

基于近红外光谱和子窗口重排分析的山茶油 掺假检测

孙 通 吴宜青 李晓珍 许 朋 刘木华*

江西农业大学生物光电技术及应用重点实验室, 江西南昌 330045

摘要 为打击山茶油掺假,保障消费者的合法利益,利用近红外光谱和子窗口重排分析(SPA)对山茶油的复杂掺假(掺入大豆油、菜籽油、花生油及混合油)进行检测。采集85个纯山茶油和315个掺假山茶油样本的近红外光谱,利用SPA变量选择方法对样本光谱的波长变量进行筛选,再由偏最小二乘-线性判别分析(PLS-LDA)建立山茶油掺假检测模型,并与竞争性自适应重加权算法(CARS)和无信息变量消除(UVE)变量选择方法的结果进行比较。研究结果表明,近红外光谱联合SPA方法可以用于山茶油的复杂掺假检测,预测集样本的分类错误率、灵敏度及特异性分别为0.1和1。SPA方法优于UVE方法,与CARS方法相当,是一种有效的变量选择方法,能简化模型并提高模型的预测精度和稳定性。

关键词 光谱学;掺假检测;近红外;子窗口重排分析;山茶油

中图分类号 S123 文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201535.0630005

Discrimination of Camellia Oil Adulteration by NIR Spectra and Subwindow Permutation Analysis

Sun Tong Wu Yiqing Li Xiaozhen Xu Peng Liu Muhua

*Key Laboratory of Optics-Electronics Application of Biomaterials, Jiangxi Agricultural University,
Nanchang, Jiangxi 330045, China*

Abstract In order to crack down on camellia oil adulteration and protect the legitimate interests of consumers, near infrared (NIR) spectroscopy and subwindow permutation analysis (SPA) are used to detect complex adulteration of camellia oil (adulterated with soybean oil, colza oil, peanut oil and mixed oil). The NIR spectra of 85 pure camellia oil samples and 315 adulterated camellia oil samples are acquired, and the SPA method is used to select important wavelength variables. After that, partial least squares-linear discriminant analysis (PLS-LDA) is used to develop calibration models for adulteration detection of camellia oil, and the result is compared to the models developed by PLS-LDA with other selection methods such as competitive adaptive reweighted sampling (CARS) and uninformative variable elimination (UVE). The results indicate that NIR spectroscopy combined with SPA method is feasible for complex adulteration detection of camellia oil, the error rate, sensitivity and specificity of classification in prediction set are 0, 1 and 1, respectively. SPA method is superior to UVE method, and is comparable with CARS method. It is an effective variable selection method, and can simplify model, improve model prediction precision and stability.

Key words spectroscopy; adulteration detection; near infrared; subwindow permutation analysis; camellia oil

OCIS codes 300.1030; 300.6340; 120.4290

收稿日期: 2015-01-13; 收到修改稿日期: 2015-02-10

基金项目: 江西省自然科学基金(20132BAB214010)、江西省教育厅科学研究基金(GJJ13254)、江西农业大学科学研究基金(QN201105)

作者简介: 孙 通(1983—),男,博士,讲师,主要从事农产品/食品品质与安全的无损检测等方面的研究。

E-mail: suntong980@163.com

*通信联系人。E-mail: suikelmh@sina.com

1 引 言

山茶油是我国特有的优质木本油脂,其油酸含量为天然植物油之冠,山茶甙等生理活性物质及微量元素丰富,具有良好的品质和保健功能,被誉为“东方橄榄油”。因此,山茶油的市场售价远高于普通的食用植物油。不法商人为谋取暴利,将大豆油及菜籽油等普通食用植物油掺入山茶油中出售。为保障消费者的合法权益,十分有必要对山茶油掺假进行快速检测。

近红外光谱技术是一种快速、绿色、无损的现代分析技术,已应用于鸡蛋及猪肉新鲜度^[1-2]、人体血糖^[3]、伞菌发酵组分^[4]、茶叶茶多酚^[5]、辣椒粉及牛奶掺假^[6-7]、酒真伪^[8]、葡萄酒品种^[9]等定量及定性检测。目前,国内外学者利用近红外光谱技术对橄榄油的掺假检测进行了较多的研究^[10-16],而山茶油的掺假检测研究则较少^[17-20]。分析和总结文献发现,一是多数研究工作均为简单的掺假检测即山茶油或橄榄油中掺入一种低价食用植物油,而在实际情况中食用植物油掺假更为复杂,往往掺入两种或多种食用植物油;二是掺假检测模型大多采用全波段光谱数据建立,未对光谱变量进行筛选,导致掺假检测模型中可能含有几百个甚至上千个光谱变量,使得模型存在不同程度的过拟合,模型稳定性和适用性变差。因此,有必要在进行变量筛选的基础上对山茶油的复杂掺假进行检测研究。

