

基于 BP 神经网络的太赫兹时域光谱对面粉中苯甲酸的定量检测研究

胡军, 刘燕德*, 孙旭东, 李斌, 徐佳, 欧阳爱国

华东交通大学机电与车辆工程学院, 江西 南昌 330013

摘要 为建立面粉中添加剂苯甲酸的定量检测模型, 首先, 探索不同光谱预处理方法对太赫兹光谱的影响, 采用平滑、多元散射校正、基线校正和归一化等方法对原始光谱进行校正处理, 并建立相应的偏最小二乘(PLS)模型以选择最优预处理方法, 发现归一化后建立的 PLS 模型较优, 预测集的相关系数(r_p)为 0.9790, 预测集的均方根误差(RMSEP)为 1.28%。其次, 分别建立面粉中苯甲酸含量检测的 PLS、最小二乘支持向量机(LS-SVM)和反向传播神经网络(BPNN)模型, 各模型的对比结果表明: 基于太赫兹吸收系数建立的 BPNN 模型的预测相关系数(r_p)为 0.9945, 预测均方根误差(RMSEP)为 0.66%。本研究为面粉中苯甲酸添加剂的无损检测提供了新的解决方案, 对促进面粉行业的健康发展具有较为重要的意义。

关键词 光谱学; 食品添加剂; 太赫兹光谱; 反向传播神经网络; 苯甲酸; 面粉

中图分类号 O439; O433.4

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP57.073002

Quantitative Determination of Benzoic Acid in Flour Based on Terahertz Time-Domain Spectroscopy and BPNN Model

Hu Jun, Liu Yande*, Sun Xudong, Li Bin, Xu Jia, Ouyang Aiguo

School of Mechatronics Engineering, East China Jiaotong University, Nanchang, Jiangxi 330013, China

Abstract To establish a quantitative detection model of benzoic acid additive in flour, terahertz time-domain spectra of benzoic acid doped at different percentages (mass fraction) in flour are collected, and the absorption coefficient spectra are obtained through calculation. It is found that the absorption peak amplitude is positively correlated with benzoic acid content. As for the detection method, first, we explore the effects of different spectral pretreatment methods on THz spectroscopy, and then adopt methods like smoothing correction, multiple scatter correction (MSC), baseline correction, and normalization correction to perform the appropriate processing. Subsequent to correction, PLS model is established to select the optimal pretreatment method. Experimental results verify that PLS model established subsequent to normalization is more optimal, with the correlation coefficient of prediction (r_p) observed to be 0.9790 and root-mean-square error of prediction (RMSEP) observed to be 1.28%. We establish PLS, least squares support vector machine (LS-SVM), and back propagation neural network (BPNN) regression models for the determination of benzoic acid content in flour. It is proved that the most optimal quantitative determination model of benzoic acid content in flour is BPNN model with correlation coefficient of prediction (r_p) of 0.9945 and root-mean-square error of prediction (RMSEP) of 0.66% subsequent to the normalization of terahertz absorption coefficient. It is concluded that a new solution for the nondestructive detection of benzoic acid additives in flour has been developed, and provide guidance for the detection of other types of additives, all of which are essential for the healthy development of the flour industry.

Key words spectroscopy; food additive; terahertz spectroscopy; BPNN; benzoic acid; flour

收稿日期: 2019-06-26; 修回日期: 2019-07-27; 录用日期: 2019-09-26

基金项目: “十二五”国家 863 计划(2012AA101906)、江西省优势科技创新团队建设计划(20153BCB24002)、南方山地果园智能化管理技术与装备协同创新中心项目(赣教高字[2014]60号)、江西省教育厅科学技术研究青年项目(GJJ190348)、江西省博士研究生创新资金项目(YC2019-B106)

* E-mail: jxliuyd@163.com

1 引言

食品安全与每个人的生活息息相关,不恰当的使用食品添加剂会对人体健康造成严重危害^[1]。面粉(小麦粉)是中国北方大部分地区的主食,也是我国的重要食品之一,更是很多糕点类食品的重要加工原料^[2-3]。面粉的质量安全直接关乎人们的身体健康,苯甲酸(BA)常被用作食品防腐剂,以延长面粉的保鲜期,但食用添加过量苯甲酸的食品会对人体健康造成极大伤害^[4-5]。

