



王微娜,张炉,尹华全,咸嘉伟,荀拾虎,石林英,刘香,郭时印,唐忠海,范伟. 基于融合光谱的菜籽油氧化稳定性快速评价[J]. 中国农业大学学报,2025,30(04):81-95.

WANG Weina, ZHANG Lu, YIN Huaquan, XIAN Jiawei, XUN Shihu, SHI Linying, LIU Xiang, GUO Shiyin, TANG Zhonghai, FAN Wei. Rapid evaluation of the oxidative stability of rapeseed oil based on fusion spectroscopy[J]. *Journal of China Agricultural University*, 2025, 30(04): 81-95.

DOI: 10.11841/j.issn.1007-4333.2025.04.07

基于融合光谱的菜籽油氧化稳定性快速评价

王微娜^{1,2} 张炉^{1,2} 尹华全^{1,2} 咸嘉伟^{1,2} 荀拾虎^{1,2} 石林英^{1,2} 刘香^{1,2}
郭时印^{1,2} 唐忠海^{1,2} 范伟^{1,2*}

(1. 湖南农业大学 食品科学技术学院,长沙 410128;

2. 湖南省菜籽油营养健康与深度开发工程技术研究中心,长沙 410128)

摘要 为实现菜籽油氧化稳定性的实时在线监测,采用自主搭建的近红外-拉曼(NIR-Raman)光谱便携设备,结合光谱融合技术对菜籽油的氧化稳定性进行定量评估。采集不同氧化程度菜籽油样本的NIR和Raman光谱数据,通过8种预处理方法和3种特征变量选择法,利用数据层融合、特征层决策融合和多区块融合策略,建立偏最小二乘回归(PLSR)模型,以预测集决定系数(R_p^2)和预测均方根误差(RMSEP)评价模型精度。结果表明:1)以过氧化值(POV)为例,在NIR光谱中,SNV+MSC预处理方法表现最佳, R_p^2 为0.84,RMSEP为1.05;Raman光谱中,SNV预处理方法最优, R_p^2 为0.85,RMSEP为0.99;2)在光谱融合方案中,对比3种融合方式,多区块融合的序贯正交偏最小二乘(SO-PLS)方法表现最佳, R^2 达到0.978,RMSEP为0.392;3)采用SO-PLS融合NIR和Raman光谱对菜籽油氧化指标,丙二醛(MDA)、茴香胺值(AV)及共轭二烯值(CDV)进行预测, R^2 分别达到0.98、0.98和0.97,RMSEP分别为0.871、1.039和2.132。综上,本研究利用SO-PLS融合NIR和Raman光谱可对菜籽油氧化程度进行快捷无损的实时动态监测,为菜籽油加工过程的质量控制提供了技术支持。

关键词 光谱融合技术;近红外光谱;拉曼光谱;菜籽油;氧化稳定性

中图分类号 S65

文章编号 1007-4333(2025)04-0081-15

文献标志码 A

Rapid evaluation of the oxidative stability of rapeseed oil based on fusion spectroscopy

WANG Weina^{1,2}, ZHANG Lu^{1,2}, YIN Huaquan^{1,2}, XIAN Jiawei^{1,2}, XUN Shihu^{1,2},
SHI Linying^{1,2}, LIU Xiang^{1,2}, GUO Shiyin^{1,2}, TANG Zhonghai^{1,2}, FAN Wei^{1,2*}

(1. College of Food Science and Technology, Hunan Agricultural University, Changsha 410128, China;

2. Hunan Engineering Research Center for Nutrition, Health and Deep Development of Rapeseed Oil,
Changsha 410128, China)

Abstract To achieve the real-time online monitoring of rapeseed oil oxidative stability, a custom-built portable near-infrared and Raman spectroscopy (NIR-Raman) device combined with spectral fusion techniques was utilized to assess the oxidative stability of rapeseed oil quantitatively. The NIR and Raman spectral data were collected from rapeseed oil samples exhibiting varying degrees of oxidation. Eight preprocessing methods and three feature selection approaches were applied to construct partial least squares regression (PLSR) models using data-level, feature-level decision and multi-block fusion

收稿日期: 2024-06-05

基金项目: 国家自然科学基金项目(32360579);湖南省自然科学基金项目(2022JJ30295);湖南省教育厅优秀青年项目(20B286)

第一作者: 王微娜(ORCID:0009-0007-5657-0079),硕士研究生,E-mail:Weina_Wang1@163.com

通讯作者: 范伟(ORCID:0009-0002-2308-8466),讲师,博士,主要从事农产品加工智能检测研究,E-mail:weifan@hunau.edu.cn

strategies. The accuracy of the models was evaluated using the prediction set determination coefficient (R_p^2) and the prediction root mean square error (RMSEP). The results demonstrated that: 1) Taking peroxide value (POV) as an example, in the NIR spectrum, the SNV+MSC preprocessing method displayed the best performance with an R_p^2 of 0.84 and RMSEP of 1.05; In the Raman spectrum, the SNV preprocessing method was the most optimal with an R_p^2 of 0.85 and an RMSEP of 0.99; 2) Among the spectral fusion schemes, the sequential orthogonal partial least squares (SO-PLS) method with multi-block fusion outperformed the other two methods, achieving R^2 of 0.978 and RMSEP of 0.392; 3) The prediction of rapeseed oil oxidation indicators, including malondialdehyde (MDA), anisidine value (AV), and conjugated diene value (CDV), using SO-PLS integrated NIR and Raman spectroscopy, R^2 values reached 0.98, 0.98, and 0.97, respectively, and RMSEP values were 0.871, 1.039, and 2.132, respectively. In summary, this study applied the SO-PLS fusion of NIR and Raman spectra for rapid, non-destructive, real-time dynamic and realized the monitoring of the oxidation level of rapeseed oil. This study provided technical support for quality control in the processing of rapeseed oil.

Keywords spectral fusion technique; Near-infrared spectroscopy; Raman spectroscopy; canola oil; oxidative stability

菜籽油是我国第二大食用植物油,占植物油消费总量的35.16%^[1],其不饱和脂肪酸含量高于80%,并含有多种维生素和必需微量元素,广受消费者青睐^[2]。但是菜籽油在加工、储存及使用过程中易受环境因素如温度、光照和空气的影响,引发自氧化和酸败。这一过程中,脂肪酸氧化产生过氧化物等初级产物,随后不稳定的过氧化物通过复杂的自由基链式反应生成次级产物,包括醛、酮、醇和环氧化合物,这些物质不仅改变油品色泽、风味,还可能引起食用者不适。长期摄入这些氧化产物可能对心脑血管和肝脏健康造成损害。因此,对菜籽油的氧化稳定性进行精确量化评估,对于保障油脂品质和消费者健康至关重要^[3-4]。

目前,食用植物油的氧化稳定性评估集中于分析油脂氧化过程中的化学组成和物理特性变化,以及由此引起的感官品质退化^[5]。评估通常基于油脂氧化的关键生化指标,包括过氧化值(Peroxide value, POV)、丙二醛(Malondialdehyde, MDA)、茴香胺值(Anisidine value, AV)和共轭二烯值(Conjugated diolefine value, CDV)含量,这些指标通常采用化学滴定、高效液相色谱(HPLC)、气相色谱(GC)等高精度分析技术进行测定^[6-8]。尽管这些传统技术在精确度上表现出色,但均存在诸如前处理繁琐、检测周期长和化学试剂使用量大等局限性^[9]。对于电子舌和电子鼻等现代快速分析工具,在定性分析方面具有优势,而在定量分析方面优势并不显著,存在成本较高、数据处理复杂等缺陷。这些因素限制了它们在食用植物油氧化稳定性快

速、无损评估中的应用,表明当前技术尚未满足行业对于高效、经济的氧化稳定性评价方法的需求^[10]。

光谱技术在食品检测领域以其无损、环保和操作便捷性得到广泛应用。近红外光谱技术,基于分子振动从基态向激发态跃迁时产生的振动倍频和合频吸收,主要涉及含氢基团如C—H、N—H、O—H等,提供了物质化学组成的定性和定量分析的独特光谱特征^[11]。相对地,拉曼光谱技术侦测的是散射光与样品分子非弹性碰撞后频率的变化,这些变化反映了分子振动能级的光子频率,特别针对非极性官能团如C=C、C—C、S—S等,其拉曼谱带特征性强,能够揭示物质的结构和构象变化^[12]。然而,单一光谱技术在表征物质的物理化学特性时存在局限,不同化学结构的物质在各自的振动谱带中表现出不同的敏感度。例如,极性基团在近红外光谱中显示出较强的吸收,而非极性基团在拉曼光谱中则有更显著的信号^[13]。鉴于此,通过光谱数据融合技术,能够整合不同光谱的优势,弥补单一光谱技术的不足,从而获得更全面的物理化学信息,提高检测的准确性和可靠性^[14]。

光谱数据融合技术是光谱分析领域的关键创新,是连接不同光谱信息的桥梁。该技术能够整合来自不同平台的光谱数据,对同一样品批次进行综合分析,充分利用各光谱间的互补性和协同效应,以获得更为全面和科学的样品特征信息。这不仅增强了光谱技术在实际应用中的适用性和准确性,也有效克服了单一光谱信息的局限性^[15]。根据数

