

文章编号 1004-924X(2015)09-2490-07

基于拉曼光谱的三组分食用调和油快速定量检测

刘燕德*, 靳昙昙, 王海阳

(华东交通大学 光机电技术及应用研究所, 江西 南昌 330013)

摘要:应用激光拉曼光谱技术结合化学计量学方法实现了三组分食用调和油中菜籽油、花生油和芝麻油的快速定量检测。分别采用标准正态变量变换(SNV)+去趋势(de-trending)算法和正交信号校正(OSC)算法对 600~3 000 cm^{-1} 波段的原始拉曼光谱进行预处理。建立了基于非线性支持向量机(SVM)和线性偏最小二乘(PLS)回归算法的定量分析模型,并采用 19 个预测集通过外部交叉验证法对模型进行验证。实验结果显示:对含有菜籽油、花生油和芝麻油的三组分食用调和油,以 OSC 预处理后建立的线性 PLS 模型预测效果最好,其验证集决定系数 R_p^2 分别为 0.990 4, 0.965 8, 0.977 1, 均方根误差(RMSEP)分别为 0.018 8, 0.037 9, 0.026 2。研究结果表明,利用激光拉曼光谱结合化学计量学方法快速定量检测三组分食用调和油中菜籽油、花生油和芝麻油的含量具有可行性,并获得了较高的预测精度。

关键词:拉曼光谱;食用调和油;支持向量机;偏最小二乘;定量检测模型

中图分类号: O657.373; TS225.1 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20152309.2490

Rapid quantitative determination of components in ternary blended edible oil based on Raman spectroscopy

LIU Yan-de*, JIN Tan-tan, WANG Hai-yang

(*Institute of Optics-mechanics-electronics Technology and Application,*
East China Jiaotong University, Nanchang 330013, China)

* *Corresponding author, E-mail: jxliuyd@163.com*

Abstract: The rapeseed oil, peanut oil and sesame oil contents in ternary blended edible oil were measured quantitatively by laser Raman spectroscopy combined with the chemometric resolution method. Two kinds of pretreatment methods called Standard Normal Variate(SNV)+de-trending and Orthogonal Signal Correction(OSC) were used to process the original Raman spectra at 600—3 000 cm^{-1} , respectively. The quantification calibration models based on nonlinear Support Vector Machine(SVM) and linear Partial Least Squares (PLS) for the rapeseed oil, peanut oil and sesame oil were established, and nineteen prediction samples were predicted using the external cross-validation to verify the accuracy of these models. The results show that linear PLS model after the OSC spectral processing obtains the best result for ternary blended edible oil containing rapeseed oil, peanut oil and sesame oil. The determination coefficients(R_p^2) of the prediction are 0.990 4, 0.965 8, 0.977 1 and Root Mean Square Error of Prediction (RMSEP) are 0.018 8, 0.037 9, 0.026 2, respectively. The

收稿日期: 2015-03-07; **修订日期:** 2015-05-21.

基金项目: 国家自然科学基金项目资助(No. 61178036, No. 31160250); 江西省光电检测工程技术研究中心资助项目(No. 赣科发财字[2012]155号)

research results indicate that laser Raman spectroscopy combined with chemometric resolution method can be used for the determination of the contents for rapeseed oil, peanut oil and sesame oil in ternary blended edible oil, and can achieve excellent prediction precision.

Key words: Raman spectroscopy; blended edible oil; Support Vector Machine(SVM); Partial Least Square(PLS); quantitative determination model

1 引言

食用调和油又称高合油,它是由两种以上经精炼的食用油按比例调配制成的。常见的调和油主要由菜籽油、大豆油、花生油、芝麻油等几种油按一定比例调和而成。虽然食用油都富含不饱和脂肪酸和维生素E,但不同油品的营养价值、微量元素等都有一定差别,而调和油则能够扬长避短,使营养均衡化,从而有益于人们的健康。常见食用调和油的检测方法主要有三维荧光光谱法^[1]、近红外光谱法^[2-3]、气相色谱法^[4]等,这些方法虽然具有检测快、无损伤等优点,但测量所需样品较多、准确度不高、操作流程繁琐且对检测人员的专业技能要求较高。因此,研究开发一种准确、便捷的食用调和油检测方法对食用油的质量管理及市场监测具有重要意义。

