

基于拉曼光谱的食用调和油原料组分快速定量检测方法

董晶晶 吴静珠 陈岩 刘翠玲 陈立果

(北京工商大学食品安全大数据技术北京市重点实验室, 北京 100048)

摘要: 应用激光拉曼光谱技术结合偏最小二乘法实现了食用调和油中5种原料油(花生油、芝麻油、菜籽油、大豆油和玉米油)的定量检测。首先选取食用油脂脂肪酸信息丰富的 $169.58 \sim 1813.61 \text{ cm}^{-1}$ 谱区,再通过一阶导数 + Norris 3点预处理对该谱区进行滤波去噪,净化拉曼光谱信息,采用偏最小二乘法建立食用调和油中各原料组分的拉曼定量检测模型,其中花生油、芝麻油、菜籽油、大豆油和玉米油的检测模型的校正集相关系数分别为 0.999 8、0.941 8、0.998 8、0.999 8、0.996 1,验证集相关系数分别为 0.943 5、0.859 3、0.954 2、0.967 6、0.942 9,均方根误差分别为 0.117、0.218、0.128、0.125、0.179。研究表明,激光拉曼光谱法结合化学计量学方法快速、准确地测定食用调和油中各原料组分的含量具有可行性,且预测能力良好。

关键词: 拉曼光谱; 食用调和油; 原料组分; 定量检测; 偏最小二乘法

中图分类号: TS225.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2017)S0-0417-05

Rapid Quantitative Determination of Raw Material Components in Blended Edible Oil Based on Raman Spectroscopy

DONG Jingjing WU Jingzhu CHEN Yan LIU Cuiling CHEN Liguo

(Beijing Key Laboratory of Big Data Technology for Food Safety, Beijing Technology and Business University, Beijing 100048, China)

Abstract: Quantitative detection of five kinds of raw materials (peanut oil, sesame oil, rapeseed oil, soybean oil and corn oil) in blended edible oil was realized by laser Raman spectroscopy combined with Partial Least Squares method. Firstly, the $169.58 \sim 1813.61 \text{ cm}^{-1}$ spectral region with abundant fatty acid information was selected, and the spectral denoising and purification of the spectral region were carried out by first derivative + Norris 3 preconditioning. Then, Raman quantitative detection model was established for raw material components of blended edible oil by using Partial Least Squares. The correlation coefficients of calibration set of peanut oil, sesame oil, rapeseed oil, soybean oil and corn oil were 0.999 8, 0.941 8, 0.998 8, 0.999 8, 0.996 1, respectively. And the correlation coefficients of the verification set were 0.943 5, 0.859 3, 0.954 2, 0.967 6, 0.942 9, respectively. The root mean square error (RMSE) were 0.117, 0.218, 0.128, 0.125, 0.179, respectively. The results showed that laser Raman spectroscopy combined with chemometric resolution method can be used to determine the contents of raw material components in blended edible oil quickly and accurately. The good prediction ability can provide a theoretical basis for rapid detection of the content of blended edible oil.

Key words: Raman spectroscopy; blended edible oil; raw material component; quantitative detection; partial least squares

引言

食用调和油又称高合油,是根据使用需要,将两种以上的精炼油脂(香味油除外)按比例调和而成

的^[1-2]。目前市售的调和油种类多达几十种,一般选用花生油、芝麻油、菜籽油、大豆油、玉米油等为主要原料,并按一定比例调和而成^[3-4]。因为单一种类植物油脂肪酸含量及比例较为固定,长期摄入使

收稿日期: 2017-07-17 修回日期: 2017-11-20

基金项目: 北京市自然科学基金面上项目(4132008)、北京教委重点项目(KZ201310011012)和河北省科技计划项目(16272916)

作者简介: 董晶晶(1992—),女,硕士生,主要从事分子光谱技术在食用油品质快速检测中的应用研究,E-mail: 2426540132@qq.com

通信作者: 吴静珠(1979—),女,副教授,博士,主要从事分子光谱成像技术在农产品品质快速检测中的应用研究,E-mail: pubwu@163.com

人体的脂肪酸摄入不均衡,易导致代谢平衡紊乱,从而影响身体健康^[5]。食用调和油则可以通过调和多种油脂脂肪酸比例使其满足符合人体摄入需求^[6]。截至目前,食用调和油可供选用的标准仅有一个推荐性商业行业标准 SB/T 10292—1998,该标准并未涉及具体的原料配比和营养标识问题。由于食用调和油对应的国家标准缺位,因此,研究开发一种准确、便捷的食用调和油原料组分检测方法对食用油的质量管理及市场监测具有重要意义。

