

近红外光谱法测定玉米秸秆饲用品质

邵书静, 张仁和, 史俊通, 薛吉全^{*}, 张兴华, 马国胜, 路海东

(西北农林科技大学农学院, 杨凌 712100)

摘 要: 为了对玉米秸秆的饲用品质进行可靠、便捷、快速的分析和评价, 该研究以不同品种、密度、氮肥和水分处理的不同发育时期和不同部位玉米秸秆为试验材料, 应用近红外光谱 (NIRS) 技术和偏最小二乘法 (PLS), 采用一阶导数+中心化+多元散射校正的光谱数据预处理方法, 构建了玉米秸秆体外干物质消化率 (IVDMD)、酸性洗涤纤维 (ADF)、中性洗涤纤维 (NDF) 和可溶性糖 (WSC) 含量的 NIRS 分析模型。所建立的 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量的 NIRS 校正模型决定系数 (R_{cal}^2) 分别为 0.9906、0.9870、0.9931 和 0.9802, 交叉验证决定系数 (R_{cv}^2) 分别为 0.9593、0.9413、0.9678 和 0.9342, 外部验证决定系数 (R_{val}^2) 分别为 0.9549、0.9353、0.9519 和 0.9191, 各项标准差 (SEC、SECV 和 SEP) 为 0.935~1.904, 相对分析误差 (RPD) 均大于 3。结果表明, 各参数的 NIRS 分析模型可用于玉米秸秆饲用品质的分析和品种选育的快速鉴定。

关键词: 近红外光谱, 模型, 纤维, 玉米秸秆, 体外干物质消化率, 可溶性糖, 校正

doi: 10.3969/j.issn.1002-6819.2009.12.027

中图分类号: O657.33

文献标识码: A

文章编号: 1002-6819(2009)-12-0151-05

邵书静, 张仁和, 史俊通, 等. 近红外光谱法测定玉米秸秆饲用品质[J]. 农业工程学报, 2009, 25(12): 151—155.

Tai Shujing, Zhang Renhe, Shi Juntao, et al. Prediction of forage quality of maize stover by near infrared spectroscopy[J].

Transactions of the CSAE, 2009, 25(12): 151—155. (in Chinese with English abstract)

0 引 言

玉米秸秆资源饲料化是现代畜牧业的发展方向^[1], 其饲用品质直接影响动物的生长发育和生产效率。因此建立快速、准确的玉米秸秆饲用品质测定方法对中国节粮型秸秆畜牧业的发展与玉米秸秆饲用品质的分析评价和品质育种具有重要的推动作用。玉米秸秆饲用品质主要取决于秸秆体外干物质消化率 (*in vitro* dry matter digestibility, IVDMD)、酸性洗涤纤维 (acid detergent fiber, ADF)、中性洗涤纤维 (neutral detergent fiber, NDF) 和可溶性糖 (water soluble carbohydrate, WSC) 含量^[2-3]。IVDMD 分析常采用人工瘤胃液发酵法^[4]、人工瘤胃液产气法^[5]和酶法^[6], ADF 和 NDF 含量测定多应用 Van Soest 抽滤法^[7]、尼龙袋法^[8]和 Ankom 滤袋法^[8], WSC 含量常采用蒽酮比色法^[8]测定, 但这些传统分析方法均存在操作繁琐、测定速度慢、成本高和污染环境等缺点。近红外光谱 (near infrared reflectance spectroscopy, NIRS) 分析具有操作简便、测定速度快、多组分同时测定、成本低、绿色环保和样品制备简单等优点^[9-11], 现已成为农作物品质研究的重要手段^[12-13], 并广泛应用于玉米品质的分析和评价^[14-18]。但是目前研究主要集中于应用 NIRS 技