激光拉曼光谱技术作为一种快速、准确、高效的定性定量分析方法,广泛应用于物理化学、生物医学、考古学等诸多领域^[5]。目前,拉曼光谱技术在食用油定性定量检测方面已取得了一系列的研究成果。GOUVINHAS^[6]等使用拉曼光谱表征了从3个品种的橄榄在不同成熟阶段所提取的特级初榨橄榄油,并结合化学计量学方法(主成分分析、判别分析、主成分回归和偏最小二乘回归)来评估和统计差异品种及其成熟过程,所建橄榄油的过氧化值和游离酸度的校正模型和预测模型的相关系数均大于0.933。NUNES^[7]等测量了200~1800 cm⁻¹波段的拉曼光谱,并结合偏最小二乘法(Partial Least Square, PLS)建立了大豆中蛋白质含量和含油量的预测模型,其中蛋白质含量的最优PLS模型的R_p²和SEP分别为0.916和0.636%,含油量的最优PLS模型的R_p²和SEP分别为0.872和0.759%。董海胜^[8]等以大豆油、橄榄油、花生油、芝麻油及其调和油为实验对象,采集250~2400 cm⁻¹的激光拉曼光谱,并

结合PLS建立植物油碘值预测模型,与传统韦氏法测得的碘值相对比,取得了较好的检测结果。不过以上研究均针对食用油成分,而将激光拉曼光谱技术应用于调和油的定量分析比较少见。本文分别用非线性的支持向量机(Support Vector Machine, SVM)回归算法和线性的PLS回归算法对现榨的三组分食用调和油(菜籽油、花生油、芝麻油)的各组分含量进行了定量分析,为激光拉曼光谱技术快速无损检测食用调和油含量提供参考。

2 材料与方 法

2.1 实验样品及分类

实验将现压榨菜籽油、花生油、芝麻油置于室温中,并配制成各含量体积比不同的调和油样品77份,如表1所示,每份1 mL置于试剂管中,在微型振荡器上充分混匀。

2.2 激光拉曼光谱采集

采用德国布鲁克公司生产的SENTERRA型激光拉曼光谱仪采集调和油光谱,仪器配备的是Olympus BX51光学显微镜,激光功率为10 mW,激光波长为785 nm,物镜的放大倍数选用10,可测光谱为90~3500 cm⁻¹,分辨率为9~15 cm⁻¹,扫描3次取平均值,每次积分时间为30 s。

检测时,用银勺取少量样品放置于激光拉曼光谱仪的实验平台上,调整焦距采集拉曼光谱,结合OPUS 6.5软件对每个浓度样品采集5条拉曼光谱。采用Origin 8.0画图软件和Unscrambler 10.3化学计量学分析软件处理所得的样品光谱。由于测量到的光谱在90~3500 cm⁻¹存在较大的噪音,因此本研究选用特征峰段比较集中的波段600~3000 cm⁻¹。图1为本次试验77个样品在600~3000 cm⁻¹波段的原始平均拉曼光谱,其中1065, 1265, 1300, 1439, 1655和2852 cm⁻¹为6个明显的特征峰。

