

# 近红外光谱快速检测食用油必需脂肪酸

张 辉, 吴 迪, 李 想, 石品艳, 王思寒, 冯凤琴<sup>\*</sup>, 何 勇

(浙江大学生物系统工程与食品科学学院, 杭州 310029)

**摘 要:** 为了建立食用油必需脂肪酸快速检测的方法, 该研究提出了基于近红外光谱技术检测食用油中  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸含量的快速测定方法。对光谱信息分别采用偏最小二乘回归方法 (PLS) 和最小二乘支持向量机 (LS-SVM) 建立模型。比较了多种光谱预处理方法对模型预测能力的影响。结果表明对于亚油酸含量的预测, 采用 Savitzky-Golay 平滑法结合多元散射校正 (MSC) 的光谱预处理所建立的 LS-SVM 模型最优。预测集的决定系数 ( $R^2$ )、预测均方根误差 (RMSEP) 和剩余预测偏差 (RPD) 分别达到了 0.989, 0.0161 和 9.4783。对于  $\alpha$ -亚麻酸含量的预测, 采用 Savitzky-Golay 平滑法结合标准正态变换 (SNV) 的光谱预处理所建立的 LS-SVM 模型最优。 $\alpha$ -亚麻酸含量预测结果的  $R^2$ 、RMSEP 和 RPD 为 0.972, 0.0036 和 6.0561, 据此表明, 应用近红外光谱技术能够检测食用油中  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸的含量, 为快速检测食用油的必需脂肪酸提供了参考。

**关键词:** 近红外光谱, 模型, 优化,  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸, 食用油, 检测

doi: 10.3969/j.issn.1002-6819.2012.07.044

中图分类号: O657.33, TS225.1

文献标志码: A

文章编号: 1002-6819(2012)-07-0266-05

张 辉, 吴 迪, 李 想, 等. 近红外光谱快速检测食用油必需脂肪酸 [J]. 农业工程学报, 2012, 28(7): 266-270.  
Zhang Hui, Wu Di, Li Xiang, et al. Rapid determination of essential fatty acids in edible oils based on near infrared spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2012, 28(7): 266-270. (in Chinese with English abstract)

## 0 引 言

$\alpha$ -亚麻酸 ( $\alpha$ -linolenic acid) 和亚油酸 (linoleic acid) 是 2 种人体必需脂肪酸, 被合称为维生素 F, 对人体有重要的生理活性。它们不能在体内合成, 只能通过膳食摄取。人体中  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸的不足是免疫力降低、健忘、疲劳、视力减退以及各种心脑血管疾病和癌症等的诱因, 同时缺乏  $\alpha$ -亚麻酸类物质会影响婴幼儿、青少年智力的正常发育, 所以引起国内外学者的重视。

通常, 分析油脂中脂肪酸的组成及含量是将它们衍生为易挥发的甲酯, 经气相色谱 (gas chromatography, GC) 测定。也可选用高效液相色谱法 (high-performance liquid chromatography, HPLC) 直接测定脂肪酸。但两者共同的缺陷是过程繁琐, 耗时很长, 不能满足对必需脂肪酸快速分析的需要。随着人们对功能性脂肪酸的了解和重视, 特别是随着食用油中更为缺乏的  $\alpha$ -亚麻酸分离富集的产业化, 在生产线上需要更及时的得到其含量, 因此有必要寻找一种快速、无损的检测  $\alpha$ -亚麻酸和亚油

酸的方法。

近红外光谱分析技术 (near infrared spectroscopy, NIRS) 是一种利用近红外谱区包含的光谱信息, 进行有机质含量及结构分析的一种技术。NIRS 的信息源主要是物质内部原子间振动的倍频与合频。近红外光谱技术能够对目标物的多个指标同时进行预测。由于近红外光谱在采样技术上独有的快速、无损、高效、低成本、采样重现性好、测量方便、操作性强等优点, 已经越来越多地应用于农业<sup>[1-5]</sup>、工业<sup>[6]</sup>、医药<sup>[7]</sup>等领域。在近红外光谱技术测定脂肪酸方面, 主要是对某种含油脂食物材料中脂肪酸组成和含量的测定<sup>[8-12]</sup>, 而对适应面更广的多种食用油中必需脂肪酸的近红外光谱测定方法报道相对较少。颜辉<sup>[13]</sup>研究了基于中红外 (infrared, IR) 和近红外 (near-infrared, NIR) 光谱的光谱融合技术快速检测食用油中亚油酸和亚麻酸含量, 建立优化模型, 提高预测精度。不过, 颜辉<sup>[13]</sup>仅研究了一阶求导和 Autoscale 的预处理方法, 并只利用了偏最小二乘回归方法 (PLS) 算法, 建立快速检测食用油中亚油酸和亚麻酸含量的模型。本研究采集油样的近红外光谱, 通过多种化学计量学方法, 建立食用油的近红外光谱及其含有的  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸含量间的关系, 研究一种食用油中  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸含量的快速检测方法。

