

曲 歌, 陈争光, 张庆华. 基于无信息变量消除法的水稻种子发芽率测定[J]. 江苏农业学报, 2019, 35(5): 1015-1020.
doi: 10.3969/j.issn.1000-4440.2019.05.002

基于无信息变量消除法的水稻种子发芽率测定

曲 歌¹, 陈争光¹, 张庆华²

(1. 黑龙江八一农垦大学电气与信息学院, 黑龙江 大庆 163319; 2. 大庆技师学院计算机工程系, 黑龙江 大庆 163254)

摘要: 为了解决常规的水稻种子发芽率测定方法存在的试验周期长且操作繁琐等问题, 实现水稻种子发芽率的快速检测。本研究以黑龙江省五常市五优稻四号粳稻种子为研究对象, 首先将 7 组种子样本(每组 60 个样本, 共计 420 个样本) 置于温度为 45 ℃, 湿度为 90% 的环境中分别进行为期 0 d、1 d、2 d、3 d、4 d、5 d、6 d 的不同时段的人工老化, 然后采集每个水稻种子样本的光谱数据后进行发芽试验。对光谱数据使用蒙特卡洛交叉验证法进行异常样本剔除, 并应用 UVE 法对全光谱数据进行特征波长选择, 使光谱数据由全光谱的 1 845 个数据点缩减为 524 个数据点, 最后建立 PLSR 预测模型。所建模型的预测集决定系数 R^2 为 0. 817 0、 $RMSEP$ 为 2. 183 0。试验结果表明, 经 UVE 法降维后建立 PLSR 模型的各项参数均优于全光谱模型, 因此, UVE 特征波长选择算法为提高水稻种子发芽率测定模型的预测能力提供了一种新的途径。

关键词: 水稻种子; 近红外光谱; 蒙特卡洛交叉验证; 无信息变量消除法; 发芽率

中图分类号: S339.3⁺1; S511 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4440(2019) 05-1015-06

Study on germination rate of rice seed based on uninformation variable elimination method

QU Ge¹, CHEN Zheng-guang¹, ZHANG Qing-hua²

(1. College of Electrical and Information Engineering, Heilongjiang Bayi Agricultural University, Daqing 163319, China; 2. Department of Computer Engineering, Daqing Technician College, Daqing 163254, China)

Abstract: In order to solve the problems of long test period and complicated operation of conventional methods for determining germination rate of rice seeds, a method of rapid detection of germination rate of rice seeds was put forward. In this study, the seeds of japonica rice Wuyou No.4 in Wuchang City of Heilongjiang province were taken as the research object. Firstly, seven groups of seed samples (60 samples in each group and 420 samples in total) were placed at a temperature of 45 ℃ and humidity of 90% for artificial aging at different time periods of 0 d, 1 d, 2 d, 3 d, 4 d, 5 d and 6 d, respectively. Secondly, the germination experiment was carried out after collecting the spectral data of each sample of rice seeds. Monte Carlo cross validation method was used to remove abnormal samples of spectral data, and UVE method was used to select the characteristic wavelength of the whole spectrum data. The spectral data were reduced from 1845 data points to 524 data points. Finally, PLSR prediction model was established based on the 524 data points. The predictive set determination coefficient R^2 of the model was 0. 817 0 and $RMSEP$ was 2. 183 0. The results showed that the parameters of PLSR model after dimension reduction by UVE method were better than those of full spectrum model. Therefore, the UVE

characteristic wavelength selection algorithm provides a new way to improve the prediction ability of rice seed germination rate measurement model.

