

## 接受的手稿

标题：对特级初榨橄榄油、大豆油和甜杏仁油混合物进行线性和非线性定量，以评估其商业标签

作者：Regina Aroca-Santos Regina Aroca-Santos, Miguel Lastra-Mejias, John C. Cancilla, Jose S. Torrecilla

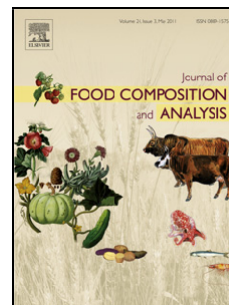
PII：S0889-1575(18)30873-1  
DOI：<https://doi.org/10.1016/j.jfca.2018.09.010>  
参考资料：YJFCA 3139

将出现在：

收到的日期：7-10-2017  
修订的日期：14-5-2018  
接受的日期：13-9-2018

请将本文引用为：Aroca-Santos R, Lastra-Mejías M, Cancilla JC, Torrecilla JS, Linear and non-linear quantification of extra virgin olive oil, soybean oil, and sweet almond oil in blends to assess their commercial labels, *Journal of Food Composition and Analysis* (2018), <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2018.09.010>

这是一份未经编辑的手稿的PDF文件，已被接受出版。作为对客户的一项服务，我们提供这个早期版本的手稿。稿件在最终出版前，将经过文字编辑、排版以及对所产生的样稿进行审查。请注意，在制作过程中可能会发现错误，从而影响内容，所有适用于本刊的法律免责声明都适用。



**特级初榨橄榄油、大豆油和甜杏仁油混合物的近似和非线性定量，**

**以评估其商业标签**

Regina Aroca-Santos,<sup>1</sup> Miguel Lastra-Mejías,<sup>1</sup> John C. Cancilla,<sup>2</sup> José S. Torrecilla\*,<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040-Madrid, Spain.

<sup>2</sup> 美国加州圣地亚哥，斯金蒂龙研究所。

**亮点：**

- 快速验证三元混合油的成分的技术。
- 单一品种橄榄油和污染物的混合物的光谱研究。
- 基于特级初榨橄榄油中污染物浓度的质量控制。
- 有助于生产商验证特级初榨橄榄油瓶的标签。

**摘要**

在这项工作中，提出了一种量化由特级初榨橄榄油（原产地保护标志 "Siruana"）、大豆油和甜杏仁油组成的二元和三元混合物的方法。该分析方法是基于可见光谱与不同性质的算法工具（偏最小二乘法和人工神经网络（ANNs））。一般来说，吸收光谱学和人工神经网络的结合会产生比测试的线性模型更好的模型。具体来说，当使用ANN模型时，三元混合物中每种成分浓度的估计误差比线性模型的准确性高28%。由于平均绝对值

\*通讯作者。电话：+34 91 394 42 44；传真：+34 91 394 42 43。电子邮件地址：jstorre@ucm.es。

误差值达到了，这种技术适合于快速验证混合物的成分，因此，它可以用来验证特级初榨橄榄油瓶的标签。

**关键字：**人工神经网络；光谱学；特级初榨橄榄油；大豆油；甜杏仁油；食品分析；食品成分。

## 1. 简介

特级初榨橄榄油（EVOO）、大豆油和甜杏仁油都是当今食品工业中使用的油，不同的研究显示，它们有可能降低患心血管疾病的几率，甚至有助于预防癌症（Jenkins等人，2006；Chen等人，2006）。特别是EVOO，它是地中海饮食中的主要脂肪来源（Vasilescu等人，2015年），其出色的营养和感官质量使其对许多健康相关方面有益（Aroca-Santos等人，2015年；Visioli和Gali，1998年；Menenezdez等人，2007年）。另一方面，大豆油是三种油中最便宜的，它在商业食品生产中被高度用于烘烤、油炸和沙拉酱。它富含维生素E，是一种非常强大的抗氧化剂，使大豆油成为循环系统的健康产品（Abedi等人，2015）。最后，甜杏仁油，尽管在烹饪应用中不像EVOO或大豆油那样常见，但也用于沙拉和蔬菜蘸酱，鉴于其维生素E和不饱和脂肪酸含量高，其成分使其成为健康的替代品（Abdallah等人，1998；Kodad，2016；Ahmad，2010）。

