doi:10.3969/j.issn.1006-8023.2024.03.014

基于卷积神经网络的樟子松木材密度近红外预测模型优化

刘晓利,李耀翔*,彭润东,张哲宇,陈雅
(东北林业大学 机电工程学院,哈尔滨 150040)

摘　要:近红外光谱分析技术在木材密度的预测方面具有独特的优势,是一种方便且快速的无损检测技术。卷积神经网络作为经典的深度学习模型之一,能够利用卷积和池化操作提取数据中的特征映射进行学习,与传统的学习模型相比具有更强的模型表达能力。为此将卷积神经网络用于近红外光谱预测木材的气干密度,以樟子松为研究对象,获取样本木材横切面的近红外光谱数据,采用杠杆值与学生化残差 t 检验(HLSR)法剔除奇异样本,采用 SGS+MC+Auto(Savitzky-Golay smoothing+ mean centering+ autoscaling)对光谱数据进行预处理,通过竞争性自适应重加权算法(competitive adaptive reweighted sampling method, CARS)对特征波长进行提取,构建卷积神经网络模型,预测樟子松的气干密度;并与偏最小二乘回归(partial least squares regression , PLSR)、支持向量机(support vector regression , SVR)和 BPNN(backpropagation network)神经网络的预测结果进行对比。结果表明,当校正集比例小于 0.65 时,模型预测结果略低于 PLSR 模型。但当校正集比例大于 0.7 时,卷积神经网络(convolution neural network, CNN)模型的预测精度优于其他模型,且随着训练样本比例的增加,模型的性能和稳定性也随之提升。研究表明 CNN 可以显著提高近红外预测木材气干密度的模型精度,实现基于近红外技术的木材密度有效预测。为木材气干密度无损检测提供了理论基础和科学依据。

关键词:木材气干密度;近红外光谱;卷积神经网络;樟子松;预测模型
中图分类号:S781.31　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1006-8023(2024)03-0142-10

NIR Prediction Model Optimization Study of *Pinus sylvestris* Wood Density Based on Convolutional Neural Network

LIU Xiaoli, LI Yaoxiang*, PENG Rundong, ZHANG Zheyu, CHEN Ya
(College of Mechanical and Electrical Engineering, Northeast Forestry University, Harbin 150040, China)

Abstract: Near-infrared spectroscopy is uniquely suited to the prediction of wood density, and is a convenient and rapid non-destructive testing technique. Convolutional neural networks, as one of the classical deep learning models, is capable of extracting feature mappings from data for learning using convolutional and pooling operations, and has more powerful modeling capability compared to traditional learning models. In this study, CNN was used in near-infrared spectroscopy to predict the air-dry density of wood. *Pinus sylvestris* was used as the study object to obtain the near-infrared spectral data of the cross-section of the sample wood. The high leverage-studentized residual (HLSR) method was used to remove abnormal samples, and SGS+MC+Auto was used to pre-process the spectral data. The characteristic wavelengths were extracted by the CARS algorithm and a CNN model was constructed to predict the air-dry density of the samples. The prediction results were compared with the prediction results of the partial least squares (PLS), the support vector machine (SVR) and the BPNN neural network. The results showed: when the calibration set ratio was less than 0.65, the model prediction results were slightly lower than the PLSR model. However, when the calibration set proportion was greater than 0.7, the prediction accuracy of the CNN model was better than the other models, and the performance and stability of the model improved with the increase of the proportion of calibration set. The study showed that CNN can significantly improve the accuracy of the model for predicting wood air-dry density in near infrared (near infrared spectroscopy), and realize the effective prediction of wood density based on NIR technology. It provides a theoretical foundation and scientific basis for the non-destructive testing of wood air-dry density.

Keywords: Wood air-dry density; near-infrared spectroscopy; convolutional neural network; *Pinus sylvestris*; prediction model

收稿日期:2023-11-02
基金项目:黑龙江省重点研发计划子课题资助(GA21C030、GA19C006)。
第一作者简介:刘晓利,硕士研究生。研究方向为木材无损检测。E-mail: xiaoli-liu@nefu.edu.cn
*通信作者:李耀翔,博士,教授。研究方向为木材无损检测。E-mail: yaoxiang@nefu.edu.cn
引文格式:刘晓利, 李耀翔, 彭润东,等. 基于卷积神经网络的樟子松木材密度近红外预测模型优化[J]. 森林工程, 2024,40(3):142-151.

LIU X L, LI Y X, PENG R D, et al. NIR prediction model optimization study of *Pinus sylvestris* wood density based on convolutional neural network[J]. Forest Engineering, 2024, 40(3):142-151.

0　引言

木材密度是评价木材材质的一项重要指标,不仅可以很好地表征木材硬度、干缩性等物理性能,而且还直接影响木材的产品质量和加工价值[1-3]。木材密度的检测一直是木材科学领域所关注的问题。传统的检测木材密度的方法对样本产生破坏且耗时长,无法满足现代化简便、快速、无损检测的要求[4]。因此,探索合理有效且能快速检测木材密度的方法具有重要意义。

近红外光谱(Near-infrared spectroscopy, NIRS)技术作为一种操作简单、实时响应、无污染的无损检测技术,可对木材的化学组成和物理性质快速、准确地预测[5]。在预测木材密度领域方面,Zhang 等[6]基于近红外光谱技术,提出了 Resnet1D-SVR-TrAdaBoost. R2 预测模型,实现了落叶松木材气干密度的无损检测;赵鹏等[7]基于近红外光谱技术,采用最小二乘支持向量机模型预测 4 种木材树种密度,预测集密度相关系数(R)为 0. 94;Li 等[8]将近红外光谱与 PSO-SVM(particle swarm optimization-support vector machine)模型结合预测落叶松的树种密度,预测集密度决定系数(R^2)为 0. 92;汪紫阳等[9]利用 NIRS 与 PLS-DA(partial least squares discriminant analysis)结合,准确识别了 9 种阔叶树,准确率高达 99. 58%。