表 1 77 份调和油样品的组分体积比

Tab. 1 Volume ratio of components in 77 blended edible oil samples

样品	真值含量/mL			样品	真值含量/mL			样品	真值含量/mL		
	菜籽油	花生油	芝麻油		菜籽油	花生油	芝麻油		菜籽油	花生油	芝麻油
No. 1	0	0	1	No. 27	0.25	0.25	0.5	No. 53	0.4	0.35	0.25
No. 2	0	0.5	0.5	No. 28	0.25	0.3	0.45	No. 54	0.4	0.4	0.2
No. 3	0	0.9	0.1	No. 29	0.25	0.35	0.4	No. 55	0.4	0.5	0.1
No. 4	0	1	0	No. 30	0.25	0.4	0.35	No. 56	0.45	0.2	0.35
No. 5	0.1	0	0.9	No. 31	0.25	0.45	0.3	No. 57	0.45	0.25	0.3
No. 6	0.1	0.1	0.8	No. 32	0.25	0.5	0.25	No. 58	0.45	0.3	0.25
No. 7	0.1	0.2	0.7	No. 33	0.25	0.55	0.2	No. 59	0.45	0.35	0.2
No. 8	0.1	0.3	0.6	No. 34	0.3	0.1	0.6	No. 60	0.5	0	0.5
No. 9	0.1	0.4	0.5	No. 35	0.3	0.2	0.5	No. 61	0.5	0.1	0.4
No. 10	0.1	0.5	0.4	No. 36	0.3	0.25	0.45	No. 62	0.5	0.2	0.3
No. 11	0.1	0.6	0.3	No. 37	0.3	0.3	0.4	No. 63	0.5	0.25	0.25
No. 12	0.1	0.7	0.2	No. 38	0.3	0.35	0.35	No. 64	0.5	0.3	0.2
No. 13	0.1	0.8	0.1	No. 39	0.3	0.4	0.3	No. 65	0.5	0.4	0.1
No. 14	0.1	0.9	0	No. 40	0.3	0.45	0.25	No. 66	0.5	0.5	0
No. 15	0.2	0.1	0.7	No. 41	0.3	0.5	0.2	No. 67	0.55	0.2	0.25
No. 16	0.2	0.2	0.6	No. 42	0.3	0.6	0.1	No. 68	0.55	0.25	0.2
No. 17	0.2	0.25	0.55	No. 43	0.35	0.2	0.45	No. 69	0.6	0.1	0.3
No. 18	0.2	0.3	0.5	No. 44	0.35	0.25	0.4	No. 70	0.6	0.2	0.2
No. 19	0.2	0.35	0.45	No. 45	0.35	0.3	0.35	No. 71	0.6	0.3	0.1
No. 20	0.2	0.4	0.4	No. 46	0.35	0.35	0.3	No. 72	0.7	0.1	0.2
No. 21	0.2	0.45	0.35	No. 47	0.35	0.4	0.25	No. 73	0.7	0.2	0.1
No. 22	0.2	0.5	0.3	No. 48	0.35	0.45	0.2	No. 74	0.8	0.1	0.1
No. 23	0.2	0.55	0.25	No. 49	0.4	0.1	0.5	No. 75	0.9	0	0.1
No. 24	0.2	0.6	0.2	No. 50	0.4	0.2	0.4	No. 76	0.9	0.1	0
No. 25	0.2	0.7	0.1	No. 51	0.4	0.25	0.35	No. 77	1	0	0
No. 26	0.25	0.2	0.55	No. 52	0.4	0.3	0.3				

