

基于PCA-SVR算法和共聚焦拉曼光谱的牡丹籽油掺伪定量分析研究

周会国^{1*}, 赵辉²

(1. 广西职业技术学院大数据学院, 广西南宁 530226)

(2. 河北工程大学信息与电气工程学院, 河北邯郸 056038)

摘要: 牡丹籽油掺伪现象严重, 需要加强监管和打击力度, 如何鉴别牡丹籽油的真伪成为了一个亟待解决的问题。该研究旨在探究基于 PCA-SVR 算法和共聚焦拉曼光谱的牡丹籽油掺伪定量分析方法。首先, 采集牡丹籽油样品, 并进行共聚焦拉曼光谱分析以确定其化学成分和结构, 分别测试不同掺伪浓度的牡丹籽油的混合油。然后, 利用拉曼光谱数据建立 PCA-SVR 定量分析模型, 以区分牡丹籽油和其他植物油的掺伪情况。最后, 通过实验验证该方法的准确性和可行性, 结果表明该方法可以有效地鉴别牡丹籽油和其他植物油的掺伪情况, 模型测试集量化效果的决定系数 R^2 优于 0.98, 均方根误差 RMSE 小于 0.04。该方案检测牡丹籽油掺伪浓度的理论极限为 0.011 52, 即对于预测混合油品中牡丹籽油所含体积比大于 0.011 52 的样品是可信的。基于 PCA-SVR 算法和共聚焦拉曼光谱相结合的检测方案具有较高的准确性和可靠性, 该研究对于提高牡丹籽油的质量控制和保障消费者的健康具有重要意义。

关键词: PCA-SVR 算法; 共聚焦拉曼光谱; 牡丹籽油; 定量分析

文章编号: 1673-9078(2024)11-370-378

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2024.11.1354

Quantitative Analysis of Adulteration of Peony Seed Oil based on PCA-SVR and Confocal Raman Spectroscopy

ZHOU Huiguo^{1*}, ZHAO Hui²

(1.School of Big Data, Guangxi Vocational and Technical College, Nanning 530226, China)

(2.School of Information and Electrical Engineering, Hebei University of Engineering, Handan 056038, China)

Abstract: It is imperative to implement more stringent punitive measures to combat the adulteration of peony seed oil, and establish quantitative methods to determine the authenticity of peony seed oil. A quantitative analysis model, based on principal component analysis and support vector regression (PCA-SVR) and Raman spectroscopy was developed, to determine the chemical composition and structure of samples of peony seed oil mixed with different proportions of soybean oil. The method effectively identified adulteration of peony seed oil. The coefficient of determination (R^2) of the quantitative effect of the model test set exceeded 0.98 and the root-mean-square error (RMSE) was less than 0.04. The theoretical limit for detecting the adulteration in peony seed oil in this model was 0.011 52, indicating that the method was reliable for measuring

引文格式:

周会国,赵辉.基于PCA-SVR算法和共聚焦拉曼光谱的牡丹籽油掺伪定量分析研究[J].现代食品科技,2024,40(11): 370-378.

ZHOU Huiguo, ZHAO Hui. Quantitative analysis of adulteration of peony seed oil based on PCA-SVR and confocal raman spectroscopy [J]. Modern Food Science and Technology, 2024, 40(11): 370-378.

收稿日期: 2023-11-13

基金项目: 国家自然科学基金项目 (61802107); 广西高校中青年教师科研基础能力提升项目 (2019KY1215)

作者简介: 周会国 (1978-), 男, 硕士, 系统分析师, 研究方向: 算法分析, E-mail: 23562798@qq.com

mixed oil samples with a volume ratio of peony seed oil that was greater than 0.011 52. The detection model combining PCA-SVR and confocal Raman spectroscopy demonstrated high accuracy and reliability. The findings of this study have important implications for improving the quality of peony seed oil to ensure consumer health.

Key words: principal component analysis and support vector regression; confocal Raman spectroscopy; peony seed oil; quantitative analysis

牡丹籽油是从牡丹花的种子中提取的一种植物油。作为一种天然的保健品，其含有丰富的营养成分和多种保健功效，如抗氧化、调节血糖等。此外，牡丹籽油还含有丰富的亚麻酸和维生素 E 等营养成分，对皮肤健康有很好的保养作用。因此，牡丹籽油在市场上有着很高的价值。然而，由于牡丹籽油的市场需求量大、产量较低，一些不法商家在利益的驱使下，常常采用掺杂、伪造等手段降低生产成本，从而导致了牡丹籽油掺伪现象的出现。这些不法商家会将其他低价植物油掺入牡丹籽油中，或者添加化学物质来改变其颜色、味道和保质期等特性，以欺骗消费者。为了解决牡丹籽油掺伪问题，需要采取一系列措施，包括加强监管、提高消费者的食品安全意识、加强生产环节的质量管理等。同时，也需要加强对牡丹籽油的检测的基础研究和技术开发，推动产业的健康发展。

光谱检测技术是快速实现植物油掺伪检测的重要手段，其不仅可以用于检测植物油的分子结构和化学键振动，实现植物油脂肪酸组成的分析，还可以用于植物油掺假定性定量的研究。紫外可见吸收光谱^[1,2]、拉曼光谱^[3-6]、红外吸收光谱^[7,8]、荧光光谱^[9-11]和激光诱导击穿光谱^[12,13]等光谱技术在植物油掺假量化分析检测的方面具有丰富的研究基础，其中拉曼光谱是一种应用较广且具有现场便携检测潜力的无损检测技术。在高值植物油检测方面，以特级初榨橄榄油掺伪量化的研究工作最为突出，拉曼光谱技术也是开展量化特级初榨橄榄油掺伪的主要技术手段^[14-17]。在有害物质检测方面，研究人员开展了拉曼光谱技术应用于食品中有害成分的检测，例如将表面增强拉曼光谱技术应用于快速检测食品中的苯并芘的研究^[18,19]。2021 年，针对牡丹籽油可能存在的掺伪行为，研究人员开展了基于拉曼光谱的牡丹籽油掺伪量化分析的基础研究工作，通过密度泛函理论构建并预测了牡丹籽油中主要脂肪酸的分子结构和振动光谱^[20]。因此，需要进一步深入开展基于拉曼光谱检测牡丹籽油掺伪的研究工作。