目前,不少研究人员对分子光谱技术在食用油的定性定量检测进行了探索性研究,并取得了一系列研究成果。其中,拉曼光谱的发展尤为迅速,具有快速、高效、无污染、无需前处理等优点,在许多领域都得到广泛的应用^[7-9]。食用油的拉曼光谱信息非常丰富,反映食用油脂脂肪酸信息的“C=C、C—C”伸缩振动所产生的谱带在拉曼光谱中属于强谱带^[10-11],谱峰明显,便于分析。

周秀军等^[12]以7类43个食用植物油样本为研究对象,采用食用油不饱和度两点描述法进行特征提取,在利用已知食用植物油样本构建训练样本库的基础上,对未知食用植物油品种的样本进行自动种类识别。能够快速、准确地实现食用植物油品种的快速分类,鉴别率达到了100%。刘燕德等^[13]以菜籽油、花生油、芝麻油及其调和油为研究对象,采用拉曼光谱技术结合化学计量学方法建立三组分食用调和油的定量检测模型,其中菜籽油、花生油和芝麻油含量的验证集决定系数 R_p^2 分别为0.990 4、0.977 1、0.965 8,均方根误差分别为0.018 8、0.026 2、0.037 9。上述研究表明,拉曼光谱技术在食用油种类鉴别和定量分析上都是可行的。

但是以往研究的对象均是三组分甚至两组分的食用调和油,而市场上的调和油多为多组分,有的原料组分在8种以上,且配比不明确。因此,在总结和借鉴已有研究的基础上,本文采用拉曼光谱技术对多组分食用调和油中各原料组分进行检测研究,建立多组分食用调和油中各组分含量的定量分析模型,为食用调和油的定量检测提供一种有效的检测方法。

1 材料与方 法

1.1 材料与试剂

通过市场调查,发现市售的食用调和油其原料组分除了以该油命名的食用油外,还包括一些其他的原料油,如菜籽油、大豆油、玉米油和棕榈油等。为使实验所用的调和油样本充分接近市售的食用调

和油,从天猫超市采购5种市场上的主流植物油,花生油、芝麻油、菜籽油、大豆油和玉米油,将其置于室温中,按照原料组分不同体积比配制调和油样本共72份,每个样本10 mL,将其置于塑料容器中,充分振荡使其混合均匀。其中优质的花生油、芝麻油占调和油样本的体积比从5%到60%,而廉价的菜籽油、大豆油和玉米油占调和油样本的体积比从10%到80%。具体的调和油样本原料各组分体积比如表1所示。

1.2 仪器与设备

仪器采用美国赛默飞世尔科技公司的 DXR 共聚焦激光显微拉曼光谱仪。

采用金属质容器装样,移液枪逐一取样(取样量统一为600 μL),试验参数设置如下:扫描样品波数范围:100 ~ 3 300 cm^{-1} ;目镜聚焦:10倍;激光光源:780 nm;激光功率:18 mW;光阑设置:50 μm pinhole;光栅:400 lines/mm;曝光时间:5.00 s;曝光次数:3。采集到的原始光谱如图1所示。深色样本如芝麻油、菜籽油及其调和油样本,具有较强的荧光反应,光谱上存在明显的鼓包。

2 结果与分析

2.1 预处理

从图1可以看出,食用油的拉曼光谱在2 800 ~ 3 000 cm^{-1} 范围内的较高峰,拉曼强度较大,该峰是脂肪酸链 C—H 键的伸缩振动产生的,不同种类的食用油在此处的拉曼强度差别并不明显^[14-15]。而反映食用油脂脂肪酸信息的 C=C、C=O、C—C 等特征波段主要集中在169.58 ~ 1 813.61 cm^{-1} 范围内,为食用油拉曼光谱的指纹区^[16-17],不同种类食用油的拉曼光谱在这一波段开始出现不同的拉曼特征峰,可以作为食用油种类识别的特征区域。本试验选用特征峰比较集中的波段169.58 ~ 1 813.61 cm^{-1} 进行分析建模,选取的特征波段光谱如图2所示。

