

基于光纤探头的洋葱近红外光谱检测的数值模拟

丁驰竹 谭佐军

华中农业大学理学院, 武汉 430070

摘要 利用 Monte Carlo 方法模拟光在洋葱组织内部的传输特性,并结合采用光纤探头的接触式测量条件,对漫反射检测信号进行仿真计算,分析表皮厚度和光学性质对测量的影响。结果表明,表皮对信号强度有明显的衰减作用,但对平均穿透深度影响不大。在波长 800 nm 处,探测点到入射点的距离(源探距)为 0.9~2.0 cm 时,在保证信号强度的同时可达到 0.5~0.8 cm 的平均穿透深度,并可检测到此深度的颈腐病害(*Botrytis allii* Munn.);使用直径和数值孔径较大的光纤探头可以在保证测量精度的同时提高探测灵敏度。

关键词 近红外光谱;无损检测;光纤;数值模拟;洋葱

中图分类号 TP 216;S 633.2 **文献标识码** A **文章编号** 1000-2421(2017)04-0110-07

洋葱是一种以球形鳞茎为可食用部位的蔬菜,具有较高的营养价值和一定的食疗作用。对洋葱内部品质进行快速无损检测,有助于实现洋葱的分级和分选,开发市场潜力。近红外光谱技术是农产品内部品质检测的较好方法。农产品组织的内部结构、可溶性固形物含量、含糖量、酸度等因素会对光谱特性产生影响,通过测量光谱信息可以对其内部品质进行分析^[1-2],该技术已在蔬菜、水果和生物组织检测中得到广泛应用^[3]。在对洋葱的检测应用中,Birth 等^[4]验证了近红外光谱技术对于物质含量的检测具有可行性;王海华等^[5]研究了利用近红外反射光谱预测洋葱的可溶性固形物含量。上述研究工作主要集中在建立光谱信息和农产品品质指标相互关联的数学模型,并没有讨论光在农产品内部的传输特性。实际上,近红外漫反射光谱技术采集的是在样品内部经历吸收和散射的复杂过程后,从样品表面漫反射出来的光子。研究光在组织中的传输特性,有助于设计更为有效的光学检测装置,提高检测算法的准确度和可靠度。Chugunov 等^[6]对洋葱建立了多层平面组织模型,用 Monte Carlo 方法对光在正常和有病害的洋葱组织中的传输特性进行了模拟,但没有考虑到洋葱的实际形状,模拟结果与实

验数据有偏差。本研究建立洋葱的多层球形模型,并结合采用光纤探头的接触式测量条件,用 Monte Carlo 方法对光在洋葱组织内部的传输特性进行数值模拟,旨在为设计更为有效的光谱检测装置提供理论依据。

1 材料与方法

1.1 测量模型

将洋葱视为多层同心球体,每层组织为均匀浑浊介质,其光学性质可由折射率 n 、吸收系数 μ_a 、散射系数 μ_s 和各向异性因子 g 描述。在数值模拟中将入射光简化为无限细光束,垂直照射洋葱表面。采用接触式测量方式,光纤探头直接与洋葱表面接触,轴线垂直于洋葱表面,探头采集到的漫反射信号经光纤送入光谱仪等探测器进行分析。探测点到入射点的距离(源探距)为 l 。探头的最大采集直径为 d ,可采集角度范围由数值孔径(numerical aperture, NA)决定。入射光中的光子在介质中传输,经历吸收和散射,若能从介质表面逸出,并进入光纤探头的可采集范围,则能被探测器接收。光子传输路径中与介质表面的最大距离为光子的穿透深度 p 。图 1 是利用光纤测量洋葱漫反射光谱的模型示意

收稿日期: 2017-03-25

基金项目: 国家自然科学基金项目(61505063);中央高校基本科研业务费专项(2662015BQ046)

丁驰竹,博士,讲师.研究方向:光学检测. E-mail: dingchizhu@mail.hzau.edu.cn

通信作者:谭佐军,博士,教授.研究方向:食品和农产品无损检测. E-mail: tanzuojun@163.com

图,该模型可用于任意波段、任意光强的光谱测量。

1.2 Monte Carlo 光传输模拟

Monte Carlo 方法是模拟光在浑浊介质中传输的有效手段^[7-9],其原理是采用随机抽样模型来描述光子在介质内随机游走、吸收和散射过程,且适用于对具有复杂结构的介质进行分析。本研究在 Wang 等^[7]编写的 MCML 程序基础上,根据多层球形模型和光纤探头检测条件,改写算法程序,分析比较不同光纤探头的信号接收能力和探测深度。Monte Carlo 模拟的流程图见图 2。