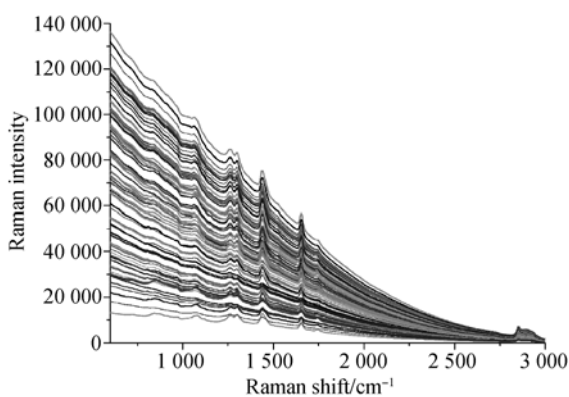


图 1 拉曼原始光谱图

Fig. 1 Original Raman spectra

2.3 数据处理及分析

为提取光谱中的有效信息,需要对 $600 \sim 3\,000 \text{ cm}^{-1}$ 波段的原始拉曼光谱进行预处理。本

文采用标准正态变量变换 (Standard Normal Variate, SNV) + 去趋势 (de-trending) 算法和正交信号校正 (Orthogonal Signal Correction, OSC) 算法两种预处理方法。SNV 用来减小颗粒的不均匀性,校正因散射引起的光谱差异,具体是将原始光谱数据减去平均光谱数据,再除以该光谱的标准方差,即将原始光谱进行标准正态化。de-trending 很少单独使用,一般在 SNV 光谱预处理后进行,具体是将 SNV 后的光谱数据减去其拟合的一条趋势线,即可去除趋势^[9]。SNV + de-trending 预处理结果如图 2 所示。OSC 算法的基本原理是滤除光谱矩阵中与浓度无关的信号,然后将浓度矩阵和光谱矩阵进行正交处理,即进行多元校正,以简化模型并提高其预测能力^[10]。OSC 预处理结果如图 3 所示。

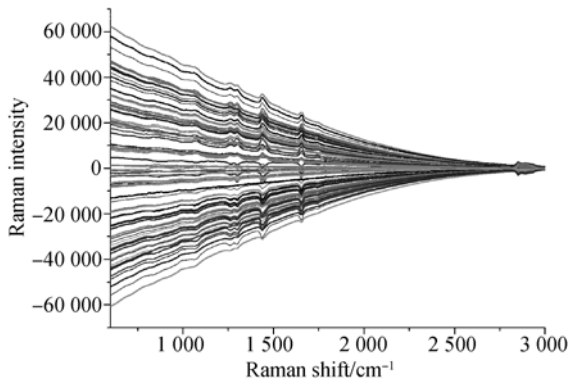


图 2 标准正态变量变换+去趋势预处理后的拉曼谱图
Fig.2 Raman spectra after pretreatment by SNV+de-trending

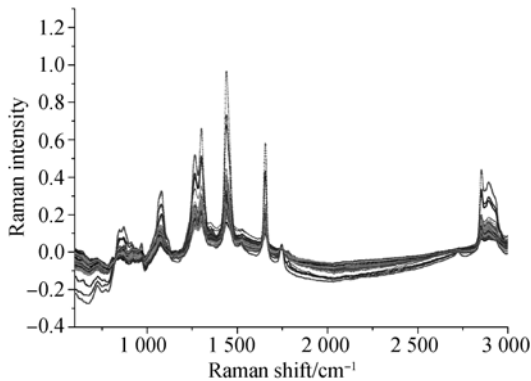


图 3 正交信号校正预处理后的拉曼谱图

Fig.3 Raman spectra after pretreatment by OSC

3 调和油各组分定量模型的建立及预测

3.1 SVM 定量检测模型的建立及预测

SVM 作为一种非线性模式识别方法,对解决小样本、高维度、非线性等问题具有独特的优势^[11]。近年来,SVM 已被应用到激光拉曼光谱的定量分析上^[12-13]。本文选择建模效果较好的 Linear 和径向基函数(Radial Basic Fuction, RBF)两种核函数,这两种核函数均需要确定模型的惩罚因子 C 和不敏感参数 γ ,采用 The Unscrambler 10.3 软件自带的 Grid-search 和留一交叉验证法进行参数优化,从而确定 SVM 的最优模型。基于 SVM 的菜籽油、花生油和芝麻油含量在 SNV+de-trending 和 OSC 两种预处理方法下的最佳主成分数 Factor、模型校正集决定系数 R_c^2 及均方根误差 RMSEC、模型预测集相关系数 R_p^2 及均方根误差 RMSEP 如表 2 所示。

表 2 基于两种核函数的 SVM 模型的三组分调和食用油中各组分预测结果

Tab.2 Prediction results of components in ternary blended edible oil based on SVM with two kinds of kernel functions

