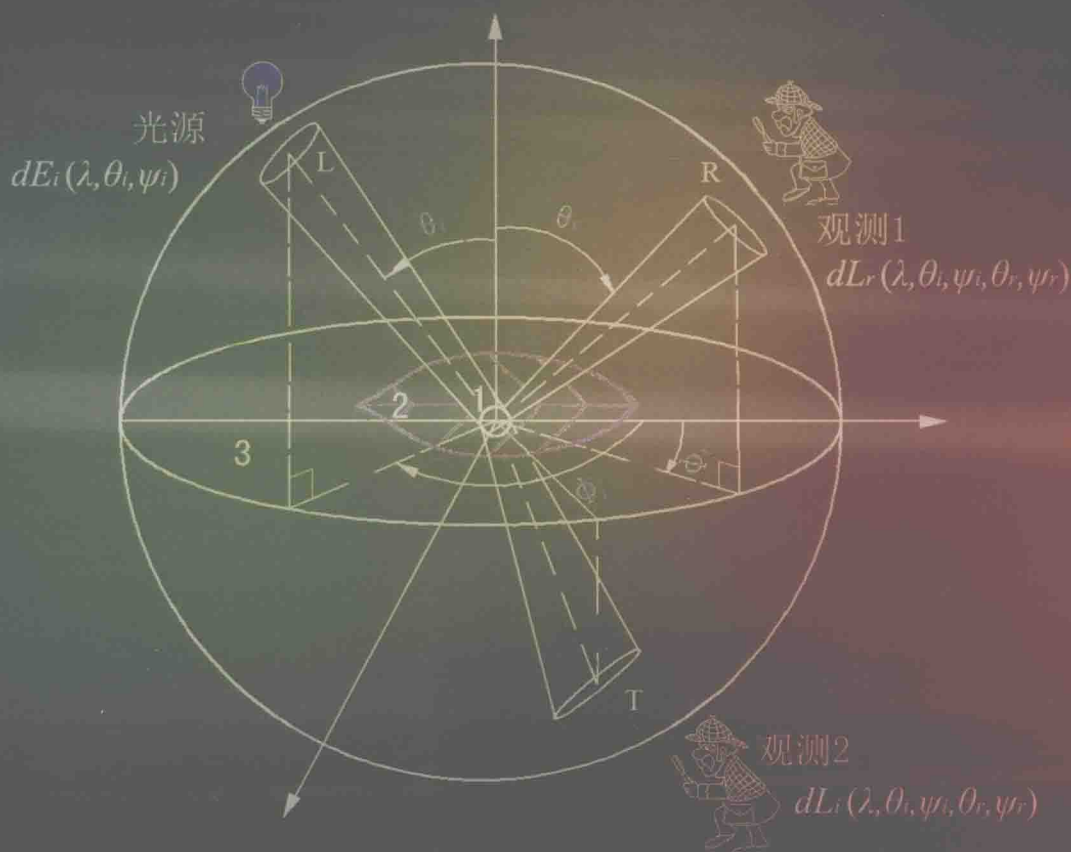


\* 现代农业高新技术丛书 \*

# 光谱及成像技术 在农业中的应用

Spectroscopy and Imaging Technology in Agriculture

何 勇 刘 飞 李晓丽 邵咏妮 著



科学出版社

# 光谱及成像技术在农业中的应用

何 勇 刘 飞 李晓丽 邵咏妮 著



科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书系统地介绍了光谱技术及光谱成像技术,并在讲清基本知识和基本原理的基础上,分析了国内外研究的最新成果,重点展示了光谱技术与光谱成像技术在农业上应用的成果。本书是多个国家高技术研究发展计划(863计划)项目、国家科技支撑计划项目研究成果的展现,实现了理论与应用的统一。本书共包含三大篇内容,其中基础篇介绍了光谱技术及光谱成像技术的发展历史、光谱分析基础、光谱分析仪器等;方法篇涉及对光谱及图像信息的预处理、数据的压缩、特征变量提取、聚类分析、回归分析等的介绍;应用篇展示了光谱及成像技术在土壤-环境信息、农作物信息、农产品和食品品质检测中的应用实例。