尽管 NIRS 具有便捷、有效等特点,但在 NIRS 数据中,仍存在光谱波段宽、光谱信息冗余等问题,从而降低模型泛化能力。为解决此类问题,早期研究提出了不同的 NIRS 数据建模方法,目前常用的建模方法主要包括支持向量机回归(support vector regression , SVR)、偏最小二乘回归(partial least squares regression , PLSR)和 BP 神经网络(back-propagation network, BPNN)等模型[10-12]。然而,随着对 NIRS 领域探索的不断深入,传统的建模方法的弊端也显现出来。PLSR 常被用于处理线性数据,在面对非线性数据时,模型精度往往较低[13-14]。SVR 常被用于处理非线性回归问题,但参数的选择过程存在随意性和主观性,对参数调节要求较高[15-16]。BPNN 结构复杂,易出现过拟合问题。

卷积神经网络(convolution neural network, CNN)是深度学习领域使用最广泛的算法之一,相较于传统的建模方法(如 PLSR、BPNN 等),避免了模型参数复杂、建模时内存过大、过拟合等问题[17]。CNN 凭借权值共享和局部关联等优势,明显降低模型中权值个数与网络计算的复杂度。CNN 凭借从多维数据中提取有效特征、良好的模型泛化能力和鲁棒性等优点,可以很好地解决高维数据中存在大量冗余信息与共线性的问题,降低人为设计参数带来的误差[18-20]。近年来,CNN 被广泛用于木材缺陷分类识别[21-23]、木材性能检测[24-25]和树种分类[26-28]等领域。王璨等[18]基于 NIRS,分别采用 CNN、BPNN、PLSR 和 LSSVM(least squares support vector machine)等模型预测土壤含水率,利用 CNN 模型得到最佳建模结果,预测集决定系数(determination coefficient of prediction set,R^2)为 0. 956、均方根误差(root mean squared error of prediction, RMSEP)为 0. 804。陈承武等[29]基于 NIRS,将 CNN 与投票机制结合,实现了蒲黄炭的高效识别,测试集判别准确率高达 95. 4%。以上研究表明 CNN 是一种优秀的 NIRS 定量、定性分析方法。

本研究基于 CNN 在木材科学领域应用的优点和潜力,以樟子松气干密度的 NIRS 数据集为研究对象,采用奇异值去除与光谱预处理等方法剔除异常样本与光谱中基线漂移现象和噪声干扰,然后对光谱数据波段优选,分别采用 CNN、PLSR 和 SVR 等算法建立樟子松密度预测模型,并比较预测模型预测效果的差异,选择最优预测模型。为 NIRS 在木材科学研究领域研究提供理论依据与模型。

1　材料与方法

1. 1　仪器与样本

试验仪器为美国 ASD 公司产品,名称为 LabSpec © Pro FR/A114260 便携式光谱扫描仪。利用此光谱仪扫描采集样品的近红外光谱。光谱波长范围选择 350 ~ 2 500 nm。光谱分辨率为:3 nm@700 nm,10 nm@1 400 nm,10 nm@2 100 nm。光谱采样间隔为:1. 4 nm@350 ~ 1 050 nm,2 nm@1 000 ~ 2 500 nm。光谱空白校准使用商用聚四氟乙烯白板,照射光源用 DC 直流灯,二分叉光纤探头采集光谱。

1. 2　试样材料

所用樟子松样品采自黑龙江省带岭林业局东方红林场,129°04′38″ E,46°53′13″ N。地处小兴安岭南麓。试验所需试验样品均直接从当地制材厂购得。共得 106 个 20 cm ×20 cm ×50 cm 的樟子松木材样品。将样品在通风干燥的试验室环境下放置 4 周至质量恒定,测得此时樟子松木材样本的平

衡含水率约为 10%。利用近红外光谱仪采集木材横切面的光谱数据[27]。木材气干密度依据《木材物理力学性质试验方法》(国家标准 GB/T 1933—2009)进行测定,见表 1。

表 1 樟子松气干密度统计分析

Tab. 1 Basic statistics of air-dry density of *Pinus sylvestris*

样本量/个 Number of samples	均值/(g·cm^{-3}) Minimum	最大值/(g·cm^{-3}) Maximum	最小值/(g·cm^{-3}) Average	标准差/(g·cm^{-3}) Standard deviation
106	0.559 3	0.634 0	0.521 2	0.030 3

1.3 基于卷积神经网络(CNN)的木材密度近红外模型构建

卷积神经网络(CNN)通常包括输入层(input layer)、卷积层(convolutional layer)、池化层(pooling layer)、全连接层(fully connected layer)与输出层(output layer)。卷积层的作用是提取数据的特征信息。可训练的卷积核通过不断地在输入数据上滑动,并对所覆盖数据执行卷积运算,提取特征信息。卷积运算公式为

$$X_j^l = f\left[\sum_i (X_j^{l-1} * w_{ij}^j) + b_j^l\right]。 \quad (1)$$

式中:l 表示卷积层数;$*$ 表示卷积运算;X_j^l 为第 l 卷积层输出的 j 个特征图;X_j^{l-1} 为第 $l-1$ 卷积层输出的 i 个特征图;$f(\ )$ 为激活函数;w_{ij}^j 为第 l 层的卷积核;b_l^l 为第 l 卷积层偏置项。

池化层的作用是对卷积层输出的特征信息进行下采样,减少参数数量并提高特征数据的鲁棒性,从而避免过度拟合确保稳定的卷积过程。全连接层作线性变换,提高模型泛化性能。

本研究采用王磊等[31]提出的全流程近红外光谱分析模型(ATSpecNet)。ATSpecNet 由 1 个输入层、3 个一维卷积层、3 个最大池化层、1 个展平层、6 个全连接层、1 个输出层和 1 个超参数优化器组成,由于本研究输入的光谱数据共有 63 个特征,因此输入层的大小为 63×1,一维卷积核的数目分别为 128、64 和 32,卷积核的大小分别为 5、5 和 3,卷积步长为 1,激活函数为 tanh。池化层的窗口大小为 2;1 个展平层;6 个全连接层,输出维度分别为 32、16、8、4、2 和 1,使用 tanh 作为激活函数,RMSprop 为优化器、初始学习率为 0.01、epoch 为 200、均方误差(MSE)为损失函数,如图 1 所示,通过优化网络损失函数来更新模型超参数,最终根据预测结果的准确性选择最优参数,保存最优 CNN 模型。

