

中图分类号: S532; S143.3 文献标识码: A 文章编号: 1672-3635(2011)02-0065-04

遗传育种

马铃薯块茎钾含量近红外模型的建立

刘翠翠, 高红秀, 李 赞, 金 萍, 石 瑛*

(东北农业大学农学院, 黑龙江 哈尔滨 150030)

摘 要: 为了快速测定马铃薯块茎中的钾含量这一品质性状, 从而缩短育种时间, 本研究使用 InfraXact Lab 型近红外分析仪测定马铃薯样品的近红外光谱值, 并用常规化学分析方法测定马铃薯样品的含钾量, 将二者拟合建立定标模型。结果表明: 钾含量定标方程的 SECV 值为 0.072, 而 1-VR 值为 0.881, 较接近 1, 钾含量的验证参数 SEP(C) 值为 0.080, RSQ 值为 0.866, 证明定标的预测能力较好, 可以用其进行马铃薯育种材料钾含量的粗略测定。

关键词: 马铃薯; 钾含量; 近红外模型

Near-infrared Model Establishment for Testing Potato Tubers Potassium Content

LIU Cuicui, GAO Hongxiu, LI Zan, JIN Ping, SHI Ying*

(College of Agronomy, Northeast Agricultural University, Harbin, Heilongjiang 150030, China)

Abstract: In order to quickly determine the quality trait of potassium content in potato tubers and thus save the breeding time, we used the InfraXact Lab NIR Analyzer to determine the value of near-infrared spectrum and conventional chemical analysis method to determine the potassium content of potato samples. Then, they were combined to establish the calibration equation. The results showed that the SECV value of the potassium content in the calibration equation was 0.072, while the value of 1-VR was 0.881, close to 1; the SEP (C) value of validation parameters of the potassium content was 0.080, while the RSQ value was 0.866. These results suggest that the calibration equation had strong predictive power and could be used in rough determination of potassium content for potato breeding stocks.

Key Words: potato; potassium content; near-infrared model

钾是植物生长中不可缺少的营养元素, 钾素营养和氮素、磷素营养一样, 对植物的品质起着重要作用, 被称为品质元素^[1]。钾素不但会对作物的产量、品质产生重要的影响, 而且以各种方式直接或间接地影响植物的抗病性^[2-5]。马铃薯属喜钾作物, 钾素能提高马铃薯的光合效率, 还可影响光合产物的合成和运输, 影响马铃薯的品质以及产量的高低^[6]。由此可见, 钾素对于马铃薯的生长至关重要。过去人们对马铃薯含钾量的研究较少, 而现在研究人员逐渐认识到, 块茎中钾的含量如

同还原糖含量、淀粉含量一样也是马铃薯重要的品质指标之一。但是, 对于育种过程中大量材料的筛选工作, 既耗时又费力。随之出现并逐渐完善的近红外光谱分析技术却有效地解决了这个难题。

近红外光谱(NIRS)分析技术是 20 世纪 80 年代后期迅速发展起来的一项测试技术, 在欧美等国, NIRS 已成为谷物品质分析的重要手段^[7]。我国在水稻、烤烟等作物品质分析中已有应用 NIRS 的报道, 陆艳婷等^[8]建立了籼稻的几种品质性状的近红外光谱模型, 所建模型具有一定的实用价值。刘岱松等^[9]

收稿日期: 2011-01-16

基金项目: 国家科技支撑计划项目(2006BAD01A06-1-3); 黑龙江省科技计划项目(GA09B101-5-4)。

作者简介: 刘翠翠(1985-), 女, 硕士研究生, 从事马铃薯遗传育种研究。

* 通信作者(Corresponding author): 石瑛, 副教授, 主要从事马铃薯遗传育种研究, E-mail: yshi@mail.neau.edu.cn。

建立了烤烟烟叶钾含量的近红外光谱模型, 结果表明, 近红外法测定结果与常规化学分析方法的结果相关性较好, 能够应用于烤烟钾含量的快速诊断。由于近红外光谱分析技术具有分析速度快、非破坏性测定、多组分同时测定、样品不需预处理、低分析成本和操作简单等诸多优点, 使得该项技术在作物品质分析以及育种上的应用越来越广泛。