尽管如此，也存在着对这些食用油中发现的一些化合物可能产生过敏反应的消极一面（Chen等人，2006），因此消费者必须了解他们所购买产品的质量、成分和营养信息。从这个意义上说，适当的食品标签非常重要，它仍然是一个未解决的问题，这就是为什么这项研究的目的是设计一个能够检测和量化EVOO与大豆油和/或甜杏仁油的二元和三元混合物中存在的油的工具。此外，涉及使用大豆作为EVOO掺杂物的欺诈活动也有报道（Lizhi等人，2010）。

研究这三种油是有意义的，因为几乎没有任何研究来量化或确定它们的混合物。它们都被用于食品工业，因此彼此之间的意外污染是一种真正的可能性，可能会导致该行业出现问题。它可能导致食品的不正确标签，从而导致欺诈行为。更糟糕的是，它将成为潜在的健康危害，因为在食用过程中可能会出现过敏反应。

为了防止这些问题，已经使用了可见光光谱技术。这项技术之前已经令人满意地用于食用油及其混合物的检测和定量（Aroca-Santos等人，2015；Aroca-Santos等人，2016）。从这些油及其二元和三元混合物的可见光谱中获得的信息被用来创建和比较线性回归模型和非线性人工神经网络（ANNs）。它们之间的主要区别在于因变量和自变量之间数学关系的性质，前者是线性的，后者是非线性的。

基于ANN的模型是一种数学工具，能够在数据库中找到不同输入和输出变量之间的非线性关系（Demuth

等人，2007；Jain和Mao，1996）。这种特质使得这些模型在许多学科，包括食品技术领域，成功地用于各种应用和工具（Torrecilla等人，2016；Torrecilla等人，2013；Torrecilla等人，2008；Wang等人，2014）。

这项工作的主要目的是测试可见光光谱与线性和ANN模型相结合的能力，为EVOO与大豆油和/或甜杏仁油的二元和三元混合物的成分量化提供一种快速和用户友好的方法。

## 2. 材料和方法

在本小节中，描述了样品制备、分析程序和所使用的数学模型。

### 2.1 样品制备

为了制备样品，我们使用了三种油：Arbequina EVOO（原产地保护名称 "Siruana"）、精制甜杏仁油（实验室Manuel Riesgo）和精制大豆油（实验室Manuel Riesgo）。这些油都在它们的最佳使用期限内，在室温下储存在干燥和黑暗的地方，以尽可能避免降解（Torrecilla等人，2015）。总共准备了141个样品（包括纯EVOO样品）：其中40个是EVOO与大豆油或甜杏仁油的二元混合物（各20个）。这些样品的体积在EVOO的百分比范围内，即80-100%。其他100个样品是EVOO与已知数量的大豆油和甜杏仁油的三元混合物，体积为2-20%。每种混合油的确切成分可参见补充资料中的表S1。

## 2.2 可见光谱学

使用瓦里安Cary 1E紫外可见分光光度计来测量上述样品。所测量的样品在一个路径长度为1厘米的透明池中进行分析，操作范围在380和720纳米之间。每个样品被测量三次，其平均值被用来设计、训练和优化模型。

## 2.3. 数学模型

### 2.3.1. 线性回归模型

这里测试的线性模型是基于部分最小二乘法（PLS）。这种方法是一种常见的、简单的数学方法，将输入和输出信息联系起来。关于输入，从获得的吸收光谱中选择了两个数据集，以便设计和比较两个模型。所用的数据集是前面提到的五个峰的最大吸收量（ $P_n$ ）和同样五个波段的曲线下面积（ $AUC_n$ ）。测试的PLS模型遵循一般方程式1。

$$y = C + \sum a_{nn} \cdot x_n + \epsilon \quad (1)$$

其中C是模型的常数（截距的回归系数）， $x$ （ $P_n$ 或 $AUC_n$ ）和 $y$ （样本组成）分别代表自变量和因变量。而 $a$ 和 $\epsilon$ 分别代表自变量的系数和因变量的估计误差。线状模型是用Statgraphics Centurion XVI程序创建的、