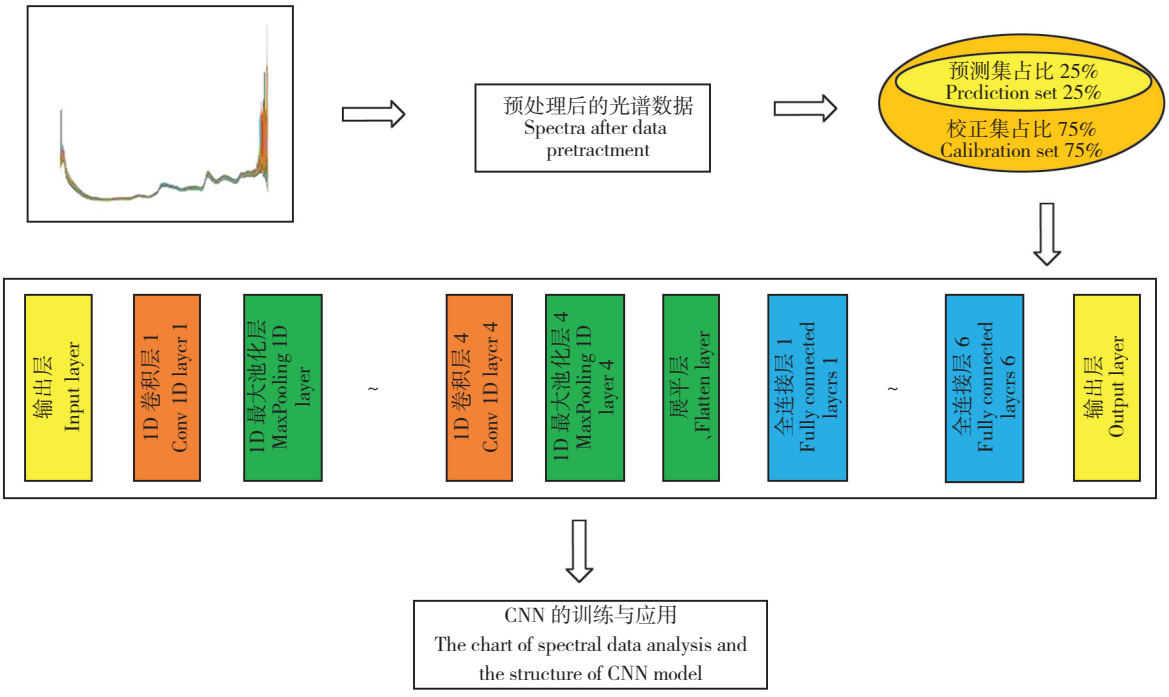


图 1 CNN-NIR 网络结构图

Fig. 1 CNN network structure

2　结果与分析

2.1　奇异值剔除

分别采用杠杆值与学生化残差 t 检验(high leverage studentized residual, HLSR)、联合 $X-Y$ 的离群值检测方法(outlier samples detection based on joint $X-Y$ distances ,ODXY)与光谱残差检验(spectral residual, SR)等方法对原始光谱数据进行异常值剔除。3 种异常样本剔除算法的样本剔除结果如图 2 所示。以模型的预测集决定系数(R^2)及 RMSEP 为模型的评估指标,见表 2。基于异常值剔除后的 NIRS 数据建立的 PLSR 模型的评估指标可知,采用 HLSR 算法时,主因子个数为 6,预测集 R^2 为 0.612 2,RMSEP 相较于未剔除异常值的模型降为 0.017 9,是不同异常值剔除算法中预测结果的最小值。模型的鲁棒性与泛化性能相较原始光谱均有较大改善。综合考虑,HLSR 被确定为建模前的异常值剔除算法。

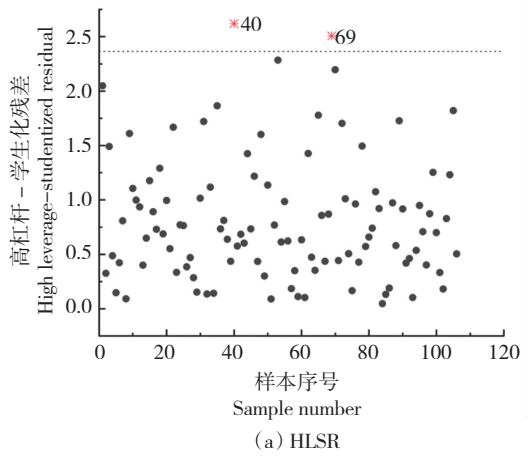
表 2　不同异常值剔除方法的樟子松木材密度建模及预测结果

Tab. 2 Modeling and prediction results of *Pinus sylvestris* wood density based on different outliers removal methods

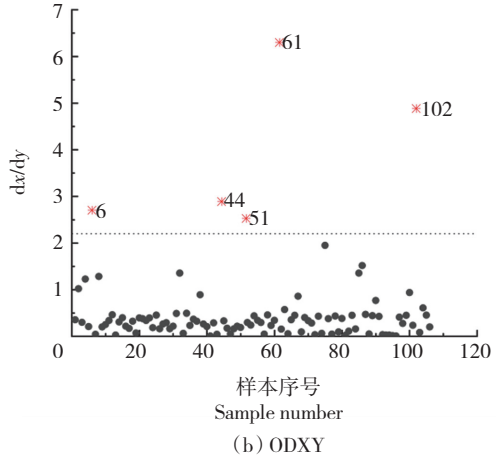
异常剔除算法 Sample removal methods	主成分数/个 Number of principal components	校正集 Calibration set		预测集 Prediction set	
		决定系数 R^2	校正均方误差 RMSEC	决定系数 R^2	预测均方误差 RMSEP
HLSR	**6**	**0.664 6**	**0.016 7**	**0.612 2**	**0.017 9**
ODXY	5	0.641 4	0.018 3	0.494 5	0.020 9
SR	5	0.610 7	0.019 1	0.453 5	0.021 0
None	5	0.653 7	0.017 7	0.523 7	0.019 9

注:None 为未采用异常剔除算法。

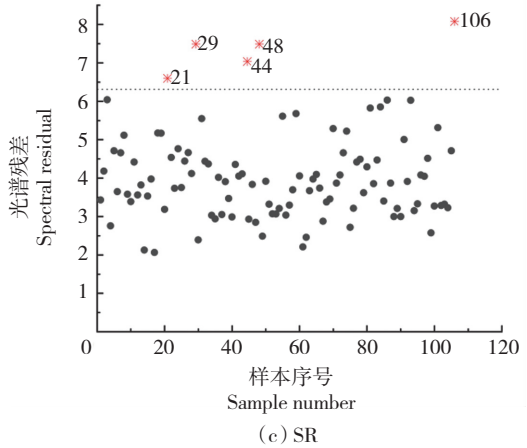
Note: None is the exception elimination algorithm not used.



