

偏最小二乘-判别分析模型影响因素初步研究

王 冬, 王纪华, 马智宏, 李 安, 靳欣欣, 潘立刚*,
侯金健, 万赐晖

(北京农业质量标准与检测技术研究中心, 农业部农产品质量安全风险评估实验室(北京),
农产品产地环境监测北京市重点实验室, 北京 100097)

摘 要: **目的** 研究偏最小二乘-判别分析模型的影响因素。**方法** 以小麦为例, 采用人工加速老化结合近、中红外光谱技术采集陈化、非陈化小麦粉的近、中红外光谱, 分别针对小麦粉衰减全反射中红外数据、衰减全反射中红外一阶导数数据、近红外一阶导数数据以及小麦颗粒近红外一阶导数数据建立偏最小二乘-判别分析模型, 分别获取模型参数及第1、2主成分得分分布情况。**结果** 小麦粉近红外一阶导数建模的第1、2主成分得分散点图具有明显的两类样本分布。外部验证数据表明, 小麦粉近红外一阶导数所建模型具有更好的稳健性。**结论** 样品的物理形态、数据预处理以及红外光谱波段皆会对偏最小二乘-判别分析模型结果产生影响; 同时, 红外光谱偏最小二乘-判别分析模型的评价需要从正确识别率、模型的校正测定系数、交互验证测定系数、校正均方根误差、交互验证均方根误差以及模型主要成分得分分布等多种情况综合考虑。

关键词: 红外光谱; 判别模型; 得分; 小麦

Elementary research on the influence factors of the partial least square-discriminant analysis models

WANG Dong, WANG Ji-Hua, MA Zhi-Hong, LI An, JIN Xin-Xin,
PAN Li-Gang*, HOU Jin-Jian, WAN Ci-Hui

(Beijing Research Center for Agricultural Standards and Testing, Risk Assessment Lab for Agro-products (Beijing),
Ministry of Agriculture, Beijing Municipal Key Laboratory of Agriculture Environment Monitoring, Beijing 100097,
China)

ABSTRACT: Objective To investigate the influence factors of partial least square-discriminant analysis models. **Methods** Taking wheat as the example, the attenuated total reflectance-mid-infrared and near-infrared spectroscopic data of the artificial accelerated aging wheat and the normal control group were collected respectively. The partial least square-discriminant analysis models were developed by attenuated total reflectance-mid-infrared data of wheat flour, 1st-derivative attenuated total reflectance-mid-infrared data of wheat flour, 1st-derivative near-infrared data and 1st-derivative near-infrared data of wheat, and the score scatter plots of the first and the second principal components were acquired respectively. **Results** The score

基金项目: 国家科技支撑计划课题(2014BAD04B05)

Fund: Supported by the National Sci-tech Support Plan (2014BAD04B05)

*通讯作者: 潘立刚, 博士, 研究员, 主要研究方向为农药毒理学。E-mail: panlig@126.com

*Corresponding author: PAN Li-Gang, Ph.D., Researcher, No 9, Shuguang Garden Mid-road, Haidian District, Beijing Research Center for Agricultural Standards and Testing, Beijing Academy of Agriculture and Forestry Sciences, Beijing 100097, China. E-mail: panlig@126.com

scatter plot of 1st-derivative near-infrared data of wheat flour had specific boundary of two groups. The external prediction data showed that 1st-derivative near-infrared data of wheat flour was the most robust model among the 4 conditions. **Conclusion** The physical form, data preprocessing and the band of infrared spectroscopy would influence the partial least square-discriminant analysis model. Meanwhile, the evaluation to partial least square-discriminant analysis model based on infrared spectroscopic data should consider the correct recognition rate, the parameters of determination coefficients of calibration and cross validation, root mean square error of calibration and cross validation and the main principal component's score distribution synthetically.