## 1 材料与方 法

### 1.1 样品准备

试验所用的食用油为市售, 包括小磨麻油 (海宁市裕丰酿造有限责任公司)、芝麻油 (河南栗城)、纯正

收稿日期: 2010-10-09 修订日期: 2011-11-21

基金项目: 国家科技支撑计划 (No.2006BAD05A02); 国家高技术研究发展计划 (“863” 计划) 项目 (2007AA10Z210)

作者简介: 张辉 (1981-), 男, 助理研究员, 主要从事功能性食品添加剂方面的研究。杭州 浙江大学生物系统工程与食品科学学院, 310029。

Email: hubert0513@zju.edu.cn

\*通信作者: 冯凤琴 (1964-), 女, 教授, 博士生导师, 主要从事食品化学方面的研究。杭州 浙江大学生物系统工程与食品科学学院, 310029。

Email: fengfq@zju.edu.cn

何 勇, 中国农业工程学会高级会员 (E041200151S)

芝麻油(舟山市植物油脂有限公司)、纯正橄榄油(番禺合兴油脂有限公司)、花生油(山东鲁花集团有限公司)、山茶油(常山县山神茶油有限公司)、大豆油(上海嘉里工业有限公司)、沙棘果油、沙棘籽油(青海康普德生物制品有限公司)。针对这 9 种油,通过 2 种油(质量比 1:1)或 3 种油(质量比 1:1:1)混合,共获得 111 个样本,均呈透明均一状态。将试验得到的食用油样本随机分为 2 组,其中 74 份样本用于模型的建立,剩余的 37 个样本作为预测样本。

## 1.2 气相色谱采集与分析

脂肪酸分析采用山东南瑞虹化工仪器有限公司 SP-6890 气相色谱仪,美国 Agilent(安捷伦)公司的色谱柱 DB-23 毛细管柱(60 m×0.250 mm×0.25 μm),火焰离子化检测器(FID),进样温度 320℃,检测器温度 330℃,检测程序为恒温 190℃停留 15 min。载气为氮气,流速 50 mL/min。使用浙江大学智能信息工程研究所 N-2000 双通道色谱工作站采集数据并分析结果。

本试验甲酯化方法采用国标 GB/T 17376-1998,萃取得到脂肪酸甲酯经过 C18 小柱去除甾醇,再经氮气吹干后复溶于用于气相色谱分析。试验中采用十九酸(C19:0)作为内标物,计算样品中 α-亚麻酸、亚油酸的含量(以质量分数计)。典型的色谱图如图 1。各种脂肪酸及内标物都得到彻底分离且峰形良好。α-亚麻酸和亚油酸的标准曲线线性相关显著,相关系数均大于 0.99。

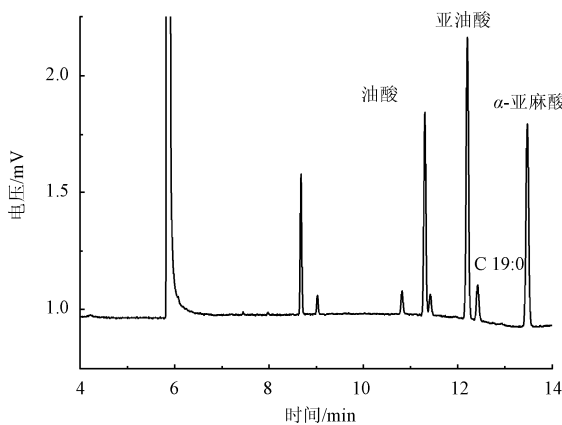


图 1 常见食用油典型的气相色谱图

Fig.1 Gas chromatograms of typical edible oil samples

## 1.3 近红外光谱采集与分析

### 1.3.1 近红外光谱采集

试验采用日本 JASCO 公司的 ModelFT/IR-4100 傅里叶红外光谱仪,选定光谱检测范围为 4 000~7 800 cm<sup>-1</sup>。仪器分辨率为 4 cm<sup>-1</sup>。整个试验过程保持室内温度在 25℃。仪器预热稳定后加样于 SiO<sub>2</sub> 可拆卸液体池,光程 0.2 mm。扫描样品的近红外透射光谱。以 SiO<sub>2</sub> 窗做空白对照。每个样本的扫描次数为 32 次,平均后作为该样本的光谱值。采样软件为 Spectra Analysis。