(a) HLSR



(b) ODXY



(c) SR

图 2　3 种异常样本剔除方法的样本剔除结果

Fig. 2 Sample removal results based on three outliers removal methods

采用 HLSR 剔除奇异样本。通过查阅学生化残差检验的 t 分布临界值表确定其值,本研究选择 $t=2.365$。基于 HLSR 剔除异常样本得到杠杆值与学生残差分布图。共剔除了样本编号 40、69 共 2 个样本。剔除异常样本后的数据用于 CNN 模型的构建。

2.2　樟子松木材近红外光谱预处理方法

通过搜索光谱预处理方法和产生最佳结果的潜变量数(nLV)来优化 PLSR 模型。采用多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、标准化

(autoscaling, Auto)、去趋势(detrending, DT)、标准正态变量变换(standard normal variate transformation, SNV)、均值中心化(mean centering, MC)与Savitzky-Golay卷积平滑(Savitzky-Golay smoothing, SGS)等预处理方法相结合对原始光谱进行预处理,见表3。基于预处理后的NIRS光谱数据建立的PLSR模型的评价指标均得到明显的改善。说明对NIRS光谱进行预处理,可以很好地解决光谱的基线漂移及噪声干扰等问题,并达到提高模型预测性能的效果。综合模型的评估指标,采用SGS+MC+Auto联合光谱预处理方法时,主成分数为4,预测集 R^2 为0.761 6,RMSEP相较于原始光谱从0.017 9降为0.014 1,是不同预处理方法处理后模型预测集RMSEP中的最小值。综合考虑,本研究选择SGS+MC+Auto处理后的NIRS数据建立CNN木材密度预测模型。

表3 不同预处理方法的樟子松木材密度预测结果

Tab. 3 Prediction results of *Pinus sylvestris* wood density based on different pretreatment methods

预处理方法 Pretreatment methods	主成分数/个 Number of principal components	校正集 Calibration set		预测集 Prediction set	
		决定系数 R^2	校正均方根误差 RMSEC	决定系数 R^2	预测均方根误差 RMSEP
None	6	0.664 6	0.016 7	0.612 2	0.017 9
MSC	7	0.791 5	0.013 9	0.655 1	0.016 9
SNV	4	0.461 3	0.022 3	0.625 0	0.017 6
SNV+DT	6	0.683 0	0.017 0	0.598 8	0.018 3
SGS	4	0.843 1	0.011 6	0.631 3	0.017 5
MSC+MC+Auto	7	0.791 5	0.013 9	0.655 1	0.016 9
SNV+DT+MC+Auto	8	0.896 4	0.009 8	0.717 4	0.015 3
SGS+MC+Auto	4	0.881 2	0.010 5	0.761 6	0.014 1

2.3 樟子松木材近红外光谱特征波段优选

预处理方法可以消除NIRS数据中的随机噪声与基线偏移等问题,提高光谱质量与信噪比。但NIRS数据中仍是存在大量复杂冗余信息的高维数据,严重干扰后续模型的预测精度与性能。因此为进一步优化NIRS数据,剔除NIRS数据的冗余波段,提高模型的预测能力。本研究采用竞争性自适应重加权算法(competitive adaptive reweighted sampling method, CARS)提取特征波段。

采用CARS提取NIRS数据时,蒙特卡洛采样法(Monte Carlo sampling runs, MC)对木材样本采样100次,以10折交叉验证构建最大潜变量因子数为15的PLSR。

采用CARS提取特征波段,最终选择63个特征变量参与PLSR的构建。模型预测精度与鲁棒性得到明显提升,其中预测集的评价参数 R^2 从0.761 6提高到0.934 1,而RMSEP从0.014 1降低为0.007 6。图3(a)为被选择的变量数目随着采样次数增加的趋势图。由图3(a)可知,随着采样次数的增加,被选中的变量数目迅速地减少,但衰减趋势逐渐放缓。

图3(b)表示交叉验证均方根误差(root mean squared error of cross validation, RMSECV)随着采样次数增加的变化趋势图。随着大量冗余信息被剔除,RMSECV数值先减小后增大。当采样次数为51时RMSECV达到最小值,此时获得最优的特征波长集。在1~50次的模型运算过程中,NIRS数据中的冗余信息被剔除。当采样次数大于51时,RMSECV数值呈现上升趋势,这表明冗余信息被剔除的同时,部分有用信息也被去除,导致模型的预测精度降低。

图3(c)表示筛选的特征波长在每次采样中的回归系数的变化轨迹,其中星号线表示最小RMSECV对应的子集数。对比图3(a)、图3(b)的结果相互对应,表明采样次数为51次时,RMSECV最小,此波长变量子集是与樟子松样品气干密度相关最高的特征波长子集,共筛选得到63个特征波长。

2.4 建模结果比较

为获得最优木材密度预测模型,本研究随机选择75%的有效样本作为校正集(Calibration set),将该样本集用于训练模型与更新模型超参数。选择剩余25%的样本作为预测集(Prediction set),将该样本集的 R^2、RMSEP、相对分析误差(RPD)等参数作为模型的评价指标,用于检测所建模型的预测能力,比较模型优劣。所得模型结果见表4。