实验采用 TQ 软件提供的一阶导数、一阶导数 + Savitzky - Golay (5、7、9、11、13、17 点)平滑^[18]、一阶导数 + Norris 导数 (5、7、9、11、13、17 点)平滑、二阶导数、二阶导数 + Savitzky - Golay (5、7、9、11、13、17 点)平滑、二阶导数 + Norris 导数 (5、7、9、11、13、17 点)平滑等方法进行光谱预处理,预处理后的谱图如图3所示。

2.2 建模分析

经光谱预处理后,对已选波段(169.58 ~ 1 813.61 cm^{-1} ,共1 644个波长点数)进行混合建模分析,采用偏最小二乘法(Partial least squares, PLS)建立食用调和油原料组分的定量分析模型,建模结

表 1 调和油样本的原料组分体积比

Tab.1 Volume ratio of components in the blended oil samples

样本编号	实际体积比					样本编号	实际体积比				
	花生油	芝麻油	菜籽油	大豆油	玉米油		花生油	芝麻油	菜籽油	大豆油	玉米油
1	1	0	0	0	0	37	0	0.3	0.2	0.5	0
2	0	1	0	0	0	38	0	0.4	0.2	0.4	0
3	0	0	1	0	0	39	0	0.2	0.3	0	0.5
4	0	0	0	1	0	40	0	0.4	0.1	0	0.5
5	0	0	0	0	1	41	0	0.4	0.2	0	0.4
6	0.5	0.5	0	0	0	42	0	0	0.2	0.2	0.6
7	0.4	0.6	0	0	0	43	0	0	0.4	0.2	0.4
8	0	0.2	0.8	0	0	44	0.2	0	0.1	0.7	0
9	0	0.4	0.6	0	0	45	0.2	0	0.3	0.5	0
10	0	0	0.2	0.8	0	46	0.4	0	0.2	0.4	0
11	0	0	0.4	0.6	0	47	0	0.2	0	0.2	0.6
12	0	0	0	0.2	0.8	48	0	0.4	0	0.1	0.5
13	0	0	0	0.4	0.6	49	0.2	0	0.1	0	0.7
14	0.2	0	0.8	0	0	50	0.4	0	0.2	0	0.4
15	0.6	0	0.4	0	0	51	0.2	0	0	0.3	0.5
16	0	0.4	0	0.6	0	52	0.4	0	0	0.2	0.4
17	0	0.6	0	0.4	0	53	0.2	0.1	0.2	0.5	0
18	0	0	0.2	0	0.8	54	0.2	0.1	0.3	0.4	0
19	0	0	0.4	0	0.6	55	0.2	0.1	0.4	0.3	0
20	0.2	0	0	0.8	0	56	0	0.2	0.1	0.2	0.5
21	0.4	0	0	0.6	0	57	0	0.2	0.1	0.3	0.4
22	0	0.4	0	0	0.6	58	0	0.2	0.1	0.4	0.3
23	0	0.6	0	0	0.4	59	0.2	0	0.1	0.2	0.5
24	0.4	0	0	0	0.6	60	0.2	0	0.2	0.2	0.4
25	0.6	0	0	0	0.4	61	0.2	0.1	0.2	0	0.5
26	0.2	0.4	0.6	0	0	62	0.2	0.2	0.2	0	0.4
27	0.3	0.2	0.5	0	0	63	0.2	0.1	0	0.3	0.4
28	0.4	0.3	0.3	0	0	64	0.2	0.1	0	0.4	0.3
29	0.5	0.1	0.4	0	0	65	0.2	0.2	0	0.4	0.2
30	0.3	0.1	0	0.6	0	66	0.2	0.2	0	0.2	0.4
31	0.2	0.3	0	0.5	0	67	0.05	0.15	0.05	0.15	0.6
32	0.4	0.2	0	0.4	0	68	0.05	0.05	0.15	0.25	0.5
33	0.2	0.1	0	0	0.7	69	0.1	0.1	0.1	0.3	0.4
34	0.4	0.1	0	0	0.5	70	0.05	0.15	0.05	0.45	0.3
35	0.2	0.4	0	0	0.4	71	0.05	0.05	0.2	0.5	0.2
36	0	0.2	0.2	0.6	0	72	0.05	0.2	0.05	0.6	0.1

