

doi: 10.3788/gzxb20134209.1123

基于参量化二维相关红外谱和最小二乘支持向量机判别掺杂牛奶

杨延荣^a, 杨仁杰^a, 张志勇^a, 杨士春^b, 梁鹏^c

(天津农学院 a. 机电工程系; b. 农业分析测试中心; c. 食品科学系, 天津 300384)

摘 要: 将参量化二维相关谱方法与最小二乘向量机结合起来, 建立一种新的掺杂牛奶判别方法. 采集 48 个合格纯牛奶样品, 并分别配置浓度范围 0.01~0.3 g/L 的掺杂尿素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂四环素牛奶各 16 个. 在研究纯牛奶和掺杂牛奶二维相关红外同步谱特性的基础上, 提取并计算了各样品相关同步谱的 6 个统计特征参量. 将处理后的 6 个特征参量输入最小二乘支持向量机, 建立掺杂牛奶与纯牛奶的判别模型, 该模型对未知样品的判别正确率为 90.6%. 结果表明: 参量化二维相关谱和最小二乘支持向量机为快速判别牛奶是否掺杂提供了一种新的可能的方法.

关键词: 二维相关红外谱; 参量化; 最小二乘支持向量机; 掺杂牛奶; 尿素; 三聚氰胺; 四环素

中图分类号: O657.33

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2013)09-1123-6

Discrimination of Adulterated Milk Using Least Square Support Vector Machines Combined with Two-dimensional Correlation Infrared Spectroscopy

YANG Yan-rong^a, YANG Ren-jie^a, ZHANG Zhi-yong^a, YANG Shi-chun^b, LIANG Peng^c

(a. Department of Electromechanical Engineering; b. Laboratory of Agricultural Analysis;

c. Department of Food Science, Tianjin Agricultural University, Tianjin 300384, China)

Abstract: A new method for the discrimination of adulterated milk based on two-dimensional(2D) correlation infrared spectroscopy and least square support vector machines (LS-SVM) was proposed. 48 pure milk samples were collected and 16 urea-tainted milk (0.01~0.3 g/L), 16 melamine-tainted milk (0.01~0.3 g/L), 16 tetracycline-tainted milk (0.01~0.3 g/L) were prepared. Based on the characteristics of 2D correlation infrared spectra of pure milk and adulterated milk, 6 apparent statistic parameters of all samples were extracted and calculated. These 6 parameters were used as input for LS-SVM to build discriminant model of adulterated milk and pure milk. The recognition rate of unknown samples was 90.6%. The results reveal that parameterization of 2D correlation spectra in combination with LS-SVM method has a feasible potential to discrimination adulterated milk and pure milk.

Key words: Two-dimensional correlation infrared spectroscopy; Parameterization; Least Square Support Vector Machines (LS-SVM); Adulterated milk; Urea; Melamine; Tetracycline

0 引言

近年来, 乳制品安全问题屡见不鲜, 从“阜阳奶粉事件”到“还原奶事件”, 从“光明牛奶回奶事件”到

“雀巢奶粉事件”, 从“2008 年三聚氰胺事件”到“2011 年的黄曲霉素事件”, 再到“2013 年的美素奶粉”等事件已经暴露出了我国乳制品安全问题的严重性, 乳制品安全问题已成为社会关注的焦点. 便捷

