

文章编号 1004-924X(2013)10-2549-08

红外光谱结合核隐变量正交投影法判别掺杂牛奶

杨延荣¹, 杨仁杰^{1*}, 张志勇¹, 董桂梅¹, 杨士春²

(1. 天津农学院 机电工程系, 天津 300384; 2. 天津农学院 农业分析测试中心, 天津 300384)

摘要:为了快速、准确地检测掺杂牛奶,采用基于核隐变量正交投影(K-OPLS)法分析了掺杂牛奶的光谱。选用高斯函数作为核函数,内部交叉验证均方根(RMSECV)最小值作为评价指标,优选了核函数中的核宽度 σ 以及Y正交成分数。配置含四环素牛奶($0.01\sim 0.3\text{ gL}^{-1}$)、三聚氰胺牛奶($0.01\sim 0.3\text{ gL}^{-1}$)和葡萄糖牛奶($0.01\sim 0.3\text{ gL}^{-1}$)各36个,采集纯牛奶及掺杂牛奶样品的红外光谱,采用K-OPLS建立各掺杂牛奶与纯牛奶的判别模型。利用这些模型对未知样品进行判别,结果显示对掺杂四环素、三聚氰胺、葡萄糖牛奶的判别正确率分别为100%、100%、95.8%。建立了同时判别3种掺杂牛奶与纯牛奶的K-OPLS模型,该模型对未知样品的判别正确率为93.1%;同时,与偏最小二乘判别PLS-DA方法的预测结果进行了比较,结果表明:K-OPLS建模方法对于复杂的牛奶体系具有较好的预测能力。

关键词:红外光谱;核隐变量正交投影;掺杂牛奶;四环素;三聚氰胺;葡萄糖

中图分类号: O657.33 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20132110.2549

Discrimination of adulterated milk based on infrared spectroscopy and K-OPLS

YANG Yan-rong¹, YANG Ren-jie^{1*}, ZHANG Zhi-yong¹, DONG Gui-mei¹, YANG Shi-chun²

(1. *Department of Electromechanical Engineering, Tianjin Agricultural University, Tianjin 300384, China;*

2. Laboratory of Agricultural Analysis, Tianjin Agricultural University, Tianjin 300384, China)

** Corresponding author, E-mail: rjyang1978@163.com*

Abstract: To detect adulterated milk rapidly and accurately, the discrimination models for adulterated milk were established based on the method of Kernel Orthogonal Projection to Latent Structure (K-OPLS). By using the Gaussian radial basis function as the kernel function and the minimum value of Root Mean Square Errors of Cross-validation (RMSECV) as an evaluation index, the width of the Gaussian kernel, the minimum value of the RMSECV, and the number of Y-orthogonal components (scalar) were selected in a optimization. 36 samples with different concentrations of tetracycline ($0.01\sim 0.3\text{ gL}^{-1}$), melamine ($0.01\sim 0.3\text{ gL}^{-1}$) and glucose ($0.01\sim 0.3\text{ gL}^{-1}$) in milk were prepared, respectively. Then the infrared absorption spectra of all samples were measured. K-OPLS models for tetracycline-tainted milk, melamine-tainted milk and glucose-tainted milk were constructed. The results show that its classification accuracy for tetracycline-tainted milk, melamine-tainted milk and glucose-tainted milk are 100%, 100%, 95.8%, respectively. The K-OPLS model was used to classify the

收稿日期:2013-05-12;修订日期:2013-06-09.

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 31201359)

above three kinds of adulterated milk and pure milk and its classification accuracy for unknown samples is 93.1%. Compared with Partial Least Square Discriminant Analysis (PLS-DA), K-OPLS methods show higher accuracy. The results indicate that the K-OPLS model has good prediction ability for complex milk systems.

Key words: infrared spectroscopy; Kernel Orthogonal Projection to Latent Structure(K-OPLS); adulterated milk; tetracycline; melamine; glucose

1 引言

牛奶是人们生活中的重要食品,其质量安全与健康息息相关。为保证牛奶的品质与质量,国家制定了牛奶及其制品的各项标准,如新国标规定每 100 g 生鲜乳中含有的蛋白质应不少于 2.8 g,但为提高蛋白质含量,使不合格牛奶达标,不法商贩采取掺杂尿素、三聚氰胺等物质来提高牛奶中蛋白质含量,严重危害消费者的健康。因此,能否快速准确地进行牛奶掺杂检测已经成为维护奶制品安全的重要课题。