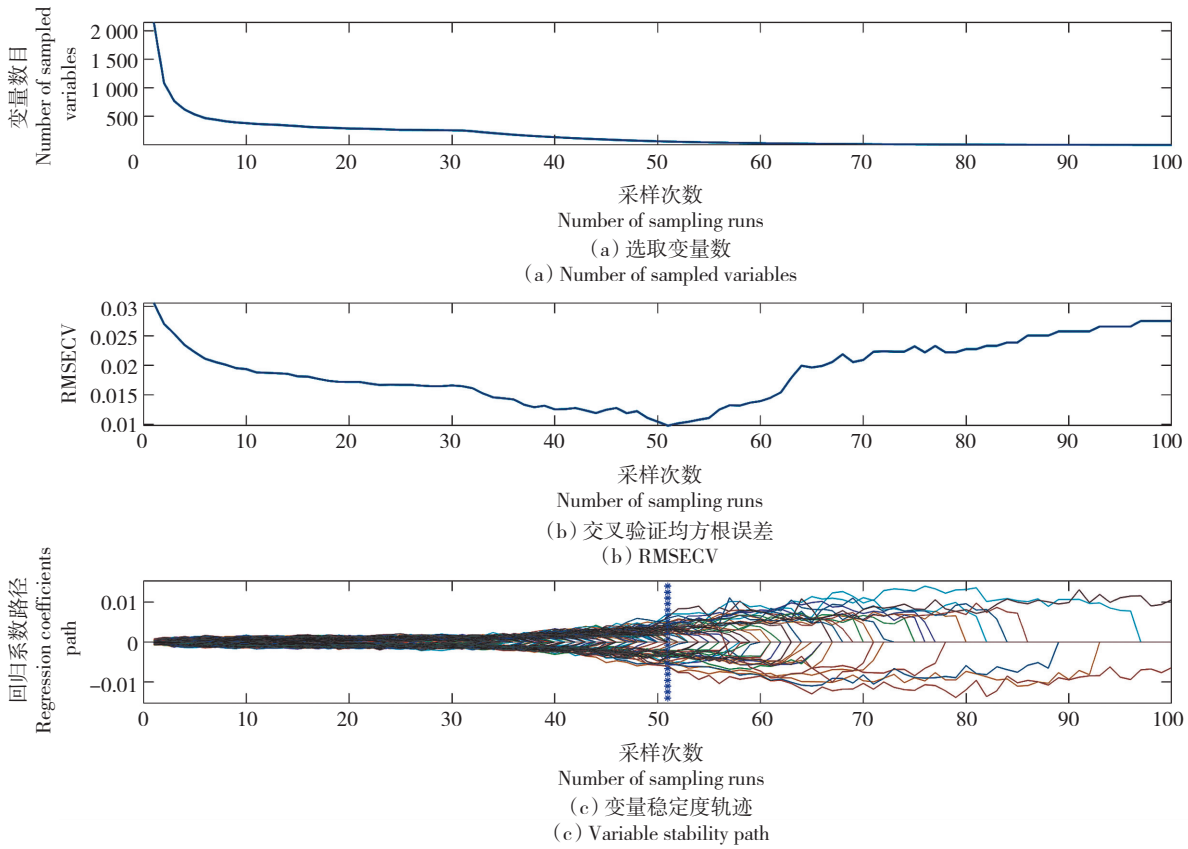


图 3　CARS 波段选择变化趋势图

Fig. 3 CARS band selections trend chart

表 4　不同建模方法的木材密度预测结果

Tab. 4 The prediction results of wood density with different model

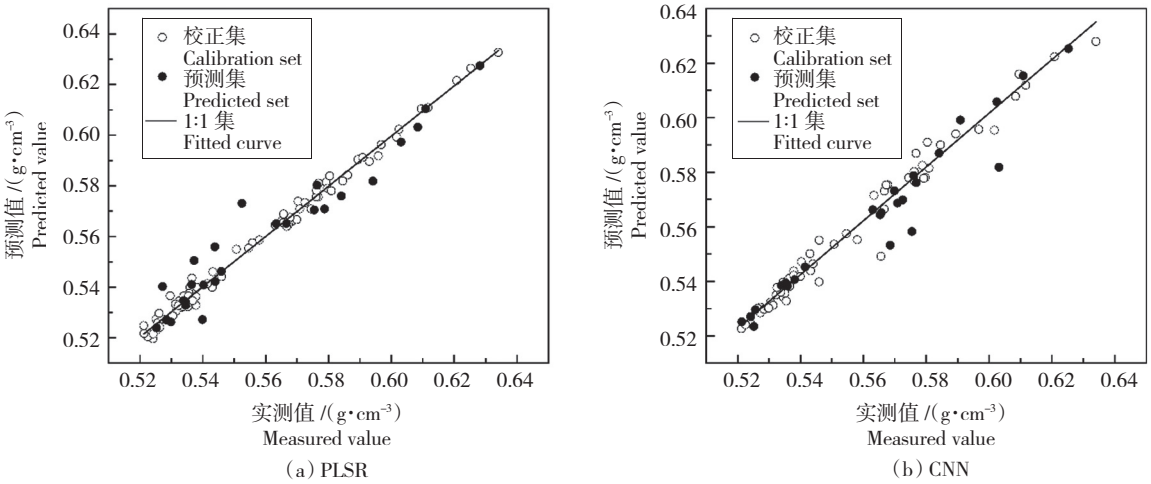
模型 Models	校正集 Calibration set		预测集 Prediction set		
	决定系数 R^2	校正均方根误差 RMSEC	决定系数 R^2	决定系数 RMSEP	相对分析误差 RPD
PLSR	0.992 2	0.002 5	0.934 1	0.007 6	3.972 2
BP	0.855 6	0.010 8	0.794 1	0.013 5	2.247 9
SVR	0.899 6	0.009 2	0.875 8	0.010 2	2.894 2
CNN	0.974 8	0.004 6	0.941 9	0.006 9	4.231 2

通过对比不同模型下的樟子松密度预测结果,对相同光谱数据的樟子松密度的回归预测,CNN 模型预测能力最优。在模型鲁棒性、泛化能力与预测精度方面,CNN 模型的预测集决定系数最大(R^2 = 0.941 9),比 BP 和 SVR 模型分别提高 0.147 8 和 0.066 1,具有最大的回归拟合度,表明 CNN 模型的拟合效果最优。均方根误差 RMSEP 最小(RMSEP = 0.006 9),比 BP 和 SVR 模型分别降低了 0.006 6 和 0.003 3,表明 CNN 模型的预测精度最高。RPD 最大(RPD=4.231 2),比 BP 和 SVR 模型分别提高了 1.983 3 和 1.337 0,表明 CNN 模型预测效果、泛化性能最佳;BP 神经网络模型在所有模型中表现较差;SVR、PLSR 在 4 个模型中表现中等。通过比较发现,CNN 模型的预测精度、鲁棒性、泛化性能最优,优于 BP、SVR 等传统模型。这是因为 CNN 结构可以学习输入数据的高阶特征信息,并最大程度地训练输入 NIRS 数据,从而建立预测能力优秀的木材密度预测模型。