主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA)

和支持向量机回归 (Support Vector Machine Regression, SVR) 相结合的混合预测模型具有良好的泛化能力和预测性能。2018 年，聂红梅等^[21]将 PCA-SVM 模型应用于冬小麦土壤水分预测的研究，选取宝鸡市 2014 年至 2016 年的冬小麦种植区 3~5 月的气象、地形及土壤等属性的 15 个预测因子，对比研究了随机森林回归模型的预测效果，发现 PCA-SVM 混合预测模型在平均预测精度和均方根误差等模型评价参数上表现出色。2020 年，刘炳春等^[22]针对中国工业固废产生量的预测问题，对比了 PCA-SVR 混合模型与 SVR、岭回归、决策树以及提升树回归等多种单一模型的预测结果，结果发现 PCA-SVR 在平均绝对百分误差和均方根误差方面均表现出优势。2021 年，韩永明等^[23]采用基于心率变异性特征和 PCA-SVR 算法模型对 PAD 维度情感进行了预测分析研究，研究结果表明 PCA-SVR 算法在 PAD 的 3 个维度上均有良好的预测效果，其平均一致性相关系数达到了 0.51。

综合以上分析，本文针对牡丹籽油掺伪的食品安全问题，面向现场快速检测的应用需求，通过基础研究，探讨共聚焦拉曼光谱仪在量化牡丹籽油掺伪的可行性，提出一种基于 PCA-SVR 算法和共聚焦拉曼光谱的牡丹籽油掺伪定量分析方法，实现掺伪量化的在线反演，并进一步讨论了掺假牡丹籽油的光谱特征，本研究对加快牡丹籽油拉曼光谱检测的基础研究，促进相关检测手段和技术的创新，推动牡丹籽油消费市场的健康发展，为拉曼光谱检测牡丹籽油的实际应用提供理论和实验依据。

1 材料与方法

1.1 原料

牡丹籽油 (产地：中国陕西，品牌：智健源，产品标准号：QZZGY 0001S-2019)；大豆油 (产地：中国，品牌：金龙鱼，产品执行标准：GB/T1536)；通过调控不同植物油的体积比例，实现牡丹籽油掺假的混合样品的制备，本文共制备了 11 种不同掺伪体

积分数的牡丹籽油和大豆油的混合样品，每种体积分数各单独制备 20 个样本，其中牡丹籽油的含量分别为 100.0%、90.0%、80.0%、70.0%、60.0%、50.0%、40.0%、30.0%、20.0%、10.0% 和 0.0%，下文分别简化为 1.0、0.9、0.8、0.7、0.6、0.5、0.4、0.3、0.2、0.1、0.0。

1.2 主要仪器设备

自研的显微共聚焦拉曼光谱仪的光路示意图，如图 1 所示。激光器为长春新产业光电技术有限公司生产的光纤耦合绿光激光器 FC-D-514.5，其波长为 514.5 nm，线宽小于 0.06 nm，最大输出功率为 30 mW，经过共焦显微光学系统后作用于实验样品的激光功率为 15 mW；光谱采集模块为长春新产业光电技术有限公司生产的 K-Sens 拉曼光谱仪，波数范围 185~3 100 cm⁻¹，面阵制冷探测器 Hamamatsu S7031（64×1 044 pixels），狭缝宽度 10 μm，分辨率优于 8 cm⁻¹；拉曼光谱的采集过程中，控制每条光谱的积分时间均为 1 000 ms，每个混合样品各保存 50 条拉曼光谱。

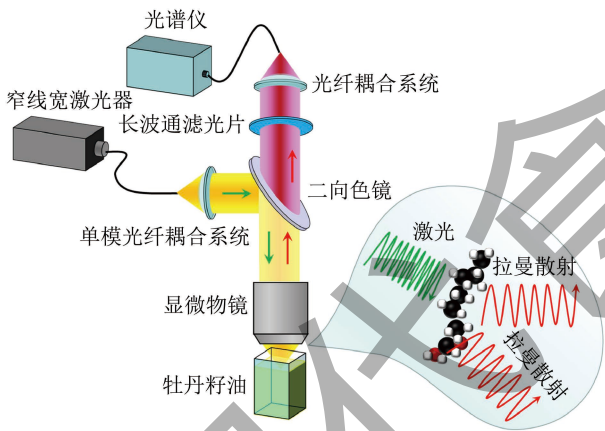


图 1 共聚焦拉曼光谱仪光路示意图
Fig.1 Schematic diagram of confocal Raman spectrometer optical path

1.3 方法

1.3.1 数据预处理

在进行拉曼光谱数据分析前，通常需要对原始光谱进行预处理，以确保获得可靠的结果。拉曼光谱是一种信号强度较弱的非弹性光散射，荧光和背景噪声是干扰拉曼光谱数据的主要因素，尤其是共聚焦拉曼光谱仪极易受到背景噪声的干扰。植物油中含有各类光敏物质，荧光信号也成为干扰捕获拉曼谱峰的主要因素。因此，本研究在处理分析实验数据前，首先对原始光谱进行降噪和去基线的处理。

