

2016, 42(6): 1077–1084
ISSN 0257–4799; CN 32–1115/S
DOI: 10.13441/j.cnki.cykx.2016.06.019

应用手持式近红外光谱仪检测桑椹可溶性固形物含量的偏最小二乘回归模型建立

颜辉 郭成 第丹丹 李霞 刘利 梁梦醒 熊孟

(江苏科技大学生物技术学院, 江苏 镇江 212018)

摘要 可溶性固形物含量(SSC)是评价桑椹鲜果品质的重要指标,利用近红外光谱分析技术建立快速、实时无损地检测桑椹鲜果中可溶性固形物的方法。首先用手持式 MicroNIR1700 型近红外光谱仪采集桑椹的近红外光谱,对光谱进行预处理后,应用偏最小二乘回归(PLS)法建立桑椹鲜果 SSC 预测模型,并用随机蛙(Random-frog)和自适应重加权采样(CARS)2种方法筛选出最优波长变量,提高 PLS 模型预测精度。经过 1 阶求导(1st Der)、标准正态变量变换(SNV)和均值中心化(MNCN)相结合预处理后的全波长光谱 PLS 模型的预测效果最好,校正集与验证集的相关系数平方(R^2)分别为 0.916 1 和 0.925 0,均方根误差分别为 0.985 8 °Brix 和 0.654 3 °Brix。相较于 Random-frog 法,用 CARS 方法优选出 19 个波长变量,所建 PLS 模型的预测效果更好,校正集与验证集的 R^2 分别为 0.933 2 和 0.943 4,均方根误差分别为 0.782 0 °Brix 和 0.582 8 °Brix。研究结果表明,利用手持式 MicroNIR 1700 型近红外光谱仪结合化学计量学方法,能够用于现场对桑椹鲜果 SSC 的快速无损检测。

关键词 桑椹;可溶性固形物;手持式近红外光谱仪;偏最小二乘回归;波长优选;随机蛙;自适应重加权采样

中图分类号 S886.9 文献标识码 A 文章编号 0257–4799(2016)06–1077–08

Establishment of Partial Least Square Regression Model for Determination of Soluble Solid Content in Mulberry Fruit by Handheld Near Infrared Spectrometer

Yan Hui* Guo Cheng Di Dandan Li Xia Liu Li Liang Mengxing Xiong Meng

(School of Biotechnology, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang Jiangsu 212018, China)

Abstract Soluble solid content (SSC) is an important index in quality evaluation of mulberry fruit. A method of rapid, real-time and nondestructive detection of soluble solid content (SSC) in mulberry fruit was established by using near infrared (NIR) spectroscopy analysis technology. Firstly, a handheld NIR spectrometer MicroNIR1700 was used to collect mulberry near infrared spectra. After pre-treatment, a prediction model for soluble solid content in mulberry fruit was established through partial least square (PLS) regression. Then, Random-frog and competitive adaptive reweighted sampling (CARS) methods were adopted to select the optimum wavelength variables to improve accuracy of the PLS model. The results showed that the best preprocessing method was the combination of first derivative (1st der), standard normal variable (SNV) transformation and mean center for PLS modeling with full wavelength variables. The calibration set and prediction set had the correlation coefficient R^2 of 0.916 1 and 0.925 0 respectively, and the root mean square error (RMSE) of 0.985 8 °Brix and 0.654 3 °Brix respectively. Compared to Random-frog method, 19 wavelength variables were selected in CARS method and the prediction effect was better. Its calibration set and prediction set had an R^2 value of 0.933 2 and 0.943

4 respectively, and an RMSE value of 0.782 0 and 0.582 8 °Brix respectively. These data demonstrate that the handheld near infrared spectrometer MicroNIR1700 combined with chemometric methods can be used for quick and nondestructive on-spot detection of soluble solid content in mulberry fruit.

Keywords Mulberry fruit; Soluble solid content; Handheld

收稿日期: 2016–05–23 接受日期: 2016–06–10

资助项目: 镇江市农业科技支撑项目 (No. NY2014032)。

第一作者信息: 颜辉 (1971–), 男, 副教授, 硕士生导师。

E-mail: yanh1006@163.com

* Corresponding author. E-mail: yanh1006@163.com

near infrared spectrometer; Partial least square regression; Wavelength selection; Random-frog; Competitive adaptive reweighted sampling

桑椹是桑属 (*Morus* L.) 植物的果实,其多汁、味甜,营养丰富,不仅是风味独特的水果,而且具有补肝益肾、生津润肠、乌发明目等保健功效。目前,桑椹鲜果及桑椹加工产品均展示出了良好的市场前景。可溶性固形物含量(soluble solids content, SSC)是桑椹鲜果品质评价的重要指标之一^[1],根据SSC可对桑椹鲜果进行分选,实现鲜果分级销售以及加工更为合适的桑椹产品种类,进而可获得更好的经济效益和品牌效应。此外,SSC还可作为果用桑树品种选育以及优质桑果生产技术体系的考核指标之一。现有的桑椹鲜果SSC检测方法通常是将桑椹果实取汁后,应用阿贝折射仪进行检测,但这种方法不能满足桑果生产、流通及产品加工过程质量控制的快速、无损、准确检测要求。

