基于近红外光谱特征提取的花椰菜灰霉病早期检测

穆炳宇1,张淑娟1,李泽珍2,王 凯1,李紫辉1,薛建新1*

- 1. 山西农业大学农业工程学院, 山西 晋中 030801
- 2. 山西农业大学食品科学与工程学院, 山西 晋中 030801

摘 要 花椰菜在生长过程中容易感染灰霉病而导致产量减少,现有的分选方法难以在早期检测到感染灰 霉病的花椰菜。应用近红外光谱技术实现花椰菜灰霉病的早期判别检测,对花椰菜病害防治意义重大。以接 种灰霉菌孢的花椰菜为研究对象,首先,采集对照组和处理组花椰菜的近红外光谱曲线并进行去噪处理,获 取 4 个批次共 608 个样本(接菌 0.5, 1, 2 和 3 d 每日的健康和染病花椰菜各 76 朵)在 500~2 400 nm 波段范 围内的光谱曲线。同时测量花椰菜样本的多酚氧化酶(polyphenol oxidase, PPO)、过氧化物酶(peroxidase, POD)与丙二醛(malondialdehyde, MDA)的活性值,采用单因素方差分析(analysis of variance, ANOVA)对 单一批次的健康和染病花椰菜品质指标进行统计分析。然后,采用 K-S 算法(Kennard-Stone)将单天的样本 划分为校正集(114 个样本)与预测集(38 个样本),使用竞争性自适应重加权算法(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)进行 4 个批次的花椰菜样本的光谱数据特征波段提取, 并基于偏最小二乘回归 (partial least square regression, PLSR)算法建立单一批次判别模型和组合批次判别模型。结果表明: 在接菌 早期,用肉眼无法实现染病花椰菜样本的识别,仅在染病第3d后部分染病样本病害特征明显时可实现判 别。测定对照组和处理组花椰菜品质指标后发现:染病2d后,对照组和染病组样本的所有品质指标均存在 显著性差异(p<0.05), 但在第 0.5 d 时各项指标均无显著性差异, 仅在第 1 d 时 MDA 值出现显著性差异, 说明从品质指标上无法判别早期染病花椰菜。建立单一批次下的 PLSR 判别模型后表明:第一批次样本(0.5 d)所建模型的判别准确率达到了94.74%,预测集均方根误差为0.835,第二至第四批次(接菌1~3d)所建 判别模型准确率达到 100%, 表明 PLSR 模型可以实现单一批次下早期染病花椰菜样本的检测; PLSR 组合 判别模型在第 0.5 d 和第 1 d 判别准确率分别达到了 92.11%与 97.37%,可以判别出大部分的患病花椰菜, 但是 PLSR 组合批次建模效果低于 PLSR 单一批次建模。结果表明,基于近红外光谱技术,通过 CARS 算法 提取特征波段结合 PLSR 模型的建立,可以在早期检测出感染灰霉病的花椰菜,为花椰菜灰霉病的早期检测 提供参考,具有一定的实际应用价值。

关键词 花椰菜;灰霉病;早期检测;近红外光谱;特征波段

中图分类号: TP391 文献标识码: A **DOI**: 10.3964/j. issn. 1000-0593(2021)08-2543-06

引言

十字花科农作物已成为全球种植最多的作物之一,其中花椰菜(Brassica oleracea L. botrytis)因其高产量和经济效益脱颖而出,其需求旺盛的主要原因是存在多种促进健康的生物活性物质,如芥子油苷,多酚或维生素 C,为其可食部分增添了巨大的营养价值[1]。并且已发现花椰菜可有效预防慢性疾病,例如某些癌症和心血管疾病[2]。然而,随着种植面

积和产量的不断增加,花椰菜病害(灰霉病等)发生情况逐渐加重,使得花椰菜品质受到影响。花椰菜灰霉病是由灰葡萄孢(Botrytis Cinerea Pers)引起的真菌性病害^[3]。植物感染灰霉病之后,其组织表面会产生大量灰色霉层,造成大量减产^[4]。因此实现对花椰菜灰霉病的早期检测非常重要。