本书可作为高校本科生和研究生教材,也可作为广大专业技术人员的培训教材和自学参考书。

### 图书在版编目(CIP)数据

光谱及成像技术在农业中的应用 / 何勇等著. —北京: 科学出版社, 2016.1

(现代农业高新技术丛书)

ISBN 978-7-03-046556-6

I. ①光… II. ①何… III. ①光谱-成像系统-应用-农业工程-研究  
IV. ①S123

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第288717号

责任编辑: 王海光 李 迪 / 责任校对: 郑金红

责任印制: 徐晓晨 / 封面设计: 北京图阅盛世文化传媒有限公司

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京京华虎彩印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2016年1月第一版 开本: 787×1092 16

2016年1月第一次印刷 印张: 18 1/4

字数: 412 000

定价: 98.00元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

# 前 言

现代光谱技术与成像技术是 20 世纪中叶发展起来的一项高新技术。随着光学、电子、计算机数据处理技术及化学计量学方法的不断进步,光谱分析技术与成像技术的准确性和普适性迅速提高,光谱分析仪器应用日益普及,其非接触、自动与快速多组分测定的优点不断为人们所认识。

目前国内外已出版了多本有关光谱或图像方面的专著,这些书籍大都偏重基本理论的介绍,但是针对农业领域,缺少一本综合相关基础知识、方法和应用的论著。本书为了弥补这方面的空白,将理论与实际应用相结合。本书共包含三大篇内容,其中基础篇介绍了光谱技术及光谱成像技术的发展历史、光谱分析基础、光谱分析仪器等;方法篇涉及对光谱及图像信息的预处理、数据的压缩、特征变量提取、聚类分析、回归分析等的介绍;应用篇展示了光谱及成像技术在土壤-环境信息、农作物信息、农产品和食品品质检测中的应用实例。本书涵盖内容全面,综合了光谱技术与成像技术、数据处理方法论并提供了相关程序,能使初学者快速入门,同时也为读者了解这一领域的发展方向及动态等提供参考。

与现有专著相比,本书更突出理论与实际相结合,本书的大部分内容是我们研究团队在多个国家高技术研究发展计划(863 计划)项目、国家科技支撑计划项目、国家自然科学基金项目及省部级科研项目资助下取得的研究成果,涉及的领域包括土壤-环境信息的检测、农作物信息检测、农产品和食品品质的检测等,这些技术、处理方法等不仅为光谱及成像技术在农业方面提供了快速、无损的检测,也可以为农业领域之外的其他非食用产品的检测提供参考,具有较强的实用性。

本书是团队 10 多年研究成果的积累,由浙江大学何勇、刘飞、李晓丽、邵咏妮共同编著,其中何勇、刘飞担任主编。团队教师裘正军、鲍一丹、冯雷、方慧、聂鹏程、岑海燕对本书的撰写给予了大力的帮助和支持,团队的研究生张初、孔汶汶、余克强、赵艳茹、刘子毅、朱红艳、孙婵骏、周莉萍、陈欣欣等参与了本书的撰写、修改和统稿工作,对他们付出的辛勤劳动表示衷心的感谢!

鉴于光谱技术与成像技术发展迅速,其涉及的知识点和应用领域日益广泛,以及作者掌握知识面的限制,书中内容难免有不足之处,敬请专家和读者批评指正,以便本书再版时修正,对诸位读者的关心和支持表示感谢。

