

doi:10.11733/j.issn.1007-0435.2026.05.028

引用格式:李沁雨,杨雪萍,杨富裕,等.特征光谱提取法在饲料桑青贮品质近红外光谱快速检测技术中的应用[J].草地学报,2026,34(5):1878—1888

LI Qin-yu, YANG Xue-ping, YANG Fu-yu, et al. Rapid Detection of Mulberry Silage Quality Based on Near-Infrared Characteristic Spectral Interval Extraction[J]. Acta Agrestia Sinica, 2026, 34(5):1878—1888

特征光谱提取法在饲料桑青贮品质近红外光谱快速检测技术中的应用

李沁雨¹, 杨雪萍^{1*}, 杨富裕^{1,2}, 倪奎奎^{1*}

(1. 中国农业大学草业科学与技术学院, 北京 100193; 2. 贵州大学动物科学学院, 贵州 贵阳 550025)

摘要:为实现近红外光谱分析技术在饲料桑(*Morus alba* L.)青贮饲料品质上的应用,本研究收集105份饲料桑青贮样品,基于区间偏最小二乘法(interval Partial Least Squares, iPLS)提取饲料桑青贮的特征光谱区间,并采用偏最小二乘法(Partial Least Squares, PLS)构建了近红外快速检测模型。结果表明,粗蛋白、酸性洗涤纤维、中性洗涤纤维、pH的模型最优,能够用于实际预测(R^2_{cv} , $R^2_p > 0.8$; RPD_{cv}, RPD_p > 2.5);干物质、乳酸、缩合单宁的模型较好,可以进行粗略预测($2 < \text{RPD}_{cv} < 2.5$, $2 < \text{RPD}_p < 2.5$);水解单宁的模型则需进一步优化(RPD_p < 2)。因此,基于特征光谱法建立的模型在稳定性及预测精度方面更具优势,可以为饲料桑青贮高效生产与利用提供理论依据与技术支持,同时为近红外分析仪器开发提供思路。

关键词:饲料桑青贮;青贮饲料;近红外光谱;特征光谱提取;化学计量学

中图分类号:S816.5+3

文献标识码:A

文章编号:1007-0435(2026)05-1878-11

Rapid Detection of Mulberry Silage Quality Based on Near-Infrared Characteristic Spectral Interval Extraction

LI Qin-yu¹, YANG Xue-ping^{1*}, YANG Fu-yu^{1,2}, NI Kui-kui^{1*}

(1. College of Grassland Science and Technology, China Agricultural University, Beijing 100193, China;

2. College of Animal Science, Guizhou University, Guiyang, Guizhou Province 550025, China)

Abstract: To advance the application of near-infrared (NIR) spectroscopy in assessing the quality of mulberry (*Morus alba* L.) silage, a total of 105 silage samples were collected. Interval Partial Least Squares (iPLS) was employed to extract informative spectral intervals, and rapid NIR prediction models were subsequently developed using Partial Least Squares (PLS). The results indicated that the models for crude protein, acid detergent fiber, neutral detergent fiber, and pH exhibited the best performance and were suitable for practical prediction (R^2_{cv} , $R^2_p > 0.8$; RPD_{cv}, RPD_p > 2.5). Models for dry matter, lactic acid, and condensed tannins demonstrated moderate performance and were adequate for approximate estimation ($2 < \text{RPD}_{cv} < 2.5$; $2 < \text{RPD}_p < 2.5$). In contrast, the model for hydrolyzable tannins required further refinement (RPD_p < 2). Collectively, these findings suggest that models constructed based on characteristic spectral intervals offer enhanced stability and predictive accuracy. This approach provides a theoretical basis and technical support for the efficient production and utilization of mulberry silage, while also offering valuable insights for the development of NIR analytical instrumentation.

Key words: Mulberry silage; Silage; Near-Infrared Spectroscopy (NIRS); Characteristic spectrum extraction; Chemometrics

收稿日期:2025-06-04;修回日期:2025-10-26

基金项目:畜禽饲料饲草精细化加工技术研究(2021YFD1300300)资助

作者简介:李沁雨(2000-),女,汉族,新疆伊犁人,博士研究生,主要从事牧草加工利用研究, E-mail: b20243241329@cau.edu.cn; *通信作者

Author for correspondence, E-mail: xueping.yang@cau.edu.cn; nikk@cau.edu.cn

饲料桑(*Morus alba* L.),亦称蛋白桑,是当前我国重要的木本饲料资源之一。饲料桑富含粗蛋白、氨基酸和粗纤维,粗蛋白含量最高可达30%^[1-2]。此外,饲料桑含有单宁、黄酮和生物碱等活性物质,具有抗氧化、消炎作用,可增强家畜免疫力与生产性能^[3-4],但过量单宁可能降低饲料适口性和消化率^[5-6]。

青贮作为饲料桑的主要贮藏方式,能够有效保存其营养成分,并在一定程度上减少单宁对家畜采食的不利影响^[7-9]。传统的青贮品质检测方法主要依赖湿化学分析法,该方法虽具有较高的准确性,但检测成本高、耗时长、且对操作人员的要求较高。因此,开发高效、便利、可实现高通量检测的分析技术成为迫切需求。

近红外光谱(Near infrared spectroscopy, NIRS)是一种高通量分析技术,能够快速、无损地检测有机化合物的成分含量^[10-12]。其光谱波长范围覆盖700~2500 nm($14286\sim4000\text{ cm}^{-1}$)^[13],可反映含氢基团(C-H, N-H, S-H, O-H)等化合键的倍频与合频振动特征,可以用于化学物质的定性和定量分析^[13-15]。近年来, NIRS技术已广泛应用于饲料水分、粗蛋白、粗纤维及粗脂肪含量的快速检测^[16]。然而,近红外全光谱中包含了大量的噪声及不相关变量的干扰^[17]。

为优化建模精度,降低噪声及不相关变量的影响,通常结合化学计量学方法进行建模^[18]。区间偏最小二乘法(interval Partial Least Squares, iPLS)是一种通过提取特征光谱进行模型构建的方法^[19]。iPLS将全光谱划分为多个等距的子区间,对每一个子区间采用偏最小二乘法(Partial Least Squares, PLS)构建模型,根据交叉验证均方根误差(Root Mean Square Error of Cross Validation, RMSECV)筛选出最终用于PLS回归模型构建的子区间组合,以此提高近红外定量分析模型的精度并减少计算量^[19]。本研究采用iPLS提取关键特征光谱区间,并基于PLS建立饲料桑青贮品质的近红外快速定量分析模型,以提高预测精度并降低计算复杂度。