近红外光谱检测技术(Near infrared spectroscopy analysis, NIRSA)是一种广泛应用的无损、快速、无需预处理、无污染的现代检测分析技术^[2],为现代电子技术、光谱技术、计算机技术和化学计量技术的集合体。应用近红外光谱检测技术,可将采集样品的光谱数据经标准化学方法进行化学成分分析,再通过数学方法将光谱数据和检测数据进行关联、转换,与化学成分数据进行回归分析,建立数学模型,用于待测样品成分的含量测算。目前近红外光谱技术已在梨^[3]、脐橙^[4]、苹果^[5]等水果的SSC检测中应用。近期,浙江大学ZHAO等^[6]采用短波近红外光谱(Near infrared spectroscopy, NIR)成像方法检测桑椹中SSC,结果表明是可行的。但NIR成像装置存在体积大、功耗高、携带不方便的缺点,无法满足众多用户的现场检测需求。近年来,便携式近红外光谱仪的研制已经成为近红外光谱分析领域发展的重要方向之一,如美国JDSU公司生产的MicroNIR系列手持式近红外光谱仪因体积小、质量轻和方便携带等独特优点,特别适合随身携带用于现场对农产品品质的快速检测^[7]。

偏最小二乘回归(Partial least square regression, PLS)是近红外光谱检测中广泛应用的一种建模方法,具有较强的处理光谱数据共线性的功能^[8-9]。在应用近红外光谱仪对样品光谱进行检测的过程中,由于光谱信息不是均匀分布于光谱波长变量中,有些波长变量所含噪声较高,这些噪声会降低最终

建立PLS模型的预测精度。通过剔除低相关的波长变量,优选高信息的波长变量建立模型,可达到提高模型预测精度的目的,同时也起到简化PLS模型的作用^[10-11]。

本研究拟建立应用MicroNIR1700型手持式近红外光谱仪实时无损检测桑椹SSC的方法,并采用随机蛙算法(Random-frog)、自适应重加权采样(Competitive adaptive reweighted sampling, CARS)这2种方法优选对桑椹SSC敏感的波长变量,以求建立高精度的PLS模型及检测方法。

1 材料与方法

1.1 供试桑椹

选用160粒6~9成熟的新鲜桑椹作为样品,桑品种为中椹1号,桑椹采摘自中国农业科学院蚕业研究所桑树种质资源保存圃。

1.2 近红外光谱采集

采用MicroNIR1700型手持式近红外光谱仪(美国JDSU公司)采集桑椹的近红外反射光谱(图1),光谱范围为891~1669 nm。光谱采样间隔为6.27 nm,积分时间15 ms,扫描次数50次,每个样品采集光谱3次,以3次平均值作为最终光谱数据。试验环境温度为室温,相对湿度40%左右。获取的光谱以每一个波长(nm)下的吸光度值 $\lg(1/R)$ 表示, R 是指反射光强与入射光强之比。



图1 用MicroNIR1700型手持式近红外光谱仪采集桑椹的NIR光谱

Fig. 1 Acquiring NIR spectrum of mulberry fruit using hand-held MicroNIR1700 spectrometer

1.3 SSC 测定与样品集划分

采集桑椹样品的近红外光谱后即 用 WZ-103 型折光仪(浙江托普云农科技股份有限公司)测定 SSC。用蒸馏水调零后取待测桑椹汁滴在检测棱镜上,轻轻合上盖板,避免产生气泡,使桑椹汁均匀遍布棱镜表面。将仪器对准明亮处,调节目镜至蓝白分界线清晰,读取分界线的刻度值。所有样本按 SSC 值从小到大排序,按 2:1 比例划分为校正集和预测集,其中 SSC 值最大和最小的样品应为校正集。最终以 107 个样本作为校正集,用于建立校正模型;53 个样本作为预测集,用于验证模型的准确性。

1.4 光谱数据处理与分析

1.4.1 光谱数据预处理 由于桑椹果实表面粗糙程度、果实大小的差异,所采集光谱信号中除样品待测成分信息外,还可能包含高频噪声、杂散光、基线漂移、样品背景等,故需对光谱进行预处理以减弱非目标因素对光谱信息的影响^[12]。采用标准化(Auto)、一阶求导(1st Der)、标准正态变量变换(SNV)、均值中心化(MNCN)和多元散射校正(MSC)等方法^[13],对采集近红外光谱数据进行预处理。

1.4.2 偏最小二乘回归 将样品光谱数据与相应的 SSC 数据导入 PLS 工具箱,选择光谱最佳预处理方法。在 PLS 分析中,潜变量(latent variable, LV)影响了预测模型的精度,需要选取最佳 LV。通常潜变量由交叉验证获得,本研究采用留一法(Leave one out, LOO)进行交叉验证。