近红外光谱技术作为无损检测技术,检测速度快、效率高,在研究植物病害方面有很大的作用^[5]。Anna 等^[6]使用高光谱成像技术检测出感染灰霉病的草莓,所建模型的 R²达到了 0.85。有研究建立 CARS-PCA-SVM 模型,可实现对

收稿日期: 2021-03-25,修订日期: 2021-06-18

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金项目(31801632), 山西省高等学校科技创新项目(2019L0396)资助

作者简介:穆炳宇, 1997 年生, 山西农业大学农业工程学院硕士研究生 e-mail: 13633544838@163.com

* 通讯作者 e-mail: vickyxjx@126.com

水稻感染稻瘟病早期和无病斑叶片的检测。Bin等[7]使用光谱技术鉴别了真菌性病原体,为农作物疾病的快速诊断和预警提供了技术参考。He等[8]使用近红外光谱和计算机视觉在线无损检测了受到脱氧性苯酚污染的小麦谷物。秦立峰等[9]对温室黄瓜早期霜霉病光谱图像田间采集存在的问题,提出融合病害差异信息的特征波段提取方法,建立了黄瓜霜霉病早期检测模型。Shen等[10]使用 NIR 光谱技术鉴定受到不同浓度曲霉菌株污染的花生,实现了 92.11%的正确分类率。Sun等[12]使用光谱技术检测了接种灰霉菌的桃子,在 36 h时对测试数据集的分类准确率达到了 97.5%。应用近红外光谱技术对花椰菜灰霉病早期无病斑阶段的检测未见报道。

本工作以健康和感染灰霉病的花椰菜为研究对象,应用近红外光谱技术,对花椰菜灰霉病早期分级检测进行研究,主要对染病但无病斑阶段进行检测。先从外观和品质指标上对早期染病花椰菜阶段进行判定,之后使用 CARS 算法对光谱数据进行特征波段的提取,构建花椰菜灰霉病的早期PLSR单一判别模型以及组合判别模型,目的是确定对花椰菜快速、准确的早期分类检测模型,为花椰菜灰霉病的早期诊断提供科学依据。

1 实验部分

1.1 样本制备

实验所用花椰菜品种为"松花",于 2020 年 10 月采摘于大田地,当天运至实验室并对花椰菜进行筛选,以保证实验前花椰菜样本的初始状态相对一致,降低个体差异对实验结果的影响^[12]。灰葡萄孢(Botrytis Cinerea Pers)由山西农业大学植物保护研究中心提供,在马铃薯葡萄糖琼脂(Potato Dextrose Agar)培养基上继代培养后^[13],配置成孢子浓度为1×10⁶ mL 的孢子悬浮液。

将菜花用小刀(0.1%的次氯酸钠溶液消毒)切成大小基本一致,约为3 cm 的花球浸泡在1%的次氯酸钠溶液中2 min,进行消毒灭菌,取出后用无菌水清洗三次。用无菌的接种针在菜花上刺孔,深度3 mm,向孔中注入10 μ L 孢子菌悬液,自然晾干,放入垫有无菌纱布的灭菌密封托盘中,转入温度为21 \mathbb{C} ,相对湿度为90%的恒温恒湿培养箱中贮藏。另有相等数量的花椰菜样本经消毒灭菌后转入温度为21 \mathbb{C} ,相对湿度为90%的同等环境下贮藏。分别在接种后0.5,1,2和3d后取出对照和接菌样本各76个,共608个样本分批次进行近红外光谱和图片信息的采集,随机选取对照和接种样本各9个用于测定品质指标。

1.2 仪器

采用美国 ASD(Analytical Spectral Device)公司的 Field Spec 3 型光谱仪对花椰菜样本光谱数据进行采集。光谱数据 同隔为 1 nm,光谱范围为 $350\sim2$ 500 nm,采样方式为漫反射。在使用前仪器至少预热 30 min,并置于暗箱中进行黑白板校正。