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(No. 31201359)资助

第一作者: 杨延荣(1976-), 女, 讲师, 硕士, 主要研究方向为农业测试技术. Email: tjshyyr@sina.com

通讯作者: 杨仁杰(1978-), 男, 讲师, 博士, 主要研究方向为食品安全检测和农业环境测试. Email: rjyang1978@163.com

收稿日期: 2013-04-07; 录用日期: 2013-05-20

快速的检测方法将是防范乳制品掺假和控制乳制品安全的关键。

传统的奶制品质量检测主要是使用一些化学分析方法,其结果准确,但过程耗时、费力,一般需要试剂,对样本具有破坏性.此外,由于各种掺假现象的层出不穷,传统化学方法的应对显迟缓和繁琐^[1].基于光谱的检测方法具有非接触、不污染样品、重复性好、适合现场-在线检测等优点,已经被广泛用于食品、医药等各个领域^[2-5].但是由于牛奶中掺杂物的多样化和微量化,掺杂物特征峰多与牛奶固有组分特征峰相互重叠,掺杂物特征信息与待分析组分之间呈现非线性关系,使得常规的二维谱和线性模式识别方法无法有效地对掺杂牛奶进行判别.而二维相关光谱技术与常规二维谱相比具有更高的分辨率,更好地提取微弱的特征信息能力,能对复杂的图谱进行解析,是一种很有发展前景的分析技术^[6-8].杨仁杰等在研究掺杂尿素牛奶近红外和中红外二维相关谱特性基础上,选择随掺杂物变化敏感区域作为建模区间,基于常规二维谱和偏最小二乘法定量分析了牛奶中掺杂的尿素^[9].本文提出一种基于二维相关谱与模式识别实现掺杂牛奶与纯牛奶的判定方法.

支持向量机以其在解决小样本、高维数、非线性等方面的独特优势,被广泛应用于各个领域的识别和分类^[10-12].但是二维相关谱矩阵是三维数据,需要将二维相关谱矩阵拉直(unfold)为二维,然后再与支持向量机结合起来进行分析.由于拉直后的数据非常庞大,建模所需时间长;而且有些数据本身对分类的贡献很小或由于测量原因而有可能不稳定,若将它们输入支持向量机进行建模,可能会影响模型的稳定性和预测能力,同时也增加了运算量而降低运算速率^[12].参量化二维相关谱是在二维相关谱的基础上进一步提取掺杂物的特征信息,提取的参量更具有“代表性”(待分析组分的特征信息).因此,本文利用参量化理论,提取纯牛奶、掺杂牛奶二维相关红外同步谱6个统计特征参量,将这些参量与最小二乘支持向量机结合起来建立掺杂牛奶与纯牛奶的判别模型.

1 二维相关谱参量化方法

二维相关光谱的概念最早由 Noda 提出,并将该技术推广到红外光谱以外的其他领域^[6].假定原始光谱数据矩阵 S 包含 k 个光谱,即矩阵为 k 行,则二维相关同步谱矩阵可表示为

$$\Phi(v_1, v_2) = \frac{1}{k-1} S^T S \quad (1)$$

矩阵 S 包含两个光谱,即 $k=2$.当第一行为纯牛奶光谱时,如果第二行为第 i 个掺杂牛奶光谱,根据式(1)计算得到第 i 个掺杂牛奶的二维相关同步谱;如果第二行为第 i 个纯牛奶光谱,则可得到第 i 个纯牛奶的二维相关同步谱.

二维相关光谱的参量化实质上就是对二维相关同步谱从统计学上进行数学特征提取.从相关谱在相关强度数值域的分布特征和相关谱在频率空间域的分布特征两个方面提取6个特征参量^[13-14]:

1) 平均值:代表在指定波数区域内二维相关同步谱的平均相关强度.

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{m \times n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \Phi(v_i, v_j) \quad (2)$$

式中 $\Phi(v_i, v_j)$ 是在波数 (v_i, v_j) 处的二维相关同步谱强度, m 和 n 分别是二维相关同步谱矩阵的行数和列数.

2) 方差:反映一组波数处 (v_i, v_j) 相关强度值与平均值的差异程度.

$$\sigma = \frac{1}{m \times n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m [\Phi(v_i, v_j) - \bar{\Phi}]^2 \quad (3)$$

3) 标准差:反映二维相关光谱在相关强度值域的离散程度.与方差相比,标准差比方差更能清楚反应相关谱强度离散程度.

$$s = \sqrt{\frac{1}{m \times n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m [\Phi(v_i, v_j) - \bar{\Phi}]^2} \quad (4)$$

4) 重心:反映样本的二维相关强度集中的波数位置.

$$m_x = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m v_i \Phi(v_i, v_j)}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \Phi(v_i, v_j)}$$

$$m_y = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m v_j \Phi(v_i, v_j)}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \Phi(v_i, v_j)} \quad (5)$$

5) 偏度:反映相关峰分布的不对称程度或偏斜程度.

$$\Phi_{\text{skew}} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m [\Phi(v_i, v_j) - \bar{\Phi}]^3}}{\sigma^3} \quad (6)$$

6) 峰度:反映相关峰集中程度或分布曲线的尖峭程度.

$$\Phi_{\text{kurt}} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m [\Phi(v_i, v_j) - \bar{\Phi}]^4}}{\sigma^4} \quad (7)$$