1.4.3 波长优选 采用 Random-frog、CARS 这 2 种算法进行波长优选,筛选出最优波长变量,以提高模型精度。(1)随机蛙算法(Random-frog)是一种对特征波长进行提取的算法,有高效的高维数据变量选择能力,利用较少的变量迭代进行建模能够输出每个变量选择可能性,实现变量的选择^[14]。将预处理的校正集光谱数据与相应的 SSC 数据导入 Random-frog 算法,对全光谱进行波长筛选,筛选出建模所用的光谱点,将优选的校正集和预测集光谱与相应的 SSC 数据导入 PLS 工具箱建模,并采用 LOO 法进行交叉验证。(2)自适应重加权采样法(CARS)。该方法是在模仿达尔文“适者生存”进化理论基础上提出的一种新的变量选择方法^[15]。同样将预处理的校正集光谱数据与相应的 SSC 数据导入 CARS 算法,对全光谱进行波长筛选,筛选出建模所用的光谱点,将优选的校正集和预测集光谱与相应的 SSC 数据导入 PLS 工具箱建

模,并采用 LOO 法进行交叉验证。

1.4.4 模型评价 相关系数平方(R^2)与均方根误差(root mean squared error, RMSE)是评价 PLS 模型性能的指标。在建模过程中存在的相关系数有 3 个,即校正集 R_c^2 、交叉验证 R_{cv}^2 与验证集 R_p^2 , R^2 值越接近 1 并且数值相差越小时,模型的预测能力越好。均方根误差(RMSE)是观测值和真值偏差的平方与观测次数(n)比值的平方根,在建模中表示为样本的实际测量值与模型的预测值之间偏离的程度,包括校正集均方根误差(RMSEC)、交叉验证均方根误差(RMSECV)和预测集均方根误差(RMSEP),其值越小模型的预测能力越好。

2 结果与分析

2.1 桑椹样品的 SSC 测定数据

对 160 粒桑椹样品 SSC 测定数据的统计结果见表 1,校正集和预测集的 SSC 值范围相近,分别为 4.60 ~ 18.20 °Brix 和 5.20 ~ 16.60 °Brix,且校正集和预测集样品的标准差相近,分别为 2.39 °Brix 和 2.46 °Brix。因此表明,校正集和预测集划分合理,为建立可靠的预测模型奠定了基础。

表 1 采集桑椹样品经折光仪测算可溶性固形物含量参考值的统计分析

Table 1 Statistic analysis on reference values of soluble solid content of mulberry fruit determined using refractometer

| 项目 Item | 数据集 Data set | | |
|--------------------------------------|-------------------|------------------------|-----------------------|
| | 样品集 Sample set | 校正集 Calibration set | 预测集 Prediction set |
| 样本数量 / 个 Sample number | 160 | 107 | 53 |
| 范围 / (°Brix) Range | 4.60 ~ 18.20 | 4.60 ~ 18.20 | 5.20 ~ 16.60 |
| 平均值 / (°Brix) Average | 8.25 | 8.25 | 8.25 |
| 标准差 / (°Brix) Standard deviation | 2.50 | 2.39 | 2.46 |
| 变异系数 / % Coefficient of deviation | 30.30 | 28.97 | 29.82 |

2.2 桑椹样品 SSC 采集的光谱特征

图 2-A 是桑椹样品 SSC 的原始近红外光谱曲线。可见近红外光谱曲线趋势基本类似,没有明显异常的样本。光谱在 1 160 nm 和 1 400 nm 处存在较强的一OH 吸收峰。整个光谱曲线吸收特征的变化反映了桑椹中固形物不同组分信息含量的差异。