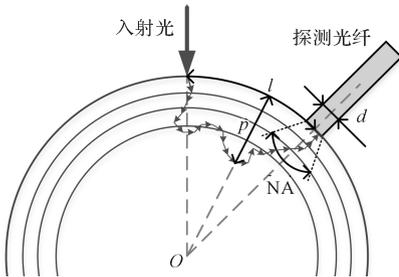


图 1 基于探测光纤的洋葱近红外光谱测量模型示意图

Fig.1 Model of the NIR spectroscopy measurement of an onion bulb with detection fiber

初始化,同时赋予初始权重 $w_0 = 1$ 。当光子在组织中传输时,采用随机抽样确定游走步长:

$$s = \frac{-\ln(\xi)}{\mu_a + \mu_s}, \xi \neq 0 \quad (1)$$

其中, ξ 为 $[0, 1)$ 区间内均匀分布的伪随机函数。由于吸收,每移动一步,光子的权重减小

$$\Delta w = \frac{w\mu_a}{\mu_a + \mu_s} \quad (2)$$

由于散射,光子的下一步游走方向由 Henyey-Greenstein 相位方程^[10]决定:

$$\cos\theta = \begin{cases} \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1-g^2}{1-g+2g\xi} \right)^2 \right], & \text{if } g > 0 \\ 2\xi - 1, & \text{if } g = 0 \end{cases} \quad (3)$$

$$\psi = 2\pi\xi \quad (4)$$

其中, $\theta \in [0, \pi)$ 为散射角, $\psi \in [0, 2\pi)$ 为方位角。

当光子移动到组织边界时,根据折射定律和非涅尔公式^[11]计算反射概率,采用随机抽样确定光子是折射或是反射。Monte Carlo 程序追踪光子运动,直到光子消亡(逸出组织外表面或是完全被组织吸收)。只有能够进入光纤探头的出射光子才能被检测系统采集到,即光子出射位置到探头中心的距离小于光纤可接收光子范围的最大半径,且光子出射方向与外表面法线的夹角小于光纤的接收角。探测信号的强度由接收到的光子权重和与总发射光子权重和之比表示。Monte Carlo 方法需要追踪大量的光子运动以得到统计结果,计算耗时长。在改写的程序中,采用并行算法同时对多个光子的漫射过程进行追迹,提高了计算效率。该程序曾用于对近红外光谱对桃的检测研究,并被实验验证^[12]。

为了衡量光纤探头的检测性能,在程序中记录每个光子的穿透深度,定义光纤探头的平均穿透深度为

$$\bar{P} = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} p_i w_i}{\sum_{i=1}^{N_p} w_i} \quad (5)$$

式(5)中, N_p 为探头接收到的光子数, p_i, w_i 分别为被接受光子的穿透深度和权重。

1.3 模拟参数设置

农产品组织的吸收系数主要由水、糖、叶绿素等成分含量决定,散射系数主要由组织的微结构特性决定^[3]。因此,洋葱组织的光学性质受洋葱品种、产地、成熟度等因素影响,并随波长变化而变化。

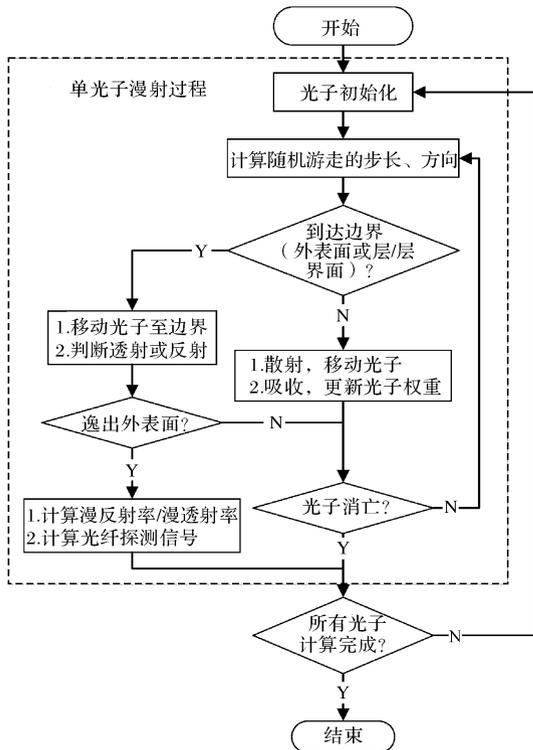


图 2 光传输 Monte Carlo 模拟流程图

Fig.2 Flowchart of Monte Carlo simulation of light transport 首先根据入射光性质对光子的位置、方向进行

