

本文引用格式: 赵路路, 殷泽轩, 陈红, 等. 基于高光谱成像的当归与独活分类[J]. 自动化与信息工程, 2023, 44(6): 33-38; 45.

ZHAO Lulu, YIN Zexuan, CHEN Hong, et al. Classification of angelicae and heracleum based on hyperspectral imaging[J]. Automation & Information Engineering, 2023, 44(6): 33-38; 45.

基于高光谱成像的当归与独活分类*

赵路路¹ 殷泽轩¹ 陈红¹ 刘诚^{1,2}

(1. 广东省科学院智能制造研究所, 广东 广州 510070

2. 昆明理工大学机电工程学院, 云南 昆明 650051)

摘要: 为避免当归与独活 2 种中药材混淆, 结合深度学习和近红外高光谱成像技术进行当归与独活的分类。首先, 获取当归与独活样本的平均光谱数据, 并采用显著图选出平均光谱数据中的 20 个波段作为特征波段, 实现特征提取与降维; 然后, 在全波段 (共 181 个波段) 和特征波段 (共 20 个波段) 的光谱数据集上, 分别采用一维卷积神经网络 (1D-CNN) 模型和支持向量机 (SVM) 模型对当归与独活进行分类。分类结果显示: 利用全波段光谱数据集建模时, 1D-CNN 和 SVM 在测试集上的分类准确率分别为 98.6% 和 98.1%; 利用特征波段光谱数据集建模时, 1D-CNN 和 SVM 在测试集上的分类准确率分别为 96.1% 和 95.5%。因此, 将高光谱成像技术与深度学习相结合可以实现当归与独活的快速分类。

关键词: 高光谱成像; 一维卷积神经网络; 支持向量机; 特征波段; 分类

中图分类号: TP391.4

文献标志码: A

文章编号: 1674-2605(2023)06-0006-07

DOI: 10.3969/j.issn.1674-2605.2023.06.006

Classification of Angelicae and Heracleum Based on Hyperspectral Imaging

ZHAO Lulu¹ YIN Zexuan¹ CHEN Hong¹ LIU Cheng^{1,2}

(1. Institute of Intelligent Manufacturing, Guangdong Academy of Science, Guangzhou 510070, China

2. Faculty of Mechanical and Electrical Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650051, China)

Abstract: To avoid confusion between Angelicae and Heracleum, deep learning and near-infrared hyperspectral imaging techniques were combined to classify them. Firstly, obtain the average spectral data of Angelicae and Heracleum samples, and use saliency maps to select 20 bands from the average spectral data as feature bands to achieve feature extraction and dimensionality reduction; Then, a one-dimensional convolutional neural networks (1D-CNN) model and a support vector machine (SVM) model were used to classify Angelicae and Heracleum on spectral datasets with a total of 181 bands and 20 bands, respectively. The result of classification showed that when modeling using full band spectral datasets, the accuracy of 1D-CNN and SVM on the test set was 98.6% and 98.1% in classification, respectively; When modeling using the characteristic bands spectral datasets, the accuracy of 1D-CNN and SVM on the test set was 96.1% and 95.5% in classification, respectively. Therefore, combining hyperspectral imaging technology with deep learning can achieve rapid classification of Angelicae and Heracleum.

Keywords: hyperspectral imaging; one-dimensional convolution neural networks; support vector machine; characteristic bands; classification

0 引言

中药材是中医药的核心组成部分。近年来, 中药材在生产与流通环节出现了掺杂、掺假和混淆等情

况^[1]。中药材当归与独活在外观上较为相似, 经验不丰富的检测人员较难区分。当归具有补血活血、调经止痛、润肠通便等功效; 独活具有止痛、解表等功效。

* 基金项目: 国家自然科学基金面上项目 (62275056); 梅州市应用型科技专项资金项目 (2021B0203001)。

若误将当归与独活混淆, 不仅减弱治疗效果, 还可能引发副作用或药物反应^[2-3]。当归与独活区分的传统方法为人工鉴别, 检测人员主要通过眼看和口尝的方式进行区分, 存在主观性强、检测效率低等问题。