本文采用小波变换算法实现基线去除和降噪，如图 2 所示。文中基于 Python 实现数据的预处理处理和定量模型的构建，并通过 Origin 9.0 绘制光谱图。

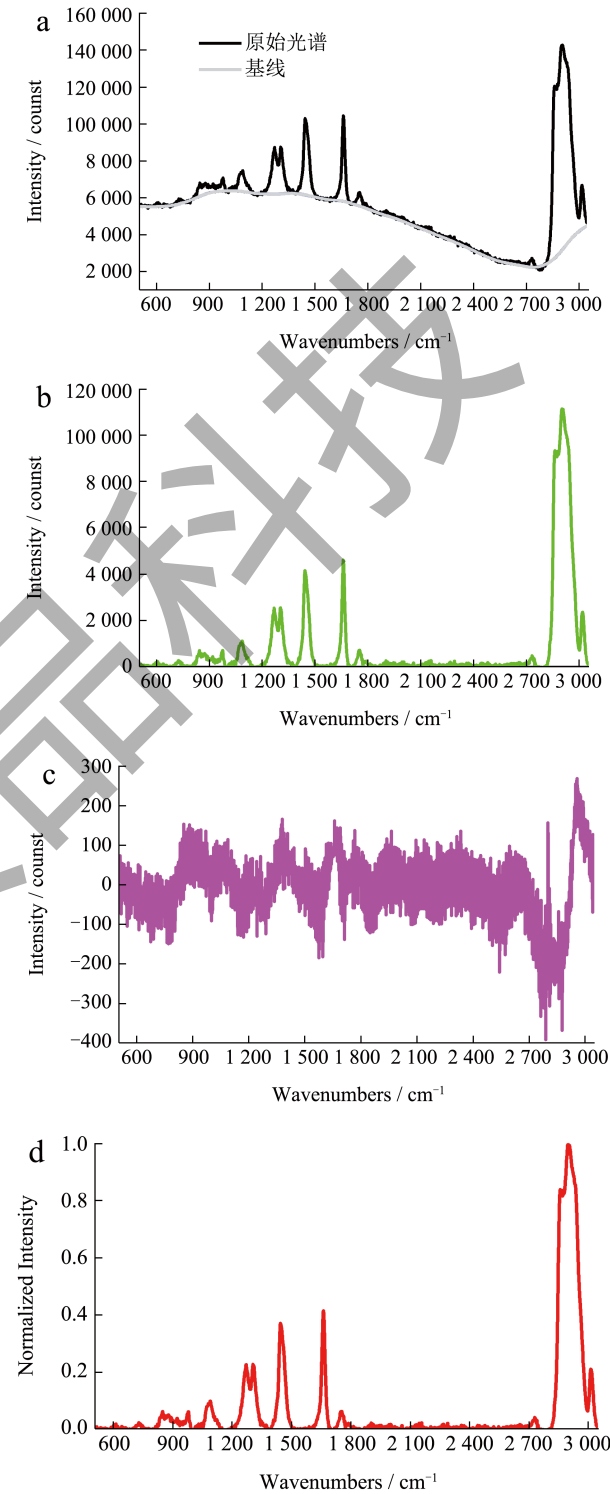


图 2 大豆油的显微共聚焦拉曼光谱的数据预处理过程
Fig.2 Data preprocessing process of microscopic confocal Raman spectroscopy

注：(a) 原始拉曼光谱；(b) 去基线和降噪后的拉曼光谱；(c) 去除的噪声；(d) 拉曼光谱的最大值归一化。

1.3.2 PCA - SVR算法

针对牡丹籽油掺假的定量分析问题，本研究通过使用PCA和SVR相结合的算法，构建牡丹籽油掺假量化的分析模型。SVR模型是一种基于统计学习理论的新颖而强大的学习方法，是Vapnik^[24]引入的小样本统计理论。由于SVR模型的泛化能力不依赖于输入空间的维数，因此与ANN模型^[25,26]相比，SVR具有对小数据集的高泛化能力。虽然SVR模型可以有效处理高维小数据集的问题，但数据集中不同变量之间的线性依赖关系会影响SVR模型的泛化能力^[27]。PCA可以通过将一大组相互关联的自变量线性转换为一小组不相关的新变量来有效地处理不同变量之间的线性依赖性。因此，通过结合PCA的特征提取和降维来扩展SVR，以加强SVR模型的泛化能力，从而提高其预测性能。本文采用的PCA-SVR算法实现量化分析主要包括以下两部分：第一步是PCA应用于光谱数据的主成分提取，从而实现输入矩阵的降维。第二步是将降维后的数据组输入SVR模型中，用于构建预测模型。

2 结果与讨论

2.1 混合油品的共聚焦拉曼光谱

本文共制备了11种不同牡丹籽油掺伪体积分数的混合样品，每种体积分数各制备了20个样本，每个体积分数各随机获取5条光谱数据，每种体积分数各收集了100条光谱，因此共收集了1100条光谱数据。每种混合油品获得的原始拉曼光谱经过数据预处理后，分别计算不同掺伪体积分数牡丹籽油的平均拉曼光谱，如图3所示。牡丹籽油与大豆油的拉曼光谱的特征峰相似，但在部分拉曼特征峰的强度上存在显著差异（1270、1655及3016 cm⁻¹等附近），这主要取决于两种植物油所含脂肪酸的种类及其比例的差异导致的。本文就是基于这种光谱差异实现两种植物油不同混合比例的检测与识别。