1.3 光谱数据获取与品质指标测量

使用 Field Spec 3 型光谱仪分别采集对照组花椰菜上表面中心点、处理组花椰菜接种点位置的光谱数据。每个点位

扫描 3 次,并取 3 次反射光谱平均值作为该样本的光谱数据。之后每天对照组和处理组各取 9 个样本进行理化指标的测定。多酚氧化酶(PPO)测定采用邻苯二酚法,过氧化物酶(POD)活性测定采用愈创木酚法,具体操作参考文献[14];丙二醛(MDA)测定参照张承等[15]的方法。为了减少仪器与外界环境等因素对光谱曲线的影响,去除两端噪声后,用500~2 400 nm 波段的光谱数据进行分析[16]。

1.4 光谱数据处理方法

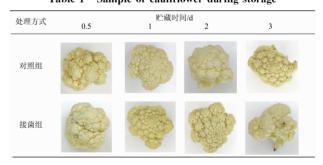
采用 K-S 算法(Kennard-Stone) 划分校正集和预测集。为了提高建模速度、缩短建模时间,采用竞争性自适应加权采样法(competitive adaptive reweighted sampling, CARS) 对光谱数据进行特征波长的选择。采用偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR) 方法建模。选择决定系数(determination coefficient, R^2) 和均方根误差(root mean square error, RMSE)作为模型评价的指标。数据处理软件包括 SPSS19.0(Version20.0, Inc., Chicago, IL, USA)、Matlab 2014 a (The MathWorks, USA)、The Unscramber X10.1 (CAMO ASA, Norway),利用 Origin2019b 绘图。

2 结果与讨论

2.1 外观变化分析

花椰菜 4 个不同贮藏期(0.5,1,2 和 3 d)对照和接菌样本如表 1 所示。随着贮藏时间的延长,花椰菜样本颜色逐渐变暗。第 0.5 d 与 1 d 的对照和处理组花椰菜样本从外观上看并无明显差异,无法判别是否感染灰霉菌。而在第 2 d,约有 30%的接种花椰菜在接种点周围出现黑斑,而到了第 3 d时,已进入花椰菜灰霉病高发期,约有 80%的接种花椰菜已出现明显的黑斑,可以用肉眼观察出花椰菜是否染病。但是在 2 d 之前从外观上不能直接观察出花椰菜是否感染灰霉病。

表 1 贮藏期花椰菜样本图
Table 1 Sample of cauliflower during storage



2.2 品质指标分析

花椰菜样本在贮藏期间品质指标(PPO, POD, MDA)平均值、均方根误差以及显著性分析如表 2 所示。POD 在 $0.5\sim1$ d 一直处于升高的状态,在 1 d 到达最高值后开始下降,处理组的 POD 上升速率和下降速率均高于对照组,并在第 3 d 达到最低。PPO 在贮藏初期呈现上升趋势,在 2 d 时达到最高峰后开始下降,处理组花椰菜在第 2 d 与 3 d 时的

PPO 值远大于对照组。从 0.5 d 到 3 d, 对照组和处理组的 MDA 值均在一直上升。

PPO 活性的变化即为组织褐变发生的进程,POD 活性的提高则有效抑制灰霉菌的侵染,切分时的机械操作对细胞造成伤害并提高了酶的活性,而后期伴随着花椰菜的衰老与

抵御病害的失败以及病害的进一步发展, PPO 和 POD 酶的 活性逐渐降低。在整个贮藏期间, MDA 值的含量一直在增加,这是因为细胞膜透性增大, 花椰菜处于不断衰老的进程中。