目前,对面粉的品质检测更多是借助于化学方法,国内外较常用的检测方法分为生物测定方法和理化分析法^[6-7]。这些检测方法大多为有损检测,而且检测成本高、操作复杂。因此,寻找一种无损、快捷的面粉质量安全检测方法迫在眉睫^[8]。

太赫兹(THz)光谱范围介于毫米波和红外线之间,具有电子学和光学的优势,使其在检测方面具有独特的特性。太赫兹波具有安全性高、透视性好、光谱分辨能力强等优点,在农业、生物医学、航空航天等领域具有良好的应用前景。近年来,许多学者利用太赫兹时域光谱检测技术开展了食品检测的探索。刘俊秀等^[9]利用太赫兹技术对15种有机化合物的太赫兹光谱数据进行了识别,建立了支持向量机(SVM)模型,其正确识别率为93.33%。李斌等^[10]用太赫兹时域光谱技术(THz-TDS)对葛粉中掺杂的薯粉含量进行定性、定量检测,建立了更优秀的用于检测葛粉中掺杂的薯粉含量的最小二乘支持向量机(LS-SVM)模型。王莹莹等^[11]利用太赫兹时域光谱系统测量了不同浓度下同型半胱氨酸的特征吸收光谱,结合线性拟合方程,精确反推出待测同型半胱氨酸的浓度。刘英等^[12]对特丁基对苯二酚(TBHQ)进行了太赫兹光谱特性研究,获得其在太赫兹波段有效谱宽为0.2~2.2 THz的吸收谱特性,结果表明在此波段内共有6个明显的吸收峰,面粉与TBHQ混合物样品的吸收峰同时体现出两者的光谱特性,从而能够检测出面粉中含有TBHQ。Lu等^[13]采用太赫兹时域谱结合化学计量学对谷氨酸和谷氨酰胺混合物进行定性和定量分析,成功实现了对混合物中两个氨基酸组分的太赫兹频谱进行解析。管爱红等^[14]采集了红薯淀粉和明矾的太赫兹光谱,发现随着明矾含量的增加,吸收峰的幅度下降,折射率也逐渐减小,验证了太赫兹光谱技术对淀

粉中明矾的检测具有可行性。Feng等^[15]利用太赫兹技术检测面粉中的增白剂,建立了面粉中掺杂质量分数为20%、50%和80%的过氧化苯甲酰的太赫兹光谱,验证了利用太赫兹技术检测面粉中增白剂的可行性,并且得到的相关系数为0.991。肖春阳等^[16]采用简单一元线性回归模型(SLR)对奶粉中山梨酸钾的含量进行了定量分析,结果表明混合物中山梨酸钾的含量与其吸收系数具有明显的线性关系。这些相关研究为食品中有害物质、违禁添加剂以及防腐剂等太赫兹光谱响应机理提供了理论参考。

面粉中过量添加剂的使用给面粉安全带来了严重的威胁^[17]。目前,鲜有利用无损方法来定量检测面粉中苯甲酸添加剂的研究。本文利用太赫兹光谱检测技术,分别建立基于偏最小二乘(PLS)^[18-19]、LS-SVM^[20]和反向传播神经网络(BPNN)^[21]的检测模型,并对所建立的模型进行评价,探索最佳定量测定模型。

2 材料与方法

2.1 实验材料

本实验所用面粉是从某大型超市购买,苯甲酸样品购买于阿拉丁试剂官网,其纯度为分析纯度 $\geq 99.7\%$ 。按照设计的质量分数配制样品(质量分数分别为0.04%,0.08%,0.1%,0.2%,0.4%,0.5%,1%,1.5%,...,20%),苯甲酸的质量分数范围为0.040%~19.99%。样品制备步骤主要包括研磨、烘干、称量、混合、压片等。按照上述方法依次制备44组不同质量分数的面粉和苯甲酸混合样品。每组样品制备4个,共得到混合样品176个,另外分别制备一组面粉和一组苯甲酸样品作为对照。所有样本采用K-S(Kennard-Stone)算法将样品按照3:1左右的比例划分为校正集和预测集,建立适用模型。表1所示为面粉和苯甲酸混合样品在校正集与预测集中的分布情况。