著 者

2015 年 7 月于浙江大学紫金港

# 目 录

前言

## 基 础 篇

第 1 章 概述 .....	3
1.1 光谱技术在农业中的应用 .....	3
1.1.1 光谱技术在土壤检测中的应用 .....	4
1.1.2 光谱技术在农作物检测中的应用 .....	4
1.1.3 光谱技术在农产品检测中的应用 .....	5
1.1.4 存在问题与应用展望 .....	6
1.2 光谱成像技术在农业中的应用 .....	7
1.2.1 光谱成像技术在土壤检测中的应用 .....	8
1.2.2 光谱成像技术在农作物检测中的应用 .....	9
1.2.3 光谱成像技术在农产品检测中的应用 .....	9
1.2.4 存在问题与应用展望 .....	10
1.3 小结 .....	11
参考文献 .....	11
第 2 章 光谱分析基础 .....	15
2.1 电磁辐射与波谱 .....	15
2.1.1 光——电磁辐射基础 .....	15
2.1.2 光与物质的相互作用 .....	16
2.1.3 光谱分析方法及其分类 .....	18
2.1.4 分子能级与分子光谱 .....	19
2.1.5 光谱分析基本定律和原理 .....	19
2.2 原子分子振动分析 .....	20
2.2.1 微振动经典力学 .....	21
2.2.2 振动简正模式 .....	24
2.2.3 简正坐标 .....	24
2.2.4 其他类型坐标 .....	26
2.3 典型官能团的光谱特征 .....	27
2.3.1 烷烃类 .....	27
2.3.2 烯烃类 .....	28

2.3.3	炔烃类	28
2.3.4	芳香族化合物	29
2.3.5	羟基化合物	29
2.3.6	羰基化合物	29
2.3.7	胺和酰胺类	30
2.3.8	碳水化合物	31
2.3.9	氨基酸、多肽和蛋白质类	31
2.3.10	聚合物类	32
2.4	光谱分析的理论基础	32
2.4.1	分子光谱	32
2.4.2	原子光谱	40
2.4.3	二向反射光谱	41
2.5	光谱成像理论基础	43
2.5.1	可见-近红外光谱成像技术	43
2.5.2	拉曼光谱成像技术	45
2.5.3	核磁共振成像技术	45
2.5.4	X射线成像技术	46
2.5.5	红外热成像技术	47
2.5.6	荧光成像技术	47
2.6	小结	48
	参考文献	48
<b>第3章</b>	<b>光谱及光谱成像仪器</b>	<b>52</b>
3.1	光谱分析仪器概述	52
3.1.1	基本构造	52
3.1.2	主要性能指标	56
3.1.3	主要分类	57
3.1.4	主要生产厂家	58
3.1.5	发展趋势	58
3.2	典型光谱分析仪器	59
3.2.1	紫外可见分光光度计	59
3.2.2	近红外光谱仪	61
3.2.3	中红外光谱仪	64
3.2.4	拉曼光谱仪	66
3.2.5	核磁共振波谱仪	68
3.2.6	太赫兹光谱仪	70
3.2.7	激光诱导击穿光谱仪	71
3.2.8	其他类型光谱仪	71
3.3	光谱成像仪器	72

3.3.1	基本构造	72
3.3.2	主要性能指标	72
3.3.3	发展趋势	72
3.4	典型光谱成像仪器	73
3.4.1	多光谱成像光谱仪	73
3.4.2	可见-近红外高光谱成像仪	74
3.4.3	显微拉曼光谱成像仪	75
3.4.4	红外热成像仪	77
3.4.5	核磁共振成像仪	78
3.4.6	X射线成像光谱仪	79
3.4.7	荧光成像光谱仪	80
3.4.8	其他成像仪	81
3.5	小结	81
	参考文献	81

## 方 法 篇

第 4 章	数据分析基础	85
4.1	概述	85
4.2	化学计量学	85
4.2.1	定义	85
4.2.2	发展历史	86
4.2.3	主要内容	86
4.2.4	在光谱分析中的应用	87
4.3	数理统计基础	87
4.3.1	误差分析	88
4.3.2	均值与方差	88
4.3.3	统计分布	88
4.3.4	置信区间	90
4.3.5	显著性检验	90
4.3.6	模型评价	91
4.4	小结	94
	参考文献	94
第 5 章	样本选择方法	95
5.1	概述	95
5.2	样本集选择	96
5.2.1	随机选择法	96
5.2.2	Kennard-Stone 算法	96