### 2.3.2 人工神经网络

基于有监督的ANNs的模型被选择用于这项任务，因为它们能够在数据库中找到并成功解释自变量（ $P_n$ 或 $AUC_n$ ）和因变量（混合物组成）之间的非线性关系。这种特性使ANN能够同时处理不同的油类混合物（EVOO、大豆油和甜杏仁；纯油和二元/三元混合物），因此是实现本研究目标的潜在合适工具。这项工作选择的ANN类型是多层感知器（MLP），因为它在过去被用于类似的任务，获得可靠和准确的结果（Aroca-Santos等人，2016；Torrecilla等人，2013）。

MLPs是有监督的模型，需要标记的数据（输入和输出数据）来进行训练、优化和验证过程 [Demuth等人，2007]。如图3所示，MLP的结构被分为三个不同的租赁层。由节点组成的输入层负责将所有数据引入MLP模型，而由人工神经元组成的隐藏层和输出层负责将输入信号转化为经过数学处理的输出响应（Torrecilla, et al, 2013）。

实验方案提供了输入节点和输出神经元的数量，因为它们分别代表自变量（这里是AUC；图1）和因变量（这里是混合物中杏仁油或豆油的体积百分比；图1），并且是手动选择的。然而，隐藏层的神经元数量是一个相关的参数，必须对其进行优化以使MLP正常运行。这些隐藏神经元的数量过大会产生过度拟合的效果，而数量不足会导致模型的学习能力差（Nedic等人，2014；Cancilla等人，2014）。连续层内的元素通过称为“权重”的加权参数相互连接。这些是非常重要的



MLP模型的估计能力，因为优化权重意味着训练有素的MLP（Amani-Ghadim和Dorraj, 2015；Knoerzer等人，2011；Demuth等人，2007）。

#### 2.3.2.1. 优化多层感知器

必须对基于MLP的模型进行充分的优化，以实现准确、可靠和高效的估算工具（Rossi等人，2014）。这种优化包括两个不同的步骤：训练和验证过程。为了正确完成这一优化，原始数据库必须被随机分成两部分，即训练（较大比例的数据）和验证（相对较小比例的数据）数据集。这种划分必须考虑到MLP需要足够的信息来正确地训练网络，同时，它需要有代表性的样本数量来证明其泛化能力（Demuth等人，2007；Torrecilla等人，2013）。在训练阶段，训练数据集中的输入信息被提交给模型，并得到一个估计值。然后将这个结果与目标值进行比较，误差通过网络反向传播，允许修改权重以降低这个误差（Rossi等人，2014）。如果这个过程不停止，训练误差将渐进地趋向于零，得到训练数据的理想拟合。这将导致已经提到的过度拟合效应，无法为外部数据提供精确的估计。为了避免这种情况，需要进行验证步骤。验证数据被用来评估MLP模型的泛化能力，在这里，权重的值不会改变；它们保持固定，如果训练周期继续，最终会导致误差增加（Nedic等人，2014）。当验证错误增加时，训练过程被停止，权重被认为是优化的。因此，这两个过程（训练和验证步骤）的目标是提高MLP的精度，并减少估计的误差。

对于不在训练数据集内的数据，误差（以平均绝对误差计，MAE，公式2）。

$$AME(\%) = \frac{1}{n} \sum_{n=1}^n |r^n - y_n| \times 100 \quad (2)$$

其中 $n$ 代表评估的数据点数量， $r$ 是样本的真实值， $y$ 是基于MLP模型对相应样本的估计值。

在这个关键的优化过程之后，基于MLP的模型还有其他内在的参数需要进一步考虑和优化，然后模型才能完全优化并准备好正常运行。这些参数是训练函数、传递函数、隐藏神经元数量（HNN）和学习系数。

