事农产品无损检测、高光谱图像技术方面的研究。

E-mail: zhuqib@163.com(通信联系人)

1 引言

粉体在日常生活和工农业生产中的应用非常广泛。不同的应用领域对粉体特性的要求各不相同,从而形成了表征粉体特性的不同参数。堆密度作为衡量粉体产品质量的参数之一,是设计粉体产品仓库以及建造粉体运输、输送设备的参考依据^[1]。面粉作为粉体的一种,其堆密度与面粉品质的流变性指标——压缩性指数和豪斯纳(Hausner)比率息息相关^[2]。此外,堆密度还会影响后期制品的质量,如面包的比容和体积,而面包比容是衡量面包品质的重要参数之一^[3-5]。因此,面粉堆密度的精准预测对整体面粉性能以及保证后期制品的品质至关重要。

传统测量粉体密度的方法(如比重瓶法等^[2,6])耗时耗力,而且只能测量单一的密度信息,但是研究人员通常希望在测得粉体密度这个重要物理信息的同时,还能够得到一些粉体的化学信息,以辅助分析粉体的品质。随着光谱图像技术的发展,近红外光谱、高光谱图像等无损检测技术已被成功应用于奶粉^[7]以及农副产品领域,但大都是对农副产品内部化学成分指标进行研究^[8-11],鲜有对粉体密度、颗粒度等物理性质的研究。

高光谱散射技术的原理是当光照射物质时,物质会对光产生吸收和散射作用,吸收主要与物质内部的化学成分有关,而散射则主要受物质的物理特性(如密度、颗粒度、结构等)的影响^[12]。近红外光谱技术只能获取被测样品的化学成分信息,而高光谱散射技术可以同时获得被测样品的吸收特性和散射特性,即可同时获取样品的化学成分信息和物理信息。Zhu等^[13]比较了高光谱散射图像技术和可见/近红外光谱分析技术检测粉体堆密度和颗粒大小的性能,结果表明,高光谱图像技术更适合于粉体材料堆密度和颗粒尺寸的检测。但是文献^[13]中仅提取了高光谱散射图像在不同波段下的平均光谱特征,可提取的特征信息有限,为了进一步提高高光谱散射图像技术对粉体材料物理特性的检测精度,有必要进一步研究其特征提取方法。

本文将矩方法引入到高光谱图像特征提取过程中,以提高面粉堆密度的检测精度。首先,提取高光谱散射图像中散射轮廓的零阶、一阶矩特征;利用提取的零阶、一阶矩特征,以及零阶一阶联合特征建立面粉堆密度的预测模型,并比较了它们在面粉堆密

度预测方面的精度。

2 材料与方法

2.1 实验材料

实验中使用的18个不同品种的小麦籽粒均于2009—2012年产自于美国密西根州。使用Buhler公司提供的MLU-202磨粉机制作面粉样本,研磨方式采用美国谷物化学家协会(AACCD)的方法26-31^[14]。同时,为了探究面粉颗粒度对堆密度的影响,取研磨后的每一品种的小麦面粉约4 kg,使用筛孔尺寸分别为63, 75, 93, 120 μm 的标准实验筛选设备(Great Western Manufacturing公司,美国)进行筛分,筛分时间为20 min。筛分过后,面粉按照各自的颗粒度(PS)大小被分成5份($<63 \mu\text{m}$ 、 $63\sim 75 \mu\text{m}$ 、 $75\sim 93 \mu\text{m}$ 、 $93\sim 120 \mu\text{m}$ 、 $>120 \mu\text{m}$),然后从每份中取约200 g放入质量为124.9 g、高为73.2 mm、内直径为103 mm的圆柱形容器中,待容器装满并抹平表面之后,分别记录净容器和装满容器的质量。

粉体的堆密度受粉体颗粒尺寸、粉体材料性质等的影响,因此对于不同的粉体材料,其堆密度有较大区别。鉴于统计模型的性能受建模样本标准值分布范围的影响,为扩大样本标准值分布范围,提高统计模型的泛化能力,需要制备大范围的堆密度样本。基于此,用直径为103 mm、加载速度为 $0.2 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$ 的质构仪(型号为TA.XT2i, Stable Micro Systems公司,英国)对容器中的每个样本进行压缩深度分别为1, 6, 11, 16, 21, 23 mm的连续压缩。这样,一个满容器样本可生成6个不同压缩深度的样本。堆密度的计算式为

$$D = \frac{m_{\text{net}}}{\pi \times (103/2)^2 \times (73.2 - h_c)}, \quad (1)$$