表 1 洋葱组织数值模拟计算参数(波长 800 nm)

Table 1 Parameter values of tissues in the onion model at 800 nm

参数 Parameters	干表皮层 Dry skin layer	肉质鳞片层 Flesh layer	
		正常 Healthy	颈腐病害 Neck rot-infected
折射率 n	1.335	1.342	1.342
吸收系数/cm ⁻¹ μ_a	1.528	0.171	0.644
散射系数/cm ⁻¹ μ_s	291.775	20.554	17.703
各向异性因子 g	0.411 1	0.487 8	0.613 8
厚度/mm d	0.098 49	2.347 50	2.583 64

Chugunov 等^[6]和 Wang 等^[13]用积分球结合反向倍加法测量了不同品种洋葱组织的吸收和散射性质。本研究数值模拟中的参数值采用了 Chugunov 等^[6]和 Wang 等^[13]的实验测量结果,列于表 1 中。洋葱模型含有 16 层肉质鳞片层,不含或含有 1~2 层干表皮层。在没有另外说明时,数值模拟中采用的光纤探头最大采集直径为 600 μm ,数值孔径为 0.479。

2 结果与分析

2.1 光纤探头参数对测量结果的影响

光纤探头能采集到的光子数与其可采集面积和可采集角度(数值孔径)有关。若漫反射率变化比较缓慢,漫反射方向有较好的角度均一性,则采用不同的光纤探头的探测结果可根据采集面积做归一化处理:

$$R_{d,\text{norm}} = \frac{4R_{d,\text{det}}}{\pi d^2} \quad (6)$$

或根据采集角度做归一化处理:

$$R_{d,\text{norm}} = \frac{R_{d,\text{det}}}{\Omega} \quad (7)$$

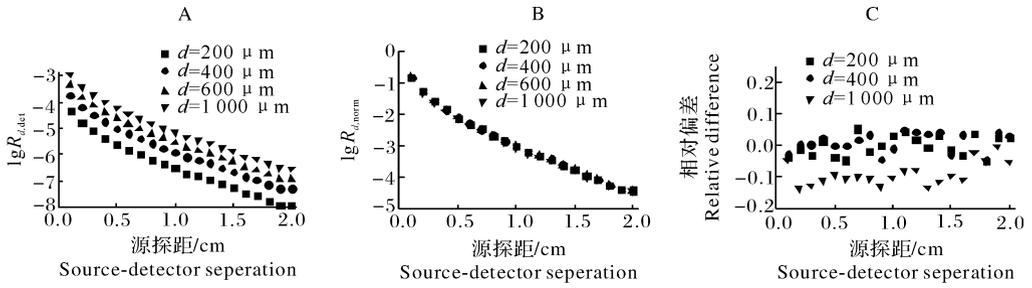
式(6)、(7)中, $R_{d,\text{det}}$ 和 $R_{d,\text{norm}}$ 分别为处理前、后的漫反射信号, d 为光纤探头的最大采集直径, Ω 是探头的接收立体角。

本研究仿真计算了不同参数的光纤探头对含有 2 层干表皮的洋葱进行漫反射测量的结果。图 3 采用的是数值孔径为 0.479,采集直径分别为 200、400、600 和 1 000 μm 的光纤探头。图 3A-C 分别为直接测量值、按面积归一化处理后的测量值、归一化处理后与直径 600 μm 探头测量值的相对偏差。图 4 采用的是直径为 600 μm ,数值孔径分别为 0.296、0.389、0.479 和 0.565 的光纤探头。图 4A-C 分别为直接测量值、按接收立体角归一化处理后的