9 种未混合的食用油(小磨麻油、芝麻油、纯正芝麻油、纯正橄榄油、花生油、山茶油、大豆油、沙棘果油、沙棘籽油)的近红外透射光谱曲线如图 2 所示。图 2 中

横坐标为红外光谱波数,纵坐标为光谱透射率。从图 2 中可以看出,不同样品的光谱曲线交错重叠。光谱数据存在不同程度的平移,还存在一些噪声。因此需要进行光谱预处理。

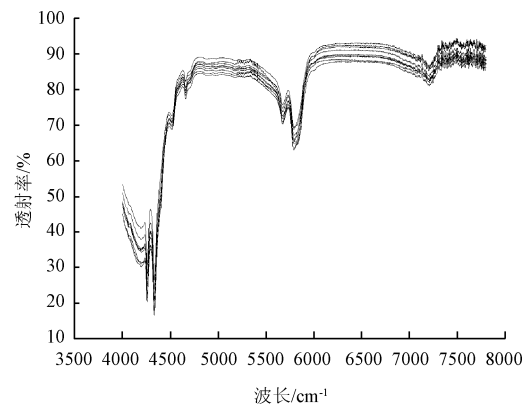


图 2 9 种未混合的食用油的近红外透射光谱曲线 (4 000~7 800 cm<sup>-1</sup>)

Fig.2 Near infrared transmission spectra (4 000-7 800 cm<sup>-1</sup>) of nine unmixed edible oil samples

### 1.3.2 近红外光谱预处理

研究基于 Unscramble V9.6 软件,分别采用 Savitzky-Golay 平滑法(Savitzky-Golay smoothing, SGS);多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、标准正态变换(standard normal variate, SNV)、基线校正(Baseline correction, BC)、一阶和二阶求导(1 st and 2nd savitzky-golay derivative, SGD)等方法<sup>[14]</sup>进行光谱预处理分析,并对处理结果进行比较。

### 1.3.3 近红外光谱建模

研究基于 Unscramble V9.6 和 Matlab7.6 软件,分别进行偏最小二乘回归方法(partial least squares regression, PLS)和最小二乘支持向量机(least-squares support vector machine, LS-SVM)<sup>[15-16]</sup>算法分析,建立食用油的近红外光谱和其包含的 α-亚麻酸和亚油酸含量间的关系。PLS 模型的最优主成分数由模型得到的最小交互验证均方根误差(root mean square error of cross-validation, RMSECV)决定。RMSECV 通过完全交互验证(full-cross validation)得到。具体的 LS-SVM 算法描述可参见参考文献[17]。

### 1.3.4 近红外光谱结果评价

根据气相色谱法测得的实际含量和模型预测含量进行对比分析。分别计算预测结果的决定系数( $R^2$ )、预测均方根误差(root mean square error for prediction, RMSEP)和剩余预测偏差(residual predictive deviation, RPD)进行模型准确性的评价。其中当 RPD 值大于 3 时表示模型有较好的预测能力<sup>[18]</sup>。

## 2 结果与分析

### 2.1 亚油酸含量预测

基于不同的光谱预处理方法分别应用 PLS 和 LS-SVM 模型对于预测样本中亚油酸含量进行了预测(表 1)。从预测结果中可以看到,总体上 LS-SVM 的预测能