表 2 贮藏期花椰菜品质指标的变化

Table 2 Changes of cauliflower quality indexes during storage

 指标	处理方式	贮藏时间/d					
1日 777		0.5	1	2	3		
$POD/(U \cdot g^{-1})$	对照组	124.33±8.00a	140.0 \pm 10.75a	100.38±1.63b	81.33±0.38a		
	接菌组	126.63 \pm 3.12a	151. 25 \pm 2. 00a	109.75 \pm 1.00a	78.75 \pm 0.50b		
$PPO/(\mathbf{U} \bullet \mathbf{g}^{-1})$	对照组	14.44 \pm 0.06a	$17.00 \pm 0.50a$	20. $25 \pm 0.13b$	$17.79 \pm 0.76 $ b		
	接菌组	14.50 \pm 0.38a	18.38 \pm 1.12a	24.86 \pm 0.32a	$21.50 \pm 0.75a$		
$MDA/(nmol \cdot g^{-1})$	对照组	$2.22 \pm 0.04a$	$3.29 \pm 0.02b$	4.55 \pm 0.19b	6.66 \pm 0.07b		
	接菌组	$2.62 \pm 0.20a$	$4.00 \pm 0.08a$	$6.60 \pm 0.23a$	8.51 \pm 0.17a		

注:同一天的 CK 和 JZ 组的单个指标间进行显著性分析,不同小写字母表示在 p<0.05 水平差异显著。

从表 2 可知,在 0.5 d 时,接种花椰菜和对照花椰菜样本的理化指标并无显著性差异,测量值差距较小;而到了第 1 d 时,仅有 MDA 在处理组和对照组之间出现了显著性差异,无法从第 1 d 的样本来区分花椰菜是否感染灰霉病;在第 2 d 时,POD,PPO 和 MDA 三个指标均出现了显著性差异,且处理组均值都高于对照组;第 3d 时,对照组的 POD均值高于处理组,而 POD 和 MDA 均值低于处理组,表明接菌的花椰菜样本衰老速度高于对照组,从第 2 d,品质指标就可以检测出花椰菜是否感染灰霉病,但是仍无法有效判别第 0.5 d 和 1 d 的患病花椰菜。

2.3 花椰菜样本近红外反射光谱特征分析

图 1 是每个贮藏天数(0.5, 1, 2 和 3 d), 所有健康和染病"松花"花椰菜样本在 500~2 400 nm 波段的平均光谱反射曲线。从图 1 可知:随着贮藏期的延长,对照组和处理组花椰菜样本平均光谱反射率逐渐升高,光谱反射曲线趋势大致相同,但不同样本的吸收峰强度不同。从图中可知,不同天数的花椰菜光谱图在 980, 1 180, 1 260, 1 450, 1 660, 2 250 nm 都出现了吸收峰,其中 980 和 1 180 nm 为 O—H 键的二级倍频峰, 1 450 nm 为 O—H 键的一级倍频峰, 1 660 和 2 250 nm 处的吸收峰则与 C—H 键和 C—O 键有关。

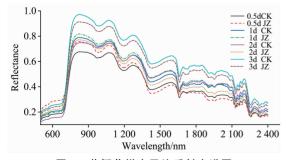


图 1 花椰菜样本平均反射光谱图

Fig. 1 Average reflection spectrum of cauliflower sample

2.4 花椰菜灰霉病早期检测模型建立与分析

2.4.1 花椰菜样本集数据划分

将每一天的花椰菜样本(健康 76 个、染病 76 个)光谱信息使用 K-S 算法按照 3:1 划分为校正集(114 个样本)和预测集(38 个样本)。

2.4.2 基于 CARS 算法的花椰菜样本特征波长选择

CARS 算法是效仿达尔文进化理论中"适者生存"的原理提出的变量选择理论[17],既可以去除无信息变量,也可以减少共线性变量对模型的影响。在实际特征波长选择过程中,保留 PLSR 模型中回归系数绝对值大的波长变量,去除绝对值小的变量,多次筛选后可以获得一系列变量子集,之后采用交叉验证的方法建模,获得模型交叉验证均方根误差最小的变量子集,即为最优波长变量子集。

表 3 CARS 算法提取的特征波长
Table 3 Characteristic wavelength table extracted by CARS algorithm

批次	时间 /d	特征波 长个数	所提取的特征波长(λ/nm)
1	0.5	11	748, 980, 992, 1 236, 1 343, 1 874, 2 109, 2 119, 2 354, 2 372, 2 383
2	1	10	845, 865, 913, 932, 1 048, 1 074, 1 363, 1 448, 1 685, 1 850
3	2	10	500, 517, 649, 686, 755, 975, 998, 1 716, 1 874, 2 169
4	3	9	552, 837, 903, 1 609, 1 665, 1 720, 1 973, 2 354, 2 383

