

傅里叶变换红外光谱和紫外光谱数据融合对牛肝菌种类的鉴别

姚 森^{1,2}, 刘鸿高¹, 李 涛³, 李杰庆^{1,*}, 王元忠^{2,4,*}

(1. 云南农业大学农学与生物技术学院, 云南 昆明 650201; 2. 云南省农业科学院农产品加工研究所, 云南 昆明 650221; 3. 玉溪师范学院资源环境学院, 云南 玉溪 653100; 4. 云南省省级中药原料质量监测技术服务中心, 云南 昆明 650200)

摘 要: 采集5种共272份牛肝菌样品的傅里叶变换红外光谱和紫外光谱, 结合多光谱信息融合策略, 建立牛肝菌种类快速鉴别的方法。多元散射校正(multiplicative signal correction, MSC)及二阶导数(second derivative, 2D)等预处理方法对原始光谱进行优化, 比较优化处理对区分不同种类牛肝菌影响; 利用优化处理后的光谱数据及融合数据建立偏最小二乘判别分析(partial least squares discriminant analysis, PLS-DA)模型和支持向量机(support vector machine, SVM)判别模型。结果显示: 1) 经过2D和MSC预处理后, 不同种类牛肝菌的PLS-DA鉴别效果优于未优化模型, 表明2D+MSC预处理优化了光谱信息并提高了分类准确度; 2) 基于傅里叶变换红外光谱、紫外光谱、低级融合和中级融合数据分别建立PLS-DA模型, 预测正确率为86.87%、66.67%、78.89%和95.56%; 建立SVM判别模型, 预测正确率分别为88.89%、74.44%、91.11%和100.00%, 表明中级融合技术对不同种类牛肝菌鉴别效果显著, 优于其他技术; 3) 中级融合技术在PLS-DA模型和SVM判别模型中对样品的预测正确率分别为95.56%和100.00%, 表明SVM判别模型对牛肝菌种类区分效果优于PLS-DA模型。采用中级融合技术建立SVM判别模型, 快速鉴别牛肝菌种类, 为牛肝菌种类鉴别和质量控制提供可靠、稳定的方法。

关键词: 数据融合; 牛肝菌; 种类鉴别; 紫外光谱; 傅里叶变换红外光谱

Data Fusion of Fourier Transform Infrared and UV Spectra for the Discrimination of Boletus Mushrooms

YAO Sen^{1,2}, LIU Honggao¹, LI Tao³, LI Jieqing^{1,*}, WANG Yuanzhong^{2,4,*}

(1. College of Agronomy and Biotechnology, Yunnan Agricultural University, Kunming 650201, China;
2. Institute of Agro-Products Processing, Yunnan Academy of Agricultural Sciences, Kunming 650221, China;
3. College of Resources and Environment, Yuxi Normal University, Yuxi 653100, China;
4. Yunnan Technical Center for Quality of Chinese Material Medica, Kunming 650200, China)

Abstract: In this study, a rapid method using Fourier transform infrared (FTIR) and ultraviolet (UV) spectroscopies coupled with data fusion was established for the identification of five species of boletus mushrooms. The original spectra of 272 samples from different species were preprocessed and optimized by multiplicative signal correction (MSC) and second derivative (2D). The classification results from the original and the optimal data matrixes were compared. Then the single and fused spectral data were analyzed by partial least squares discriminant analysis (PLS-DA) and support vector machine (SVM). The results showed that 1) compared with the original spectra, the preprocessing methods of 2D and MSC could optimize the spectral information and improve the classification accuracy; 2) base on FTIR, UV, low-level data fusion and mid-level data fusion data matrixes, respectively, the prediction accuracy of the PLS-DA models was 86.87%, 66.67%, 78.89% and 95.56%, and the prediction accuracy of the SVM models was 88.89%, 74.44%, 91.11% and 100.00%, respectively, indicating that mid-level data fusion was better than the other methods; 3) in terms of the prediction accuracy, the classification ability of the SVM model with mid-level data was better than that of the PLS-DA model with mid-level data. In conclusion, the SVM model based on mid-level data fusion represents a rapid

收稿日期: 2017-08-17

基金项目: 国家自然科学基金地区科学基金项目(31660591; 21667031); 云南省教育厅科学研究基金项目(2016ZZX106); 云南省高校食用菌资源开发与利用重点实验室建设项目

第一作者简介: 姚森(1992—), 男, 硕士研究生, 主要从事牛肝菌光谱指纹图谱研究。E-mail: yaosen0402@163.com

*通信作者简介: 李杰庆(1982—), 男, 讲师, 硕士, 主要从事食用菌研究。E-mail: lijieqing2008@126.com

王元忠(1981—), 男, 副研究员, 硕士, 主要从事药用真菌研究。E-mail: boletus@126.com

method for the effective identification of different species of bolete mushrooms. It can provide an effective method for identification and quality control of edible mushrooms.