KEY WORDS: infrared spectroscopy; discriminant model; score; wheat

1 引言

红外光谱源于物质官能团的振动与转动能级跃迁,可以提供被测物质丰富的化学信息和结构信息。定性判别是红外光谱非常重要的应用之一,在产地识别^[1]、产品溯源^[2]、真伪识别^[3]、质量控制^[4]等方面具有重要的应用。现代红外光谱分析在定性判别方面更多地采用化学计量学算法建立定性判别校正模型,不仅可以充分利用红外光谱数据提取其有效信息,从而实现快速定性判别,而且可以为基于红外光谱技术的仪器研发提供良好的软件基础与应用保障。

在定性判别模型中,偏最小二乘-判别分析(partial least square-discrimination analysis, PLS-DA)模型具有广泛的应用^[5]。所谓 PLS-DA 模型,是将测试样品的化学值根据判别需要赋以特定的数值,采用 PLS 算法建立校正模型。由于 PLS 算法在迭代过程中自变量和因变量之间存在中间变量的交换,保持了自变量所提取数据和因变量之间的最大相关性,因此 PLS 算法所建模型一般具有精度高、稳定性好的特点。由此可见,PLS-DA 算法判别准确度较高,在工业^[6]、农业^[7]、林业^[8]、食品^[9]等领域,以及环境分析^[10]、元素分析^[11]、真伪鉴定^[12]、品质及种类识别^[13,14]、品质分析^[15]等方面得到了广泛的应用。

对 PLS-DA 模型性能的评价,一般采用正确判别率进行衡量。然而,所测样品的理化性质、光谱仪性能、测试者的操作等诸多原因皆会对光谱质量造成一定程度的影响,严重时会导致所测样品的光谱数据异常,这种异常往往难以通过观察谱图发现。如果只用“正确判别率”一个指标进行判断,很有可能由于样品在 PLS 特征空间分布不明确而导致误判。

针对上述问题,本研究以陈化小麦为例,采集了陈化、非陈化小麦粉的近红外(near-infrared, NIR)光谱、衰减全反射-中红外(attenuate total reflectance-mid-infrared, ATR-MIR)光谱以及陈化、非陈化小麦的近红外光谱。分别从样品物理形态、数据预处理、不同光谱方法 3 个角度对所建 PLS-DA 模型进行比较,对红外光谱 PLS-DA 模型的影响因素进行初步研究。本研究可对红外光谱 PLS-DA 模型的建立与评价提供一定的参考,并对增强判别模型稳健具有一定的参考价值。

2 材料与方法

2.1 仪器与设备

傅里叶变换近/中红外光谱仪(型号: Spectrum 400, 美国 Perkin Elmer 公司)。

2.2 样品收集与制备

从我国小麦主产区收集当年小麦样品 57 份,包含华北地区 34 份、华中地区 7 份、华东地区 6 份、内蒙古地区 10 份;其中,冬小麦 47 份,春小麦 10 份。

每份小麦样品收集量不少于 3 kg,将每份小麦样品平分为对照组(非陈化组)和实验组(陈化组)。对照组样品放置于低温干燥处保存。实验组样品采用人工加速样品老化的方法,将实验组样品置于相对湿度 70%、温度(40±2)℃的恒温恒湿培养箱中,保持 90 d,制备人工可控条件下的陈化小麦样品。将对照组、陈化组小麦样品分别经过风干、除杂、研磨、过筛,共四个前处理步骤,制备成待测试小麦粉样品。其中,采用旋风磨对小麦颗粒进行研磨,过筛孔径 1 mm。

2.3 仪器条件

针对小麦颗粒、小麦粉近红外光谱的采集,将

样品装入近红外专用石英样品杯中。样品杯呈圆柱形,底面内径 90 mm,高 15 mm。为保证采集到有效的近红外光谱,小麦颗粒、小麦粉装入样品杯的高度不低于 10 mm。为进一步减小装样操作对光谱的影响,将小麦、小麦粉样品装入样品杯后,再轻放 200 g 重物于样品上,使样品紧实度趋于一致。针对小麦粉中红外光谱的采集,将样品装载于中红外衰减全反射钻石晶体表面,用螺旋压力器顶住小麦粉样品并加压,压力值采用和仪器相连接的计算机中的软件进行监控,以保证对每个样品的压力一致。

采用傅里叶变换近、中红外光谱仪采集小麦、小麦粉的近、中红外光谱。分别采集对照组、实验组小麦粉样品的近、中红外光谱以及小麦的近红外光谱。采用积分球附件以漫反射方式采集小麦、小麦粉的近红外光谱,以积分球内部反射面作为参比,光谱分辨率 8 cm^{-1} ,光谱范围 $12800\sim 4000\text{ cm}^{-1}$,累加 64 次;采用衰减全反射(ATR)附件采集样品的中红外光谱,以 ATR 附件空光路作为参比,光谱分辨率 4 cm^{-1} ,光谱范围 $4000\sim 650\text{ cm}^{-1}$,累加 32 次。