术分析玉米籽粒和整株品质, 而有关秸秆饲用品质的研究较少^[2,19-23], 而且同时对其所有这些品质参数进行 NIRS 分析以评价其品质的研究鲜见报道。目前, 由于仪器硬件、构造和分析软件的差异, 不同类型近红外光谱仪的定标模型不能通用, 故不同类型的近红外光谱仪都需要单独定标。本研究拟构建玉米秸秆 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量的 NIRS 分析模型, 为其饲用品质的分析和评价提供简便、快速、准确和低成本的测定方法。

1 材料与方法

1.1 试验材料

供试样品采自 2006 和 2007 年, 包括不同品种 (普通玉米和饲用玉米)、不同栽培条件 (密度、氮肥和水分)、不同发育时期 (7 叶期、13 叶期、吐丝期、吐丝后 25 d 和成熟期) 和不同部位 (茎秆、叶片、叶鞘和全株 (去除果穗)) 的玉米秸秆, 以上样品共计 212 份。样品取回后 105℃下杀青 30 min, 65℃下烘干至恒质量。所有样品采用高速万能植物粉碎机粉碎, 过 40 目筛后装入塑料袋中密封, 存放于 4℃冰箱备用。

1.2 试验方法

1.2.1 样品近红外光谱的采集

近红外仪器为 DA7200 二极管阵列近红外光谱分析仪 (Perten Inc., Sweden), 仪器使用的软件为“Simplicity”。采集光谱时仪器工作参数为: 谱区范围 950~1 650 nm, 分辨率 3.125 nm。将一定量样品倒入直径 75 mm 的分析杯内, 表面刮平, 进行全波长连续扫描, 收集样品的吸收光谱。为消除样品的不均匀性, 减小误差, 每个样品重装 3 次, 每次重复扫描 2 次。由图 1 可见, 样品的近红外光谱有多处吸收峰, 可以作为定量分析的依据。

收稿日期: 2008-04-02 修订日期: 2009-09-04

基金项目: 国家“863”计划项目 (2006AA100201); 国家“973”计划项目 (2009CB118604); 陕西省重大科技专项 (2007ZDKG-03)

作者简介: 邵书静 (1980—), 女, 山东曲阜人, 博士生, 主要从事玉米生理生态研究, 杨凌 西北农林科技大学农学院, 712100。

Email: sjtai_tai@yahoo.com.cn

^{*}通信作者: 薛吉全, 男, 教授, 主要从事玉米新品种选育和栽培技术研究, 杨凌 西北农林科技大学农学院, 712100。Email: xjq2934@yahoo.com.cn

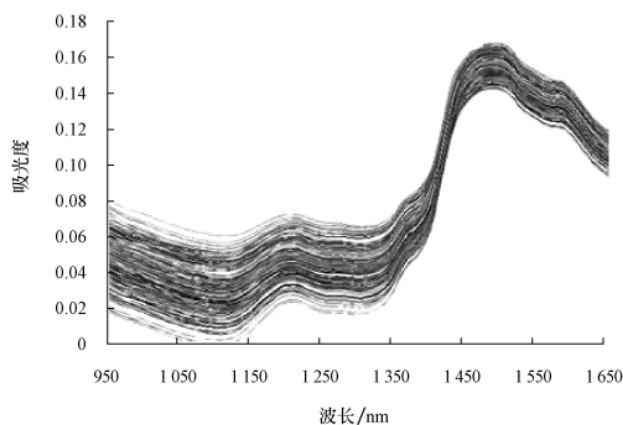


图1 玉米秸秆样品的近红外光谱

Fig.1 Spectrogram of near infrared reflectance spectroscopy of maize stover

1.2.2 样品 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量的化学测定

样品 IVDMD 按酶法(胃蛋白酶—纤维素酶两步消化)测定^[6],胃蛋白酶为 1:10 000 (Sigma 公司),纤维素酶为“Onozuka”R-10 (Sigma 公司); ADF 和 NDF 含量采用 Ankom 滤袋法^[8]进行测定; WSC 含量应用蒽酮比色法^[8]测定。所有样品均平行测定 3 次取平均值,结果以干基(%)表示。