2.2 光谱采集

本实验采用日本Advantest公司生产的TAS7500太赫兹时域光谱仪进行检测,频谱测量范围设置为0.1~5.0 THz,分辨率设置为7.6 GHz,扫描次数为4048次/点。该太赫兹时域光谱系统包括两个超短脉冲光纤激光器,通过异步采样的原理实现太赫兹信号的产生和探测。脉冲中心波长为1550 nm,最大输出功率为50 mW,系统每次扫描采

表1 校正集与预测集中苯甲酸的质量分数分布情况

Table 1 Mass fraction of benzoic acid in calibration and prediction sets

Data set	Number of samples	Mass fraction / %			
		Minimum	Maximum	Mean	Standard deviation
Total	176	0.0479	19.999	9.332	6.243
Calibration	132	0.0479	19.999	9.332	6.297
Prediction	44	0.0479	19.999	9.332	6.249

样时间为 8 ms。为了减少实验过程的随机误差,对每个样品进行 4 次测量后取平均光谱。

2.3 参数提取方法

根据 Dorney 等^[22]和 Duvillaret 等^[23]提出的光学参数提取模型,采用快速傅里叶变换(FFT)获取太赫兹脉冲的频谱分布,可表示为

$$E(\omega) = A(\omega) \exp[-i\varphi(\omega)] = \int E(t) \exp(-i\omega t) dt, \quad (1)$$

$$n(\omega) = \frac{\varphi(\omega)c}{\omega L} + 1, \quad (2)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2k(\omega)\omega}{c} = \frac{2}{d} \ln \left\{ \frac{4n(\omega)}{\rho(\omega)[n(\omega) + 1]^2} \right\}, \quad (3)$$

式中: $A(\omega)$ 为电场幅值; $\varphi(\omega)$ 为电场的相位; $E(t)$ 为太赫兹时域波形; ω 为频率; $k(\omega)$ 为消光系数; $\rho(\omega)$ 为幅值比函数; $\varphi(\omega)$ 为参考信号和样本信号的相位差; d 为样品厚度; c 为真空中的光速; $n(\omega)$ 为检测样品的折射率; $\alpha(\omega)$ 为检测样品的吸收系数; $E(\omega)$ 为太赫兹脉冲的频谱分布。

2.4 模型预处理方法

1) 平滑预处理方法

在光谱分析中,平滑是常用的预处理方法。经平滑处理后,光谱中存在的随机白噪声被消除。平滑是通过平均一定宽度窗口内的波长信息来提高光谱信号的信噪比。本文采用卷积平滑法。Savitzky-Golay(S-G)卷积平滑又称为多项式平滑, $x_{\lambda, \text{smooth}}$ 为波长 λ 处经平滑后的光谱平均值,其计算公式为

$$x_{\lambda, \text{smooth}} = \bar{x}_{\lambda} = \frac{1}{H} \sum_{i=-w}^{+w} x_{\lambda+i} h_i, \quad (4)$$

式中: h_i 为平滑系数; H 为归一化因子, $H = \sum_{i=-w}^{+w} h_i$ 。每一测量值乘以平滑系数 h_i 的目的是尽可能减小平滑对有用信息的影响。

2) 基线校正预处理方法

在光谱采集过程中,仪器的状态变化、光程的变化以及环境的变化都无可避免。基线校正(baseline correction)预处理方法是在不改变原始光谱的形状下,

消除这些影响。常用的基线校正法有位移校正法和线性基线校正法。位移校正法是将校正中的基线进行平行移动;线性基线校正法是将校正基线进行垂直移动。

3) 多元散射校正预处理方法

多元散射校正(MSC)是常用的光谱数据预处理手段,用于消除样品厚度和光程差的差异对检测模型精度的影响,增强光谱的有效信息,其计算公式为

$$\mathbf{X}_i = \frac{\mathbf{X} - \mathbf{b}}{a}, \quad (5)$$

式中: \mathbf{X}_i 为经过多元散射校正后得到的新光谱矩阵; \mathbf{X} 为原始光谱矩阵; \mathbf{b} 为样品太赫兹光谱矩阵 \mathbf{X} 与样品太赫兹光谱的平均光谱矩阵拟合得到的截距向量; a 为拟合得到的系数。