子窗口重排分析(SPA)是中南大学梁逸曾教授等于2010年提出的新变量选择方法。该方法通过蒙特卡罗抽样建立大量模型,并对模型进行统计分析,根据分析结果优选变量。目前,SPA方法已应用于临床诊断的标记物筛选^[21-23]。

本文利用近红外光谱技术对山茶油的复杂掺假(掺入大豆油、菜籽油、花生油及混合油)进行检测研究。采用SPA方法对样本光谱波长变量进行筛选,并应用偏最小二乘-线性判别分析(PLS-LDA)建立山茶油的掺假检测模型。

2 材料与方 法

2.1 实验材料与仪器

实验所用的纯山茶油样本共85个,由江西出入境检验检疫局综合技术中心从江西(上饶、赣州、萍乡、樟树、吉安、宜春)、湖南(平江、湘潭、常德)、浙江丽水、广西南宁等地收集而来。大豆油、菜籽油及花生油样本各3个,3个样本均为不同厂家生产,从正规大超市购买。

光谱采集仪器为QualitySpec型可见/近红外光谱仪(Analytical Spectral Devices,美国),光谱波段采集范围为350~1800 nm,光谱采集软件为Indico Pro Spectral Acquisition软件。光源为色温2901 K的卤钨灯(Analytical Spectral Devices,美国),功率为6.5 W。石英比色皿宽度为4 mm。

2.2 实验方法

2.2.1 样本配制

将大豆油按一定质量分数掺入纯山茶油样本中,大豆油掺伪质量分数分别为1%、3%、5%、7%、9%、11%、13%、15%、20%、25%、30%、35%、40%、45%、50%。为方便叙述,大豆油掺伪质量分数梯度在下文中简称为掺伪梯度1。对于每个掺伪质量分数,各配制3个样本,即从85个纯山茶油样本中以不重复抽样方式随机抽取3个纯山茶油样本,并与3个大豆油样本随机配成3组,每组配制1个样本,共获得45个仅掺有大豆油的山茶油样本。按照上述方法,分别配制45个仅掺有菜籽油的山茶油样本和45个仅掺有花生油的山茶油样本。对于上述掺假样本,掺假质量分数为1%时,实际的最大配制误差为4.16%,其他样本的配制误差则不超过2%。此外,为保证掺假样本中植物油混和均匀,配制样本时,先加山茶油,再加其他油,然后充分摇匀。

将大豆油和菜籽油掺入纯山茶油样本中,大豆油和菜籽油总掺伪质量分数梯度与掺伪梯度1相同。对于每个掺伪质量分数,各配制3个样本(样本配制与掺杂大豆油的山茶油样本类似),3个样本中大豆油和菜籽油的掺伪质量分数各不相同(表1),共获得45个掺有大豆油和菜籽油的山茶油样本。按照该方法,分别配制45个掺有大豆油和花生油的山茶油样本以及45个掺有菜籽油和花生油的山茶油样本。

将大豆油、菜籽油和花生油一起掺入纯山茶油样本中,大豆油、菜籽油及花生油的总掺伪质量分数梯度与掺伪梯度1相同。对于每个掺伪质量分数,各配制3个样本(样本配制与掺杂大豆油的山茶油样本类似),3个样

本中大豆油、菜籽油和花生油的掺伪质量分数各不相同(表 2),共获得 45 个掺有大豆油、菜籽油和花生油的山茶油样本。因此,实验中共有纯山茶油样本 85 个和掺假山茶油样本 315 个,将上述样本按照 2:1 比例分配为校正集和预测集,校正集样本用于建立掺假检测模型,预测集样本用于评价模型的性能。

2.2.2 光谱采集

样本光谱采集前,将光谱仪器预热 30 min,以保证仪器性能的稳定。将样本放置于 4 mm 的石英比色皿中,并以透射方式采集样本的光谱。样本光谱采集时间和扫描次数分别为 68 ms 和 50 次,光谱参比为 4 mm 的空石英比色皿。光谱采集和参数设置采用 Indico Pro Spectral Acquisition 软件完成。样本光谱以 $\lg(1/T)$ 表示, T 为样本光谱透射率。

2.2.3 变量筛选及模型建立

SPA 是一种基于模型集群分析思想的新变量选择方法。SPA 方法能够检测变量之间的组合效应,从而选择较优的变量子集。该方法具体步骤如下:1) 采用蒙特卡罗抽样方法从样本光谱矩阵中获取 N 个建模数