2.4 数据处理

数据处理软件采用通用化学计量学软件 Unscrambler v9.7。针对小麦(粉)成分复杂、红外光谱吸收严重重叠等特点,研究了以下 3 个方面对陈化小麦(粉)PLS-DA 模型的影响:在数据预处理方面,考虑到仪器性能以及小麦(粉)的理化性质特点,在中心化数据的基础上,将直接建模和一阶导数预处理建模进行比较;在光谱波段方面,将小麦粉的近、中红外光谱的谱学特征、模型特征分布趋势以及建模结果进行比较;在样品形态方面,将小麦粉和小麦颗粒的近红外光谱特征、模型特征分布趋势及建模结果进行比较。

将实验组样品赋值“+1”、对照组样品赋值“-1”,作为因变量,分别采用小麦(粉)的中红外、近红外光谱数据作为自变量,建立 PLS-DA 模型。在模型评价方面,考察模型维数(n)、校正测定系数(determination coefficient of calibration, R_c^2)、校正均方根误差(root mean square error of calibration, RMSEC)、交互验证测定系数(determination coefficient of cross validation, R_{cv}^2)、交互验证均方根误差(root mean square error of cross validation, RMSECV)5 个统计量,以及校正集、

交互验证集分别针对陈化小麦(粉)、非陈化小麦(粉)的正确判别率,并重点考察了第一主成分(PC1)、第二主成分(PC2)得分的散点分布情况。

3 结果与分析

小麦粉经过 ATR 校正的 ATR-MIR 谱图如图 1(a)所示, NIR 光谱如图 1(b)所示;小麦颗粒的 NIR 光谱如图 1(c)所示。从图 1(a)可见,小麦粉的 ATR-MIR 光谱主要反映淀粉和蛋白质特征官能团的中红外吸收,具体表现如下: O-H 键伸缩振动 3301 cm^{-1} , C-H 键不对称伸缩振动 2928 cm^{-1} , C-H 键对称伸缩振动 2856 cm^{-1} , C-O 键伸缩振动 1007 cm^{-1} 以及蛋白质处在酰胺 I 带 1648 cm^{-1} 和酰胺 II 带 1537 cm^{-1} 处的吸收。从图 1(b)可见,小麦粉的 NIR 光谱主要反映淀粉和蛋白质特征官能团的近红外吸收,具体表现如下: C-H 二级倍频吸收 8326 cm^{-1} , O-H 一级倍频吸收 6835 cm^{-1} , C-H 一级倍频吸收 5634 cm^{-1} , O-H 与 C=O 合频吸收 5175 cm^{-1} 以及 C-H 与 C=O 合频吸收 4751 cm^{-1} 、 4286 cm^{-1} 。从图 1(b)和图 1(c)可见,小麦颗粒的 NIR 光谱(图 1(c))和小麦粉的 NIR 光谱(图 1(b))相似,但是光谱离散程度更大、绝对吸收值较小麦粉 NIR 光谱绝对吸收值大,小麦颗粒 NIR 光谱在短波区域的吸收更明显。

由于小麦粉较小麦颗粒的粒径小,在采集光谱时用 200 g 重物加压于小麦粉上,使小麦粉紧实度趋于一致,并且和样品杯底部紧密贴合;而 200 g 重物对于小麦颗粒的物理形状几乎无影响,小麦颗粒和样品杯底部贴合程度不均匀,即小麦颗粒和样品杯底面之间有不规则的空间距离,因此造成了小麦颗粒的近红外光谱绝对吸收值较大且光谱之间的离散程度较大。另一方面,小麦颗粒的外表皮上富集蛋白质类物质,而小麦粉是将小麦颗粒研磨后过筛所得,从含量上“稀释”了小麦颗粒外表皮上的蛋白类物质,因此小麦粉在近红外短波波段的吸收较小麦颗粒在近红外短波波段的吸收弱。

将本研究所获的红外光谱数据分别进行中心化处理,以减小实验系统误差的影响。小麦粉 ATR-MIR 数据采用直接建模、一阶导数建模,小麦粉和小麦颗粒 NIR 数据采用一阶导数建模,分别建立 PLS-DA 模型,模型参数及正确识别率如表 1 所示。