测量参数	光谱预处理	核函数	惩罚因子 C	不敏感参数 $\gamma(\times 10^{-4})$	支持向量机 SVMs	校正集决定系数 R_c^2	校正集均方根误差 RMSEC	验证集决定系数 R_p^2	验证集均方根误差
菜籽油	NO	Linear	0.278 3	1	40	0.867 8	0.077 4	0.837 6	0.085 0
		RBF	10^4	2.7	37	0.942 9	0.051 5	0.827 6	0.092 1
	SNV+de-trending	Linear	0.278 3	1	42	0.940 2	0.052 5	0.727 5	0.122 5
		RBF	10^4	2.7	28	0.972 4	0.037 0	0.914 8	0.062 6
	OSC	Linear	0.278 3	1	42	0.953 2	0.046 2	0.865 5	0.080 3
		RBF	10^3	2	35	0.966 0	0.038 8	0.907 3	0.064 2
花生油	NO	Linear	0.129 2	1	36	0.865 4	0.078 3	0.841 0	0.084 8
		RBF	10^3	1.6	37	0.922 1	0.059 3	0.898 1	0.068 1
	SNV+de-trending	Linear	0.129 2	1	46	0.896 2	0.068 5	0.614 4	0.166 5
		RBF	10^3	7.7	28	0.972 8	0.036 5	0.830 2	0.090 5
	OSC	Linear	0.129 2	1	39	0.866 5	0.083 3	0.846 4	0.084 8
		RBF	10^3	2.8	39	0.926 3	0.057 9	0.885 9	0.072 0
芝麻油	NO	Linear	0.215 4	1	36	0.808 9	0.095 6	0.805 9	0.091 2
		RBF	10^5	5.9	25	0.968 4	0.036 4	0.872 0	0.072 9
	SNV+de-trending	Linear	0.215 4	1	44	0.944 4	0.048 6	0.770 5	0.101 3
		RBF	10^5	5.9	21	0.968 9	0.036 0	0.887 4	0.068 5
	OSC	Linear	0.215 4	1	41	0.879 0	0.074 8	0.842 7	0.080 9
		RBF	106	3.6	37	0.950 7	0.045 4	0.824 9	0.0899

由表 2 可知,在采用非线性 SVM 建模时,最优菜籽油 SVM 模型对应的预处理方法为 SNV+de-trending,核函数为 RBF,C 和 γ 分别为 10^4 和 2.7,其支持向量机个数为 28,校正集和验证集的决定系数分别为 0.972 4,0.914 8,校正集和验证集的均方根误差分别为 0.037,0.062 6;最优花生油 SVM 模型不需要光谱预处理,核函数为 RBF,C 和 γ 分别为 10^3 和 1.6,其支持向量机个数为 37,校正集和验证集的决定系数分别为 0.922 1,0.898 1,校正集和验证集的均方根误差分别为 0.059 3,0.068 1;最优芝麻油 SVM 模型对应的预处理方法为 SNV+de-trending,核函数为 RBF,C 和 γ 分别为 10^5 和 5.9,其支持向量机个数为 21,校正集和验证集的决定系数分别为 0.968 9,0.887 4,校正集和验证集的均方根误差分别为 0.036,0.068 5。综上,三组分调和油中菜籽油、花生油和芝麻油各含量的 SVM 建模时,RBF 核函数的预测精度比 Linear 核函数要高。该结果为油脂含量的预测提供了参考。

表 4 基于 PLS 模型的三组分调和食用油中各组分预测结果

Tab. 4 Prediction results of components in ternary blended edible oil based on PLS