5.2.3	SPXY 算法	97
5.2.4	Duplex 算法	97
5.2.5	含量梯度法	97
5.2.6	GN 距离法	97
5.2.7	相似样品剔除选择法	98
5.2.8	Kohonen 网络法	98
5.2.9	最邻近规则法	99
5.2.10	最大最小距离法	99
5.3	异常样本剔除	99
5.3.1	主成分分析法	99
5.3.2	残差法	100
5.3.3	蒙特卡罗偏最小二乘法	100
5.3.4	杠杆值法	100
5.3.5	狄克逊检验法	101
5.3.6	肖维勒准则法	101
5.3.7	格鲁布斯检验法	101
5.3.8	DFFITS 法	101
5.3.9	$K$ 最邻近距离法	102
5.3.10	Cook 距离法	102
5.3.11	马氏距离法	102
5.3.12	欧氏距离法	103
5.3.13	光谱残差法	103
5.3.14	多变量修剪法	103
5.3.15	最小协方差行列式法	104
5.3.16	半数重采样法	104
5.3.17	最小半球体积法	104
5.4	小结	104
	参考文献	105
第 6 章	光谱预处理方法	106
6.1	概述	106
6.2	常用预处理方法	106
6.2.1	均值中心化	106
6.2.2	标准化	106
6.2.3	最大最小归一化	107
6.2.4	矢量归一化	107
6.2.5	平滑算法	107
6.2.6	变量标准化	108
6.2.7	去趋势算法	108



6.2.8	多元散射校正	108
6.2.9	基线校正	109
6.2.10	导数	109
6.2.11	正交信号校正	109
6.2.12	净分析信号	111
6.2.13	小波变换	111
6.2.14	经验模态分解	111
6.2.15	褶合变换	112
6.2.16	傅里叶变换	112
6.3	小结	113
	参考文献	113
第 7 章	数据压缩与特征提取	115
7.1	概述	115
7.2	典型数据压缩与特征提取方法	115
7.2.1	主成分分析	115
7.2.2	偏最小二乘法	116
7.2.3	线性判别分析	116
7.2.4	独立成分分析	116
7.2.5	小波变换	117
7.2.6	局部线性嵌入	117
7.2.7	等距映射	118
7.3	小结	118
	参考文献	119
第 8 章	特征波长选择方法	120
8.1	概述	120
8.2	基于知识的人工选择方法	120
8.3	基于 PCA 的特征波长选择方法	121
8.3.1	载荷法	121
8.3.2	Modeling Power 法	121
8.3.3	特征投影图法	122
8.4	基于 PLS 的特征波长选择方法	122
8.4.1	载荷与载荷权重法	122
8.4.2	回归系数与加权回归系数法	122
8.4.3	变量重要性投影法	122
8.4.4	PLS 修剪算法	123
8.4.5	SR 法	123
8.4.6	无信息变量消除法	124
8.4.7	竞争性自适应重加权采样法	125

8.4.8	间隔偏最小二乘法	125
8.4.9	反向区间偏最小二乘法	126
8.4.10	联合区间偏最小二乘法	126
8.4.11	前向区间偏最小二乘法	126
8.4.12	移动窗口偏最小二乘法	127
8.4.13	反向波长选择偏最小二乘法	127
8.4.14	迭代预测变量权重偏最小二乘法	127
8.4.15	刀切偏最小二乘法	128
8.4.16	基于 bootstrap 特征波长选择法	128
8.5	独立成分分析	128
8.6	小波变换	129
8.7	其他特征波长选择方法	129
8.7.1	相关系数法	129
8.7.2	方差法	129
8.7.3	连续投影算法	130
8.7.4	逐步回归分析与逐步判别分析	130
8.7.5	互信息法	131
8.8	小结	131
	参考文献	132
<b>第 9 章</b>	<b>模式识别方法</b>	<b>134</b>
9.1	概述	134
9.2	无监督模式识别方法	134
9.2.1	系统聚类分析	135
9.2.2	K 均值聚类分析	135
9.2.3	自组织神经网络	136
9.3	有监督模式识别方法	137
9.3.1	距离判别法	137
9.3.2	Fisher 判别法	138
9.3.3	贝叶斯判别法	139
9.3.4	K 最邻近判别法	140
9.3.5	簇类独立软模式	140
9.3.6	支持向量机	141
9.3.7	回归判别分析	142
9.4	小结	142
	参考文献	142
<b>第 10 章</b>	<b>回归分析方法</b>	<b>144</b>
10.1	概述	144
10.2	线性回归分析方法	144

