

# 区间偏最小二乘法结合拉曼光谱测定 猪肉皮下脂肪的碘值

赵 芳, 彭彦昆

中国农业大学工学院, 北京 100083

**摘要** 碘值是评价脂肪酸品质的重要指标,为探究拉曼光谱技术结合化学计量学方法对完整脂肪样本中脂肪酸不饱和程度测定的可行性,以猪肉皮下脂肪为研究对象,利用实验室自主搭建的拉曼光谱检测系统,获取其 300~2000  $\text{cm}^{-1}$  波段的光谱,进而利用该光谱进行预处理方法的优化研究和碘值相关变量的优选研究,并以传统韦氏滴定法测定得到的碘值为参考值,采用偏最小二乘法建立了完整脂肪样本中碘值的校正模型。结果表明:8 次多项式拟合基线校正为最优预处理方法;经区间偏最小二乘法筛选得到的优选变量为 1106~1470  $\text{cm}^{-1}$ ;结合最优预处理方法和优选变量建立碘值预测模型,其预测集相关系数  $R_p$  和预测均方根误差(RMSEP)分别为 0.9463 和  $2.5391 \times 10^{-2}$ 。研究结果证明,优选的拉曼光谱变量可用于完整脂肪中碘值的快速无损测定,为基于拉曼光谱的猪胴体脂肪酸不饱和程度的在线、快速、无损检测提供了理论依据。

**关键词** 光谱学; 碘值; 拉曼光谱; 区间偏最小二乘法; 猪皮下脂肪

中图分类号 O657.37

文献标识码 A

doi: 10.3788/CJL201744.1111001

## Measurement of Iodine Value of Pork's Subcutaneous Adipose Tissue by Interval Partial Least Square and Raman Spectroscopy

Zhao Fang, Peng Yankun

College of Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China

**Abstract** Iodine value is an important index for evaluating quality of the fatty acid. In order to research the feasibility of measuring unsaturation degree of fatty acid of intact fat sample by using the Raman spectroscopy and chemometrics method, we use pork's subcutaneous adipose tissue as research object to obtain the Raman spectra in the wavelength range of 300-2000  $\text{cm}^{-1}$  with utilization of self-constructed Raman spectroscopy detection system. Both of preprocessing methods and iodine value related variables are optimized. Using the iodine value obtained by traditional Wijs titration as reference, we build the calibration model of iodine value in fat sample by partial least square algorithm. The experimental results show that the optimal preprocessing method is the 8<sup>th</sup> order polynomial fitting method. The optimal combination band, 1106-1470  $\text{cm}^{-1}$ , is obtained by interval partial least square method. Based on the optimized pretreatment method and selected variables, the iodine value prediction model is developed, the prediction set coefficient ( $R_p$ ) and root mean square error of prediction (RMSEP) of the model are 0.9463 and  $2.5391 \times 10^{-2}$ , respectively. The study results indicate that optimized variable can be used in rapid and nondestructive measurement of iodine value of intact pork fat, which provides theoretical basis for on-line, rapid, and nondestructive measurement of unsaturation degree of fatty acid in pig carcasses based on Raman spectroscopy.

**Key words** spectroscopy; iodine value; Raman spectroscopy; interval partial least square; pork's subcutaneous adipose tissue

**OCIS codes** 300.6450; 060.2310; 060.3510; 070.4790

收稿日期: 2017-06-05; 收到修改稿日期: 2017-07-09

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFD0401205)

作者简介: 赵 芳(1993—),女,硕士研究生,主要从事农畜产品品质安全无损检测方面的研究。E-mail: iwmfl@sina.cn

导师简介: 彭彦昆(1960—),男,教授,博士生导师,主要从事农畜产品品质安全检测技术及装置方面的研究。

E-mail: ypeng@cau.edu.cn(通信联系人)