表 1 山茶油中掺杂两种植物油的具体掺假质量分数

Table 1 Specific adulteration percentage of two vegetable oils in camellia oil

Total adulteration percentage /%	Adulteration percentage of each kind of oil /%		
	(Soybean oil, Colza oil)	(Soybean oil, Peanut oil)	(Colza oil, Peanut oil)
1	(0.58, 0.51), (0.30, 0.67), (0.72, 0.31)	(0.32, 0.69), (0.50, 0.52), (0.72, 0.33)	(0.52, 0.55), (0.71, 0.30), (0.30, 0.73)
3	(0.98, 2.00), (1.55, 1.51), (1.99, 0.98)	(2.01, 0.99), (1.07, 1.97), (1.48, 1.56)	(1.49, 1.49), (1.01, 2.00), (2.06, 1.02)
5	(1.51, 3.50), (2.51, 2.46), (3.94, 1.00)	(2.56, 2.52), (1.51, 3.53), (3.96, 1.01)	(1.52, 3.55), (2.53, 2.51), (4.02, 1.03)
7	(3.51, 3.50), (1.96, 4.99), (3.99, 3.04)	(2.00, 4.99), (4.03, 2.97), (3.51, 3.50)	(3.56, 3.53), (2.00, 5.02), (4.05, 3.00)
9	(2.96, 5.98), (4.49, 4.54), (1.96, 6.99)	(4.56, 4.50), (1.96, 7.02), (2.94, 6.01)	(4.51, 4.50), (1.99, 7.00), (2.98, 6.00)
11	(2.95, 8.01), (6.91, 4.02), (5.46, 5.55)	(5.52, 5.51), (3.03, 7.98), (7.04, 4.02)	(5.55, 5.57), (3.01, 8.00), (7.05, 3.99)
13	(6.49, 6.47), (1.98, 11.07), (7.96, 4.95)	(8.01, 4.96), (6.50, 6.52), (1.99, 11.00)	(6.54, 6.52), (2.00, 11.01), (8.01, 5.00)
15	(2.95, 11.97), (7.56, 7.53), (8.96, 6.06)	(7.50, 7.50), (2.98, 12.00), (8.99, 5.99)	(7.56, 7.53), (3.07, 12.02), (9.03, 6.02)
20	(10.03, 10.00), (4.04, 15.94), (11.96, 8.04)	(10.04, 10.08), (11.95, 7.98), (3.99, 15.96)	(4.02, 16.00), (12.06, 8.01), (10.00, 10.00)
25	(12.47, 12.54), (6.05, 19.06), (16.02, 9.03)	(5.97, 18.94), (16.05, 9.00), (12.47, 12.52)	(12.49, 12.52), (6.01, 18.99), (15.98, 9.04)
30	(15.02, 15.05), (7.03, 22.98), (21.03, 8.97)	(14.97, 15.04), (20.98, 9.00), (6.98, 23.01)	(6.99, 23.01), (21.01, 8.98), (15.02, 15.00)
35	(6.00, 28.97), (17.53, 17.61), (21.97, 13.07)	(17.49, 17.49), (5.97, 29.00), (21.98, 12.99)	(17.53, 17.52), (22.00, 13.02), (5.99, 29.00)
40	(19.95, 19.94), (14.06, 26.00), (31.99, 8.01)	(20.01, 20.01), (31.95, 8.04), (13.99, 25.97)	(14.02, 26.02), (32.04, 8.01), (19.99, 20.00)
45	(22.54, 22.48), (15.95, 29.06), (35.05, 9.98)	(16.01, 29.02), (22.54, 22.46), (34.98, 9.95)	(22.51, 22.50), (16.03, 28.98), (34.95, 10.16)
50	(20.10, 29.94), (25.18, 24.92), (36.08, 14.00)	(24.97, 24.98), (20.05, 29.97), (36.05, 13.98)	(20.00, 29.99), (35.97, 14.02), (25.00, 25.03)