1.2.3 建立 NIRS 数学模型的方法

采用美国 Thermo Electron 公司的 GRAMS/AI 化学分析计量软件(7.02 版)进行建模和模型优化,建立模型的化学计量学方法为偏最小二乘法(PLS)。将所有样品按单个品质参数的化学分析值从小到大排列,采用每隔 2 个取 1 个的方式选择样品组成验证集,剩下的样品组成校正集^[24]。建模前计算样品 GH(马氏距离)值^[25-26],对校正集样品光谱进行异常值检验, GH 值代表每个样品的谱带与所有样品平均谱带的差异。一般 $GH \leq 3.0$ 的样品视为来自同一群体, $GH > 3.0$ 的样品则视为异常样品予以剔除。为了减弱仪器背景或漂移对信号的影响,采用一阶导数+中心化+多元散射校正的数学方法对光谱数据进

行预处理。建模的过程就是首先利用校正集样品建立校正模型并作交叉验证,然后利用验证集样品进行外部验证,最后根据校正决定系数(R^2_{cal})、交叉验证决定系数(R^2_{cv})、外部验证决定系数(R^2_{val})、校正集样品标准差(SEC)、交叉验证标准差(SEC_{CV})、预测集样品标准差(SEP)等指标确定最优模型^[9-12]。将建好的校正模型(包括相同文件名的 3 个文件: *.cal, *.cdf, *.cdb)复制到仪器使用软件“Simplicity”相应目录下,即可调用相应的分析模型进行样品预测。

1.2.4 衡量校正模型优劣的参数

衡量校正模型优劣的主要参数包括 R^2_{cal} 、 R^2_{cv} 、 R^2_{val} 、SEC、SEC_{CV}、SEP 等。对于同一样品集所构建的近红外模型来说,各类决定系数越大,标准差越小,则表明模型的定标及预测效果越好。另外可用相对分析误差(RPD)对校正模型的定标效果和预测精度进行进一步验证^[11]:

$RPD = SD/SEC (SEP)$ 。式中 SD——样品成分含量的标准偏差。如果 $RPD > 3$,则说明该成分定标效果良好,预测精度高,所建立的 NIRS 分析模型可用于实际检测;如果 $2.5 \leq RPD \leq 3$,则说明应用 NIRS 技术对该成分进行定量分析是可行的,但定标效果和预测精度有待于进一步提高;如果 $RPD < 2.5$,则说明该成分难以进行 NIRS 定量检测分析。

2 结果与分析

2.1 样品 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量的化学分析结果

根据 GH 值,剔除部分异常样品,实际参与建模的样品数及样品 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量的化学测定结果见表 1。由表 1 可见,IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 质量分数变化幅度分别为 25.09%~70.01%、22.31%~59.56%、44.86%~82.49%和 3.58~27.06%,变幅很大,基本上涵盖了玉米秸秆可能出现的 IVDMD 等品质参数的变化范围,具有很好的样品代表性,满足了建立近红外分析模型的基础。

表1 玉米秸秆 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量化学测定结果

Table 1 Results of in vitro dry matter digestion (IVDMD), acid detergent fiber (ADF), neutral detergent fiber (NDF) and water soluble carbohydrate (WSC) of maize stover by chemical measure

参数	校正集				验证集			
	样本数	变幅/%	平均/%	标准偏差/%	样本数	变幅/%	平均/%	标准偏差/%
IVDMD	136	25.09~70.01	48.16	8.13	70	26.24~66.95	43.62	10.83
ADF	131	22.31~59.56	40.65	6.36	70	23.57~57.02	39.85	8.94
NDF	135	44.86~82.49	66.31	6.56	70	47.87~78.49	63.71	8.72
WSC	130	3.58~27.06	11.89	6.20	70	3.69~26.94	12.24	6.65