# 1 引 言

脂肪酸的组成及含量对肉的品质具有重要影响,并与人体的健康密切相关。脂肪酸按饱和程度分为饱和脂肪酸与不饱和脂肪酸。有研究表明,饱和脂肪酸的含量越高,肉的品质越好,但过量摄入饱和脂肪酸会导致动脉粥样硬化,增加胆固醇含量,对人体健康不利。不饱和脂肪酸是产生肉香味的重要前提物质之一,能为人体提供必需的营养物质。过多的不饱和脂肪酸会影响肉品的加工质量,易导致肉品发生脂肪氧化,产生腐败味<sup>[1-3]</sup>。因此,只有当饱和脂肪酸和不饱和脂肪酸的比例适当时,才能在保证肉品品质的同时亦利于其贮藏和加工。碘值是指 100 g 油脂加成反应所需碘的质量,是衡量油脂不饱和程度的一个重要指标。碘值越大,脂肪酸的不饱和程度越高,即不饱和脂肪酸的含量越高。因此,可以通过碘值初步评价猪肉的加工品质和营养品质。目前,碘值的测定主要采用韦氏滴定法,但该方法具有试剂消耗多、操作繁琐、耗时长和破坏样品等缺点,不适合于实时无损检测。

拉曼光谱能提供分子的转动和振动信息,可以实现分子中某些化学键和官能团的指纹鉴别<sup>[4]</sup>。目前,拉曼光谱技术已广泛地应用于食品安全检测和品质检测中<sup>[5-6]</sup>,已有研究人员基于拉曼光谱对脂肪酸的成分和含量进行了研究。Afseth 等<sup>[7]</sup>利用拉曼光谱技术,采用最小二乘回归(PLSR)法建立了完整鲑鱼肌肉组织、绞碎鲑鱼肌肉组织和提炼的鱼油中碘值的预测模型;结果表明,鱼油中碘值的预测精度最高,相关系数为 0.874,交叉均方根误差为  $2.5 \times 10^{-2}$ 。Beattie 等<sup>[8]</sup>将拉曼光谱技术首次应用于完整的猪肉、牛肉、羊肉和肌肉脂肪等组织中,分别建立了单个脂肪酸含量、饱和脂肪酸及多不饱和脂肪酸含量与光谱之间的关系;结果表明,多不饱和脂肪酸的预测精度最高,决定系数( $R^2$ )和预测均方根误差(RMSEP)分别为 0.97 和 4%。国内研究人员大多将拉曼光谱技术应用于检测植物油中脂肪酸的含量,而用于检测肉品中脂肪酸含量的研究报道还很少。董海胜等<sup>[9]</sup>探讨了将拉曼光谱技术与化学计量学结合起来用于快速、无损测定植物油中碘值的可行性。王翔等<sup>[10]</sup>利用拉曼光谱技术分别研究了植物油和动物脂肪油的光谱特性,比较和分析了植物油和动物脂肪的光谱,提出了一种根据拉曼光谱识别不同油品的有效方法。

上述研究为利用拉曼光谱技术测定油脂中的碘值提供了理论基础和方法依据,但是采用拉曼光谱技术测定猪肉皮下完整脂肪样品中碘值的研究还鲜见报道。本文基于拉曼光谱技术,结合区间偏最小二乘法探究了完整脂肪样本中脂肪酸的不饱和程度,即碘值测定的可行性,提出了一种无损、快速测定完整脂肪中碘值的方法,为猪肉品质的快速判定奠定了基础。

## 2 材料与方 法

### 2.1 实验仪器

实验采用实验室自主搭建的拉曼光谱检测系统<sup>[11]</sup>,该系统主要包括 Raman Explorer 785 拉曼光谱仪、CCD 相机、10785MM0350MS 激光器、光纤和探头等。该系统的光谱范围为  $0 \sim 2400 \text{ cm}^{-1}$ ,激光波长为 785 nm。其他仪器还包括 GZX-9070MBE 数显鼓风干燥箱和 MJ-BL25B2 搅拌机。