Keywords: data fusion; boletes; species identification; ultraviolet spectrum; Fourier transform infrared spectrum

DOI:10.7506/spkx1002-6630-201820043

中图分类号: TS207

文献标志码: A

文章编号: 1002-6630 (2018) 20-0302-06

引文格式:

姚森, 刘鸿高, 李涛, 等. 傅里叶变换红外光谱和紫外光谱数据融合对牛肝菌种类的鉴别[J]. 食品科学, 2018, 39(20): 302-307. DOI:10.7506/spkx1002-6630-201820043. <http://www.spkx.net.cn>

YAO Sen, LIU Honggao, LI Tao, et al. Data fusion of Fourier transform infrared and UV spectra for the discrimination of bolete mushrooms[J]. Food Science, 2018, 39(20): 302-307. (in Chinese with English abstract) DOI:10.7506/spkx1002-6630-201820043. <http://www.spkx.net.cn>

牛肝菌是牛肝菌目(Boletales)大型真菌,除了少数品种有毒、味苦不能食用外,大部分品种可以食用^[1]。其菌肉肥厚,味道鲜美,口感细腻,富含蛋白质、纤维、多糖、维生素和铁、锌、钙等矿质元素,同时具有抗氧化性、抗肿瘤、抗病毒、健胃等药用功效,是天然的保健食品,兼具食药两用价值,深受国内外消费者青睐^[2-3]。

云南是我国牛肝菌种类最丰富的地区之一,已知牛肝菌224种,其中可食用牛肝菌144种^[4]。牛肝菌种类繁多,形态相似,采用传统方法观察鉴别难度大,因误采误食造成中毒事件时有发生^[5],目前对快速、有效鉴别牛肝菌种类的研究较少,同时市场上对食用牛肝菌分类模糊,以次充好的现象屡见不鲜。李艳春等^[6]研究了市场上4“种”常见牛肝菌的DNA条形码,结果表明4“种”牛肝菌样品代表了12个物种;Dentinger等^[7]对超市购买的中国云南出口美味牛肝菌进行DNA测序分析,发现同一包装袋内15片牛肝菌中有3种新牛肝菌物种。现今,市场上的欺诈行为严重威胁消费者健康,损害消费者利益,扰乱食用菌市场。准确鉴别野生牛肝菌是保障消费者安全,维护人民利益,进一步开发利用和加强市场质量监控的重要前提。

目前,食用菌鉴别分类研究主要集中在光谱法和分子生物学方法。Mohaček-Grošev等^[8]采集30个不同属野生菌的红外光谱,对光谱信息进行解析,结果显示不同野生菌样品的红外光谱差异明显,其中1 200~1 000 cm⁻¹的差异可以作为不同属野生菌的特征区。杨天伟等^[9]采用紫外光谱(ultraviolet spectroscopy, UV)技术结合主成分分析对不同产地、种类可食用牛肝菌进行研究,结果表明其紫外图谱具有指纹特性,主成分分析显示不同种类牛肝菌对营养成分积累有明显差异,可以用于鉴别不同产地、种类食用牛肝菌。Mello等^[10]根据ITS片段设计引物,采用分子生物学方法成功鉴别铜色牛肝菌(*Boletus aereus* Bull.)和美味牛肝菌(*B. edulis* Bull.)。单一的光谱法对样品有效信息提取率低,容易受到各个因素(如温度、湿度、CO₂浓度、溶剂

等)影响;分子生物学方法费用昂贵,操作复杂,不适合推广应用。

数据融合是将多个来源信息加以过滤、优化、整合,得到更加准确、可靠的数据信息,其目的是通过各仪器间协同作用,获得比单一技术更准确的分类结果^[11-12],已被广泛应用于食品、饮料的鉴别和质量评价等领域^[13-16]。数据融合分为低级融合、中级融合和高级融合,低级数据融合是将不同仪器获得的数据进行简单的串联,形成更全面的数据集^[17];中级融合是将不同来源的数据经过特征提取,并对选取特征变量(如主成分)进行整合,去除干扰信息,从而获得更加丰富、系统的数据集^[18-19];高级融合为决策级融合,结合两个或两个以上分类模型得出最佳鉴别结果^[20]。目前,大多数学者采用低级或中级融合技术,仅10%的研究采用高级融合技术^[21]。在本实验中,中级融合分类正确率已经达到100%,因此不对高级融合进行深入的研究分析。