牡丹籽油的拉曼光谱与大豆油的拉曼光谱存在显著的差异，其中位于870 cm⁻¹的拉曼峰位对应亚甲基的伸缩振动，位于976 cm⁻¹的拉曼峰位对应碳碳双键的弯曲振动，位于1086和1270 cm⁻¹的拉曼峰位对应碳碳单键弯曲振动，位于1305 cm⁻¹的拉曼峰位对应亚甲基弯曲振动，位于1445 cm⁻¹的拉曼峰位对应亚甲基的剪切振动，位于1655 cm⁻¹的拉曼峰位对应烯烃RHC=CHR中的碳碳双键

的伸缩振动，位于3016 cm⁻¹的拉曼峰位对应烯烃RHC=CHR中的=C-H伸缩振动，位于2810~2991 cm⁻¹内的拉曼峰主要由甲基和亚甲基振动产生^[10]。拉曼特征峰与官能团匹配如表1所示。

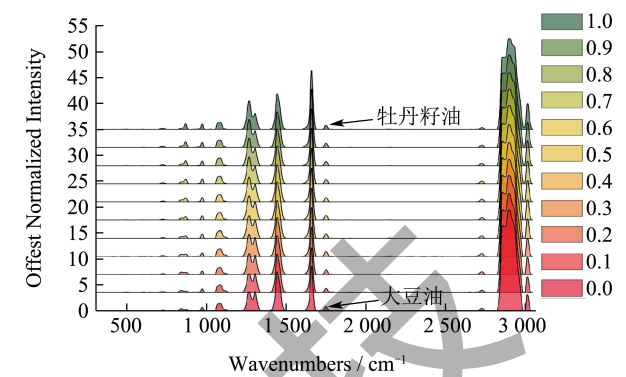


图3 不同比例大豆掺伪牡丹籽油的拉曼光谱
Fig.3 Raman spectra of soybean adulterated peony seed oil with different proportions

表1 拉曼特征峰与官能团匹配
Table 1 Raman characteristic peaks match their functional groups

拉曼特征峰/cm ⁻¹	官能团信息	参考文献
870	-CH ₂ 伸缩振动	[10,20]
976	C=C 弯曲振动	[4,10,20]
1086	C-C 弯曲振动	[10,20]
1270	C-C 弯曲振动	[4,10,20]
1305	-CH ₂ 弯曲振动	[10,20]
1445	-CH ₂ 剪切振动	[10,20]
1655	RHC=CHR 中的碳碳双键的伸缩振动	[4,10,20]
2810~2991	-CH ₂ 以及 -CH ₃ 振动	[20]
3016	RHC=CHR 中的 =C-H 伸缩振动	[20]

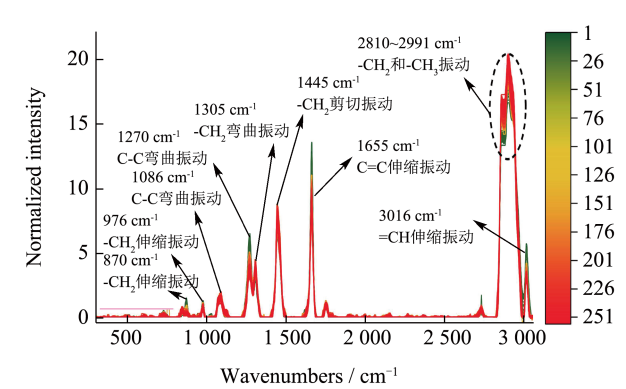


图4 所有混合油品的拉曼光谱及其官能团匹配
Fig.4 Raman spectra and functional group matching of all mixed oil products

2.2 牡丹籽油掺伪体积分数与拉曼特征峰的关联性

为进一步说明牡丹籽油掺伪体积分数与拉曼特征峰的关联性,绘制了11种混合油品的1100条拉曼光谱,如图4所示。根据图4可以发现不同牡丹籽油的掺伪体积分数对拉曼光谱特征峰的影响,即拉

曼光谱特征峰强变化反映牡丹籽油掺伪体积分数的灵敏度。拉曼峰位在 870 cm^{-1} ($-\text{CH}_2$ 伸缩振动), 1270 cm^{-1} (C-C 弯曲振动), 1665 cm^{-1} (C=C 伸缩振动), 3016 cm^{-1} ($=\text{CH}$ 伸缩振动)以及 $2810\sim 2991\text{ cm}^{-1}$ ($-\text{CH}_2$ 与 $-\text{CH}_3$ 振动)特征最为明显,这些差异是构建定量分析模型的主要依据。