2.2 样品 IVDMD、 ADF、NDF 和 WSC 含量近红外校正模型的建立与优化

建立近红外校正模型实际上就是通过化学计量学方法将光谱数据与化学值进行回归分析,在二者之间建立定量的函数关系^[9-11]。

本试验利用 GRAMS/AI 化学分析计量软件(7.02 版)对光谱数据进行预处理,采用 PLS 分析并确定模型最佳

主因子数。结果表明,当采用一阶导数+中心化+多元散射校正的预处理方法,IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 的最佳主因子数分别为 6、4、10 和 9,在此条件下建立的 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 校正模型的决定系数最大,标准差最小。由表 2 可知,各模型的校正决定系数和交叉验证决定系数均较高且均达极显著水平($P < 0.01$),标准差较小(SEC 为 0.935~1.604, SEC_{CV} 为 1.170~1.726),

而且各模型的 *RPD* 均大于 3，以上表明各参数定标效果良好，所建模型的各项决定系数和标准差已满足样品分析对准确度的要求。

表 2 玉米秸秆 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 近红外模型的校正结果

参数		校正			交叉验证	
		<i>SEC</i>	R^2_{cal}	<i>RPD</i>	<i>SECV</i>	R^2_{cv}
IVDMD	6	1.506	0.9906**	5.4	1.631	0.9593**
ADF	4	1.444	0.9870**	4.4	1.656	0.9413**
NDF	10	0.935	0.9931**	7.0	1.170	0.9678**
WSC	9	1.604	0.9802**	3.9	1.726	0.9342**

注：**表示在 0.01 水平差异显著。

2.3 NIRS 校正模型对 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量预测效果分析

NIRS 校正模型建立后，需采用外部验证的方法对所建立的模型预测效果进行验证。即用未参与建模样品（验证集样品）对所建模型的预测效果进行检验^[9-11]。

由验证集样品各品质参数化学测定值与 NIRS 预测值的散点图（图 2）得出，化学值和预测值间的相关系数（*r*）分别为 0.9772（IVDMD）、0.9671（ADF）、0.9756（NDF）和 0.9587（WSC），且均达极显著水平（表 3）；对预测值和化学值进行成对数据双尾 *t* 检验时，*t* 检验值（*t*_{0.05}）均未达到显著水平，从而说明各参数的 NIRS 预测值和化学值间存在较强的相关性，二者间的差异不显著。各参数 NIRS 校正模型的外部验证决定系数（ R^2_{val} ）也均达极显著水平（*P* < 0.01），*SEP* 较小（1.200~1.904），

而且各模型的 *RPD* 均大于 3，由此可见各参数校正模型的预测精度较高，NIRS 预测值与化学值比较接近。

表 3 玉米秸秆 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量 NIRS 校正模型的外部验证结果

参数	相关系数	<i>t</i> _{0.05}	<i>SEP</i>	R^2_{val}	<i>RPD</i>
IVDMD	0.9772**	NS	1.642	0.9549**	6.6
ADF	0.9671**	NS	1.809	0.9353**	4.9
NDF	0.9756**	NS	1.200	0.9519**	7.3
WSC	0.9587**	NS	1.904	0.9191**	3.5

注：**表示在 0.01 水平差异显著，NS 表示无显著差异。

上述结果表明样品各参数的定标效果良好，预测精度较高，所建立的 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量的 NIRS 分析模型可用于对玉米秸秆饲用品质进行实际检测。

3 讨 论

在近红外光谱仪的实际应用中，由于各仪器之间仪器响应（例如不同光源、光学系统、和探测器等）的不同，或者因环境因素（温度和湿度等）的影响，使测量的光谱有差异，从而导致模型不再适用，计算结果偏差很大或根本无法使用。目前，不同类型近红外光谱仪的定标模型不能通用，故不同类型的近红外光谱仪都需要单独定标。

本研究用于建模的样品既包括不同品种（普通玉米和饲用玉米）、不同栽培条件（密度、氮肥和水分）玉米秸秆，也包括不同发育时期（7 叶期、13 叶期、吐丝期、吐丝后 25 d 和成熟期）和不同部位（茎秆、叶片、叶鞘和全株（去除果穗））的玉米秸秆，样品涵盖范围广，IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 含量变化范围大，具有很好的代表性。