目前,国内外多采用光谱手段对牛奶掺杂进行检测^[1-7],但由于牛奶中掺杂物具有微量和多样的特点,掺杂物特征峰极易与牛奶成分特征峰相互重叠,且掺杂物特征信息与待分析组分之间呈现非线性关系,因此从测试光谱中提取有用信息,实现牛奶掺杂检测存在较大难度,而研究有效的建模方法是构建预测模型的关键。目前常用的一些建模方法如多元线性回归(MLR)、主成分回归(PCR)、偏最小二乘回归(PLSR)等均属于线性建模方法,不适合于复杂的、非线性生物体系,难以提取微弱的掺杂物特征信息。针对上述问题,John 等^[8]提出了引入正交思想的隐变量正交投影(Orthogonal Projections to Latent Structures, O-PLS)建模方法,该方法具有较强的信息提取能力^[9]。Rantalainen 等^[10]在 O-PLS 的基础上引入非线性核函数,提出基于核技术的 K-OPLS 建模方法,增强了非线性处理能力,对于非线性多组分的生物体系具有较强的预测能力^[11-12]。本文作者采用 K-OPLS(Kernel Orthogonal Projection to Latent Structure)方法建立掺杂四环素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶、掺杂葡萄糖牛奶以及 3 种掺杂牛奶与纯牛奶的判别模型,实现了掺杂牛奶与纯牛奶的正确识别。

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,仪器采用陶瓷光源,溴化钾(KBr)分束器,DTGS 检测器。光谱采集为 900~1 700 cm^{-1} ,分辨率为 8 cm^{-1} ,扫描间隔为 4 cm^{-1} ,扫描次数为 32。

2.2 试剂和样品处理

试验分别采用 3 个品牌纯牛奶(从超市购置):蒙牛纯牛奶、伊利纯牛奶和海河纯牛奶进行对比试验。随机选取上述纯牛奶,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,分别配置浓度为 0.01~0.3 $\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ 的掺杂四环素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂葡萄糖牛奶各 36 个,纯牛奶样本 108 个。

试验前需要对测试样品进行匀质处理。为减小仪器漂移影响,每采集完一个样品的光谱数据后,同时采集蒸馏水的光谱作为背景光谱,采用样品光谱扣除相邻背景光谱后的数据作为分析光谱。

2.3 K-OPLS 方法

选用高斯函数作为 Kernel 函数,K-OPLS 建模算法如下^[9]:

(1)对 $Y^T KY$ 进行本征值分解得到 Y 载荷矩阵 C_p :

$$(C_p, \sum_p) \leftarrow \text{EVD}(Y^T K_{\text{tr, tr}}^{1,1} Y, A), \quad (1)$$

(2)将 Y 投影到 C_p 上得到 Y 的得分矩阵 U_p :

$$U_p \leftarrow Y C_p, \quad (2)$$

(3)对每个正交主成分执行以下步骤循环计算(i 从 1 到 A_0 , A_0 为正交主成分数)

a. 计算 X 的预测得分矩阵 T_{ptr}^i :

$$T_{\text{ptr}}^i \leftarrow K_{\text{tr, tr}}^{1, i} U_p \sum_p^{-1/2}, \quad (3)$$

b. 计算 i 个正交主成分的预测载荷矩阵 c_i^j

和本征值 σ_o^i :

$$(\mathbf{c}_o^i, \sigma_o^i) \leftarrow EDV((\mathbf{T}_{ptr}^i)^T (\mathbf{K}_{tr, tr}^{i,i} - \mathbf{T}_{ptr}^i (\mathbf{T}_{ptr}^i)^T) \mathbf{T}_{ptr}^i, 1). \quad (4)$$

c. 计算 i 个正交主成分的预测得分向量 \mathbf{t}_{otr}^i :

$$\mathbf{t}_{otr}^i \leftarrow (\mathbf{K}_{tr, tr}^{i,i} - \mathbf{T}_{ptr}^i (\mathbf{T}_{ptr}^i)^T) \mathbf{T}_{ptr}^i \mathbf{c}_o^i \sigma_o^{i-1/2}. \quad (5)$$

d. 对 i 个 Y 正交得分向量标准化:

$$\|\mathbf{t}_{otr}^i\| \leftarrow \sqrt{\mathbf{t}_{otr}^{i,T} \mathbf{t}_{otr}^i} \quad \mathbf{t}_{otr}^i \leftarrow \mathbf{t}_{otr}^i / \|\mathbf{t}_{otr}^i\|. \quad (6)$$