表2 山茶油中掺杂三种植物油的具体掺假质量分数

Table 2 Specific adulteration percentage of three vegetable oils in camellia oil

Total adulteration percentage /%	Adulteration percentage of each kind of oil /%		
	(Soybean oil, Colza oil, Peanut oil)		
1	(0.31, 0.31, 0.41),	(0.61, 0.10, 0.31),	(0.11, 0.40, 0.52)
3	(0.53, 2.00, 0.50),	(1.00, 1.04, 1.00),	(2.03, 0.50, 0.50)
5	(1.05, 1.00, 2.99),	(2.02, 2.02, 1.04),	(1.00, 2.99, 1.01)
7	(3.00, 3.01, 1.00),	(1.05, 5.02, 1.01),	(2.01, 2.03, 3.01)
9	(3.08, 3.06, 3.01),	(5.06, 2.02, 2.06),	(1.00, 4.04, 4.00)
11	(4.04, 4.04, 3.00),	(6.01, 1.00, 4.01),	(1.00, 6.01, 4.00)
13	(5.03, 4.02, 4.00),	(2.04, 6.01, 5.00),	(3.00, 2.05, 7.99)
15	(5.07, 5.01, 5.02),	(8.02, 3.02, 3.99),	(2.01, 7.00, 6.03)
20	(10.00, 6.00, 4.01),	(7.00, 6.99, 6.02),	(3.02, 10.03, 7.01)
25	(3.08, 14.98, 7.02),	(5.99, 4.03, 15.03),	(9.01, 8.03, 7.99)
30	(10.06, 10.03, 10.00),	(3.05, 20.98, 6.01),	(7.01, 4.00, 18.99)
35	(5.02, 18.03, 12.00),	(12.04, 11.99, 11.01),	(18.99, 8.03, 8.02)
40	(14.02, 12.99, 13.02),	(6.99, 17.01, 16.02),	(21.01, 4.00, 15.05)
45	(15.00, 15.03, 15.02),	(20.44, 7.17, 16.33),	(6.05, 17.98, 21.02)
50	(17.00, 17.00, 16.01),	(22.97, 7.08, 20.02),	(5.02, 20.99, 24.00)

据子集和测试数据子集;2)利用PLS-LDA方法分别对 N 个建模数据子集建立 N 个子模型,并对相应的测试数据子集进行预测;3)对预测误差进行统计分析。以变量 i 为例,假定包含变量 i 的建模数据子集共有 K 个,即 K 个子模型中含有变量 i , K 个子模型对相应的 K 个测试数据子集进行预测,获得 K 个预测误差,此类预测误差称为正常预测误差(NPE)。对于某一个含有变量 i 的建模数据子集,仅将变量 i 所在的列进行重排,再利用PLS-LDA建立预测模型,并对相应的测试数据子集进行预测,获得的预测误差称为重排预测误差(PPE)。对于变量 i ,计算 E_{NPEi} 和 E_{PPEi} 的平均值,分别记为 M_{Ni} 和 M_{Pi} ,当 $M_{Ni}>M_{Pi}$ 时,变量 i 被作为无信息或干扰变量剔除;4)对于保留的变量,采用Mann-Whitney U方法检验NPE和PPE的分布差异,差异以 p 值表示。定义条件协同得分(COSS)为负的 p 值的对数,即 $S_{COSS}=-\lg p$,则COSS值越大变量越重要;5)根据变量的重要性,依次将变量加入预测模型中,并采用交叉验证建模,根据交互验证错误率最小确定最优的变量组合。SPA的具体原理与算法参见文献[23-24]。

经SPA变量筛选后,采用PLS-LDA方法建立山茶油的掺假检测模型,并对预测集样本进行预测。为检验SPA方法的有效性,选择两种优秀的变量选择方法与SPA方法进行比较。这两种变量选择方法分别为竞争性自适应重加权算法(CARS)和无信息变量消除(UVE)方法。CARS和UVE的具体原理与算法参见文献[25-26]。实验中对于SPA变量选择,蒙特卡罗抽样次数为1000,样本抽取比率为0.8,波长变量抽取数为50。对于CARS变量选择,蒙特卡罗抽样次数为50。对于UVE变量选择,蒙特卡罗抽样次数为1000,样本抽取比率为0.8。在PLS-LDA分析中,纯山茶油样本的类别值为1,掺假山茶油样本的类别值为-1,交叉验证的最大主成分数为15。SPA、CARS及UVE变量选择方法和PLS-LDA均在Matlab R2014a(The Math Works,美国)中运行完成。

建立的山茶油掺假检测模型性能由错误率、灵敏度及特异性指标进行评价。灵敏度为纯山茶油样本中被正确分类为纯山茶油样本的比率。特异性为掺假山茶油样本中被正确分类为掺假山茶油样本的比率。

3 结果与讨论

3.1 光谱分析

图1为所有纯山茶油和掺假山茶油样本的平均光谱。由图1可知,两平均光谱在350~700 nm波段范围存在差异,究其原因可能是由于样本之间的颜色深浅引起。此外,样本光谱在700~1800 nm波段范围基本重合,无明显差别,但在1210、1410、1722及1760 nm左右存在明显的吸收峰,表明该波段范围包含较多有用的光谱信息,需要采用化学计量学方法进行提取。为了排除样本颜色和光谱仪末端噪声对山茶油掺假检测的