2 材料与方法

2.1 仪器与分析条件

实验所用仪器为美国 Nicolet IR200 傅里叶红

外光谱仪,仪器采用 DTGS 检测器,光谱采集范围为(900~1 700) cm^{-1} ,分辨率 8 m^{-1} ,扫描 32 次求平均值。

试验前需要对测试样品进行均质处理,为了减少随机误差,测量时随机抽取样品进行光谱数据采集。在扫描待测样品之前,按照与扫描待测样品相同的参量设置方式采集蒸馏水的光谱作为背景光谱,样品光谱扣除背景光谱后的数据作为分析光谱。

2.2 试剂和样品处理

试验分别采用了蒙牛纯牛奶、伊利纯牛奶和天河纯牛奶进行对比试验。随机选取上述纯牛奶,利用电子天平称取不同质量的掺杂物分析纯,按照低密高疏的浓度分布原则,分别配置浓度范围都为 0.01~0.3 g/L 的掺杂尿素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂四环素牛奶各 16 个,纯牛奶样本 48 个。

2.3 最小二乘支持向量机 (LS-SVM)

由于 SVM 模型较为复杂,求解速度较慢。为了解决这个问题,Suykens J. A. K 提出一种新型支持向量机方法——最小二乘支持向量机(Least Squares Support Vector Machines, LS-SVM)^[15]。LS-SVM 是经典 SVM 的一种改进,采用求解线性方程组的方法代替经典 SVM 中较复杂的二次优化问题,降低了计算复杂性,加快了求解速度,提高了回归准确

度。LS-SVM 具体算法可参考文献[10-12]。

选用径向基函数(Radial Basis Function, RBF)作为核函数,在 LS-SVM 模型中,两个参量 γ 和 σ^2 影响着模型的预测能力,其中 γ 是正则化参量,决定适应误差的最小化和平滑程度, σ^2 是核函数 RBF 的参量, σ^2 值太小或太大,会对样本的数据造成过学习或欠学习的现象^[11]。采用交叉验证法对其进行优选,即计算不同参量 γ 和 σ^2 情况下的交叉验证均方根差(Root Mean Square Errors of Cross Validation, RMSECV),选择 RMSECV 最小时所对应的 σ 和 N 即为最佳建模参量,其中 RMSECV 为

$$\text{RMSECV} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (y_i - y_{pi})^2}{m-1}} \quad (8)$$

式中: y_i, y_{pi} 分别是第个 i 样品的实际值和预测值, m 为校正集中的样本数。

3 结果与讨论

3.1 纯牛奶与掺杂牛奶二维相关红外谱

在 900~1 700 cm^{-1} 构建纯牛奶、掺杂尿素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂四环素牛奶的二维相关红外同步谱(见图 1)。从图 1 可以看出,在(900~1 200) cm^{-1} 范围内,三种掺杂牛奶相关同步谱几乎