e. 从核矩阵中剔除 Y 正交成分:

$$\mathbf{K}_{tr, tr}^{i+1} \leftarrow \mathbf{K}_{tr, tr}^{i,i} (\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{t}_{otr}^i \mathbf{t}_{otr}^{i,T}). \quad (7)$$

f. 计算新的核矩阵用于 $i+1$ 循环:

$$\mathbf{K}_{tr, tr}^{i+1, i+1} \leftarrow (\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{t}_{otr}^i \mathbf{t}_{otr}^{i,T}) \mathbf{K}_{tr, tr}^{i,i} (\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{t}_{otr}^i \mathbf{t}_{otr}^{i,T}). \quad (8)$$

(4) 计算第 A_0+1 主成分的预测得分矩阵:

$$\mathbf{T}_{ptr}^{A_0+1} \leftarrow \mathbf{K}_{tr, tr}^{A_0+1} \mathbf{U}_p \Sigma_p^{-1/2}. \quad (9)$$

(5) 计算回归系数:

$$\mathbf{B}_t \leftarrow ((\mathbf{T}_{ptr}^{A_0+1})^T \mathbf{T}_{ptr}^{A_0+1})^{-1} (\mathbf{T}_{ptr}^{A_0+1})^T \mathbf{U}_p. \quad (10)$$

计算 X 的得分矩阵 $\mathbf{T}_p \leftarrow \mathbf{K} \mathbf{U}_p$ 、 Y 得分矩阵 \mathbf{U}_p

和预测得分矩阵 \mathbf{T}_{ptr} 。

对于预测集中的数据类同校正集的操作, 计算得到 $\mathbf{T}_{ptr}^{A_0+1}$, 并根据 \mathbf{B}_t 和 \mathbf{C}_p^T 得到 Y 的估计值:

$$\hat{Y} \leftarrow \mathbf{T}_{ptr}^{A_0+1} \mathbf{B}_t \mathbf{C}_p^T, \quad (11)$$

其中: $\mathbf{K}^{i,j}$ 为原始的 Gram 核矩阵, $\mathbf{K}^{j,i}$ 为原始核矩阵经 i, j 次收缩后的核矩阵, \mathbf{I} 为单位矩阵, \sum_p 为 Y 的本征值。

K-OPLS 判别是将回归分析中的 Y 变量(二进制变量)设定为类别变量, 用类别变量和光谱矩阵进行非线性回归。Kernel 函数中核宽度 σ 和 Y 正交成分数 N 均影响模型预测能力。为防止模型过度训练, 使其具有良好的泛化能力, 采用交叉验证法来确定模型的最佳参数 σ 和 N , 即计算不同参数 σ 和 N 情况下的内部交叉验证均方根(Root Mean Square Error of Cross Validation, RMSECV), 选择 RMSECV 最小时对应的 σ 和 N 作为最佳建模参数。

$$RMSECV = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (y_i - y_{pi})^2}{m}}. \quad (12)$$

利用 Q^2Y 及判别准确率来评定模型质量:

$$Q^2Y = 1 - \frac{\sum (y - y_p)^2}{\sum (y - \bar{y})^2}, \quad (13)$$

式中: y 、 y_p 和 \bar{y} 分别代表样品的实际值、预测值和平均值, m 为校正集中的样本数。本文[10]表

示掺杂牛奶, [0 1]表示纯牛奶。

需要说明的是 Q^2Y 描述的是不同类别在统计学上的意义, 当 Q^2Y 大于 0.5 时, 认为所建立的模型是一个好的模型, 当 Q^2Y 大于 0.7 时, 表明所建模型非常好[13-14]。

3 结果与分析

3.1 纯牛奶和掺杂牛奶红外光谱

图 1 是纯牛奶和 3 种掺杂牛奶在 900~1700 cm^{-1} 的吸收谱。显然在整个光谱范围内纯牛奶样品与掺杂牛奶样品的光谱形状, 谱峰位置几乎相同, 无法直观地通过谱图比对实现掺杂牛奶与纯牛奶的判别, 因此只能借助于化学计量学进行分析。