### 2.2 实验材料

为了防止脂肪酸(尤其是不饱和脂肪酸)通过游离基链式反应与空气中的氧结合发生自动氧化,从北京各超市购买了 41 份带皮猪肉;运至实验室后,对样品进行去皮处理,并切割成  $60 \text{ mm} \times 45 \text{ mm} \times 18 \text{ mm}$  的皮下脂肪样品;将样品分别装入双层密封袋内,并在密封袋上进行标记,然后将其置于  $-20 \text{ }^\circ\text{C}$  的冰箱中冷藏。将样品按照 3:1 的比例随机划分为校正集与验证集,校正集包含 30 个样本,预测集包含 11 个样本。试验步骤如图 1 所示。

实验所用试剂主要为碘化钾、淀粉溶液、环己烷、无水硫酸钠、硫代硫酸钠、冰乙酸和一氯化碘,均为分析纯。

### 2.3 拉曼光谱采集

打开拉曼光谱检测系统,待 CCD 相机冷却到  $-55 \text{ }^\circ\text{C}$  时设置检测系统的参数:激光功率为 450 mW,曝光时间为 5 s,拉曼探针到样品的距离为 7 mm。对每个样品的上下表面分别进行光谱采集,每个表面采集 3 个不同位置处的拉曼光谱,即每个样品共采集 6 条光谱曲线,将其平均值作为该样品的原始光谱曲线。

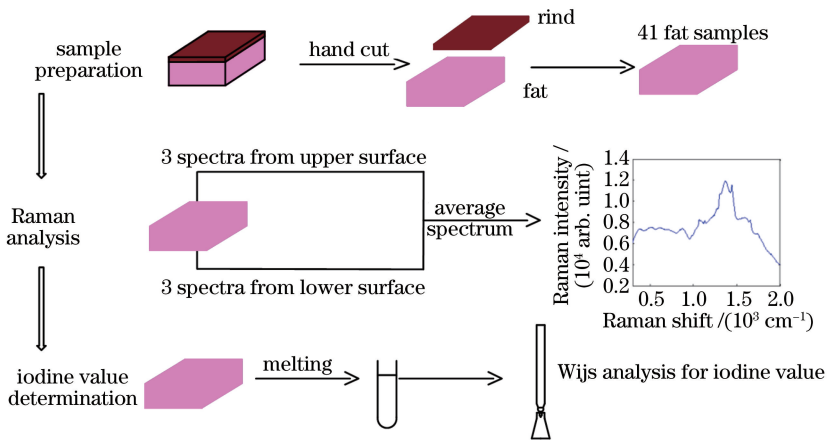


图 1 试验流程

Fig. 1 Experimental procedure

## 2.4 碘值的测定

将采集完光谱的脂肪样品用搅拌机充分搅拌至浆糊状,备用;然后按照国家标准 GB/T 15687—2008 进行油脂试样的制备。将浆糊状脂肪样品置于 75 °C 的干燥箱内进行熔化处理,熔化处理时间为 35 min,过滤得到完全澄清的油脂试样;水分会影响碘值的测定结果,因此对熔化处理后得到的油脂试样进行干燥处理:按 10 g 样品加 1~2 g 无水硫酸钠的比例加入无水硫酸钠,充分搅拌后过滤。为了防止油脂凝固和高温下无水硫酸钠失去干燥能力,整个过程在 40 °C 的干燥箱内进行。将经过上述处理的油脂样品装入 10 mL 的离心管内,然后将离心管装入密封袋内,并进行标记。为了防止油脂样品氧化,在进行碘值测定之前,油脂样品均要置于 -20 °C 的冰箱中冷藏。

碘值的测定采用国家标准 GB/T 5532—2008,即韦氏滴定法。称取约 0.2 g 的样品置于锥形瓶中,加入 20 mL 由环己烷和冰乙酸等体积混合的溶剂溶解试样,用移液管取 25 mL 韦氏试剂加入到锥形瓶中,摇匀后置于暗处;1 h 后向锥形瓶中加入 20 mL 质量浓度为 100 g·L<sup>-1</sup> 的碘化钾溶液和 150 mL 水,然后用硫代硫酸钠标准溶液滴定至浅黄色,再加入 1 mL 淀粉溶液继续滴定,直至蓝色恰好消失。同时进行空白溶液的测定。样品中碘值(碘的质量分数)的计算公式为

$$W = \frac{12.69c(V_1 - V_2)}{m}, \quad (1)$$

式中  $W$  为样品的碘值,  $c$  为硫代硫酸钠标准溶液的浓度,  $V_1$  为空白溶液消耗硫代硫酸钠标准溶液的体积,  $V_2$  为样品溶液消耗硫代硫酸钠标准溶液的体积,  $m$  为样品的质量。