由于仪器波长准确度、仪器信号、样品状态、装样条件或其他因素的影响，近红外光谱分析中会导致异常光谱的产生、谱图的偏移或漂移，若不加以处理，则会影响校正模型的质量和未知样品预测结果的准确性^[9-10]。样品的水分含量是影响近红外分析准确性的一个重要因素^[27-28]。因此，在近红外实验室分析中为达到较好的分析准确性，应考虑对样品水分做统一处理，为此本研究对样品进行了烘箱干燥处理。为减弱各种非目标因素对光谱的影响，本研究建模时根据 *GH* 值对校正集样品光谱进行了异常值检验，剔除了部分异常样品，并采用一阶导数+中心化+多元散射校正的数学方法对光谱数据进行了预处理。模型分析结果表明以上方法的使用在一定程度上提高了近红外建模的准确性。

基础数据（化学分析值）的准确性是影响近红外光谱分析结果的一个重要因素。基础数据越准确，所建模型的准确度越高，其对未知样品的预测结果也越准确。采用人工瘤胃液发酵法测定玉米秸秆的体外干物质消化率，由于瘤胃液的制取过程比较繁琐，而且瘤胃液对环境条件控制的要求比较严格，再加上动物个体之间生理差异的影响，从而影响测定的准确性；本研究采用酶法

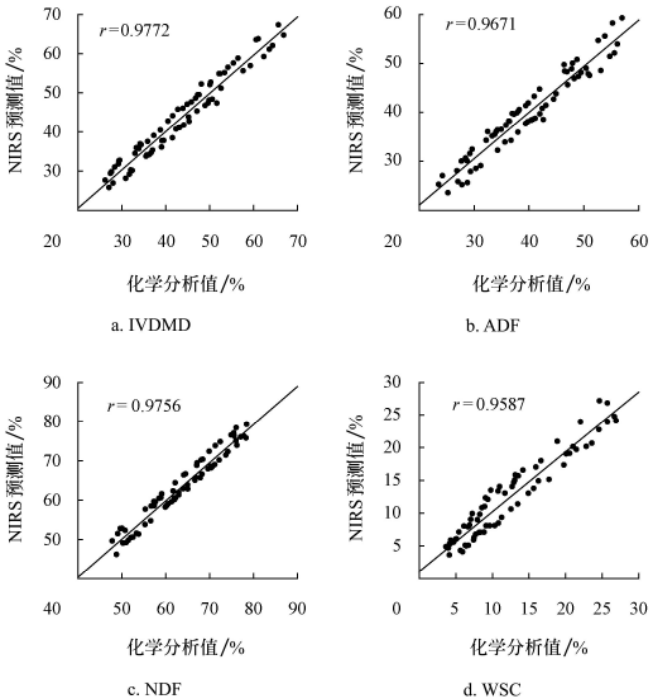


图 2 IVDMD、ADF、NDF 和 WSC 外部验证的化学分析值与预测值的散点图
Fig.2 Spectrogram of Lab vs NIRS values for IVDMD, ADF, NDF and WSC