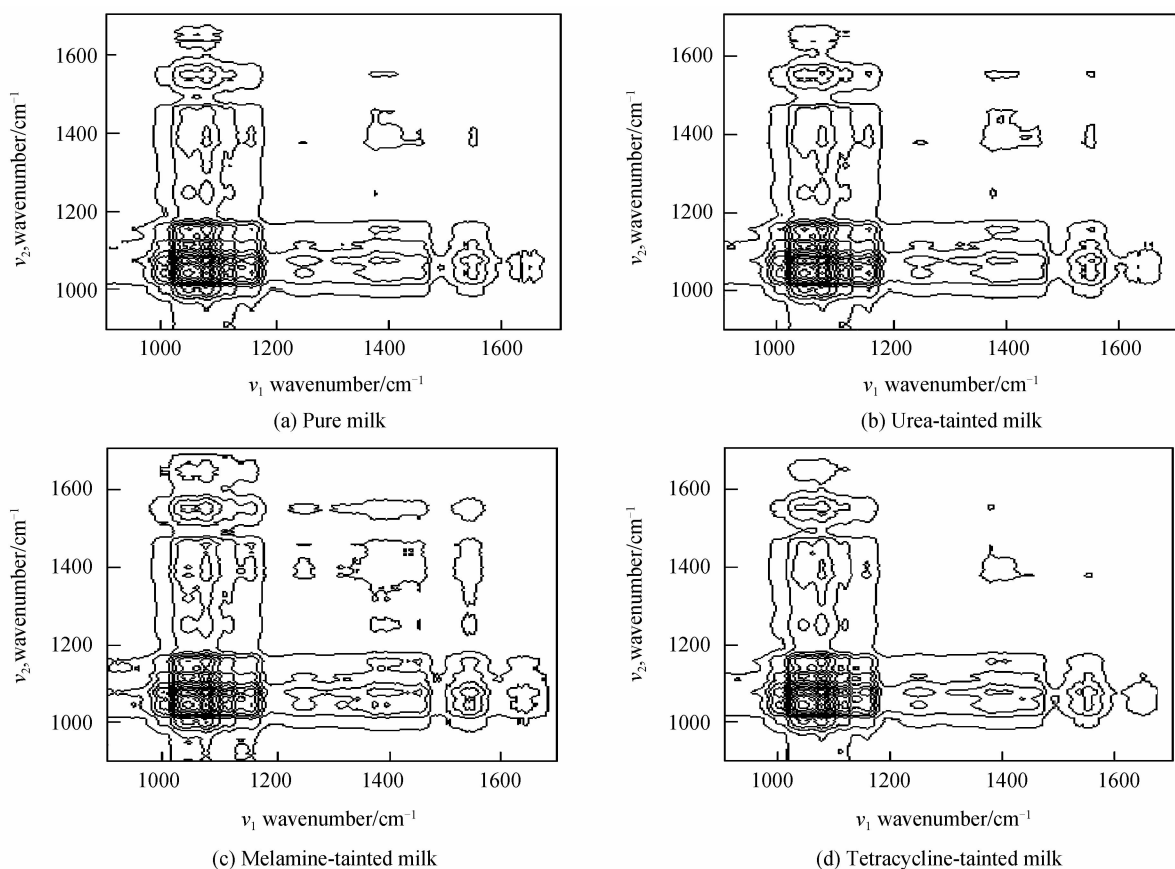


图 1 纯牛奶与掺杂牛奶二维相关红外同步谱

Fig. 1 Synchronous 2D correlation infrared spectra of pure milk and adulterated milk

与纯牛奶相同,这表明在 $900\sim 1\,200\text{ cm}^{-1}$ 区间特征信息主要是由纯牛奶固有组分吸收所引起. 在 $1\,200\sim 1\,700\text{ cm}^{-1}$ 区间,三种掺杂牛奶与纯牛奶相关谱在细微处略有差别,但差别并不明显,无法根据这些信息判别牛奶是否掺杂. 由此可见,虽然二维相关谱与常规二维谱相比,具有更好地提取特征信息能力,但是对于复杂的掺杂牛奶体系仍旧无法直接通过肉眼观察相关谱实现掺杂牛奶的判别,同样需要借助模式识别来进行判别.

3.2 二维相关红外同步谱特征参量的提取和标准化

采用 MATLAB R2011a 对 96 个二维相关同步谱矩阵(掺杂尿素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂四环素牛奶各 16 个,48 个对应纯牛奶)提取了 6 个特征参量:平均值、方差、标准差、重心、偏度和峰度. 由于不同的特征参量具有不同的量纲和数量级(方差和重心的数量级分别为: 10^{-4} 和 10^3),如果直接利用所提取的参量进行分析,就会突出数值较大的参量在分类分析中的作用,而相对消弱数值较小特征参量的作用^[14]. 因此,建模前对不同掺杂牛奶和纯牛奶样品的特征参量所组成的数组文件 $X = [x_{ij}]_{I \times J}$ 进行无量纲标准化处理. 本文采用式(9)进行标准变换.

$$x'_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \quad (i=1,2,\dots,I; j=1,2,\dots,J) \quad (9)$$

式中 $\bar{x}_j = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I x_{ij}$ 为第 j 个特征参量数组的平均值, $s_j = \left[\frac{1}{I-1} \sum_{i=1}^I (x_{ij} - \bar{x}_j)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$ 是第 j 个特征参量数组的标准差, I 为样本数, J 为特征数. 在对 6 个参量标准化的基础上,采用 LS-SVM 模式识别方法对掺杂牛奶和纯牛奶进行判定.