1 材料与方法

1.1 试验材料

为增加样本地域分布,在山东、海南两地采集不同生长高度的饲料桑样本,并采用不同青贮添加

剂及贮藏天数处理制备饲料桑青贮样本。设置3个水平刈割高度(0.9, 1.2, 1.8 m),3种添加剂处理(乳酸菌($10^6\text{ CFU}\cdot\text{g}^{-1}\text{ FM}$)、葡萄糖(2% FM)、乳酸菌($10^6\text{ CFU}\cdot\text{g}^{-1}\text{ FM}$)+葡萄糖(2%)),以及4个贮藏时间(0, 7, 14, 60 d),并收集未经添加剂处理的新鲜样本。将采集到的饲料桑样本切碎至1~2 cm的短条后均匀混合,每300 g样本放入聚乙烯袋中真空密封并分别贮藏,每个处理设3个重复,最终共制备105袋青贮样本。

1.2 湿化学法测定营养成分含量

取200 g青贮样本于65℃烘箱中烘干至恒重,称重后测得干物质(Dry matter, DM)含量^[20],并将烘干样本用粉碎机粉碎,过1 mm筛,用于测定粗蛋白、中性洗涤纤维、酸性洗涤纤维及采集近红外光谱。杜马斯燃烧法^[21]用于粗蛋白(Crude protein, CP)含量测定;Van Soest法^[22]用于中性洗涤纤维(Neutral detergent fiber, NDF)及酸性洗涤纤维(Acid detergent fiber, ADF)含量测定。

1.3 湿化学法测定发酵品质

饲料桑青贮样本开袋后均匀混合,将20 g样本浸于180 mL蒸馏水中,在4℃下浸提4 h。将得到的浸提液用滤纸过滤,测定pH及有机酸。pH采用便携式pH计(PHS-3C)测定^[23]。参照Broderick和Kang^[24]的方法,通过高效液相色谱测定乳酸(Lactic acid, LA),色谱柱:KC-811column, Shimadzu, 日本;检测器:SPD-M10AVP,流动相:3 mmol·L⁻¹高氯酸,流速1 mL·min⁻¹;柱温50℃;检测波长210 nm,进样量5 μL。

1.4 湿化学法测定单宁含量

Folin-ciocalte试剂比色法用于缩合单宁(Condensed tannin, CT)及水解单宁(Hydrolyzable tannin, HT)测定^[25-26],分别将没食子酸和儿茶素作为缩合单宁与水解单宁的标准品,于725 nm和495 nm下测定吸光度。

1.5 近红外光谱采集

近红外光谱采用二极管阵列近红外光谱分析仪(Corona extreme; Zeiss, Germany)采集。将饲料桑干粉样本平铺均匀,置于旋转操作台上,对每个样本重复扫描2次后计算光谱平均值。光谱采集范

围为910~2150 nm,光谱分辨率为10 nm。环境条件为温度10℃~30℃,湿度为30%~70%。

1.6 近红外光谱预处理

按照随机抽样原则,将所有采集的样本分为定标集和验证集(4:1),分别用于定标模型的建立和外部验证。分别采用标准正态变(Standard Normal Variate, SNV)、多元散射校正(Multiplicative Scatter Correction, MSC)两种方法对光谱数据进行预处理,根据建模结果筛选出最优的预处理方法。

1.7 特征光谱提取及模型构建

光谱经预处理后,进行iPLS特征光谱区间提取。采用向前区间偏最小二乘法(Forward iPLS, FiPLS)、向后区间偏最小二乘法(Backward iPLS, BiPLS)提取特征光谱区间,将光谱分为10, 20, 50, 100四种区间数,以交叉验证均方根误差(Root Mean Square Error of Cross Validation, RMSECV)为评价标准,筛选出RMSECV最小的光谱区间组合。在筛选出的组合区间的基础上建立PLS回归模型,并采用交叉验证法进行内部验证。同时建立基于全光谱的PLS回归模型,将其结果与iPLS-PLS模型结果进行对比。

1.8 模型评价标准

采用校准决定系数(Coefficients of determination of calibration, R^2_c)、校准均方根误差(Root mean square error of calibration, RMSEC)、交叉验证决定系数(Coefficients of determination of cross validation, R^2_{cv})、交叉验证均方根误差(Root Mean Square Error of Cross Validation, RMSECV)、预测决定系数(Coefficients of determination of prediction, R^2_p)、预测均方根误差(Root mean square error of prediction, RMSEP)、交叉验证相对标准差(Ratio of Performance to deviation of cross validation, RPD_{cv})、预测相对标准差(Ratio of performance to deviation of prediction, RPD_p)、偏差(Difference)和斜率(Slope)进行评价。

其中, R^2 用于表示预测值与实测值之间的相关度,当 R^2 接近1时,表明预测值与实测值之间的相关程度、模型拟合好。RMSE用于表示模型的预测能力, RMSE越小,表明模型预测能力越强。RPD=

SD/RMSE,用于表示模型的预测精度,RPD_p>2.5表明模型可以用于实际预测,2<RPD_p<2.5表明模型可以进行粗略预测,RPD_p<2表明模型不可用^[17]。Difference用于表明预测值与实测值之间的差异, Difference 越小差异越小。Slope 越接近1,说明模型预测的线性关系越好。

1.9 统计分析

利用R(R Core Team, 2021, 4.1.1)进行近红外模型构建。R包prospectr用于MSC处理,pls用于偏最小二乘回归计算,pca3d,plotly用于主成分分析(Principal component analysis, PCA)。EXCEL 2019用于统计分析。

2 结果与讨论

2.1 近红外光谱

饲料桑青贮样品的原始近红外光谱图如图1所示。各样本之间吸收峰位置相似,但吸光度具有明显的差异。在910~2150 nm之间,饲料桑青贮的近红外光谱图呈现出4处较强的吸收峰(1400~1640, 1640~1860, 1860~2000, 2000~2150 nm)和1处较弱的吸收峰(1120~1320 nm)。其中,1400~1640 nm区域主要对应O-H键的合频吸收^[27]以及N-H键的拉伸振动^[28],这些信号可能与水分及蛋白质中的氨基酸相关。1640~1860 nm区域主要受C-H键的拉伸振动的影响^[28],可能反应了碳水化合物和脂类的特征吸收,如纤维素、半纤维素及脂肪酸。1860~2000 nm区域由O-H^[27]及N-H的合频吸收引起^[28],主要反映水分的吸收特征。2000~2150 nm区域可能与酰胺相关^[28],这一区域的吸收峰可能来自于蛋白质和多肽,尤其是肽键(C=O-NH)在近红外光谱中的特征吸收。1120~1320 nm处的吸收峰较弱,主要源于C-H键的拉伸振动^[28],可能与可溶性碳水化合物(如葡萄糖和果糖)及木质素相关。