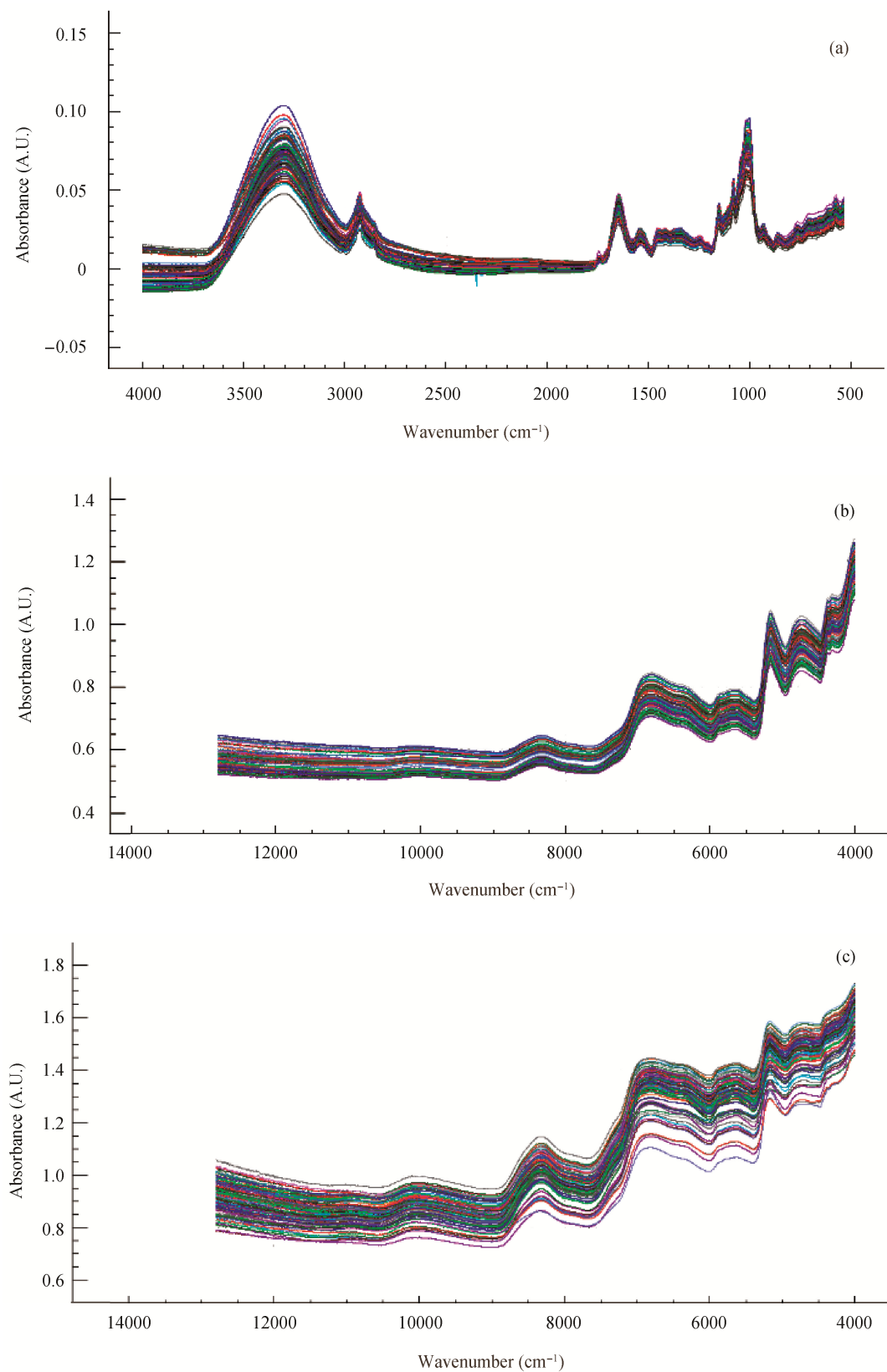


图1 小麦粉的中红外光谱(a)、近红外光谱(b)以及小麦颗粒的近红外光谱(c)

Fig. 1 The MIR spectra (a), NIR spectra (b) of wheat flour and the NIR spectra (c) of wheat kernel

表 1 不同实验条件 PLS-DA 模型结果
Table 1 Results of PLS-DA models under different conditions