式中 m_{net} 为容器中面粉的质量; h_c 为压缩深度。

在获取高光谱图像之前,用保鲜袋将样本密封放置在恒温为 $4 \text{ }^\circ\text{C}$ 的冷藏室内保存,以方便不同时段使用(4 a之内)。容器中的样本每次被压缩后,都会进行高光谱散射图像的采集,共采集了474个面粉样本的高光谱散射图像。需要说明的是,有些种类的面粉太少难以填满容器而被剔除。样本种类和份数信息详见表1(份数=分组数目 \times 6个样本)。474个样本的堆密度范围为 $427.5\sim 806.9 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$,均值为 $608.9 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$,标准差为 $86.1 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$,样本的覆盖范围比较广泛,可以满足不同品种所期望的变化范围,说明建模样本具有代表性。

表 1 474 个小麦面粉样本的种类和份数信息

Table 1 Variety and quantity of 474 wheat flour samples

Variety	Year	Quantity	Variety	Year	Quantity	Variety	Year	Quantity	Variety	Year	Quantity
Caledonia	2009	30	E5011A	2009	30	D8006	2009	30	E8052	2011	24
	2011	30	E5011B	2010	30		2010	24		2012	24
	2012	30	E5024	2010	30		2011	24	OH06	2012	24
Aubrey	2011	24	E6012	2011	24	2012	24	Ambassador		2012	24
	2012	24	E6032	2011	24						

2.2 高光谱散射图像采集系统

实验中用的高光谱散射图像采集系统如图 1 所示,由密西根州立大学和美国农业部农业研究局采后实验室联合开发。该系统主要由 1 个覆盖波长范围为 400~1000 nm 的增强型图像光谱仪(型号 ImSpector V10E, Spectral Imaging 公司, 芬兰)、1 个 14 位高性能电子倍增电荷耦合器件(EMCCD)摄像头(型号 Luca R604, Andor Technology 公司, 美国)、1 个功率为 20 W 的卤钨灯(型号 HL-2000-HP, Ocean Optics 公司, 美国)组合光源、1 个直流稳压控制芯片(型号 PT6204N, Texas Instruments 公司, 美国)控制的定焦镜头(型号 Xenoplan 1.9/35, Schneider Optics 公司, 美国)以及样本固定平台和样品载物台等构成。

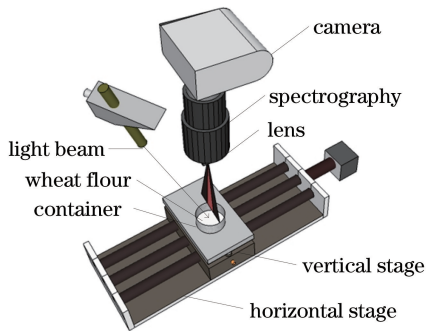


图 1 高光谱散射图像采集系统

Fig. 1 Schematic of hyperspectral scattering imaging system

当对样本进行图像采集时,通过聚焦透镜和光纤产生的直径为 1.0 mm 的入射光束与平台法线呈 15°角入射至样本表面。该发射角可以减少镜面反射,保证有足够的光子在组织内部传输,以获得充分反映组织内部特性的光子。同时,为了避免入射点处 CCD 检测器的像素值因光强过强而饱和,扫描线以 1.5 mm 的间隔远离光束入射中心点。为减小样本空间信息的影响,对每个样本每隔 0.5 mm 扫描一次,在 9 mm 距离范围内扫描 19 次,获得 19 条扫描线图像,每个扫描图像的曝光时长为 120 ms,图像的光谱分辨率为 3.1 nm,空间分辨率为 0.21 mm。为校正光源变化对图像的影响,同时采集了特氟龙白板高光谱散射图像。

2.3 数据处理

2.3.1 矩光谱特征提取

图 2(a)为实验用某个样本未经预处理的高光谱散射图像,其中感兴趣区域为 20 mm。为了去除噪声,对每个面粉样本在 500~1000 nm 范围的每一波段进行 5 点平滑处理,以提取散射轮廓。图 2(b)给出了原始高光谱散射图像在三个典型波段(735, 835, 935 nm)下的散射轮廓曲线。所使用的高光谱系统在 500~1000 nm 范围内共有 161 个波段,因此原始高光谱图像共包含 161 个轮廓(波段)。对每个波段下的轮廓用矩方法提取零阶矩和一阶矩光谱特征。每一波段下散射轮廓的 n 阶矩定义^[11]为

$$C^n = \sum_i R(r_i) \times r_i^n,$$

$$-10 \text{ mm} \leq i \leq 10 \text{ mm}, n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2)$$