采用 CARS 算法对每天的花椰菜样本数据提取特征波长,由表 3 可知,0.5~3 d的 4 个批次特征波长个数依次为11,10,10 和 9 个,每个贮藏时间内大多数特征波段并不相同,分析认为随着贮藏时间的延长,花椰菜内所含酶活性变化,MDA 含量上升,而这些物质内部含有的 O—H,C—O

和 C—H 键时刻处在动态变化中。仅有少数波长重复。其中 $0.5\,\mathrm{m}\,2\,\mathrm{d}\,$ 重复的波长为 $1\,874\,\mathrm{nm}$, $0.5\,\mathrm{m}\,3\,\mathrm{d}\,$ 重复的波长为 $2\,354\,\mathrm{m}\,2\,383\,\mathrm{nm}$ 。

2.4.3 CARS 特征波长 PLSR 单一批次建模

将4个单一批次特征波段数据为自变量,以花椰菜的好坏类别为因变量,建立基于近红外光谱的PLSR判别模型。目的是验证使用近红外光谱能否实现对早期感染灰霉病花椰菜的判别,以此建立的PLSR模型预测结果如表4所示。

表 4 CARS 特征波长 PLSR 单一批次建模
Table 4 CARS characteristic wavelength PLSR single batch modeling

批次 时间		预测集建模结果		预测集判别结果		
机伙	/d	$R_{ m p}^2$	RMSEP	总数	误判个数	判别准确率/%
1	0.5	0.835	0.206	38	2	94.74
2	1	0.892	0.155	38	0	100
3	2	0.944	0.118	38	0	100
4	3	0.977	0.057	38	0	100

从表 4 可知,预测集的 $R_{\rm e}^2$ 从 0.5 d 的 0.835 上升到 3 d 的 0.977,说明模型精度在不断升高;RMSEC 由 0.5 d 的 0.206 下降至 0.057,说明模型稳定性越来越好。随着花椰菜病害特征逐渐明显,模型的判别准确率也在不断提高,预测集的误判个数由 0.5 d 的 2 个下降至 1 d 的 0 个,并且第三和第四批次均已达到了 100% 的判别准确率。结果表明使用近红外光谱曲线建模可识别出花椰菜是否患有灰霉病,在接种 1 d 后就可达到 100%的准确率。

2.4.4 CARS特征波长 PLSR 组合批次建模

将花椰菜样本 4 个批次(0.5~3 d)通过 CARS 算法提取的特征波段(共 37 个)组合起来作为自变量,以花椰菜的好坏类别为因变量,进行基于 PLSR 算法的组合批次建模,提高模型的泛化能力和检测效率,并以此来判别单一批次花椰菜是否患病。

表 5 CARS 特征波长 PLSR 组合批次建模
Table 5 CARS characteristic wavelength PLSR
combined batch modeling

批次 时间		预测集建模结果		预测集判别结果		
/d	$R_{ m p}^2$	RMSEP	总数	误判个数	判别准确率/%	
1	0.5	0.817	0.242	38	3	92.11
2	1	0.875	0.185	38	1	97.37
3	2	0.912	0.149	38	0	100
4	3	0.959	0.098	38	0	100

从表 5 可知,预测集的 R_p^2 从 0.5 d 的 0.817 上升到 3 d 的 0.959,说明模型精度整体趋势是在升高;RMSEC 由 0.5 d 的 0.242 下降至 0.098,说明模型稳定性越来越好。但是 0.5 d 误判个数达到了 3 个,1 d 误判个数为 1 个,表明组合批次特征波段建模并不能有效判别 2 d 之前的花椰菜是否患病;而到了第 2 d 和 3 d 时,判别准确率达到了 100%。在花椰菜外观有严重变化时,CARS 特征波段组合批次使用 PLSR 算法所建模型判别结果较好。