测定秸秆的体外干物质消化率, 试验条件容易控制, 干扰因素较少, 测定结果的准确性相对较高, 对于样品自身性质的分析具有很好的参考性。应用 Van Soest 抽滤法测定玉米秸秆的 NDF 和 ADF 含量, 由于传统抽滤法一次测定样本数量少, 同时需要使用真空抽滤装置, 对抽提过滤的时间要求苛刻, 测定影响因素较多, 因而测定结果的重现性不好, 精确度不高; 本研究应用 Ankom 滤袋法测定秸秆的 NDF 和 ADF 含量, 与传统抽滤相比, Ankom 滤袋法具有批量测定、避免了很多影响纤维分析结果准确度因素的优点, 从而使分析结果重现性较好, 精确度较高。Melchinger^[19]、Zimmer^[20]、Albanell^[21]和白琪林^[2,22-23]分别针对不同的参数构建了玉米秸秆饲用品质的 NIRS 分析模型。所建 IVDMD 分析模型^[19,21-22]的各参数分别为 0.81~0.91 (R_{cv}^2), 0.76~0.91 (R_{val}^2), 1.56~2.34 ($SECV$) 和 1.64~2.64 (SEP); ADF 含量分析模型^[19-21,23]的各参数分别为 0.86~0.91 (R_{cv}^2), 0.79~0.90 (R_{val}^2), 0.87~2.03 ($SECV$) 和 1.14~1.90 (SEP); NDF 含量分析模型^[20-21,23]的各参数分别为 0.90~0.94 (R_{cv}^2), 0.85~0.88 (R_{val}^2), 1.01~1.81 ($SECV$) 和 1.07~2.39 (SEP); WSC 含量分析模型^[2]的各参数分别为 0.89 (R_{cv}^2), 0.89 (R_{val}^2), 1.77 ($SECV$) 和 2.14 (SEP)。与上述分析模型结果相比, 本研究所建立的 4 个品质参数 NIRS 分析模型的决定系数较大, 而标准差较小。这表明, 本研究所建立的玉米秸秆饲用品质 NIRS 分析模型具有较高的质量。

本研究所建立各参数模型都有各自的适配范围, 如果今后待测定样品本身的某参数含量超出了所建模型的适应范围时, 就需要扩充校正样品集所覆盖的范围, 在原有的模型中添加包含新信息的样品, 以保证测定的准确性。

4 结 论

本研究应用近红外光谱技术 (NIRS), 采用偏最小二乘回归法 (PLS), 并结合一阶导数+中心化+多元散射校正的数学方法对光谱数据进行了预处理, 建立了玉米秸秆体外干物质消化率 (IVDMD)、酸性洗涤纤维 (ADF)、中性洗涤纤维 (NDF) 和可溶性糖 (WSC) 含量的稳定校正模型 (包括相同文件名的 3 个文件: *.cal, *.cdf, *.cdb), 校正模型决定系数 (R_{cal}^2) 为 0.9802~0.9931, 交叉验证决定系数 (R_{cv}^2) 为 0.9342~0.9678, 外部验证决定系数 (R_{val}^2) 为 0.9191~0.9549, 各项标准差 (SEC 、 $SECV$ 和 SEP) 为 0.935~1.904, 为其饲用品质分析和品种选育提供了快速、可靠的分析方法。

[参 考 文 献]