## 2.5 数据分析方法

利用 MATLAB 软件对光谱数据进行预处理和建模,其中光谱预处理方法包括 Savitzky-Golay(SG)平滑、一阶导数(1D)、8 次多项式拟合基线校正和标准正态变换(SNV),分别采用全谱偏最小二乘法和区间偏最小二乘法建立完整脂肪样本碘值的校正模型,并对预测集样本进行预测,通过比较校正集相关系数  $R_c$ 、预测集相关系数  $R_p$ 、校正均方根误差(RMSEC)和 RMSEP 对模型进行评价及选择。

# 3 结果与讨论

## 3.1 样品的碘值

按照 2.4 节所述的方法测定样品的碘值,测得的结果如表 1 所示。

## 3.2 光谱数据

41 个脂肪样本的原始拉曼光谱数据如图 2 所示。拉曼光谱包含谱线数目、位移和谱带强度等信息,这些信息只与分子振动和转动能级有关,而每一种物质都有自己的特征拉曼光谱,因此可以由拉曼特征频率确定分子中的原子团和化学键<sup>[12]</sup>。为了更好地对脂肪酸的特征峰进行归属,利用 8 次多项式拟合基线校正法

表 1 脂肪样品中的碘值分布

Table 1 Distribution of iodine value in fat samples

$10^{-2}$

| Data set        | Minimum | Maximum | Mean  | Standard deviation |
|-----------------|---------|---------|-------|--------------------|
| Calibration set | 59.72   | 92.15   | 71.80 | 8.42               |
| Prediction set  | 61.09   | 83.62   | 71.43 | 7.41               |

对原始平均光谱图进行荧光背景扣除处理,结果如图 3 所示。从图 2 和图 3 可以看出,所研究的脂肪酸的特征峰主要集中在  $1000 \sim 1800 \text{ cm}^{-1}$  范围内,与文献[13-15]中脂肪酸的拉曼位移一致。其中,  $1071 \text{ cm}^{-1}$  和  $1131 \text{ cm}^{-1}$  为 C—C 伸缩振动,  $1266 \text{ cm}^{-1}$  为对称的 C—H 伸缩振动,  $1307 \text{ cm}^{-1}$  为  $\text{CH}_2$  弯曲振动,  $1446 \text{ cm}^{-1}$  为  $\text{CH}_2$  剪切振动,  $1660 \text{ cm}^{-1}$  为 C=C 伸缩振动,  $1745 \text{ cm}^{-1}$  为 C=O 伸缩振动,这些特征峰分别代表了饱和脂肪酸与不饱和脂肪酸的特征峰,因此可以通过这些谱带来定量分析脂肪的不饱和度,即碘值的大小。