参数	小麦粉 ATR-MIR 直接建模	小麦粉 ATR-MIR 一阶导数建模	小麦粉 NIR 一阶导数建模	小麦颗粒 NIR 一阶导数建模
模型维数 n	14	7	5	5
R_c^2	0.9733	0.9866	0.9896	0.9788
RMSEC	0.16	0.12	0.1	0.15
R_{cv}^2	0.8907	0.9353	0.8956	0.7055
RMSECV	0.34	0.26	0.33	0.54
校正集陈化小麦粉 正确判别率(%)	100	100	100	100
校正集非陈化小麦粉 正确判别率(%)	100	100	100	100
交互验证集陈化小麦粉 正确判别率(%)	100	100	100	98.9
交互验证集非陈化小麦粉 正确判别率(%)	100	100	100	96.7
外部预测集陈化小麦粉 正确判别率(%)	100	100	100	100
外部预测集非陈化小麦粉 正确判别率(%)	100	100	100	100

通过表 1 可见, 小麦颗粒 NIR 一阶导数建模的交互验证正确识别率没有达到 100%, 而其他建模结果皆达到 100%正确识别率。从该角度而言, 小麦颗粒 NIR 一阶导数建模结果是较差的。

模型的测定系数(R^2)反映了预测值与给定值(亦称作“真值”)之间的相关关系。在 PLS-DA 模型中, R^2 在一定程度上反映了模型的准确度和精密度; 此外, 多元校正模型的 RMSEC、RMSECV 分别表征了模型的精密度和准确度。通过表 1 数据可见, 模型的 RMSEC 和 R_c^2 、RMSECV 和 R_{cv}^2 之间具有一定的关联性, R_c^2 (或 R_{cv}^2)大的数据, RMSEC(或 RMSECV)小, 反之亦反。综上所述, 对于判别模型而言, 表征模型准确度的 RMSECV 值更为重要。从该角度而言, 小麦粉 ATR-MIR 一阶导数建模的结果有最小的 RMSECV 值, 其 RMSEC 值仅次于小麦粉 NIR 一阶导数建模, 在上述 4 个模型中是最好的建模结果。小麦粉 ATR-MIR 直接建模以及小麦粉 NIR 一阶导数建

模的结果次于小麦粉 ATR-MIR 一阶导数建模结果。

从上述两个角度看, 小麦粉 ATR-MIR 一阶导数建模的结果是 4 个模型中最好的。考虑到第 1、2 主成分(PC1、PC2)代表了模型的大部分信息, 将 4 个模型的 PC1、PC2 得分绘制散点图, 如图 2 所示, 其中图 2(a)、图 2(b)、图 2(c)、图 2(d)分别是小麦粉 ATR-MIR 直接建模、小麦粉 ATR-MIR 一阶导数建模、小麦粉 NIR 一阶导数建模以及小麦颗粒一阶导数建模的 PC1、PC2 得分散点图。

从图 2(a)可见, 小麦粉 ATR-MIR 直接建模的 PC1、PC2 得分散点图没有明显的 2 类分界, 而是分为 3 类。造成上述现象可能的原因是, 未经过一阶导数预处理的数据, 由于仪器等原因造成的光谱平移未被消除, 而携带了大量的与小麦的品种、产地等信息有关的其他信息。从图 2(b)和图 2(d)分别可见, 小麦粉 ATR-MIR 一阶导数建模以及小麦颗粒 NIR 一阶导数建模的 PC1、PC2 得分散点图皆具有分为 2 类的

趋势,但不十分明显。从图 2(c)可见,小麦粉 NIR 一阶导数建模的 PC1、PC2 得分散点图明显分为 2 类。综合图 2 可见,只有小麦粉 NIR 一阶导数建模可以在代表大部分信息的 PC1、PC2 散点图上得到清晰的两类样本分布,其他光谱情况虽然可以得到正确识别率较高的模型,但是得分分布情况不够明确,亦即小麦粉 NIR 一阶导数建模有更好的稳健性。

对外部验证集的预测结果集统计如表 2 所示,分

别针对 4 种光谱情况,对外部验证集中的非陈化组、陈化组小麦粉/小麦颗粒光谱数据进行预测,统计预测值及预测偏差的最小值、最大值、平均值和标准差。分析表 2 数据可知,小麦粉 NIR 一阶导数建模的外部验证集的两组数据预测值、偏差在 4 种光谱情况中有更小的标准差,说明小麦粉 NIR 一阶导数所建模型具有更好的稳健性。这和 PC1、PC2 得分散点图分析结果一致。