力要优于 PLS。但是当光谱没有经过预处理时, PLS 的预测能力要更优。这主要是因为未经过平滑预处理的光谱信号包含有很多高频的噪声, 这些噪声会对 LS-SVM 建模产生比较大的影响。对于 PLS 来说当采用基于窗口大小为 3 的 SGS 平滑结合窗口大小为 3 的一阶或二阶 SGD 进行光谱预处理时效果比未经过预处理时效果要差, 而其他预处理对于 PLS 的预测结果均有提高, 但提高的幅度不大。其中基于窗口大小为 3 的 SGS 平滑结合 SNV 的光谱预处理达到了最优的预测结果。对于 LS-SVM 来说, 所有经过预处理后的模型预测能力都要优于未经过预处理的效果,  $R^2$  均在 0.98 以上。但经过不同预处理的 LS-SVM 模型预测能力相差不大, 其中窗口大小为 3 的 SGS 平滑结合 MSC 的光谱预处理能够达到最优的预测效果 (图 3),  $RPD$  值达到了 9.4783。从总体的预测结果可以看到近红外光谱技术能够很好地对食用油中亚油酸含量进行预测。

表 1 基于不同预处理和化学计量学模型的食用油中亚油酸含量的预测结果比较

Table 1 Predicted results of linoleic acid contents in edible oils based on different spectral pretreatments and chemometrics

光谱预处理	化学计量学	主成分数	预测均方根误差	剩余预测偏差	决定系数
无	PLS	10	0.0292	4.9325	0.965
	LS-SVM	/	0.0482	2.9735	0.890
SGS-3	PLS	9	0.0281	5.1014	0.968
	LS-SVM	/	0.0180	8.0759	0.984
SGS-3 and SNV	PLS	10	0.0257	5.5572	0.969
	LS-SVM	/	0.0163	9.3714	0.988
SGS-3 and MSC	PLS	10	0.0259	5.5273	0.968
	LS-SVM	/	0.0161	9.4783	0.989
SGS-3 and BC	PLS	9	0.0281	5.1014	0.968
	LS-SVM	/	0.0180	8.0759	0.984
SGS-3 and 1 <sup>st</sup> SGD-3	PLS	10	0.0467	3.0844	0.902
	LS-SVM	/	0.0229	7.1720	0.984
SGS-3 and 2 <sup>nd</sup> SGD-3	PLS	10	0.0483	2.9685	0.896
	LS-SVM	/	0.0235	6.6522	0.983

注: SGS-3, 1<sup>st</sup> SGD-3 和 2<sup>nd</sup> SGD-3 分别为窗口大小均为 3 的 Savitzky-Golay 平滑, 一阶 Savitzky-Golay 求导和二阶 Savitzky-Golay 求导。

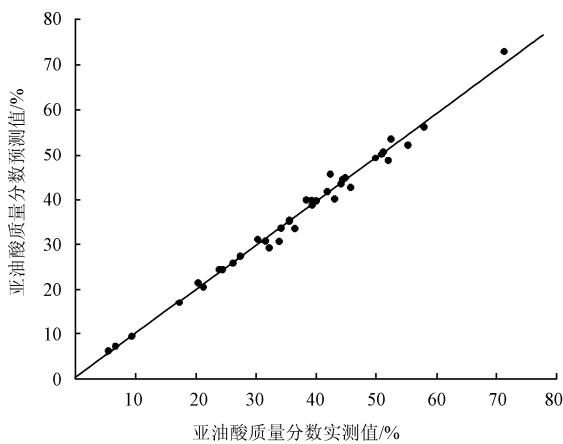


图 3 基于窗口大小为 3 的 SGS 平滑以及 MSC 光谱预处理结合 LS-SVM 得到的食用油中亚油酸质量分数的预测结果  
Fig.3 Predicted results of linoleic acid contents in edible oils based on spectral pretreatment of Savitzky-Golay smoothing with segment size of three and MSC and LS-SVM model

## 2.2 $\alpha$ -亚麻酸含量预测

同样采用不同的光谱预处理方法分别应用 PLS 和 LS-SVM 模型对于预测样本中  $\alpha$ -亚麻酸含量进行了预测 (表 2)。发现预测样本中的 9 号样本其  $\alpha$ -亚麻酸质量分数测定值达到 27.48%, 明显大于其他样本的测定值。如果包含该样本, 会使得性能评价指标过好, 不利于反映模型实际预测能力。从表 2 中可以看到当预测样本集包含 9 号样本比不包含时  $RMSEP$  变化不大, 而  $R^2$  和  $RPD$  则有较大幅度的提高。总体上看 LS-SVM 的预测能力依然优于 PLS。并且同样当光谱没有经过预处理时, 所有样本都在预测集中 PLS 的预测能力要更优。对于 PLS 来说基于窗口大小为 3 的 SGS 平滑结合 MSC 的光谱预处理达到了最优的预测结果。对于 LS-SVM 来说, 所有经