使用 0.5 d 单一批次特征波段所建模型判别准确率达到了 94.74%,而组合批次特征波段 PLSR 算法所建模型在 0.5 d 时判别准确率仅为 92.11%,差距达到 2.63%,1 d 单一批次特征波段建模已达 100%识别率,而 1 d 组合批次特征波段所建模型验证时仍有 1 个误判;同样使用组合批次特征波段建立基于 PLSR 算法的模型预测第 2 d 和第 3 d 时,预测均方根误差低于单一批次特征波段建模,表明 PLSR 组合批次模型效果劣于 PLSR 单一批次模型。

利用可见/近红外光谱技术对花椰菜灰霉病进行早期检 测。通过 CARS 算法进行特征波段的提取, 既可以提取病害 的特征信息,又可以对冗余数据进行剔除;通过 PLSR 建立 相应的病害判别模型,对单一批次的花椰菜样本进行检测; 将 CARS 单一批次提取的特征波段组合进行总体 PLSR 建 模,实验结果表明,所有模型的样本判别准确率全部大于 92.11%,精度较高。CARS-PLSR单一批次模型可有效判别 花椰菜是否感染灰霉病,对染病仅 0.5 d 的花椰菜检测精度 达到94.74%,比使用组合批次波段的整体模型高2.63%, 输入变量仅仅有11个;对染病1d之后的花椰菜检测精度均 达到 100%。组合批次波段的整体建模在染病 1 d 时判别准 确率达到了97.37%,处于较高水平,但输入变量达到了37 个,目效果差于单一批次模型,该模型在染病2d之后对花椰 菜检测精度也可达到 100%。因此,综合评价 CARS-PLSR 单一批次模型为最优模型,其各天准确率分别为94.74%, 100%, 100%和100%。

3 结 论

基于花椰菜感染灰霉病,在肉眼无法观察以及品质指标没有显著性差异时,使用近红外光谱对花椰菜是否患病进行了早期判别检测,取得较好的效果。结果表明近红外光谱可有效判别健康与感染灰霉病的花椰菜。为已经感染灰霉病但是仍处于早期无病斑阶段的花椰菜检测提供了新思路,为花椰菜灰霉病检测、早期防治与科学用药提供了参考,也为开发实时、便携病害检测仪器提供理论支持。

References

- [1] Paula G I, Juan N E, Micaela C. BMC Plant Biol., 2021, 21: 30.
- [2] Kapusta-Duch J, Szelag-Sikora A, Sikora J, et al. Sustainability, 2019, 11(15): 4008.
- [3] Abbey J, Percival D, Abbey L, et al. Biocontrol Science and Technology, 2019, 29(3): 207.
- [4] ZHANG Zheng-wei, CHEN Xiu, SHI Xiao-yuan, et al(张正炜,陈 秀,石小媛,等). China Vegetables(中国蔬菜), 2021, 2: 41.

- [5] WU Bin, ZHOU Shu-bin, WU Xiao-hong, et al(武 斌,周树斌,武小红,等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2021, 41(3): 932.
- [6] Siedliska A, Baranowski P, Zubik M, et al. Postharvest Biology and Technology, 2018, 139(5): 115.
- [7] Li B, Zhang DP, Shen Y. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2020, 243(5): 118820.
- [8] He X M, Zhao T X, Shen F, et al. Biosystems Engineering, 2021, 201(1): 1.
- [9] QIN Li-feng, ZHANG Xi, ZHANG Xiao-xi(秦立峰,张 熹,张晓茜). Transactions of The Chinese Society of Agricultural Machinery (农业机械学报), 2020, 51(11); 212.
- [10] Shen F, Wu Q F, Liu P, et al. Food Control, 2018, 93(11): 1.
- [11] Sun Y, Gu X Z, Wang Z J, et al. PLOS ONE, 2015, 10(12): e0143400.
- [12] XUE Jian-xin, ZHANG Shu-juan, SUN Hai-xia, et al(薛建新,张淑娟,孙海霞,等). Transactions of The Chinese Society of Agricultural Machinery(农业机械学报), 2013, 44(8): 169.
- [13] YUAN Zhong-yu, ZHOU Hui-ling, TIAN Rong, et al (袁仲玉,周会玲,田 蓉,等). Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(农业工程学报), 2014, 30(4); 255.
- [14] ZHOU Xiao-wan, TANG Yong-ping, SHI Ya-li, et al(周晓婉, 唐永萍, 石亚莉, 等). Food Science(食品科学), 2016, 37(12): 254.
- [15] ZHANG Cheng, LI Ming, LONG You-hua, et al(张 承, 李 明, 龙友华,等). Food Science(食品科学), 2016, 37(22): 274.
- [16] ZHAO Chuan-yuan, HE Dong-jian, LEE Won Suk(赵川源, 何东健, LEE Won Suk). Transactions of The Chinese Society of Agricultural Machinery(农业机械学报), 2017, 48(5): 356.
- [17] YU Lie, ZHU Ya-xing, HONG Yong-sheng, et al(于 雷,朱亚星,洪永胜,等). Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering(农业工程学报), 2016, 32(22): 138.