据特性和分析需求,融合策略可细分为低层融合(Low-level data fusion LLDF)、中层融合(Mid-level data fusion, MLDF)、高层融合(High-level data fusion, HLDF)以及多区块融合,正确选择融合策略对提升模型的泛化能力和降低过拟合风险至关重要^[16]。该技术已广泛应用于食品成分分析、物种鉴定、真伪鉴别以及产地追溯等领域^[17-18]。然而,现有文献在光谱数据融合技术的应用上存在一定的局限性。例如,An等^[19]采用集成近红外、中红外和拉曼光谱,对比3种数据融合技术,对馒头老化程度进行定量分析,结果表明HLDF在评估馒头的可溶性直链淀粉含量、结晶程度及硬度方面表现最为出色,其中对可溶性直链淀粉含量和结晶程度及硬度的 R^2 均达到0.9以上。Xu等^[20]利用近红外和拉曼光谱的数据融合技术鉴别鳕鱼真伪,并对比单一光谱分析和3种融合策略,结果表明HLDF为最优策略,实现了98%的准确率和92%的敏感度。尽管这2项研究突显了HLDF在食品成分分析和真伪鉴别中的显著优势,但该方法在处理过程中存在重要信息丢失问题,因此未能充分体现光谱数据间的互补性。

本研究拟采用光谱融合技术整合近红外光谱与拉曼光谱数据,系统比较单一光谱分析、低层数据融合(LLDF)、多种中层特征融合(MLDF)策略以及多区块融合方法的性能。通过构建菜籽油氧化稳定性指标的定量分析模型,包括过氧化值(POV)、丙二醛(MDA)、茴香胺值(AV)及共轭二烯值(CDV),实现对该食用油氧化稳定性的快速、无损定量评估,以期为油脂氧化稳定性的实时在线监测提供全面、高可靠性的技术手段,为相关领域的研究和实践提供理论基础。

1 材料与方法

1.1 试验材料及制备

本研究以甘蓝型油菜籽为试验材料,选取湖南省五大油菜籽主产区(衡阳、益阳、岳阳、常德、邵阳),共6个主要品种(沔油520、金湘油9号、中双11号、华油杂50、丰油730和常油杂83),总计26个样品。样品经过压榨与过滤工艺,精炼得到菜籽毛油,随后封装并标记以备后续试验使用。将50 mL的菜籽毛油样本置于棕色广口玻璃瓶内,采用烘箱加速氧化法(Schaal)^[21]进行氧化处理。分别在氧化

处理的第0、3、6、9、12、15天,分别取出5 mL氧化样品,进行封装,标记,并对每种油样在特定时间节点的样品进行理化性质检测和光谱数据采集。

1.2 试验试剂及设备

试剂: β -茴香胺、氯化亚铁、硫氰酸钾、三氯甲烷、甲醇、三氯乙酸、1,1,3,3-四氧乙基丙烷、异辛烷、冰醋酸、氢氧化钠、正己烷,均为分析纯,由国药集团化学试剂有限公司提供。

设备:榨油机,型号D02,东都宝电器科技有限公司;电热鼓风干燥箱,101A-3AB,北京永光明医疗仪器有限公司;近红外光谱仪,必达泰克光电科技(上海)有限公司;拉曼光谱仪,必达泰克光电科技(上海)有限公司;电子天平,ML204,上海梅特勒-托利多仪器有限公司;紫外分光光度计,UV204T,日本岛津仪器有限公司;酶标仪,型号1510,美国Thermo公司;水浴锅,HWS28,北京永光明医疗仪器有限公司。

1.3 指标测定

过氧化值的测定:参照GB/T 5009.37—2003《食用植物油卫生标准的分析方法》^[22]中第二法比色法进行测定。过氧化值是指样品中的过氧化物将二价铁离子氧化成三价铁离子,三价铁离子与硫氰酸盐反应生成橙红色硫氰酸铁配合物,在500 nm波长处测定的吸光度。准确吸取1 mL样品溶液置于10 mL比色管内,加0.05 mL氯化亚铁溶液,用三氯甲烷+甲醇(体积比7:3)混合溶液稀释至刻度线,摇匀。将反应溶液于500 nm处测定吸光度。按以下公式计算过氧化值:

$$X = \frac{c - c_0}{m \times \frac{V_2}{V_1} \times 55.84 \times 2}$$

式中: X 为样品中过氧化值,meq/kg; c 为标准曲线中测得样品中铁的质量, μg ; c_0 为标准曲线中测得零管铁的质量(不含样品的标准溶液中加入铁标准溶液时铁的含量), μg ; V_1 为样品稀释后总体积,mL; V_2 为样品测定时的取样体积,mL; m 为样品质量,g。

茴香胺值的测定:参照GB/T 24304—2009《动植物油脂茴香胺值测定》^[23]。茴香胺值是指 p -茴香胺溶液与样品反应在350 nm测得的吸光度的增加值,并扩大100倍后的数值。称取0.5~1 g样品,精确到1 mg,装入25 mL容量瓶中,预加热固体试样至其熔点以上,

但不超过熔点的10℃。用5~10 mL的异辛烷溶解,并用相同溶液稀释至刻度线,取5 mL溶液于具塞试管内,加入1 mL *p*-茴香胺试剂,盖上塞子并摇匀,静置8 min,取适量溶液在350 nm处测定吸光度。茴香胺值(AV)的计算公式为:

$$AV = \frac{100QV}{m} [1.2 \times (A_1 - A_2 - A_0)]$$

式中: V 为溶解试样的体积, mL; m 为样品质量, g; Q 为测定溶液中样品质量浓度, g/mL, 通常为0.01 g/mL; A_0 为未反应测试溶液吸光度; A_1 为反应溶液吸光度; A_2 为空白溶液吸光度。

共轭二烯值的测定: 参照GB/T 22500—2008《动植物油紫外吸光度的测定》^[24]。共轭二烯值是通过计算测得样品溶液的紫外吸光度值确定。称取样品0.05~0.25 g, 置于25 mL容量瓶中。在室温下, 用2,2,4-三甲基戊烷溶解样品, 再用相同溶剂稀释到刻度线, 摇匀。以溶剂作为空白, 使用分光光度计测定溶液在220~320 nm波长范围内的吸光度。紫外吸收度计算公式为:

$$E_{1\text{cm}(\lambda)}^{1\%} = \frac{A_{(\lambda)}}{w}$$

式中: $E_{1\text{cm}(\lambda)}^{1\%}$ 为紫外吸光度, 是以质量浓度为1 g/100 mL, 比色皿波长为 λ , 光程长度为10 mm时测得的吸光度; $A_{(\lambda)}$ 为波长 λ 下样品的吸光度; w 为测试溶液样品的质量浓度, g/L。

丙二醛浓度的测定: 参照王凯^[25]方法稍作修改, 取0.5 g样品置于试管中, 加入200 μ L 0.02 mol/L MDA溶液和500 μ L 10 mg/mL 三氯乙酸溶液, 95℃加热30 min。取下层反应液500 μ L于离心管中, 加入500 μ L三氯甲烷溶液后混合均匀。取上清液200 μ L至96孔板中处测定吸光度 A 。按以下公式计算丙二醛浓度(C_{MDA}):

$$C_{\text{MDA}} = \frac{(A_{532} - A_{600}) \times V_1}{\epsilon l V_2}$$

式中: A_{532} 为溶液在532 nm处的吸光度值; A_{600} 为溶液在600 nm处的吸光度值; V_1 为溶液总体积, mL; ϵ 为MDA溶液在532 nm处的吸光系数, 本研究取 1.56×10^5 L/(mol·cm); l 为光程长度, 通常为1 cm; V_2 为样品体积, mL。

1.4 光谱采集与分析

1.4.1 光谱采集

采用自主搭建的近红外-拉曼(NIR-Raman)光谱便携设备^[26]采集菜籽油样品的近红外(Near-

infrared, NIR)和拉曼(Raman)光谱数据, 该设备可在同温同湿及相同场景下采集, 有效解决采集环境及背景干扰导致光谱数据稳定性差和机械误差大等问题。采集条件为: NIR光谱采集范围为900~1700 nm, 分辨率 16 cm^{-1} , 积分时间100 μ s, 背景光谱扫描64次, 每个样平均采集5次, 共计有效光谱156条; Raman光谱的激发波长为785 nm, 激光功率300 mW, 光谱采集范围为0~3500 cm^{-1} , 积分时间10 s, 扫描时间3000 ms, 光谱平均次数为5次, 求平均值, 共计有效光谱156条。均在室温条件下采集。

1.4.2 光谱预处理及特征变量筛选

光谱信号在环境因素的干扰下易产生随机噪声、背景污染和基线漂移, 这些干扰因素会降低定量和定性分析模型的准确性, 并削弱其预测能力。因此, 实施光谱预处理是提高分析结果可靠性的关键步骤。常见的预处理技术包括一阶导数(First derivative, FD)、二阶导数(Second derivative, SD)、多元散射校正(Multidimensional scattering correction, MSC)、标准正态变量变换(Standard normal variate transformation, SNV)以及Savitzky-Golay平滑(SG)。在进行光谱预处理时, 必须综合考量样品特性、光谱数据来源及分析目标, 以选择最适合的预处理策略。本研究将对比分析上述5种预处理方法及其不同组合的效果, 以确定最佳的预处理方案, 从而提高光谱分析的准确性和预测性能。