2.2 主成分分析

将采集到的饲料桑青贮样品的原始光谱进行主成分分析(Principal component analysis, PCA)(图2),前三个主成分(PC1, PC2, PC3)共解释了99.2%的总变异量,其中PC1, PC2, PC3贡献分别为88.3%变异量、10%变异量、0.9%变异量。

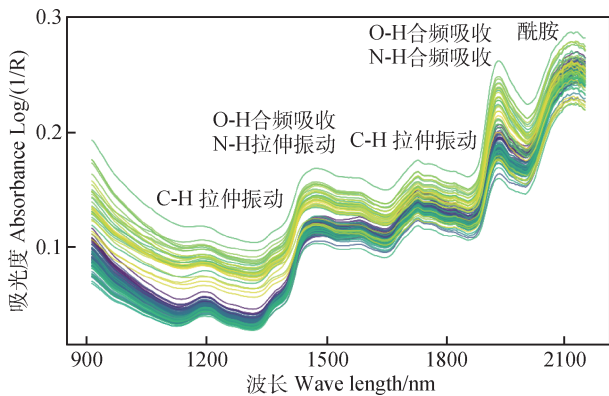


图1 饲料桑青贮原始近红外光谱图

Fig. 1 Raw NIR spectra of mulberry silage

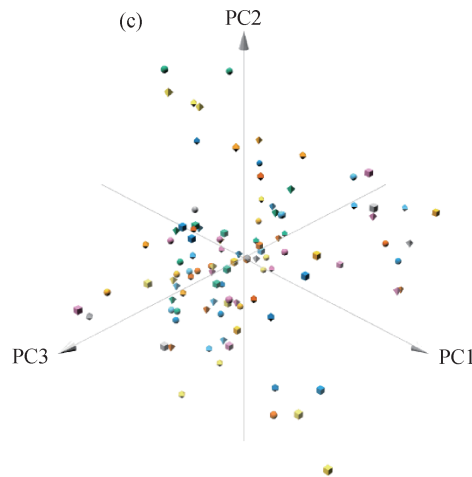
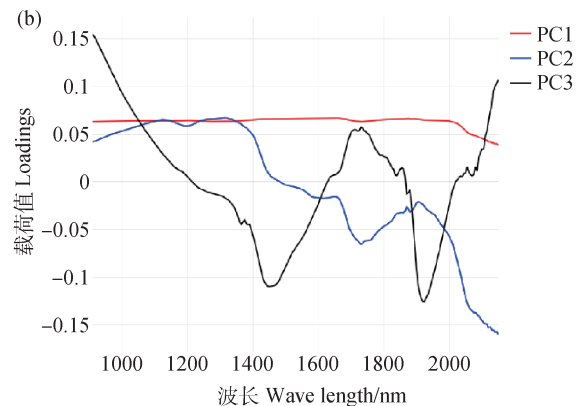
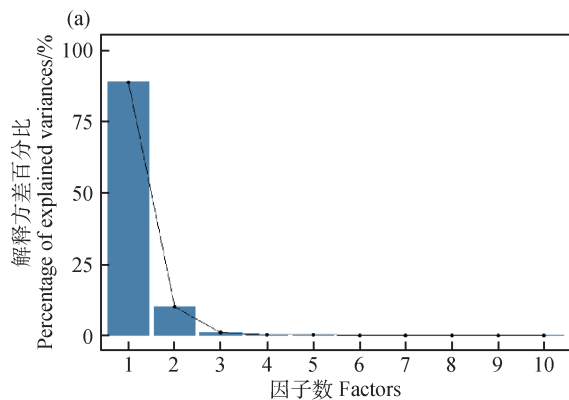


图2 近红外原始光谱主成分分析

Fig. 2 PCA of raw NIR spectra

注:a, 主成分分析因子解释方差图;b, 主成分分析载荷图;c, 主成分分析3D得分图

Note: a, PCA factors explained variance plot; b, PCA loadings plot; c, PCA 3D scores plot

2.3 饲料桑青贮品质湿化学法真实值分析及数据分集

从饲料桑青贮的营养成分、发酵品质及单宁含量分布图可以观察到各指标数据的分布特征。各组分数据呈离散分布,组分间存在差异,取值范围较宽,表明样本具有代表性,且整体符合正态分布(图3)。

在模型构建之前,将所有样本按4:1随机分为

PCA 载荷图(图2b)显示了不同波长对各主成分的贡献,PC1的主要贡献波段为1900~2100 nm,主要由于水分的O-H伸缩振动,较为平缓,PC2受1600~1800 nm区间影响,可能与脂肪C-H伸缩有关,PC3在1700~1900 nm波长区间出现强烈波动,可能与纤维素、半纤维素有关。从PCA得分图(图2c)来看,各样本点在三维空间中的分布较为分散,表明数据具有较强的变异性。这种分布特征表明,样本在光谱特征上存在显著差异,能够较好地代表不同青贮处理条件下的样本,可为近红外模型构建提供良好的数据基础。

定标集(N=84)和验证集(N=21),表1、表2分别列出了湿化学法测定的饲料桑青贮营养成分、发酵品质、单宁含量的定标集及验证集数据分布情况,各组分的标准偏差相对较小,变异系数大,数据具有较好的代表性。同时,定标集和验证集的数据分布及统计特性基本一致,验证集的数据大部分被包含在定标集的范围内,说明样本分集合理,为后续的近红外模型构建提供坚实基础。