Early Detection of Cauliflower Gray Mold Based on Near-Infrared Spectrum Feature Extraction

MU Bing-yu¹, ZHANG Shu-juan¹, LI Ze-zhen², WANG Kai¹, LI Zi-hui¹, XUE Jian-xin¹*

- 1. College of Agricultural Engineering, Shanxi Agricultural University, Jinzhong 030801, China
- 2. College of Food Science and Engineering, Shanxi Agricultural University, Jinzhong 030801, China

Abstract Gray mold easily occurs during cauliflower growth, thereby leading to reduced output. Cauliflower infected with gray mold at an early stage is difficult to detect with existing methods. In this study, near-infrared spectroscopy was used to distinguish and detect cauliflower with gray mold, which is highly significant for the disease control of cauliflower. Taking cauliflower with Botrytis cinema spore inoculation as the research object, this study obtained the near-infrared spectra of cauliflower in control and treatment groups and performed de-noising. The spectra of 608 samples in four batches (76 healthy and infected cauliflowers at 0.5, 1, 2 and 3 d old each) were acquired within the waveband range of $500 \sim 2400$ nm. After measuring the activity of polyphenol oxidase, peroxidase and malondialdehyde in the cauliflower samples, and one-way ANOVA was used to statistically analyze the quality indices of a single batch of healthy and infected cauliflowers. The Kennard-Stone algorithm was used to divide each day's samples into a calibration (114 samples) and a prediction (38 samples) set. Competitive adaptive reweighted sampling (CARS) was then used to extract the feature waveband of the spectroscopic data of the four batches of cauliflower samples, and the discrimination models of single and combination batches were established based on of partial least square regression (PLSR). Results indicated that the naked eye could not identify infected cauliflower samples at the early stage of inoculation and could identify them only 3 d after infection when some infected samples showed evident disease characteristics. The measurement of quality indices of the cauliflower in the control and treatment groups showed significant differences in all quality indices between these groups 2 d after infection (p < 0.05); however no significant differences existed in all quality indices at 0.5 d, and a significant difference in MDA value existed only at 1d. These findings suggested that the quality indices of infected cauliflower cannot be discriminated at an early stage. The PLSR discrimination model of a single batch was established, and it showed the following: the discrimination accuracy of the model established for the first batch (0.5 d) reached 94.74%, the root-mean-square error of the prediction set was 0.835, and the discrimination accuracy of the models established for the second to fourth batch ($1 \sim 3$ d) reached 100%. These findings indicated that the PLSR model could detect infected cauliflower samples under a single batch at an early stage. The discrimination accuracy of the PLSR combination discrimination model reached 92.11% and 97.37% at 0.5 and 1 d, respectively, to discriminate a large proportion of infected cauliflower. However, the effect of PLSR combination-batch modeling was inferior to that of PLSR single-batch modeling.

Therefore, using near-infrared spectroscopy, extracting the feature waveband through CARS, and establishing a PLSR model can detect cauliflower infected with gray mold at an early stage, thereby providing a reference for the early detection cauliflower with gray mold and has some practical value.