式中 C^n 为 n 阶矩, $R(r_i)$ 为对应距离 r_i 下的光强, r_i 为对应的距离。当 $n=0$ 时, C^0 称为零阶矩(记为 ZOM),即不同散射距离下散射光强的总和,也即高光谱图像技术中常用的平均光谱;当 $n=1$ 时, C^1 称为一阶矩(记为 FOM),即散射距离和散射光强的加权和。

2.3.2 系数特征校正

为校正光源变化带来的影响,原面粉高光谱散射图像提取的光谱特征可用表达式 $\bar{T} = T_s/T_w$ 进行校正,其中 \bar{T} 为校正后面粉的光谱特征, T_s 为样本原始散射图像提取的相应光谱特征, T_w 为特氟龙白板图像提取的相应光谱特征。后期的分析都在校正后的光谱特征 \bar{T} 上进行。

2.4 样本集划分及模型性能评价

采用偏最小二乘算法(PLS)作为建模工具。PLS 模型的最优潜在变量个数采用留一交叉验证方法确定。建模之前需要将样本进行划分,为了验证模型的稳健性,采用 10 次随机实验,即随机抽取 474 个总体样本的 3/4,即 355 个样本作为校正集,用以建立标准值的预测模型,剩下的 119 个样本作为预测集;并将 10 次随机抽取结果的平均值作为最终结果。

采用预测集中预测值与标准值的相关系数 R_p 、

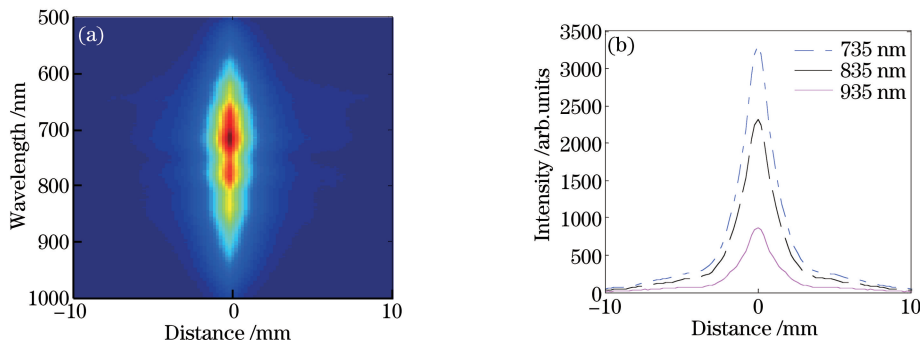


图2 (a) 未经处理的样本高光谱散射图像;(b)三个波段下的散射轮廓

Fig. 2 (a) Raw hyperspectral scattering image of sample without disposing; (b) scattering profiles at three wavelengths

均方根误差 RMSEP 以及剩余预测偏差 RPD 作为评价模型性能的指标。RMSEP 越小说明预测值越精确, R_p 越大表示预测精度越高, RPD 越大表示模型的稳健性越高。

3 结果与分析

3.1 矩光谱特征曲线分析

图3分别给出了样本 ZOM 和 FOM 的相对光谱特征曲线。由图3可知,ZOM 光谱值的总体变化趋势是随波长增大而增大,而 FOM 光谱值的变化则相对平稳。其原因在于各波段下高光谱散射轮廓的光强随着距离增加而急剧减小;相比于 ZOM, FOM 特征对距入射点较远的光子光强赋予了较大的距离权重,从而在总体上减小了 FOM 特征随波段的变化。在图3中,650 nm 波长附近有明显的峰值变化,这可能与面粉中戊聚糖的吸收有关^[15];在

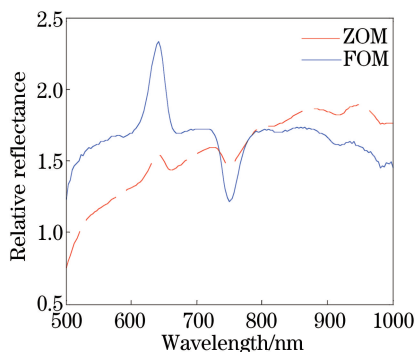


图3 样本 ZOM 和 FOM 的相对光谱特征曲线

Fig. 3 Relative spectral feature curves of ZOM and FOM of sample

750 nm 波长附近,峰值波动明显,这主要与面粉中的淀粉、蛋白质、油脂、纤维素等分子有关,这些分子的碳氢(C—H)键、氮氢(N—H)键、氢氧(O—H)键以及它们之间的组合频率在上述波段内有吸收谱带^[16-17];在 900~1000 nm 波长范围内也出现了峰值变化,这主要与面粉中水分子 O—H 键的吸收有关^[18]。