影响,将样本光谱的可见光波段(350~779 nm)及末端波段(1781~1800 nm)去除,后续分析仅在780~1780 nm波段范围内进行,该波段范围内共包含1001个光谱波长变量。

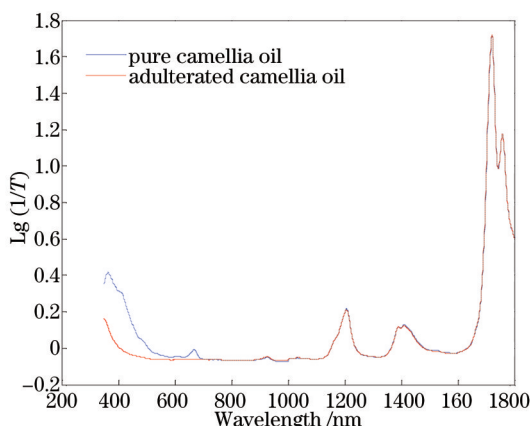


图1 所有纯山茶油和掺假山茶油样本的平均光谱

Fig.1 Average spectra of all pure camellia oil and adulterated camellia oil samples

3.2 SPA 变量选择

采用SPA方法在780~1780 nm波段范围内对波长变量进行筛选。图2为经SPA变量筛选获得的所有波长变量的COSS值。所有波长变量的COSS值范围为0.123~23.094,共有37个波长变量的COSS值小于2,即 p 值大于0.01,此类波长变量为非信息变量。对于剩余的波长变量按照COSS值从大到小进行排列。图3为有用信息变量1243 nm和无用信息变量1742 nm的预测误差分布图。从图3可以看出,有用信息变量1243 nm的NPE分布与PPE分布差异明显,即该变量的 p 值小,COSS值大,而无用信息变量1742 nm的NPE分布与PPE分布非常接近,即该变量的 p 值大,COSS值小。

为获得最优变量组合,将波长变量按照COSS值大小依次加入掺假检测模型中,并计算交互验证错误率,根据交互验证错误率最小选择最优的变量组合。由于波长变量数众多,将10个波长变量作为一组依次加入掺假检测模型中以初步确定较优的变量组合,在此基础上再进一步确定最优的变量组合。图4为不同波长变量数下山茶油掺假检测模型的交互验证错误率。由图4(a)可知,波长变量数为10~120时,模型的交互验证错误率逐渐下降,而后随着波长变量数的继续增加,模型的交互验证错误率反而逐渐上升。因此,确定前120个波长变量为较优的变量组合。在此基础上,选择波长变量数为110~130继续进行分析。由图4(b)可知,波长变量数由110增加到114时,交互验证错误率呈下降趋势,而后随着波长变量数的增加,交互验证错误率呈上升趋势。波长变量数为114时,模型的交互验证错误率最低,为0.0018。因此,经SPA变量筛选,共有114个波长变量被保留。

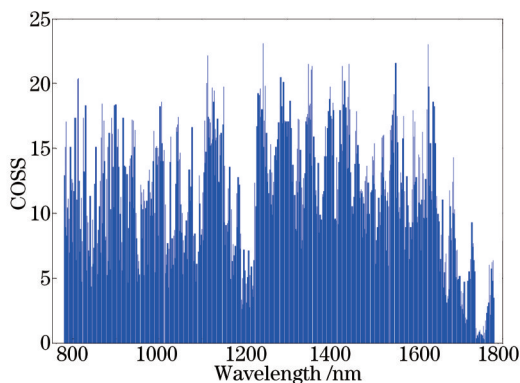


图2 经SPA变量筛选获得的所有波长变量的COSS值

Fig.2 COSS values of all wavelength variables by SPA method

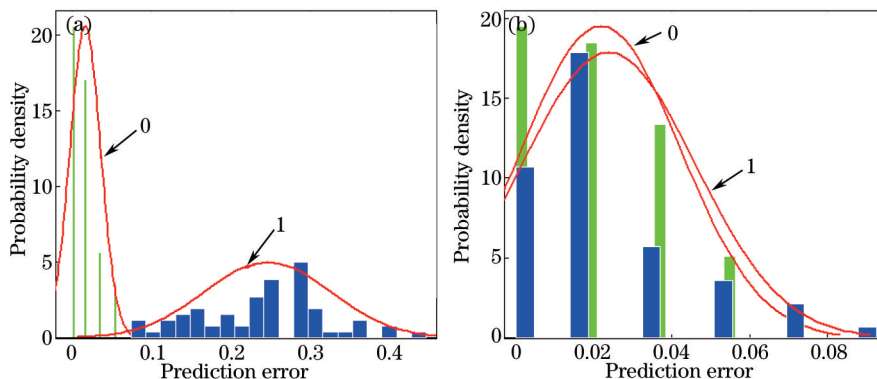


图3 (a) 有用信息变量 1243 nm 和(b)无用信息变量 1742 nm 的预测误差分布图。

“0”代表正常预测误差分布，“1”代表重排预测误差分布

Fig.3 Prediction error distribution of (a) an informative variable of 1243 nm and (b) an uninformative variable of 1742 nm.