特征变量筛选与数据降维是提升预测模型性能的关键。一方面精简模型, 能够提升其运行效率及增强其解释能力; 另一方面能够去除冗余或非线性特征有助于增强模型的预测精度和稳健性。在特征选择领域, 常用的技术包括相关系数分析、方差分析、序列投影算法(Successive projections algorithm, SPA)、无信息变量消除(Uninformative variables elimination, UVE)和竞争性自适应重加权采样(Competitive adaptive reweighted sampling, CARS)。在降维技术中, 主成分分析(Principal component analysis, PCA)、核主成分分析(Kernel principal component analysis, KPCA)、独立成分分析(Independent component analysis, ICA)和多维尺度分析(Multidimensional scaling)等方法也被广泛应用。根据具体的分析需求和样本特性, 选择恰当的特征选择与降维方法对于优化模型的预测性能

至关重要。本研究将对比KPCA、CARS和UVE筛选方法,旨在提高模型的预测精度。

1.4.3 光谱融合技术

光谱融合技术是将不同光谱数据整合到一起,获得物质完整信息结构,用于实现单一光谱优势互

补、增强样本数据特征变量的数量和质量,提高模型的适应性与解释性,并对样品进行定性定量分析^[15,27]。本研究将对比3种融合方式,即低层融合、不同策略中层融合和多区块融合(图1),最终确定最佳融合策略^[28-29]。

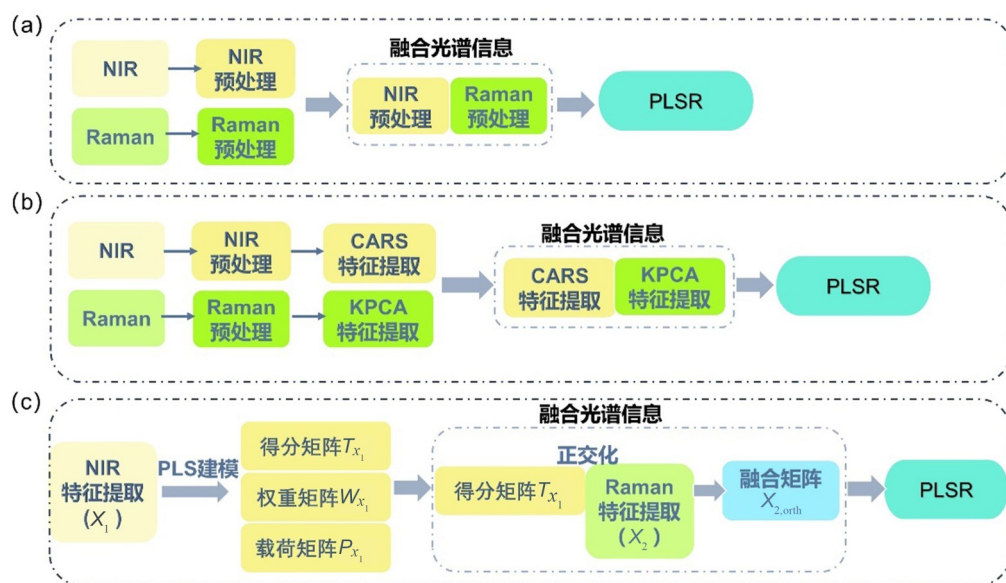


图1 数据层融合(a)、特征层融合(b)和SO-PLS融合(c)3种融合策略示意

Fig.1 Schematic illustrations of three fusion strategies: (a) Data-level fusion, (b) Feature-level fusion, and (c) SO-PLS fusion

低层融合又称数据层融合,是将不同光谱仪器的原始数据或经预处理后的数据按照一定的顺序串联,融合成新的数据集作为变量进行处理^[30]。通常根据分析体系的需求对原始光谱选择合适的预处理方法消除噪音及背景干扰是低层融合的关键。低层融合的方法可分为多数据耦合和直接融合建模。耦合融合法应用广泛,即将不同来源光谱首尾相连,组成新矩阵,其优点是易于操作,且新矩阵保留了样本完整的信息结构,具有较强适用性。然而也存在信息冗余较多,模型预测耗时长等不足^[31]。

中层融合又称为特征层融合,在低层融合基础上将各光谱数据进行特征变量选择后按照顺序串联成新矩阵,用于减少数据冗余或重叠信息,加快预测或分类模型的准确性和解释性^[24]。此时,选择合适的特征变量筛选方法是特征层融合的关键。特征层融合因特征变量选择方式的不同可分为3种策略,即手动选择、自动选择、降维处理,其中自动选择和降维为处理应用较为广泛。

多区块融合方法分为并联式和串联式2种校正

模式,分别为多块偏最小二乘方法(Multiblock PLS)和序贯正交偏最小二乘(Sequential orthogonal partial least squares, SO-PLS)^[32-33]。Multiblock PLS采用并联式的校正模式,将每个模块的矩阵看作单独的块建立PLS,然后将块与块所得结果进行整合。SO-PLS是串联式的校正模式,是将Multiblock PLS中的每块按顺序将特征信息提取出来,并与另一块正交化,以获得更高提取信息的能力^[34]。由于SO-PLS不受变量数量及变量维度的限制,并且不依赖于区块,能够在建立模型的同时为每一区块输入潜在变量,因此本研究采用SO-PLS^[35]。

将近红外光谱矩阵定义为区块 X_1 ,拉曼光谱矩阵为区块 X_2 。

1)采用标准PLS算法,建立 X_1 与含量 y 的回归模型,得到 X_1 的得分矩阵 T_{X_1} , T_{X_1} 的权重矩阵 W_{X_1} , X_1 的载荷矩阵 P_{X_1} , y 的载荷矩阵 Q_{X_1} , y 的残差阵 y_R 为:

$$y_R = y - T_{X_1} Q_{X_1}^T \quad (1)$$

2)将 T_{X_1} 与块 X_2 进行正交化得到正交后的光谱

阵 $X_{2,orth}$:

$$X_{2,orth} = X_2 - T_{X_1}(T_{X_1}^T T_{X_1})^{-1} T_{X_1}^T X_2 \tag{2}$$

3)采用标准 PLS 算法,建立 $X_{2,orth}$ 与浓度残差 y_R 的回归模型,得到 $X_{2,orth}$ 的得分矩阵 $T_{X_{2,orth}}$, $X_{2,orth}$ 的权重矩阵 $W_{X_{2,orth}}$, $X_{2,orth}$ 的载荷矩阵 $P_{X_{2,orth}}$, y_R 的载荷矩阵 $Q_{X_{2,orth}}$ 。

4)含量预测值 y_{pre} 为:

$$y_{pre} = T_{X_1} Q_{X_1}^T + T_{X_{2,orth}} Q_{X_{2,orth}}^T \tag{3}$$

1.4.4 模型建立及验证

在建立预测模型之前,采用 Kennard-Stone 算法以 7:3 的比例将样本划分为训练集和测试集。利用偏最小二乘 (Partial least squares regression, PLSR) 建立菜籽油氧化指标定量模型,PLSR 诠释了多元线性回归、典型相关性分析和主成分分析相结合的优势,同时也是光谱中多元校正分析中应用最广泛的建模方法^[36]。

利用决定系数 (R^2)、校正集决定系数 (R_c^2)、预测集决定系数 (R_p^2)、校正均方根误差 (RMSEC)、预测均方根误差 (RMSEP)、平均绝对误差 (MAE) 评价模型预测效果。

1.5 数据分析

所有菜籽油氧化指标均重复测定 3 次,测定结果以平均值表示。所有数据采用 Matlab R2021b 进行预处理和建模分析。

2 结果与讨论

2.1 菜籽油氧化分析

菜籽油中含有较多不饱和脂肪酸,在加工贮藏过程中不饱和脂肪酸易受温湿度的影响而发生自氧化反应,因此导致菜籽油品质逐渐降低。在油脂自氧化初期,油脂氧化产生过氧化产物或氢过氧化产物,通过过氧化值 (POV) 可以判断油脂的初级氧化程度^[37]。随后氢过氧化物不稳定发生水解产生二级氧化产物,包括含有羰基、酮基的游离脂肪酸、甘油三酯及其聚合物和共轭二烯值 (CDV) 等^[20],这些有害产物进一步分解,并累积形成有害气体,导致菜籽油产生酸败味。

菜籽油经 Schaal 加速氧化法处理后,发生自氧化反应,在 0~15 d 通过监测 POV、AV、MDA 和 CDV 的变化判断菜籽油氧化程度 (表 1)。在自氧化初始,菜籽油的 POV 为 3.062 meq/kg,第 15 天时,POV 急剧上升至 13.770 meq/kg,增长约 4.5 倍。其中在第 9~15 天氧化速率显著加快,说明不饱和脂肪酸迅速分解,达到自氧化反应中期。此时,AV、MDA 和 CDV 均呈现急速上升趋势,分别达到 66.500、27.910、32.638 nmol/mL,均超过正常范围,这是由于不饱和脂肪酸分解形成醛类、酮类及烯炔类等物质,并不断累积,导致油脂品质急剧下降及酸败味的产生。

表 1 菜籽油氧化过程中过氧化值、共轭二烯值、茴香胺值、丙二醛浓度的变化
Table 1 Variations in the peroxide value, anisidine value, and contents of conjugated dienes and malondialdehyde during the oxidation process of rapeseed oil