Key words: rice seed; near infrared spectroscopy; Monte Carlo cross validation; uninformation variable elimination; germination rate

收稿日期: 2018-07-04

基金项目: 国家重点研发计划项目(2016YFD0701300)

作者简介: 曲 歌(1994-), 女, 黑龙江大庆人, 硕士研究生, 主要从事
近红外光谱的水稻种子品质分析研究。(E-mail) xqg1002
@ 163.com

通讯作者: 陈争光, (E-mail) ruzee@ sina.com

水稻是世界上最重要的粮食作物之一,稳定的水稻年产量已经成为人们生活的基本保障^[1-2]。选择高发芽率的水稻种子进行播种是保证水稻稳产、高产的首要环节。目前,传统的种子发芽率测定方法存在着操作过程繁琐,试验周期长且测定工作量大等缺点。因此,寻找一种快速、准确、无损测定水稻种子发芽率的方法显得尤为重要。

近红外光谱技术具有分析速度快、分析效率高、测试重现性好、不破坏样品且绿色无污染等优点^[3],如今已被广泛应用于农业、食品、药品^[4-7]等各个领域。目前,在种子质量检测领域,已有众多的国内外学者将近红外光谱技术应用于种子发芽率的测量分析中,李毅念等^[8]应用近红外光谱技术结合 PLSR 成功地对杂交水稻种子的发芽率进行预测,且对不同老化时间段水稻种子验证集进行预测时,真实值与预测值的相对误差最大值为 4.2%。戴子云等^[9]应用近红外光谱技术和偏最小二乘法对结缕草种子的发芽率进行预测,所建模型的决定系数超过 90%,线性关系良好,校正和预测标准差分别为 9.80 和 9.47。朱银等^[10]应用近红外光谱法建立了小麦种子发芽率的定量分析模型,研究表明:近红外光谱与小麦种子发芽率高度相关并且证明了近红外光谱技术测定小麦种子发芽率的可能性。总结前人研究结果发现,前人在建立种子发芽率预测模型时选择了全光谱或截取的部分波段进行建模。全光谱中含有的无用信息会导致建模过程中运算量加大同时影响最终建立预测模型的预测性能,而截取光谱区间进行建模则可能会导致部分有用信息被删除,也会影响最终建立预测模型的预测性能。所以在本研究中尝试引入特征波长选择的算法来提取光谱中与种子发芽率密切相关的信息。

特征波长选择算法是从全波段光谱数据中挑选出共线性最小、冗余最少且包含有用信息的少数波长点来代表全部的光谱数据^[11]。该算法的应用,既避免了全光谱建模运算量大的缺点,同时也避免了截选谱区后有用信息涵盖不全的不足。无信息变量消除法(Uninformation variable elimination, UVE)是近些年兴起的一种特征波长选择方法^[12],该方法的显著优点是在对光谱的特征波长进行提取时将噪声信息与光谱信息结合到一起,波长选择结果较为直观。胡晓男等^[13]将 UVE 法应用于南疆红枣总酸的

近红外光谱特征波长选择。李倩倩等^[14]将 UVE 法分别用于烟草总氮和总糖的近红外光谱变量筛选。总结前人研究结果发现,经 UVE 法进行特征波长提取后建立的预测模型的各项参数均优于全光谱建模模型。

本研究在前人研究的基础上,应用蒙特卡洛交叉验证法(Monte Carlo cross validation, MCCV)法对采集到的原始光谱数据进行异常样本剔除,然后通过 UVE 法对光谱数据进行特征波长选择。经 SPXY (Sample set partitioning based on joint X-Y distance) 法对样本集进行合理划分后建立 PLSR 水稻种子发芽率预测模型。旨在为应用近红外光谱技术对水稻种子发芽率进行测定提供一种更为优化的建模方法。

1 材料与方法

1.1 试验材料及设备

试验所用材料是从黑龙江省五常市利元种子有限公司采购的 2017 年收获的粳稻品种五优稻 4 号(又称稻花香 2 号)种子。试验用到的设备有 TANGO 近红外光谱仪(德国布鲁克公司生产),波数采集范围:11 500~4 000 cm^{-1} ,最优分辨率:4 cm^{-1} ,扫描速度:每秒采集 8 次。PRX-450C 智能人工气候箱(宁波海曙赛福实验仪器厂生产),温度范围:0~50 $^{\circ}\text{C}$,控湿范围:50%~95%。分析软件分别应用了 The Unscrambler X 10.3 (CAMO Software AS, NORWAY) 和 MATLAB R2016a。