随着高光谱图像的光谱分辨率不断提高, 数据处理能力不断增强, 高光谱成像技术广泛应用于中药材分选、食品安全、药物检测和饲料营养成分鉴别等领域。在中药材分选领域, 战皓等^[4]基于近红外光谱结合偏最小二乘法对不同产地的独活药材中的蛇床子素、二氢欧山芹醇当归酸酯等含量进行定量分析; 张付杰等^[5]利用可见近红外光谱成像对三七粉进行质量等级无损鉴定, 结果表明, 不同质量等级的三七粉内在成分的含量比例不同, 在可见光谱和近红外光谱范围内光谱特征也不同; 孙飞等^[6]基于近红外光谱, 利用数据融合的方式, 提高了姜半夏红外光谱鉴别的准确率。以上研究主要针对单类别中药材进行光谱分析, 而利用深度学习和高光谱成像技术实现当归与独活分类的研究鲜有报道。

本文提出一种基于高光谱成像的当归与独活分类方法。首先, 基于深度学习构建当归与独活分类模型; 然后, 通过显著图筛选特征波段, 去除冗余的光谱信息, 以减轻数据存储、计算与传输的压力^[7]; 最后, 利用支持向量机 (support vector machine, SVM) 建立全波段和特征波段光谱数据的分类模型进行对比验证, 实现当归与独活的无损分类。

1 数据样本

本文选用的当归与独活样本是在 2022 年 11 月—12 月购买于北京同仁堂药店, 其中当归样本有 562 片, 独活样本有 401 片, 共 963 片, 当归与独活的样本如图 1 所示。

将所有当归与独活样本分别按 7 : 3 的比例划分为训练集和测试集, 其中训练集有 673 片样本 (当归 393 片, 独活 280 片), 测试集有 290 片样本 (当归 169 片, 独活 121 片)。

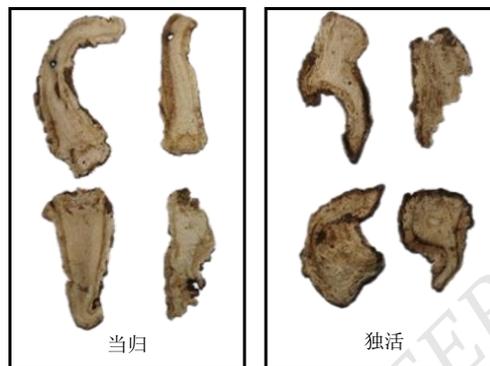
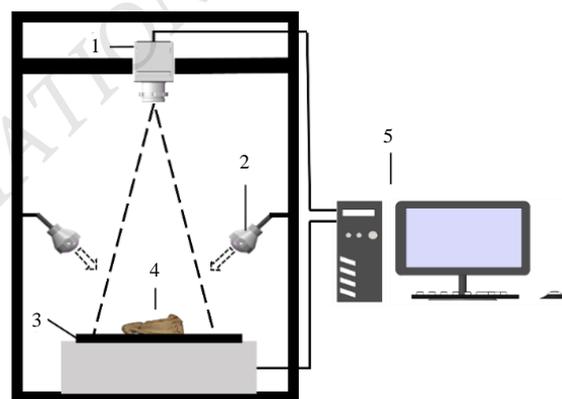


图 1 当归与独活样本

2 高光谱图像采集与处理

本文利用高光谱实验平台采集当归与独活样本的高光谱图像。高光谱实验平台主要由高光谱相机、卤素灯、移动载物台、计算机等组成, 如图 2 所示。



1—高光谱相机; 2—卤素灯; 3—移动载物台; 4—被测样品;
5—计算机。

图 2 高光谱实验平台示意图

本文选用 Specim Fx17 高光谱相机获取当归与独活样本的高光谱数据, 其光谱范围为 900~1 700 nm, 光谱分辨率为 8 nm, 光谱通道数为 224 个。