4) 归一化预处理方法

归一化预处理方法又称为数据标准化方法,用于消除光程变化或样品浓度变化等对光谱产生的影响。在光谱分析检测中,较常用的归一化预处理方法为矢量归一化方法。光谱的归一化公式可表示为

$$x_{\text{nor}} = (x - \bar{x}) / \sqrt{\sum_{k=1}^m x_k^2}, \quad (6)$$

式中: $\bar{x} = \sum_{k=1}^m x_k / m$, m 为波长数, $k=1, 2, \dots, m$ 。这种方法常被用来校正由微小光程差异引起的光谱变化。

2.5 模型评价方法

先对面粉样品的太赫兹光谱进行光谱预处理,然后建立 PLS 模型,并通过 PLS 模型对其预处理方法进行评价,寻找最优的面粉中苯甲酸太赫兹光谱的预处理方法。采用最佳预处理后混合样品的太赫兹光谱分别建立 PLS 和 LS-SVM 光谱检测模型。通过比较校正集的相关系数(r_c)、预测集的相关系数(r_p)、校正均方根误差(RMSEC)、预测均方根误差(RMSEP)来评价模型。模型相关系数越高,预测均方根误差越小,则模型的精度越高,且 RMSEC 与 RMSEP 越接近,则模型稳健性越好。

2.6 算法的原理

BP 神经网络是一种多层的前馈神经网络,该网

络的主要特点是信号向方传递,误差反向传播。在向前传递中,信息从输入层到隐含层逐层处理,直至输出层,每一层的神经元只影响下一层神经元状态,若输出层得不到预期输出,则转入反向传播,根据预测误差调整网络权值和阈值,从而使得预测的结果不断逼近期望输出值,图1所示为BP神经网络的拓扑结构。

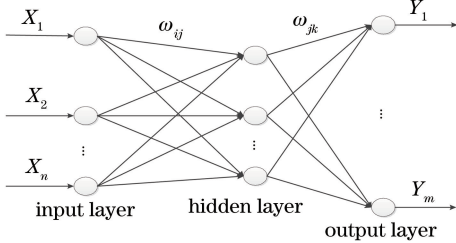


图1 BP神经网络的拓扑结构

Fig. 1 Topology structure of BP neural network

3 实验结果与分析

3.1 纯面粉和添加剂样品的太赫兹光谱响应特性

太赫兹光谱中包含如吸收系数、折射率、介电常数、相位角等太赫兹光学参数,可多维度反映所穿透物质的内部信息。图2所示为面粉、苯甲酸纯品及其混合物的太赫兹光谱吸收系数,考虑到前端和后端存在较多的噪声干扰,截取光谱的频率范围为1.0~3.0 THz的光谱。可以看到:纯面粉的谱线接近一条直线,随着频率的增大,面粉样品的吸收系数曲线缓慢上升;纯苯甲酸在1.94 THz处出现明显的吸收峰,在2.46 THz处也有一个较弱的吸收峰。闫慧^[24]采用密度泛函理论(DFT)对苯甲酸进行结构优化和振动模式分析,结果表明:苯甲酸单体B3LYP在1.95 THz位置处于Ph-COOH扭曲运动,其频率位置与实验观测的1.94 THz非常接近;苯甲酸二聚物B3LYP在2.55 THz位置处于Ph-COOH扭曲运动,其频率位置与实验观测的2.46 THz非常接近。

不同质量分数的苯甲酸太赫兹吸收谱线的吸收峰位置基本一致,在1.94 THz的位置出现较强的吸收峰,并且随着面粉中苯甲酸质量分数的增加,吸

收强度也不断增大。混合样品的原始太赫兹光谱波形整体几乎一致,但在一定的波段内吸收峰的强度有所不同,由于面粉中苯甲酸浓度不断增加,样品对太赫兹波谱的吸收更加强烈。由图2可知,苯甲酸的质量分数为19.990%的样品在1.94 THz有明显的吸收峰,其他浓度的样品在此位置都有对应的吸收峰。苯甲酸质量分数分别为10.010%、14.988%、19.990%的样品太赫兹光谱,除了在1.94 THz位置处峰值出现较大变化,整条光谱的吸收系数也呈现规律性变化,苯甲酸质量分数的细微变化都会引起整条光谱的变化。