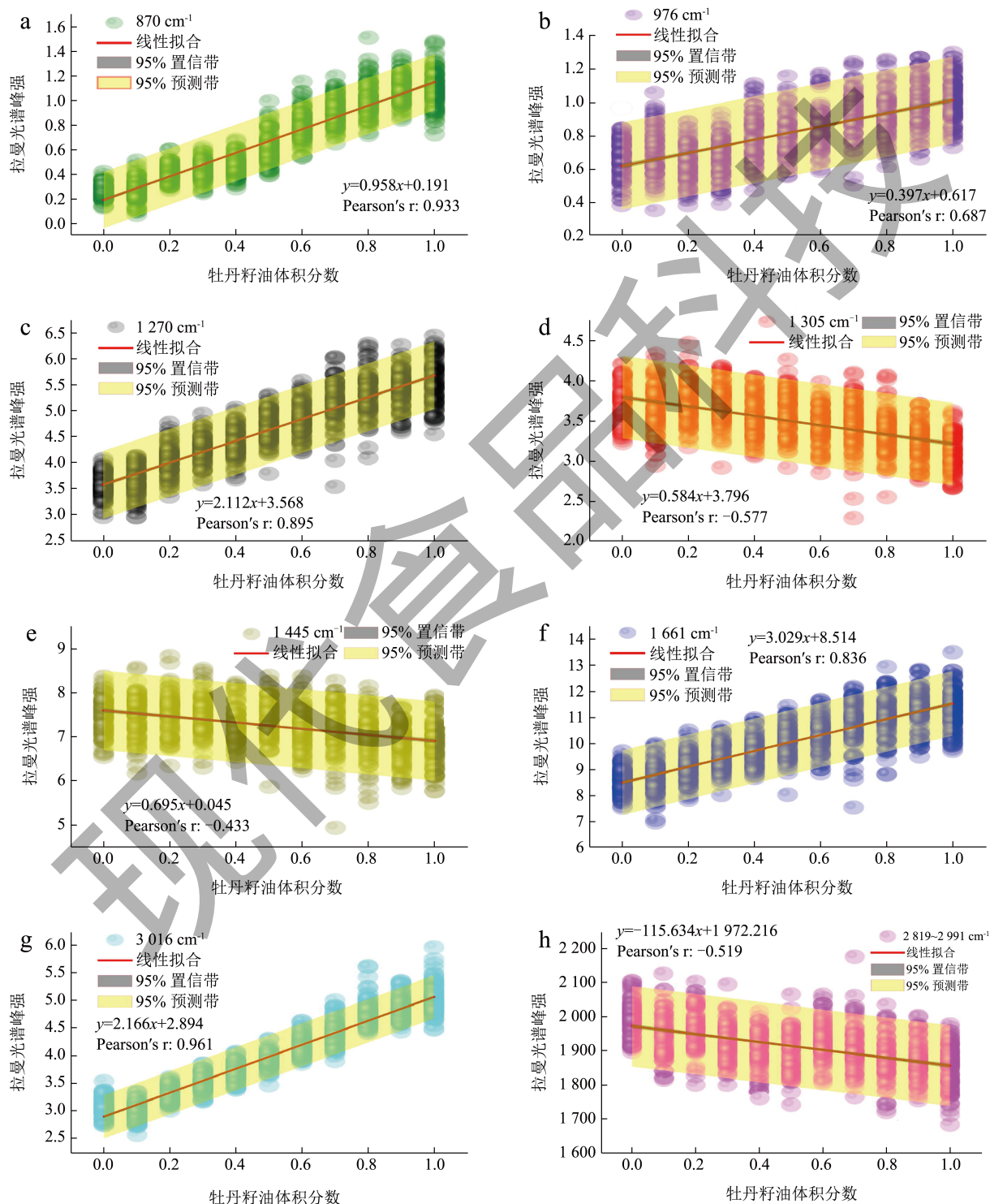


图5 牡丹籽油掺伪体积分数与拉曼特征峰的关联性

Fig.5 The correlation between adulteration concentration of peony seed oil and Raman characteristic peaks

从图 4 可以发现拉曼光谱特征峰差异具有反映牡丹籽油掺伪体积分数的潜力，为评估牡丹籽油掺伪体积分数与拉曼特征峰的相关性，绘制了 8 个拉曼特征峰强与混合油品中牡丹籽油体积分数的散点图并拟合回归方程及皮尔逊相关系数 (Pearson's r)，如图 5 所示。根据图 5 可以发现位于 870 、 976 、 $1\,270$ 、 $1\,661$ 以及 $3\,016\text{ cm}^{-1}$ 的拉曼特征峰强与混合油品中牡丹籽油体积分数存在正相关性，这说明牡丹籽油对应的相关脂肪酸含量多于大豆油，而位于 $1\,305$ 、 $1\,445$ 、 $2\,819\sim 2\,991\text{ cm}^{-1}$ 的拉曼特征峰强与混合油品中牡丹籽油体积分数存在负相关性，这说明牡丹籽油对应的相关脂肪酸含量少于大豆油，如表 2 所示。

表 2 牡丹籽油掺伪体积分数与拉曼特征峰的皮尔逊相关系数

Table 2 Pearson correlation coefficient between pseudo concentration of peony seed oil and Raman characteristic peaks	
拉曼特征峰/ cm^{-1}	皮尔逊相关系数 (Pearson's r)
870	0.933
976	0.687
1 270	0.895
1 305	-0.577
1 445	-0.433
1 661	0.836
3 016	0.961
2 819~2 991	-0.519

图 5 所示，根据某一个拉曼特征峰可以建立混合油品中牡丹籽油体积分数的量化回归模型，但单一拉曼特征峰强表现出较差的量化性能。皮尔逊相关系数可以作为一种衡量指标，其中 $3\,016\text{ cm}^{-1}$ 的特征峰强与牡丹籽油体积分数的相关性最好，但图 5g 仍表现出一种差强人意的定量结果。为此，本文提出一种基于 PCA-SVR 算法实现大豆油掺伪牡丹籽油的量化分析模型。

2.3 基于PCA-SVR牡丹籽油的掺伪定量分析模型

构建 PCA-SVR 定量分析模型可分为以下步骤：首先是针对提出的科学问题，采集相关光谱数据；其次对数据进行清洗和预处理，以确保数据的准确性和完整性。这包括去除重复数据、缺失值处理、异常值处理等。必要时在建模前对数据开展探索性

分析，以了解数据的分布、相关性和特征；然后，将数据集划分为训练集、验证集和测试集。训练集用于训练模型，验证集用于选择最优的模型参数，测试集用于评估模型的性能；最后，使用训练集对模型进行训练，并使用验证集来选择最优的模型参数。使用测试集来评估模型的性能，并计算出相应的指标，例如决定系数和均方根误差等。采集数据、预处理和探索性分析在前面已完成，本节着重介绍 PCA-SVR 模型的训练和优化。