选择一个合适的训练函数是至关重要的，因为它控制着模型学习过程中的算法（Torrecilla等人，2008）。在用于设计MLP模型的软件中所有可用的训练函数中（见下文），由于提供了低估计误差，所以选择了贝叶斯正则化算法（TrainBR）（Demuth等人，2007；Torrecilla等人，2008）。这种算法在过去已经成功地用于类似的估计任务（Aroca -Santos等人，2016年），它因能够产生概括性良好的模型而闻名，同时促进了最佳MLP架构的定位（Demuth等人，2007年；Torrecilla等人，2008年）。

传递函数的目的是限制每个人工神经元提供的数学结果的窗口，避免由绝对值产生的偏差。在这项工作中，选择了sigmoid函数（Aroca -Santos等人，2016），这导致了0和1之间的结果，与原始归一化数据的限制相匹配（见下文）。

必须对HNN进行调整，直达到模型的最佳性能，为此，采用了启发式策略（Cancilla等人，2014），考虑到待优化的权重数量不应高于样本量的一半，以避免过度拟合效应。

最后，学习系数（ $L_c$ ）及其递减系数（ $L_{cd}$ ）和递增系数（ $L_{ci}$ ）使用基于"Box-Wilson中心综合设计 $2^3$ +星点"（Demuth等人，2007）的详尽实验设计进行了优化。 $L_c$ 与经典反向传播算法的学习系数相当（Palancar等人，1998），它分别通过 $L_{cd}$ 和 $L_{ci}$ 减少和增加，直到MLP模型的统计性能恶化。当计算的反向传播阶段发生时， $L_c$ 被模型采用，这发生在每个训练周期，导致权重值的变化，最终在这些周期结束时达到其最佳值。在实验设计中， $L_c$ 和 $L_{cd}$ 的测试值范围从0.001到1， $L_{ci}$ 从2到100（Aroca-Santos等人，2016）。

MLP模型的设计和优化是用MATLAB 7.0.1完成的，实验设计是用Statgraphics Centurion 16.1.18软件包进行的。

#### 2.3.2.2. 验证多层感知器

在MLP被正确优化后，通过 $k$ -fold交叉验证测试其泛化能力。 $k$ -fold交叉验证测试包括将整个数据库分离成 $k$ 个随机数据集，这些数据集被连续用作验证数据集。这样做的是为了让整个数据库成为验证数据集的一部分。

并评估模型在整个数据范围内的估计能力 (Cancilla等人, 2014; Joo等人, 2014)。

### 3. 结果和讨论

#### 3.1. 可见光谱学光谱

对于拍摄的每一个光谱, 从380到720纳米的每一个纳米的波长都有一个吸收值。换言之, 每次测量的总光谱数据点为340个。作为一个例子, 图2显示了EVOO和大豆油的双重混合的一些可见吸收曲线。图中的箭头表示EVOO的浓度在下降。该图清楚地表明, 随着豆油浓度的增加, 混合物的吸收率降低, 揭示了光谱结果和样品组成的关系 (图2中的光谱与补充资料表S1中编号为1、25、28、34和40的样品相对应)。这些光谱结果与EVOO和甜杏仁油的二元混合物相当。

可以看出, 吸收曲线显示了五个峰值, 对应于EVOO的色素, 主要是叶绿素和类胡萝卜素 (Ferreiro-Gonzalez等人, 2017; Tarakowski等人, 2014)。最有特点的是波长为670纳米的峰值, 代表叶绿素及其衍生物的吸收, 如叶绿素-a和叶绿素-b (Ferreiro-Gonzalez等人, 2017; Minguéz -Mosquera等人, 1991; Tarakowski等人, 2014)。另一方面, 420-500纳米范围内的吸收主要来自类胡萝卜素, 主要是叶黄素和 $\beta$ -胡萝卜素 (Ferreiro-Gonzalez等人, 2017; Tarakowski等人, 2014)。这些峰值提供了样品的相关信息, 它们的吸收值将被用于设计所有的