2.1 高光谱图像采集

首先, 将高光谱相机和卤素灯预热 30 min, 以保证图像采集过程中高光谱相机正常运转; 然后, 设置高光谱相机镜头与样本之间的距离为 40 cm 并校准镜头, 高光谱相机的曝光时间为 4.2 ms, 帧率为 234 f/s; 接着, 设置移动载物台的移动速度为 10 cm/s, 此时成像效果最佳; 最后, 将当归与独活样本随机散放在

移动载物台上,利用图像采集软件 SpectraVIEW 采集当归与独活样本的高光谱图像。

2.2 高光谱图像预处理

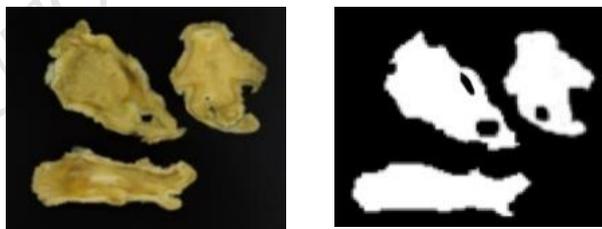
为降低光源强度分布不均匀和相机暗电流对高光谱图像的干扰,对采集的当归与独活样本高光谱图像进行黑白校正,校正公式为

$$R_{\lambda} = \frac{I_{\lambda} - H_{\lambda}}{B_{\lambda} - H_{\lambda}} \quad (1)$$

式中: R_{λ} 为校正后的高光谱图像, I_{λ} 为采集的高光谱图像, B_{λ} 为反射率为 99% 标准白板图像, H_{λ} 为镜头遮挡采集的暗场图像。

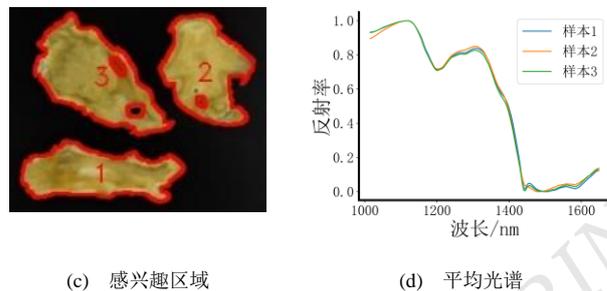
高光谱相机采集的当归与独活样本高光谱图像不仅包含样本信息,还包含干扰信息,这些干扰信息会影响分类模型的稳定性和可靠性^[8]。本文利用多元散射校正 (multiplicative scatter correction, MSC)、标准归一化变量 (standard normalized variate, SNV)、卷积平滑 (savitzky-golay, SG)^[9] 这 3 种方法分别对高光谱图像进行预处理,并对比选出最优的预处理方法。其中, MSC 用于校正光谱散射,降低因样本不均匀而导致的光谱差异,可有效提高光谱数据的信噪比; SNV 用于校正样本因颗粒散射而引起的光谱误差; SG 用于减少随机噪声,提高光谱的平滑性,通常在平滑点的前后选取多个点进行拟合,确定该点的最佳值,进而提高光谱数据的信噪比。

为了获取当归与独活样本的平均光谱数据,利用图像掩模逐个提取当归与独活样本的感兴趣区域 (region of interest, ROI),并将每个样本所有像素点的平均光谱反射值作为一条光谱曲线,共有 963 条平均光谱曲线。平均光谱数据提取过程如图 3 所示。



(a) 三通道彩图

(b) 灰度图



(c) 感兴趣区域

(d) 平均光谱

图 3 平均光谱数据提取过程

首先,利用高光谱相机采集当归与独活样本的三通道彩图;然后,通过阈值处理将高光谱相机采集的 1 364 nm 波段的灰度图作为掩模图像;最后,根据掩模图像中单个样本的掩模坐标,从高光谱图像中提取去除背景的部分高光谱图像作为感兴趣区域,并计算其平均光谱。