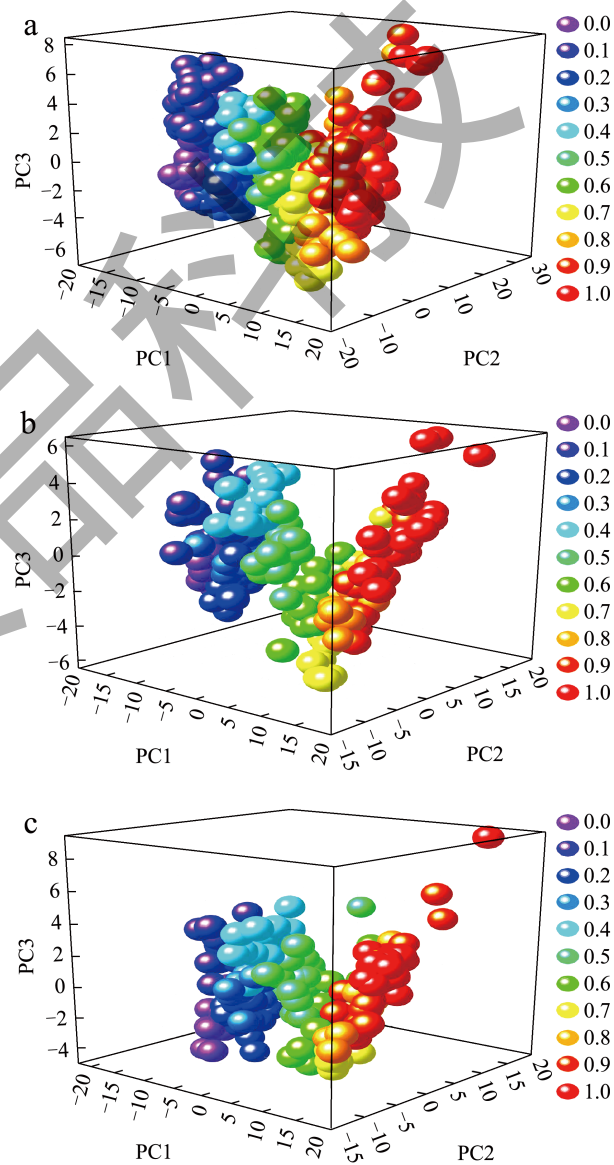


图 6 11 种不同掺伪体积分数油品拉曼光谱数据的 PCA 得分图

Fig.6 PCA score diagram of Raman spectra of 11 different peony seed oil concentrations

注：a~c 分别为不同角度的三维图。

表 3 牡丹籽油掺伪量化的模型评价指标对比

评价指标	训练集		验证集		测试集	
	决定系数 R^2	均方根误差 RMSE	决定系数 R^2	均方根误差 RMSE	决定系数 R^2	均方根误差 RMSE
PCA-SVR	0.989	0.031 9	0.984	0.039 7	0.986	0.037 0
DT	0.851	0.214 1	0.821	0.345 7	0.782	0.364 5
PLS	0.791	0.124 5	0.792	0.274 8	0.694	0.316 0
Lasso	0.891	0.138 1	0.886	0.214 1	0.835	0.169 7

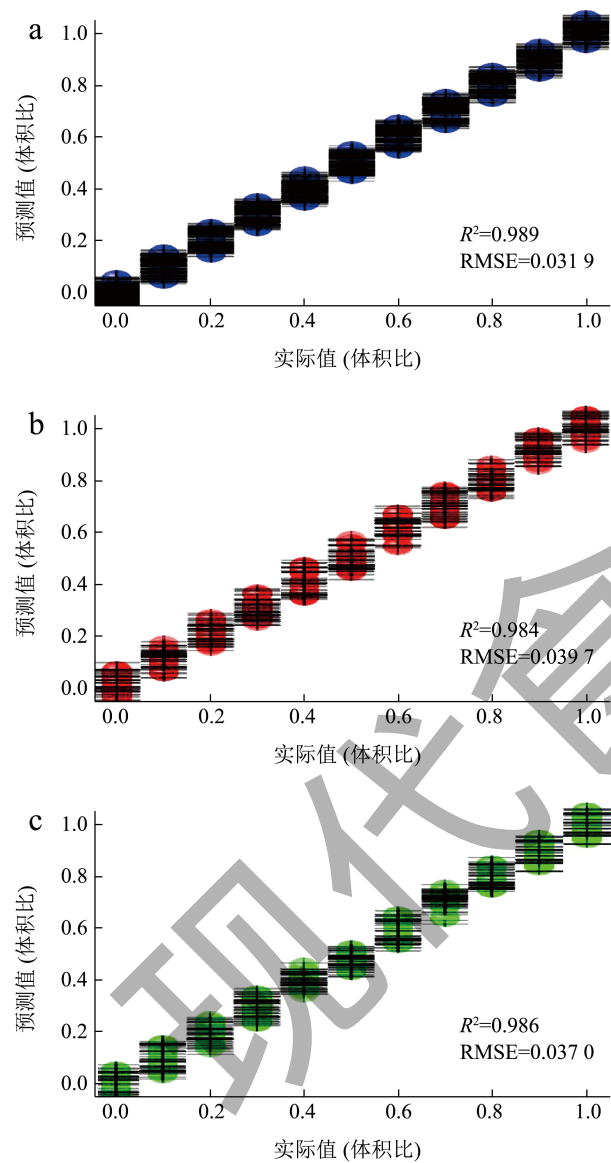


图 7 PCA-SVR 模型实际值和预测值之间的关系

Fig.7 The relationship between the actual and predicted values of the PCA-SVR model