本研究采用傅里叶变换红外光谱(Fourier transform infrared spectroscopy, FTIR)法和UV法,具有花费低、速度快、灵敏度高、可靠性强等优点^[22-23]。采用二阶导数(second derivative, 2D)、多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、数据融合等方法优化样品信息,通过偏最小二乘判别分析(partial least squares discriminant analysis, PLS-DA)和支持向量机(support vector machine, SVM)比较FTIR、UV、低级融合和中级融合技术对不同种牛肝菌的分类效果,快速及有效鉴别野生食用菌,为加强市场监管提供理论基础与科学依据。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

实验所用5个不同种类牛肝菌(皱盖疣柄牛肝菌、栗色牛肝菌、小美牛肝菌、美味牛肝菌和双色牛肝菌)均采自云南省,共272份样品,样品详细信息见表1。

表1 牛肝菌样品信息

Table 1 Information about boletes samples

代号	编号	名称	拉丁名
A	1~52	皱盖疣柄牛肝菌	<i>Leccinum rugosiceps</i> (PK.) Sing.
B	53~122	栗色牛肝菌	<i>B. umbriniporus</i> Hongo.
C	123~172	小美牛肝菌	<i>B. speciosus</i> Frost.
D	173~242	美味牛肝菌	<i>B. edulis</i> Bull.
E	243~272	双色牛肝菌	<i>B. bicolor</i> Peck.

KBr 天津市风船化学试剂科技有限公司；氯仿云南杨林工业开发区汕滇药业有限公司。所有化学试剂均为分析纯。

1.2 仪器与设备

Frontier型FTIR仪（配备硫酸三甘肽晶体氧化检测器，扫描范围为4 000~400 cm^{-1} ，扫描信号累加16次，分辨率为4 cm^{-1} ）美国Perkin Elmer公司；UV-2550型紫外-可见分光光度计（扫描范围190~600 nm，狭缝宽度1 nm）日本岛津公司；SY3200-T型超声波清洗仪（功率150 W，频率55 kHz）上海声源超声波仪器设备有限公司；YP-2型压片机上海市山岳科学仪器有限公司；FW-100型高速粉碎机天津市华鑫仪器厂；80目标标准筛盘浙江上虞市道墟五四仪器厂。

1.3 方法

1.3.1 FTIR采集

样品采集后清洗干净，50 $^{\circ}\text{C}$ 烘干，粉碎后过80目标标准筛，备用。按1:100的比例，准确称量（ 1.5 ± 0.2 ）mg牛肝菌样品和（ 150 ± 20 ）mg溴化钾粉末，放入玛瑙研钵充分混合研磨成细粉，将细粉倒入压制磨具中压制成片。将FTIR仪预热30 min后进行FTIR扫描，样品重复测定2次，取平均光谱；扫描前使用空白样本扣除 CO_2 和 H_2O 的干扰。

1.3.2 UV采集

称取（ 0.1 ± 0.002 ）g牛肝菌样品粉末置于石英比色皿中，加入10 mL氯仿溶剂，超声提取30 min，三层滤纸过滤，取清液备用。紫外-可见分光光度计预热30 min后测定样品UV，重复扫描2次，取平均光谱，扫描间隔1 nm。

1.4 数据分析

FTIR仪和紫外-可见分光光度计在采集光谱信息时，会夹杂背景噪音、散光等干扰信息。为消除干扰信息，红外原始光谱通过OMNIC 8.0软件进行平均光谱、自动基线校正、平滑、纵坐标归一化等预处理，紫外原始光谱采用UV probe 2.34软件进行平滑等预处理；同时，采用2D+MSC对FTIR和UV分别进行优化处理。

原始光谱经预处理后，选取具有指纹特性的原始光谱数据进行串联，形成一个包含大量变量的独立数据矩阵，完成低级融合。采用SIMCA-P+13.0软件对FTIR和UV数据分别进行PLS-DA，提取主成分并整合，进行中级融合。

SIMCA-P+13.0软件对光谱数据进行2D、MSC优化处理，Origin 8.0软件作图，通过SIMCA-P+13.0软件和MATLAB R2014a软件分别进行PLS-DA和SVM分析，建立判别模型，比较分类结果。