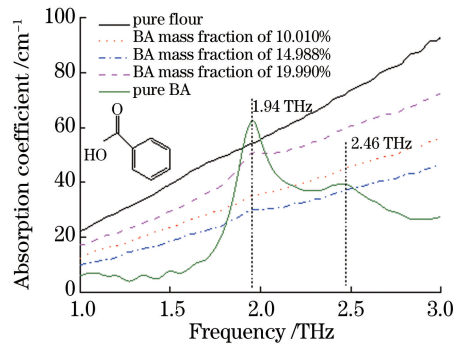


图2 面粉中不同质量分数苯甲酸样品的太赫兹吸收谱线
Fig. 2 Terahertz absorption spectra of benzoic acid with different mass fraction in flour

3.2 添加苯甲酸的面粉样品太赫兹光谱的校正处理

由于太赫兹光谱仪对环境的要求非常苛刻,为减小在实验过程中实验仪器振动、噪声等导致的太赫兹光谱漂移、光散射等现象,通过适当的预处理可获得更好的建模效果。本文主要采用平滑校正、多元散射校正、基线校正、归一化等方法进行校正处理,并利用PLS模型评价校正效果。利用化学计量学软件Unscrambler对原始数据进行预处理,将原始数据导入软件,并按照(4)~(6)式进行计算。

对添加苯甲酸的面粉太赫兹光谱进行不同预处理后建立PLS模型。通过比较校正集与预测集的相关系数和均方根误差对校正处理效果进行评价。表2为添加苯甲酸的面粉太赫兹光谱不同预处理

表2 添加苯甲酸的面粉太赫兹光谱吸收系数校正处理的PLS建模效果

Table 2 Results of terahertz absorption coefficient in PLS model by correction processing for flour doped with benzoic acid

Pretreatment method	P_c	r_c	RMSEC	r_p	RMSEP
Original	4	0.9722	0.0143	0.9747	0.0156
Savitzky-Golay	4	0.9719	0.0142	0.9746	0.0155
MSC	3	0.9758	0.0133	0.9755	0.0136
Baseline correction	5	0.9799	0.0124	0.9697	0.0143
Normalization	4	0.9806	0.0120	0.9790	0.0128

PLS 建模结果,经归一化校正处理的建模效果最佳,说明归一化预处理对消除太赫兹检测过程中的光程变化有一定的帮助。归一化后建立的 PLS 模型的 r_p 为 0.9790, RMSEP 为 1.28%。

3.3 PLS 定量检测模型的建立

PLS 可以充分利用小样本信息,将矩阵分解及矩阵回归并为一歩^[12],常用于评估样品浓度真值与样品光谱矩阵之间的关系。图 3 所示为添加苯甲酸的面粉均方根误差随主成分因子数的变化曲线。主成分因子数(PC)直接决定建模效果,若 PC 太低,则有可能丢失有效光谱信息;PC 过高,则模型易出现过度拟合现象。在该添加苯甲酸的面粉太赫兹光谱吸收系数的 PLS 模型中,选取的最佳主成分因子数为 4。当 PC 为 4 时,此时校正集和预测集的均方根误差都最小。

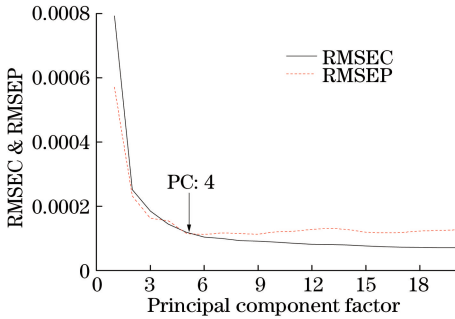


图 3 添加苯甲酸面粉的均方根误差随主成分因子数的变化曲线

Fig. 3 Root-mean-square error of benzoic acid-doped flour changed with principal component factor

图 4 所示为添加苯甲酸的面粉太赫兹吸收光谱的回归系数,回归系数较大的 1.94 THz 频率在 PLS 模型中起着重要作用。正相关系数与苯甲酸浓度响应

呈正相关,负相关系数与苯甲酸浓度响应呈负相关。将面粉的太赫兹光谱吸收系数经归一化预处理后建立全谱 PLS 模型, r_p 为 0.9790, RMSEP 为 1.28%。