1.2 老化试验

种子自然老化是一个漫长的过程,为了得到不同老化程度的水稻种子,需要对水稻种子进行人工加速老化。一些学者通过试验研究认为高温高湿人工加速老化的方法与种子自然老化的结果基本一致^[15],故本研究选择将水稻种子置于温度为 45 $^{\circ}\text{C}$,湿度为 90% 的环境中进行不同时间段的老化。试验中每称取 15 g 水稻种子作为一个试验样本,并将其装入一个尼龙网袋中,每 60 个样本设为 1 组。本研究中共设置了 7 组试验样本,7 组样本的人工加速老化的时间分别为 0 d、1 d、2 d、3 d、4 d、5 d、6 d。试验的具体操作步骤:先将第 1 组样本置于人工气候箱中,24 h 后将第 2 组样本置于人工气候箱中,再 24 h 后将第 3 组样本置于人工气候箱中,依此类推,于 6 d 后得到老化时间为 6~0 d 的水稻种子人工老

化样本。

1.3 光谱数据采集

将经过老化的水稻种子样本置于室内(温度 23 ℃,湿度 30%)自然干燥 2 d 以平衡种子内部的水分含量。然后,将每个水稻种子样本置于样品杯中,以旋转方式测量其近红外光谱曲线。每个样本扫描 32 次,取其平均值作为样本的光谱测量结果,并将采集完光谱数据的水稻种子样本进行发芽试验。

1.4 发芽试验

从采集过光谱数据的每个水稻种子样本中均随机抽取 100 粒种子进行发芽试验。将抽取出的水稻种子样品放入水中浸泡 24 h 后取出,然后将其均匀摆放于透明发芽盒内湿润的发芽纸上,要求水稻种子之间互不接触,按照农作物种子检验规程 GB/T 3543.4—1995^[16] 进行纸上发芽试验。于 14 d 后计算水稻种子发芽率。每一个样本的发芽试验设置 3 个重复,最后取平均值。

1.5 无信息变量消除法

采集到的水稻种子原始光谱数据中不仅含有与研究内容有关的信息,还不可避免地含有噪声信息以及无用信息。无信息变量消除法是基于偏最小二乘(Partial least squares, PLS)模型回归系数建立的一种特征波长的选取方法,其主要作用是剔除对模型没有贡献的波长点从而降低数据的维度^[17]。UVE 法的具体算法如下^[18]:

(1) 将光谱矩阵 $X(n \times m)$ 与浓度矩阵 $Y(n \times 1)$ 进行偏最小二乘回归,并选取最佳主成分数;

(2) 随机生成一噪声矩阵 $N(n \times m)$, 矩阵中随机生成的噪声值应小于仪器的误差值。将噪声矩阵 N 与光谱矩阵 X 组合成一新矩阵 $XN(n \times 2m)$, 其中前 m 列为 X 矩阵,后 m 列为 N 矩阵。

(3) 将矩阵 XN 与 Y 进行偏最小二乘回归,通过留一法交叉验证,得到回归系数矩阵 $B(n \times 2m)$ 。

(4) 按列分别计算矩阵 B 的标准偏差 $S(1 \times 2m)$ 和平均值 $mean(1 \times 2m)$, 然后根据公式计算每列数据的 $H_i = mean_i / S_i, i = 1, 2, \dots, 2m$ 。

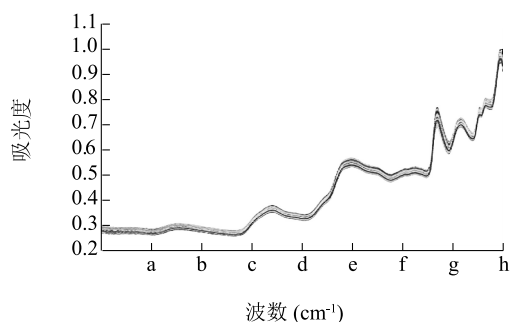
(5) 在矩阵 XN 中的 $m+1 \sim 2m$ 列区间内取 H_i 的最大绝对值即 $H_{\max} = \max[abs(H)]$ 。

(6) 在矩阵 XN 中 $1 \sim m$ 列区间内剔除光谱矩阵 X 中对应的 $H_i < H_{\max}$ 的变量,并将剩余的变量提取出来组成一个特征波长新矩阵 X_{uve} 。