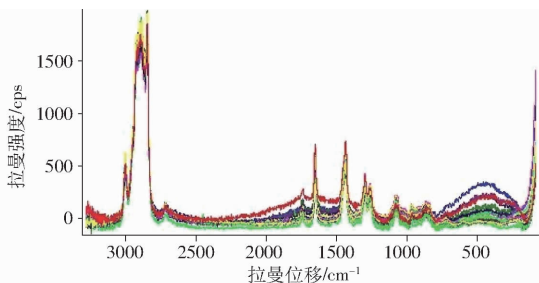


图 1 食用调和油拉曼光谱图

Fig.1 Raman spectra of edible blended oil

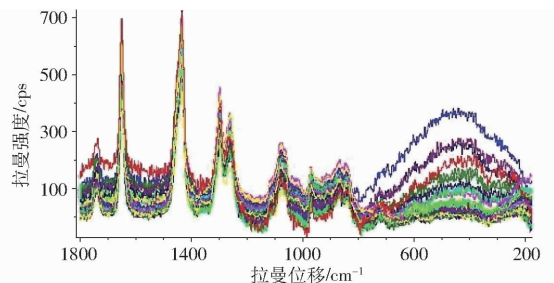


图 2 食用调和油特征波段拉曼光谱图

Fig.2 Characteristic band of edible blended oil's Raman spectra

果如表 2 所示。其中, nF 为主成分数, Rc 为校正集相关系数, Rp 为验证集相关系数, RMSEC 为定标均

方根误差, RMSEP 为预测均方根误差, STD 为预测

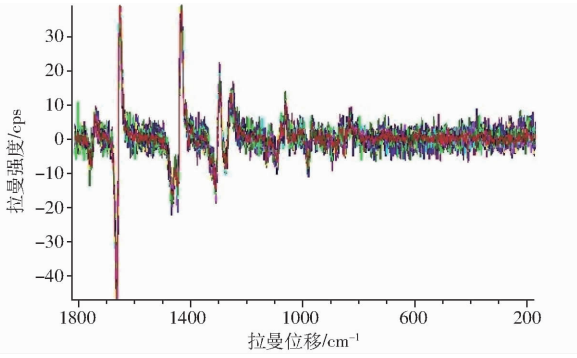


图3 一阶导数 + Norris 导数 3 点预处理后的拉曼光谱图

Fig. 3 Raman spectra after first-order derivative + Norris derivative 3-point preprocessing

误差的标准偏差, R_c 和 R_p 的值越大、RMSEC 和 RMSEP 的值越小,模型的性能越好^[19]。模型预测值与实际值的相关性如图4所示。

由表2可知,采用一阶导数 + Norris 3 点平滑预处理方法建立的模型,相对于其他预处理方法建立的模型预测精度有很大的提高,对食用调和油样本原料组分中的花生油、芝麻油、菜籽油、大豆油和玉米油含量预测的 R_c 分别为 0.999 8、0.941 8、0.998 8、0.999 8、0.996 1, R_p 分别为 0.943 5、0.859 3、0.954 2、0.967 6、0.942 9,预测的标准偏差 STD 分别为 0.056 2、0.113 9、0.064 4、0.062 4、0.091 4。

表2 基于 PLS 模型的调和油各组分预测结果

Tab. 2 Prediction results of components in edible blended oil based on PLS

预处理	食用油种类	nF	R_c	R_p	RMSEC	RMSEP	STD
无	花生油	2	0.914 7	0.853 4	0.081 8	0.129	0.096 0
	芝麻油	1	0.739 0	0.755 1	0.114 0	0.173	0.131 5
	菜籽油	6	0.998 8	0.896 8	0.010 7	0.189	0.094 9
	大豆油	10	0.999 7	0.945 2	0.006 04	0.160	0.080 7
	玉米油	1	0.639 9	0.584 6	0.197 0	0.285	0.224 0
二阶导数 + SG 9	花生油	1	0.716 7	0.627 9	0.141	0.158	0.146 6
	芝麻油	1	0.802 9	0.610 0	0.101	0.255	0.154 6
	菜籽油	1	0.781 0	0.681 2	0.136	0.207	0.157 4
	大豆油	1	0.667 8	0.560 0	0.188	0.261	0.208 9
	玉米油	1	0.678 5	0.567 4	0.188	0.308	0.225 7
一阶导数 + Norris 9	花生油	4	0.948 9	0.860 2	0.063 9	0.141	0.089 5
	芝麻油	4	0.885 1	0.810 2	0.078 8	0.148	0.101 3
	菜籽油	8	0.999 6	0.988 7	0.006 43	0.064	0.032 8
	大豆油	8	0.998 9	0.984 4	0.011 7	0.086 5	0.043 6
	玉米油	9	0.998 3	0.978 2	0.014 7	0.113	0.056 6
一阶导数 + Norris 3	花生油	10	0.999 8	0.943 5	0.003 03	0.117	0.056 2
	芝麻油	3	0.941 8	0.859 3	0.040 90	0.218	0.113 9
	菜籽油	7	0.998 8	0.954 2	0.007 47	0.128	0.064 4
	大豆油	10	0.999 8	0.967 6	0.003 14	0.125	0.062 4
	玉米油	7	0.996 1	0.942 9	0.015 90	0.179	0.091 4