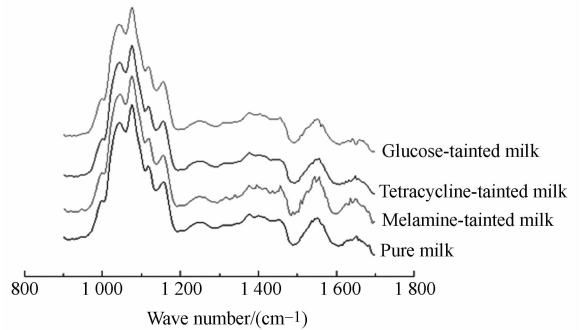


图 1 纯牛奶和掺杂牛奶的红外光谱

Fig. 1 Infrared spectrum of pure milk and adulterated milk

3.2 掺杂四环素牛奶 K-OPLS 判别模型

按照校正集和验证集比例为 2:1 的关系, 采用浓度梯度法从 36 个掺杂四环素牛奶样本中选出 24 个样品作为校正集样品, 余下 12 个构成独立验证集。从 36 个纯牛奶样本中随机选取 24 个作为校正集, 其余 12 个作为验证集。对校正集中的 48 个样品, 采用 K-OPLS 建模方法, 让核函数宽度从 0.1 开始, 以 0.1 为间隔, 直到 10, 正交成分数 N 从 1 开始直到 15 为止, 分别计算 RMSECV, 选择 RMSECV 最小所对应的 σ 和 N 。

图 2 是在不同 σ 和 N 下 RMSECV 的三维表面图, 从图中可以看出, 当 $\sigma=0.7, N=5$ 时, RMSECV 全局最小(RMSECV=0.273), 因此选择 $\sigma=0.7, N=5$ 建立掺杂四环素牛奶与纯牛奶的 K-OPLS 判别模型。该模型的 $Q^2Y=0.69$, 表明所建模型比较好。

采用所建立的模型, 对校正集中的 48 个样品

进行内部预测,共有 4 个样品(掺杂四环素牛奶和纯牛奶各 2 个)被误判,其判别正确率为 91.7%。对验证集中的 24 个未知样品进行外部预测,掺杂牛奶和纯牛奶都得到正确识别,其判别正确率为 100%。

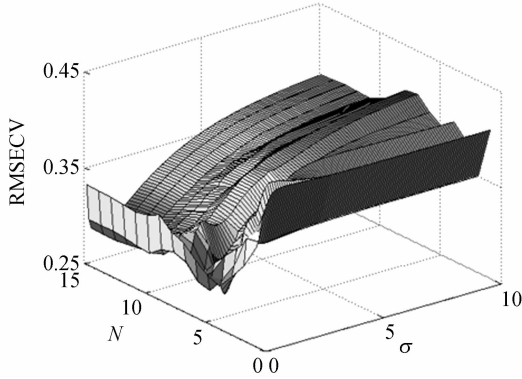


图 2 不同参数对四环素牛奶 K-OPLS 模型的影响
Fig. 2 Effect of different parameters on the K-OPLS model of tetracycline-tainted milk

为了说明 K-OPLS 方法的优势,对同样的校正集和验证集,建立掺杂四环素牛奶的 PLS-DA 模型,表 1 给出了两种方法的建模参数和预测结果。显然,K-OPLS 方法的预测能力要优于 PLS-DA。

表 1 两种方法对掺杂四环素牛奶与纯牛奶的判别结果
Tab. 1 Discrimination results of tetracycline-tainted milk and pure milk by PLS-DA and K-OPLS

建模方法	建模参数	判别正确率	
		校正集/%	预测集/%
PLS-DA	主成分为 5	100	87.5
K-OPLS	$\sigma=0.7, N=5$	91.7	100

3.3 掺杂三聚氰胺牛奶 K-OPLS 判别模型

采用同样的方法选择校正集(48 个)和验证集样品(24 个)。对校正集中的 48 个样品建立掺杂三聚氰胺牛奶的 K-OPLS 判别模型。图 3 是不同核参数 σ 和正交成分数 N 所对应模型的 RMSECV 三维表面图,从图上可以看出当 $\sigma=0.2, N=8$ 时,所对应模型的 RMSECV 全局最小(RMSECV=0.156),因此选择 $\sigma=0.2, N=8$ 建立掺杂三聚氰胺牛奶与纯牛奶的 K-OPLS 判别模型($Q^2Y=0.9$)。

采用所建立的模型,对校正集中的 48 个样品

进行内部预测,其中 1 个纯牛奶被误判,24 个掺杂三聚氰胺牛奶都得到正确识别,模型对校正集样品的判别正确率为 97.9%。对验证集中的 24 个未知样品进行外部预测,无论掺杂三聚氰胺牛奶,还是纯牛奶,判别正确率都为 100%。