- [1] 李浩波. 秸秆饲料学[M]. 西安: 西安地图出版社, 2002: 1—10.
- [2] 白琪林. 青贮玉米秸秆品质性状遗传及其近红外测定方法的研究[D]. 北京: 中国农业大学, 2005.
- [3] 白琪林, 陈绍江, 戴景瑞. 我国常用玉米自交系秸秆品质性状及其相关分析[J]. 作物学报, 2007, 33(11): 1777—1781.
Bai Qilin, Chen Shaojiang, Dai Jingrui. Stalk quality traits and their correlations of maize inbred lines in China[J]. Acta Agronomica Sinica, 2007, 33(11): 1777—1781. (in Chinese with English abstract)
- [4] Tilly J M, Terry R A. A two stage technique for the in vitro digestion of forage crops[J]. Journal of the British Grassland Society, 1963, 18(2): 104—111.
- [5] Menke K H, Raab L, Salewski A, et al. The estimation of the digestibility and metabolizable energy content of ruminant feeding stuffs from the gas production when they are incubated with rumen liquor in vitro[J]. Journal of Agricultural Science, 1979, 93(1): 217—222.
- [6] Aufrere J, Doreau B M. Comparison of methods for predicting digestibility of feeds[J]. Animal Feed Science and Technology, 1988, 20(3): 203—218.
- [7] Van Soest P J, Robertson J B, Lewis B A. Methods for dietary fiber, neutral detergent fiber and non-starch polysaccharides in relation to animal nutrition[J]. Dairy Science, 1991, 74(10): 3583—3597.
- [8] John Piltz, Don Law. AFIA — Laboratory Methods Manual[M]. Balwyn, Victoria: Australian Fodder Industry Association Inc., 2007: 31—37, 51—53, 63—65.
- [9] 陆婉珍. 现代近红外光谱分析(第二版)[M]. 北京: 世界地图出版社, 2007.
- [10] 严衍禄, 赵龙莲, 韩东海, 等. 近红外光谱分析基础与应用[M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2005.
- [11] Williams P C. Implementation of near-infrared technology[C]. American Association of Cereal Chemist, St Paul, Minnesota, USA, 2001: 145—169.
- [12] 张勇, 丛茜, 谢云飞, 等. NIRS 分析技术在农业中的应用进展[J]. 农业工程学报, 2007, 23(10): 285—290.
Zhang Yong, Cong Qian, Xie Yunfei, et al. Progress in application of near infrared spectroscopy technology in agriculture[J]. Transactions of the CSAE, 2007, 23(10): 285—290. (in Chinese with English abstract)
- [13] 胡晓航, 李海洋. 近红外光谱技术在农产品品质分析中的应用[J]. 林业科技情报, 2007, 39(1): 6—8.
Hu Xiaohang, Li Haiyang. Applications of near infrared spectroscopy technology in analyzing the quality of agricultural products[J]. Forest Science and Technology Information, 2007, 39(1): 6—8. (in Chinese with English abstract)
- [14] Cozzolino D, Fassio A, Gimenez A. The use of near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) to predict the composition of whole maize plants[J]. Science of Food and Agriculture, 2001, 81(1): 142—146.
- [15] Volkers K C, Wachendorf M, Loges R, et al. Prediction of the quality of forage maize by near-infrared reflectance spectroscopy[J]. Animal Feed Science and Technology, 2003, 109(14): 183—194.
- [16] Jiang H Y, Zhu Y J, Wei L M, et al. Analysis of protein, starch and oil content of single intact kernels by near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) in maize (*Zea mays L.*)[J]. Plant Breeding, 2007, 126(5): 492—497.
- [17] 魏良明, 姜海鹰, 李军会, 等. 玉米杂交种品质性状的近红外光谱分析技术研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2005, 25(9): 1404—1407.
Wei Liangming, Jiang Haiying, Li Junhui, et al. Predicting the chemical composition of intact kernels in maize hybrids by near infrared reflectance spectroscopy[J]. Spectroscopy