测量参数	光谱预处理	最佳主成分数 Factor	校正集决定 系数 R_c^2	校正集均方根 误差 RMSEC	验证集决定 系数 R_v^2	验证集均方根 误差 RMSEP
菜籽油	NO	9	0.982 8	0.275 7	0.979 1	0.027 7
	SNV+de-trending	11	0.977 6	0.031 5	0.976 2	0.029 5
	OSC	9	0.991 1	0.019 9	0.990 4	0.018 8
花生油	NO	9	0.967 3	0.038 4	0.955 4	0.043 3
	SNV+de-trending	9	0.941 5	0.051 3	0.930 1	0.054 2
	OSC	8	0.967 6	0.038 2	0.965 8	0.037 9
芝麻油	NO	9	0.974 7	0.032 4	0.973 5	0.028 2
	SNV+de-trending	8	0.938 9	0.050 4	0.935 1	0.044 2
	OSC	9	0.977 4	0.030 6	0.977 1	0.026 2

表 4 所示为基于 PLS 的菜籽油、花生油和芝麻油含量不经过预处理和经过 SNV+de-trending 和 OSC 两种预处理方法下的最佳主成分数 Factor、模型校正集决定系数 R_c^2 及均方根误差 RMSEC、模型预测集相关系数 R_v^2 及均方根误差 RMSEP。 R_c^2 和 R_v^2 体现模型预测值和真实值的相关性,越接近 1 越好。RMSEC 和 RMSEP 体现模型的预测效果,两值越小越好^[15]。由此可

3.2 PLS 定量检测模型的建立及预测

PLS 算法是一种经典的定量校正线性建模方法,它将光谱矩阵和数值矩阵分解成特征向量,同时考虑两者的相互关系再进行线性回归分析^[14]。这里使用 SVM 算法建立非线性校正模型后,再建立 PLS 线性定量分析模型进行对比,然后通过外部交叉验证法对模型进行验证。本实验采用 58 份作为定标样品集,用于建立定标模型;19 份作为验证集对模型预测能力进行检验(见表 3)。

表 3 各组分验证集样品编号

Tab. 3 Sample numbers of validation set of each component

油品	验证集/No.
菜籽油	2,6,10,14,18,22,26,30,34,38,42,46,50, 54,58,62,66,70,74
花生油	3,5,6,18,19,20,22,24,27,35,40,52,53, 54,57,61,62,66,76
芝麻油	9,13,15,16,20,24,30,31,36,38,40,49,50, 54,57,63,66,70,71

知,基于 PLS 模型的菜籽油、花生油、芝麻油含量的 OSC 预处理后的建模效果比其他预处理后的建模效果要好,模型的精度和稳定性更高^[16]。

同理,将表 2 和表 4 对比得到各组分经 OSC 预处理后的线性 PLS 建模均比同等条件下非线性 SVM 建模效果好,即三组分调和油中各组分含量的 PLS 线性建模方法优于 SVM 非线性建模

方法。因此经 OSC 预处理后 PLS 法所建立的模型为最佳模型。

图 4(a)、(b)、(c)分别为三组分调和油的菜籽油、花生油和芝麻油含量的最佳模型预测集中实际值与预测值之间的相关性。在该最佳模型中,菜籽油含量的校正集和验证集的决定系数分

别为 0.991 1, 0.990 4, 均方根误差分别为 0.019 9, 0.018 8;花生油含量的校正集和验证集的决定系数分别为 0.977 4, 0.977 1, 均方根误差分别为 0.030 6, 0.026 2;芝麻油含量的校正集和验证集的决定系数分别为 0.967 6, 0.965 8, 均方根误差分别为 0.038 2, 0.037 9。