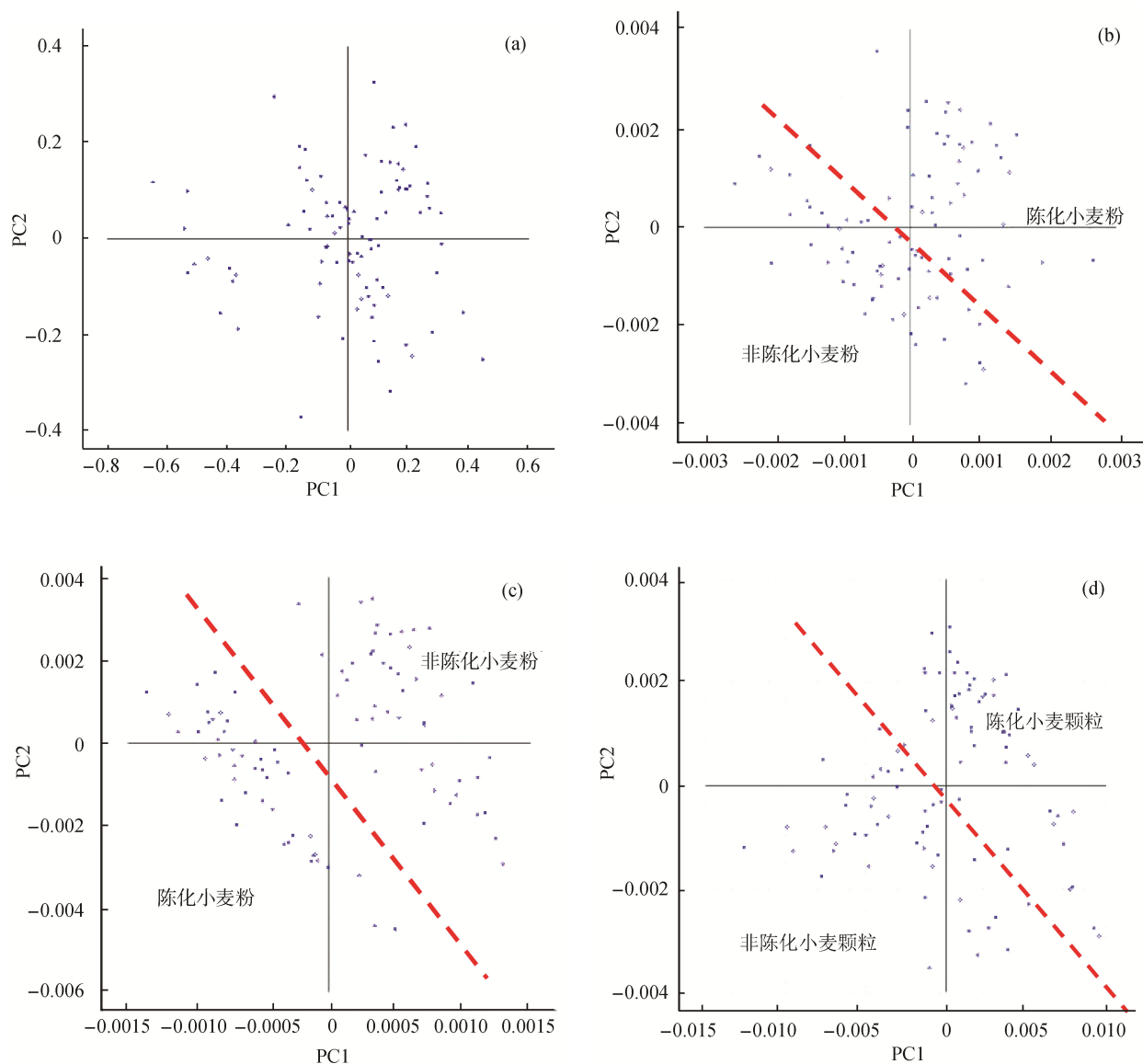


图 2 不同实验条件 PLS-DA 模型第 1、2 主成分得分散点图

Fig. 2 Scatter plots of the scores of PC1 and PC2 under different conditions

注: (a)小麦粉 ATR-MIR 直接建模, (b)小麦粉 ATR-MIR 一阶导数建模, (c)小麦粉 NIR 一阶导数建模, (d)小麦颗粒 NIR 一阶导数建模