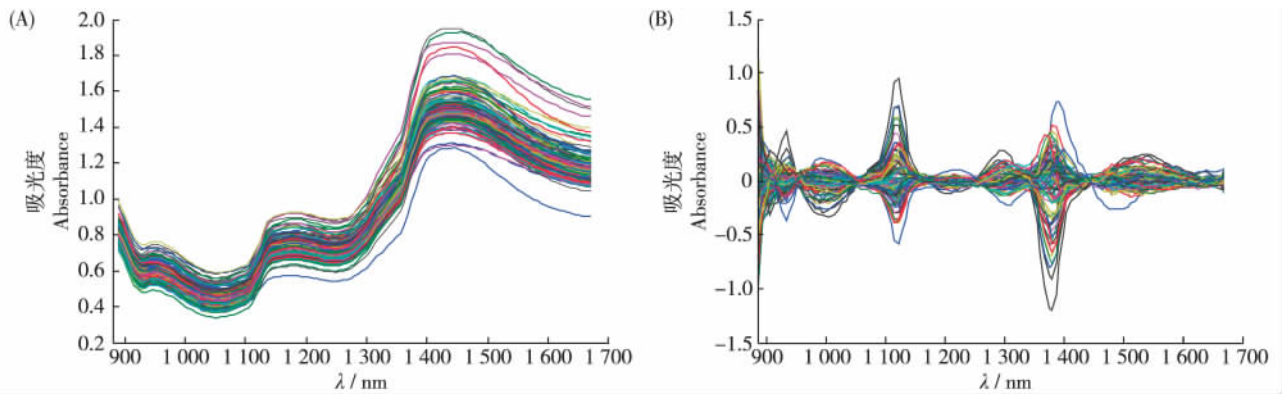


图 2 桑椹样品可溶性固形物的原始近红外光谱(A)和预处理后的近红外光谱(B)

Fig. 2 The raw NIR spectra (A) and the preprocessed NIR spectra (B) of soluble solid content in mulberry fruit

2.3 近红外光谱预处理及模型预测效果

采用标准化(Auto)、一阶求导(1st Der)、标准正态变量变换(SNV)、均值中心化(MNCN)和多元散射校正(MSC)^[13]等多种方法对原始近红外光谱进行预处理。如表2所示5种预处理方法中,采用一阶求导(1st Der)、标准正态变量变换(SNV)和均值中心化(MNCN)相结合的方法预处理后,建立偏最小二乘回归(PLS)的模型效果最好。

160个桑椹样品SSC的近红外光谱经过预处理

后(图2-B),对全波长光谱信息进行建模预测。从表3可知模型的校正集相关系数平方(R_c^2)和校正集均方根误差(RMSEC)分别为0.9161、0.7202 °Brix,交叉验证时相关系数平方(R_{cv}^2)和交叉验证均方根误差(RMSECV)分别为0.8435、0.9858 °Brix,验证集相关系数平方(R_p^2)和验证集均方根误差(RMSEP)分别为0.9250、0.6543 °Brix。从校正集和验证集的结果看,相关系数 R^2 都达0.90以上,预测RMSE的相对误差都<10%,因此模型的预测效果都相对较好。

表 2 原始近红外光谱数据经不同方法预处理后建立偏最小二乘回归(PLS)模型的预测效果

Table 2 Prediction performance of PLS model established using different preprocessing methods to raw NIR spectral data

| 预处理方法 Preprocessing method | 潜在变量 Latent variable (LV) | 相关系数平方 R^2 | | | 均方根误差 / (°Brix) RMSE | | |
|--------------------------------|------------------------------|-----------------|--------------------|----------------|-------------------------|---------------------|-------------------|
| | | | | | | | |
| | | 校正集 R_c^2 | 交叉验证 R_{cv}^2 | 预测集 R_p^2 | 校正集均方根误差 RMSEC | 交叉验证均方根误差 RMSECV | 预测集均方根误差 RMSEP |
| 1 st Der | 9 | 0.9136 | 0.8288 | 0.9198 | 0.7307 | 1.0430 | 0.6715 |
| 1 st Der, SNV | 9 | 0.9162 | 0.8491 | 0.9246 | 0.7196 | 0.9678 | 0.6560 |
| 1 st Der, MSC | 9 | 0.9162 | 0.8492 | 0.9248 | 0.7196 | 0.9675 | 0.6559 |
| 1 st Der, SNV, MNCN | 8 | 0.9161 | 0.8435 | 0.9250 | 0.7202 | 0.9858 | 0.6543 |
| 1 st Der, SNV, Auto | 8 | 0.9176 | 0.8280 | 0.8777 | 0.7136 | 1.0363 | 0.8341 |

表 3 不同波长优选法优选波长后建立 PLS 模型的预测效果

Table 3 Prediction performance of PLS models established using different wavelength selection methods

| 方法 Method | 潜在变量 Latent variable (LV) | 相关系数平方 R^2 | | | 均方根误差 / (°Brix) RMSE | | |
|--------------|------------------------------|-----------------|--------------------|----------------|-------------------------|---------------------|-------------------|
| | | | | | | | |
| | | 校正集 R_c^2 | 交叉验证 R_{cv}^2 | 预测集 R_p^2 | 校正集均方根误差 RMSEC | 交叉验证均方根误差 RMSECV | 预测集均方根误差 RMSEP |
| PLS | 8 | 0.9161 | 0.8435 | 0.9250 | 0.7202 | 0.9858 | 0.6543 |
| Random-frog | 8 | 0.9384 | 0.8957 | 0.9367 | 0.6169 | 0.8038 | 0.6080 |
| CARS-PLS | 8 | 0.9332 | 0.9014 | 0.9434 | 0.6424 | 0.7820 | 0.5828 |

2.4 近红外光谱优选及模型预测效果

桑椹样品 SSC 的原始近红外光谱经过预处理后,由于全波长光谱区域中仍存在很多信息较弱或有多重线性关系的冗余信息,而波长优选能选出高信息的光谱变量,可以提高建立 PLS 模型的预测精度。