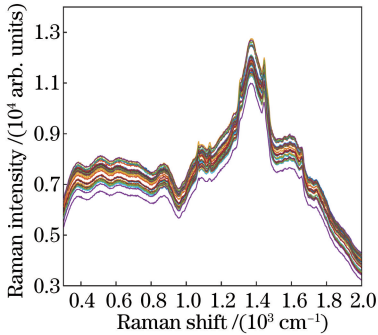


图 2 41 个猪肉脂肪样品的原始拉曼光谱

Fig. 2 Raw Raman spectra of 41 pork fat samples

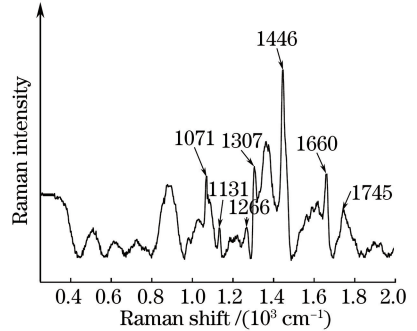


图 3 荧光背景扣除后的平均拉曼光谱

Fig. 3 Average Raman spectrum after fluorescence background removal

### 3.3 全波段偏最小二乘法的建模结果

为了建立脂肪样品的碘值预测模型,首先对采集的原始光谱数据进行预处理,以减小由仪器和外界环境产生的干扰信号的影响。主要采用 SG 平滑、一阶导数、8 次多项式拟合基线校正、标准正态变换、SG/8 次多项式拟合基线校正、8 次多项式拟合基线校正/一阶导数共 6 种预处理方法,图 4 分别为采用前 4 种方法预处理后的拉曼光谱。SG 平滑预处理可以有效去除原始光谱中的噪声,且保留着拉曼信号中的有效信息,是一种应用最广泛的去噪方法<sup>[6]</sup>。一阶导数预处理可消除背景的干扰,但可能会增加信噪比<sup>[16]</sup>。8 次多项式拟合基线校正预处理可以有效扣除荧光背景,消除仪器带来的影响<sup>[17]</sup>,最常用的校正方法大都基于多项式拟合法<sup>[11]</sup>。标准正态变换一般用来消除激光光源功率变化产生的噪声。

采集完光谱信息后,采用 2.4 节所述的方法测定碘值,在全波段( $300 \sim 2000 \text{ cm}^{-1}$ )范围内利用偏最小二乘法建立碘值的预测模型,模型的预测结果如表 2 所示。由表 2 可知:在全波段范围内,由原始光谱数据建立的偏最小二乘模型的预测结果良好,预测集相关系数  $R_p$  可达 0.9220,但 RMSEP 偏高;原始光谱经预处理后建立的预测模型的预测结果基本都有所提高,其中模型预测精度提高最显著的是 8 次多项式拟合基线校正方法预处理后的,其预测集相关系数  $R_p$  可达 0.9314, RMSEP 为  $3.0609 \times 10^{-2}$ ,并且最佳主因子数减少到 4,更有利于模型的稳定。这可能是由于采用该方法处理后得到的光谱数据有效地扣除了荧光背景,并保留了脂肪酸的有用信息。经一阶导数预处理后模型的预测精度有所降低,这可能是经导数处理后光谱的信噪比增大,从而导致预测精度下降。综上所述,利用 8 次多项式拟合基线校正为最优预处理方式。

### 3.4 区间偏最小二乘法建模结果

原始光谱数据中既包含了与待测对象品质相关的信息,也包含了一些与待测对象品质无关的信息,因此可以通过变量筛选从数据中挑选出一些最有效的变量,以提高模型的预测能力和稳健性<sup>[18]</sup>。区间偏最小二乘法<sup>[19]</sup>将原始数据的变量分为若干个等宽的子区间,然后对每个区间或几个区间的变量建立偏最小二乘模型,以交互验证均方根误差(RMSECV),选取最优变量区间。子区间宽度的划分会影响最佳波段的选择。为了获得更全面的与碘值相关性强的波段,在传统区间偏最小二乘法的基础上进行算法优化,其工作过程主要分为两个步骤。步骤 1:以 3.3 节所述的最佳预处理方法(即 8 次多项式拟合基线校正)预处理后的光谱数