Note: (a) model developed directly by ATR-MIR spectra data of wheat flour, (b) model developed after 1st derivative by ATR-MIR spectra data of wheat flour, (c) model developed after 1st derivative by NIR spectra data of wheat flour, (d) model developed after 1st derivative by NIR spectra data of wheat

表 2 不同情况的外部验证集预测结果统计
Table 2 Statistical results of the external prediction set under different conditions

光谱情况	组别	参数	最小值	最大值	平均值	标准差
小麦粉 ATR-MIR 模型	非陈化组	预测值	0.601	1.345	0.981	0.22
		偏差	0.247	0.507	0.319	0.07
	陈化组	预测值	-1.269	-0.496	-0.947	0.27
		偏差	0.226	0.449	0.312	0.07
小麦粉 ATR-MIR 一阶导数模型	非陈化组	预测值	0.630	1.440	1.011	0.21
		偏差	0.167	0.273	0.219	0.03
	陈化组	预测值	-1.456	-0.597	-0.954	0.29
		偏差	0.259	0.336	0.292	0.02
小麦粉 NIR 一阶导数模型	非陈化组	预测值	0.393	0.969	0.717	0.17
		偏差	0.283	0.340	0.307	0.02
	陈化组	预测值	-0.941	-0.440	-0.680	0.16
		偏差	0.301	0.413	0.327	0.03
小麦颗粒 NIR 一阶导数模型	非陈化组	预测值	0.160	0.968	0.650	0.27
		偏差	0.417	0.619	0.526	0.06
	陈化组	预测值	-1.384	0.116	-0.670	0.55
		偏差	0.434	0.598	0.523	0.05

4 结 论

本研究以小麦粉/小麦颗粒为例, 研究了 4 种不同的红外光谱情况下所建陈化小麦粉/小麦颗粒 PLS-DA 模型的性质。研究结果表明, 小麦粉 NIR 一阶导数建模的 PC1、PC2 得分散点图具有明显的 2 类样本分布; 外部验证数据表明, 小麦粉 NIR 一阶导数所建模型具有更好的稳健性。

本研究说明, 样品的物理形态、数据预处理以及红外光谱波段皆会对 PLS-DA 模型结果产生影响; 同时, 红外光谱 PLS-DA 模型的评价需要从正确识别率、模型的 R_C^2 、 R_{CV}^2 、RMSECV、RMSEC 以及模型主成分得分分布等多种情况综合考虑。本研究可对红外光谱 PLS-DA 模型的建立与评价提供一定的参考, 并对增强判别模型稳健性具有一定的参考价值。

参考文献

[1] 韩仲志, 万剑华, 张洪生, 等. 基于玉米籽粒近红外光谱的品种与产地识别研究[J]. 中国粮油学报, 2014, 29(1): 21–25.
Han ZZ, Wan JH, Zhang HS, et al. Variety and origin

identification of maize based on near infrared spectrum [J]. J Chin Cereals Oils Assoc, 2014, 29(1): 21–25.

[2] 周健, 成浩, 曾建明, 等. 基于近红外的多相偏最小二乘模型组合分析实现茶叶原料品种检定和溯源的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 30(10): 2650–2653.
Zhou J, Cheng H, Zeng JM, et al. Study on identification and traceability of tea material cultivar by combined analysis of multi-partial least square models based on near infrared spectroscopy [J]. Spectr Spect Anal, 2010, 30(10): 2650–2653.

[3] 王冬, 潘立刚, 王纪华, 等. 地理标志农产品杭州西湖龙井的真伪识别方法及应用研究[J]. 农产品质量与安全, 2014, (1): 37–40.
Wang D, Pan LG, Wang JH, et al. Research on authenticity identification method and its application for Hangzhou West-Lake Longjing tea as the agricultural product of geographical indication [J]. Agric Prod Qual Saf, 2014, (1): 37–40.