指标 Indicator	指标类别 Indicator category	第 0 天 Day 0	第 3 天 Day 3	第 6 天 Day 6	第 9 天 Day 9	第 12 天 Day 12	第 15 天 Day 15
过氧化值/ (meq/kg) POV	平均值	3.062	3.741	3.709	4.540	7.369	8.645
	最大值	3.063	4.042	4.382	5.903	9.795	13.770
	最小值	3.061	3.431	2.925	3.369	5.646	5.602
共轭二烯值 CDV	平均值	17.677	24.040	25.813	25.959	34.001	46.889
	最大值	18.000	60.200	60.200	36.879	49.816	66.500
	最小值	17.510	20.100	19.831	18.138	17.585	22.300
茴香胺值 AV	平均值	1.510	2.822	7.184	7.963	13.982	18.207
	最大值	1.870	3.000	10.673	12.692	21.075	27.910
	最小值	1.260	1.270	2.200	2.670	4.118	4.954
丙二醛浓度/ (nmol/mL) MDA	平均值	0.313	3.463	6.420	7.196	9.832	15.871
	最大值	0.314	7.349	11.238	11.900	16.780	32.638
	最小值	0.312	0.584	1.157	1.540	1.879	1.900

2.2 光谱分析

不同氧化阶段菜籽油的近红外(NIR)和拉曼(Raman)光谱见图2。在油脂氧化监测中,NIR和Raman光谱的特征峰存在显著差异。NIR光谱的主要特征峰集中在1 140~1 210 nm和1 370~1 540 nm波长范围内。其中,1 166和1 207 nm处的特征表示酯基C—O键的第二泛音伸缩振动;1 390 nm处的特征峰表示—CH₂基团的弯曲振动;1 403 nm和1 413 nm处的吸收峰分别由不饱和脂肪酸中O—H键的伸缩振动和顺式二取代烯烃的—CH键摇摆振动引起;1 533 nm处的吸收峰则与

C=C骨架的振动相关,这是油脂在二级氧化过程中生成芳香物质的信号。

Raman光谱则在800~1 800 cm⁻¹和2 800~3 100 cm⁻¹的波长范围内展示了物质的化学结构特征。1 076 cm⁻¹和868 cm⁻¹处的特征峰分别代表亚甲基C—C键的伸缩振动;1 654 cm⁻¹和1 265 cm⁻¹处的特征峰代表烯烃中C=C键的伸缩振动和=CH基团的剪切振动;1 437 cm⁻¹和1 300 cm⁻¹处的特征峰反应了—CH₂基团的C—H键剪式振动和弯曲振动;3 009 cm⁻¹和2 850 cm⁻¹处的特征峰则代表C—H键的对称伸缩振动和反对称伸缩振动。

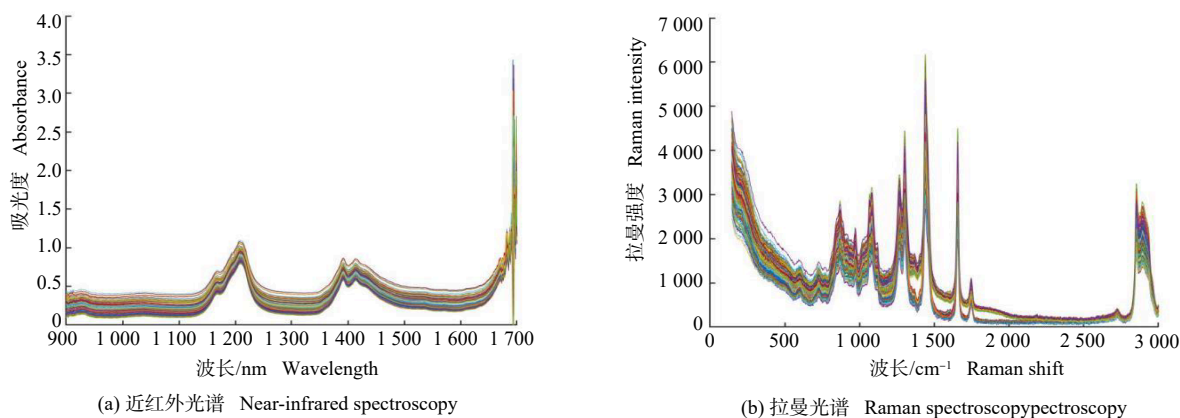


图2 菜籽油近红外光谱和拉曼光谱原始光谱图

Fig.2 Near-infrared spectroscopy and Raman spectroscopy original plots of rapeseed oil

2.3 光谱预处理结果分析

在近红外(NIR)和拉曼(Raman)光谱分析中,环境因素易导致基线漂移和产生无关噪声,影响光谱数据的准确性,因此预处理在光谱分析中是至关重要的。本研究采用SG、SNV、MSC、FD和SD,以及组合方法,包括SNV+MSC、SG+FD和SG+SD,共8种预处理方法,以增强模型的鲁棒性。以POV指标为例,筛选最佳预处理方法,结果见表2。

NIR和Raman光谱经预处理后模型准确性均有所提高。其中,SNV+MSC为NIR光谱的最佳预处理方法,其 R_c^2 最大为0.87, R_p^2 为0.84, RMSEC和RMSEP分别为0.93和1.05。而在Raman光谱分析中,单一的SNV预处理方法效果最佳, R_c^2 和 R_p^2 分别为0.89和0.85, RMSEC和RMSEP分别为0.89和0.99。然而,当采用SG+SD的组合预处理方法时,模型的 R_c^2 和 R_p^2 值降低,是由于部分关键信息被错误地剔除,从而削弱了模

型的预测能力。

2.4 光谱波长变量选择

变量信息的复杂程度会影响模型预测结果的可靠性,冗余信息过多,模型运行速度就越慢;变量信息过少,则会遗漏关键信息,减弱模型精度^[38-39]。因此,本研究采用竞争性自适应重加权采样(CARS)和无信息变量消除(UVE)算法来提取特征光谱提升模型的预测精度。CARS是一种集成蒙特卡洛抽样和PLS回归模型的变量选择技术,该技术采用自适应重加权和衰减函数去除PLS模型中权重较小的波长,并选择RMSECV对应子集中最低的变量作为最终提取的特征波长。使用CARS方法筛选变量时设置采样次数为100次,交叉验证组数为10组,CARS提取NIR和Raman光谱特征波长筛选过程及结果见图3。可以看出,CARS提取NIR光谱特征波长过程中(图3(a)),在第1~51次采样时,无关信息变量逐渐被剔除,第51次采样时

表2 光谱预处理方法对模型性能的影响

Table 2 Effects of spectral pretreatment methods on model performance

光谱技术 Spectral type	预处理 Pretreatment	主成分分数 Principal component score	训练集 Training		预测集 Prediction	
			决定系数 R_c^2	均方根误差 RMSEC	决定系数 R_p^2	均方根误差 RMSEP
近红外光谱 Near-infrared spectroscopy	原始	26	0.80	1.11	0.71	1.39
	Savitzky-Golay 平滑	28	0.86	0.96	0.79	1.09
	标准正态变量变换	27	0.80	1.08	0.77	1.36
	多元散射校正	27	0.82	1.08	0.77	1.22
	一阶导数	29	0.85	0.99	0.73	1.25
	二阶导数	29	0.83	1.04	0.75	1.25
	标准正态变量变换 + 多元散射校正	27	0.87	0.93	0.84	1.05
	Savitzky-Golay 平滑 + 一阶导数	29	0.86	0.94	0.80	1.15
拉曼光谱 Raman spectroscopy	Savitzky-Golay 平滑 + 二阶导数	40	0.82	1.06	0.75	1.43
	原始	9	0.84	0.99	0.75	0.97
	Savitzky-Golay 平滑	10	0.85	0.91	0.78	1.57
	标准正态变量变换	9	0.89	0.86	0.85	0.99
	多元散射校正	8	0.84	1.03	0.79	1.09
	一阶导数	7	0.89	0.85	0.74	1.18
	二阶导数	6	0.85	0.99	0.72	1.29
	标准正态变量变换 + 多元散射校正	8	0.84	0.97	0.81	1.30
	Savitzky-Golay 平滑 + 一阶导数	6	0.87	0.91	0.81	1.11
	Savitzky-Golay 平滑 + 二阶导数	5	0.83	1.01	0.73	1.21

RMSECV 降到最低,同时也对应了回归系数路径变化曲线的星垂线。因此在第 51 次蒙特卡洛采样后选择的变量作为特征变量,共包含 27 个特征变量(图 3(b))。同理,CARS 提取 Raman 光谱特征波长过程中(图 3(c)),在第 56 次蒙特卡洛采样后选择的变量作为特征波长,共包含 67 个特征变量(图 3(d))。

UVE 是一种添加与自身变量数相同的随机噪

音到光谱矩阵中,进行统计并逐一剔除的方法,将回归系数矩阵的平均值与标准偏差的比值作为变量的稳定性,超过稳定性阈值的变量作为模型的特征变量。使用 UVE 算法时,设定采样次数为 500 次,UVE 的 NIR 和 Raman 光谱特征波长筛选过程及结果见图 4。可以看出,UVE 提取 NIR 光谱特征变量共计 37 个,提取 Raman 光谱特征变量共计 262 个。