2 结果与分析

2.1 水稻种子发芽率与近红外光谱图

通过发芽试验得到老化 0 d、1 d、2 d、3 d、4 d、5 d、6 d 的水稻种子发芽率的平均值分别为 97%、95%、93%、91%、88%、85%、81%。可见随着老化时间的增加,水稻种子的发芽率不断降低,说明水稻种子内部物质结构也随着老化时间的增加不断变化。全部水稻种子样本的近红外光谱图如图 1 所示,图中不同老化时间段水稻种子样本的谱型趋势基本一致,光谱采样间隔为 4 cm^{-1} ,每条光谱曲线由 1 845 个数据点组成,数据量较为庞大。



a; 11 000 cm^{-1} ; b; 10 000 cm^{-1} ; c; 9 000 cm^{-1} ; d; 8 000 cm^{-1} ; e; 7 000 cm^{-1} ; f; 6 000 cm^{-1} ; g; 5 000 cm^{-1} ; h; 4 000 cm^{-1} 。

图 1 全部水稻种子样品的近红外光谱图

Fig.1 Near-infrared spectrogram of all rice samples

2.2 数据处理

在试验数据采集的过程中,难免会出现光谱数据异常或化学值异常的情况,这些样本被我们称作异常样本^[19]。本研究选用蒙特卡洛交叉验证法(MCCV)作为剔除这些异常样本的方法,对每一个老化时间段水稻种子的光谱数据分别进行 MCCV 运算,采用留一法交叉验证多次建立 PLS 模型,求出每一个样本预测均方根误差(RMSEP)的均值与方差。以图 2 所示的老化 1 d 水稻种子样本的预测均方根误差均值-方差分布图为例,根据异常值的计算方法,图 2 中老化 1 d 的水稻种子光谱数据需剔除 5 个数据点,即编号为 3、5、20、25 和 26 号的样本。最终,老化 0 d、1 d、2 d、3 d、4 d、5 d、6 d 的水稻种子,剔除异常样本的个数分别为 5 个、5 个、4 个、4 个、4 个、5 个、5 个,共计剔除 32 个异常样本。

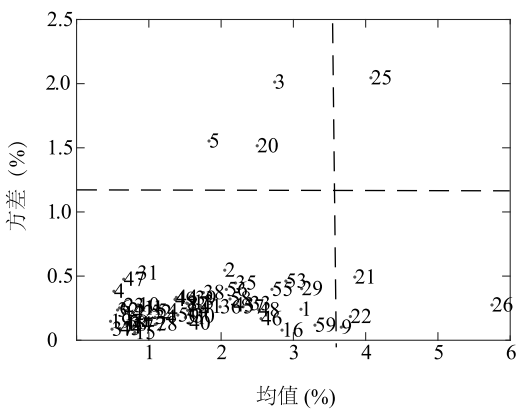


图2 老化 1 d 的水稻种子样本的预测均方根误差均值-方差分布

Fig.2 Mean and standard deviation distributions of root mean standard error of prediction (RMSEP) for one-day aging rice seed samples

分别对不同老化时间段水稻种子样本集进行异常样本剔除后,其相应的发芽率的各项参数如表 1 所示。从表 1 中可以看出,异常样本被剔除后,每个老化时间段水稻种子样本发芽率的标准偏差均不同程度地减小,由此可见 MCCV 法可以有效地剔除与数据整体偏离较大的样本,降低数据集的离散程度。

在剔除异常样本后,应用 UVE 法对剩余的样本光谱进行特征波长选择,当选择主成分数为 10 时 UVE 特征波长选择图如图 3 所示。图中的横坐标表示变量的个数,纵坐标为根据无信息变量消除法运算步骤(4)计算得出的 H_i 值,图中间的竖线是原始光谱数据矩阵和随机噪声数据矩阵的分界线。2 条横虚线分别为波长选择的上下阈值,即 H_{max} , UVE 法就是将虚线内的数据点剔除,而虚线外的数据点保留,并将保留的数据组成新的矩阵,即 X_{uve} 。最终,近红外光谱的数据点由 1 845 个筛选为 524 个,大幅降低了数据的维度。