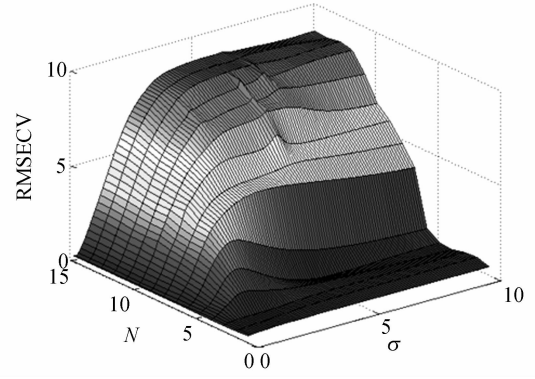


图 3 不同参数对三聚氰胺牛奶 K-OPLS 模型的影响
Fig. 3 Effect of different parameters on the K-OPLS model of melamine-tainted milk

对同样的校正集和验证集样品,建立了掺杂三聚氰胺牛奶的 PLS-DA 模型。采用所建立的模型对校正集和验证集中所有的样品进行预测,校正集和预测集中各有 1 个纯牛奶被误判。表 2 给出了两种方法的建模参数和预测结果。

表 2 两种方法对掺杂三聚氰胺牛奶与纯牛奶的判别结果
Tab. 2 Discrimination results of melamine-tainted milk and pure milk by PLS-DA and K-OPLS

建模方法	建模参数	判别正确率	
		校正集/%	预测集/%
PLS-DA	主成分为 4	97.9	95.8
KOPLS	$\sigma=0.2, N=8$	97.9	100

3.4 掺杂葡萄糖牛奶 K-OPLS 判别模型

选取 48 个样品(掺杂葡萄糖牛奶和纯牛奶各 24 个)作为校正集,建立 K-OPLS 模型,剩余的 24 个样品作为验证集,对所建立模型的预测能力进行评估。

图 4 是不同核参数 σ 和正交成分数 N 所对应模型的 RMSECV 三维表面图,从图中可以看出当 $\sigma=0.1, N=3$ 时,所对应模型的 RMSECV 全局最小(RMSECV=0.215),因此选择 $\sigma=0.1, N=3$ 建立掺杂葡萄糖牛奶与纯牛奶的 K-OPLS 模型。该模型的 $Q^2Y=0.816$,表明所建模型非常好。

利用所建的模型对校正集中 48 个样品进行内部预测,其中 2 个纯牛奶被误判,24 个掺杂葡萄糖牛奶都被正确识别,该模型对校正集样品总的判别正确率为 95.8%。对验证集中的 24 个样品进行预测,1 个纯牛奶被误判,12 个掺杂牛奶都得到正确判别,模型对未知样品总的判别正确率为 95.8%。

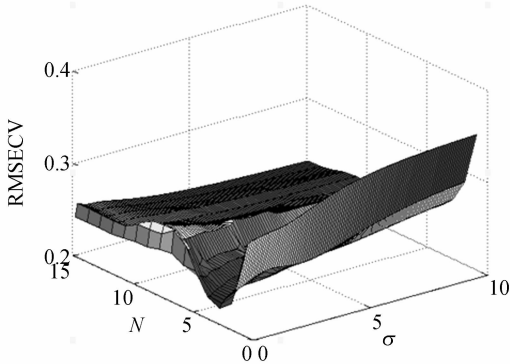


图 4 不同参数对葡萄糖牛奶 K-OPLS 模型的影响
Fig. 4 Effect of different parameters on the K-OPLS model of glucose-tainted milk

对同样的校正集和验证集样品,建立了掺杂葡萄糖牛奶的 PLS-DA 模型。利用所建模型对校正集进行内部预测,3 个样品(2 个掺杂葡萄糖牛奶和 1 个纯牛奶)被误判;对验证集外部预测,各有 1 个掺杂葡萄糖牛奶和纯牛奶被误判。表 3 给出了两种方法的建模参数和预测结果。

表 3 两种方法对掺杂葡萄糖牛奶与纯牛奶的判别结果
Tab. 3 Discrimination results of glucose-tainted milk and pure milk by PLS-DA and K-OPLS