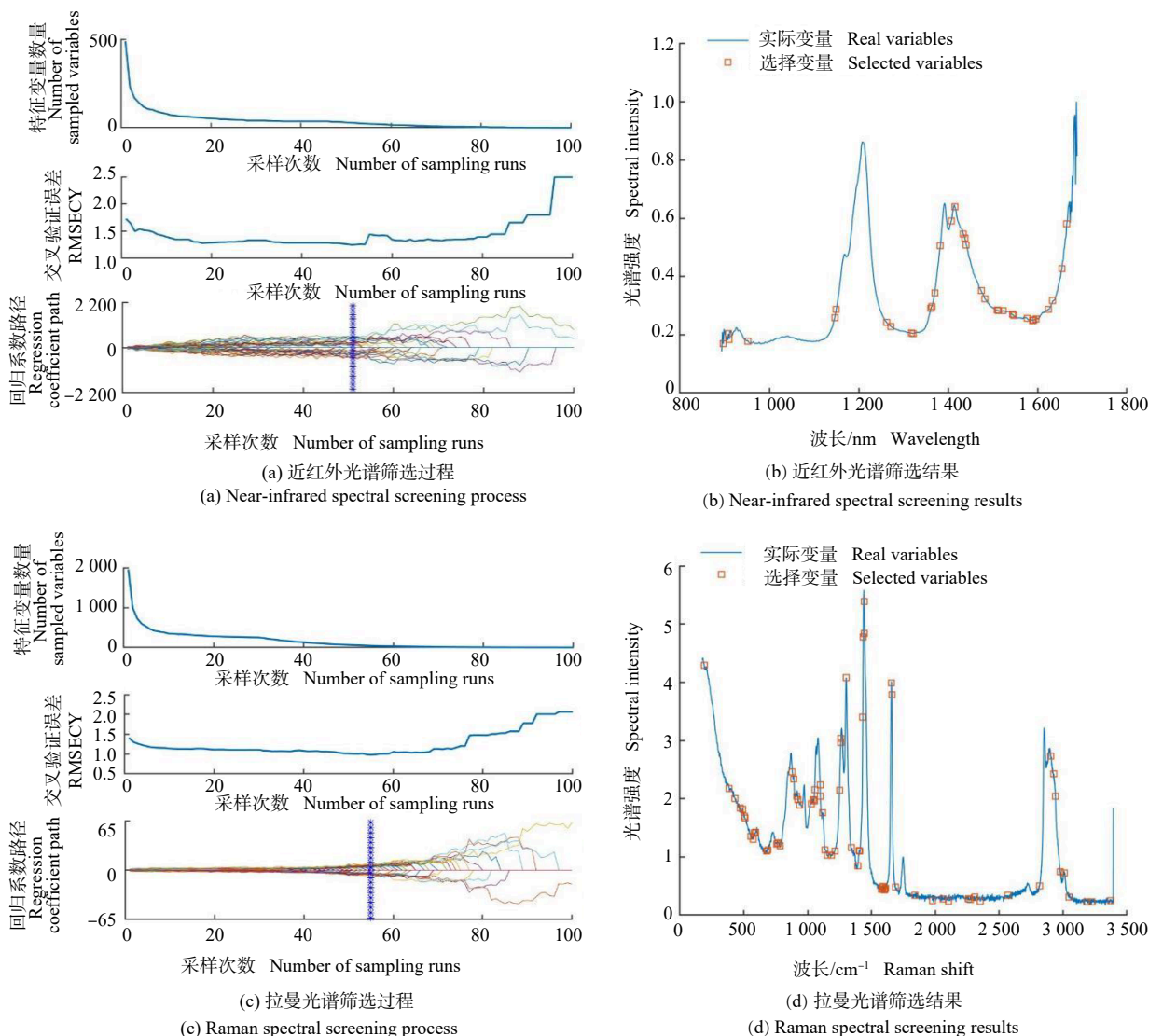


图3 基于CARS的近红外光谱和拉曼光谱的波段筛选过程和结果

Fig.3 Process and results of wavelength selection for Near-infrared and Raman spectroscopy based on the Competitive Adaptive Reweighted Sampling (CARS)

2.5 融合技术分析

2.5.1 数据层融合分析

数据层融合将近红外(NIR)和拉曼(Raman)光谱经最佳预处理后光谱矩阵进行串联,光谱信息叠加后获得样品的完整身份信息。融合矩阵的行数与样本数量相同,列数与各光谱变量的列数相同。本研究以过氧化值(POV)为例,建立PLSR模型评估数据层融合与单一光谱模型的预测性能,结果见表3。数据层融合模型的 R_c^2 为0.94, R_p^2 为0.84。与单一光谱模型相比,数据层融合模型的 R_c^2 有所提升,RMSEC降至0.54,表明模型稳定性增强。然而,单一Raman光谱模型的预测性能优于数据层融

合模型,是由于数据融合后导致数据量增加,信息冗余过多,从而影响模型的精度。

2.5.2 特征层融合分析

特征层融合在数据层融合的基础上进一步利用特征变量筛选优化输入变量。在特征层融合过程中,根据不同光谱选择合适的特征变量方法是特征层融合的关键点。本研究比较3种特征融合策略对特征融合过程中模型精度的影响。第一种策略采用核主成分分析(KPCA)对NIR和Raman光谱进行降维处理,利用核主成分的贡献率筛选关键特征变量。在KPCA处理的NIR光谱中(图5(a)),核主因子数达到9时,贡献率超过95%;KPCA处

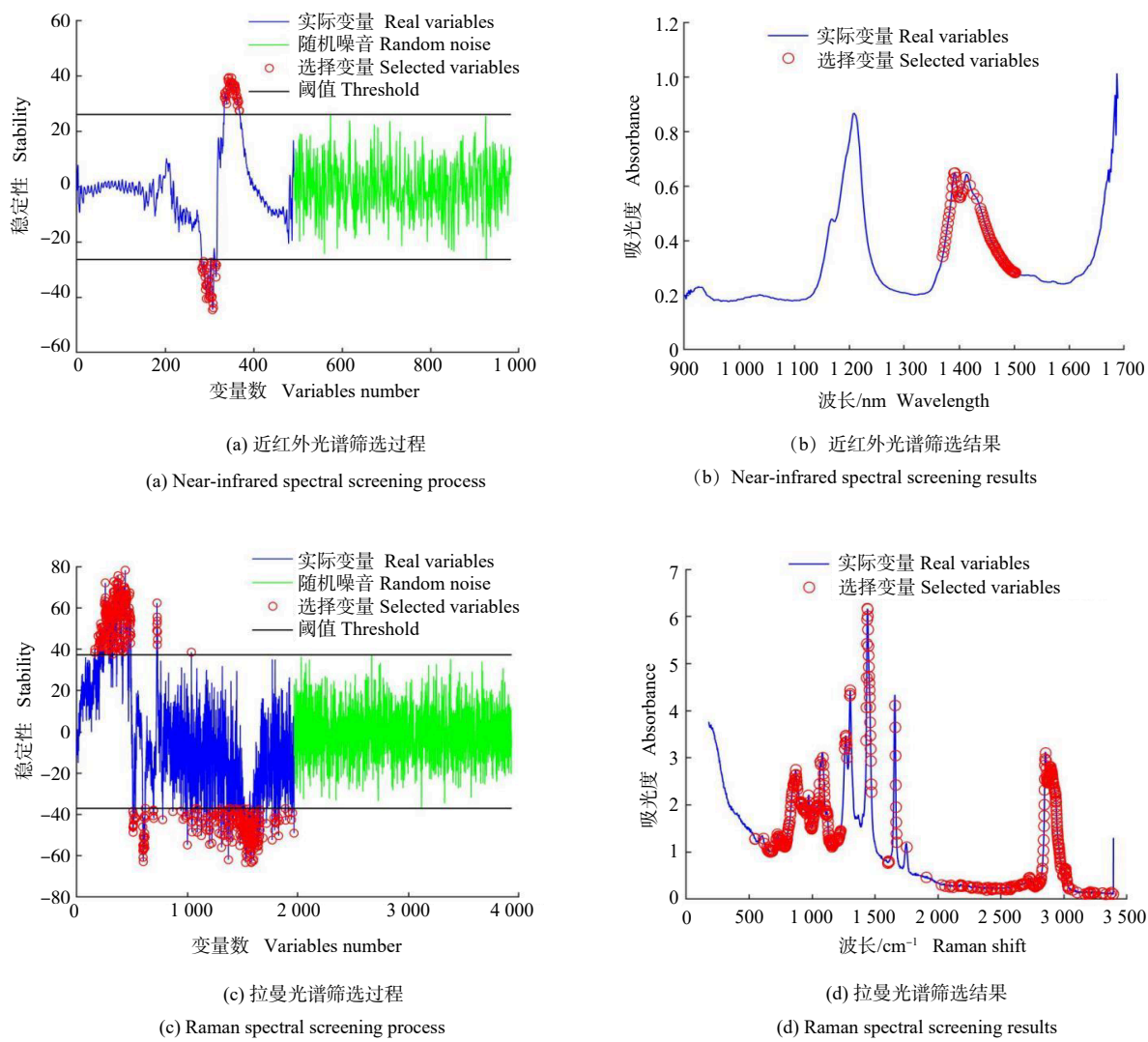


图4 基于UVE的近红外光谱和拉曼光谱波段筛选过程及筛选结果

Fig.4 The process and results of wavelength selection for Near-infrared and Raman spectroscopy based on Uninformative Variable Elimination (UVE)