- and Spectral Analysis, 2005, 25(9): 1404—1407. (in Chinese with English abstract)
- [18] 孟兆芳, 赵龙莲, 程奕, 等. 近红外光谱法测定玉米品质指标的研究[J]. 华北农学报, 2008, 23(2): 147—150.
Meng Zhaofang, Zhao Longlian, Cheng Yi, et al. Study on determination several quality characteristics of maize by near infrared spectroscopy[J]. Acta Agriculturae Boreali-Sinica, 2008, 23(2): 147—150. (in Chinese with English abstract)
- [19] Melchinger A E, Schmidt G A, Geiger H H, et al. Evaluation of near infrared reflectance spectroscopy for Predicting grain and stover quality traits in maize[J]. Plant Breeding, 1986, 97(1): 20—29.
- [20] Zimmer E, Gurrath P A, Paul C, et al. Near infrared reflectance spectroscopy analysis of digestibility traits of maize stover[J]. Euphytica, 1990, 48(1): 73—81.
- [21] Albanell E, Plaixats J, Ferret A, et al. Evaluation of near-infrared reflectance spectroscopy for predicting stover quality trait in semi-exotic populations of maize[J]. Science of Food and Agriculture, 1995, 69(3): 269—273.
- [22] 白琪林, 陈绍江, 董晓玲, 等. 近红外漫反射光谱法测定玉米秸秆体外干物质消化率[J]. 光谱学与光谱分析, 2006, 26(2): 2711—274.
Bai Qilin, Chen Shaojiang, Dong Xiaoling, et al. Prediction of IVDMD with near infrared reflectance spectroscopy(NIRS) in maize stalk[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2006, 26(2): 2711—274. (in Chinese with English abstract)
- [23] 白琪林, 陈绍江, 董晓玲, 等. 近红外漫反射光谱法测定玉米秸秆 NDF 与 ADF 含量[J]. 光谱学与光谱分析, 2004, 24(11): 1345—1347.
Bai Qilin, Chen Shaojiang, Dong Xiaoling, et al. Prediction of NDF and ADF concentrations with near infrared reflectance spectroscopy (NIRS)[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2004, 24(11): 1345—1347. (in Chinese with English abstract)
- [24] 吴静珠, 王一鸣, 张小超, 等. 近红外光谱分析中定标集样品挑选方法研究[J]. 农业机械学报, 2006, 37(4): 158—161.
Wu Jingzhu, Wang Yiming, Zhang Xiaochao, et al. Study on algorithms of selection of representative samples for calibration in near infrared spectroscopy analysis[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2006, 37(4): 158—161. (in Chinese with English abstract)
- [25] 闵顺耕, 李宁, 张明祥. 近红外光谱分析中异常值的判别与定量模型优化[J]. 光谱学与光谱分析, 2004, 24(10): 1205—1209.
Min Shungeng, Li Ning, Zhang Mingxiang. Outlier diagnosis and calibration model optimization for near infrared spectroscopy analysis[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2004, 24(10): 1205—1209. (in Chinese with English abstract)
- [26] Maesschalck R D, Jouan R D, Massart D L. The Mahalanobis distance[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2000, 50(1): 1—18.
- [27] 于海燕, 应义斌, 刘燕德. 农产品品质近红外光谱分析结果影响因素研究综述[J]. 农业工程学报, 2005, 21(11): 160—163.
Yu Haiyan, Ying Yibin, Liu Yande. Research progress of factors affecting the determination of the inner quality of agricultural products by near infrared reflectance spectroscopy[J]. Transactions of the CSAE, 2005, 21(11): 160—163. (in Chinese with English abstract)
- [28] 李勇, 魏益民, 张波, 等. 近红外水分稳健分析模型研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2005, 25(12): 1963—1967.
Li Yong, Wei Yimin, Zhang Bo, et al. Study on the robust NIR calibration models for moisture[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2005, 25(12): 1963—1967. (in Chinese with English abstract)

Prediction of forage quality of maize stover by near infrared spectroscopy

Tai Shujing, Zhang Renhe, Shi Juntong, Xue Jiquan^{*}, Zhang Xinghua, Ma Guosheng, Lu Haidong

(College of Agronomy, Northwest Agriculture and Forestry University, Yangling 712100, China)

Abstract: In order to reliably, conveniently and rapidly analyze and evaluate forage quality of maize stover, the samples of maize stover from different varieties and treatments of density, nitrogenous fertilizer and water were used to establish near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) calibration models of *in vitro* dry matter digestion (IVDMD), acid detergent fiber (ADF), neutral detergent fiber (NDF) and water soluble carbohydrate (WSC) of maize stover with near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) technique, partial least square regression (PLS) and data pretreatment of 1st derivative+mean center+Multiple scatter correction. The results showed that determination coefficients of calibration (R_{cal}^2) about those models were 0.9906, 0.9870, 0.9931 and 0.9802 and those of cross validation (R_{cv}^2) and validation (R_{val}^2) were 0.9593(0.9549), 0.9413(0.9353), 0.9678(0.9519) and 0.9342(0.9191) for IVDMD, ADF, NDF and WSC, respectively. Standard error of calibration, cross validation and prediction (SEC , $SECV$ and SEP) ranged from 0.935 to 1.904. All values of relative percent differences (RPD) were greater than three. It demonstrated that these calibration models could be used to rapidly and accurately predict forage quality of maize stover and screen various samples in maize breeding.

Key words: near infrared reflectance spectroscopy, models, fibers, maize stover, *in vitro* dry matter digestion, water soluble carbohydrate, calibration