3.3 三种掺杂牛奶与纯牛奶 LS-SVM 判别模型

在 LS-SVM 模型中,以 1 和 -1 分别表示掺杂牛奶和纯牛奶. 按照浓度梯度法,从 48 个掺杂牛奶样本中选择 32 个样品作为校正集(10 个掺杂尿素牛奶,掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂四环素牛奶各 11 个),余下 16 个构成独立的预测集. 从 48 个纯牛奶样本中随机选取 32 个作为校正集,其余 16 个作为预测集. 对校正集中的 64 个样品,将归一化后的 6 个统计参量输入 LS-SVM,建立掺杂牛奶与纯牛奶的 LS-SVM 判别模型.

为了确定最佳的建模参量 γ 和 σ^2 ,分别计算在不同参量 γ 和 σ^2 下 LS-SVM 模型的 RMSECV,通过二步格点搜索和交叉验证方法搜索最佳正则化参量 γ 和 RBF 核参量 σ^2 的最佳组合. 设定 γ 和 σ^2 的初始值都为 0.1,搜索范围都为 0.1~100. 根据上述

设定的参量进行最佳参量的网格搜索,结果见图 2. 图中所示曲线为不同参量组合 $\log_2(\gamma)$ 和 $\log_2(\sigma^2)$ 下,LS-SVM 模型 RMSECV 等高线图. 图 2 中“.”表示粗选(搜索步长较大)过程,“×”表示精选(搜索步长较小)过程,粗选和精选网格点数都为 10×10 . 先粗选确立最优参量范围,再精选确定最佳的建模参量. 最终选择 $\gamma=68.31$ 和 $\sigma^2=1.24$ 时,建立掺杂牛奶与纯牛奶的 LS-SVM 判别模型.

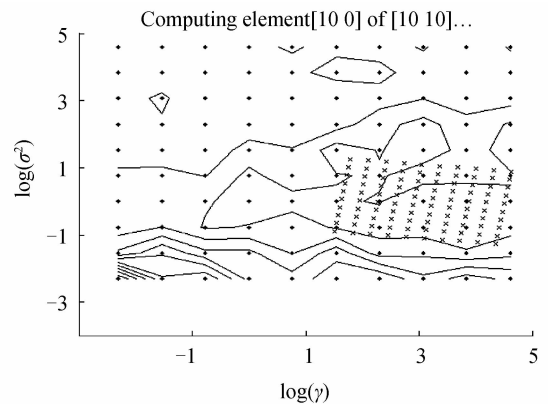


图 2 LS-SVM 参数寻优等高线图

Fig. 2 Contour plot of the optimization error for LS-SVM on the basis of parameters γ and σ^2 for classification

采用所建立的 LS-SVM 模型对校正集和预测集中的样品进行预测,预测结果见图 3. 显然,校正集中 64 个样品都得到正确判别;预测集中 3 个纯牛奶被误判为掺杂牛奶,其判别正确率为 81.3%,16 个掺杂牛奶(6 个掺杂尿素牛奶,掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂四环素牛奶各 5 个)的识别正确率为 100%. 所建 LS-SVM 模型对预测集中所有未知样品的判别正确率为 90.6%.

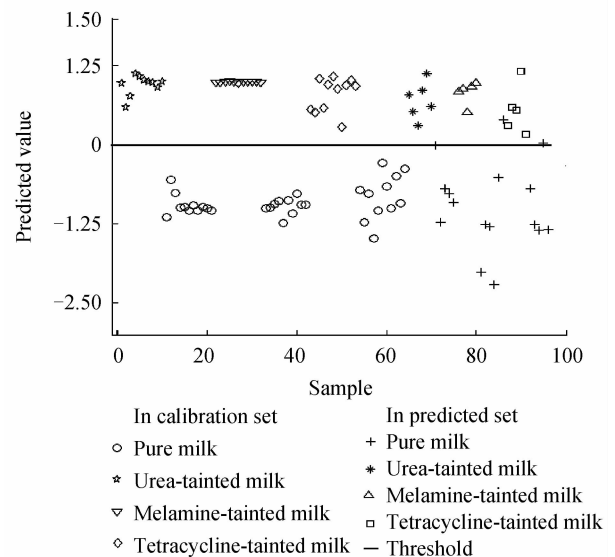


图 3 LS-SVM 模型对所有样品的预测结果

Fig. 3 Predicted values of all samples by LS-SVM model

为了进一步评价所建立的三种掺杂牛奶 LS-SVM 模型的性能,图 4 给出了掺杂牛奶与纯牛奶分

类的 ROC 曲线 (Receiver Operating Characteristic Curve), 其中横坐标为 1-特异 (1-specificity), 纵坐标为灵敏度 (sensitivity), 分别表示两类样本的分类准确率. 从图上可以看出, 所建立的 LS-SVM 模型 ROC 曲线面积为 0.93. 据文献 [11] 和 [16] 报道: ROC 曲线下的面积越大, 模型的分类能力越强. 当 ROC 曲线下面积为 1 时, 可认为所建分类模型具有很好的分类能力. 由此可见, 所建立的三种掺杂牛奶与纯牛奶 LS-SVM 模型具有较强的判别能力.