这里创建的模型。此外，图3显示了样品中使用的纯EVOO的可见光谱，其中指出了四个吸收峰。

最后，在图4中，显示了甜杏仁油和大豆油纯样品的光谱。从它们的形状和分析范围内的吸收值（380到720纳米）来看，可以解释为什么EVOO的吸收会随着杏仁和/或大豆油比例的增加而减少，因为这两种油的光谱拥有比研究的EVOO低得多的信号（图3）。

### 3.2. PLS 模型

共设计了四个线性PLS模型，通过其平均绝对误差（MAE，方程式2）来比较其结果。其中两个，一个用于二元混合物，另一个用于三元混合物，使用前面提到的五个峰的最大吸收量作为自变量，另外两个使用AUCs作为自变量。这些线性模型得到的结果见表1，可以看出，使用AUCs的二元混合物的MAE最低。

显然，在二元样品的情况下，测试的自变量和因变量之间存在线性关系。相反，在三元混合物的情况下，线性关系就不太行得通了。正因为如此，MLP模型将被应用，以试图找到输入和输出变量之间的最佳数学关系（见下文）。

### 3.3. MLP 模型

鉴于这些混合物的线性回归结果明显较差，所以只直接对三元混合物（也包括二元样品）进行了MLP模型，表1。值得注意的是，数据库中的变量在0和1之间被线性归一化，这与所采用的传递函数（sigmoid函数）提供的范围相匹配。另一方面，由于在PLS模型中使用AUC作为独立变量取得了最好的结果，这一信息也被用于MLP模型的设计中。按照上述程序，MLP模型的HNN、Lc、Ld和Lci值被优化。这些参数的最终值显示在表2中。

所有设计的模型的主要结果摘要见表3。可以看出，所有数据集和模型都取得了稳健的结果。在二元混合物的情况下，PLS模型得益于使用AUCs作为独立变量，而不是吸收峰（更好的统计性能）。这背后的原因可能是，与某些波长的单一吸收值相比，AUC变量中包含的内在信息更多。

另一方面，当比较线性（PLS）和非线性（MLP）模型估计三元混合物成分的结果时，MLP模型的表现更好（图1），在三元混合物中获得的豆油定量的MAE为2.80%，甜杏仁油的定量为2.78%（见表3）。与类似的PLS模型相比，MLP对豆油和杏仁油的估计的MAE分别低了31%和26%，这是一个明显的改进。

为了保证MLP的泛化能力，并充分验证最终的优化版本，已经进行了两个不同的过程。首先，为了防止学习阶段的过度拟合，已经进行了一个验证过程（见图1）。

表3中反映的结果)。一旦模型被优化,就进行了k-fold交叉验证( $k=6$ )。在这种情况下,数据库被随机分为六个部分,以便将每个数据集( $1/6$ 的数据)作为一个独立的验证集。通过这种方式,整个数据库被用来验证优化后的数学工具。k-fold交叉验证的主要结果显示在表4中。可以看出,统计结果稍差,但与表3所示的结果相当,从而在统计上验证了该模型。

在这项研究中,使用了单一批次的EVOO,这意味着不同EVO的光谱变化没有被考虑在内。然而,已经证明的是,通过一种直接和快速的方法可以准确地检测出独特的EVOO与不同类型的油(大豆和甜杏仁)的潜在污染,即使是三元混合物。这意味着EVOO生产商可以获得有用的工具,以确保他们的标签是可信的,他们的产品没有任何潜在的健康危害(如过敏反应)。

最后,应该指出的是,尽管在这项工作中,分析仅限于大豆和甜杏仁油,但只要其他污染油(非精炼或精炼)的可见光谱与被监测的EVOO不同,就可以开发新的工具,大大增加这种方法的适用性。