测量值、归一化处理后与数值孔径为 0.479 的探头测量值的相对偏差。由图 3 可见,在归一化处理后,除直径为 1 000 μm 和数值孔径为 0.565 的光纤探头有部分测量值的相对偏差大于 10% 外,其余信号的相对偏差都在 $\pm 5\%$ 以内。说明当源探距离在 0.1~2.0 cm 之间时,为了提高测量灵敏度,可以选用直径较大、数值孔径较大的光纤探头进行测量,再根据探头的采集面积、接收立体角对测量结果进行归一化处理;但探头直径或数值孔径过大,由于漫反射率随出射位置和出射角度变化,将导致测量精度降低。在本研究后述的数值模拟中,光纤探头的最大采集直径为 600 μm ,数值孔径为 0.479。

2.2 表皮厚度对测量结果的影响

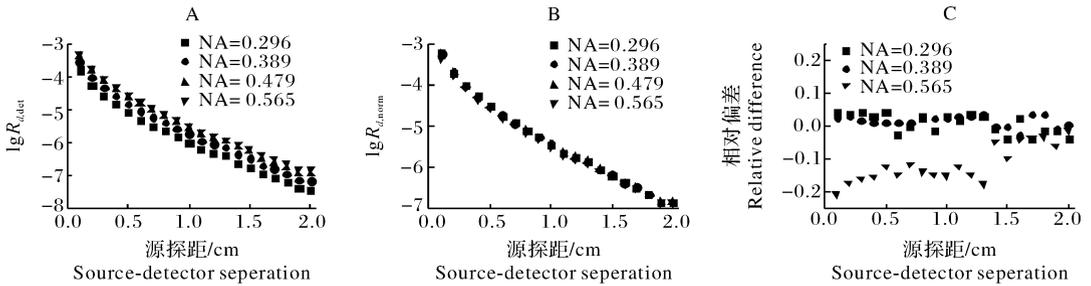
图 5 是光纤探头在距入射点不同位置处分别对不含表皮层、有 1 层干表皮和有 2 层干表皮的洋葱的 800 nm 近红外光漫反射测量结果。图 5A 是漫反射探测信号强度,图 5B 是含 1、2 层干表皮的洋葱漫反射信号强度与无表皮时信号强度的相对偏差。由图 5 可见,随着源探距离增加,漫反射信号强度近似指数减小。虽然洋葱的干表皮层非常薄,但是由于干表皮的吸收和散射系数远大于肉质的吸收和散射系数,因此,干表皮的存在对漫反射信号有明显的衰减作用,信号曲线整体下移,且表皮越厚衰减越多,在实际测量中必须考虑到干表皮层对探测结果的影响。图 5C、D 给出了探测信号的平均穿透深度。在源探距 0.1 cm 处,干表皮使穿透深度减小;当源探距离大于 0.1 cm 时,干表皮对穿透深度的影响很小。平均穿透深度随源探距离增大而增加,在 0.9~2.0 cm 时,可达到 0.5~0.8 cm 的平均探测深度,即第 2~3 层肉质鳞片层。增大源探距,虽然可检测到更深处的组织,但是由于漫反射信号衰减强烈,对探测器的灵敏度提出很高



A:漫反射探测信号 Detected diffuse reflectance signal; B:处理后信号 Processed signal; C:处理后信号的相对偏差 Relative difference of processed signal. $\lg R_{d,det}$:漫反射探测信号对数值 Detected diffuse reflectance signal by logarithm; $\lg R_{d,norm}$:处理后信号对数值 Processed signal by logarithm.下同:The same as below.

图 3 不同直径光纤探头的漫反射探测信号

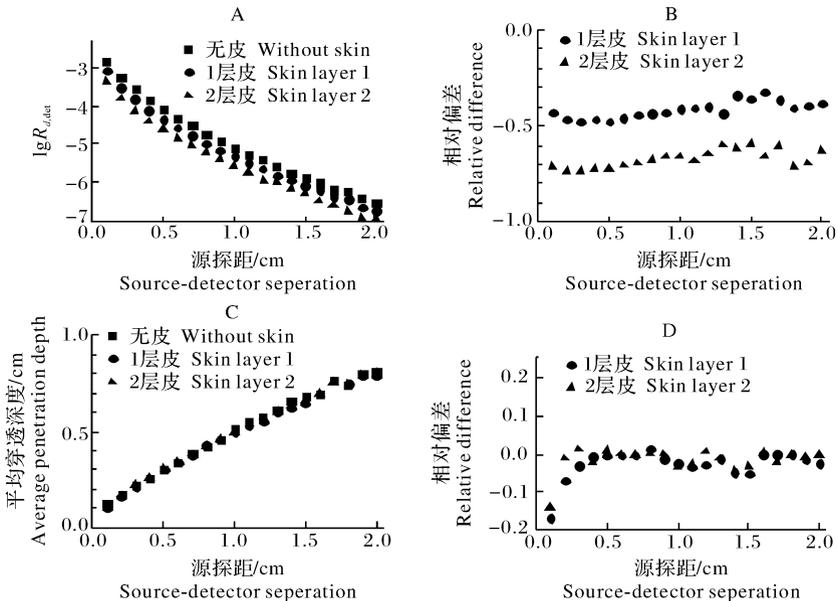
Fig.3 Diffuse reflectance detected by fiber probes of different diameters