由表 4 中 PLSR 模型和 CNN 模型的评估指标可以看出,PLSR 模型校正集决定系数 R^2 最大,为 0.992 2,校正集的决定系数 R^2 和预测集的决定系数 R^2 的差值为 0.058 1。但 CNN 模型校正集的决

定系数 R^2 和预测集的决定系数 R^2 的差值为0.032 9，CNN 模型校正集与预测集的评估指标差异较小，因此 CNN 的回归拟合程度与预测精度优于 PLSR。

PLSR 与 CNN 模型的回归结果如图 4 所示。2 个模型的校正集与预测集的密度预测值均分布在拟合线附近。由图 4 可知，2 个模型的校正集样本分布差异并不明显。相对于 PLSR 模型，CNN 模型的预测集样本更接近拟合线，模型的泛化能力更强。并且 CNN 模型的 RPD 值更大，说明 CNN 模型的性能指标优于 PLSR。



(a) PLSR　　(b) CNN

图 4　不同模型得到的回归图

Fig. 4 Regression plots obtained by different models

综合分析表明，CNN 模型是一种高性能的樟子松木材气干密度 NIRS 模型。基于相同的近红外光谱数据，采用 CNN 技术能够建立樟子松气干密度预测模型，且相比于传统的预测模型具有更高的模型稳健性、泛化能力与预测准确性。研究表明采用 CNN 建模时，CNN 结构能进一步降低输入数据的维度与排除不相关数据的干扰，并且筛选与挖掘 NIRS 数据中的高阶、深层的特征信息[29]。利用这些特征信息进行樟子松气干密度的实值回归，从而建立预测能力更好、泛化能力更强、鲁棒性更强的预测模型。

虽然 CNN 技术的权重共享机制可以有效地降低模型中超参数的个数，但由于 CNN 基本架构是由输入层、卷积层等网络结构堆叠而成，需要大量的训练样本进行训练，调节模型中的超参数。因此在建立 CNN 模型时，当参与建模的训练样本量较小时，模型的预测性能可能达不到最优，随着校正集样本量的增加，对增加的 NIRS 数据进行训练，更新网络结构中的权重，从而寻求最优的模型参数，进一步提升模型预测能力与精度。

2.5　建模样本量对模型预测精度的影响

为了研究不同建模样本量对模型效果的影响，本研究采用随机取样法划分校正集与预测集，校正集的占比梯度设置为 0.5~0.9。模型的评价指标为预测集样本的 R^2、RMSEP 与 RPD。为进一步验证 CNN 回归预测模型的预测效果，建立 BP、PLSR、SVR 等传统模型作为参考对象，见表 5。

由表 5 可知，当校正集样本的占比为 0.50 时，PLSR 与 SVR 模型的预测性能与模型泛化性能优于 CNN 模型，BP 神经网络的模型性能最差。当校正集样本的比例为 0.55 与 0.60 时，PLSR 模型为最优模型。CNN 模型的预测性能得到了明显的提升。当校正集样本占比大于 0.70 时，CNN 模型在所有模型中表现最佳，模型的预测精度、模型稳定性与泛化性能均优于其他传统模型。当校正集比例大于 0.80 时，虽然模型的预测精度较高，但是预测集的样本个数均小于 21，代表性较弱。当校正集占比为 0.70 时，预测集的样本个数大于 30，具有较强的代表性，并且预测集的 R^2 达到 0.973 2，RMSEP 为 0.004 9，模型的预测结果较为理想。因此本研究中校正集样本量最优占比为 0.70。

通过综合评价各模型的评价指标，随着校正集样本比例的增大，虽然部分模型的预测精度略有降低，模型的预测精度整体呈现增高趋势，模型的性能不断变优。其中 CNN 模型的预测效果最佳，模型预测性能增幅较大。当校正集样本比例较小时，PLSR 和 SVR 模型的预测性能较佳，但是随着比例的增加，模型精度的增长幅度不明显。BP 神经网络

表 5　不同校正集样本量下各模型的预测结果

Tab. 5 The predicted results of training sets with different sample sizes

校正集/预测集 Calibration set/ Prediction set	CNN			BP			PLSR			SVR		
	决定系数 R^2	均方根误差 RMSE	相对分析误差 RPD	决定系数 R^2	均方根误差 RMSE	相对分析误差 RPD	决定系数 R^2	均方根误差 RMSE	相对分析误差 RPD	决定系数 R^2	均方根误差 RMSE	相对分析误差 RPD
(0.50)52/52	0.735 6	0.015 8	1.965 8	0.655 3	0.013 9	1.719 9	0.841 7	0.011 5	2.537 6	0.770 3	0.014 3	2.107 2
(0.55)57/47	0.799 1	0.013 8	2.255 4	0.483 3	0.021 1	1.406 2	0.866 1	0.010 7	2.762 1	0.786 9	0.014 2	2.189 9
(0.60)62/42	0.826 5	0.013 0	2.429 5	0.673 7	0.016 2	1.771 9	0.911 3	0.008 5	3.399 2	0.825 7	0.013 1	2.424 0
(0.65)67/37	0.896 6	0.010 3	2.576 1	0.767 7	0.014 1	2.103 5	0.934 0	0.007 5	3.945 6	0.833 4	0.013 0	2.483 5
(0.70)72/32	0.973 2	0.004 9	6.202 0	0.806 1	0.013 5	2.307 5	0.932 2	0.008 0	3.901 0	0.849 0	0.011 6	2.615 0
(0.75)78/26	0.941 9	0.006 9	4.231 2	0.794 1	0.013 5	2.247 9	0.934 1	0.007 6	3.972 2	0.875 8	0.010 2	2.894 2
(0.80)83/21	0.939 8	0.007 1	4.175 2	0.710 5	0.015 1	1.904 6	0.913 1	0.008 3	3.476 9	0.880 2	0.010 1	2.960 2
(0.85)88/16	0.930 2	0.008 4	3.838 0	0.823 5	0.010 3	2.458 5	0.900 9	0.007 7	3.280 7	0.913 7	0.008 9	3.515 5
(0.90)93/11	0.988 3	0.003 6	9.727 7	0.911 5	0.008 2	3.526 3	0.940 5	0.006 7	4.299 5	0.934 9	0.008 6	4.109 1