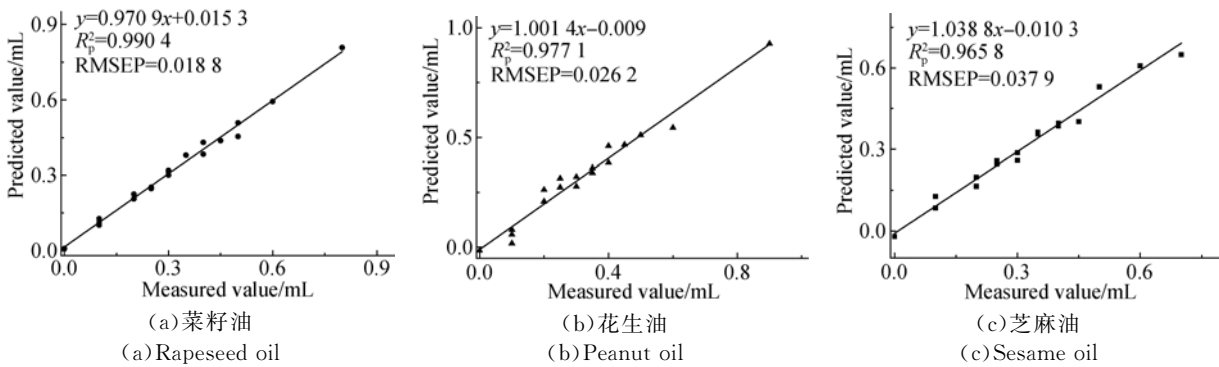


图 4 最佳模型预测集中实际值与预测值之间的相关性

Fig. 4 Correlation between actual and predicted values of prediction set in optimized models

4 结论

本文应用激光拉曼光谱技术对三组分食用调和油中各组分进行了快速定量检测。运用两种预处理方法对拉曼光谱数据进行预处理,滤除非相关因素的干扰,提高模型信噪比,建立了调和油含量的最优定量分析模型,并通过外部交叉验证法验证模型,取得了较高的精度。实验表明,经

OSC 预处理后 PLS 法建立的模型为食用调和油含量的最佳模型。应用激光拉曼光谱技术检测调和油各组分含量具有可行性。

由于本实验采用调和油样品由现压榨纯油调制而成,并且样品数量较少,可能会影响模型的适用性,因此,对市场上的食用调和油以及多样品、高分组调和油的激光拉曼光谱定量检测研究将是下一步工作的重点。

参考文献:

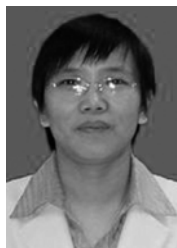
- [1] 纳鹏军, 马晓波. 调和油中掺杂地沟油的检测方法[J]. 光谱实验室, 2012, 29(6):3809-3812.
NA P J, MA X B. Determination of illegal cooking oil mixed with blend oil [J]. *Chinese Journal of Spectroscopy Laboratory*, 2012, 29(6):3809-3812. (in Chinese)
- [2] 刘福莉, 陈华才. 近红外透射光谱法检测三组分食用调和油含量的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2009, 29(8):2099-2102.
LIU F L, CHEN H C. Rapid determination of the components in ternary blended edible oil using near infrared transmission spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2009, 29(8):2099-2102. (in Chinese)
- [3] 李娟, 范璐, 毕艳兰, 等. 红外、近红外光谱-簇类

的独立软模式方法识别植物调和油脂[J]. 分析化学, 2010, 38(4):475-482.

- LI J, FAN L, BI Y L, *et al.*. Combining infrared, near infrared with soft independent modeling of class analogy for identification of vegetable blend oil [J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2010, 38(4):475-482. (in Chinese)
- [4] CRISTINA R S, FEDERICO M, LUIS C R, *et al.*. Quantification of blending of olive oils and edible vegetable oils by triacylglycerol fingerprint gas chromatography and chemometric tools[J]. *Journal of Chromatography B*, 2012, 910(1):71-77.
- [5] 吴斌, 骆晓森, 陆建, 等. 用激光拉曼频移测定乙醇水溶液的浓度[J]. 光学精密工程, 2011, 19(2):392-396.
WU B, LUO X S, LU J, *et al.*. Determination of ethanol concentration of aqueous solution by using