表 2 基于不同预处理和化学计量学模型的食用油中  $\alpha$ -亚麻酸含量的预测结果比较

Table 2 Predicted results of  $\alpha$ -linolenic acid contents in edible oils based on different spectral pretreatments and chemometrics

光谱预处理	化学计量学	主成分数	所有样本都在预测集中			预测集中去除样本 9		
			预测均方根误差	剩余预测偏差	决定系数	预测均方根误差	剩余预测偏差	决定系数
无	PLS	9	0.0094	4.7939	0.959	0.0085	2.3661	0.833
	LS-SVM	/	0.0064	7.2843	0.902	0.0062	3.3451	0.910
SGS-3 <sup>a</sup>	PLS	9	0.0093	4.8203	0.960	0.0085	2.3802	0.834
	LS-SVM	/	0.0053	8.6096	0.986	0.0052	3.9243	0.935
SGS-3 and SNV	PLS	8	0.0099	4.5380	0.952	0.0093	2.1646	0.820
	LS-SVM	/	0.0036	13.6021	0.994	0.0036	6.0561	0.972
SGS-3 and MSC	PLS	9	0.008	5.6490	0.969	0.0074	2.7503	0.885
	LS-SVM	/	0.0036	13.3852	0.994	0.0037	5.9600	0.971
SGS-3 and BC	PLS	9	0.0093	4.8203	0.960	0.0085	2.3802	0.834
	LS-SVM	/	0.0053	8.6096	0.986	0.0052	3.9243	0.935
SGS-3 and 1 <sup>st</sup> SGD-3 <sup>b</sup>	PLS	10	0.0135	3.3436	0.910	0.0127	1.5942	0.775
	LS-SVM	/	0.0064	9.1274	0.990	0.0064	4.4417	0.950
SGS-3 and 2 <sup>nd</sup> SGD-3 <sup>c</sup>	PLS	8	0.0253	1.7806	0.691	0.0205	0.9828	0.294
	LS-SVM	/	0.0056	8.4396	0.996	0.0042	5.8056	0.981

注: SGS-3, 1<sup>st</sup> SGD-3 和 2<sup>nd</sup> SGD-3 分别为窗口大小均为 3 的 Savitzky-Golay 平滑, 一阶 Savitzky-Golay 求导和二阶 Savitzky-Golay 求导。

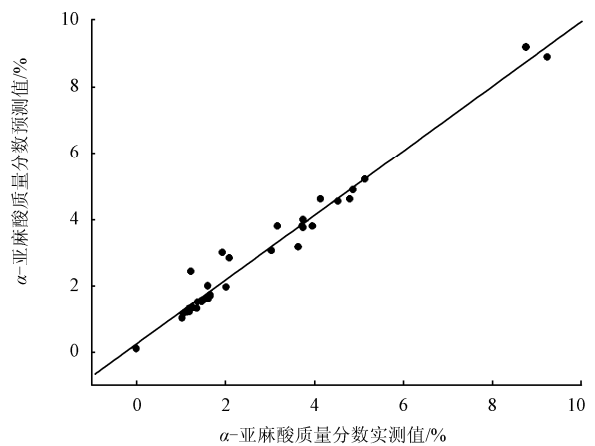


图 4 基于窗口大小为 3 的 SGS 平滑以及 SNV 光谱预处理结合 LS-SVM 得到的食用油中  $\alpha$ -亚麻酸质量分数的预测结果  
Fig.4 Predicted results of  $\alpha$ -linolenic acid contents in edible oils based on spectral pretreatment of Savitzky-Golay smoothing with segment size of three and SNV and LS-SVM model

过预处理后的模型预测能力都要优于未经过预处理的效果,  $R^2$  均在 0.93 以上。其中窗口大小为 3 的 SGS 平滑结合 SNV 的光谱预处理能够达到了最优的预测效果(图 4),  $RPD$  值达到了 6.0561。可以看到近红外光谱技术能够很好地对食用油中  $\alpha$ -亚麻酸含量进行预测。MSC 和 SNV 是 2 种效果较优的光谱预处理方法。