对经过一阶求导(1st Der)、标准正态变量变换(SNV)和均值中心化(MNCN)方法预处理后的近红外光谱数据,采用 Random-frog 算法进行波长优选(图3)。图3横坐标是波长变量,纵坐标是特定波

长被选择的概率大小,概率越大的变量其波长的重要性也就越大^[16]。根据光谱数据的重要性排序,筛选出前50个近红外光谱数据进行 PLS 建模。结果如表3所示,最佳潜在变量为8;模型的校正集相关系数平方(R_c^2)以及预测集相关系数平方(R_p^2)与全波长光谱建模相比分别提高了2.43%、1.26%;交叉验证和验证集的均方根误差比全波长光谱建模分别降低了18.46%、7.08%。图中特征波长的数量从125个降到50个,提高了模型预测精度,并极大地简化了模型。

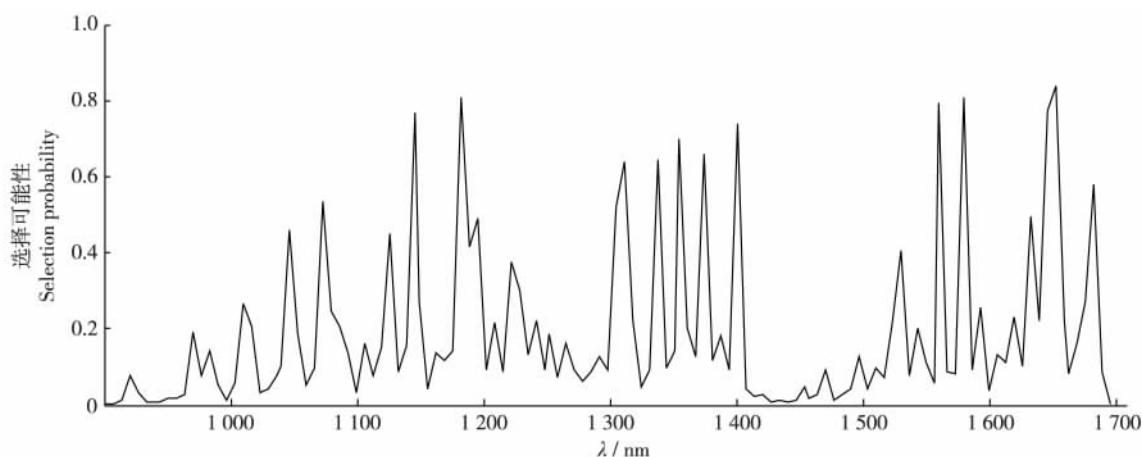


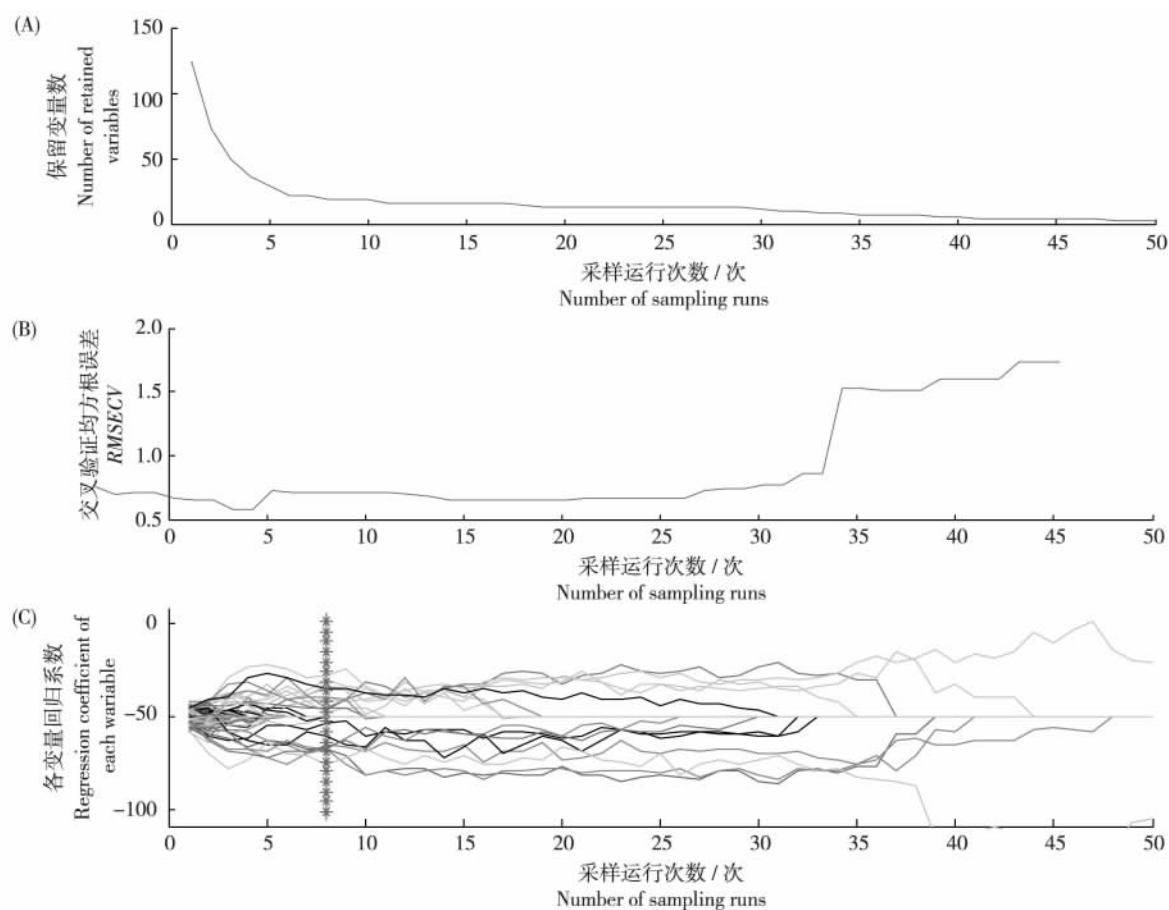
图3 预处理后的近红外光谱采用 Random-frog 算法进行优选后的波长变量