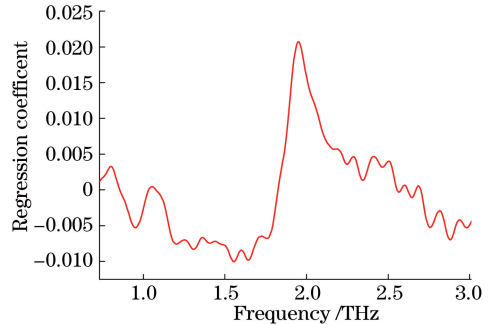


图 4 PLS 模型中添加苯甲酸的面粉太赫兹吸收光谱的回归系数

Fig. 4 Regression coefficient of terahertz absorption spectrum of benzoic acid-doped flour in PLS model

3.4 LS-SVM 定量检测模型的建立

LS-SVM^[13-14]是在统计学基础上建立的一种机器学习方法,其关键指标参数有输入向量、核函数种类及其相应的参数。LS-SVM 的两种典型的核函数分别为径向基核函数(RBF)和线性(Lin)核函数。表 3 为添加苯甲酸的面粉太赫兹光谱吸收系数建模效果,其中 x_i 为样本点, x_j 为核函数中心点, γ 为分布参数, σ^2 为内核参数,表示 RBF 的方差, t 为所建模型的运行时间,单位为 s。采用 RBF 时,其参数组合为 $\gamma = 16690$, $\sigma^2 = 229.418$,此时建模效果最佳, r_p 为 0.987, RMSEP 为 1.10%。结果表明:RBF 模型的效果总体优于 Lin 核函数模型。其原因可能是 RBF 的泛化能力更强,可以逼近任意非线性函数,能很好地处理面粉中苯甲酸含量与其太赫兹光谱数据的非线性关系。

表 3 添加苯甲酸的面粉样品太赫兹光谱吸收系数的 LS-SVM 建模结果

Table 3 Results of terahertz spectral absorption coefficient of benzoic acid-doped flour samples in LS-SVM model

Type of kernel function	Equation	Parameter	Number of input variables	r_p	RMSEP	t / s
Lin	$K(x_i, x_j) = x_i x_j$	$\gamma = 12.670$	264	0.983	0.012	6.162
RBF	$K(x, x_i) = \exp(-\ x, x_i\ ^2 / 2\sigma^2)$	$\gamma = 16690$ $\sigma^2 = 229.418$	264	0.987	0.011	4.368
Lin	$K(x_i, x_j) = x_i x_j$	$\gamma = 7.2903$	10	0.9802	0.0126	5.7252
RBF	$K(x, x_i) = \exp(-\ x, x_i\ ^2 / 2\sigma^2)$	$\gamma = 219380$ $\sigma^2 = 3276.1$	10	0.9820	0.0128	4.8204

3.5 BPNN 定量检测模型的建立

主成分分析是一种有效的降维方法,太赫兹光谱包含在 0.1~3 THz 范围内的 264 个谱变量中,有些变量可能包含不相关的回归信息。因此,采用主

成分分析法将原始的太赫兹光谱转换到新的坐标轴,得到作为新变量的主成分分析得分,其中主成分分析得分为 97.436% ~ 99.973%,基本上体现出太赫兹系统采集的光谱信息。

BPNN 具有三层神经元(输入层、隐含层和输出层),输入层和隐藏层的每个节点都连接到下一层的每个节点,并使用与其相关的权重因子。在训练过程中,利用反向传播算法对这些权值进行修正。隐藏层和输出层的传递函数分别为 Tansig 函数和 Purelin 函数,训练函数和性能函数分别为 Trainlm 和均方误差(MSE),训练次数设置为 200,训练目标为 0.001,学习速率为 0.1。图 5 所示为优化输入向量和隐藏层数量的结果,采用 6 个主成分分析得分输入向量和 6 个隐藏层神经元,得到了最佳的 BPNN 模型,最佳 BPNN 模型的预测相关系数为 0.9945,预测均方根误差为 0.66%。