2 结果与分析

2.1 原始FTIR检测结果

采用OMNIC 8.0软件对272份牛肝菌FTIR进行平滑、基线校正和纵坐标归一化等预处理。选取牛肝菌FTIR特征吸收峰的集中波段在2 000~400 cm^{-1} 内，用于区分牛肝菌种类。如图1所示，不同种类牛肝菌的FTIR较为相似，共有峰波数大致相同，在1 634、1 480、1 400、1 319、1 253、1 078、1 057 cm^{-1} 等波数附近有明显吸收峰，但不同种牛肝菌样品吸收峰的强度有差异。1 634 cm^{-1} 附近吸收峰为C=O伸缩振动，为蛋白质酰胺I带；1 480 cm^{-1} 附近归属为亚甲基的弯曲振动；1 400、1 319、1 253 cm^{-1} 等附近为多糖、蛋白质等的C—O—H弯曲振动和亚甲基的变形振动；1 078、1 057 cm^{-1} 附近分别为糖类的C—O和C—C伸缩振动；950~710 cm^{-1} 波段有多个弱吸收峰，主要为糖类异构体的特征峰^[24-25]。

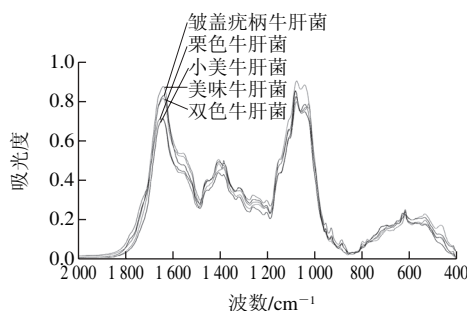


图1 5种牛肝菌的FTIR

Fig. 1 IR spectra of five boletus species

2.2 原始紫外图谱分析

在采集样品UV过程中，容易受到溶剂、仪器、环境等干扰，采用UV probe 2.34软件对牛肝菌样品进行平滑等预处理。由于在190~230 nm波长内UV受干扰严重，且400 nm以后无明显特征吸收峰，牛肝菌UV的特征吸收峰集中在230~400 nm波长范围内，因此选取230~400 nm波长范围的171个变量作为样品信息用于区分牛肝菌种类。如图2所示，在240~400 nm范围内5种牛肝菌样品光谱图峰形相似度高，在250~350 nm区间有明显的特征吸收峰，274、285、296 nm附近为样品共有峰，表明不同种牛肝菌的化学组分相似；5种牛肝菌样品的峰强、峰位和峰面积存在差异，尤其在230~240 nm区间差异明显，具有指纹特性，能够作为区分不同种类牛肝菌的依据。

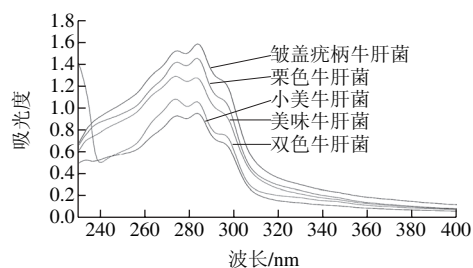
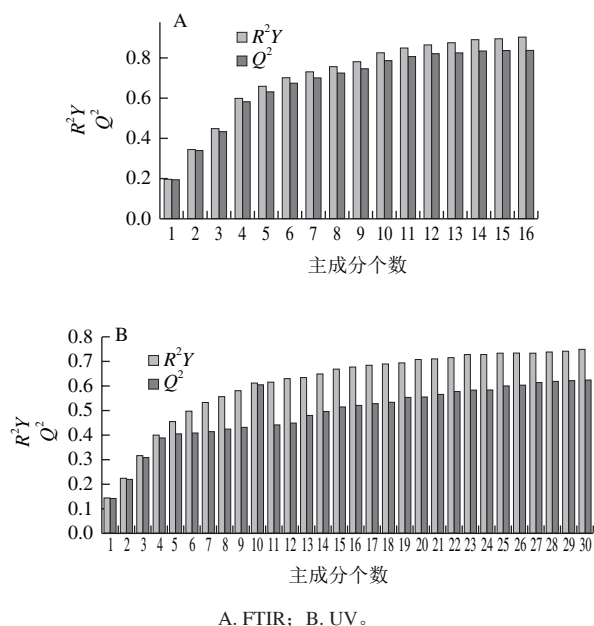


图2 5种牛肝菌的UV

Fig. 2 UV spectra of five boletus species

2.3 主成分提取

采用PLS-DA提取主成分, R^2Y 表示主成分累计贡献率, 贡献率越高代表样品信息越多; Q^2 表示主成分对样品的预测能力, Q^2 越大表示预测能力越强^[26]。如图3所示, 当 Q^2 达到最大值时, FTIR前16个主成分累计贡献率达90.35%, UV前30个主成分累计贡献率达74.86%, 能够代表样品的主要信息。将两种光谱数据的主成分组合在一起, 进行中级融合, 形成新的数据集为进一步鉴别分析做准备。