Fig. 3 Selected wavelength variables of the preprocessed NIR spectra based on Random-frog algorithm

利用 CARS 变量筛选法对经一阶求导(1st Der)、标准正态变量变换(SNV)和均值中心化(MNCN)预处理的光谱数据进行特征变量选择。CARS 方法提取的最大因子数由蒙特卡罗(MC)交叉验证决定^[17]。结果如表3所示,最佳潜在变量为8;模型的校正集相关系数平方(R_c^2)以及预测集相关系数平方(R_p^2)与全波长光谱建模相比分别提高了1.87%、1.99%。图4-A~C是优选波长后得到的特征波长,分别表示 CARS 算法运行中随着采样次数的增加,波长变量的数量、交叉验证均方根误差(RMSECV)值和每个波长回归系数发生的变化。从图4-A中可以看出,随着采样次数的增加,被选中波长变量的数量逐渐下降,下降趋势由快到慢,呈现出波长变量粗选和精选2个过程^[17]。图4-B为波长筛选过程中 RMSECV 的变化趋势,其值由平缓到逐渐增大,平缓曲线表明采样中筛选提出的波长变量与 SSC 无关,增长曲线表明在以后的采样过程中大

量与桑椹 SSC 预测无关的或者具有部分共线性的信息逐渐被剔除。图4-C表示随着运行次数增加各变量回归系数的变化趋势,其中“*”所对应的点即为 RMSECV 最低点^[18]。对这些优选的特征波长进行 PLS 建模,结果表明交叉验证和验证集均方根误差比全波长光谱建模分别降低了20.67%、10.93%,特征波长的数量从125个降到19个。CARS 变量筛选算法不但提高了模型的预测精度,也简化了模型,提高了建模效率。

图5是用 Random-frog 和 CARS 2种方法进行波长优选的结果。优选波长是基于数学方法随机选择所得,部分波长被重复选中,说明这些区域数据信息与被检对象含量具有较高的相关性。CARS 方法能更好地筛选出与桑椹样品 SSC 相关的重要波长变量,还能在不降低预测性能的情况下有效提取光谱中的关键变量^[19],最后达到简化预测模型和提高模型预测精度的目的。

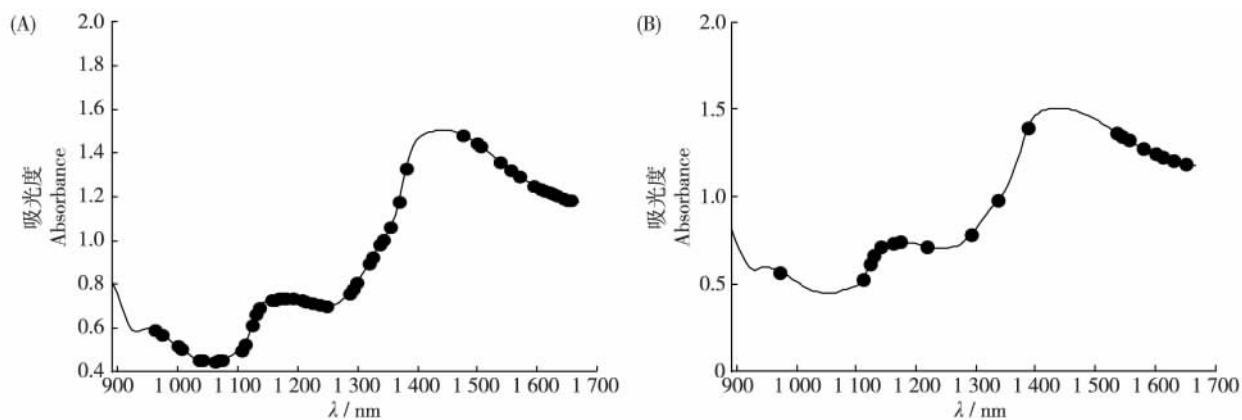


A. 保留变量数 B. 交叉验证均方根误差 C. 各变量回归系数 (“*”对应点即为交叉验证均方根误差 *RMSECV* 最低点)

A. Number of retained variables B. Root mean square error in cross-validation C. Regression coefficient of each variable (the corresponding point of “*” is the lowest point of *RMSECV*)