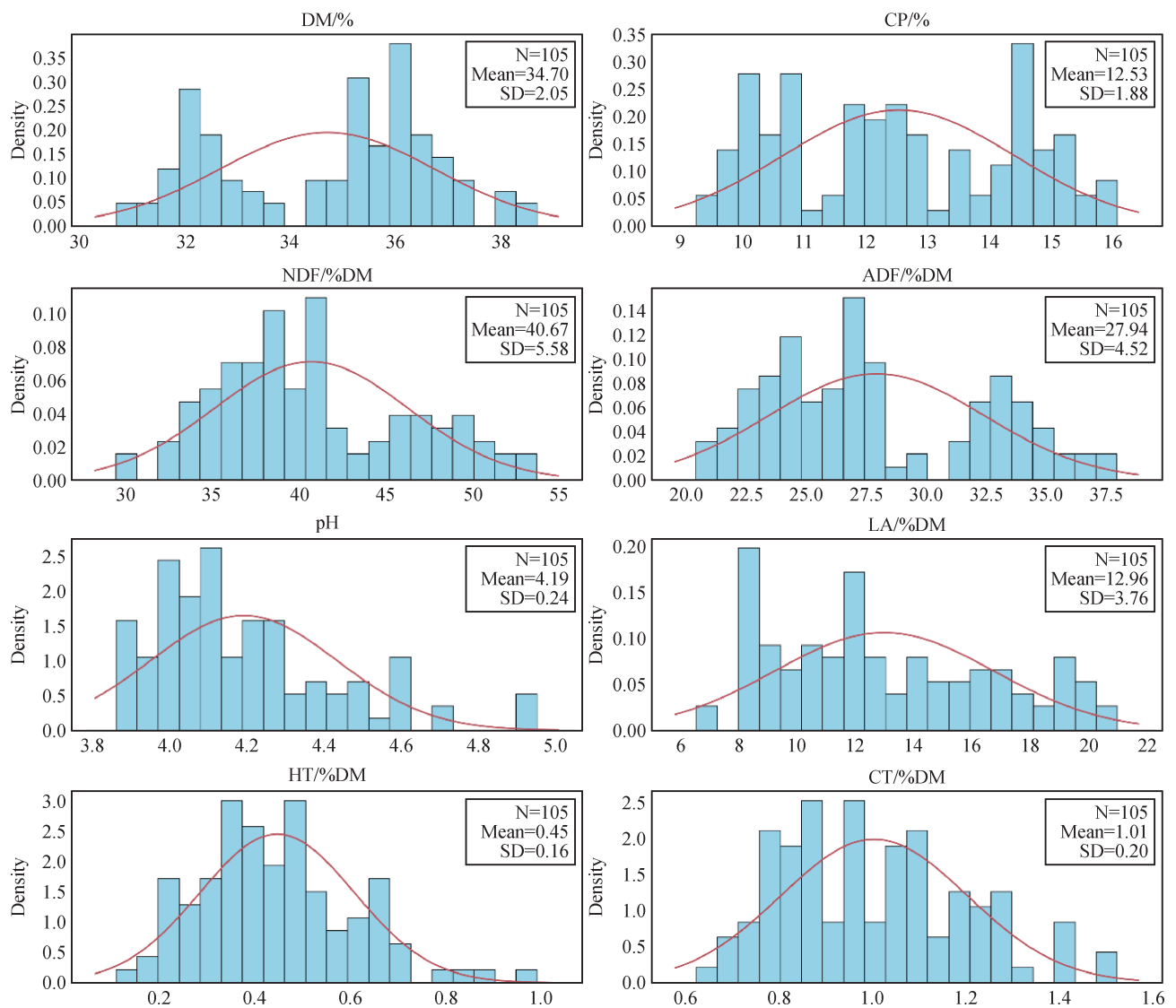


图3 饲料桑青贮的营养成分、发酵品质、单宁含量数据分布

Fig. 3 Distribution of nutritional composition, fermentation quality, and tannin content in mulberry silage

表1 饲料桑青贮定标集的营养成分、发酵品质、单宁含量数据统计

Table 1 Nutritional composition, fermentation quality, and tannin content of the calibration set (mulberry silage)

项目 Items	数量 No.	平均值 Mean	最大值 Max	最小值 Min	标准偏差 SD	变异系数 CV/%
DM/(%FM)	84	34.78	38.70	30.69	2.07	5.94
CP/(%DM)	84	12.42	15.91	9.25	1.92	15.45
NDF/(%DM)	84	40.86	53.67	29.41	5.71	13.98
ADF/(%DM)	84	28.19	38.01	20.38	4.65	16.51
pH值	84	4.19	4.95	3.86	0.24	5.85
LA/(%DM)	84	12.70	20.95	6.52	3.68	28.95
CT/(%DM)	84	1.01	1.52	0.62	0.20	19.87
HT/(%DM)	84	0.44	0.99	0.19	0.16	35.28

注: DM,干物质;CP,粗蛋白;NDF,中性洗涤纤维;ADF,酸性洗涤纤维;LA,乳酸;CT,缩合单宁;HT,水解单宁。下同

Note: DM, Dry matter; CP, crude protein; NDF, Neutral detergent fiber; ADF, Acid detergent fiber; LA, Lactic acid; CT, Condensed tannin; HT, Hydrolyzable tannin. The same as below

2.4 光谱预处理

采用标准正态变量变换(SNV)和多元散射校正(MSC)两种方法对饲料桑青贮近红外光谱数据

进行预处理(图4)。预处理能够去除散射效应,提高光谱数据的一致性,同时降低噪声影响,使数据更加平滑并保留其基本趋势。

表 2 饲料桑青贮验证集的营养成分、发酵品质、单宁含量数据统计

Table 2 Nutritional composition, fermentation quality, and tannin content of the validation set (mulberry silage)

项目 Items	数量 No.	平均值 Mean	最大值 Max	最小值 Min	标准偏差 SD	变异系数 CV/%
DM (%FM)	21	34.41	38.11	31.61	2.03	5.89
CP (%DM)	21	13.00	16.08	10.20	1.71	13.14
NDF (%DM)	21	39.88	51.01	33.35	5.22	13.09
ADF (%DM)	21	26.95	35.96	22.33	3.98	14.77
pH	21	4.21	4.92	3.88	0.24	5.70
LA (%DM)	21	14.00	20.36	8.02	4.08	29.12
CT (%DM)	21	0.99	1.41	0.72	0.20	20.65
HT (%DM)	21	0.48	0.89	0.11	0.19	39.97