当归与独活样本的平均光谱曲线如图 4 所示。

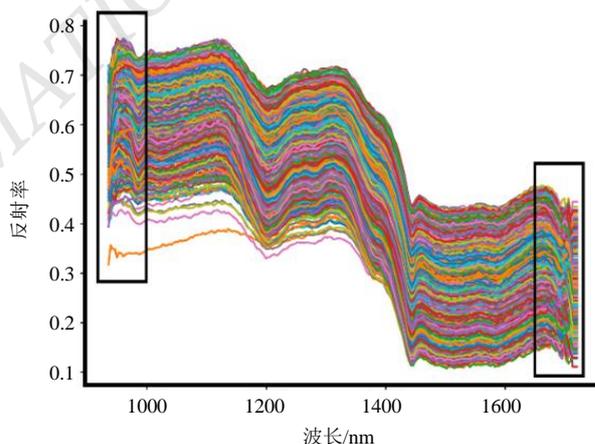


图 4 当归与独活样本的平均光谱曲线

由图 4 可知,当归与独活样本的平均光谱曲线在两端边缘处光谱反射值波动较剧烈,受干扰较大,数据失真严重,影响后期的分类效果,需进行噪声裁剪,即剔除噪声较大的 936 ~ 1 012 nm 和 1 652 ~ 1 720 nm 边缘波段,保留 1 016 ~ 1 648 nm 中间波段 (对应 224 波段中的 23 ~ 204, 共计 181 个波段) 进行建模分析。

3 分类模型建立

本文分别采用深度学习中的卷积神经网络 (convolutional neural network, CNN) 和机器学习中的 SVM 建立当归与独活分类模型。

3.1 一维卷积神经网络建模

卷积神经网络是一种端到端的深度神经网络，主要包括输入层、卷积层、池化层、全连接层和输出层。本文基于 LeNet-5 卷积神经网络建立当归与独活一维卷积神经网络（1D-CNN）分类模型，主要包括 3 个卷积层、3 个平均池化层和 1 个全连接层，模型框架如图 5 所示。

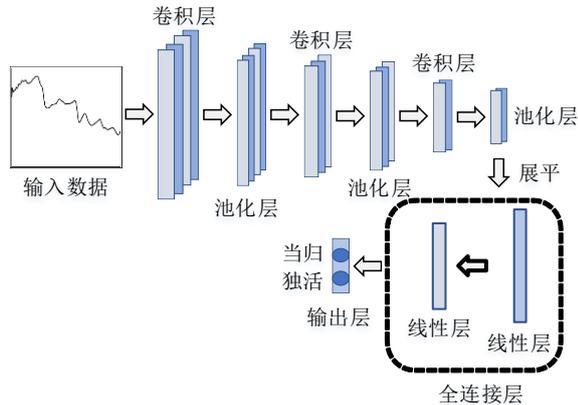


图 5 当归与独活 1D-CNN 分类模型框架

当归与独活 1D-CNN 分类模型的参数如表 1 所示。

表 1 当归与独活 1D-CNN 分类模型参数

层名	卷积核尺寸	步长	特征图尺寸	激活函数
一维卷积层	5	1	16×177	ReLU
池化层	2		16×88	
一维卷积层	5	1	16×84	ReLU
池化层	2		16×42	
一维卷积层	5	1	16×38	ReLU
池化层	2		16×19	
全连接层			304	ReLU
输出分类层			2	Softmax

当归与独活 1D-CNN 分类模型的输入为当归与独活样本高光谱图像经处理后的 1×181 (通道数 \times 波段数) 一维向量。除输出层的激活函数采用 Softmax 函数外，其他层的激活函数均采用 ReLU 函数。模型训练的批尺寸为 16 个。利用交叉熵损失函数评价预测值与实际值 (标签值) 之间的差异，同时使用 Adam 优化器优化卷积神经网络参数。