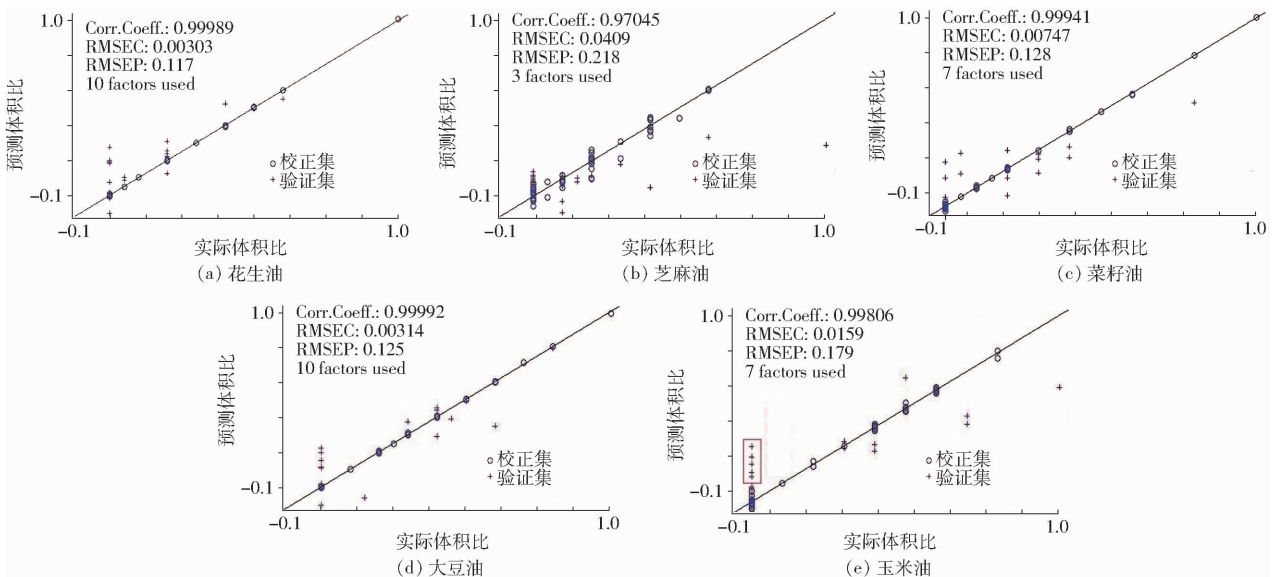


图4 预测值与实际值的相关性分析结果

Fig. 4 Correlation analysis results between predictions and actual values

分析表 2 可得,在上述不同类型的预处理方法下,芝麻油模型相较其他种类原料油模型的预测精度相对较差,分析原因可能是芝麻油的颜色较深,采集拉曼光谱易受到荧光的干扰^[20],噪声较大,掩盖了一些有价值的光谱信息,从而影响了模型的预测精度。

以玉米油预测模型为例(图 4e)分析可得,误差较大的样本主要集中在模型两端,尤其是含量较低处。在其他原料油模型中也存在类似的问题。图 4e 中用红框标出误差较大的样本分别为 2、8、11、45、54,这 5 个调和油样本实际的玉米油含量均为零。结果表明该模型对于原料组分含量较低甚至接近零的样本预测误差较大,究其原因可能是组分含量过低导致有效信息较弱甚至被其他组分的