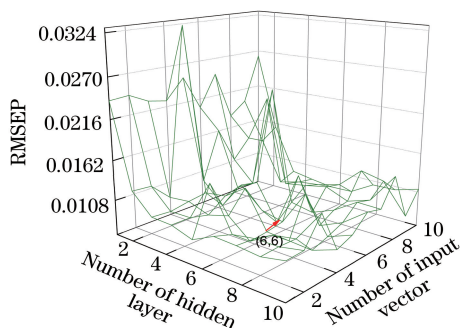


图 5 BPNN 中输入向量个数和隐藏层数的优化结果

Fig. 5 Optimized results of BPNN for number of input vectors and hidden layers

3.6 PLS、LS-SVM 和 BPNN 检测模型的对比

图 6 所示为混合样品的苯甲酸质量分数预测值与真实值的拟合结果。利用预测集中的 44 个未知样品对最佳 PLS、LS-SVM 和 BPNN 模型的实际预测能力进行评估。与 PLS 和 LS-SVM 模型相比, BPNN 模型的预测精度最高, r_p 为 0.9945, RMSEP 为 0.66%。

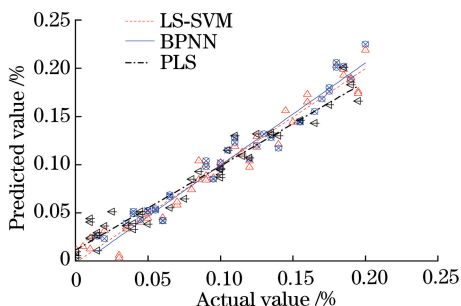


图 6 不同模型中混合样品的苯甲酸质量分数的预测值与真实值的关系

Fig. 6 Relationship between predicted values and actual values of mass fraction in different models

4 结 论

建立了面粉中苯甲酸添加剂的定量测定模型,

验证了太赫兹光谱检测技术对面粉中苯甲酸含量检测的可行性,并验证了利用太赫兹光谱结合 PLS、LS-SVM 和 BPNN 方法都可以测定面粉中苯甲酸的浓度。相比于平滑、多元散射校正和基线校正,归一化处理具有更好的校正效果。对比 LS-SVM 和 BPNN 模型,发现 BPNN 模型可以获得更好的建模效果,预测相关系数为 0.9945,预测均方根误差为 0.66%。BP 神经网络更适合用于混合样品中苯甲酸含量的检测。所提出的基于 BP 神经网络与太赫兹技术的面粉中苯甲酸含量的检测方法,有效避免了传统化学和生物分析方法存在检测费时费力、成本高昂的问题,对其他食品添加剂的检测具有一定的借鉴意义。

参 考 文 献

- [1] Bilge G, Sezer B, Eseller K E, et al. Determination of whey adulteration in milk powder by using laser induced breakdown spectroscopy [J]. Food Chemistry, 2016, 212: 183-188.
- [2] Huang M, Kim M S, Delwiche S R, et al. Quantitative analysis of melamine in milk powders using near-infrared hyperspectral imaging and band ratio[J]. Journal of Food Engineering, 2016, 181: 10-19.
- [3] Liu W, Liu C H, Yu J J, et al. Discrimination of geographical origin of extra virgin olive oils using terahertz spectroscopy combined with chemometrics [J]. Food Chemistry, 2018, 251: 86-92.
- [4] Qin J Y, Xie L J, Ying Y B. Determination of tetracycline hydrochloride by terahertz spectroscopy with PLSR model[J]. Food Chemistry, 2015, 170: 415-422.
- [5] Jiang L, Li M, Li C, et al. Terahertz spectra of L-ascorbic acid and thiamine hydrochloride studied by terahertz spectroscopy and density functional theory [J]. Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, 2014, 35(10): 871-880.
- [6] Mathanker S K, Weckler P R, Wang N. Terahertz (THz) applications in food and agriculture: a review [J]. Transactions of the ASABE, 2013: 1213-1226.
- [7] Lu S H, Li B Q, Zhai H L, et al. An effective approach to quantitative analysis of ternary amino acids in foxtail millet substrate based on terahertz spectroscopy [J]. Food Chemistry, 2018, 246: 220-227.
- [8] Liu C, Yang S X, Deng L. A comparative study for least angle regression on NIR spectra analysis to determine internal qualities of navel oranges [J].