#### 4. 总结

总而言之,可见光光谱等相当直接和快速的分析技术与线性回归或MLP模型相结合,可以用来设计一种廉价的方法来快速量化三元食用油的含量。

混合物。根据统计结果，线性和非线性模型都可以用来估计大豆和甜杏仁油与特级初榨橄榄油的三元混合物中的浓度。然而，尽管基于人工神经网络的模型所需的计算能力较高，但它们提供了比线性模型更好的统计性能。从根本上说，用户可以根据他们的要求选择相应的算法。这些工具对食品行业可能非常重要，因为它们能够协助食品生产的质量控制阶段以及标签阶段，让消费者准确了解他们购买的是什么。此外，它还可以帮助预防在其消费过程中可能出现的过敏反应，避免潜在的严重健康威胁。

## 鸣谢

这项工作得到了马德里Complutense大学FEI项目的部分资助，项目编号为FEI-EU-17-03和FEI 16/123。

## 参考文献.

Abdallah, A, Ahumada, M.H., Gradziel, T.M. , 1998。来自不同基因型和加利福尼亚生产地区的杏仁核的油含量和脂肪酸组成。 *J. Am.Soc. Hortic.Sc.*1029-1033.

Abedi, E., Ali Sahari, M., Barzegar, M., Hossein Azizi, M., 2015.通过超声波处理优化大豆油的漂白，并研究漂白后的大豆油的物理化学特性。 *J. Food Sci. Tech.*50, 857-863.

Ahmad, Z., 2010.杏仁油的用途和特性。《临床实践中的补充疗法》杂志16, 10 -12。



Amani-Ghadim, A.R., Dorraji, M.S.S. , 2015.合成的氧化锌纳米粒子上的光催化过程建模：动力学模型开发和人工神经网络。 *J. Applied Catalysis B：环境* 163, 539-546.

Aroca-Santos, R., Cancilla, J. C., Matute, G., Torrecilla, J. S. , 2015。通过吸收光谱和非线性建模识别和量化皮夸尔品种特级初榨橄榄油中的掺杂物。 *J. Agric.Food Chem.*63, 5646-5652.

Aroca-Santos, R., Cancilla, J.C., Pariente, E.S., Torrecilla, J.S. , 2016.应用神经网络来描述含有精制橄榄油和特级初榨橄榄油的混合物。 *Talanta* 161, 304-308.

Cancilla, J.C., Wang, S.C., Díaz-Rodríguez, P., Matute, G., Cancilla, J.D., Torrecilla, J.S., 2014.通过神经网络将化学参数与感官小组的结果联系起来，以区分橄榄油的质量。 *J. Agric.食品化学*。 62, 10661-10665.

Chen, C.Y., Lapsley, K., Blumberg, J. A. , 2006.杏仁的营养和健康观点。 *J. Sci. Food Agric.*86, 2245-2250.

Demuth H., Beale M., Hagan M., 2007.与MATLAB®一起使用的神经网络工具箱用户指南。版本5。第九次印刷 为5.1版修订（2007b版），（仅在线）。

Ferreiro-Gonzalez, M., Barbero, G. F., Alvarez, J. A., Ruiz, A., Palma, M., Ayuso, J., 2017。用一种新的曲线解析方法结合可见光光谱对初榨橄榄油进行鉴定。 *食品化学* .220, 331-336.

Jain, A.K., Mao, J.C., Mohiuddin, K. M. , 1996.人工神经网络：一个教程。 *计算机*29, 31-44.

Jenkins, D.J., Kendall, C.W., Josse, A.R., Salvatore, S., Brighenti, F., Augustin, L.S., (2006)。杏仁减少健康人的餐后血糖、胰岛素血症和氧化损伤。 *J. Nutr.* 136, 2987-2992.