模型性能始终劣于其他模型,但是随着校正集样本量的增大,模型的预测效果得到不断优化。单独评价 CNN 模型时,随着校正集样本比例的增大,CNN 模型能够提取更多的 NIRS 数据中关键特征点,模型得到了更加有效的训练,提升了模型的预测精度与泛化能力。当校正集样本量较大时,CNN 模型可以充分提取 NIRS 数据中的高阶信息,提高模型回归拟合程度与预测精度,建立稳定性强、预测性能良好的定量分析模型。与陈国喜等[16]、王璨等[18]研究结论一致。

3　结论

本研究应用卷积神经网络构建樟子松气干密度预测模型。建模过程中,通过奇异值剔除,保证了样本的可靠性;通过光谱预处理和特征提取,剔除了光谱信息中的冗余信息。

经过 CNN 与 BP、PLSR 和 SVR 建模比较,在校正集比例大于一定比例时,CNN 回归模型的预测精度更高,泛化性能更强。比例较小的情况下模型性能优于 BP、但略低于 PLSR 和 SVR 模型。PLSR 模型结果较优是由于樟子松气干密度和近红外光谱之间存在线性关系,SVR 模型较优是由于 SVR 模型更适合小样本数据的建模,随着校正集样本比例的提升,CNN 模型预测性能逐渐提高,逐渐优于 PLSR、SVR 等模型的预测性能。在大数据量的情况下,CNN 回归建模效果更佳。可见,CNN 回归模型不仅为近红外光谱预测木材气干密度提供了新的思路,而且具有明显的优势和重要的应用价值。但 CNN 回归建模也有一定的局限性,如当样本量较低时,模型的预测精度不佳且泛化性能较弱。当样本量较大时,虽然模型预测精度明显提升,但是建模所需时间较长。未来的研究重点应是如何提升 CNN 的训练速度,提升 CNN 模型的泛化性能,使 CNN 在近红外光谱领域得到更广泛的应用。

【参　考　文　献】

[1] 张哲宇,李耀翔,王志远,等. 基于 IFSR 异常样本剔除的落叶松木材密度近红外优化模型的研究[J]. 光谱学与光谱分析,2022,42(11):3395-3402.
ZHANG Z Y, LI Y X, WANG Z Y, et al. NIR model optimization study of larch wood density based on IFSR abnormal sample elimination[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(11): 3395-3402.

[2] 徐明锋,柯娴氡,张毅,等. 粤东 6 种阔叶树木材密度及其影响因子研究[J]. 华南农业大学学报,2016,37(3):100-106.
XU M F, KE X D, ZHANG Y, et al. Wood densities of six hardwood tree species in eastern Guangdong and influencing factors[J]. Journal of South China Agricultural University, 2016, 37(3): 100-106.

[3] 于雷,陈金浩,李龙飞,等. IPSO-BP 木材绝干密度近红外光谱预测模型[J]. 光谱学与光谱分析,2020,40(9):2937-2942.
YU L, CHEN J H, LI L F, et al. Prediction model of wood absolute dry density by near-infrared spectroscopy based on IPSO-BP[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2020, 40(9): 2937-2942.

[4] 李颖,李耀翔,徐浩凯,等. 基于降噪处理的蒙古栎木材气干密度 NIRS 定标模型[J]. 南京林业大学学报(自然科学版),2016,40(6):148-156.
LI Y, LI Y X, XU H K, et al. Model calibrating for NIRS-based oak wood air-dry density prediction with denoising pretreatment[J]. Journal of Nanjing Forestry University (Natural Sciences Edition), 2016, 40(6): 148-156.

[5] 褚小立,陆婉珍. 近五年我国近红外光谱分析技术研究与应用进展[J]. 光谱学与光谱分析,2014,34(10):2595-2605.
CHU X L, LU W Z. Research and application progress of near infrared spectroscopy analytical technology in China in the past five years[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2014, 34(10): 2595-2605.

[6] ZHANG Z Y, LI Y X, LI Y. Prediction approach of larch wood density from visible - near - infrared spectroscopy based on parameter calibrating and transfer learning[J]. Frontiers in Plant Science, 2022, 13: 1006292.

[7] 赵鹏,李悦. 可见光/近红外光谱分析的木材树种与密度同时预测[J]. 光谱学与光谱分析,2019,39(11):3525-3532.
ZHAO P, LI Y. Simultaneous prediction of wood density and wood species based on visible/near infrared spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2019, 39(11): 3525-3532.

[8] LI Y, VIA B K, YOUNG T, et al. Visible-near infrared spectroscopy and chemometric methods for wood density prediction and origin/species identification[J]. Forests, 2019, 10(12): 1078.

[9] 汪紫阳,尹世逵,李春旭,等. 可见/近红外光谱技术识别树叶树种的研究[J]. 西北林学院学报,2019,34(1):229-236,260.
WANG Z Y, YIN S K, LI C X, et al. Identification of tree leaf and species by VIS/NIR spectroscopy[J]. Journal of Northwest Forestry University, 2019, 34(1): 229-236, 260.

[10] YANG J, XU J F, ZHANG X L, et al. Deep learning for vibrational spectral analysis: recent progress and a practical guide[J]. Analytica Chimica Acta, 2019, 1081: 6-17.

[11] JIANG D Y, HU G, QI G Q, et al. A fully convolutional neural network-based regression approach for effective chemical composition analysis using near-infrared spectroscopy in cloud[J]. Journal of Artificial Intelligence and Technology, 2021, 1(1): 74-82.

[12] ZHU Z Q, QI G Q, LEI Y B, et al. A long short-term memory neural network based simultaneous quantitative analysis of multiple tobacco chemical components by near-infrared hyperspectroscopy images[J]. Chemosensors, 2022, 10(5): 164.