A:漫反射探测信号 Detected diffuse reflectance signal; B:处理后信号 Processed signal; C:处理后信号的相对偏差 Relative difference of processed signal.

图 4 不同数值孔径光纤探头的探测信号

Fig.4 Diffuse reflectance detected by fiber probes of different numerical apertures



A:漫反射探测信号 Detected diffuse reflectance; B:漫反射探测信号的相对偏差 Relative difference of detected diffuse reflectance; C:平均穿透深度 Average penetration depth; D:平均穿透深度的相对偏差 Relative difference of average penetration depth.

图 5 不同表皮层数的洋葱的漫反射探测信号和平均穿透深度

Fig.5 Detected diffuse reflectance and average penetration depth of onion bulbs with different numbers of dry skins

的要求。

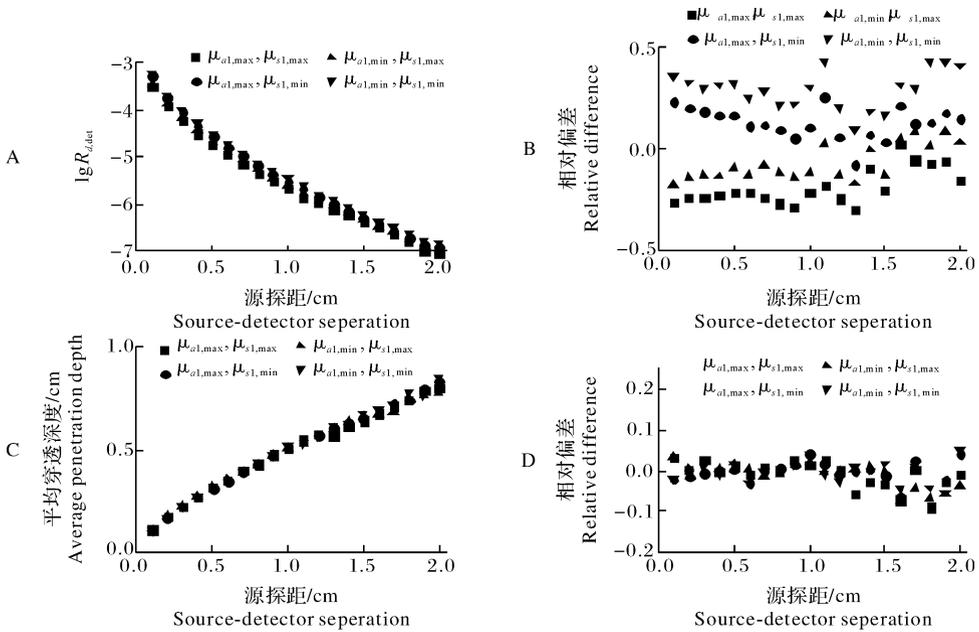
2.3 表皮光学性质对测量结果的影响

为分析表皮光学性质对漫反射率的影响,采用含有 2 层干表皮的洋葱模型,令其吸收系数和散射系数分别在表 1 中数值($\mu_a = 1.528 \text{ cm}^{-1}$ 、 $\mu_s = 291.775 \text{ cm}^{-1}$)的基础上波动 $\pm 20\%$,计算漫反射探测信号和平均穿透深度,并与 $\mu_a = 1.528 \text{ cm}^{-1}$ 、 $\mu_s = 291.775 \text{ cm}^{-1}$ 时相比较,结果如图 6 所示。干表皮的吸收和散射都会衰减漫反射信号,吸收和散射系数越大,对漫反射的衰减作用越强。在干表皮光学性质波动范围内,其光学性质对探测信号平均穿透