“0” stands for the distribution of NPE, while “1” represents the distribution of PPE

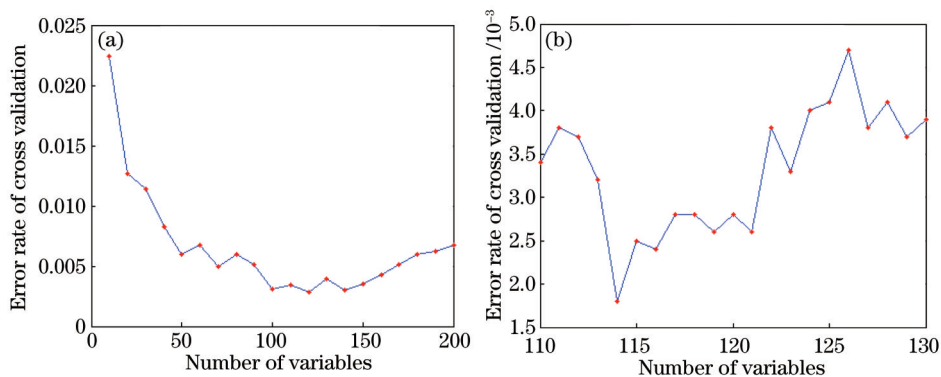


图4 不同波长变量数时山茶油掺假检测模型的交互验证错误率。

(a)变量数为 10~200,间隔为 10; (b)变量数为 110~130,间隔为 1

Fig.4 Error rate of cross validation of adulteration detection models for camellia oils under different number of wavelength variables.

(a) Number of variables is 10~200, interval is 10; (b) number of variables is 110~130, interval is 1

3.3 模型建立及预测

利用 PLS-LDA 方法对 114 个波长变量建立山茶油掺假检测模型,并对预测集样本进行预测。表 3 为不同变量选择方法下山茶油掺假检测的 PLS-LDA 结果。由表 3 可知,经 SPA 变量筛选后,建模变量数由 1001 个下降为 114 个,而预测集的交互验证错误率却由 0.0226 下降为 0,特异性由 0.9714 上升为 1,掺假检测模型性能得到有效改善。表明 SPA 方法是一种有效的变量选择方法,能简化模型,提高模型的预测精度和稳定性。与 CARS-PLS-LDA 模型相比,SPA-PLS-LDA 模型的建模变量数多,而预测集的交互验证错误率、灵敏度及特异性均与其一致,两者模型性能相当。与 UVE-PLS-LDA 模型相比,SPA-PLS-LDA 模型的建模变量数少,但模型性能优于 UVE-PLS-LDA 模型,交互验证错误率由 0.0150 下降为 0,特异性由 0.9810 上升为 1。由此可见,SPA 方法优于 UVE 方法,与 CARS 方法相当。

图 5 为预测集样本的 SPA-PLS-LDA 预测结果。由图 5 可知,纯山茶油样本的预测值为 2.08~5.80 之间,掺假山茶油样本的预测值为 -2.67~-0.14,纯山茶油样本和掺假山茶油样本均被完全正确分类,错误率为 0。

表 3 采用不同变量选择方法时山茶油掺假检测的 PLS-LDA 结果

Table 3 PLS-LDA results of adulteration detection of camellia oils with different variable selection methods

Method	Number of variables	Calibration			Prediction		
		Error rate	Sensitivity	Specificity	Error rate	Sensitivity	Specificity
None	1001	0.0037	1	0.9952	0.0226	1	0.9714
SPA	114	0	1	1	0	1	1
CARS	54	0	1	1	0	1	1
UVE	138	0.0075	1	0.9905	0.0150	1	0.9810