近红外光谱分析技术已经应用于许多作物的诸多领域, 但国内尚未有在马铃薯上应用的报道。本研究以 1562 份马铃薯品种、资源及杂种后代的块茎为材料, 建立马铃薯块茎钾含量的近红外光谱分析模型, 以期对马铃薯块茎钾含量的测定探索一种简便、快速、高效的分析方法, 为建立马铃薯品质性状评价的新体系提供基础数据, 进而对马铃薯品质育种材料的筛选提供有效的、可用的新方法。

1 材料与方法

1.1 试验材料

供试材料为 2007~2010 年东北农业大学马铃薯选种圃中入选的无性系材料, 参加 2007~2008 年国家马铃薯区域试验、生产试验的品种(系), 部分来自于讷河、克山和加格达奇等地的马铃薯品种(系), 样品数目为 1562 份。将新鲜马铃薯样品切碎, 105℃ 杀青 30 min, 70.5℃ 烘干约 14 h 至恒重后, 磨成粉末。

1.2 试验方法

1.2.1 近红外光谱的测定

试验仪器是 FOSS 公司生产的 InfraXact Lab 型近红外光谱分析仪, 将预处理过的样品放到近红外光谱分析仪的样品杯中, 以盖过扫描感应区域为标准, 由装于电脑上的操作软件 ISIScan 来控制, 光谱结果自动存储在本机配置的计算机中。

1.2.2 常规化学分析方法

马铃薯块茎全钾含量的测定采用火焰光度计法^[9]。

1.2.3 剔除超常样品和过剩样品

试验所用软件是 FOSS 公司的 WINISI 定标软件, 将上述马铃薯块茎钾含量的化学分析值及其近红外光谱值导入该软件, 运用软件的聚类分析功能, 剔除马氏距离(GlobalH 或简称 GH, 含义为得分的三维图中, 每个样品距离中心样品点的距离)大于 3.0 的样品, 即超常样品, 然后利用得分文件, 选择 NH(NeighborH) > 0.8(以某一样品为中心, 半径 0.8

以内的样品将被认为和此样品为相似样品, 其光谱性质不能增加定标集样品的变异范围, 即为过剩样品)的样品构成定标群体。

1.2.4 光谱预处理

本试验根据模型特点和测量要求选择的回归分析方法是 MPLS(改进最小二乘法回归技术), 对光谱的散射预处理方式采用了 None(对光谱不进行散射校正)和 SNV + Detrend(标准正常化处理 + 去偏异技术), 数学处理技术的参数分别为(Derivative 导数处理 = 0, Gap 做导数处理计算所采用的光谱点间隔 = 0, Smooth 平滑处理间隔 = 1, Smooth 2 二次平滑处理间隔 = 1)和(Derivative 导数处理 = 1, Gap 做导数处理计算所采用的光谱点间隔 = 4, Smooth 平滑处理间隔 = 4, Smooth 2 二次平滑处理间隔 = 1)。

1.2.5 定标与验证

样品的扫描数据和化学数据经过处理后就可以建立定标方程, 上述两种光谱预处理方式建立了两个定标方程, 我们挑选交互验证标准偏差 SECV 偏小, 交互验证相关系数 1-VR 偏大的一组为最终定标结果。在建立定标方程后, 需对该方程的预测性能进行验证。采用一组没有参与定标的独立样品组(即验证样品集)验证该方程的预测性能。验证样品集的成分应覆盖一定的范围, 以便得出合理的验证结果。验证结果的好坏主要取决于 SEP(C)值和 RSQ 值, 其中 SEP(C)值越小越好, RSQ 值越接近 1 越好。

2 结果与分析

2.1 剔除超常样品和过剩样品后的结果分析

由于原始样品集的过剩样品数量较大, 所以剔除超常样品和过剩样品后, 仅剩余 369 份样品用于模型构建。与未去除过剩样品前相比, 去除过剩样品后, 样品分布较平均, 有效改善了样品过于集中的情况, 此样品集较有代表性。

样品经过处理后剩余 369 份材料, 全部扫描光谱如图 1, 剔除 283 位置处的 81037 和 309 位置处的 20892, 与其它扫描光谱相比, 这两处光谱有较大波动, 不参与定标。

2.2 钾含量定标集和验证集的分选

从最终用于马铃薯钾含量的近红外模型建立的样品集 367 份中, 随机选取 90 份样品组成验证集, 剩余的 277 份样品自动生成定标集。从表 1 可以看出, 定标集的变化范围是 0.825%~2.250%, 验证集的