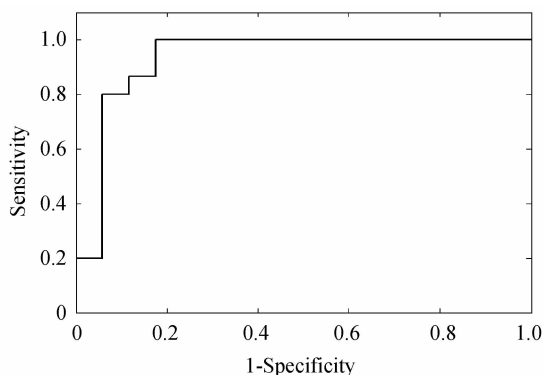


图 4 掺杂牛奶与纯牛奶 LS-SVM 判别模型的 ROC 曲线
Fig. 4 Receiver operating characteristic (ROC) curve of adulterated milk and pure milk

分别建立了三种掺杂牛奶与其对应纯牛奶的 LS-SVM 判别模型, 三个模型中校正集样品个数都为 21, 预测集样品个数都为 11, 表 1 给出了三个模型的建模参量和模型预测结果. 对于掺杂尿素牛奶与纯牛奶 LS-SVM 判别模型, 校正集 21 个样品中, 有 2 个纯牛奶被误判为掺杂牛奶, 其判别正确率为 90.5%, 预测集 11 个样品中, 仅有 1 个纯牛奶被误判, 其判别正确率为 90.9%. 对于掺杂三聚氰胺与纯牛奶 LS-SVM 判别模型, 校正集和预测集中的所有样品都被正确识别. 对于掺杂四环素牛奶与纯牛奶 LS-SVM 判别模型, 校正集和预测集中各有一个纯牛奶样品被误判, 其判别正确率分别为 95.2% 和 90.9%.

表 1 三个 LS-SVM 模型建模参量及预测结果

Table 1 Parameters and discrimination results of three LS-SVM models

Models	Parameters of models	Discriminant accuracy	
		Training set	Testing set
Urea-tainted milk	$\gamma=0.2$ $\sigma^2=35.2$	90.5%	90.9%
Melamine-tainted milk	$\gamma=2.15$ $\sigma^2=2.2$	100%	100%
Tetracycline-tainted milk	$\gamma=2.5$ $\sigma^2=15.1$	95.2%	90.9%

4 结论

本文在研究纯牛奶、掺杂尿素牛奶、掺杂三聚氰

胺牛奶和掺杂四环素牛奶二维相关红外谱特性的基础上, 基于参量化理论提取了相关谱 6 个特征参量. 将所提取的参量与最小二乘支持向量机结合起来分别建立了掺杂尿素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶、掺杂四环素牛奶、三种掺杂牛奶与纯牛奶的 LS-SVM 判别模型, 这些模型对未知样品的判别正确率分别为 90.9%、100%、90.9% 和 90.6%. 研究结果表明: 基于参量化二维相关谱和 LS-SVM 判别掺杂牛奶是可行的. 该方法既利用了二维相关谱强的提取信息能力, 又减小了输入 LS-SVM 建模数据的维数, 具有较好的应用前景.