3.2 建模结果对比分析

表2给出了 ZOM、FOM 和 Z-FOM(将 ZOM 和 FOM 特征共同作为模型的输入变量)的建模结果,其中 LV 为潜在的变量数目;RMSEC、RMSEP 分别为校正集和预测集均方根误差; R_c 、 R_p 分别为校正集和预测集相关系数;RPD 为剩余预测偏差; t -test 为 t 检验。由表2可知,FOM 的建模结果优于 ZOM,而 Z-FOM 的建模结果优于 ZOM 和 FOM。对于预测相关系数 R_p ,相比于 ZOM 建模结果,FOM 提升了 1.10%,Z-FOM 提升了 3.10%;对于预测均方根误差 RMSEP,相比于 ZOM 建模结果,FOM 降低了 $2.70 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$,Z-FOM 降低了 $8.50 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$;对于剩余预测偏差 RPD,相比于 ZOM 建模结果,FOM 提升了 0.27,Z-FOM 提升了 1.10。这是由于光子在组织内部传输后的表面光强分布是被测组织的特性参数(吸收、散射系数)与散射距离的函数。传统的 ZOM 和 FOM 难以全面地反映光强分布轮廓的形态特征,而基于两种距离加权方式(ZOM 相当于平均加权,FOM 相当于距离加权)的 Z-FOM 可以更全面地获得轮廓的形态特征,从而有利于提高面粉堆密度的预测精度。

表2 堆密度的预测结果

Table 2 Predicting results of bulk density

Method	LV	R_c	RMSEC / ($\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$)	R_p	RMSEP / ($\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$)	RPD	t -test
ZOM	14	0.958	24.7	0.937	30.4	2.85	—
FOM	13	0.961	23.7	0.948	27.7	3.12	6.17×10^{-4}
Z-FOM	16	0.979	17.6	0.968	21.9	3.95	5.69×10^{-6}

图4为ZOM、FOM和Z-FOM光谱特征10次随机实验中1次的堆密度预测结果图。由图4可以看出,面粉堆密度在不同矩光谱(ZOM、FOM、Z-FOM)中都获得了较好的线性相关性以及均方根误差值,它们的相关系数 R_p 都达到了94%以上,预测集均方根误差RMSEP都控制在 $30\text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ 以下;相比单一的光谱特征ZOM或

FOM,Z-FOM表现出了较好的建模结果,如预测相关系数 R_p 由ZOM的0.940增加到0.970,预测集均方根误差RMSEP由ZOM的 $28.4\text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ 降低至 $22.7\text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ 。上述结果表明,基于矩方法的特征融合光谱Z-FOM在保留两特征间互补作用的同时,减弱了干扰信息对模型的影响,提高了模型的预测能力。

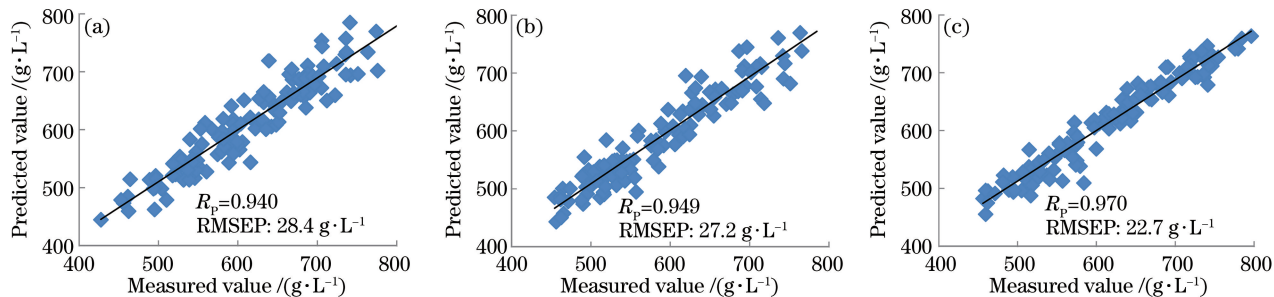


图4 堆密度预测结果。(a) ZOM;(b) FOM;(c) Z-FOM

Fig. 4 Prediction results of bulk density. (a) ZOM; (b) FOM; (c) Z-FOM

4 结 论

利用高光谱散射技术,结合高光谱散射图像特征提取中的矩方法和偏最小二乘方法,建立了面粉高光谱堆密度的快速无损检测模型。结果表明:高光谱散射技术可用于粉体(面粉)堆密度的预测;基于矩方法的FOM光谱特征优于ZOM;与单一的光谱特征ZOM或FOM相比,特征融合的Z-FOM光谱特征建模效果更好,预测相关系数 R_p 可达到0.968,预测均方根误差RMSEP可降低到 $21.9\text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$,剩余预测偏差RPD可达到3.95,模型的稳健性得到了大幅提升。相对于单一特征方法,Z-FOM联合光谱方法对面粉堆密度的预测表现得更优异。