表3 基于单一光谱和数据层融合的PLSR模型比较

Table 3 Comparison of PLSR models based on single spectrum and data layer fusion

光谱技术 Spectral type	波段数量 Number of bands	主成分分数 Score of principal component	训练集 Training		预测集 Prediction	
			决定系数 R_c^2	均方根误差 RMSEC	决定系数 R_p^2	均方根误差 RMSEP
近红外光谱 Near-infrared spectroscopy	512	27	0.87	0.93	0.84	1.05
拉曼光谱 Raman spectroscopy	2 048	9	0.89	0.86	0.85	0.99
近红外-拉曼光谱 NIR-Raman spectroscopy	2 560	26	0.94	0.54	0.84	1.02

理的 Raman 光谱(图 5(b)),核主因子数为 10 时,贡献率接近 100%。故选取 NIR 光谱中的前 50 个核主成分与 Raman 光谱中的前 50 个主成分首位连接形成新的数据矩阵,用于后续建立模型。第二种策略将 NIR 和 Raman 光谱分别采用 CARS 和

UVE 2 种特征变量筛选后进行融合,比较 2 种特征变量筛选方法融合后模型的预测精度。第三种策略在 CARS 和 UVE 方法中选择 NIR 和 Raman 光谱最佳筛选方法进行并联融合,并建立 PLSR 评估模型精度。

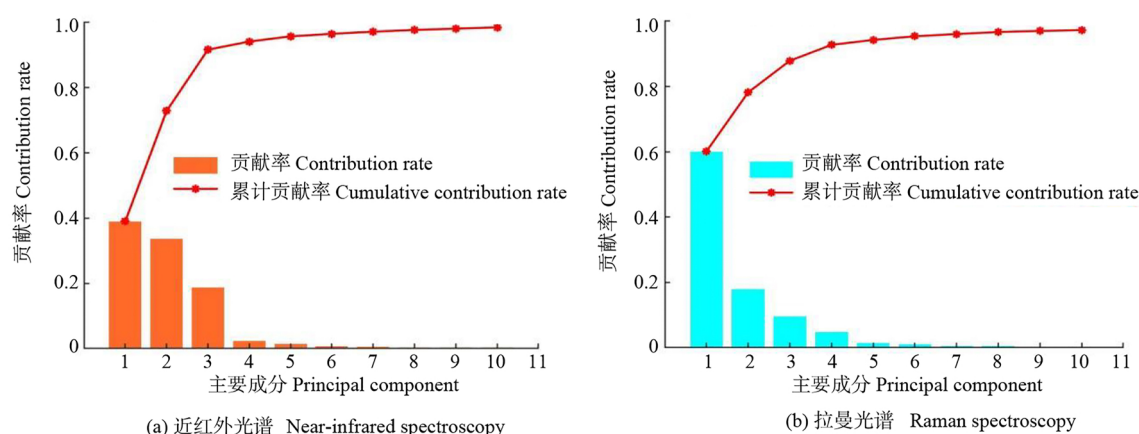


图5 近红外光谱和拉曼光谱的 KPCA 主成分贡献率

Fig.5 KPCA principal component contribution rate change plots for Near-infrared and Raman spectroscopy

对比 3 种特征融合策略的结果(表 4)表明, UVE-NIR 结合 CARS-Raman 是 NIR 和 Raman 光谱的最佳融合策略,该策略 R_c^2 均达到最大为 0.96,

R_p^2 最高达到了 0.94,同时 RMSEP 最小,为 0.61。因此,选择恰当的特征变量筛选方法能够有效提升特征层融合模型的预测精度。

表4 基于特征层融合的不同方法的 PLSR 模型比较

Table 4 Comparison of PLSR models based on different methods of feature layer fusion

光谱技术 Spectral type	方法 Method	波段数量 Number of bands	主成分分数 Score of principal component	训练集 Training		预测集 Prediction	
				决定系数 R_c^2	均方根误差 RMSEC	决定系数 R_p^2	均方根误差 RMSEP
近红外光谱 Near-infrared spectroscopy	自适应重加权采样	27	10	0.80	1.14	0.75	1.31
	无信息变量消除	37	20	0.83	1.06	0.81	1.14
拉曼光谱 Raman spectroscopy	自适应重加权采样	67	6	0.94	0.66	0.89	0.78
	无信息变量消除	262	10	0.91	0.75	0.88	0.93
近红外-拉曼光谱 NIR-Raman spectroscopy	核主成分分析	100	20	0.87	0.93	0.85	1.03
	自适应重加权采样	94	10	0.97	0.46	0.91	0.70
	无信息变量消除	299	17	0.97	0.42	0.84	1.26
	无信息变量消除- 近红外+自适应重 加权采样-拉曼	104	10	0.96	0.51	0.94	0.61

2.5.3 多块融合分析

多区块融合中序贯正交偏最小二乘(SO-PLS)通过顺序正交化的方式,可以有效处理和解释多块数据中的复杂关系。本研究利用SO-PLS对NIR和Raman光谱每个区块进行优化选择和排序,以降低模型误差。以过氧化值(POV)为例,在单一光谱的PLSR模型中,确定NIR光谱的最佳主

成分分数为20,Raman光谱为10,建立PLS模型后对其真实值与预测值进行比较(图6(a)),其中MAE为1.685%,表明具有较高的预测性能。同时对预测结果进行回归分析(图6(b)),结果表示 R^2 达到0.978, RMSE降低至0.392,与传统融合技术相比,SO-PLS对POV的预测能力具有显著优势。

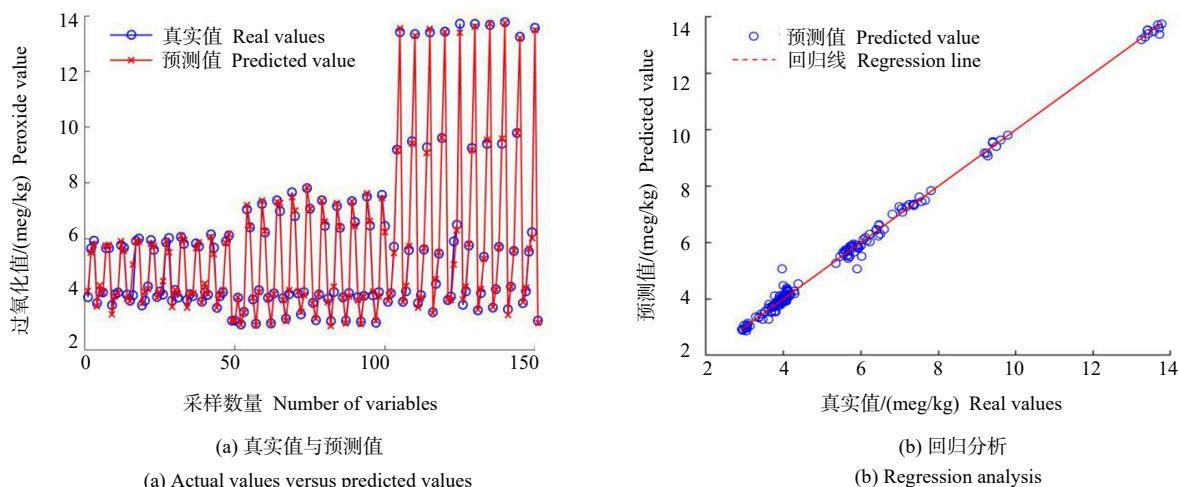


图6 基于SO-PLS的菜籽油过氧化值真实值与预测值及回归分析结果

Fig.6 Results of the regression analysis and the comparison between the actual and predicted peroxide values of rapeseed oil using SO-PLS

鉴于此,利用SO-PLS融合技术对其他3个氧化指标进行预测结果见图7。对茴香胺值的 R^2 达到0.98, RMSE为1.039;对共轭二烯值的 R^2 达到0.97, RMSE为2.132;丙二醛浓度的 R^2 达到0.98, RMSE为0.871。综合分析表明,SO-PLS融合模型在预测菜籽油的过氧化值、丙二醛、茴香胺值及共轭二烯值关键氧化指标方面展现了卓越的性能,其 R^2 均在0.97以上,预测均方根误差(RMSEP)相对较低,显示出较低层融合和中层融合更高的准确性和可靠性。

3 结论

本研究采用自主搭建的近红外(NIR)和拉曼(Raman)光谱便携式设备,并引入光谱数据融合策略,构建了综合性评估菜籽油氧化稳定性的定量模型。通过探索NIR和Raman光谱的独特优势与互补性,采用数据层融合、特征层融合以及多区块融合策略,建立PLSR预测模型,定量分析菜籽油4个氧化指标,包括过氧化值、丙二醛浓度、茴香胺值和

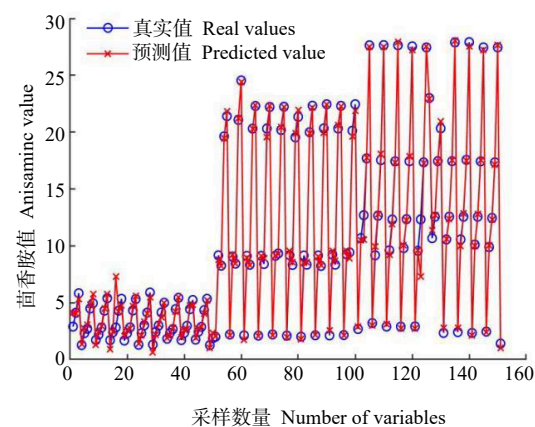
共轭二烯值。主要研究结论如下:

在单一光谱建模和数据层融合分析中,SNV+MSC为NIR光谱的最佳预处理方法,其 R_p^2 为0.84, RMSEC和RMSEP分别达到0.93和1.05。在Raman光谱中,SNV为最佳预处理, R_p^2 为0.85, RMSEP为0.99。数据层融合后,尽管信息量增加,但存在较多冗余信息,模型预测精度与单一光谱相比提升有限, R_p^2 为0.84, RMSEP为1.02。

在特征层融合分析中,比较3种融合策略,其中UVE-NIR与CARS-Raman的组合表现最佳, R_p^2 为0.94, RMSEP降至0.61。

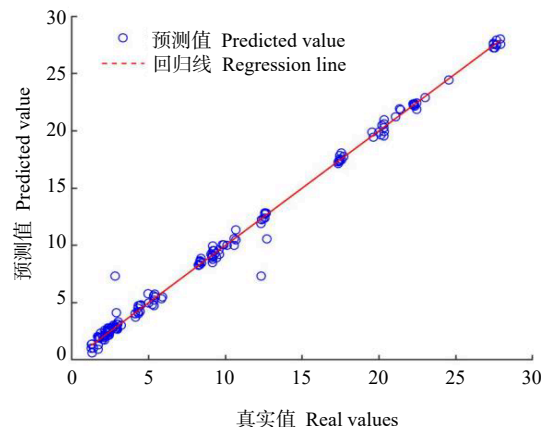
多区块融合中,采用SO-PLS融合法准确率显著提高, R^2 达到0.978, RMSE降至0.392。确定最佳融合策略后,对菜籽油氧化指标,即丙二醛浓度、茴香胺值和共轭二烯值进行分析, R^2 分别为0.98、0.98、0.97, RMSEP分别为0.871、1.039、2.132。

本研究结果表明,光谱融合技术能够使NIR和Raman光谱的优势相结合,实现对菜籽油氧化稳定



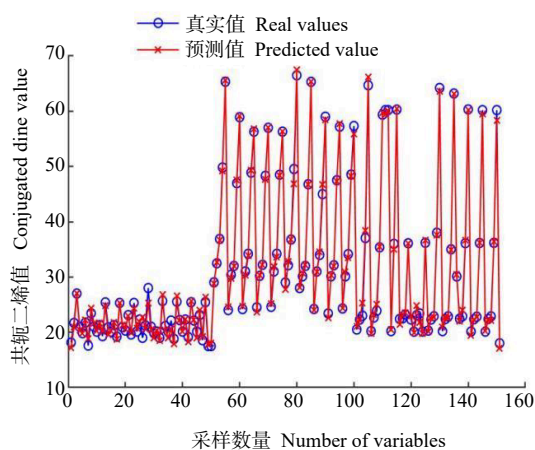
(a) 茴香胺值的真实值与预测值

(a) Actual values versus predicted values of anisaminc value



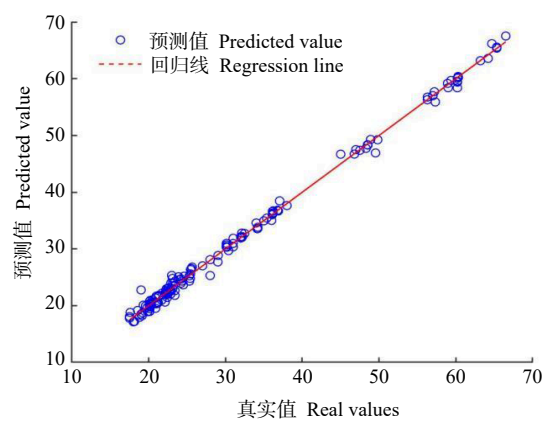
(b) 茴香胺值的回归分析

(b) Regression analysis of anisaminc value



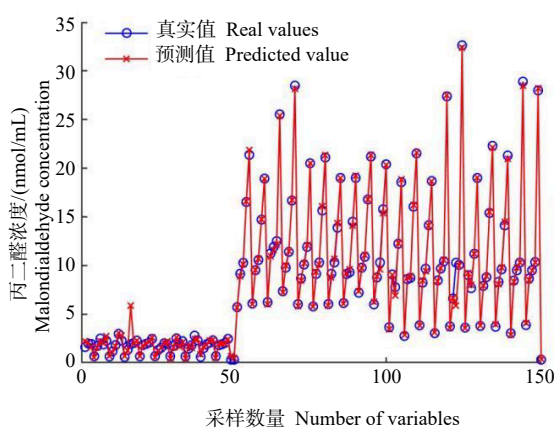
(c) 共轭二烯值的真实值与预测值

(c) Actual values versus predicted values of conjugated diene value



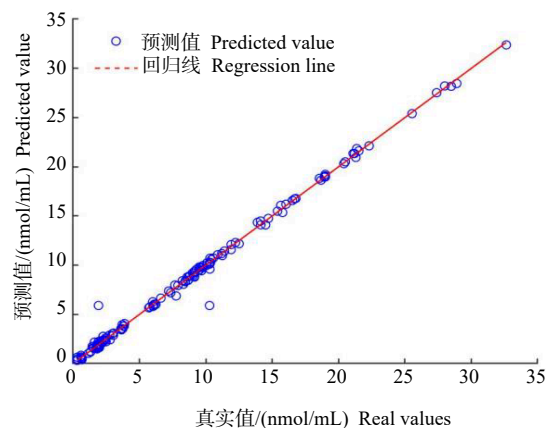
(d) 共轭二烯值的回归分析

(d) Regression analysis of conjugated diene value



(e) 丙二醛浓度的真实值与预测值

(e) Actual values versus predicted values of malondialdehyde concentration



(f) 丙二醛浓度的回归分析

(f) Regression analysis of malondialdehyde concentration

图7 基于SO-PLS融合方法的菜籽油氧化稳定性指标真实值与预测值及回归分析结果

Fig.7 Regression analysis results of the true and predicted values of rapeseed oil oxidation stability indices based on the SO-PLS fusion method