图 4 预处理后的近红外光谱采用 CARS 算法进行优选后的波长变量

Fig. 4 Selected wavelength variables of the preprocessed NIR spectra based on CARS algorithm



“●”对应点为选择的变量。

The corresponding point of “●” is the selected variable.

图 5 用 Random-frog (A) 和 CARS (B) 2 种算法选择的特征波长

Fig. 5 Selected characteristic wavelengths based on random-frog (A) and CARS (B) algorithms

对全波长和波长优选后建立的 2 种 PLS 模型的预测效果如图 6 所示。2 种模型的校正集和验证集结果的拟合直线中,实线为测量值与预测值的回归线,虚线为目标线(1:1)。从图 6 可以看出,经过波长优选后建立的 CARS-PLS 模型的回归线与目标线比全波长的 PLS 模型更为接近,说明波长优选对建模的必要性。

比较全波长与 2 种波长优选后建立的 PLS 模型

的预测效果,从表 3 的数据可以看出经过波长优选的建模效果均优于全波长光谱建模,而采用 CARS 算法提取的特征波长建模效果更是优于 Random-frog 算法筛选的特征波长建模效果,其交叉验证均方根误差和验证集均方根误差相对于 Random-frog 算法分别降低 2.71%、4.15%,同时交叉验证和验证集的相关系数平方较之也分别提高 0.64%、0.72%。因此,可以确定 CARS 算法优选波长的效果更好。

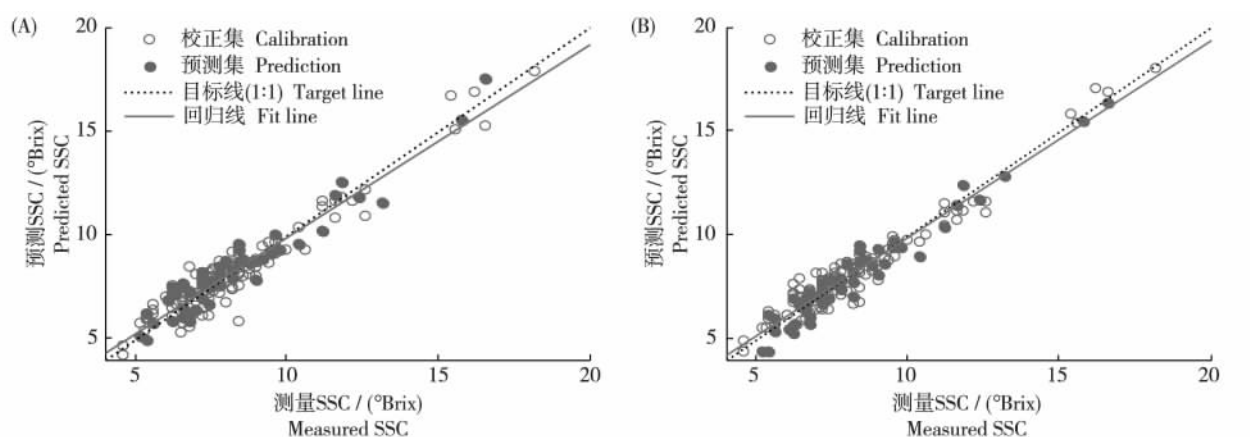


图 6 PLS 模型(A)和 CARS-PLS 模型(B)的预测效果

Fig. 6 Prediction performance of the PLS (A) and CARS-PLS (B) models

3 讨论

研究结果表明,采用手持式近红外光谱仪建立的预测桑椹鲜果 SSC 的 PLS 模型是可行的。经过 1st-Der、SNV 和 MNCN 等方法对桑椹鲜果 SSC 测定采集的原始近红外光谱进行预处理的效果好。与波长优选 Random-frog 算法相比,经 CARS 算法优选的特征波长通过 PLS 建模的预测效果最好,由 CARS-PLS 模型得到的校正集和验证集的相关系数平方分别为 0.933 2、0.943 4, $RMSECV$ 和 $RMSEP$ 分别为 0.782 0 °Brix、0.582 8 °Brix,相对全波长光谱建模的稳健性更好。