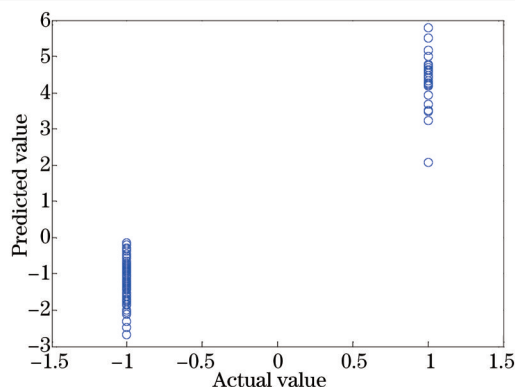


图5 预测集样本的SPA-PLS-LDA预测结果

Fig.5 Prediction results of samples in prediction set by SPA-PLS-LDA

4 结 论

利用近红外光谱联合SPA变量优选对山茶油的复杂掺假进行检测。研究表明,近红外光谱联合SPA方法可以对山茶油的复杂掺假进行检测,预测集样本的分类错误率、灵敏度及特异性分别为0、1和1。SPA方法优于UVE方法,与CARS方法相当。SPA方法可以有效筛选波长变量,简化模型并提高模型的预测精度和稳定性。研究结果可为山茶油掺假快速检测仪的开发提供理论参考。

参 考 文 献

- 1 Zhao Jiewen, Bi Xiakun, Lin Hao, *et al.*. Visible-near-infrared transmission spectra for rapid analysis of the freshness of eggs[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013, 50(5): 053003.
赵杰文, 毕夏坤, 林 颖, 等. 鸡蛋新鲜度的可见-近红外透射光谱快速识别[J]. *激光与光电子学进展*, 2013, 50(5): 053003.
- 2 Guo Peiyuan, Lin Yan, Fu Yan, *et al.*. Research on freshness level of meat based on near-infrared spectroscopic technique[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013, 50(3): 033002.
郭培源, 林 岩, 付 妍, 等. 基于近红外光谱技术的猪肉新鲜度等级研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2013, 50(3): 033002.
- 3 Wu Chunyang, Lu Qipeng, Ding Haiquan, *et al.*. Noninvasive blood glucose sensing with near-infrared spectroscopy based on interstitial fluid[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(11): 1117001.
吴春阳, 卢启鹏, 丁海泉, 等. 利用人体组织液进行近红外无创血糖测量[J]. *光学学报*, 2013, 33(11): 1117001.
- 4 Song Jia, Li Chenliang, Xing Gaoyang, *et al.*. Study on analyzing active ingredient of *Marasmius androsaceus* via radial basis function neural network combining with near infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2014, 34(12): 1230001.
宋 佳, 李臣亮, 邢高杨, 等. 径向神经网络结合近红外光谱技术分析安络小皮伞发酵组分的研究[J]. *光学学报*, 2014, 34(12): 1230001.
- 5 Zhang Haidong, Li Guirong, Li Ruocheng, *et al.*. Determination of tea polyphenols content in Puerh tea using near-infrared spectroscopy combined with extreme learning machine and GA-PLS algorithm[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013, 50(4): 043001.
张海东, 李贵荣, 李若诚, 等. 近红外光谱结合极限学习机和GA-PLS算法检测普洱茶茶多酚含量[J]. *激光与光电子学进展*, 2013, 50(4): 043001.
- 6 S A Haughey, P Galvin-King, Y C Ho, *et al.*. The feasibility of using near infrared and Raman spectroscopic techniques to detect fraudulent adulteration of chili powders with Sudan dye[J]. *Food Control*, 2015, 48: 75-83.
- 7 L Zhang, X Zhang, L Ni, *et al.*. Rapid identification of adulterated cow milk by non-linear pattern recognition methods based on near infrared spectroscopy[J]. *Food Chemistry*, 2014, 145: 342-348.
- 8 H Chen, C Tan, T Wu, *et al.*. Discrimination between authentic and adulterated liquors by near-infrared spectroscopy and ensemble classification[J]. *Spectrochimica Acta Part A - Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2014, 130: 245-249.
- 9 Cao Fang, Wu Di, He Yong, *et al.*. Variety discrimination of grapes based on visible-near reflection infrared spectroscopy[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, 29(2): 537-540.
曹 芳, 吴 迪, 何 勇, 等. 基于可见-近红外反射光谱技术的葡萄品种鉴别方法的研究[J]. *光学学报*, 2009, 29(2): 537-540.