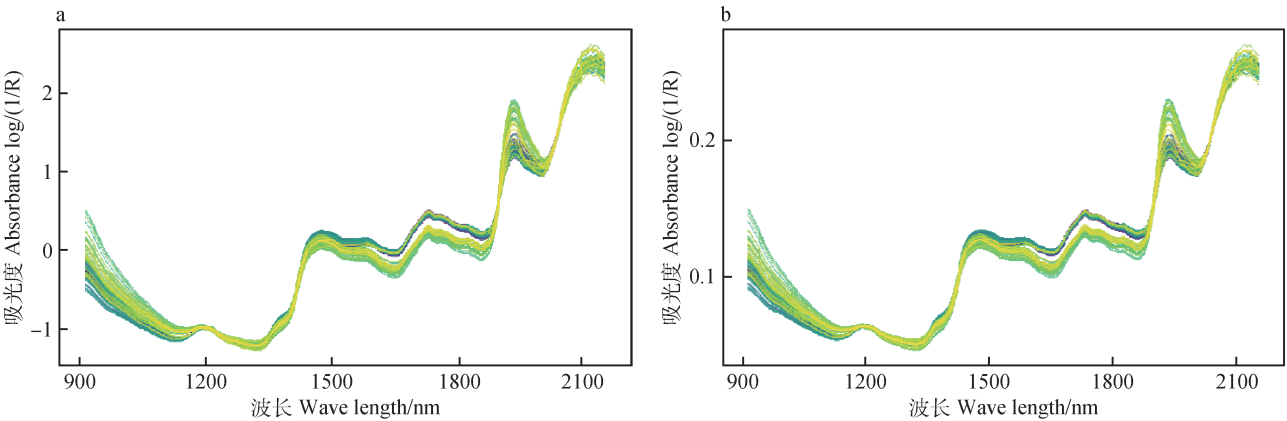


图 4 经过预处理后的近红外光谱图

Fig. 4 Preprocessed NIR spectra of mulberry silage

注: a, 经过 SNV 预处理后的光谱图; b, 经 MSC 预处理后的光谱图

Note: a, Spectra after pretreatment by SNV; b, Spectra after pretreatment by MSC

2.5 iPLS 法特征光谱区间提取

采用向前区间偏最小二乘法(Forward iPLS)和向后区间偏最小二乘法(Backward iPLS)进行特征光谱提取,并对不同区间数量(10,20,50 和 100)进行优化选择。表 3 汇总了各组分最优模型对应的特征光谱区间组合。结果表明,各组分模型的最优预处理方法均为 SNV。不同组分间的特征光谱区间组合存在显著差异:CP,LA 在 20 forward 下获得最优区间组合;NDF,HT 在 20 backward 下表现最佳;ADF,pH 在 50 backward 下获得最优结果;CT 在 100 forward 下获得最优区间组合。同时,CP 的特征光谱区间分布相对连续,而 NDF 的特征光谱区间分布于近红外短波与长波区域,LA,HT 的特征光谱区间主要集中于近红外长波区域。

2.6 PLS 法构建定标模型

在 iPLS 法筛选出的特征光谱区间基础上,采用 PLS 法建立饲料桑青贮营养成分、发酵品质和单宁含量模型。表 4 列出了各组分最优模型的定标模型结果。CP,ADF,DM,pH 的定标模型性能最佳,

R^2_{cv} 分别为 0.98,0.91,0.86,0.89,RMSECV 分别达到了 0.23,1.39,0.77,0.08,RPD_{cv} 分别为 8.21,3.35,2.70,3.05;NDF,LA,CT 的定标模型略次于前者,但也具有较好的稳定性,其 R^2_{cv} 分别达到了 0.83,0.79,0.80,RMSECV 分别达到了 2.31,1.66,0.88;RPD_{cv} 分别达到了 2.47,2.22,2.27;HT 的模型较差, R^2_{cv} 为 0.13,RMSECV 达到了 1.44;RPD_{cv} 为 1.08。相比全光谱建模(表 5),iPLS 提取的特征光谱区间显著提升了模型的稳定性,尤其是 DM 的 R^2_{cv} 从 0.66 提升到 0.86,RMSECV 从 1.19 下降到 0.77,RPD_{cv} 从 1.74 提升至 2.70。

2.7 模型预测性能评价

基于 iPLS 法特征光谱区间组合提取的最优模型预测性能如表 6 所示,近红外预测值与湿化学法真实值的散点图如图 5 所示。结果表明,CP,ADF,pH 的模型预测性能最佳,可用于实际预测($R^2_p > 0.8$,RMSEP < 1 ,RPD_p > 2.5);NDF,DM,LA,CT 的模型预测性能良好,可进行粗略检测($R^2_p >$

表 3 基于 iPLS 的饲料桑青贮近红外特征光谱区间组合选择

Table 3 Selected spectral interval combinations of mulberry silage using iPLS

项目 Items	预处理 Pretreatment	区间偏最小二乘法 iPLS	区间数 Interval number	特征光谱区间 Characteristic spectral interval /nm
DM	SNV	100 forward	21	935~940, 1345~1350, 1375~1420, 1455~1470, 1485~1500, 1665~1680, 1935~1940, 1955~1960, 1975~1980, 2005~2040, 2135~2140
CP	SNV	20 forward	4	1330~1565
NDF	SNV	20 backward	6	1030~1205, 1630~1685, 1930~1985, 2045~2095
ADF	SNV	50 backward	34	935~1130, 1160~1180, 1235~1305, 1335~1355, 1435~1530, 1560~1655, 1785~1855, 1885~2105, 2135~2150
pH	SNV	50 backward	34	935~955, 985~1130, 1160~1180, 1235~1405, 1435~1530, 1560~1580, 1610~1780, 1810~1830, 1860~1880, 1910~1930, 1985~2005, 2035~2105
LA	SNV	20 forward	6	1150~1205, 1270~1445, 1510~1565, 1810~1865
CT	SNV	100 forward	12	1195~1200, 1225~1230, 1245~1260, 1275~1280, 1355~1360, 1435~1440, 1485~1490, 1515~1520, 1545~1550, 1655~1660, 2035~2040
HT	SNV	20 backward	6	1450~1565, 1630~1865

注: SNV, 标准正态变量。下同

Note: SNV, Standard normal variate. The same as below

表 4 基于 iPLS 特征光谱区间提取的最优 PLS 定标模型

Table 4 Optimal PLS calibration model based on iPLS-selected spectral intervals

项目 Items	因子数 Factors	校准决定系数 R^2_c	校准均方根误差 RMSEC	交叉验证决定系数 R^2_{cv}	交叉验证均方根误差 RMSECV	交叉验证相对标准差 RPD _{cv}
CP	9	0.99	0.17	0.98	0.23	8.21
ADF	8	0.96	0.95	0.91	1.39	3.35
DM	9	0.91	0.61	0.86	0.77	2.70
NDF	6	0.89	1.90	0.83	2.31	2.47
pH	10	0.95	0.05	0.89	0.08	3.05
LA	9	0.85	1.40	0.79	1.66	2.22
CT	12	0.87	0.72	0.80	0.88	2.27
HT	4	0.25	1.34	0.13	1.44	1.08

表 5 基于全光谱的最优 PLS 定标模型

Table 5 Optimal PLS calibration model based on full spectra

项目 Items	因子数 Factors	校准决定系数 R^2_c	校准均方根误差 RMSEC	交叉验证决定系数 R^2_{cv}	交叉验证均方根误差 RMSECV	交叉验证相对标准差 RPD _{cv}
CP	14	1	0.11	0.97	0.34	5.68
ADF	9	0.96	0.92	0.89	1.51	3.09
NDF	5	0.85	2.21	0.8	2.57	2.22
DM	12	0.93	0.54	0.66	1.19	1.74
pH	12	0.96	0.05	0.86	0.09	2.71
LA	9	0.88	1.27	0.72	1.92	1.91
CT	8	0.84	0.79	0.73	1.04	1.93
HT	5	0.24	1.35	0.04	1.52	1.03

0.6, RMSEP<2, RPD>2); HT 的模型较差, 需要进一步优化。

相较于未经过 iPLS 特征波长提取的模型(表 7), 特征光谱区间提取显著提升了部分组分的预测性能。尤其是 CT 模型, R^2 从 0.75 提升到 0.83, RMSEP 从 1.04 下降至 0.86, RPD_p 从 1.96 提升至 2.38, 改进后的 CT 模型可用于粗略预测。