在 ZHAO 等^[6]的试验中,桑椹的 SSC 光谱范围是 3.21 ~ 10.99 °Brix,均数为 6.75 °Brix,标准差 1.55 °Brix,采用 PLS 建立模型时,预测集的 $RMSEP$ 为 0.41 °Brix, R_p^2 为 0.92,经 Random-Frog 算法进行波长优选后,模型预测精度并没有能够提高^[6]。本项研究建立的 CARS-PLS 模型的 R_p^2 为 0.943 4,优于 ZHAO 等^[6]的研究结果,但 $RMSEP$ 为 0.582 8 °Brix,不及

ZHAO 等^[6]的研究结果;本项研究建立 CARS-PLS 模型的相对 $RMSEP$ ($RMSEP/Mean \times 100\%$) 为 7.06%,与 ZHAO 等^[6]的研究结果(6.08%)很接近。由于本项研究建立 CARS-PLS 模型预测桑椹样品 SSC 的范围更广(4.60 ~ 18.20 °Brix),标准差更大(2.50 °Brix),因此适用性更广而有很好的应用前景。

本研究目前只是针对桑品种中椹 1 号桑椹鲜果的 SSC 进行了预测,为了提高模型的适应性,还需要进一步研究多个品种桑椹的 SSC 预测模型。

参考文献 (References)

- [1] ZHAN B S, NI J H, LI J. Hyperspectral technology combined with CARS algorithm to quantitatively determine the SSC in Korla fragrant pear[J]. Spectrosc Spect Anal 2014, 34(10): 2752 - 2757
- [2] SCHMUTZLER M, HUCK C W. Simultaneous detection of total antioxidant capacity and total soluble solids content by Fourier transform near-infrared (FT-NIR) spectroscopy: a quick and sensitive method for on-site analyses of apples[J]. Food Control 2016, 66: 27 - 37
- [3] 秦善知, 陈斌, 陆道礼, 等. 基于便携式近红外光谱仪检测梨可溶性固形物[J]. 江苏农业科学 2014, 42(8): 284 - 286

- [4] 孙通,许文丽,林金龙,等.可见/近红外漫透射光谱结合 CARS 变量优选预测脐橙可溶性固形物[J].光谱学与光谱分析, 2012, 32(12):3229-3233
- [5] 应义斌,刘燕德,傅霞萍.苹果有效酸度的近红外漫反射无损检测[J].农业机械学报, 2004, 35(6):124-126
- [6] ZHAO Y R, YU K Q, HE Y. Hyperspectral imaging coupled with random frog and calibration models for assessment of total soluble solids in mulberries[J/OL]. J Anal Methods Chem, 2015:343782 [2016-05-22]. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4584247>. DOI:10.1155/2015/343782
- [7] 冯帮,陈斌,颜辉.微型近红外光谱仪的软件开发与实验[J].分析仪器, 2014(3):7-12
- [8] JIE D F, XIE L J, FU X P, et al. Variable selection for partial least squares analysis of soluble solids content in watermelon using near-infrared diffuse transmission technique[J]. J Food Eng, 2013, 118(4):387-392
- [9] 王加华,李鹏飞,曹楠宁,等.基于 iPLS 原理最优化信息区间的桃糖度组合权重 PLS 模型研究[J].红外与毫米波学报, 2009, 28(5):386-391
- [10] 江国兴.丰水梨优质丰产技术要点[J].西南园艺, 2000, 28(2):15-16
- [11] 褚小立,袁洪福,王艳斌,等.遗传算法用于偏最小二乘方法建模中的变量筛选[J].分析化学, 2001, 29(4):437-442
- [12] 颜辉,陈斌,朱文静.基于近红外光谱分析法的奶粉品质快速检测[J].农业机械学报, 2009, 40(7):149-152
- [13] 褚小立.化学计量学方法与分子光谱分析技术[M].北京:化学工业出版社, 2011:97-98
- [14] 陈立旦,赵艳茹.可见-近红外光谱联合随机蛙跳算法检测生物柴油含水量[J].农业工程学报, 2014, 30(8):168-173
- [15] LI H D, XU Q S, LIANG Y Z. Random frog: an effective reversible jump Markov Chain Monte Carlo-like approach for variable selection with applications to gene selection and disease classification[J]. Anal Chim Acta, 2012, 740:20-26
- [16] 朱逢乐,何勇,邵永妮.应用近红外高光谱成像预测三文鱼肉的水分含量[J].光谱学与光谱分析, 2015, 35(1):113-117
- [17] 于霜,刘国海,梅从立,等.基于 CARS 变量筛选的固态发酵 pH 值近红外检测[J].计算机与应用化学, 2014, 31(9):1143-1146
- [18] 吴静珠,徐云.基于 CARS-PLS 的食用油脂脂肪酸近红外定量分析模型优化[J].农业机械学报, 2011, 42(10):162-166
- [19] 李江波,郭志明,黄文倩,等.应用 CARS 和 SPA 算法对草莓 SSC 含量 NIR 光谱预测模型中变量及样本筛选[J].光谱学与光谱分析, 2015, 35(2):372-378