Joo, S.B., Oh, S.E., Sim, T., Kim, H., Choi, C.H., Koo, H., Mun, J.H., 2014.使用人工神经网络从足底压力预测步态速度。 *J. Expert systems with applications* 16, 7398 - 7405.

Knoerzer, K., Juliano, P., Roupas, P., Versteeg, C., 2011.创新的食物加工技术：多物理学模拟的进展。Wiley-Blackwell, Oxford, UK.

Kodad, O., 2006.杏仁树 ( *Prunus amygdalus Batsch* ) 基因改良计划中的新的自适应选择和评估标准。西班牙Lleida大学博士论文。

Lizhi, H., Toyoda, K., Ihara, I., 2010.用电介质光谱法鉴别掺杂了植物油的橄榄油。 *食品工程杂志* 96, 167 -171.

Menéndez, J.A., Vázquez-Martín, A., Colomer, R., Brunet, J., Carrasco-Pancorbo, A., García-Villalba, R., Fernández -Gutiérrez, A., Segura-Carretero, A., 2007。橄榄油的苦味原理可以逆转HER2过度表达的乳腺癌细胞对曲妥珠单抗 ( 赫赛汀 ) 的获得性自抗性。 *BMC. 癌症* 7, 80-98.

Minguez-Mosquera, I., Rejano, J.L., Gandul, B., Higinio, A., Garrido, J., 1991。初榨橄榄油中色素的相关性。 *J. Am. Oil Chem. Soc.* 68, 669-671.

Nedic, V., Despotovic, D., Cvetanovic, S., Despotovic, M., Babic, S., 2014.经典统计学方法和人工神经网络在交通噪声预测中的比较。 *J. Environment Impact Assessment Review* 49, 24 -30.

Palancar, M.C., Aragon, J.M., Torrecilla, J.S., 1998. 基于人工神经网络的pH控制系统。工业与工程化学研究 37, 2729 - 2740.

Rossi, P., Gayol, M. F., Renaudo, C., Pramparo, M. C., Nepote, V., Grosso, N. R., 2014. 使用人工神经网络建模来表示通过分子蒸馏浓缩乌贼油中的欧米伽3的过程。Grasas Aceites 65, 4.

Tarakowski, R., Malanowski, A., Kosciesza, R., Siegoczynski, R. M., 2014. VIS 光谱和压力引起的相变 - 追逐橄榄油的质量。食品工程杂志, 122, 28-32.

Torrecilla, J.S., Vidal, S., Aroca-Santos, R., Wang, S., Cancilla, J.C., 2015. 通过智能系统对单品种特级初榨橄榄油及其二元混合物的光降解的光谱测定。Talanta 144, 363-368.

Torrecilla, J. S., Aragón, J. M., Palancar, M. C., 2008. 通过选择训练函数优化人工神经网络。应用于橄榄油厂废弃物。工业。工程。Chem.Res. 47, 7072-7080.

Torrecilla, J.S., Aroca-Santos, R., Cancilla, J.C., Matute, G., 2016. 对光谱数据进行算法建模以量化来自不同植物产地的醋的二元混合物。Anal. 方法》8, 2786-2793.

Torrecilla, J.S., Cancilla, J.C., Matute, G., Diaz -Rodriguez, P., 2013. 在受保护的原产地名称框架内对橄榄油进行分类的神经网络模型。国际食品科学与技术杂志12, 2528 -2534.

Vasilescu, I., Eremia, S.A.V., Albu, C., Radoi, A., Litescu, S.C., Radu, G.L. , 2015.用电化学方法测定橄榄油的抗自由基特性 , 基于DPPH自由基。J. Food Chem.166, 324-329.

Visioli, F., Galli, C. , 1998.橄榄油的次要成分对心血管疾病的影响 : 新发现。  
*Nutr.Rev.*, 56, 142-147.

Wang, B., Cancilla, J.C., Torrecilla, J.S., Haick, H., 2014.人工传感智能与硅纳米线在气相中的超选择性检测。 *Nano Letters* 14, 933-938.