3 讨论

iPLS 能够筛选与变量相关性最高的光谱区间, 从而减少不相关变量的干扰, 降低噪声影响, 提高模型的稳定性的预测精确性^[29-30]。本研究中, 利用 iPLS 提取的特征光谱区间, 各组分因其特有的化学特性, 表现出不同的光谱吸收特性^[31]。例如, CP 的

表 6 基于 iPLS 特征光谱区间提取的最优 PLS 模型的预测性能

Table 6 Predictive performance of the optimal PLS model based on iPLS-selected spectral intervals

项目 Items	预测决定系数 R^2_p	预测均方根误差 RMSEP	偏差 Difference	斜率 Slope	预测相对标准差 RPDp
CP	0.99	0.18	0.02	1.04	9.74
ADF	0.95	0.90	0.03	0.94	4.40
NDF	0.86	1.98	-0.24	0.90	2.64
DM	0.83	0.81	0.06	0.99	2.49
pH	0.93	0.06	0.01	1.04	3.73
LA	0.82	1.81	-0.53	1.13	2.25
CT	0.83	0.86	0.01	0.90	2.38
HT	0.00	1.95	-0.01	-0.12	0.98

表 7 基于全光谱的最优 PLS 模型的预测性能

Table 7 Predictive performance of the optimal PLS model based on full spectra

项目 Items	预测决定系数 R^2_p	预测均方根误差 RMSEP	偏差 Difference	斜率 Slope	预测相对标准差 RPDp
CP	0.98	0.23	0.04	1.01	7.55
ADF	0.93	1.08	0.16	0.91	3.68
NDF	0.86	1.95	-0.33	0.96	2.67
DM	0.82	0.90	0.12	0.86	2.26
pH	0.88	0.08	0.00	0.95	2.92
LA	0.81	1.83	-0.52	1.11	2.23
CT	0.75	1.04	0.21	0.88	1.96
HT	0.02	2.01	-0.10	-0.49	0.95

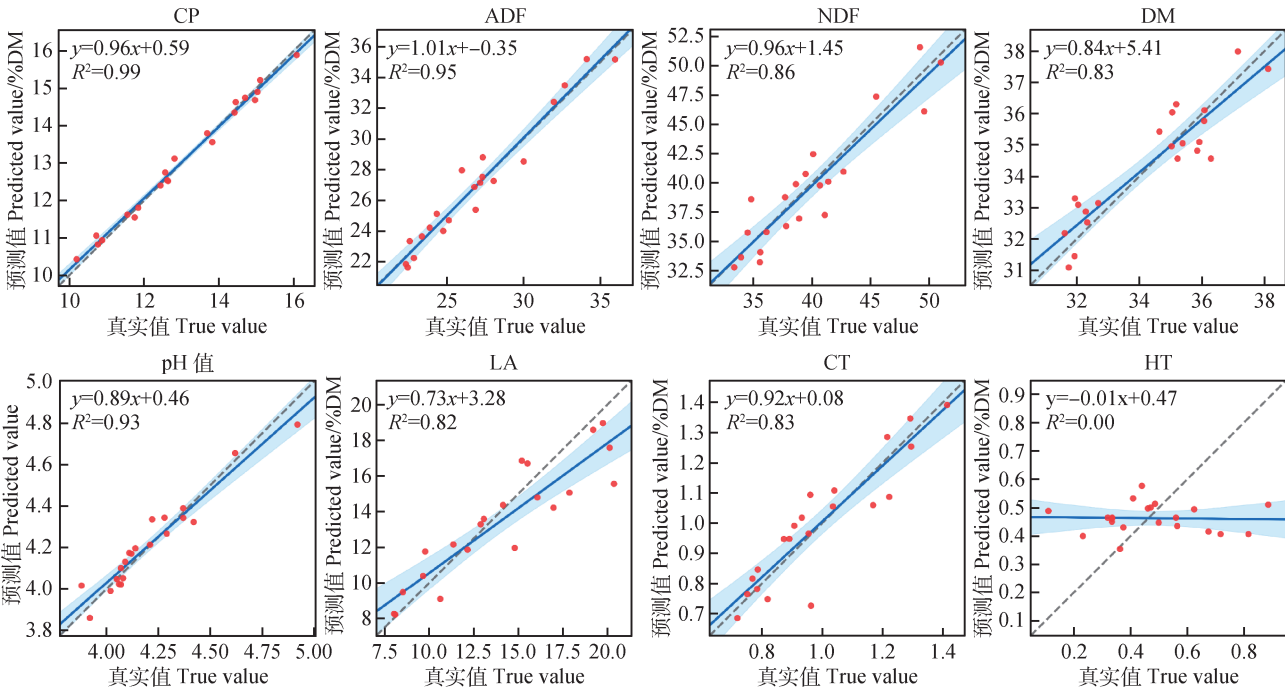


图 5 基于 iPLS 特征光谱区间提取的饲料桑青贮模型预测性能图

Fig. 5 Predictive performance of mulberry silage models based on iPLS-selected spectral intervals

特征光谱呈现出一段连续的区间,并在 1500 nm 附近具有显著吸收峰,这可能与氨基和酰胺基团中的 O—H 和 N—H 键的一级倍频吸收有关^[32]。不同组分的光谱吸收特征受其化学组成影响,导致部分组分在特征光谱区间上存在重叠。例如,ADF, NDF

和 DM 的特征波长存在高度重合,主要集中在 1400~2100 nm 波段,这种现象的原因是近红外光谱测定的本质是分子振动及倍频和合频吸收的叠加^[33]。因此,利用化学计量学方法去除不相关变量的干扰,减轻信号重叠效应^[34],对于提高模型的预