深度的影响在 $\pm 10\%$ 以内。

2.4 病变组织对测量信号的影响

检查组织是否发生病害,是对农产品进行无损检测的目的之一。洋葱经常发生“烂头”现象,而颈腐病(*Botrytis allii* Munn.)是产生“烂头”的主要原因。如图 7 所示,建立了 3 种不同程度的病害模型。模型含有 2 层干表皮,病害从洋葱中心向外发展,分别只有 1 层正常肉质层(Case 1H)、2 层正常肉质层(Case 2H)和 3 层正常肉质层(Case 3H)。图 8 给出了病害洋葱和正常洋葱的漫反射测量结果。发生了病害的洋葱的漫反射率低于正常洋葱的漫反射



A: 漫反射探测信号 Detected diffuse reflectance; B: 漫反射探测信号的相对偏差 Relative difference of detected diffuse reflectance; C: 平均穿透深度 Average penetration depth; D: 平均穿透深度的相对偏差 Relative difference of average penetration depth.

图 6 不同表皮光学性质的洋葱的漫反射探测信号和平均穿透深度

Fig.6 Detected diffuse reflectance and average penetration depth of onion bulbs with skins of different optical properties

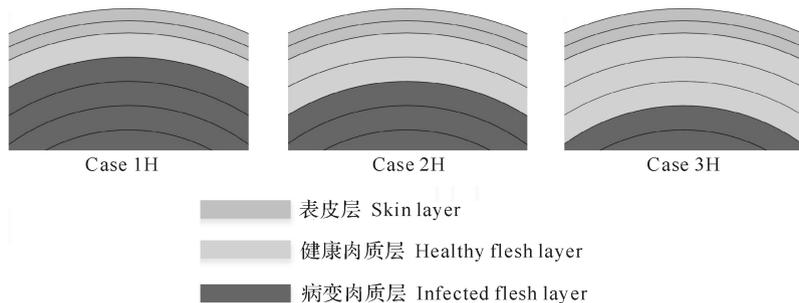
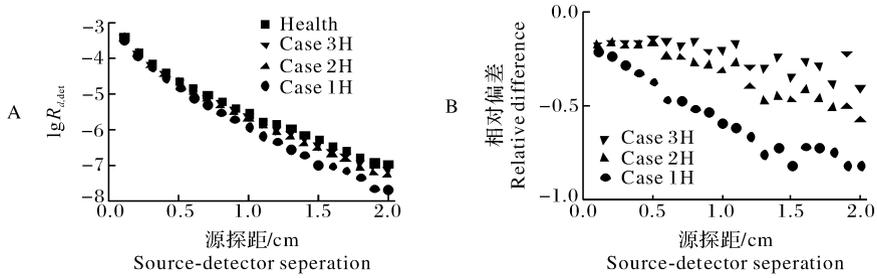


图 7 病害洋葱模型

Fig.7 Models of infected onion bulbs



A:漫反射探测信号 Detected diffuse reflectance; B:漫反射探测信号的相对偏差 Relative difference of detected diffuse reflectance.

图8 不同病害程度的洋葱的漫反射探测信号及与正常洋葱探测信号的相对偏差

Fig.8 Detected diffuse reflectance of onion bulbs with different infected layers and the relative differences with that from healthy onion bulb

率。这是因为病害组织的吸收系数大于正常组织,对光的衰减更强;而病害组织的散射系数小于正常值,减小了光子后向散射逸出表面的机率。从 Case 3H 到 Case 1H,随着病害向外表发展,漫反射测量结果与正常的测量结果之间的差异变大。对于 Case 2H 和 Case 3H,当源探距小于 0.3 cm 时,漫反射测量与正常测量结果差异并不明显;当源探距在 0.5~2.0 cm 之间时,差异变得明显,这可由该区域的平均探测深度增加来解释。另外的数值模拟表明,当病害区离外表皮间大于 3 层正常肉质层时,漫反射信号与正常洋葱的漫反射信号几乎一样,即无法通过漫反射测量检测出病害。