信息掩盖。

3 结论

(1)采用激光拉曼光谱技术对食用调和油中各原料组分(花生油、芝麻油、菜籽油、大豆油和玉米油)的含量进行了快速的定量检测。运用一阶导数、二阶导数、Savitzky-Golay 卷积、Norris derivative filt 等进行图谱预处理,建立食用调和油各原料组分含量的拉曼定量检测模型,实验结果表明经过一阶导数 + Norris 3 点预处理后建立的模型稳定性最好,复现性较高,预测结果准确可靠。

(2)相对于以往的三组分食用调和油定量分析研究,本次实验增加了四组分和五组分的调和油样本,提升了模型的应用价值。

参 考 文 献

- 1 闵征桥,刘金勇,高盼,等. 用气相色谱法测定食用植物调和油配方的研究[J]. 粮食与食品工业, 2013, 20(3):11-14. MIN Zhengqiao, LIU Jinyong, GAO Pan, et al. Research on formula of edible blended oil by gas chromatography [J]. Cereal and Food Industry, 2013, 20(3): 11-14. (in Chinese)
- 2 李新华,车欣,邵帅. 营养型植物调和油配方数学模型的建立及应用[J]. 食品科学, 2010, 31(13):118-121. LI Xinhua, CHE Xin, SHAO Shuai. Establishment and application of a mathematical model for formulation of nutrition-based cooling oil [J]. Food Science, 2010, 31(13): 118-121. (in Chinese)
- 3 JOVIĆ O, SMOLIĆ T, JURIŠIĆ Z, et al. Chemometric analysis of ternary edible oil mixtures[C]// XXII. Hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera. Hrvatska znanstvena bibliografija i MZOS-Svibor, 2011.
- 4 骆倩. 食用调和油质量现状及质量管理措施研究[J]. 粮食科技与经济, 2014, 39(4):39-40.
- 5 谭量量,翁梦娇,吴翔,等. 脂肪酸平衡营养调和油配料软件设计与应用研究[J]. 中国粮油学报, 2016, 31(6):128-133. TAN Liangliang, WENG Mengjiao, WU Xiang, et al. Design and application of batching software used to prepare nutritional blend oil with fatty acid balance[J]. Journal of the Chinese Cereals and Oils Association, 2016, 31(6):128-133. (in Chinese)
- 6 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 Fuli, CHEN Huacai. 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)
- 7 张燕君,何宝丹,付兴虎,等. 拉曼光谱结合 PSO-LSSVM 算法检测三组分食用调和油含量[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(8):2440-2445. ZHANG Yanjun, HE Baodan, FU Xinghu, et al. Raman spectra combined with PSO-LSSVM algorithm for detecting the components in ternary blended edible oil [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2017, 37(8):2440-2445. (in Chinese)
- 8 ÖZBALCI B, BOYACI İ H, TOPCU A, et al. Rapid analysis of sugars in honey by processing Raman spectrum using chemometric methods and artificial neural networks [J]. Food Chemistry, 2013, 136(3-4):1444.
- 9 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. 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. (in Chinese)
- 10 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(7):1370-1374. 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(7): 1370-1374. (in Chinese)
- 11 XU J, HOU P G, WANG Y T, et al. Determination of component contents of blend oil based on characteristics peak value integration [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(1): 298-302.
- 12 周秀军,戴连奎,李晟. 基于拉曼光谱的食用植物油快速鉴别[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(7):1829-1833. ZHOU Xiujun, DAI Liankui, LI Sheng. Fast discrimination of edible vegetable oil based on Raman spectroscopy [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2012, 32(7): 1829-1833. (in Chinese)