参 考 文 献

- [1] Wu C B, Hu X F, Duan B T. Theoretical calculation for packing density of powder [J]. China Powder Science and Technology, 2009, 15(5): 76-81.
吴成宝, 胡小芳, 段百涛. 粉体堆积密度的理论计算[J]. 中国粉体技术, 2009, 15(5): 76-81.
- [2] Bian Q, Sittipod S, Garg A, *et al.* Bulk flow properties of hard and soft wheat flours [J]. Journal of Cereal Science, 2015, 63: 88-94.
- [3] Zhang Y Q, Chen L, Lu K K, *et al.* Effect of adding powdered mushroom (*Lentinus edodes*) on dough performance and bread quality [J]. Modern Food Science and Technology, 2016, 32(2): 211-220.
- [4] Li Z, Dong Y, Yu L T. Optimization of barley bread composite improver and its improvement on bread quality [J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2016, 31(6): 117-122.
李真, 董英, 於来婷. 大麦面包复合改良剂的优化及其对面包品质的改善作用[J]. 中国粮油学报, 2016, 31(6): 117-122.
- [5] Wang X, Yin X M, Liang J F. Effects of hydrocolloids on characteristics of frozen dough and quality of bread [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2014, 45(s1): 230-235.
王璇, 尹晓萌, 梁建芬. 亲水胶体对冷冻面团及其面包品质的影响[J]. 农业机械学报, 2014, 45(s1): 230-235.
- [6] Barbosa-Canovas G, Ortega-Rivas E, Juliano P, *et al.* Food powders: physical properties, processing and functionality [M]. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishing, 2005.
- [7] Huang M, Kim M S, Delwiche S R, *et al.* Quantitative analysis of melamine in milk powders using near-infrared hyperspectral imaging and band ratio [J]. Journal of Food Engineering, 2016, 181: 10-19.
- [8] Ma Y N, Huang M, Yang B, *et al.* Automatic threshold method and optimal wavelength selection for insect-damaged vegetable soybean detection using

- hyperspectral images[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2014, 106: 102-110.
- [9] Liu Y D, Xiao H C, Sun X D, *et al.* Non-destructive detection of citrus huanglong disease using hyperspectral image technique [J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2016, 47(11): 231-238, 277.
刘燕德, 肖怀春, 孙旭东, 等. 基于高光谱成像的柑橘黄龙病无损检测 [J]. *农业机械学报*, 2016, 47(11): 231-238, 277.
- [10] Zhu Q B, He C L, Lu R F, *et al.* Ripeness evaluation of "Sun Bright" tomato using optical absorption and scattering properties [J]. *Postharvest Biology and Technology*, 2015, 103: 27-34.
- [11] Zhu Q B, Huang M, Lu R F. Analysis of hyperspectral scattering images using a moment method for apple firmness prediction [J]. *Transactions of the American Society of Agricultural and Biological Engineers*, 2014, 57(1): 75-83.
- [12] Qin J W, Lu R F. Measurement of the optical properties of fruits and vegetables using spatially resolved hyperspectral diffuse reflectance imaging technique [J]. *Postharvest Biology and Technology*, 2008, 49(3): 355-365.
- [13] Zhu Q B, Xing Y C, Lu R F, *et al.* Visible/shortwave near infrared spectroscopy and hyperspectral scattering for determining bulk density and particle size of wheat flour [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2017, 25(2): 116-126.
- [14] AACC International. Approved methods of analysis, 11th Ed. method 26-31 [S/OL]. [2017-06-30]. <http://methods.aaccnet.org>.
- [15] Cornell H, Hoveling A W. *Wheat: chemistry and utilization* [M]. Lancaster: Chemical Rubber Company Press, 1998.
- [16] Jamshidi B, Minaei S, Mohajerani E, *et al.* Reflectance Vis/NIR spectroscopy for nondestructive taste characterization of Valencia oranges [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2012, 85: 64-69.
- [17] Pan L Q, Wu S X, Qiu H, *et al.* Magnetic tunnel junctions based on partially-oxidized-iron electrodes [J]. *Modern Physics Letters B*, 2003, 17(7): 267-272.
- [18] Cayuela J A. Vis/NIR soluble solids prediction in intact oranges (*Citrus sinensis L.*) cv. Valencia late by reflectance [J]. *Postharvest Biology and Technology*, 2008, 47(1): 75-80.