3 讨论

本研究对洋葱建立了多层球形模型,用 Monte Carlo 方法对采用光纤探头的接触式漫反射率测量结果进行数值模拟,分析了表皮厚度、吸收和散射性质对漫反射信号强度、平均穿透深度的影响。计算结果表明,表皮的存在对漫反射信号有衰减作用,且表皮越厚,吸收和散射系数越大,信号衰减越多;但是表皮对平均穿透深度影响不大。在近红外漫反射光谱检测中,往往要求有一定的平均穿透深度,因而源探距可以选择在 1.0~2.0 cm 之间,平均穿透深度可达 0.5~0.8 cm。在此距离范围内,数值模型构建需要考虑到洋葱的实际形状特征,而不能简单采用平面模型计算。对颈腐病害的洋葱模型进行数值模拟,证明近红外漫反射光谱技术可以检测到约 0.8 cm 深处的颈腐病害。本研究还分析了光纤探头参数对探测结果的影响。在对洋葱的检测中,探测信号的强度与探头可采集面积、角度范

围成正比。当源探距较大时,由于漫反射率减小,使用直径和数值孔径较大的光纤探头可以提高探测灵敏度。

参 考 文 献

- [1] 傅霞萍,应义斌.基于 NIR 和 Raman 光谱的果蔬质量检测研究进展与展望[J].农业机械学报,2013,44(8):148-164.
- [2] 付苗苗,刘梅英,牛智有,等.基于近红外光谱法的水稻秸秆可溶性糖快速检测[J].华中农业大学学报,2016,35(2):115-121.
- [3] NICOLAÍ B M, BEULLENS K, BOBELYN E, et al. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: a review [J]. Postharvest biology and technology, 2007, 46(2):99-118.
- [4] BIRTH G S, DULL G G, RENFROE W T, et al. Nondestructive spectrophotometric determination of dry matter in onions [J]. Journal of the American society for horticultural science, 1985, 110(2): 297-303.
- [5] 王海华,李长缨,李民赞.基于近红外反射光谱的洋葱可溶性固体物检测[J].光谱学与光谱分析,2013,33(9):2403-2406.
- [6] CHUGUNOV S, LI C. Monte Carlo simulation of light propagation in healthy and diseased onion bulbs with multiple layers [J]. Computers and electronics in agriculture, 2015, 117: 91-101.
- [7] WANG L, JACQUES S L, ZHENG L. MCML—Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues [J]. Computer methods and programs in biomedicine, 1995, 47(2): 131-146.
- [8] ZHU C, LIU Q. Review of Monte Carlo modeling of light transport in tissues [J]. Journal of biomedical optics, 2013, 18(5): 50902.
- [9] ZOLEK N S, LIEBERT A, MANIEWSKI R. Optimization of the Monte Carlo code for modeling of photon migration in tissue [J]. Computer methods and programs in biomedicine, 2006, 84(1): 50-57.

- [10] HENYEY L G, GREENSTEIN J L. Diffuse radiation in the galaxy[J]. *The astrophysical journal*, 1941, 93: 70-83.
- [11] BORN M, WOLF E. *Principles of optics*[M]. 7th. Oxford: Cambridge university press, 1999.
- [12] DING C, SHI S, CHEN J, et al. Analysis of light transport features in stone fruits using Monte Carlo simulation[J]. *PLoS ONE*, 2015, 10(10): e0140582.
- [13] WANG W, LI C. Measurement of the light absorption and scattering properties of onion skin and flesh at 633nm[J]. *Postharvest biology and technology*, 2013, 86: 494-501.

Numerical simulation of NIR spectroscopy measurement of onion bulbs using fiber probes

DING Chizhu TAN Zuojun

College of Science, Huazhong Agricultural University, Wuhan 430070, China

Abstract Near infrared spectroscopy technique is widely used to nondestructively inspect agricultural products. The Monte Carlo method was used to simulate light propagation in onion bulbs. The measurement system using fiber probes was modeled. The detected diffuse reflectance signals were calculated and the effects of dry skins on the measurements were analyzed. The results showed that the dry skin reduced the signal strength detected, but had little influence on the average penetration depth. At the wavelength of 800 nm, a source-detector separation between 0.9 and 2.0 cm is preferred to reach an average penetration depth of 0.5 to 0.8 cm and is capable of detecting the neck rot-infected flesh located in this depth. Using fiber probes with larger acceptance radii and numerical apertures helps increase the measurement sensitivity.

Keywords NIR spectroscopy; nondestructive inspection; fiber; numerical simulation; onion

(责任编辑:陆文昌)