10.2.1	一元线性回归分析	144
10.2.2	多元线性回归分析	144
10.2.3	偏最小二乘法	145
10.2.4	主成分回归	145
10.2.5	逐步线性回归	145
10.2.6	岭回归	146
10.2.7	Logistic 回归	146
10.3	非线性回归分析方法	146
10.3.1	人工神经网络	146
10.3.2	最小二乘支持向量机	150
10.3.3	随机森林	151
10.3.4	相关向量机	151
10.3.5	高斯过程回归	152
10.4	回归分析优化算法	153
10.4.1	遗传算法	153
10.4.2	蚁群算法	154
10.4.3	粒子群算法	154
10.4.4	模拟退火算法	155
10.5	小结	155
	参考文献	155

## 应 用 篇

第 11 章	高光谱图像处理方法	159
11.1	概述	159
11.2	图像预处理方法	159
11.2.1	裁剪	159
11.2.2	感兴趣区域提取	159
11.2.3	校正	160
11.3	图像压缩与特征提取方法	160
11.3.1	主成分分析	160
11.3.2	独立成分分析	161
11.3.3	最小噪声分离	161
11.3.4	波段比算法	161
11.4	图像分析与可视化	161
11.4.1	特征波长提取	161
11.4.2	纹理特征	162
11.4.3	光谱角制图	164

11.4.4	高光谱图像可视化 .....	164
11.5	小结 .....	165
	参考文献 .....	165
<b>第 12 章</b>	<b>核磁共振成像方法</b> .....	<b>166</b>
12.1	概述 .....	166
12.1.1	成像原理 .....	166
12.1.2	系统组成 .....	167
12.1.3	农业应用领域 .....	167
12.2	核磁共振成像分析与处理方法 .....	170
12.2.1	核磁共振图像特点分析 .....	170
12.2.2	图像预处理过程 .....	170
12.3	三维重建算法 .....	172
12.4	模型简化 .....	173
12.5	模型三维测量 .....	174
12.6	小结 .....	175
	参考文献 .....	176
<b>第 13 章</b>	<b>光谱信息数据处理典型软件与工具</b> .....	<b>178</b>
13.1	光谱数据分析软件 .....	178
13.1.1	Unscrambler .....	178
13.1.2	Matlab 工具箱 .....	182
13.2	高光谱图像分析软件 .....	183
13.3	拉曼图像分析软件 .....	183
13.4	核磁共振分析软件 .....	186
13.5	小结 .....	187
<b>第 14 章</b>	<b>土壤信息检测</b> .....	<b>188</b>
14.1	概述 .....	188
14.2	土壤水分检测 .....	189
14.3	土壤养分检测 .....	191
14.4	土壤电导率检测 .....	202
14.5	土壤压实度检测 .....	204
14.6	土壤重金属检测 .....	205
14.7	环境信息检测 .....	207
14.8	小结 .....	210
	参考文献 .....	211
<b>第 15 章</b>	<b>农作物信息检测</b> .....	<b>213</b>
15.1	概述 .....	213
15.2	作物养分信息检测 .....	213
15.3	作物生理信息检测 .....	217

15.4	作物形态信息检测	218
15.5	农作物病害检测	223
15.5.1	基于光谱技术的检测	223
15.5.2	基于图像技术的检测	225
15.6	作物虫害信息检测	227
15.7	作物重金属含量检测	229
15.8	小结	230
	参考文献	230
<b>第 16 章</b>	<b>农产品品质与安全检测</b>	<b>233</b>
16.1	概述	233
16.2	谷物品质检测	233
16.2.1	谷物分级检测	233
16.2.2	谷物成分检测	236
16.3	水果品质检测	237
16.3.1	水果品种(产地)鉴别	237
16.3.2	水果内部品质检测	237
16.3.3	基于图像技术的水果研究	239
16.4	蔬菜品质检测	242
16.4.1	产地、品种的鉴别	242
16.4.2	品质成分的检测	243
16.4.3	煮沸时间的研究	246
16.5	酒水饮料品质检测	247
16.5.1	品牌检测	247
16.5.2	品质检测	248
16.6	调味品品质检测	250
16.6.1	品牌、品种的鉴别	250
16.6.2	品质成分的检测	252
16.6.3	辐照剂量的研究	253
16.7	奶制品品质检测	254
16.7.1	酸奶品质检测	254
16.7.2	奶粉品质检测	254
16.7.3	其他奶制品检测	255
16.8	肉制品品质检测	256
16.8.1	肉类化学成分的检测	256
16.8.2	肉类冷冻和冷藏状态的研究	258
16.8.3	肉类其他方面的研究	259
16.9	功能性食品检测	261
16.9.1	品牌、品种的鉴别	261