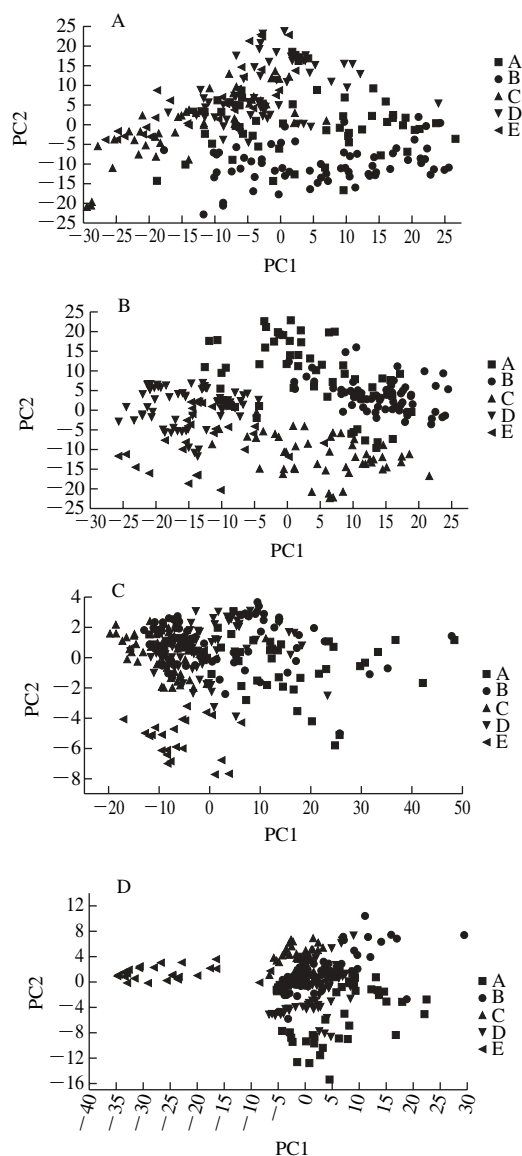
A. FTIR; B. UV。

图3 PLS-DA提取主成分得分图

Fig. 3 Scores plots for principal components extracted by PLS-DA

2.4 PLS-DA结果

PLS-DA是基于偏最小二乘回归的一种有监督的判别分类方法, 利用自变量矩阵 X 和分类变量 Y 建立回归模型, 通过PLS预测未知样品类别的方法^[27-28]。采用PLS-DA比较预处理对分类效果的影响。图4显示, 经过预处理后FTIR较UV对不同种牛肝菌的区分效果更好; 经过预处理后的区分效果优于原始的效果, 表明2D和MSC预处理对FTIR和UV的优化效果较好。



A.原始FTIR; B. FTIR经过预处理后; C.原始UV; D. UV经过预处理后。

图4 不同种牛肝菌PLS-DA得分图

Fig. 4 Scores plot for PLS-DA of different species of bolete mushrooms

随机选取90个样品(约样品量的1/3)作为预测集, 其余182个样品作为训练集。对FTIR、UV、低级融合和中级融合数据分别建立PLS-DA判别模型。如表2所示, FTIR技术与UV技术相比, FTIR判别模型具有更高的准确度, 表明FTIR结合PLS-DA建立判别模型对未知样品的分类更加准确。低级数据融合技术对不同种牛肝菌的分类正确率高于UV技术, 低于FTIR技术, 表明低级融合丰富了光谱数据, 同时简单的数据串联将无效信息相互叠加, 降低分类正确率。结果与Roussel等^[29]的结论一致, 受干扰信息影响, 不是所有情况下数据融合得到的结果都优于单独仪器。同时, 中级数据融合训练集和预测集的正确率分别达到98.90%和95.56%, 正确率高于单一光谱技术, 分类效果优于低级融合, 表明中级融合技术在