参考文献

- [1] PENG Pan, LIN Hui. Application of near-infrared spectroscopy in dairy product analysis [J]. *Bulletion of Advanced Technology Research*, 2010, **4**(2): 35-39.
彭攀, 林慧. 近红外光谱分析技术在奶制品检测中的应用[J]. *先进技术研究通报*, 2010, **4**(2): 35-39.
- [2] GU Chun-feng, LAN Xiu-feng, YU Yin-shan, et al. Fluorescence spectrum of milk solution [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2012, **24**(1): 107-111.
顾春峰, 兰秀风, 于银山, 等. 牛奶水溶液的荧光光谱研究[J]. *光子学报*, 2012, **24**(1): 107-111.
- [3] LU C H, XING B R, HAO G, et al. Rapid detection of melamine in milk powder by near infrared spectroscopy [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2009, **17**: 59-67.
- [4] MAUER L J, CHERNYSHOVA A A, HIATT A, et al. Melamine detection in infant formula powder using near- and mid-infrared spectroscopy [J]. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2009, **57**: 3974-3980.
- [5] LIU X L, JIA G, WU C M, et al. Determination of characteristic wave bands and detection of melamine in fishmeal by Fourier Transform near infrared spectroscopy [J]. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 2010, **18**(2): 113-120.
- [6] NODA I. Advances in two-dimensional correlation spectroscopy [J]. *Vibrational Spectroscopy*, 2004, **36**(2): 143-165.
- [7] YANG R J, LIU R, XU K X. Determination of melamine of milk based on two-dimensional correlation infrared spectroscopy [C]. *SPIE*, 2012, **8229**: 822918.
- [8] HU Xin-yao, WANG Qi, SUN Su-qin, et al. New developments of two-dimensional correlation spectroscopy [J]. *Journal of Guangxi Normal University*, 2003, **21**(2): 242-243.
胡鑫尧, 王琪, 孙素芹, 等. 二维相关光谱技术的研究进展[J]. *广西师范大学学报*, 2003, **21**(2): 242-243.
- [9] YANG Ren-Jie, LIU Rong, XU Ke-Xin. Detection of urea in milk using two-dimensional correlation spectroscopy and partial least square method [J]. *Transactions of the CSAE*, 2012, **28**(6): 259-263.
杨仁杰, 刘蓉, 徐可欣. 二维相关光谱结合偏最小二乘法测定牛奶中的掺杂尿素[J]. *农业工程学报*, 2012, **28**(6): 259-263.
- [10] XIONG Yu-hong, WEN Zhi-yu, CHEN Gang, et al. Spectral multicomponent analysis based on wavelet transform and support vector machine [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(10): 1514-1517.
熊宇虹, 温志渝, 陈刚, 等. 基于小波变换和支持向量机的光谱多组分分析[J]. *光子学报*, 2005, **34**(10): 1514-1517.

- [11] YU Ke, CHENG Yi-yu. Discriminating the genuineness of Chinese medicines with least squares support machines[J]. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 2006, **34**(4): 561-564.
虞科, 程翼宇. 一种基于最小二乘支持向量机算法的近红外光谱判别分析方法[J]. *分析化学*, 2006, **34**(4): 561-564.
- [12] YANG Jian-lei, ZHU Tuo, XU Yan, *et al.* Application of three-dimensional fluorescence spectra technique to discrimination of distilled spirits based on support vector machines[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2010, **30**(1): 243-246.
杨建磊, 朱拓, 徐岩, 等. 基于最小二乘支持向量机算法的三维荧光光谱技术在中国白酒分类中的应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2010, **30**(1): 243-246.
- [13] LI Zhen, SHANG Li-ping, DENG Hu, *et al.* Extraction of characteristic parameters of three-dimensional fluorescence spectra of tyrosine and tryptophan[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2009, **29**(7): 1925.
李朕, 尚丽平, 邓琥, 等. 色氨酸和酪氨酸的三维荧光光谱特征参量提取[J]. *光谱学与光谱分析*, 2009, **29**(7): 1925.
- [14] TIAN Guang-jun. Identification and determination of oil in water based on three-dimensional fluorescence spectra parameterization and pattern recognition [D]. Yanshan University, 2005.
田广军. 基于三维荧光光谱参量化及模式识别的水中油类鉴别与测定[D]. 燕山大学, 2005.
- [15] SUYKENS J A K, VANDEWALLE J. Least squares support vector machine classifiers[J]. *Neural Process Lett*, 1999, **9**(3): 293-300.
- [16] LI Shui-fang, SHAN Yang, ZHU Xiang-rong, *et al.* Detection of geographical origin of honey using near-infrared spectroscopy and chemometrics [J]. *Transactions of the CSAE*, 2011, **27**(8): 350-354.
李水芳, 单杨, 朱向荣, 等. 近红外光谱结合化学计量学方法检测蜂蜜产地[J]. *农业工程学报*, 2011, **27**(8): 350-354.