3.2 SVM

SVM 是常用的分类模型^[10]，因具有良好的泛化能力，在数据分类领域广泛应用。通过网格搜索算法结合 10 折交叉验证选择合适的超参数 (核函数、正则化系数 C 和核系数 γ) 来优化 SVM 模型。核函数、正则化系数 C 和核系数 γ 的调参范围分别设置为 {poly, rbf, sigmoid}、 $10^{-5} \sim 10^5$ 、 $10^{-5} \sim 10^3$ 。

SVM 超参数的优化过程为：首先，确定 SVM 模型，并将所有当归与独活样本分别按 7:3 的比例划分为训练集和测试集，定义网格搜索和交叉验证策略；然后，对超参数在交叉验证的训练集上训练 SVM 模型，并在测试集上评估 SVM 模型的性能；接着，根据评估结果，选择具有最佳性能的超参数组合；最后，利用最佳超参数组合在训练集上重新训练 SVM 模型，得到优化后的 SVM 模型。

3.3 评价指标

本文以当归与独活 1D-CNN 分类模型的准确率 P 作为评价指标，确定最佳的预处理方法和最优的分类模型，计算公式为

$$P = \frac{N_c}{N_a} \times 100\% \quad (2)$$

式中： N_c 为判别正确的样本数目， N_a 为样本总数目。

4 光谱特征波段选择

显著图是一种用于解释深度学习模型决策的可视化方法。利用显著图对当归与独活的全波段光谱数据进行特征波段选择^[11-12]，去除光谱数据中无关和冗余的特征，可减少数据计算量，增强当归与独活 1D-CNN 分类模型分类效果。

显著图选择特征波段的过程为：首先，将测试集中的数据 (1×181) (通道数 \times 波段数) 输入到训练好的当归与独活 1D-CNN 分类模型的输入层，根据类别标签进行前向传播得出分类结果；然后，停止前向传播进行反向传播，传播回输入层后通过对输入数据的梯度 ω 进行绝对值和归一化处理，作为各波段的贡献度 λ ；最后，根据贡献度 λ 选择相对应的 20 个波

段作为特征波段。

5 分类流程

当归与独活分类流程图如图 6 所示。

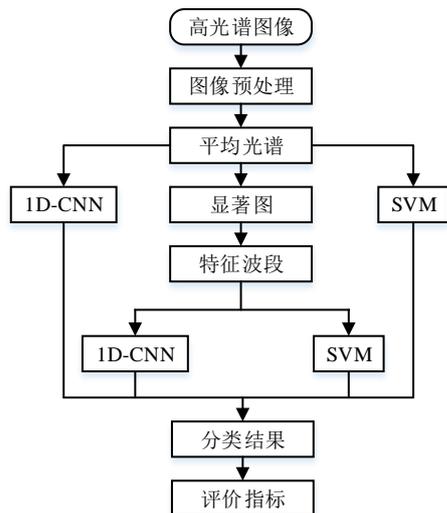


图 6 当归与独活分类流程图

首先,采用高光谱相机获取当归与独活样本的高光谱图像,确定高光谱图像预处理的最佳方法并计算其平均光谱;然后,分别利用当归与独活 1D-CNN 分类模型和 SVM 分类模型对当归与独活进行分类;接着,通过显著图选择当归与独活的特征波段,减少数据计算量;最后,在当归与独活数据集上基于所选的特征波段,分别采用 1D-CNN 分类模型和 SVM 分类模型实现当归与独活的分类。