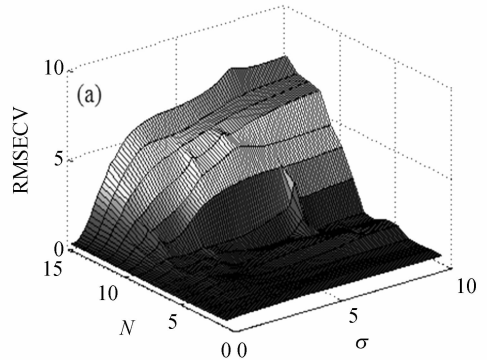
建模方法	建模参数	判别正确率	
		校正集/%	预测集/%
PLS-DA	主成分为 4	93.8	91.7
K-OPLS	$\sigma=0.1, N=3$	95.8	95.8

3.5 3 种掺杂牛奶 K-OPLS 判别模型

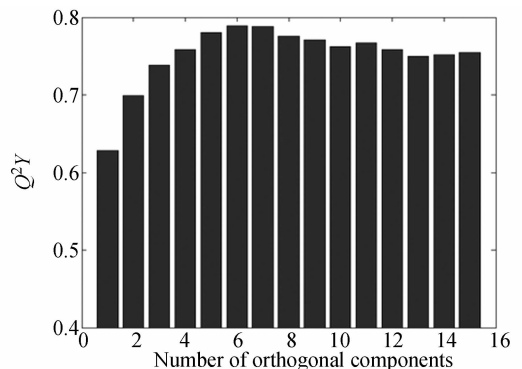
为进一步说明 K-OPLS 方法的优势,对上述所建立的模型进行扩展,即建立了 3 种掺杂牛奶与纯牛奶的 K-OPLS 判别模型。按照浓度梯度法,选择 144 个样品(掺杂四环素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶和掺杂葡萄糖牛奶各 24 个,纯牛奶 72 个),余下的 72 个样品作为验证集。

图 5(a)是不同参数下 K-OPLS 模型的 RM-

SECV 三维表面图,选择 $\sigma=0.1, N=6$ 建立 3 种掺杂牛奶与纯牛奶的 KOPLS 判别模型。图 5b 是 $\sigma=0.1$ 时,不同正交成分数 N 下的 Q^2Y 。从图上可以看出,随着 N 的增加, Q^2Y 不断增加,当 $N=6$ 时,达到极大值 0.79,当 N 继续增大时, Q^2Y 反而减小。所以图 5(b)进一步说明该模型选择 6 个正交成分的正确性,而且根据 Q^2Y 值,说明所建模型非常好。



(a)不同建模参数 σ 和 N 对 RMSECV 的影响
(a) Effect of different parameters on the RMSECV



(b) $\sigma=0.1$ 时不同正交成分数对 Q^2Y 的影响
(b) Effect of number of Y-orthogonal components on the Q^2Y ($\sigma=0.1$)

图 5 不同建模参数对掺杂牛奶 K-OPLS 模型的影响
Fig. 5 Effect of different parameters on the K-OPLS model of adulterated milk

图 6 是正交成分 $N=6$ 时, Y 预测得分 T_p 与第一 Y 正交成分 (T_{o1}) 的散点图。从图中可看出:掺杂牛奶类样品与纯牛奶类样品差异度比较明显,纯牛奶类样品主要位于正的 T_p 区域,而掺杂牛奶类样品主要位于负的 T_p 区域。而对于 3 类掺杂牛奶,大部分掺杂三聚氰胺牛奶样品位于正的 T_{o1} 区域,掺杂四环素牛奶和掺杂葡萄糖牛

奶样品主要位于负的 T_{o1} 区域,二者无法区分开。

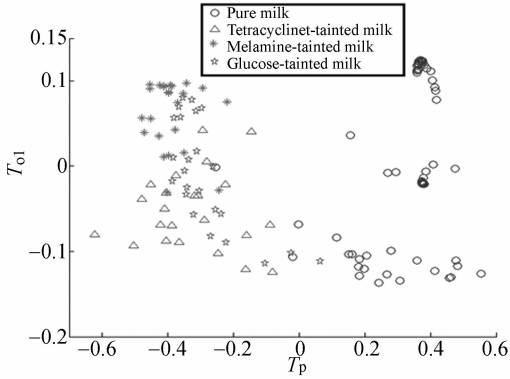


图 6 T_p 与 T_{o1} 之间的关系 ($N=6$)