性的高效评估。融合光谱将菜籽油的物理化学信息有效融合获得完整信息,同时增强了模型的解释力和适用性。这一成果对菜籽油氧化稳定性的实时监测提供一种创新的分析方法。

参考文献 References

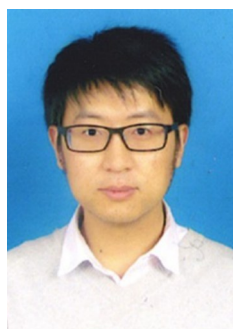
- [1] 常佳丽. 成都市消费者小榨浓香菜籽油消费行为影响因素研究[D]. 成都: 西南财经大学, 2019
Chang J L. Research on influencing factors of consumer's consumption behavior for conventional processed rapeseed oil in chengdu[D]. Chendu: Southwestern University of Finance and Economics, 2019 (in Chinese)
- [2] Cui Y, Hao P, Liu B, Meng X. Effect of traditional Chinese cooking methods on fatty acid profiles of vegetable oils. *Food Chemistry*, 233: 77-84
- [3] Shahidi F, Zhong Y. Lipid oxidation and improving the oxidative stability [J]. *Chemical Society Reviews*, 2010, 39(11): 4067-4079
- [4] Guéraud F, Atalay M, Bresgen N, Cipak A, Eckl P M, Huc L, Jouanin I, Siems W, Uchida K. Chemistry and biochemistry of lipid peroxidation products[J]. *Free Radical Research*, 2010, 44(10): 1098-1124
- [5] 王亚萍, 姚小华, 曹永庆, 常君, 任华东, 张成才, 王开良. 几种油料植物油脂的品质及氧化稳定性研究[J/OL]. 中国油脂: 1-14. 2024-07-08. <https://doi.org/10.19902/j.cnki.zgyz.1003-7969.240054>
Wang Y P, Yao X H, Cao Y Q, Chang J, Ren H D, Zhang C C, Wang K L. Study on the quality and oxidation stability of the oils from several oil plants[J/OL]. *China oil and fats*: 1-14. 2024-07-08. <https://doi.org/10.19902/j.cnki.zgyz.1003-7969.240054> (in Chinese)
- [6] Zhang N, Li Y L, Wen S S, Sun Y W, Chen J, Gao Y, Sagymbek A, Yu X Z. Analytical methods for determining the peroxide value of edible oils: A mini-review[J]. *Food Chemistry*, 2021, 358: 129834
- [7] Hori K, Koh F H, Tsumura K. A metabolomics approach using LC TOF-MS to evaluate oxidation levels of edible oils [J]. *Food Analytical Methods*, 2019, 12(8): 1799-1804
- [8] Vandemoortele A, Heynderickx P M, Leloup L, De Meulenaer B. Kinetic modeling of malondialdehyde reactivity in oil to simulate actual malondialdehyde formation upon lipid oxidation [J]. *Food Research International*, 2021, 140: 110063
- [9] Li J W, Sun X Y, Liu Y F. Analysis and detection of edible oil oxidation [J]. *Lipid Technology*, 2016, 28(8-9): 145-148
- [10] Hussain N, Sun D W, Pu H B. Classical and emerging non-destructive technologies for safety and quality evaluation of cereals: A review of recent applications[J]. *Trends in Food Science & Technology*, 2019, 91: 598-608
- [11] Zareef M, Chen Q S, Hassan M M, Arslan M, Hashim M M, Ahmad W, Kutsanedzie F Y H, Agyekum A A. An overview on the applications of typical non-linear algorithms coupled with NIR spectroscopy in food analysis[J]. *Food Engineering Reviews*, 2020, 12(2): 173-190
- [12] Chen J L, Lin H, Cao L M, Sui J X, Wang L, Fang X, Wang K Q. On-site detection of chloramphenicol in fish using SERS-based magnetic aptasensor coupled with a handheld Raman spectrometer [J]. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2023, 303: 123211
- [13] 郭佳, 李开开. 红外与拉曼光谱技术对食用油掺伪检测研究进展[J/OL]. 中国粮油学报, 1-19. <https://doi.org/10.20048/j.cnki.issn.1003-0174.2000784>
- [14] Wang X, Esquerre C, Downey G, Henihan L, O' Callaghan D, O'Donnell C. Development of chemometric models using Vis-NIR and Raman spectral data fusion for assessment of infant formula storage temperature and time [J]. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, 2021, 67: 102551
- [15] Cocchi M. Data fusion methods and applications. [M]. *Elsevier*, 2019: 253-260
- [16] Sorber L, Van Barel M, De Lathauwer L. Structured data fusion[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, 2015, 9(4): 586-600
- [17] Zhao J, Tian G, Qiu Y Y, Qu H B. Rapid quantification of active pharmaceutical ingredient for sugar-free Yangwei Granules in commercial production using FT-NIR spectroscopy based on machine learning techniques [J]. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2021, 245: 118878
- [18] Song Y, Wang X Z, Xie H L, Li L Q, Ning J M, Zhang Z Z. Quality evaluation of Keemun black tea by fusing data obtained from near-infrared reflectance spectroscopy and computer vision sensors [J]. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2021, 252: 119522
- [19] An H J, Zhai C, Zhang F, Ma Q Y, Sun J F, Tang Y W, Wang W X. Quantitative analysis of Chinese steamed bread staling using NIR, MIR, and Raman spectral data fusion[J]. *Food Chemistry*, 2023, 405(Pt A): 134821
- [20] Xu Y, Koidis A, Tian X G, Xu S, Xu X Y, Wei X Q, Jiang A M, Lei H T. Bayesian fusion model enhanced codfish classification using near infrared and Raman spectrum[J]. *Foods*, 2022, 11(24): 4100
- [21] 牛付欢, 梁俊梅, 张余权, 姜元荣, 王明娟, 尚培磊. 油脂 OSI 加速氧化条件下氧化机制初探[J]. 中国粮油学报, 2014, 29(10): 67-71
Niu F H, Liang J M, Zhang Y Q, Jiang Y R, Wang M J, Shang P L. Preliminary study on the oxidation mechanism of lipid under the accelerated conditions of o the OSI method [J]. *Journal of the Chinese Cereals and Oils Association*, 2014, 29(10): 67-71 (in Chinese)
- [22] GB/T 5009.37—2003 食用植物油卫生标准的分析方法[S]. 北京: 中国标准出版社, 2004
GB/T 5009.37—2003 Method for analysis of hygienic standard of edible oils[S]. Beijing: Beijing: Standards Press of China, 2004 (in Chinese)
- [23] GB/T 24304—2009 动植物油脂 茴香胺值的测定[S]. 北京: 中国标准出版社, 2010
GB/T 24304—2009 Animal and vegetable fats and oils—Determination of anisidine value[S]. Beijing: Beijing: Standards Press of China, 2010 (in Chinese)
- [24] GB/T 22500—2008 动植物油脂 紫外吸光度的测定[S]. 北京: 中国标准出版社, 2008
GB/T 22500—2008 Animal and vegetable fats and oils: Determination of ultraviolet absorbance expressed as specific UV extinction [S]. Beijing: Beijing: Standards Press of China, 2009 (in Chinese)
- [25] 王凯. 迷迭香提取物与茶多酚棕榈酸酯协同抗油脂氧化及机理解析[D]. 江南大学, 2021
Wang K. Study of synergistic interactions between rosemary extract and

- tea polyphenol palmitate on oil [D]. Jiangnan University, 2021 (in Chinese)
- [26] 唐逸芸, 吕慧英, 王微娜, 石林英, 光品宇, 唐忠海, 范伟. 基于光谱融合的菜油真伪快速鉴别研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2023, 14(20): 33-45
- Tang Y Y, lv H Y, Wang W N, Shi L Y, Guang P Y, Tang Z H, Fan W. Rapid identification of Camellia oil authenticity based on spectral fusion[J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2023, 14(20): 33-45 (in Chinese)
- [27] Lan Z W, Zhang Y, Sun Y, Ji D, Wang S M, Lu T L, Cao H, Meng J. A mid-level data fusion approach for evaluating the internal and external changes determined by FT-NIR, electronic nose and colorimeter in Curcuma Rhizoma processing [J]. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2020, 188: 113387
- [28] 杨红欣, 唐兴萍, 杨正明, 张菊, 陆娅娟, 吴文斗. 多光谱技术在食品无损检测中的应用进展[J]. 食品工业科技, 2024, 45(8): 350-357
- Yang H X, Tang X P, Yang Z M, Zhang J, Lu Y J, Wu W D. Application research and prospects of multispectral technology in non-destructive testing of food [J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2024, 45(8): 350-357 (in Chinese)
- [29] Geurts B P, Engel J, Rafii B, Blanchet L, Suppers A, Szymańska E, Jansen J J, Buydens L M C. Improving high-dimensional data fusion by exploiting the multivariate advantage [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2016, 156: 231-240
- [30] Wang F X, Wang C G. Improved model for starch prediction in potato by the fusion of near-infrared spectral and textural data [J]. *Foods*, 2022, 11(19): 3133
- [31] Li Y, Huang Y, Xia J J, Xiong Y M, Min S G. Quantitative analysis of honey adulteration by spectrum analysis combined with several high-level data fusion strategies [J]. *Vibrational Spectroscopy*, 2020, 108: 103060
- [32] 孙飞, 詹书怡, 郭宁, 梁生旺, 乔延江, 王淑美. 基于多模块偏最小二乘的中药制药过程系统建模研究[J]. 中国中药杂志, 2018, 43(16): 3270-3278
- Sun F, Zhan S Y, Guo N, Liang S W, Qiao Y J, Wang S M. System modeling on Chinese herbal medicine process based on multi-block partial least squares [J]. *China Journal of Chinese Materia Medica*, 2018, 43(16): 3270-3278 (in Chinese)
- [33] Næs T, Tomic O, Mevik B H, Martens H. Path modelling by sequential PLS regression [J]. *Journal of Chemometrics*, 2011, 25(1): 28-40
- [34] Lauzon-Gauthier J, Manolescu P, Duchesne C. The Sequential Multi-block PLS algorithm (SMB-PLS): Comparison of performance and interpretability [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2018, 180: 72-83
- [35] Tao L Y, Via B, Wu Y J, Xiao W, Liu X S. NIR and MIR spectral data fusion for rapid detection of Lonicera japonica and Artemisia annua by liquid extraction process [J]. *Vibrational Spectroscopy*, 2019, 102: 31-38
- [36] Dupuy N, Galtier O, Ollivier D, Vanloot P, Artaud J. Comparison between NIR, MIR, concatenated NIR and MIR analysis and hierarchical PLS model. Application to virgin olive oil analysis [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2010, 666(1/2): 23-31
- [37] Yu X Z, Li Q H, Sun D J, Dong X B, Wang T. Determination of the peroxide value of edible oils by FTIR spectroscopy using polyethylene films [J]. *Analytical Methods*, 2015, 7(5): 1727-1731
- [38] 董春旺, 梁高震, 安霆, 王近近, 朱宏凯. 红茶感官品质及成分近红外光谱快速检测模型建立 [J]. 农业工程学报, 2018, 34(24): 306-313
- Dong C W, Liang G Z, An T, Wang J J, Zhu H K. Near-infrared spectroscopy detection model for sensory quality and chemical constituents of black tea [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2018, 34(24): 306-313 (in Chinese)
- [39] 王转卫, 迟茜, 郭文川, 赵春江. 基于近红外光谱技术的发育后期苹果内部品质检测 [J]. 农业机械学报, 2018, 49(5): 348-354
- Wang Z W, Chi Q, Guo W C, Zhao C J. Internal quality detection of apples during late developmental period based on near-infrared spectral technology [J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2018, 49(5): 348-354 (in Chinese)

责任编辑: 刘迎春



第一作者简介: 王微娜, 湖南农业大学硕士研究生, 食品加工与安全专业, 主要从事农产品无损检测研究。



通讯作者简介: 范伟, 博士, 湖南农业大学食品科学技术学院讲师, 研究生导师, 主要从事农产品加工智能检测研究。主持湖南省自然科学基金、国家质检总局科技计划、长沙市科技计划等项目, 参与科技部国际科技合作项目、国家自然科学基金项目、湖南省科研条件创新专项等课题, 获湖南省自然科学三等奖一项, 近年发表SCI收录论文18篇、其中第一作者及通讯作者论文10篇, 获软件著作权6项。