注：(a) 训练集的 PCA-SVR 模型的预测评价指标；
(b) 验证集的 PCA-SVR 模型的预测评价指标；(c) 测试集的 PCA-SVR 模型的预测评价指标。

在构建 PCA-SVR 模型的过程中，将所有有效数据按照 3:1:1 随机划分为训练集、验证集和测试集，其中训练集有 660 条光谱数据，验证集和测试集各有 220 条光谱数据。将 PCA 应用于 3 个光谱数据集的主成分提取，从而实现输入矩阵的降维。图 6 为混合油样中 3 个数据集的 PCA 得分图，前三个主成分对拉曼光谱数据集的累计方差贡献均达到 99.14%。由此我们可以判定 PCA 降维数据所提取的特征反映了原有光谱数据的特征信息。图 6a 为训练集 PCA 得分图，图 6b 为验证集 PCA 得分图，图 6c 为测试集 PCA 得分图。

图 7a 是 660 条拉曼光谱训练集 PCA-SVR 量化分析模型的实际值和预测值误差散点图，图 7b 是 220 条拉曼光谱验证集 PCA-SVR 量化分析模型的实际值和预测值误差散点图，图 7c 是 220 条拉曼光谱测试集 PCA-SVR 量化分析模型的实际值和预测值误差散点图。表 3 为 3 种数据集的模型评价指标情况，结合图 5 可以发现 PCA-SVR 模型预测值稳定分布在回归线上，即该模型较好的预测了 11 种不同牡丹籽油的掺伪体积分数。

为了进一步比较 PCA-SVR 混合模型在定量分析预测的优越性能，本研究对比了几种单一预测模型在相同数据集的预测效果，选用决策树（Decision Tree, DT）、偏最小二乘回归（Partial Least Squares, PLS）、最小绝对收缩和选择算法（Least Absolute Shrinkage and Selection Operator, Lasso）等单一模型与 PCA-SVR 混合模型对比，其结果如表 3 所示。

研究结果表明 PCA-SVR 混合模型的预测结果最优，其中 PCA 算法实现了高维数据的降维，去除数据中的干扰点和冗余信息，为 SVM 模型预测精简了数据，提高了模型的运算过程，而 SVR 算法在处理非线性数据方面表现优异，其可以克服神经网络中可能出现的局部最小的弊端，从而实现全局最优化。

2.4 方法检测限分析

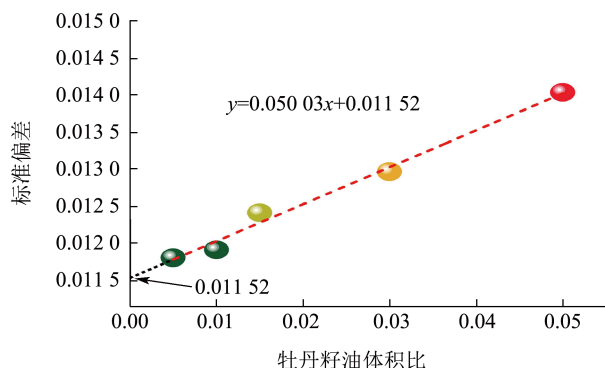


图8 牡丹籽油浓度与预测值标准偏差的回归方程

Fig.8 Regression equation between the concentration of peony seed oil and the standard deviation of predicted values

Wang 等^[20]基于 PLS、PCR 及 MLR 定量分析算法开展了牡丹籽油的掺伪定量分析, 但该研究没有进一步分析该方法检测限的问题, 然而如何对检测限直接进行测量和计算目前尚无统一规定。根据 IUPAC 的定义, 目前比较常用的方法是利用已知结果的低掺伪体积分数的样品, 直接进行方法检出限的测定^[28]。本项目制备了 5 种低体积分数的牡丹籽油掺伪混合油品 (牡丹籽油的体积比分别为 0.05、0.03、0.015、0.01、0.005), 每种体积分数的混合油品各单独制备了 5 组样本, 每组样本各随机采集 10 条拉曼光谱, 因此共收集到 250 条已知低掺伪体积分数样本的拉曼光谱。将拉曼光谱数据输入 PCA-SVR 模型中求得预测体积分数的平均标准偏差, 采用偏最小二乘回归法计算牡丹籽油体积分数与预测值标准偏差的回归方程, 如图 8 所示。回归方程为 $y=0.050\ 03x+0.011\ 52$, 即方程与纵坐标 (标准偏差) 的截距为 0.011 52, 因此可以判定基于该方案可检测牡丹籽油掺伪体积比的理论极限为 0.011 52。

3 结论

本文针对国内市场上牡丹籽油可能存在的制假贩假现象, 将大豆油作为一种掺假牡丹籽油的普通油脂, 详细对比分析了两种植物油的光谱差异及不同掺伪体积分数对拉曼特征峰的影响, 阐明了主要拉曼特征峰所对应的官能团, 通过模拟不同掺伪体积分数的混合油品建立 PCA-SVR 定量模型, 其中训练集决定系数大于 0.989, 均方根误差小于 0.032 0, 验证集决定系数大于 0.984, 均方根误差小于 0.039 8, 测试集决定系数大于 0.986, 均方根误差小于 0.037。

该方案检测牡丹籽油掺伪体积分数的理论极限为 0.011 52, 即对于预测混合油品中牡丹籽油所含体积比大于 0.011 52 的样品是可信的。

牡丹籽油作为一种我国特有的新型植物油, 其具有较高的营养价值, 因此牡丹籽油售价高于普通植物油。而民众对该类油品的认知不够, 很难分辨真假。本文考虑大豆油可能作为一种潜在的掺假油脂, 并评估了牡丹籽油掺伪量化分析的可行性, 为稳定国内牡丹籽油市场的检测和健康发展提供了一种可供参考的检测技术手段。