Keywords Cauliflower; Gray mold; Early detection; Near-infrared spectroscopy; Feature band

(Received Mar. 25, 2021; accepted Jun. 18, 2021)

* Corresponding author

光 谱 界 前 辈 张锐先生病逝



中国光学学会光谱专业委员会原副主任,光谱学家,高级研究员张锐(原名张叡)先生 因病于 2021 年 5 月 28 日在北京逝世,享年 92 岁。

张锐 1929 年 9 月 13 日出生于安徽省怀宁县。1951 年毕业于国立安徽大学化学系。

1951年8月-1952年12月,在中国科学院上海物理化学研究所工作。

1953年1月-1963年10月,在中国科学院长春应用化学研究所工作。

1963年10月—1990年4月,在核工业部第五研究所工作。

1990年在核工业部第五研究所退休。

1953 年, 张锐随苏联专家参加了抚顺钢厂不锈钢产品和炉前快速分析法的研究。在这期间, 张锐翻译了苏联 Я. П. 别尔凯维奇著《金属光谱分析指导》一书。于 1956 年由科学出版社出版(再版三次)。这是我国第一部有关光谱分析的译著。

1954 年秋,张锐参与举办全国性"光谱分析学习会",这次学习班吸收全国大学、研究单位和厂矿急需人才前来参加。使其成为光谱分析技术骨干,在全国开花结果。著名物理学家、科学院副院长吴有训来所视察时,曾赞誉说"你们是全国光谱界的拳头"。

1961年,张锐负责接受国家核纯铀分析项目,一反传统的物理浓缩法(美英采用载体分馏法,苏联用蒸发法),研究出一个切合生产需要的 TBP 萃取铀预分离,联合光谱法测定痕量杂质。做到完全回收铀,提高测定灵敏度,进行多元素联合测定。这一方法对建立核高纯铀的光谱分析法起着重要作用。

在科学院工作的 12 年中, 张锐主持研究的光谱分析法包括半导体材料硅、镓、铟、锑、砷、磷, 稀有难熔元素锆、铪以及原子能材料铀等。20 世纪 50 年代, 张锐等一批师从前苏联专家的老一辈学者成为我国光谱分析学科的先驱。

1963 年 10 月至 1964 年 4 月,在核燃料生产基地参加核纯铀产品质量检测工作,协助解决生产过程中产品分析出现的分析技术问题。根据核化铀生产过程中不断提出的要求,研究出一契合生产需要的 TBP 萃取-光谱法联合测定 16 元素作为核纯铀成分检测和质量监控的方法。为核工业发展做出了很大贡献。

20 世纪 70 年代初期, 张锐的研究重点从元素的微量分析, 转向光谱仪的研制及其在痕量分析中的应用。先后试制成功了一米光栅光谱仪, 光栅光电直读光谱仪, 组装了一台氮分子激光器(含氙弧灯)-单色计-光子计数器-计算机系统的多功能激光荧光计及一米光栅光谱仪元素发射光谱图。获得国家级成果奖两次:

- 1. "战备型一米光栅光谱仪"获得1978年全国科学大会重大贡献奖。
- 2. "光电直读仪的改装及其在矿石分析中的应用"获 1980 年国防科委重大成果奖。

作为光谱学家, 张锐长期兼任中国光学学会光谱专业委员会的领导工作、中国机械工程学会理化检验学会常务理事、《光谱学与光谱分析》杂志常务编委、美国《Analytical Chemistry》杂志审稿人。曾在国内外学术专刊上发表论文 60 多篇。著有《原子光谱分析》(中国科学技术大学出版社,1991),《元素发射光谱图》(原子能出版社,1976)等。

惊悉,光谱界前辈张先生不幸辞世,我们感到无比的沉痛,谨致以沉痛哀悼。这对光谱界是个无法补救的损失;愿我们后生化悲痛为力量,以此来悼念、纪念光谱界前辈张锐先生。愿张先生安息。