测性能至关重要。

根据建模结果,CP,ADF,pH的模型预测性能最佳,具有较高的准确性和稳定性($R^2_p > 0.8$, $RMSEP < 1$, $RPD_p > 2.5$),可以用于实际预测;NDF,DM,LA,CT的模型预测性能良好($R^2_p > 0.6$, $RMSEP < 2$, $RPD > 2$),可以用于粗略预测;而HT的模型性能较差,还需要进一步优化($RPD_p < 2$)。本研究结果表明,iPLS提取特征光谱区间后,部分组分的模型稳定性和预测能力得到了显著提升,特别是pH模型的预测精度提升最为明显,RPD_p最高提高了27.74%,进一步验证了iPLS对提高近红外模型稳定性的有效性。然而,HT的模型表现较差,可能是因为饲料桑青贮样品中HT含量小于1%,这导致近红外光谱无法很好地捕捉到相关信号,造成模型性能较差^[35-37]。

iPLS法不仅可以提高模型预测精确度,还可以改善模型的稳定性^[38]。Zhou等^[39]在银杏叶槲皮素的近红外定量分析中发现,基于iPLS法提取特征光谱区间的PLS模型较全光谱模型更加稳定,且全光谱模型容易存在过拟合现象。本研究结果与之类似,在全光谱建模的情况下,DM,LA和CT模型的预测能力较好,但模型稳定性较差($R^2_{cv} < 0.8$, $RPD_{cv} < 2$),而基于iPLS提取特征光谱区间的模型,其稳定性显著提升。这说明iPLS方法在减少冗余波长、降低噪声影响方面具有重要作用。此外,基于iPLS提取特征光谱区间的PLS回归模型,在计算效率上也优于全光谱PLS模型。全光谱PLS需要处理大量冗余信息,计算量较大,而iPLS筛选出的特征光谱点数较少,使得模型计算速度更快,同时降低了计算成本。这对于开发低成本、便携式的近红外光谱分析仪器具有重要的应用价值^[38,40]。

4 结论

本研究通过iPLS法对饲料桑青贮样本的全光谱数据进行了特征光谱区间提取,并基于特征光谱构建了偏最小二乘法(PLS)定量分析模型,以预测饲料桑青贮营养成分、发酵品质和单宁含量,发现CP,ADF,pH的iPLS-PLS模型最佳($R^2_p > 0.8$, $RMSEP < 1$, $RPD_p > 2.5$),可以用于实际预测;NDF,DM,LA,CT的模型较好($R^2_p > 0.6$, $RMSEP < 2$, $RPD > 2$),可以进行粗略预测;HT的模型预测能力较弱($RPD_p < 2$),需进一步优化。iPLS法提取

的特征光谱区间使PLS模型在预测精确性和稳定性方面均优于基于全光谱的PLS模型,尤其是pH模型的RPD_p提高了27.74%,iPLS方法通过选择与目标变量高度相关的光谱区域,减少冗余信息,提高信噪比,提高了模型的泛化能力,同时降低计算量,提高计算效率,为开发低成本、便携式近红外光谱分析仪器提供了理论依据。

参考文献

- [1] 徐晓峰,何至远,董虹. 蛋白桑在畜禽生产上的应用研究进展[J]. 中国畜牧杂志,2024,60(3):66-72,78
XU X F, HE Z Y, DONG H. Application of protein mulberry in livestock and poultry production [J]. Chinese Journal of Animal Science, 2024, 60(3): 66-72, 78
- [2] 黄自然,杨军,吕雪娟. 桑树作为动物饲料的应用价值与研究进展[J]. 蚕业科学,2006,32(3):377-385
HUANG Z R, YANG J, LÜ X J. The utilization and development of mulberry as animal forage [J]. Science of Sericulture, 2006, 32(3): 377-385
- [3] 黄军鹏,赵卫国,杨赵军,等. 添加饲料桑对围产期奶牛生产性能、免疫和抗氧化功能及瘤胃微生物区系的影响[J]. 动物营养学报,2023,35(11):7224-7234
HUANG J P, ZHAO W G, YANG Z J, et al. Effects of forage mulberry addition on performance, immune and antioxidant function and rumen microflora of perinatal Holstein dairy cows [J]. Chinese Journal of Animal Nutrition, 2023, 35(11): 7224-7234
- [4] 王敬尧,解湧芳,丽丽,等. 添加不同水平单宁酸对绵羊体外发酵参数和甲烷产量的影响[J]. 中国畜牧兽医,2020,47(5):1436-1443
WANG J Y, XIE Y F, LI L, et al. Effects of adding different levels of tannic acid on rumen fermentation parameters and methane production of sheep *in vitro* method [J]. China Animal Husbandry & Veterinary Medicine, 2020, 47(5): 1436-1443
- [5] WAFULA E N, ONDUSO M, WAINAINA I N, et al. Antinutrient to mineral molar ratios of raw common beans and their rapid prediction using near-infrared spectroscopy [J]. Food Chemistry, 2022, 368: 130773
- [6] 赵一鸣,徐文,安容容,等. 饲料中单宁、硫代葡萄糖苷和植酸对畜禽的影响及其降解方法[J]. 饲料工业,2024,45(7):119-125
ZHAO Y M, XU W, AN R R, et al. Effects of tannin, glucoside and phytic acid in feed on livestock or poultry and their degradation methods [J]. Feed Industry, 2024, 45(7): 119-125
- [7] 蒋子洁,侯启瑞,侯文玉,等. 桑叶、构树叶、榆树叶营养价值、抗营养因子及其在畜牧生产中的应用[J]. 饲料工业,2023,44(18):25-29
JIANG Z J, HOU Q R, HOU W Y, et al. Nutritional value and antinutritional factors of mulberry leaves, paper mulberry leaves and elm leaves and their applications in livestock production [J]. Feed Industry, 2023, 44(18): 25-29
- [8] 刘纯铭,钟如意,肖定福. 青贮桑叶的生产工艺、营养作用及