16.9.2	品质成分的检测 .....	262
16.9.3	掺假研究 .....	265
16.10	食用油品质检测 .....	265
16.11	茶叶品质检测 .....	267
16.11.1	茶叶品种鉴别 .....	267
16.11.2	茶叶内部品质检测 .....	270
16.12	烟草品质检测 .....	271
16.13	其他农副产品检测 .....	272
16.14	小结 .....	274
	参考文献 .....	274

# 基础篇





# 第1章 概述

光谱及光谱成像技术以物质与光的相互作用为基础，涉及光谱形成机理、光谱分析仪器、光谱信息传输理论、信号处理与信息挖掘、光谱图像处理、土壤-作物-农产品光谱特性等研究领域，是当前农业领域中重要的无损检测技术手段。

本章将概述光谱及光谱成像技术在农业领域中的发展历程，指出其存在的问题并对它们的应用前景进行展望。

## 1.1 光谱技术在农业中的应用

20世纪30年代，红外光谱分析技术作为一种方便、快速、准确的分析手段，得到了大众的广泛认可，当时的研究主要侧重于对分子结构的理论性探究。红外光谱区域中的近红外光谱是由分子的倍频、合频叠加而产生的吸收带，叠加的信号很难被分离提取出来；而红外光谱区域中的中红外光谱是由分子的基频振动组成的光谱，其吸收带多而窄，吸收强度大，有显著的吸收特性，易于对光谱做出合理的解析。因此，当时的研究主要是针对中红外区域的基频吸收波段进行光谱解析。

20世纪50年代，Norris在美国农业部的支持下，率先用近红外光谱分析技术对农产品的成分进行定量检测。他主要是针对近红外光谱的吸收特性和散射特性，探究合理的统计分析方法来揭示光谱中的信息，其中多元线性回归法用于提取近红外光谱中的物质成分信息，建立相应的定标模型方面效果十分显著，这为后来近红外光谱理论体系的系统形成奠定了重要的基础。

20世纪60年代，Norris及其研究小组对光谱学方法进行了大量的论证，其中最大的成果就是得到了谷物和植物叶子的反射吸收光谱，为近红外光谱技术的发展运用提供了极大的便利（席志勇和王凤花，2012）。在此期间，Norris还研制出了世界上第一台近红外光谱扫描仪，充分展示了用多元线性回归分析方法提取光谱中物质成分信息的优势。60年代中期，近红外光谱分析的弱点逐渐暴露，较差的抗干扰性、较低的灵敏度，加上当时的技术又相对落后，无法克服上述不足，导致该技术的研究应用停滞不前。

20世纪70年代，研究发现生物中普遍存在的水分在近红外区具有很强的吸收特性，对物质中其他成分的光谱分析造成了极大的干扰，因此，急需建立相关光谱的定标分析方法。利用多元线性回归方法建立定标模型的近红外光谱分析仪，因其效果令人满意，在农业领域中得到了广泛的应用，其中包括Norris团队设计完成的应用于烟草和草料成分定量分析的近红外光谱仪。与此同时，激光技术的飞速发展，使新型激光不断地被应用于拉曼光谱中作为激发光源，专家相继研发出了一些新的拉曼技术及其与其他分析方法的联用技术。70年代后期，计算机和核磁共振无论在理论还是技术上都得到了进一步的完善，核磁共振技术开始逐渐应用于农业领域。