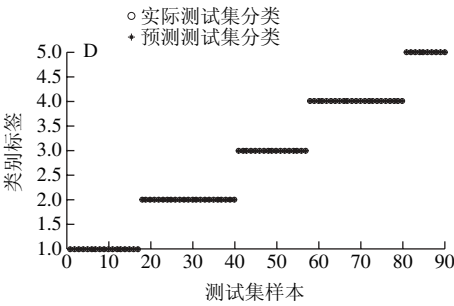
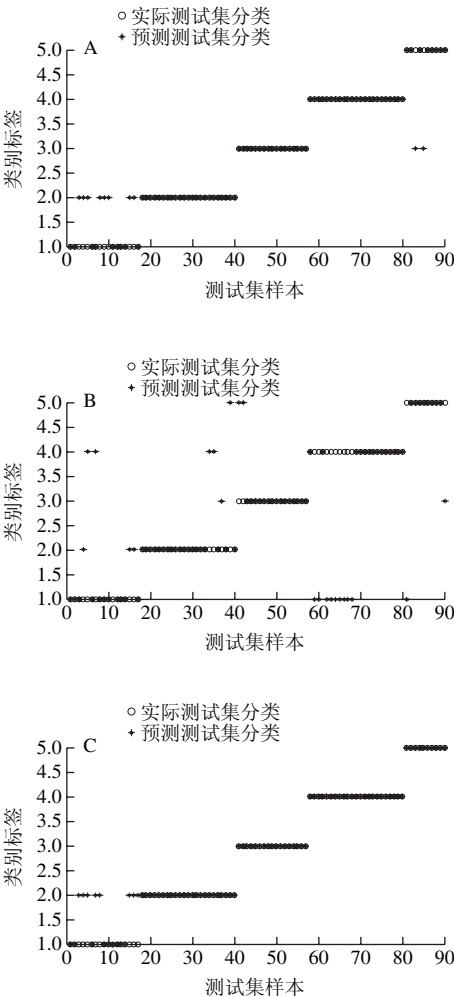
融合过程中去除了大量干扰信息，能够建立更稳定、可靠的判别模型。

表2 PLS-DA对不同数据集的分类结果
Table 2 Results of PLS-DA of different data matrixes

数据集来源	训练集正确率/%	预测集正确率/%
FTIR	98.96	86.67
UV	75.82	66.67
低级融合	97.25	78.89
中级融合	98.90	95.56

2.5 SVM

SVM是基于统计学习理论的模式识别方法，主要应用于模式识别领域，能够解决小样本、非线性和高维数等问题，有效防止过拟合现象^[30-31]，该方法已被广泛应用于原材料鉴别、食品分析等方面^[32-34]。SVM模型选取训练集和预测集的方法同2.4节，采用网格搜索法筛选建模的最佳参数，基于FTIR、UV、低级融合和中级融合数据分别建立SVM判别模型。如图5所示，UV技术分类错误最多，中级融合全部分类正确，表明中级融合对牛肝菌种类的鉴别效果最佳。



A. FTIR; B. UV; C.低级融合; D.中级融合。

图5 SVM对测试集的实际分类和预测分类图

Fig. 5 Plots of actual and predicted categories of test samples by SVM

表3 SVM对不同数据集的分类结果
Table 3 Results of SVM of different data matrixes

数据集来源	训练集正确率/%	预测集正确率/%
FTIR	95.60	88.89
UV	86.81	74.44
低级融合	98.35	91.11
中级融合	100.00	100.00

如表3所示，4 个数据集建模稳定性依次为中级融合>低级融合>FTIR>UV。同时低级融合对样品的预测正确率高于单个技术，表明低级融合数据比单个仪器数据更全面，判别效果更好；中级融合的分类正确率高于低级融合，证明中级融合在整合数据过程中去除了无效信息，避免两种光谱信息的互相干扰，提高分类正确率。该结论与Biancolillo等^[19]研究结果相吻合，多种光谱技术对食品进行鉴别分析，低级和中级数据融合区分效果皆高于单一光谱技术，并且中级数据融合优于低级数据融合。比较表2和表3可知，采用中级融合技术建立SVM判别模型，模型稳定、可靠，对不同种牛肝菌鉴别效果最佳。

3 结论

采用FTIR法和UV法采集云南地区常见牛肝菌物种的光谱信息，选择MSC和2D分别对牛肝菌FTIR和UV进行优化处理。优化后的光谱数据进行PLS-DA，结果显示同种类牛肝菌样品能较好地聚集在一起，部分不同种类牛肝菌样品混在一起，难以区分；表明优化处理对牛肝菌种类区分效果优于原始光谱，且FTIR对不同种牛肝菌的区分效果优于UV。

采用低级和中级数据融合策略对两种光谱数据进行融合，通过PLS-DA和SVM建立分类鉴别模型，并比较FTIR、UV、低级融合和中级融合技术对不同种牛肝菌鉴别效果。结果显示：中级数据融合建立的SVM判别模型预测正确率分别为95.56%和100.00%，高于其他模型，表明中级融合对不同种牛肝菌区分效果最佳，且SVM建立分类模型更稳定、可靠。中级融合技术结合SVM建立鉴