[13] 方明明,刘静. 基于回归卷积神经网络的近红外光谱苹果脆片品质评价方法研究[J]. 食品科技,2020,45(7):303-308,316.
FANG M M, LIU J. Evaluation method of apple chips quality by near infrared spectroscopy based on regressive convolutional neural network[J]. Food Science and Technology, 2020, 45(7): 303-308, 316.

[14] BALABIN R M, SAFIEVA R Z, LOMAKINA E I. Comparison of linear and nonlinear calibration models based on near infrared (NIR) spectroscopy data for gasoline properties prediction[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2007, 88(2): 183-188.

[15] 谭念,王学顺,黄安民,等. 基于灰狼算法 SVM 的 NIR 杉木密度预测[J]. 林业科学,2018,54(12):137-141.
TAN N, WANG X S, HUANG A M, et al. Wood density prediction of *Cunninghamia lanceolata* based on gray wolf algorithm SVM and NIR[J]. Scientia Silvae Sinicae, 2018, 54(12): 137-141.

[16] 陈国喜,周松斌,陈颀,等. 基于波段注意力卷积网络的近红外奶粉皮革水解蛋白掺假检测[J]. 光谱学与光谱分析,2022,42(12):3811-3816.
CHEN G X, ZHOU S B, CHEN Q, et al. Detection of hydrolyzed leather protein adulteration in infant formula based on wavelength attention convolutional network and near-infrared spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(12): 3811-3816.

[17] CHEN Y Y, WANG Z B. End-to-end quantitative analysis modeling of near-infrared spectroscopy based on convolutional neural network[J]. Journal of Chemometrics, 2019, 33(5): e3122.

[18] 王璨,武新慧,李恋卿,等. 卷积神经网络用于近红外光谱预测土壤含水率[J]. 光谱学与光谱分析,2018,38(1):36.
WANG C, WU X H, LI L Q, et al. Convolutional neural network application in prediction of soil moisture content[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(1): 36.

[19] 王飞. 基于改进 CNN 卷积神经网络的音乐识别模型构建[J]. 自动化技术与应用,2024,43(2):127-131.
WANG F. Construction of music recognition model based on improved CNN convolutional neural network[J]. Techniques of Automation and Applications, 2024, 43(2): 127-131.

[20] 张涛,张晓利,任彦. Transformer 与 CNN 融合的单目图像深度估计[J]. 哈尔滨理工大学学报,2022,27(6):88-94.

ZHANG T, ZHANG X L, REN Y. Monocular image depth estimation based on the fusion of transformer and CNN[J]. Journal of Harbin University of Science and Technology, 2022, 27(6): 88-94.

[21] 司丽洁,高凡,丁安宁,等. 基于卷积神经网络在木材缺陷识别中的研究进展[J]. 林产工业,2023,60(2):57-60,75.
SI L J, GAO F, DING A N, et al. Research progress in wood defect detection based on convolutional neural network[J]. China Forest Products Industry, 2023, 60(2): 57-60, 75.

[22] 赵京鹤,修大元,王金龙,等. 绝缘纸板典型缺陷局放特征的 CNN 识别[J]. 哈尔滨理工大学学报,2022,27(5):79-88.
ZHAO J H, XIU D Y, WANG J L, et al. PD recognition for typical cardboard insulation defect with CNN[J]. Journal of Harbin University of Science and Technology, 2022, 27(5): 79-88.

[23] GAO M Y, SONG P, WANG F, et al. A novel deep convolutional neural network based on ResNet-18 and transfer learning for detection of wood knot defects[J]. Journal of Sensors, 2021, 2021: 4428964.

[24] 吕俊霄,陈金浩,张怡卓,等. 应用二维相关近红外光谱特征建立蒙古栎弹性模量卷积神经网络预测模型[J]. 东北林业大学学报,2022,50(9):109-113,134.
LYU J X, CHEN J H, ZHANG Y Z, et al. Establishment of convolutional neural network prediction model for elastic modulus of *Quercus mongolica* using two-dimensional correlation near infrared spectral features[J]. Journal of Northeast Forestry University, 2022, 50(9): 109-113, 134.

[25] NEYSES B, SCHARF A. Using machine learning to predict the density profiles of surface-densified wood based on cross-sectional images[J]. European Journal of Wood and Wood Products, 2022, 80(5): 1121-1133.

[26] YANG S Y, KWON O, PARK Y, et al. Application of neural networks for classifying softwood species using near infrared spectroscopy[J]. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 2020, 28(5/6): 298-307.

[27] MAYRA J, KESKI-SAARI S, KIVINEN S, et al. Tree species classification from airborne hyperspectral and LiDAR data using 3D convolutional neural networks[J]. Remote Sensing of Environment, 2021, 256: 112322.

[28] KITA Y, SUGIYAMA J. Wood identification of two anatomically similar Cupressaceae species based on two-dimensional microfibril angle mapping[J]. Holzforschung, 2021, 75(7): 591-602.

[29] 陈承武,王天舒,胡孔法,等. 基于卷积神经网络与投票机制的蒲黄炮制品近红外判别方法[J]. 光谱学与光谱分析,2022,42(11):3361-3367.
CHEN C W, WANG T S, HU K F, et al. Identification method of pollen typhae processed products based on convolutional neural network and voting mechanism[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(11): 3361-3367.

[30] 江泽慧,黄安民,王斌. 木材不同切面的近红外光谱信息与密度快速预测[J]. 光谱学与光谱分析,2006,26(6):1034-1037.
JIANG Z H, HUANG A M, WANG B. Near infrared spectroscopy of wood sections and rapid density prediction[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2006, 26(6): 1034-1037.

[31] 王磊,宦克为,刘小溪,等. 基于卷积神经网络的近红外光谱全流程分析模型研究[J]. 分析化学,2022,50(12):1918-1926.
WANG L, HUAN K W, LIU X X, et al. Full-range analysis model of near infrared spectroscopy based on convolutional neural network[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2022, 50(12): 1918-1926.

[32] 蔡健荣,黄楚钧,马立鑫,等. 一维卷积神经网络的手持式可见/近红外柑橘可溶性固形物含量无损检测系统[J]. 光谱学与光谱分析,2023,43(9):2792-2798.
CAI J R, HUANG C J, MA L X, et al. Hand-held visible/near infrared nondestructive detection system for soluble solid content in mandarin by 1D-CNN model[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2023, 43(9): 2792-2798.