- 10 A A Christy, S Kasemsumran, Y Du, *et al.*. The detection and quantification of adulteration in olive oil by near-infrared spectroscopy and chemometrics[J]. *Analytical Sciences*, 2004, 20(6): 935-940.
- 11 Zhuang Xiaoli, Xiang Yuhong, Qiang Hong, *et al.*. Quality analysis of olive oil and quantification detection of adulteration in olive oil by near-infrared spectrometry and chemometrics[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2010, 30(4): 933-936.
庄小丽, 相玉红, 强 洪, 等. 近红外光谱和化学计量学方法用于橄榄油品质分析与掺杂量检测[J]. *光谱学与光谱分析*, 2010, 30(4): 933-936.
- 12 H Yang, J Irudayaraj. Comparison of near-infrared, Fourier transform-infrared, and Fourier transform-Raman methods for determining olive pomace oil adulteration in extra virgin olive oil[J]. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 2001, 78(9): 889-895.
- 13 B Ozturk, A Yalcin, D Ozdemir. Determination of olive oil adulteration with vegetable oils by near infrared spectroscopy coupled with multivariate calibration[J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2010, 18(3): 191-201.
- 14 A G Mignani, L Ciaccheri, H Ottevaere, *et al.*. Visible and near-infrared absorption spectroscopy by an integrating sphere and optical fibers for quantifying and discriminating the adulteration of extra virgin olive oil from Tuscany[J]. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2011, 399(3): 1315-1324.
- 15 Wang Chuanxian, Chu Qinghua, Ni Xinlu, *et al.*. Nondestructive identification of olive oil by near infrared spectroscopy[J]. *Food Science*, 2010, 31(24): 402-404.
王传现, 褚庆华, 倪昕路, 等. 近红外光谱法用于橄榄油的快速无损鉴别[J]. *食品科学*, 2010, 31(24): 402-404.
- 16 D Ozdemir, B Ozturk. Near infrared spectroscopic determination of olive oil adulteration with sunflower and corn oil[J]. *Journal of Food and Drug Analysis*, 2007, 15(1): 40-47.
- 17 Yuan Jiaojiao, Wang Chengzhang, Chen Hongxia. Study on the quantitative analysis of camellia oil adulterated with soybean oil by near infrared transmittance spectroscopy (NITS)[J]. *Journal of the Chinese Cereals and Oils Association*, 2012, 27(3): 110-114.
原姣姣, 王成章, 陈虹霞. 近红外透射光谱分析油茶籽油掺入豆油的研究[J]. *中国粮油学报*, 2012, 27(3): 110-114.
- 18 Sun Tong, Hu Tian, Xu Wenli, *et al.*. Adulteration discrimination of camellia seed oil by Vis/NIR spectra and UVE-GA method[J]. *China Oils and Fats*, 2013, 38(10): 75-79.
孙 通, 胡 田, 许文丽, 等. 基于 UVE-GA 变量优选的山茶油可见/近红外光谱掺假鉴别[J]. *中国油脂*, 2013, 38(10): 75-79.
- 19 L Wang, F S C Lee, X Wang, *et al.*. Feasibility study of quantifying and discriminating soybean oil adulteration in camellia oils by attenuated total reflectance MIR and fiber optic diffuse reflectance NIR[J]. *Food Chemistry*, 2006, 95: 529-536.
- 20 Zhang Juhua, Zhu Xiangrong, Shang Xuebo, *et al.*. Quantification analysis of camellia oils adulteration with rapeseed oil and soybean oil by combining near infrared spectroscopy and partial-least-squares[J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2012, 33(3): 334-336.
张菊华, 朱向荣, 尚雪波, 等. 近红外光谱结合偏最小二乘法用于纯茶油中掺伪菜籽油和大豆油的定量分析[J]. *食品工业科技*, 2012, 33(3): 334-336.
- 21 T Wu, M Yang, H F Wei, *et al.*. Application of metabolomics in traditional Chinese medicine differentiation of deficiency and excess syndromes in patients with diabetes mellitus[J]. *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine*, 2012: 968083.
- 22 W Zhang, L X Zhang, H D Li, *et al.*. GC-MS based serum metabolomic analysis of isoflurane-induced postoperative cognitive dysfunctional rats: Biomarker screening and insight into possible pathogenesis[J]. *Chromatographia*, 2012, 75(13-14): 799-808.
- 23 H D Li, M M Zeng, B B Tan, *et al.*. Recipe for revealing informative metabolites based on model population analysis[J]. *Metabolomics*, 2010, 6(3): 353-361.
- 24 H D Li, Y Z Liang, Q S Xu, *et al.*. Model population analysis for variable selection[J]. *Journal of Chemometrics*, 2010, 24(7-8): 418-423.
- 25 H D Li, Y Z Liang, Q S Xu, *et al.*. Key wavelengths screening using competitive adaptive reweighted sampling method for multivariate calibration[J]. *Analytica Chimica Acta*, 2009, 648(1): 77-84.
- 26 V Centner, D L Massart, O E Denoerd, *et al.*. Elimination of uninformative variables for multivariate calibration[J]. *Analytical Chemistry*, 1996, 68(21): 3851-3858.

栏目编辑: 吴秀娟