别模型,能够准确、有效区分不同种牛肝菌,为快速鉴别野生食用菌提供有效方法,对维护食用菌市场的稳定具有重要意义。

参考文献:

- [1] 李泰辉,宋斌.中国食用牛肝菌的种类及其分布[J].食用菌学报,2002,9(2):22-30. DOI:10.3969/j.issn.1005-9873.2002.02.006.
- [2] WANG X M, ZHANG J, WU L H, et al. A mini-review of chemical composition and nutritional value of edible wild-grown mushroom from China[J]. Food Chemistry, 2014, 151: 279-285. DOI:10.1016/j.foodchem.2013.11.062.
- [3] CHEUNG P C K. The nutritional and health benefits of mushrooms[J]. Nutrition Bulletin, 2010, 35(4): 292-299. DOI:10.1111/j.1467-3010.2010.01859.x.
- [4] 戴玉成,周丽伟,杨祝良,等.中国食用菌名录[J].菌物学报,2010(1):1-21. DOI:10.13346/j.mycosystema.2010.01.022.
- [5] 李树红,赵永昌,于富强,等.云南商品牛肝菌中易混淆毒牛肝系统学研究[J].中国食用菌,2011,30(5):34-36. DOI:10.13629/j.cnki.53-1054.2011.05.013.
- [6] 李艳春,吴刚,杨祝良.我国云南食用牛肝菌的DNA条形码研究[J].植物分类与资源学报,2013,35(6):725-732. DOI:10.7677/ynzwjy201313201.
- [7] DENTINGER B T M, SUZ L M. What's for dinner? Undescribed species of porcini in a commercial packet[J]. Pre-College Engineering Education Research, 2014, 2: e570. DOI:10.7717/peerj.570.
- [8] MOHAČEK-GROŠEV V, BOŽAC R, PUPPELS G J. Vibrational spectroscopic characterization of wild growing mushrooms and toadstools[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2001, 57(14): 2815-2829. DOI:10.1016/S1386-1425(01)00584-4.
- [9] 杨天伟,李涛,张霁,等.不同产地、种类牛肝菌的紫外光谱鉴别分析[J].食品工业,2015,36(9):208-212.
- [10] MELLO A, GHIGNONE S, VIZZINI A, et al. ITS primers for the identification of marketable boletes[J]. Journal of Biotechnology, 2006, 121(3): 318-329. DOI:10.1016/j.jbiotec.2005.08.022.
- [11] KHALEGHI B, KHAMIS A, KARRAY F O, et al. Multisensor data fusion: a review of the state-of-the-art[J]. Information Fusion, 2013, 14(1): 28-44. DOI:10.1016/j.inffus.2011.08.001.
- [12] VERA L, ACEÑA L, GUASCH J, et al. Discrimination and sensory description of beers through data fusion[J]. Talanta, 2011, 87: 136-142. DOI:10.1016/j.talanta.2011.09.052.
- [13] MÁRQUEZ C, LÓPEZ M I, RUISÁNCHEZ I, et al. FT-Raman and NIR spectroscopy data fusion strategy for multivariate qualitative analysis of food fraud[J]. Talanta, 2016, 161: 80-86. DOI:10.1016/j.talanta.2016.08.003.
- [14] DALLE ZOTTE A, OTTAVIAN M, CONCOLLATO A, et al. Authentication of raw and cooked freeze-dried rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*) by means of near infrared spectroscopy and data fusion[J]. Food Research International, 2014, 60: 180-188. DOI:10.1016/j.foodres.2013.10.033.
- [15] GUTIÉRREZ J M, HADDI Z, AMARI A, et al. Hybrid electronic tongue based on multisensor data fusion for discrimination of beers[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 2013, 177: 989-996. DOI:10.1016/j.snb.2012.11.110.
- [16] HONG X, WANG J. Detection of adulteration in cherry tomato juices based on electronic nose and tongue: comparison of different data fusion approaches[J]. Journal of Food Engineering, 2014, 126: 89-97. DOI:10.1016/j.jfoodeng.2013.11.008.
- [17] PIZARRO C, RODRÍGUEZ-TECEDOR S, PÉREZ-DEL-NOTARIO N, et al. Classification of Spanish extra virgin olive oils by data fusion of visible spectroscopic fingerprints and chemical descriptors[J]. Food Chemistry, 2013, 138(2): 915-922. DOI:10.1016/j.foodchem.2012.11.087.
- [18] DEARING T I, THOMPSON W J, RECHSTEINER C E, et al. Characterization of crude oil products using data fusion of process raman, infrared, and nuclear magnetic resonance (NMR) spectra[J]. Applied Spectroscopy, 2011, 65(2): 181-186. DOI:10.1366/10-05974.
- [19] BIANCOLILLO A, BUCCI R, MAGRÌ A L, et al. Data-fusion for multiplatform characterization of an Italian craft beer aimed at its authentication[J]. Analytica Chimica Acta, 2014, 820: 23-31. DOI:10.1016/j.aca.2014.02.024.