### 3 讨论与结论

本文探索了利用傅里叶变换近红外光谱技术检测食用油中  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸的含量。分别采用偏最小二乘回归方法(PLS)和最小二乘支持向量机(LS-SVM)建立了  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸的近红外光谱预测模型。当采用多元散射校正(MSC)和标准正态变换(SNV)作为光谱预处理方法时能够较好地提高预测精度。 $\alpha$ -亚麻酸含量和亚油酸含量预测结果的决定系数( $R^2$ )、预测均方根误差(RMSEP)和剩余预测偏差(RPD)分别为 0.972, 0.0036 和 6.0561 以及 0.989, 0.0161 和 9.4783, 均达到了较好的效果。本文分别研究了 Savitzky-Golay 平滑法(SGS)、多元散射校正(MSC)、标准正态变换(SNV)、基线校正、一阶和二阶求导等光谱预处理方法, 并发现 MSC 和 SNV 预处理算法结果要优于一阶求导; 同时, 分别对比了 PLS 和 LS-SVM 2 种光谱建模算法, 结果显示, 非线性建模算法 LS-SVM 的模型结果要明显优于线性建模算法 PLS, 因此, LS-SVM 算法较 PLS 算法要更适用于食用油必需脂肪酸含量的近红外光谱检测应用。

同传统的气相色谱分析方法相比, 近红外光谱技术具有快速、无损、易操作、成本低廉、对人体无伤害等优点, 配合适当的硬件, 可开发出食用油必需脂肪酸快速检测仪, 用于工业化生产检验, 具有很好的应用前景。今后的研究方向, 主要是优化预测模型, 提高模型的鲁棒性, 开发配套的硬件, 研究应用于生产制备过程中食用油中  $\alpha$ -亚麻酸和亚油酸的快速检测仪器。

#### [参 考 文 献]

- [1] 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(4): 933-936.  
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(4): 933-936. (in Chinese with English abstract)
- [2] Xing Juan, Josse D B. Fresh bruise detection by predicting softening index of apple tissue using VIS/NIR spectroscopy[J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 45(2): 176-183.
- [3] 周子立, 张瑜, 何勇, 等. 基于近红外光谱技术的大米品种快速鉴别方法[J]. 农业工程学报, 2009, 25(8): 131-135.  
Zhou Zili, Zhang Yu, He Yong, et al. Method for rapid discrimination of varieties of rice using visible NIR spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2009, 25(8): 131-135. (in Chinese with English abstract)
- [4] 黄凌霞, 吴迪, 金航峰, 等. 基于变量选择的蚕茧茧层量可见红外光谱无损检测[J]. 农业工程学报, 2010, 26(2): 231-236.  
Huang Lingxia, Wu Di, Jin Hangfeng, et al. Non-destructive detection of cocoon shell weight based on variable selection by visible and near infrared spectroscopy[J]. Transactions of the Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2010, 26(2): 231-236. (in Chinese with English abstract)
- [5] 朱登胜, 吴迪, 宋海燕, 等. 应用近红外光谱法测定土壤的有机质和 pH 值[J]. 农业工程学报, 2008, 24(8): 196-199.  
Zhu Dengsheng, Wu Di, Song Haiyan, et al. Determination of organic matter contents and pH values of soil using near infrared spectroscopy[J]. Transactions of the Society of Agricultural Engineering (Transactions of the CSAE), 2008, 24(8): 196-199. (in Chinese with English abstract)
- [6] 吴立军, 尤瑜生, 冯典英, 等. 近红外光谱法测定 ABS/PC 材料的共混比[J]. 工程塑料应用, 2006, 34(10): 52-56.  
Wu Lijun, You Yusheng, Feng Dianying, et al. Quantitative analysis of ABS/PC blend by NIR spectrometry[J]. Engineering Plastics application, 2006, 34(10): 52-56. (in Chinese with English abstract)
- [7] 王培勇, 龙菲筱, 傅兰英, 等. 用近红外无损肌氧及运动心率检测技术评定 100 m 极量强度运动对心脏冲击影响[J]. 光谱学与光谱分析, 2010(2): 340-344.  
Wang Peiyong, Long Feixiao, Fu Lanying, et al. Evaluation of heart impact in the 100 m extreme intensity sport using near-infrared non-invasive muscle oxygen detecting device and sports heart rate detection technology[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010(2): 340-344. (in Chinese with English abstract)
- [8] González-Martín I, González-Pérez I, Alvamz-García N, et al. On-line determination of fatty acid composition in intramuscular fat of Iberian pork loin by NIRs with a remote reflectance fibre optic probe[J]. Meat Science, 2005, 69(2): 243-248.
- [9] González-Martín, González-Pérez C, Hemández-Méndez J, et al. Determination of fatty acids in the subcutaneous fat of Iberian breed swine by near infrared spectroscopy (NIRS) with a fibre-optic probe[J]. Meat Science, 2003, 65(2): 713-719.
- [10] Realini C E, Duckett S K, Windham W R. Effect of vitamin addition to ground beef from grass-fed or grain-fed sources on color and lipid stability, and prediction of fatty acid composition by near-infrared reflectance analysis[J]. Meat science, 2004, 68(1): 35-43.
- [11] 吴建国, 石春海, 张海珍. 构建整粒油菜脂肪酸成分近红外反射光谱分析模型的研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2006, 26(2): 259-262.  
Wu Jianguo, Shi Chunhai, Zhang Haizhen. Study on developing calibration models of fat acid composition in intact rapeseed by near infrared reflectance spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2006(2): 259-262. (in