- Raman stretching frequency shifts [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2011, 19(2):392-396. (in Chinese)
- [6] GOUVINHAS I, MACHADO N, CARVALHO T, *et al.*. Short wavelength Raman spectroscopy applied to the discrimination and characterization of three cultivars of extra virgin olive oils in different maturation stages [J]. *Talanta*, 2015, 132(15):829-835.
- [7] NUNES C A. Vibrational spectroscopy and chemometrics to assess authenticity, adulteration and intrinsic quality parameters of edible oils and fats [J]. *Food Research International*, 2014, 60:255-261.
- [8] 董海胜, 臧鹏, 李云鹏, 等. 激光拉曼光谱结合偏最小二乘法快速测定植物油碘值[J]. *光电子·激光*, 2013, 24(7):1370-1374.
- DONG H SH, ZANG P, LI Y P, *et al.*. Fast quantitative determination of iodine value in vegetable oil by using laser Raman spectroscopy and PLS [J]. *Journal of Optoelectronics · Laser*, 2013, 24(7):1370-1374. (in Chinese)
- [9] 褚小立. 化学计量学方法与分子光谱分析技术 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2011: 55-83.
- CHU X L. *Molecular Spectroscopy Analytical Technology Combined with Chemometrics and its Applications* [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2011: 55-83. (in Chinese)
- [10] 张小超, 吴静珠, 徐云. 近红外光谱分析技术及其在现代农业中的应用 [M]. 北京: 电子工业出版社, 2012:104-105.
- ZHANG X CH, WU J ZH, XU Y. *Near Infrared Spectroscopy Technology and its Application in Modern Agriculture* [M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2012:104-105. (in Chinese)
- [11] 丁世飞, 齐丙娟, 谭红艳. 支持向量机理论与算法研究综述 [J]. *电子科技大学学报*, 2011, 40(1): 2-10. (in Chinese)
- DING SH F, QI B J, TAN H Y. An overview on theory and algorithm of support vector machines [J]. *Journal of University of Electronic Science and Technology of China*, 2011, 40(1):2-10. (in Chinese)
- [12] 李冰宁, 武彦文, 汪雨, 等. 拉曼光谱结合模式识别方法用于大豆原油掺伪的快速判别 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, 34(10):2696-2700.
- LI B N, WU Y W, WANG Y, *et al.*. Raman spectroscopy combined with pattern recognition methods for rapid identification of crude soybean oil adulteration [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, 34(10):2696-2700. (in Chinese)
- [13] FAN Y X, LAI K Q, RASCO B A, *et al.*. Determination of carbaryl pesticide in Fuji apples using surface-enhanced Raman spectroscopy coupled with multivariate analysis [J]. *LWT-Food Science and Technology*, 2015, 60(1):352-357.
- [14] 许禄, 邵学广. 化学计量学方法 [M]. 北京: 科学出版社, 2004:31-40.
- XU L, SHAO X G. *Chemometric Methods* [M]. Beijing: Science Press, 2004:31-40. (in Chinese)
- [15] 李水芳, 张欣, 李姣娟, 等. 拉曼光谱无损检测蜂蜜中的果糖和葡萄糖含量 [J]. *农业工程学报*, 2014, 30(6):249-254.
- LI SH F, ZHANG X, LI J J, *et al.*. Non-destructive detecting fructose and glucose content of honey with Raman spectroscopy [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2014, 30(6):249-254. (in Chinese)
- [16] 刘燕德, 周延睿, 潘圆媛. 基于最小二乘支持向量机的辣椒可溶性固形物和维生素 C 含量近红外光谱检测 [J]. *光学精密工程*, 2014, 22(2):281-288.
- LIU Y D, ZHOU Y R, PAN Y Y. Determination of soluble solids content and vitamin C of fresh peppers based on NIR spectrometry and least squares support vector machines [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2014, 22(2):281-288. (in Chinese)

作者简介:



刘燕德(1967—),女,江西泰和人,博士,教授,博士生导师,2006年于浙江大学获得博士学位,主要从事农产品智能无损检测技术的研究。E-mail: jxliuyd@163.com



靳芸芸(1990—),女,河南永城人,硕士研究生,主要从事食用油光电检测方面的研究。E-mail: tantanjin@126.com