- GUO Lili, DING Shifei. Research progress on deep learning[J]. Computer Science, 2015, 42(5):28-33. (in Chinese)
- 14 VINCENT P, LAROCHELLE H, BENGIO Y, et al. Extracting and composing robust features with denoising autoencoders [C] // Proceedings of the 25th International Conference on Machine Learning, 2008: 1096-1103.
- 15 VINCENT P, LAROCHELLE H, LAJOIE I, et al. Stacked denoising autoencoders: learning useful representations in a deep network with a local denoising criterion [J]. Journal of Machine Learning Research, 2010, 11(6): 3371-3408.
- 16 FARABET C, COUPRIE C, NAJMAN L, et al. Learning hierarchical features for scene labeling [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis & Machine Intelligence, 2013, 35(8):1915-1929.
- 17 HINTON G, DENG L, YU D, et al. Deep neural networks for acoustic modeling in speech recognition: the shared views of four research groups [J]. IEEE Signal Processing Magazine, 2012, 29(6):82-97.
- 18 STELLAN O. Deep learning [M]. Cambridge University Press, 2011:112-156.
- 19 LI Weijia, FU Haohuan, LE Yu, et al. Stacked autoencoder-based deep learning for remote-sensing image classification: a case study of African land-cover mapping [J]. International Journal of Remote Sensing, 2016, 37(23): 5632-5646.
- 20 宋鹏, 吴科斌, 张俊雄, 等. 基于计算机视觉的玉米单倍体自动分选系统[J]. 农业机械学报, 2010, 41(增刊):249-252.
SONG Peng, WU Kebin, ZHANG Junxiong, et al. Sorting system of maize haploid kernels based on computer vision [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2010, 41(Supp.): 249-252. (in Chinese)

~~~~~

(上接第 421 页)

- 13 刘燕德, 靳县县, 王海阳. 基于拉曼光谱的三组分食用调和油快速定量检测[J]. 光学精密工程, 2015, 23(9):2490-2496.  
LIU Yande, JIN Tantan, WANG Haiyang. Rapid quantitative determination of components in ternary blended edible oil based on Raman spectroscopy [J]. Optics and Precision Engineering, 2015, 23(9): 2490-2496. (in Chinese)
- 14 杨坤, 褚昆昆, 朱祥, 等. 几种典型食用油脂拉曼光谱分析研究[J]. 粮食与油脂, 2015(11):56-58.  
YANG Kun, CHU Kunkun, ZHU Xiang, et al. Analysis on Raman spectroscopy of several typical edible oils [J]. Cereals & Oils, 2015(11):56-58. (in Chinese)
- 15 BARTHUS R C, POPPI R J. Determination of the total unsaturation in vegetable oils by Fourier transform Raman spectroscopy and multivariate calibration[J]. Vibrational Spectroscopy, 2001, 26(1):99-105.
- 16 赵薇, 刘翠玲, 孙晓荣, 等. 应用拉曼光谱技术识别食用油的种类[J]. 食品科技, 2015(3):274-278.  
ZHAO Wei, LIU Cuiling, SUN Xiaorong, et al. Application of Raman spectroscopy for classification of edible oils [J]. Food Science and Technology, 2015(3): 274-278. (in Chinese)
- 17 邓之银, 张冰, 董伟, 等. 拉曼光谱和 MLS-SVR 的食用油脂脂肪酸含量预测研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(11): 2997-3001.  
DENG Zhiyin, ZHANG Bing, DONG Wei, et al. Research on prediction method of fatty acid content in edible oil based on Raman spectroscopy and multi-output least squares support vector regression machine [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33(11): 2997-3001. (in Chinese)
- 18 刘善梅, 李小昱, 钟雄斌, 等. 基于高光谱成像技术的生鲜猪肉含水率无损检测[J/OL]. 农业机械学报, 2013, 44(增刊 1):165-170. [http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view\\_abstract.aspx?flag=1&file\\_no=2013s130&journal\\_id=jcsam](http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?flag=1&file_no=2013s130&journal_id=jcsam). DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2013.S1.030.  
LIU Shanmei, LI Xiaoyu, ZHONG Xiongbn, et al. Non-destructive detection of water content in fresh pork based on Hyperspectral imaging technology[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(Supp.1): 165-170. (in Chinese)
- 19 杨国强, 张淑娟, 赵艳茹. 基于近红外透射光谱的汾阳王酒快速鉴别[J/OL]. 农业机械学报, 2013, 44(增刊 1):189-193. [http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view\\_abstract.aspx?flag=1&file\\_no=2013s134&journal\\_id=jcsam](http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?flag=1&file_no=2013s134&journal_id=jcsam). DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2013.S1.034.  
YANG Guoqiang, ZHANG Shujuan, ZHAO Yanru. Fast discrimination of adulterated Fenyangwang wine based on near infrared spectroscopy[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2013, 44(Supp.1): 189-193. (in Chinese)
- 20 ASHTON L, JOHANNESSEN C, GOODACRE R, et al. The importance of protonation in the investigation of protein phosphorylation using Raman spectroscopy and Raman optical activity[J]. Analytical Chemistry, 2011, 83(20):7978-7980.