[4] 涂瑶生, 柳俊, 孙冬梅, 等. 近红外漫反射光谱法用于白芍配方颗粒原料药材质量控制的研究[J]. 中国中药杂志, 2011, 36(9): 1162–1167.
Tu YS, Liu J, Sun DM, et al. Study on quality control of herbal material of paeony formula granule by near infrared diffuse

- reflection spectroscopy [J]. *China J Chin Mater Med*, 2011, 36(9): 1162–1167.
- [5] Bassbasi M, De Luca M, Ioele G, *et al.* Prediction of the geographical origin of butters by partial least square discriminant analysis (PLS-DA) applied to infrared spectroscopy (FTIR) data [J]. *J Food Comp Anal*, 2014, 33(2): 210–215.
- [6] 李立兵, 陈康宁, 王家俊, 等. 多次衰减全反射 IR 指纹图谱结合 PLS-DA 法在烟用香精分类中的应用[J]. *烟草科技*, 2014, (7): 37–39, 50.
- Li LB, Chen KN, Wang JJ, *et al.* Classification of tobacco flavors by PLS-DA combined with multi-bounce attenuated total reflectance IR fingerprint spectra [J]. *Tobacco Sci Technol*, 2014, (7): 37–39, 50.
- [7] Ni LJ, Zhang LG, Xie J, *et al.* Pattern recognition of Chinese flue-cured tobaccos by an improved and simplified K-nearest neighbors classification algorithm on near infrared spectra [J]. *Anal Chim Acta*, 2009, 633(1): 43–50.
- [8] Mariana RA, Carlos HVF, Lauro ESB, *et al.* Classification of Amazonian rosewood essential oil by Raman spectroscopy and PLS-DA with reliability estimation [J]. *Talanta*, 2013, 117: 305–311.
- [9] Edoardo Capuano, Grishja van der Veer, Rita Boerrigter-Eenling, *et al.* Verification of fresh grass feeding, pasture grazing and organic farming by cows farm milk fatty acid profile [J]. *Food Chem*, 2014, 164: 234–241.
- [10] 汪洪涛, 李耀翔. 基于 NIR-PLS 的土壤碳含量预测模型研究[J]. *森林工程*, 2014, 30(1): 5–8.
- Wang HT, Li YX. Predicting soil carbon content based on the near infrared spectroscopy and partial least squares [J]. *Forest Eng*, 2014, 30(1): 5–8.
- [11] 李晓金, 朱凯, 牛智有, 等. 基于 PLS 算法的生物质秸秆元素分析 NIRS 快速检测[J]. *华中农业大学学报*, 2015, 34(2): 131–135.
- Li XJ, Zhu K, Niu ZY, *et al.* NIRS rapid detection of elemental analysis for straw biomass based on PLS algorithm [J]. *J Huazhong Agric Univ*, 2015, 34(2): 131–135.
- [12] 周健, 成浩, 贺巍, 等. 基于近红外的 PLS 量化模型鉴定西湖龙井真伪的研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, 29(5): 1251–1254.
- Zhou J, Cheng H, He W, *et al.* Identification of Xihulongjing tea by PLS model using near-infrared spectroscopy [J]. *Spectr Spect Anal*, 2009, 29(5): 1251–1254.
- [13] 王逸之, 董文渊, 李永和, 等. 基于近红外光谱结合 PLS-DA 法的野外竹种识别技术研究[J]. *竹子研究汇刊*. 2014, 33(4): 16–20.
- Wang YZ, Dong WY, Li YH, *et al.* Discrimination of bamboo species by NIR and partial least squares discriminant analysis (PLS-DA) in the field [J]. *J Bamboo Res*, 2014, 33(4): 16–20.
- [14] 温珍才, 孙通, 耿响, 等. 可见/近红外联合 UVE-PLS-LDA 鉴别压榨和浸出山茶油[J]. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33(9): 2354–2358.
- Wen ZC, Sun T, Geng X, *et al.* Discrimination of pressed and extracted camellia oils by Vis/NIR spectra combined with UVE-PLS-LDA [J]. *Spectr Spect Anal*, 2013, 33(9): 2354–2358.
- [15] 吴静珠, 石瑞杰, 陈岩, 等. 食用油油酸的近红外特征谱区优选[J]. *中国粮油学报*, 2015, 30(2): 118–121.
- Wu JZ, Shi RJ, Chen Y, *et al.* Research on selecting characteristic NIR regions of oleic acid in edible oil [J]. *J Chin Cereals Oils Assoc*, 2015, 30(2): 118–121.

(责任编辑: 杨翠娜)

作者简介



王冬, 博士后, 副研究员, 主要研究方向为振动光谱分析与化学计量学。
E-mail: nirphd@163.com



潘立刚, 博士, 研究员, 主要研究方向为农药毒理学。
E-mail: panlig@126.com