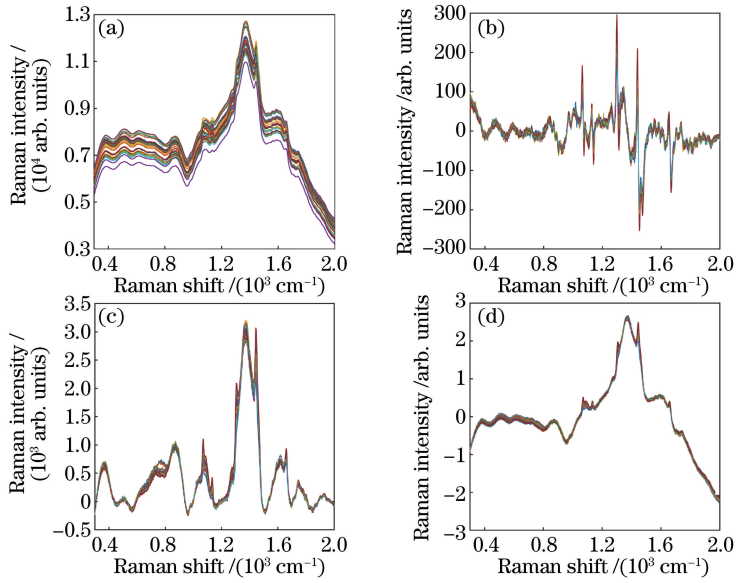


图 4 经过不同方法预处理后的拉曼光谱。(a) SG 平滑;(b)一阶导数;(c) 8 次多项式基线校正;(d)标准正态变换  
Fig. 4 Raman spectra processed by different methods. (a) SG smoothing; (b) first derivative;  
(c) 8<sup>th</sup> order polynomial fitting; (d) standard normal variate

据为基础,利用 MATLAB 中自带的 PLS\_Toolbox\_802 工具包中的区间偏最小二乘法来选择最佳波段。采用区间偏最小二乘法对光谱数据进行区间分割时,若区间宽度过小,容易导致特征位移处的光谱信息丢失,而且过多的区间进行组合时,运算量很大,容易导致 MATLAB 程序运行异常或运算中断。因此结合全波段光谱数据变量个数,实验选择了 5 个区间宽度进行 5 次筛选,其子区间变量个数分别为 80、60、40、30、20,并得到不同区间宽度划分下的最佳波段。步骤 2:针对上述 5 个不同区间宽度下得到的 5 组最佳波段,以频率出现最多的波段为中心向外扩充波长区域,对组合波段建立偏最小二乘模型,比较不同组合波段的建模效果,确定对碘值预测精度最高的最佳组合波段。5 次变量筛选的统计结果如图 5 所示。

表 2 全波段碘值偏最小二乘法建模结果

Table 2 Modeling results of partial least square for iodine value in full wavelength

| Preprocessing method                     | Latent variables | $R_c$  | RMSEC / $10^{-2}$ | $R_p$  | RMSEP / $10^{-2}$ |
|--|------------------|--------|-------------------|--------|-------------------|
| Raw spectrum                             | 6                | 0.9251 | 3.0617            | 0.9220 | 3.5648            |
| SG smoothing                             | 7                | 0.9268 | 3.1656            | 0.9262 | 3.0765            |
| 8 <sup>th</sup> order polynomial fitting | 4                | 0.9314 | 3.0684            | 0.9314 | 3.0609            |
| First derivative                         | 4                | 0.9762 | 1.8815            | 0.8516 | 3.3773            |
| Standard normal variate                  | 6                | 0.9693 | 2.0710            | 0.9090 | 3.4428            |
| SG and polynomial fitting                | 6                | 0.9388 | 2.9017            | 0.8869 | 3.7101            |
| Polynomial fitting and first derivative  | 4                | 0.9772 | 1.8414            | 0.8563 | 3.3448            |