- [20] DOESWIJK T G, SMILDE A K, HAGEMAN J A, et al. On the increase of predictive performance with high-level data fusion[J]. Analytica Chimica Acta, 2011, 705(1): 41-47. DOI:10.1016/j.aca.2011.03.025.
- [21] BORRÁS E, FERRÉ J, BOQUÉ R, et al. Data fusion methodologies for food and beverage authentication and quality assessment: a review[J]. Analytica Chimica Acta, 2015, 891: 1-14. DOI:10.1016/j.aca.2015.04.042.
- [22] ALEXANDRAKIS D, DOWNEY G, SCANNELL A G M. Rapid non-destructive detection of spoilage of intact chicken breast muscle using near-infrared and Fourier transform mid-infrared spectroscopy and multivariate statistics[J]. Food and Bioprocess Technology, 2012, 5(1): 338-347. DOI:10.1007/s11947-009-0298-4.
- [23] ZAVOI S, FETEA F, RANGA F, et al. Comparative fingerprint and extraction yield of medicinal herb phenolics with hepatoprotective potential, as determined by UV-Vis and FT-MIR spectroscopy[J]. Notulae Botanicae Horti Agrobotanici Cluj-Napoca, 2011, 39(2): 82.
- [24] FAGHIHIAN H, SABOKROOH E. Immobilization of ligands on surfactant coated alumina for removal of cations[J]. Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering, 2012, 31(4): 1-9.
- [25] 杨天伟,张霁,史云东,等.红外光谱结合多元统计分析快速鉴别不同种类牛肝菌[J].食品科学,2015,36(24):116-121. DOI:10.7506/spkx1002-6630-201524020.
- [26] MICKIEWICZ B, HEARD B J, CHAU J K, et al. Metabolic profiling of synovial fluid in a unilateral ovine model of anterior cruciate ligament reconstruction of the knee suggests biomarkers for early osteoarthritis[J]. Journal of Orthopaedic Research, 2015, 33(1): 71-77. DOI:10.1002/jor.22743.
- [27] GROMSKI P S, MUHAMADALI H, ELLIS D I, et al. A tutorial review: Metabolomics and partial least squares-discriminant analysis-a marriage of convenience or a shotgun wedding[J]. Analytica Chimica Acta, 2015, 879: 10-23. DOI:10.1016/j.aca.2015.02.012.
- [28] BORRÁS E, FERRÉ J, BOQUÉ R, et al. Olive oil sensory defects classification with data fusion of instrumental techniques and multivariate analysis (PLS-DA)[J]. Food Chemistry, 2016, 203: 314-322. DOI:10.1016/j.foodchem.2016.02.038.
- [29] ROUSSEL S, BELLON-MAUREL V, ROGER J M, et al. Authenticating white grape must variety with classification models based on aroma sensors, FT-IR and UV spectrometry[J]. Journal of Food Engineering, 2003, 60(4): 407-419. DOI:10.1016/S0260-8774(03)00064-5.
- [30] XU Y, ZOMER S, BRERETON R G. Support vector machines: a recent method for classification in chemometrics[J]. Critical Reviews in Analytical Chemistry, 2006, 36(3/4): 177-188. DOI:10.1080/10408340600969486.
- [31] KAUR H, SINGH B. Classification and grading rice using multi-class SVM[J]. International Journal of Scientific and Research Publications, 2013, 3(4): 1-5.
- [32] BALABIN R M, SAFIEVA R Z, LOMAKINA E I. Gasoline classification using near infrared (NIR) spectroscopy data: comparison of multivariate techniques[J]. Analytica Chimica Acta, 2010, 671(1): 27-35. DOI:10.1016/j.aca.2010.05.013.
- [33] DEVOS O, DOWNEY G, DUPONCHEL L. Simultaneous data pre-processing and SVM classification model selection based on a parallel genetic algorithm applied to spectroscopic data of olive oils[J]. Food Chemistry, 2014, 148: 124-130. DOI:10.1016/j.foodchem.2013.10.020.
- [34] POULADZADEH P, SHIRMOHAMMADI S, BAKIROV A, et al. Cloud-based SVM for food categorization[J]. Multimedia Tools and Applications, 2015, 74(14): 5243-5260. DOI:10.1007/s11042-014-2116-x.