表 1 异常样本剔除后不同老化时间段水稻种子发芽率相关参数统计表

Table 1 Statistical table of parameters related to germination rate of rice seeds in different aging periods after eliminating abnormal samples

项 目	异常样本处理	老化时间(d)						
		0	1	2	3	4	5	6
发芽率平均值(%)	剔除前	97	95	93	91	88	85	81
	剔除后	97	95	93	91	88	85	82
标准偏差(%)	剔除前	1.448	1.937	2.182	2.108	2.118	2.887	2.361
	剔除后	1.230	1.855	2.021	1.828	1.857	2.380	1.924

2.3 样品集的划分

在建模过程中,决定最终模型预测能力的一个关键环节就是样品集的划分,如果用于建模的校正集样本数量或涵盖的信息量过少会导致最终建立模型的预测能力较差。本研究选用 SPXY 法按 2 : 1 的比例对每个老化时间段的水稻种子的样品集进行划分,划分后样品集的各参数如表 2 所示。由表 2 可知,7 个老化时间段水稻种子的校正集样本发芽率范围均覆盖了验证集样本发芽率范围,说明应用 SPXY 法划分到建模集的样本具有足够的代表性,建模可靠性较高。

2.4 模型的建立与验证

分别对剔除异常样本后的全光谱数据和经 UVE 法进行波长选择后的光谱数据建立 PLSR 模

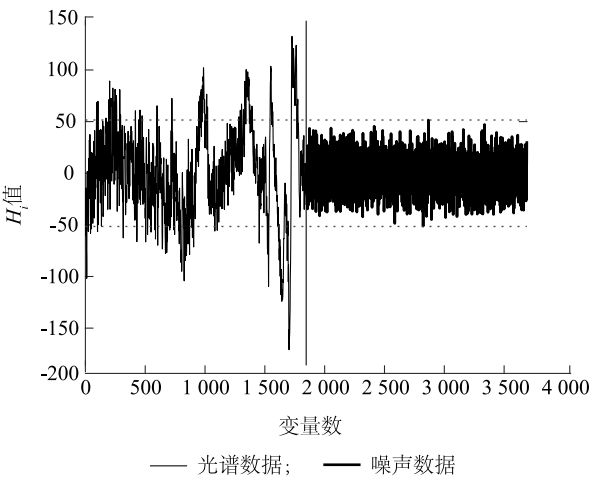


图3 UVE 特征波长选择图
Fig.3 Wavelengths selection results with UVE algorithm

型,其模型相关参数如表 3 所示。由表 3 可知经波长选择后的数据所建模型的各项参数都优于全光谱数据建立的模型,如交叉验证相关系数由 0.875 5 增加到 0.894 1,交叉验证决定系数(R^2)由 0.766 6 增加到 0.799 4,交叉验证标准误差($SECV$)与交叉验证均方根误差($RMSECV$)也都一定程度地减小。可见,应用 UVE 法波长选择后的数据所建模型的各项参数都得到了优化,校正模型的性能得到提高。

表 2 SPXY 法划分样品集后的各参数统计表
Table 2 The statistical table of parameters of sample set divided by SPXY method

老化时间 (d)	样品集	样本个数	发芽率(%)		
			平均值	最大值	最小值
0	校正集	37	96	99	94
	验证集	18	97	98	94
1	校正集	37	95	98	92
	验证集	18	96	98	93
2	校正集	37	93	98	88
	验证集	19	93	97	90
3	校正集	37	91	95	87
	验证集	19	92	95	88
4	校正集	37	88	92	85
	验证集	19	89	92	87
5	校正集	37	85	90	81
	验证集	18	86	88	82
6	校正集	37	82	87	78
	验证集	18	82	84	80

表 3 无信息变量消除法波长选择前后所建校正模型的评价参数
Table 3 Evaluation parameters of the calibration model before and after wavelength selection by uninformaton variable elimination method

	波长点数	交叉验证 相关系数	R^2	$SECV$	$RMSECV$
全光谱	1 845	0.875 5	0.766 6	2.576 7	2.571 8
UVE	524	0.894 1	0.799 4	2.418 4	2.413 7