采用区间偏最小二乘变量筛选法,通过上述步骤,最终得到的最佳组合波段为 1106~1470  $\text{cm}^{-1}$ 。该波段包含了 1266  $\text{cm}^{-1}$  处的不饱和脂肪酸特征峰和 1446  $\text{cm}^{-1}$  处的饱和脂肪酸特征峰,能反映脂肪酸的不饱和程度。而与多不饱和脂肪酸相关的 1660  $\text{cm}^{-1}$  和 1745  $\text{cm}^{-1}$  处的特征峰并没有包含在最佳组合波段内,这可能与猪肉皮下脂肪样品中的多不饱和脂肪酸的含量较少有关<sup>[11]</sup>。利用该最佳组合波段建立碘值的预测模型,当主因子数为 5 时,校正集的相关系数  $R_c$  和 RMSEC 分别为 0.9658 和  $2.1845 \times 10^{-2}$ ,预测集的相关系数  $R_p$  和 RMSEP 分别为 0.9463 和  $2.5391 \times 10^{-2}$ ,建模结果如图 6 所示。相较全波长建模结果,图 6 所示的建模效果显著提高,这是因为经变量筛选法得到的最优组合波段在特征峰波段内,有效提取了与碘值相关的光谱信息,且变量数减少,极大地简化了模型结构,有助于提高模型的稳定性。另外,利用区间偏最小二乘法筛选出的拉曼波段更利于研发简单、快速和廉价的猪胴体脂肪酸不饱和程度检测装置。

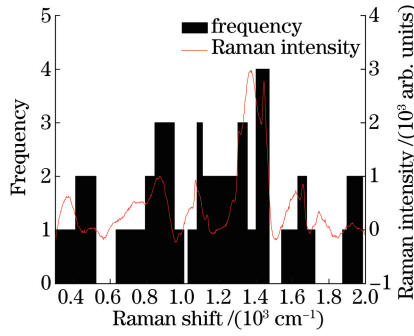


图 5 区间偏最小二乘法筛选得到的变量统计结果

Fig. 5 Statistical results of variables selected by interval partial least square

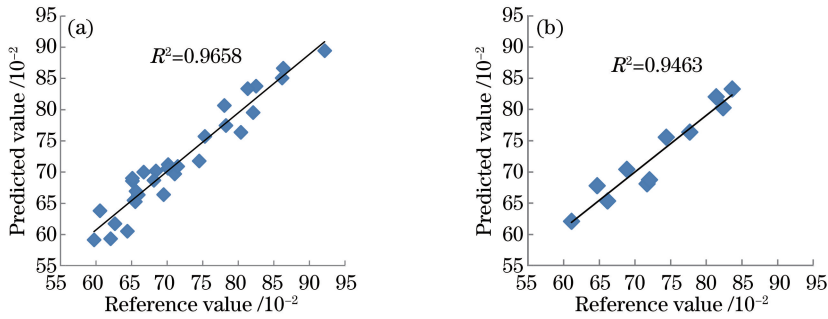


图 6 区间偏最小二乘法建模结果。(a)校正集;(b)预测集

Fig. 6 Modeling results of interval partial least square. (a) Calibration set; (b) prediction set

## 4 结 论

利用拉曼光谱技术对猪肉皮下完整脂肪样本中脂肪酸不饱和程度(碘值)的测定进行了初步研究。试验发现,当碘值为  $59.73 \times 10^{-2} \sim 92.15 \times 10^{-2}$  时,最优预处理方法为 8 次多项式拟合基线校正。以该方法预处理后的光谱数据为基础,结合区间偏最小二乘法筛选得到的在最优组合波段内建立的碘值预测模型的效果最佳,其预测集相关系数  $R_p$  和 RMSEP 分别为 0.9463 和  $2.5391 \times 10^{-2}$ 。研究结果表明,应用优选拉曼变量可以实现对完整脂肪样本中脂肪酸不饱和程度的测定,这为以后基于该优选变量拉曼光谱的猪胴体脂肪酸不饱和程度的在线、无损、快速测定及装置的研发提供了理论基础和技术支持。