- Expert Systems with Applications, 2015, 42(22): 8497-8503.
- [9] Liu J X, Du B, Deng Y Q, et al. Terahertz-spectral identification of organic compounds based on differential PCA-SVM method[J]. Chinese Journal of Lasers, 2019, 46(6): 0614039.
刘俊秀, 杜彬, 邓玉强, 等. 基于差分-主成分分析-支持向量机的有机化合物太赫兹吸收光谱识别方法[J]. 中国激光, 2019, 46(6): 0614039.
- [10] Li B, Du X Y, Liu Y D, et al. Detection research of seed potato starch in kudzu using terahertz time-domain spectroscopy [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2019, 56(20): 203001.
李斌, 杜秀洋, 刘燕德, 等. 太赫兹时域光谱葛粉掺薯粉检测研究[J]. 激光与光电子学进展, 2019, 56(20): 203001.
- [11] Wang Y Y, Wang L P, Li T, et al. Terahertz characteristic absorption spectrometric analysis of homocysteine[J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(10): 1030003.
王莹莹, 汪丽平, 李恬, 等. 同型半胱氨酸的太赫兹特征吸收光谱分析[J]. 光学学报, 2019, 39(10): 1030003.
- [12] Liu Y, Zhao G Z. Progress on terahertz spectroscopic inspection and analysis of several kinds of food additives [J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2018, 16(2): 195-200.
刘英, 赵国忠. 若干食品添加剂的太赫兹光谱检测与分析研究进展[J]. 太赫兹科学与电子信息学报, 2018, 16(2): 195-200.
- [13] Lu S H, Zhang X, Zhang Z Y, et al. Quantitative measurements of binary amino acids mixtures in yellow foxtail millet by terahertz time domain spectroscopy[J]. Food Chemistry, 2016, 211: 494-501.
- [14] Guan A H, Li Z, Ge H Y. The qualitative and quantitative detection of potassium alum in sweet potato starch based on terahertz time-domain spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2018, 38(1): 267-270.
管爱红, 李智, 葛宏义. 红薯淀粉中添加剂明矾的定性和定量太赫兹时域光谱技术检测[J]. 光谱学与光谱分析, 2018, 38(1): 267-270.
- [15] Feng L, Cai J H, Zhang G X, et al. Research of benzoyl peroxide residues in flour by terahertz spectroscopy technology [J]. Advanced Materials Research, 2013, 712/713/714/715: 2039-2042.
- [16] Xiao C Y, Li P P, Ge H Y. Terahertz spectral detection of potassium sorbate in milk powder [J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2017, 15(5): 728-732.
肖春阳, 李鹏鹏, 葛宏义. 奶粉中山梨酸钾的太赫兹光谱检测[J]. 太赫兹科学与电子信息学报, 2017, 15(5): 728-732.
- [17] Diniz P H G D, Pistonesi M F, Alvarez M B, et al. Simplified tea classification based on a reduced chemical composition profile via successive projections algorithm linear discriminant analysis (SPA-LDA) [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2015, 39: 103-110.
- [18] Ali F, Rasoolimanesh S M, Sarstedt M, et al. An assessment of the use of partial least squares structural equation modeling (PLS-SEM) in hospitality research [J]. International Journal of Contemporary Hospitality Management, 2018, 30(1): 514-538.
- [19] Li Z, Guan A H, Ge H Y, et al. Wavelength selection of amino acid THz absorption spectra for quantitative analysis by a self-adaptive genetic algorithm and comparison with mWPLS [J]. Microchemical Journal, 2017, 132: 185-189.
- [20] Cheng J H, Sun D W. Data fusion and hyperspectral imaging in tandem with least squares-support vector machine for prediction of sensory quality index scores of fish fillet[J]. LWT-Food Science and Technology, 2015, 63(2): 892-898.
- [21] Zhang L, Suganthan P N. A survey of randomized algorithms for training neural networks [J]. Information Sciences, 2016, 364/365: 146-155.
- [22] Dorney T D, Baraniuk R G, Mittleman D M. Material parameter estimation with terahertz time-domain spectroscopy [J]. Journal of the Optical Society of America A, 2001, 18(7): 1562-1571.
- [23] Duvillaret L, Garet F, Coutaz J L. Influence of noise on the characterization of materials by terahertz time-domain spectroscopy [J]. Journal of the Optical Society of America B, 2000, 17(3): 452-461.
- [24] Yan H. Study on organic molecules by terahertz time-domain spectroscopy and theoretical calculations [D]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2012.
闫慧. 有机分子太赫兹光谱的实验与理论计算研究[D]. 北京: 中国科学院大学, 2012.