将验证集中 129 个未知样本代入到经 UVE 特征波长选择后建立的预测模型中,得到水稻种子发芽率的实际测定值与模型预测值的相关性如图 4 所示。图中横坐标为水稻种子发芽率的实际测定值,

纵坐标为模型预测值。从图中可以看出验证集中的数据点基本都分布在回归线附近,说明水稻种子发芽率的实际测定值与模型预测值之间存在着良好的线性关系,其相关系数为 0.903 9,决定系数(R^2)为 0.817 0,预测标准误差(SEP)为 2.183 4,预测均方根误差($RMSEP$)为 2.183 0。而将未知样本代入到全光谱建立的预测模型中,得到其各项参数:相关系数为 0.896 1, R^2 为 0.802 9, SEP 为 2.273 4, $RMSEP$ 为 2.264 7。对比各项参数可知,经 UVE 法筛选的光谱数据建立的水稻种子发芽率测定模型的预测性能更优。

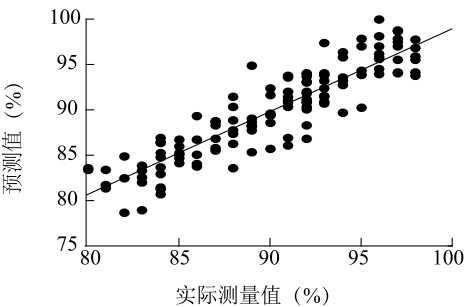


图 4 水稻种子发芽率实测值与预测值相关性
Fig.4 The correlation between measured value and predicted value of rice seed germination rate

3 讨论

本研究通过人工加速老化获得不同老化程度的水稻种子并采集其近红外光谱数据,在数据分析时应用了 MCCV 异常样本剔除方法与 UVE 特征波长选择算法,最终建立了 PLSR 水稻种子发芽率测定模型,实现了通过测量水稻种子近红外光谱即可知道其发芽率的目标。

应用 MCCV 法对全部试验样本进行异常样本剔除后发现,不同老化时间段水稻种子发芽率的标准偏差减小,说明该方法剔除了与样本集离散程度较高的样本。刘翠玲等^[20]与尹宝全等^[21]在应用不同异常样本剔除方法对试验样本进行处理后发现,异常样本剔除方法的应用可以提高所建模型的预测性能,起到模型优化的作用。

经 UVE 法对全光谱进行特征波长提取后,参与建模的光谱数据由 1 845 个数据点降到 524 个数据点,大幅降低了数据的维数,使所建模型的运算量得到缩减。与应用全光谱建立的 PLSR 模型相对比可

知,经 UVE 法特征波长选择后的校正模型的 R^2 由 0.766 6 增加到 0.799 4, $RMSECV$ 从 2.571 8 降低到 2.413 7。建模结果表明,经特征波长选择后的光谱数据排除了大量的无用信息,使所建模型更加简化的同时提高模型的预测精度。该结果与胡晓男等^[13]、李倩倩等^[14] 在应用 UVE 特征波长选择算法时得出的结论一致。

用建立的 UVE-PLS 预测模型对验证集中未知样本进行预测时,水稻种子发芽率的实际测定值与模型预测值的决定系数为 0.817 0,说明水稻种子的近红外光谱数据与水稻种子发芽率之间的相关性较高。在其他学者应用近红外光谱分析技术对水稻种子^[8]、结缕草种子^[9] 以及小麦种子^[10] 的发芽率的研究中也证实了近红外光谱数据与种子发芽率具有良好的相关性,应用近红外光谱技术测量种子发芽率具有可行性。预测均方根误差 ($RMSEP$) 为 2.183 0,说明应用波长选择后的数据建立的水稻种子发芽率测定模型具有较好的预测能力。本研究为提高水稻种子发芽率检测模型的预测能力提供了一种新的方法。此外,特征波长选择算法的应用也为制造专门用于检测水稻种子发芽率的便携式近红外光谱仪提供了理论依据。