## 参 考 文 献

- [1] Yan Haipeng, Zhu Hong, Wu Juqing, *et al.* Fatty acid and meat quality: a review[J]. Meat Research, 2009(7): 15-19.  
闫海鹏, 朱虹, 吴菊清, 等. 脂肪酸与肉的品质[J]. 肉类研究, 2009(7): 15-19.
- [2] 张嫚, 周光宏, 徐幸莲. 脂肪酸对肉类品质的影响[J]. 肉类工业, 2004(11): 12-14.
- [3] 李玉梅. 不同脂肪来源的日粮对育成猪的生产性能和猪肉脂肪酸组成的影响[J]. 饲料广角, 2012(11): 36-39.
- [4] 杨序纲, 吴琪琳. 拉曼光谱的分析与应用[M]. 北京:国防工业出版社, 2008: 9-11.
- [5] Lei Xing, Liu Ye, Huang Zhulin, *et al.* High sensitivity tapered fiber SERS probe and its application on pesticide residues detection[J]. Acta Optica Sinica, 2015, 35(8): 0806001.  
雷星, 刘晔, 黄竹林, 等. 高灵敏度锥形光纤 SERS 探针及其在农残检测中的应用[J]. 光学学报, 2015, 35(8): 0806001.
- [6] Zhai Chen, Peng Yankun, Li Yongyu, *et al.* Research on identification and determination of pesticides in apples using Raman spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35(8): 2180-2185.  
翟晨, 彭彦昆, 李永玉, 等. 基于拉曼光谱的苹果中农药残留种类识别及浓度预测的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35(8): 2180-2185.
- [7] Afseth N K, Wold J P, Segtnan V H. The potential of Raman spectroscopy for characterisation of the fatty acid

- unsaturation of salmon[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2006, 572(1): 85-92.
- [8] Beattie J R, Bell S E J, Borggaard C, *et al.* Prediction of adipose tissue composition using Raman spectroscopy: average properties and individual fatty acids[J]. *Lipids*, 2006, 41(3): 287-294.
- [9] Dong Haisheng, Zang Peng, Li Yunpeng, *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.  
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.
- [10] Wang Xiang, Dai Changjian. Study on Raman spectra of some animal and plant oils[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2015, 35(4): 929-933.  
王翔, 戴长建. 部分动植物的拉曼光谱研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2015, 35(4): 929-933.
- [11] Dhakal S, Li Y Y, Peng Y K, *et al.* Prototype instrument development for non-destructive detection of pesticide residue in apple surface using Raman technology[J]. *Journal of Food Engineering*, 2014, 123: 94-103.
- [12] Li-Chan E C Y. The applications of Raman spectroscopy in food science[J]. *Trends in Food Science and Technology*, 1996, 7(11): 361-370.
- [13] Olsen E F, Rukke E O, Flatten A, *et al.* Quantitative determination of saturated-, monounsaturated- and polyunsaturated fatty acids in pork adipose tissue with non-destructive Raman spectroscopy[J]. *Meat Science*, 2007, 76(4): 628-634.
- [14] Olsen E F, Baustad C, Egelanddal B, *et al.* Long-term stability of a Raman instrument determining iodine value in pork adipose tissue[J]. *Meat Science*, 2010, 85(1): 1-6.
- [15] Berhe D T, Eskildsen C E, Lametsch R, *et al.* Prediction of total fatty acid parameters and individual fatty acids in pork backfat using Raman spectroscopy and chemometrics: understanding the cage of covariance between highly correlated fat parameters[J]. *Meat Science*, 2016, 111: 18-26.
- [16] Fan Y X, Lai K Q, Rasco B A, *et al.* Analyses of phosmet residues in apples with surface-enhanced Raman spectroscopy[J]. *Food Control*, 2014, 37: 153-157.
- [17] Yang Guiyan, Li Lu, Chen He, *et al.* Baseline correction method for Raman spectra based on generalized Whittaker smoother[J]. *Chinese J Lasers*, 2015, 42(9): 0915003.  
杨桂燕, 李路, 陈和, 等. 基于广义 Whittaker 平滑器的拉曼光谱基线校正方法[J]. *中国激光*, 2015, 42(9): 0915003.
- [18] 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.
- [19] Wang Juxiang, Han Xiao, Liu Jie. Rapid determination of dynamic viscosity in used lubricating oil by BiPLS combined with IR[J]. *Physical Testing and Chemical Analysis-Chemical Analysis*, 2015, 51(5): 638-641.  
王菊香, 韩晓, 刘洁. 组合区间偏最小二乘法结合红外光谱法测定在用润滑油的运动粘度[J]. *理化检验-化学分册*, 2015, 51(5): 638-641.