参考文献

- [1] 曹晨鹏, 郝仕国, 罗宁宁, 等. 基于受激布里渊散射及紫外-可见吸收光谱的橄榄油等级鉴别与分析 [J]. 中国激光, 2018, 45(9): 165-170.
- [2] 龙伶俐, 薛雅琳, 张蕊, 等. 利用紫外吸收光谱研究植物油精炼程度 [J]. 农业机械, 2012, 24: 61-63.
- [3] 张宇, 周金池. 拉曼光谱在食用油鉴别及检测领域的最新研究进展 [J]. 粮食与油脂, 2018, 31(4): 10-11.
- [4] 蒋雪松, 莫欣欣, 孙通, 等. 食用植物油中反式脂肪酸含量的激光拉曼光谱检测 [J]. 光谱学与光谱分析, 2019, 39(12): 3821-3825.
- [5] 余小敏, 尹蔚, 罗文松. 拉曼光谱法快速鉴别劣质火锅油 [J]. 中国油脂, 2021, 46(7): 99-103.
- [6] SILVIA P, CHIARA A, LUCA L, et al. Lutein/ β -carotene ratio in extra virgin olive oil: An easy and rapid quantification method by Raman spectroscopy [J]. Food Chemistry, 2023, 404: 134748.
- [7] WANG L, YANG Q L, ZHAO H Y. Sub-regional identification of peanuts from Shandong Province of China based on Fourier transform infrared (FT-IR) spectroscopy [J]. Food Control, 2021, 124: 107879.
- [8] HANIEH M N, ZAHRA T, MAHSA L A, et al. Multivariate analysis of food fraud: A review of NIR based instruments in tandem with chemometrics [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2022, 107: 104343.
- [9] 陶建峰, 陈明惠, 田甜, 等. 联合荧光光谱与寿命法检测多次高温加热油 [J]. 激光生物学报, 2017, 26(3): 237-243.
- [10] 匡俊豪, 罗宁宁, 郝中骐, 等. 基于近红外拉曼光谱的山茶油掺假检测技术研究 [J]. 南昌航空大学学报 (自然科学版), 2022, 36(3): 104-110.
- [11] 卢先勇, 何文绚, 陈昊聪, 等. 基于植物油三维荧光光谱的茶油鉴定模型 [J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(12): 3854-3859.
- [12] 吴宜青, 刘津, 莫欣欣, 等. 共轴双脉冲激光诱导击穿光谱和最小二乘支持向量机法定量分析植物油中铬 [J]. 分析化学, 2016, 44(12): 1919-1926.

- [13] 吴宜青,孙通,刘津,等.基于LSSVM和CARS变量优选的食用植物油中铬含量DP-LIBS检测[J].激光与光电子学进展,2018,55(1):438-445.
- [14] H A S I B, S L P, H C M N, et al. Use of portable Raman spectroscopy in the quality control of extra virgin olive oil and adulterated compound oils [J]. *Vibrational Spectroscopy*, 2021, 116: 103299.
- [15] QIU J, HOU H Y, YANG I S, et al. Raman spectroscopy analysis of free fatty acid in olive oil [J]. *Applied Sciences*, 2019, 9(21): 4510.
- [16] DONG W, ZHANG Y Q, ZHANG B. Quantitative analysis of adulteration of extra virgin olive oil using Raman spectroscopy improved by Bayesian framework least squares support vector machines [J]. *Analytical Methods*, 2012, 4(9): 2772-2777.
- [17] PHILIPPIDIS A, POULAKIS E, PAPADAKI A, et al. Comparative study using Raman and visible spectroscopy of cretan extra virgin olive oil adulteration with sunflower oil [J]. *Analytical Letters*, 2017, 50(7): 1182-1195.
- [18] 王珊,李忠,潘亮,等.表面增强拉曼光谱(SERS)快速检测食用油中的苯并[a]芘[J].现代食品科技,2017,33(9):271-275.
- [19] 丁亦男,李蔚敏.表面增强拉曼光谱在食品中苯并芘检测的应用[J].现代食品,2016,7:83-84.
- [20] WANG H P, XIN Y J, MA H Z, et al. Rapid detection of Chinese-specific peony seed oil by using confocal Raman spectroscopy and chemometrics [J]. *Food Chemistry*, 2021, 362(15): 130041.
- [21] 聂红梅,杨联安,李新尧,等.基于PCA-SVR的冬小麦土壤水分预测[J].土壤,2018,50(4):812-818.
- [22] 刘炳春,齐鑫.基于PCA-SVR模型中国工业固废产生量预测研究[J].河南师范大学学报:自然科学版,2020,48(1):69-74.
- [23] 韩永明,张明星,耿志强.基于心率变异性特征和PCA-SVR的PAD维度情感预测分析[J].北京化工大学学报:自然科学版,2021,48(5):102-110.
- [24] VLADIMIR N. VAPNIK. *The Nature of Statistical Learning Theory* [M]. Springer, New York, NY. (1995).
- [25] WU C L, CHAU K W, LI Y S. River stage prediction based on a distributed support vector regression [J]. *Journal of Hydrology*, 2008, 358 (1-2): 96-111.
- [26] RAO B V, GOPALAKRISHNA S J. Hardgrove grindability index prediction using support vector regression [J]. *International Journal of Mineral Processing*, 2009, 91 (1-2): 55-59.
- [27] WANG C Y, WU C G, LIANG Y C. Medicine composition analysis based on PCA and SVM [J]. *Lecture Notes in Computer Science*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heidelberg, 2005: 1226-1230.
- [28] IUPAC. *Information Bulletin* [M]. New Jersey, USA: Blackwell Science, 1978, 2: 91-92.