Fig. 6 Relation between T_p and T_{o1} at $N=6$

采用所建立的 K-OPLS 模型对校正集中 144 个样品进行内部预测,共有 6 个样品被误判;其中 1 个掺杂四环素牛奶被误判,2 个掺杂葡萄糖牛奶被误判,3 个纯牛奶被误判,24 个掺杂三聚氰胺牛奶都得到正确识别,所建模型对校正集样品的判别正确率为 95.8%。对验证集中 72 个未知样品的预测结果见图 7 所示。掺杂四环素牛奶和掺杂三聚氰胺牛奶识别正确率都为 100%;仅有 1 个掺杂葡萄糖牛奶被误判,其判别正确率为 91.7%;4 个纯牛奶被误判,其判别正确率为 88.9%。模型对未知样品总的判别正确率为 93.1%。显

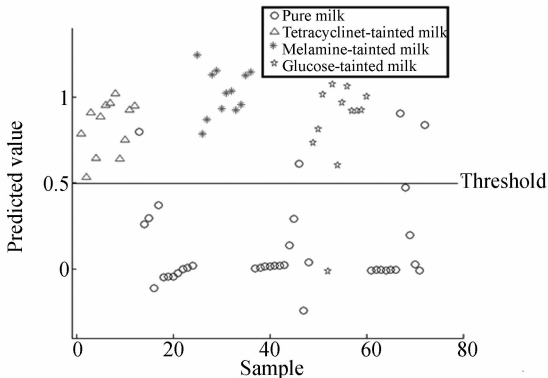


图 7 掺杂牛奶 K-OPLS 模型对验证集样品预测结果

Fig. 7 Predicted results of validation set by K-OPLS model

然,将一种掺杂牛奶与纯牛奶的 K-OPLS 模型扩展到三种掺杂牛奶与纯牛奶的判别,同样取得较好的判别正确率,这就说明 K-OPLS 建模方法对于复杂的牛奶体系具有较好的预测能力。

对同样的校正集和预测集,建立了掺杂牛奶的 PLS-DA 模型。对于 PLS-DA 模型,在校正集中,分别有 2 个掺杂四环素牛奶、1 个掺杂葡萄糖牛奶和 5 个纯牛奶被误判;在验证集中,1 个掺杂四环素牛奶、3 个掺杂葡萄糖牛奶和 5 个纯牛奶被误判,该模型对未知样品的判别正确率为 87.5%。表 4 给出了两种方法建模参数和预测结果。显然,无论对校正集样品内部预测,还是对验证集样品外部预测,K-OPLS 方法的判别正确率都高于 PLS-DA。

表 4 两种方法对掺杂牛奶与纯牛奶的判别结果

Tab. 4 Discrimination results of adulterated milk and pure milk by PLS-DA and K-OPLS

建模方法	建模参数	判别正确率	
		校正集	预测集
PLS-DA	主成分为 9	94.4%	87.5%
K-OPLS	$\sigma=0.1, N=6$	95.8%	93.1%

4 结 论

将红外光谱技术与 K-OPLS 方法相结合,分别建立掺杂四环素牛奶、掺杂三聚氰胺牛奶、掺杂葡萄糖牛奶与纯牛奶的 K-OPLS 判别模型,这些模型对未知样品的判别正确率分别达到了 100%、100%、95.8%。为了进一步验证该方法的有效性,建立了同时判别上述 3 种掺杂牛奶与纯牛奶的 K-OPLS 判别模型,其对未知样品的判别正确率为 93.1%。与 PLS-DA 方法的预测结果进行了比较。研究表明:K-OPLS 建模方法对于复杂的掺杂牛奶体系具有较好的预测能力,可实现掺杂牛奶与纯牛奶的正确识别。

参考文献:

[1] LISA J M, ALONA A, CHERNYSHOVA A H, *et al.*. Melamine detection in infant formula powder using near- and mid-infrared spectroscopy [J]. *Ag-*

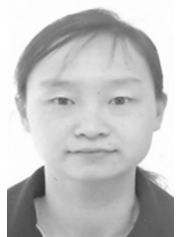
ric. Food Chem., 2009, 57:3974-3980.

[2] 唐玉莲. 近红外光谱在乳制品成分快速检测方面的应用研究[J]. *乳业科学与技术*, 2009, 32(4):190-194.