- Chinese with English abstract)
- [12] Flåtten A, Bryhni E A, Kohler A, et al. Determination of C22:5 and C22:6 marine fatty acids in pork fat with Fourier transform mid-infrared spectroscopy[J]. *Meat Science*, 2005, 69(3): 433—440.
- [13] 颜辉. 植物油的亚油酸、亚麻酸红外光谱融合和模型优化方法的研究[D]. 江苏: 江苏大学, 2010.
- Yan Hui. A study on method of IR spectroscopy integration and model optimization for measuring linoleic acid and linolenic acid in vegetable oil[D]. Jiangsu: Jiangsu University, 2010.
- [14] Helland I S, Naes T, Isaksson T. Related versions of the multiplicative scatter correction method for preprocessing spectroscopic data[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, 29(2): 233—241.
- [15] Suykens J A K, Gestel T V, De Brabanter J, et al. Least squares support vector machines[M]. Singapore: World Scientific Publishing, 2002.
- [16] Suykens J A K, Vanderwalle J. Least squares support vector machine classifiers[J]. *Neural Processing Letters*, 1999, 9(3): 293—300.
- [17] Wu Di, He Yong, Feng Shuijuan, et al. Study on infrared spectroscopy technique for fast measurement of protein content in milk powder based on LS-SVM[J]. *Journal of food engineering*, 2008, 84(1): 124—131.
- [18] Williams P C. Implementation of near-infrared technology[M]. *Near-infrared technology in the agricultural and food industries* (2nd ed.), 2001: 145—169.

## Rapid determination of essential fatty acids in edible oils based on near infrared spectroscopy

Zhang Hui, Wu Di, Li Xiang, Shi Pinyan, Wang Sihan, Feng Fengqin\*, He Yong

(College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, Hangzhou, 310029, China)

**Abstract:** In order to find out a fast quantitative determination method for the essential fatty acids in edible oils, near infrared spectroscopy was applied in determination of the contents of  $\alpha$ -linolenic acid and linoleic acid. The chemometrics models between near infrared spectra and the contents of  $\alpha$ -linolenic acid and linoleic acid were established by partial least squares regression (PLS) and least-squares support vector machine (LS-SVM). Several common used spectral pretreatment methods were used to establish different PLS and LS-SVM models. For linoleic acid prediction, best predictive performance was obtained using LS-SVM model and spectral pretreatment of Savitzky-Golay smoothing and multiplicative scatter correction (MSC). Coefficient of determination ( $R_p^2$ ), root mean square error for prediction ( $RMSEP$ ) and residual predictive deviation ( $RPD$ ) were 0.0161, 0.989 and 9.4783, respectively. For  $\alpha$ -linolenic acid prediction, best predictive performance was obtained using LS-SVM model and the spectral pretreatment of Savitzky-Golay smoothing and standard normal variation (SNV).  $R_p^2$ ,  $RMSEP$  and  $RPD$  were 0.0036, 0.972 and 6.0561, respectively. The results indicate that it is feasible to use near infrared spectroscopy for fast determination of  $\alpha$ -linolenic acid and linoleic acid contents in edible oils.

**Key words:** near infrared spectroscopy, models, optimization,  $\alpha$ -linolenic acid and linolenic acid, edible oils, determination