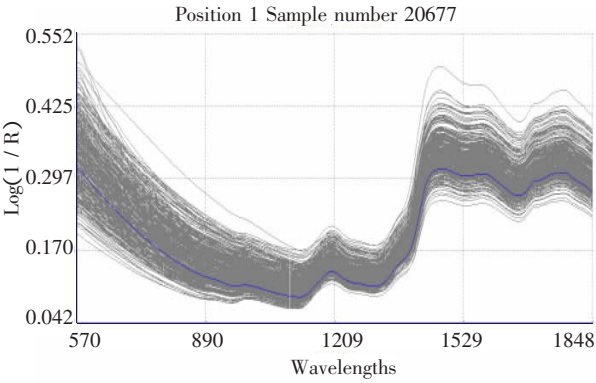


图 1 剔除过剩样品后的光谱图

Figure 1 Spectra after removing excess samples

变化范围是 0.850%~1.975%，验证集全部包含在定标集内，符合定标要求。但是，供试材料的钾含量过于集中，变化幅度太小，这将对定标结果产生一定的影响。

2.3 定标模型的建立

通过软件推荐的散射处理技术 SNV + Detrend 和 None，建立了两个马铃薯钾含量的定标方程，表

2 即为两种不同光谱处理技术下的钾含量定标参数，从表 2 中可以看出，两种光谱处理技术在定标的过程中，都自动剔除了少量超常样品，SNV + Detrend 散射处理技术建立的定标方程中的 SEC 值和 SECV 值都低于无散射处理技术建立的定标方程，RSQ 值和 1-VR 值都高于无散射处理技术建立的定标方程，按照软件推荐的选择方式，选出一个 SECV 值低而 1-VR 值较高的一组作为定标方程，即选择 SNV + Detrend 处理技术下的定标方程，该方程中 SECV 值为 0.072，而 1-VR 值为 0.881，接近于 0.900 这一数学上常用的可接受标准，定标结果较好。

2.4 模型的验证

对于所建模型的优劣，除了取决于定标参数外，还要对该模型进行验证，观察其验证参数的好坏，全面评价定标结果。用未参与定标的 90 份验证集样品检验该模型的预测能力，结果显示，有 8 份样品出现了报警(报警阈值由软件定义)，剔除这 8 份报警样品，用剩余的 82 份样品对该模型进行重新验证，结果见表 3，SEP(C)值为 0.080，RSQ

表 1 钾含量定标和验证集的化学分析数据

Table 1 Chemical analysis of potassium content calibration and validation sets

组分 Constituent	最小值(%) Minimum	最大值(%) Maximum	均值(%) Mean	标准误 SE	样本数(No.) Sample size N
定标集 Calibration set	0.825	2.250	1.485	0.208	277
验证集 Validation set	0.850	1.975	1.467	0.217	90

表 2 两种不同散射处理技术下的钾含量定标参数

Table 2 Calibration parameters of potassium content under two different scattering process technologies

组分 Constituent	样本数(No.) Sample size N	校正 Calibration				交叉检验 Validation	
		定标样品集 平均浓度 Mean	定标样品集 浓度最大值 Est. max	定标 标准偏差 SEC	定标 相关系数 RSQ	交互验证 标准偏差 SECV	交互验证 相关系数 1-VR
SNV+Detrend	268	1.490	2.112	0.066	0.899	0.072	0.881
None	267	1.484	2.104	0.083	0.840	0.087	0.827

表 3 修正后钾含量验证参数

Table 3 Validation parameters of potassium content after revising

组分 Constituent	预测标准偏差 SEP	系统偏差 Bias	扣除系统偏差的预测标准偏差 SEP(C)	斜率 Slope	样本(No.) N	预测相关系数 RSQ
钾含量 Potassium content	0.083	-0.024	0.080	1.046	82	0.866

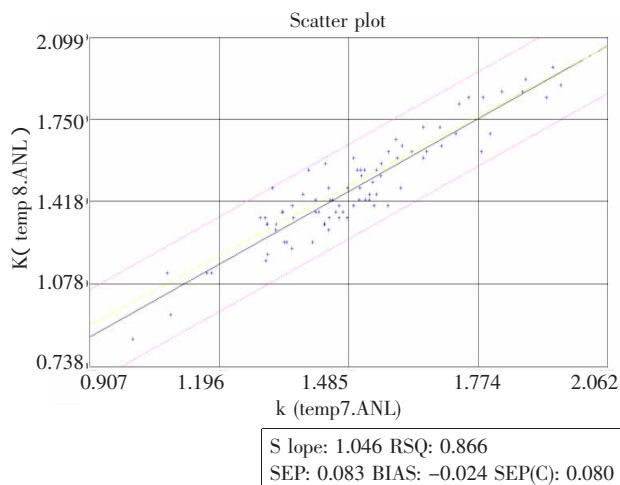


图2 修正后的钾含量近红外模型预测值
与实测值的交叉验证结果

Figure 2 Results of cross-validation between potassium
content NIR predicted and measured after revising