6 结果与分析

实验采用戴尔 Precision 3630 台式机,硬件为:处理器 Intel(R) Core(TM) i7-8700 CPU @ 3.20 GHz 六核;内存 32 GB;显卡 NVIDIA GeForce GTX 1060,显存 6 GB。在高光谱实验平台获取高光谱原始图像后,利用 SpectraVIEW 软件进行高光谱图像的黑白校正和高光谱图像的预处理。通过 PyCharm 编程软件在 Anaconda3 集成环境和 Pytorch1.6.0 深度学习框架下完成 1D-CNN 模型和 SVM 模型的建立及分类结果分析。

6.1 高光谱数据

全部当归与独活样本的平均光谱如图 7 所示。

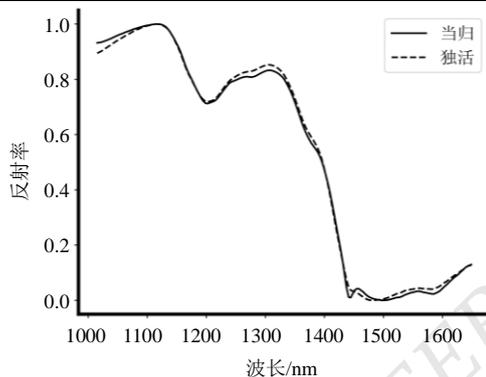


图 7 全部当归与独活样本的平均光谱

由图 7 可知,当归与独活光谱曲线相似性高,不易区分,但在某些波段存在细微的差异。

6.2 预处理结果

利用 SVM 对 SNV、MSC 和 SG 3 种高光谱图像的预处理方法进行评估,选出最优的预处理方法,结果如表 2 所示。

表 2 基于 3 种高光谱图像预处理的 SVM 模型识别结果

预处理方法	训练集 准确率/%	测试集 准确率/%
原始高光谱	98.91	96.98
SNV	99.32	97.77
MSC	99.23	97.68
SG	99.52	98.10

由表 2 可知,当归与独活样本的原始高光谱数据经过 SG 预处理后具有最高的准确率。本文 1D-CNN 分类模型、SVM 分类模型和特征波段选择均采用 SG 作为高光谱图像的预处理方法。

6.3 特征波段选择

利用 1D-CNN 分类模型进行当归与独活分类,其结果如图 8 所示。

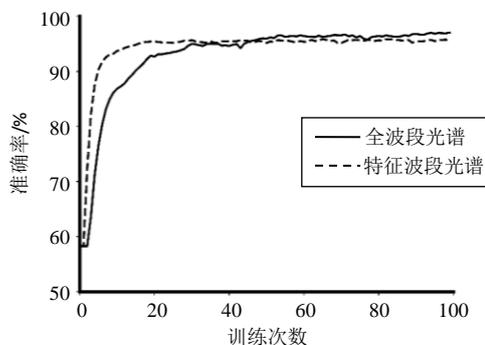


图 8 1D-CNN 分类模型在测试集上的准确率

由图 8 可知, 当归与独活 1D-CNN 分类模型在测试集上的准确率为 98.6%。根据 1D-CNN 模型的权重, 利用显著图可得到输入光谱数据的显著波段如图 9 所示。

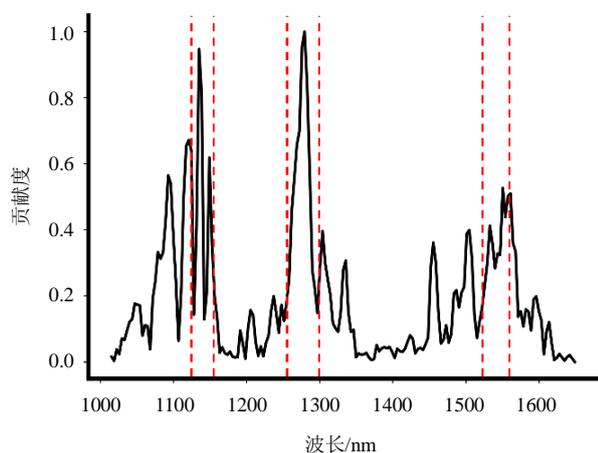


图 9 输入光谱数据的显著波段

由图 9 可知, 波段贡献度较大的区域分别集中在 1 120 nm、1 262 nm 和 1 548 nm 波长附近, 因此选择 1 108 ~1 136 nm、1 260 ~1 284 nm 和 1 542 ~1 560 nm 共 20 个波段作为特征波段。