本研究中仅采用了粳稻品种五优稻 4 号水稻种子作为研究对象。在进一步的研究中,可以应用本研究所用的数据分析方法与建模方法对粳稻或籼稻其他品种种子的相关数据进行处理并建立对应的发芽率预测模型,然后将建立的不同品种水稻种子的发芽率预测模型进行汇总,从而增加水稻种子发芽率预测模型的广泛适用性。

参考文献:

- [1] 管珊红,曾小军,许晶晶,等. 江西省水稻产业发展现状与对策[J]. 南方农业学报, 2017, 48(1): 189-196.
- [2] 孙伟,郑崇珂,解丽霞,等. 水稻对盐胁迫的生理和分子反应研究进展[J]. 山东农业科学, 2016, 48(4): 148-153.
- [3] 谢丽娟,应义斌,于海燕,等. 近红外光谱分析技术在蔬菜品质无损检测中的应用研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(6): 1131-1135.
- [4] XU H R, YU P, FU X P, et al. On-site variety discrimination of tomato plant using visible-near infrared reflectance spectroscopy[J]. Journal of Zhejiang University-SCIENCE B, 2009, 10(2): 126-132.
- [5] LI X Y, HE Y, FANG H. Non-destructive discrimination of Chinese bayberry varieties using Vis/NIR spectroscopy[J]. Journal of Food Engineering, 2007, 81(2): 357-363.
- [6] 曾云龙,赵敏,张敏,等. 近红外荧光传感法测定中药材中赭曲霉毒素 A[J]. 发光学报, 2019, 40(1): 115-121.
- [7] 蒋霞,张晓,白铁成,等. 近红外光谱技术结合 PLS 和 SPA 检测鲜冬枣表面农药残留量的方法[J]. 江苏农业科学, 2018, 46(2): 146-149.
- [8] 李毅念,姜丹,刘璿琰,等. 基于近红外光谱的杂交水稻种子发芽率测试研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(6): 1528-1532.
- [9] 戴子云,梁小红,张利娟,等. 近红外光谱技术的结缕草种子发芽率研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(10): 2642-2645.
- [10] 朱银,颜伟,杨欣,等. 基于近红外光谱的小麦种子发芽率测试[J]. 江苏农业科学, 2015, 43(12): 111-113.
- [11] 何勇. 光谱及成像技术在农业中的应用[M]. 北京: 科学出版社, 2016.
- [12] CENTNER V, MASSART D L, DE NOORD O E, et al. Elimination of uninformative variables for multivariate calibration[J]. Analytical Chemistry, 1996, 68(21): 3851-3858.
- [13] 胡晓男,彭云发,罗华平,等. 无信息变量消除法在筛选新疆红枣总酸近红外特征波长中的应用[J]. 食品工业, 2015(5): 232-235.
- [14] 李倩倩,田旷达,李祖红,等. 无信息变量消除法变量筛选优化烟草中总氮和总糖的定量模型[J]. 分析化学, 2013, 41(6): 917-921.
- [15] 董新红,宋明. 种子劣变的原因及其防止与修复[J]. 中国种业, 2002(1): 39-40.
- [16] 国家技术监督局. 农作物种子检验规程——发芽试验: GB/T 3543.4—1995[S]. 北京: 中国标准出版社, 1995: 54-73.
- [17] POLANSKI J, GIELECIK R. The comparative molecular surface analysis (CoMSA) with modified uninformative variable elimination-PLS (UVE-PLS) method: application to the steroids binding the aromatase enzyme[M]. 2003, 43: 656-666.
- [18] 褚小立,袁洪福,陆婉珍. 近红外分析中光谱预处理及波长选择方法进展与应用[J]. 化学进展, 2004, 16(4): 528-542.
- [19] TOBIAS R. Chemometrics: a practical guide[J]. Technometrics, 1998, 41(4): 375-376.
- [20] 刘翠玲,孙晓荣,吴静珠,等. 基于 NIR 的小麦粉异常样本剔除方法研究[J]. 农机化研究, 2014(4): 46-48.
- [21] 尹宝全,史银雪,孙瑞志. 近红外光谱分析中的一种基于 XY 变量联合的异常样本剔除算法[J]. 中国科学技术大学学报, 2016, 46(3): 208-214.

(责任编辑:陈海霞)