值为 0.866, 而钾含量近红外模型预测值与实测值的交叉验证结果见图 2, 由图 2 可知, 验证集样品较均匀的分布在回归线两侧, 并且全部分布在两条报警线范围内, 以上结果说明该模型预测效果较好, 可以用其进行马铃薯育种材料块茎钾含量的粗略测定, 但是定标结果并没有达到预期效果, 还有待于进一步提高。

3 讨论

实践证明, 应用所建模型能够快速、高效的测定马铃薯块茎的钾含量, 从而缩短育种年限, 缩小育种规模, 大大提高了育种的效率。由此可见, 近红外光谱技术是现代育种过程中非常重要的育种手段。但是, 本试验中所建模型并不十分理想, 究其原因, 可能受以下几方面因素的影响:

样品的均一性与否对模型的精确度有着重要的影响, 马铃薯块茎不是均质的材料, 各部位含钾量并不相同, 扫描光谱样品与化学分析样品的取样差异会影响光谱与化学分析值间的关联程度。另外, 常规化学分析的准确性也直接影响着建模的准确性, 本试验的常规分析采用火焰光度计法, 由于分析方法的局限性使得操作过程中可能出现一定的随机误

差, 导致化学分析值的结果存在着误差, 一定程度上影响了模型的精确度。

近红外光谱信息量大、信号微弱、谱区重叠严重, 尤其是在测量低浓度的样品时, 需要提高仪器的信噪比来抵消这一方面的影响, 进而提高分析结果的可靠性, 所以在进行分析之前一般要对光谱数据进行预处理。

受收集材料的影响, 本试验所用材料数量充足, 但是钾的含量(干基)大多分布在 1%~2%之间, 范围较狭窄, 样品代表性有所局限, 对于建模有一定的影响, 今后应陆续补充材料, 增加样品的代表性, 扩大供试样品钾含量的范围, 从而完善该模型。

本试验建立了马铃薯块茎钾含量的近红外模型, 并对该模型的准确性进行了检验。结果表明: 钾含量定标方程的 SECV 值为 0.072, 而 1-VR 值为 0.881, 较接近 1, 钾含量的验证参数 SEP(C)值为 0.080, RSQ 值为 0.866, 说明所建模型较好, 具有一定的实用价值, 可以将其用于马铃薯育种过程中大量材料的筛选工作, 加速马铃薯育种进程。但所建模型还有很大完善的空间, 今后需逐步对该模型进行优化, 进一步提高它的预测能力。

[参 考 文 献]

- [1] 曹慧, 王孝威, 付循成. 高等植物的钾营养[J]. 北方园艺, 2008 (2): 48-51.
- [2] Gething P A. 主要作物的推荐施钾技术[M]. 北京: 北京农业大学出版社, 1993: 9-10.
- [3] 张福锁. 植物营养生态生理学和遗传学[M]. 北京: 中国科学技术出版社, 1993: 150-151.
- [4] 胡笃敬, 董任瑞, 葛旦之. 植物钾营养的理论与实践[M]. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1993: 202-203.
- [5] Munson R D. 农业中的钾[M]. 范钦祯等译. 北京: 科学出版社, 1995: 389-390.
- [6] 哈里斯 P M. 马铃薯改良的科学基础[M]. 蒋先明等译. 北京: 农业出版社, 1984: 155-185.
- [7] Ciurezak E W. Use of near infrared spectroscopy in cereal products[J]. Food Testing and Analysis, 1995, 5: 35-39.
- [8] 陆艳婷, 俞法明, 严文潮, 等. 籼稻品质分析的近红外光谱模型建立及其应用研究[J]. 生物数学学报, 2010, 25(1): 159-165.
- [9] 刘岱松, 金兰淑, 杨朝辉, 等. 烤烟烟叶钾含量的近红外光谱法快速测定[J]. 土壤通报, 2010, 41(2): 417-419.
- [10] 张永成, 田丰. 马铃薯试验研究方法[M]. 北京: 中国农业科学技术出版社, 2007: 186-187.