- 其在反刍动物上的应用效果研究进展[J]. 中国饲料, 2022(7):126-130
- LIU C M, ZHONG R Y, XIAO D F. Production technology and nutritional function of silage mulberry leaves and its application effect in ruminants[J]. China Feed, 2022(7):126-130
- [9] 张颖超, 尹守亮, 王一炜, 等. 木本饲料青贮研究进展[J]. 生物技术通报, 2021, 37(9):48-57
- ZHANG Y C, YIN S L, WANG Y W, et al. Research progress of woody forage silage [J]. Biotechnology Bulletin, 2021, 37(9):48-57
- [10] 褚小立, 史云颖, 陈瀑, 等. 近五年我国近红外光谱分析技术研究与应用进展[J]. 分析测试学报, 2019, 38(5):603-611
- CHU X L, SHI Y Y, CHEN P, et al. Research and application progresses of near infrared spectroscopy analytical technique in China in past five years[J]. Journal of Instrumental Analysis, 2019, 38(5):603-611
- [11] STUTH J, JAMA A, TOLLESON D. Direct and indirect means of predicting forage quality through near infrared reflectance spectroscopy[J]. Field Crops Research, 2003, 84(1/2):45-56
- [12] CHELI F, BATTAGLIA D, PINOTTI L, et al. State of the art in feedstuff analysis: a technique-oriented perspective [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2012, 60(38):9529-9542
- [13] PASQUINI C. Near Infrared Spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications[J]. Journal of the Brazilian Chemical Society, 2003, 14(2):198-219
- [14] 严衍禄, 赵龙莲, 李军会, 等. 现代近红外光谱分析的信息处理技术[J]. 光谱学与光谱分析, 2000, 20(6):777-780
- YAN Y L, ZHAO L L, LI J H, et al. Information technology of modern NIR spectral analysis [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2000, 20(6):777-780
- [15] OSBORNE B G. Near infrared spectroscopy in food analysis[J]. Encyclopedia of Analytical Chemistry, 2006(9):1-14
- [16] NORRIS K H, BARNES R F, MOORE J E, et al. Predicting forage quality by infrared reflectance spectroscopy[J]. Journal of Animal Science, 1976, 43(4):889-897
- [17] MIAO X X, MIAO Y, LIU Y, et al. Measurement of nitrogen content in rice plant using near infrared spectroscopy combined with different PLS algorithms[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2023, 284:121733
- [18] CHEN H, LIN Z, TAN C. Fast discrimination of the geographical origins of notoginseng by near-infrared spectroscopy and chemometrics[J]. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2018, 161:239-245
- [19] NØRGAARD L, SAUDLAND A, WAGNER J, et al. Interval partial least-squares regression (iPLS): a comparative chemometric study with an example from near-infrared spectroscopy [J]. Applied Spectroscopy, 2000, 54(3):413-419
- [20] 朱丹, 张佩华, 赵勐, 等. 不同 NDF 与淀粉比例饲料在奶牛瘤胃的降解特性[J]. 草业科学, 2015, 32(12):2122-2130
- ZHU D, ZHANG P H, ZHAO M, et al. Rumen degradation characteristics of different neutral detergent fiber/starch ratio diets in dairy cattle [J]. Pratacultural Science, 2015, 32(12):2122-2130
- [21] 魏国涛, 王栋. 杜马斯燃烧法测定盐城市小麦粗蛋白含量[J]. 现代食品, 2023, 29(23):176-178
- WEI G T, WANG D. Determination of crude protein content in wheat in Yancheng City by Dumas combustion method [J]. Modern Food, 2023, 29(23):176-178
- [22] VAN SOEST P J, ROBERTSON J B, LEWIS B A. Methods for dietary fiber, neutral detergent fiber, and nonstarch polysaccharides in relation to animal nutrition[J]. Journal of Dairy Science, 1991, 74(10):3583-3597
- [23] JUNG J S, RAVINDRAN B, SOUNDHARRAJAN I, et al. Improved performance and microbial community dynamics in anaerobic fermentation of *Triticale* silages at different stages[J]. Bioresource Technology, 2022, 345:126485
- [24] BRODERICK G A, KANG J H. Automated simultaneous determination of ammonia and total amino acids in ruminal fluid and *in vitro* Media1[J]. Journal of Dairy Science, 1980, 63(1):64-75
- [25] MAKKAR H P S, BECKER K. Vanillin-HCl method for condensed tannins: effect of organic solvents used for extraction of tannins[J]. Journal of Chemical Ecology, 1993, 19(4):613-621
- [26] WANG N W, XIONG Y, WANG X K, et al. Effects of *Lactobacillus plantarum* on fermentation quality and anti-nutritional factors of paper mulberry silage [J]. Fermentation, 2022, 8(4):144
- [27] CZARNECKI M A, MORISAWA Y, FUTAMI Y, et al. Advances in molecular structure and interaction studies using near-infrared spectroscopy [J]. Chemical Reviews, 2015, 115(18):9707-9744
- [28] RANZAN C, STROHM A, RANZAN L, et al. Wheat flour characterization using NIR and spectral filter based on Ant Colony Optimization[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2014, 132:133-140
- [29] ZOU X B, ZHAO J W, POVEY M J W, et al. Variables selection methods in near-infrared spectroscopy [J]. Analytica Chimica Acta, 2010, 667(1/2):14-32
- [30] PEREIRA A F C, PONTES M J C, NETO F F G, et al. NIR spectrometric determination of quality parameters in vegetable oils using iPLS and variable selection[J]. Food Research International, 2008, 41(4):341-348
- [31] MUKHERJEE S, LASKAR S. Vis-NIR-based optical sensor system for estimation of primary nutrients in soil[J]. Journal of Optics, 2019, 48(1):87-103
- [32] CHEN J, REN X, ZHANG Q, et al. Determination of protein, total carbohydrates and crude fat contents of foxtail millet using effective wavelengths in NIR spectroscopy [J]. Journal of Cereal Science, 2013, 58(2):241-247
- [33] JI Q G, LI C F, FU X S, et al. Protected geographical indication discrimination of Zhejiang and non-Zhejiang ophiopogonis japonicus by near-infrared (NIR) spectroscopy combined with

- chemometrics; the influence of different stoichiometric and spectrogram pretreatment methods [J]. *Molecules*, 2023, 28(6): 2803
- [34] 陈积山, 朱瑞芬, 张强, 等. 建立近红外特征波长模型快速测定羊草常规营养成分的研究[J]. *草地学报*, 2019, 27(4): 867-873
- CHEN J S, ZHU R F, ZHANG Q, et al. Research on the rapid determination of conventional nutritional components of *Leymus chinensis* by establishing near infrared characteristic wavelength model[J]. *Acta Agrestia Sinica*, 2019, 27(4): 867-873
- [35] RILEY M R, ARNOLD M A, MURHAMMER D W. Effect of sample complexity on quantification of analytes in aqueous samples by near-infrared spectroscopy [J]. *Applied Spectroscopy*, 2000, 54(2): 255-261
- [36] BEĆ K B, GRABSKA J, KIRCHLER C G, et al. NIR spectra simulation of thymol for better understanding of the spectra forming factors, phase and concentration effects and PLS regression features [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2018, 268: 895-902
- [37] 田丽梅, 陈菲, 林炎丽, 等. 近红外光谱检测燕麦饲草青贮营
- 养品质研究[J]. *草地学报*, 2023, 31(12): 3841-3850
- TIAN L M, CHEN F, LIN Y L, et al. Research on detecting nutritional quality of forage oat silage by near infrared spectroscopy[J]. *Acta Agrestia Sinica*, 2023, 31(12): 3841-3850
- [38] YUN Y H, LI H D, DENG B C, et al. An overview of variable selection methods in multivariate analysis of near-infrared spectra [J]. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2019, 113: 102-115
- [39] ZHOU X H, XIANG B R, WANG Z M, et al. Determination of quercetin in extracts of *Ginkgo biloba* L. leaves by near-infrared reflectance spectroscopy based on interval partial least-squares (iPLS) model [J]. *Analytical Letters*, 2007, 40(18): 3383-339
- [40] FU J S, YU H D, CHEN Z, et al. A review on hybrid strategy-based wavelength selection methods in analysis of near-infrared spectral data [J]. *Infrared Physics & Technology*, 2022, 125: 104231

(责任编辑 彭露茜)