6.4 建模结果与分析

将选择的特征波段测试集数据分别输入到 1D-CNN 分类模型和 SVM 分类模型, 由图 8 可知, 1D-CNN 分类模型经过 50 个 Epoch 后逐渐趋于平稳。

1D-CNN 分类模型和 SVM 分类模型分别在全波段和特征波段当归与独活光谱数据集上的最佳分类结果如表 3 所示。

表 3 全波段和特征波段光谱数据集的分类结果

处理方法和模型	训练集分类准确率/%	测试集分类准确率/%
原始高光谱+SG+1D-CNN	99.7	98.6
原始高光谱+SG+SVM	99.5	98.1
特征波段+SG+1D-CNN	96.6	96.1
特征波段+SG+SVM	96.8	95.5

由表 3 可知, 经过 SG 预处理的全波段光谱数据在 1D-CNN 分类模型、SVM 分类模型中均有良好的分类性能, 在 1D-CNN 分类模型中训练集和测试集的

分类准确率相差不大, 均超过 98%; 经过 SG 预处理的特征波段光谱数据在 1D-CNN 分类模型和 SVM 分类模型中的分类准确率都有不同程度的降低, 但其测试集精度均超过 95.5%, 相比全波段光谱数据下降约 3%, 由此可得出, 显著图用于特征波段选择具有良好的效果, 可有效减少数据冗余。

7 结论

本文基于深度学习和近红外高光谱成像技术, 实现了当归与独活的分类。采用 SG 方法进行高光谱图像平滑处理; 利用图像掩模逐个提取样本的感兴趣区域并获取各样本的平均光谱数据; 显著图被使用选择各样本中光谱数据的特征波段, 通过 1D-CNN 分类模型和 SVM 分类模型分别对当归与独活的全波段光谱数据和特征波段光谱数据进行建模分析。结果表明: 1D-CNN 分类模型和 SVM 分类模型均具有较好的分类效果; 由于选择特征波段, 光谱数据会丢失部分数据信息, 导致 SVM 分类准确率稍有降低 (约 3%), 但准确率仍达到 95% 以上。

在后续研究中, 可以尝试增加不同种类的当归与独活以及样本数量, 为当归与独活分类检测提供可靠的数据支持。此外, 还可以使用其他的波段选择方法, 设计更高效的深度学习模型。

参考文献

- [1] 倪琳, 刘富强, 靳婉君, 等. 建立快速筛查当归饮片及药材中掺假独活和掺假量的分析方法[J]. 海峡药学, 2022, 34(7): 40-45.
- [2] 车苏容, 张家源, 张秋梅, 等. 当归及其混淆品独活、欧当归的紫外鉴别[J]. 亚热带植物科学, 2020, 49(6): 473-476.
- [3] 张蕾, 赵宇平, 庞银银, 等. 基于高光谱成像技术的葛根与葛藤鉴别[J]. 中国中药杂志, 2023, 48(16): 4362-4369.
- [4] 战皓, 方婧, 杨滨, 等. 近红外光谱法测定不同产地独活中蛇床子素和二氢欧山芹醇当归酸酯含量[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(4): 1110-1113.
- [5] 张付杰, 史磊, 李丽霞, 等. 高光谱成像的三七粉质量等级无损鉴别[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(7): 2255-2261.
- [6] 孙飞, 陈雨, 王凯洋, 等. 基于红外光谱数据融合的姜半夏鉴别方法研究[J]. 北京中医药大学学报, 2019, 42(10): 862-868.

(下转第 45 页)