TANG Y L. Study on near infrared spectroscopy technique for composition detection of dairy produc-

- tion [J]. *Journal of Dairy Science and Technology*, 2009, 32(4):190-194. (in Chinese)
- [3] 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.
- YANG R J, LIU R, XU K X. Detection of urea in milk using two-dimensional (2D) correlation spectroscopy and partial least square method [J]. *Transactions of the CSAE*, 2012, 28(6):259-263. (in Chinese)
- [4] KASEMSUMARAN S, THANAPASE W, KIATSOONTHON A. Feasibility of near infrared spectroscopy to detect and to quantify adulterants in cow milk [J]. *Analytical Sciences*, 2007, 23(7):907-910.
- [5] 杨仁杰,刘蓉,徐可欣. 基于中红外光谱检测牛奶中掺杂尿素[J]. *光谱学与光谱分析*, 2011, 31(9):2383-2385.
- YANG R J, LIU R, XU K X. Adulteration detection of urea in milk by mid-infrared spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2011, 31(9):2383-2385. (in Chinese)
- [6] LU C H, XING B R, HAO G, *et al.*. Rapid detection of melamine in milk powder by near infrared spectroscopy [J]. *Near infrared Spectroscopy*, 2009, 17(2):59-67.
- [7] LEE S Y, ERDENE O G, JAEBUM C, *et al.*. Detection of melamine in powdered milk using surface-enhanced raman scattering with no pretreatment [J]. *Analytical Letters*, 2010, 43(14):2135-2141.
- [8] TRYGG J, WOLD S. Orthogonal projections to latent structures (O-PLS) [J]. *Journal of Chemometrics*, 2002, 16(3):119-128.
- [9] BYLESJÖ M, RANTALAINEN M, CLOAREC O, *et al.*. OPLS discriminant analysis: combining the strengths of PLS-DA and SIMCA classification [J]. *Journal of Chemometrics*, 2006, 20:341-351.
- [10] RANTALAINEN M, BYLESJÖ, CLOAREC O, *et al.*. Kernel-based orthogonal projections to latent structures (K-OPLS)[J]. *Journal of Chemometrics*, 2007, 21(7):376-385.
- [11] 陈敏,贺益君,王靖岱,等. 基于小波包分析和 K-OPLS 集成方法在颗粒粒径分布检测中的应用[J]. *化工学报*, 2010, 61(6):1349-1356.
- CHEN M, HE Y J, WANG J D, *et al.*. Integrated method of wavelet packet analysis and K-OPLS and its application in measurement of particle size distribution [J]. *CIESC Journal*, 2010, 61(6):1349-1356. (in Chinese)
- [12] BYLESJÖ M, RANTALAINEN M, NICHOLSON J K, *et al.*. K-OPLS package: kernel-based orthogonal projections to latent structures for prediction and interpretation in feature space [J]. *BMC Bioinformatics*, 2008, 9:106.
- [13] WESTAMAN E, WAHLUND L O, FOY C, *et al.*. Combining MRI and MRS to distinguish between Alzheimer's disease and healthy controls [J]. *Journal of Alzheimer's Disease*, 2012, 22(1):171-181.
- [14] MEHDI J H, HESHMATOLLAH E N, AKRAM K. Use of kernel orthogonal projection to latent structure in modeling of retention indices of pesticides[J]. *QSAR Comb.*, 2009, 28(11-12):1432-1441.

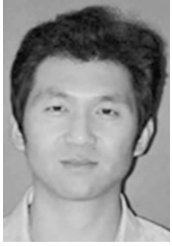
作者简介:



杨延荣(1976—),女,山西太谷人,硕士,讲师,2003年于山西农业大学获得硕士学位,主要从事农业测试技术方面的研究。E-mail: tjshyyr@sina.com



杨仁杰(1978—),男,山西运城人,博士研究生,讲师,2005年于南开大学获得硕士学位,主要从事食品安全检测方面的研究工作。E-mail: rjyang1978@163.com



张志勇(1979—),男,山西交城人,博士,讲师,2005年于山西农业大学获得硕士学位,2012年于天津大学获得博士学位,主要从事光谱应用方面的研究工作。E-mail: zzyzy1979@163.com



杨士春(1975—),男,辽宁朝阳人,博士,副教授,2005年于沈阳农业大学获得硕士学位,2013年于天津工业大学获得博士学位,主要从事膜蒸馏及燃料乙醇的研究。E-mail: scy_8882428@sina.com



董桂梅(1978—),女,天津人,博士,讲师,2001年、2007年和2011年于天津大学分别获得学士、硕士和博士学位,主要研究光电检测及自动化技术。Email: guimeidong@gmail.com

(本栏目编辑:曹 金)

(版权所有 未经许可 不得转载)