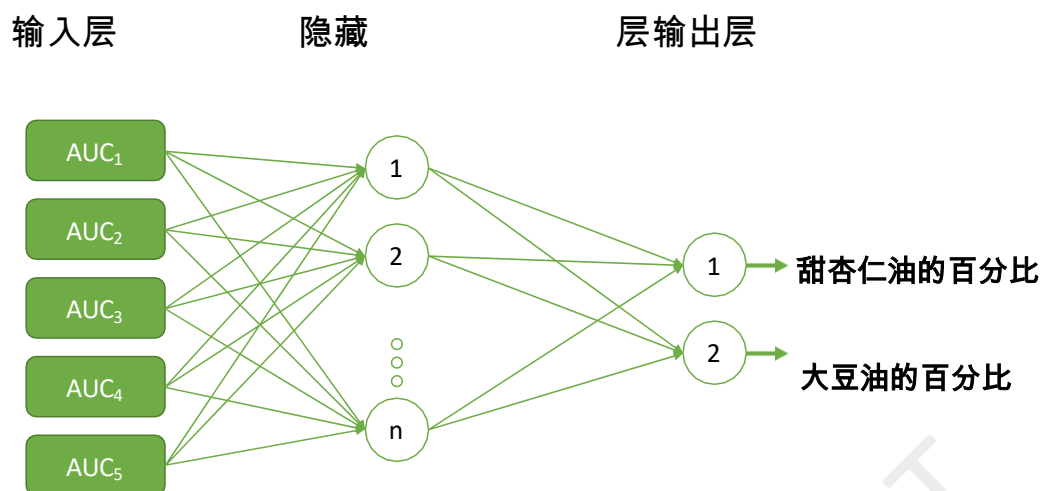


图1.所设计的MLP方案，其中AUC1.AUC5为自变量，甜杏仁油和大豆油在混合物中的体积百分比为因变量。

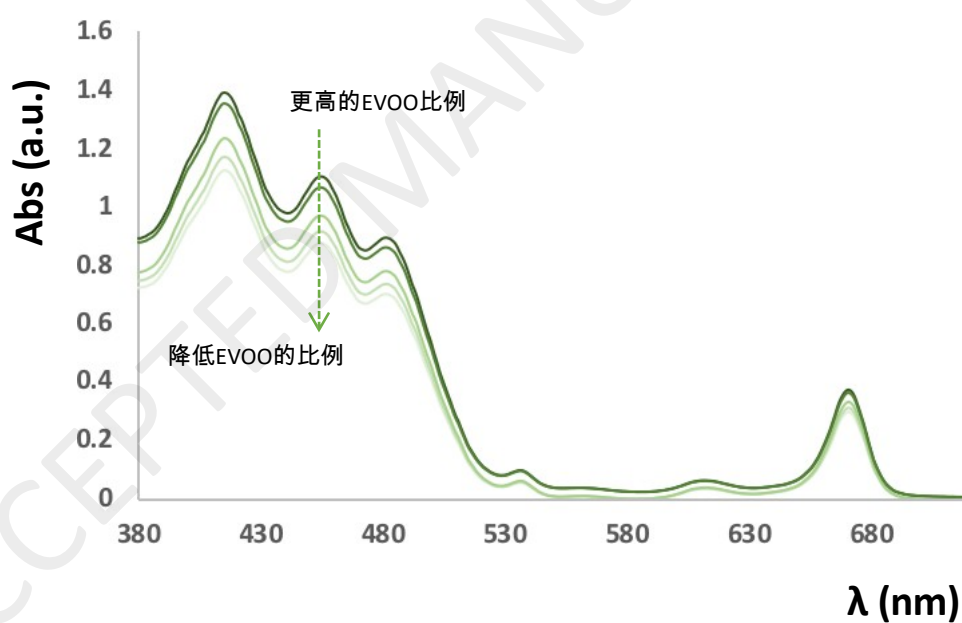


图2.不同的EVOO与大豆油的二元混合物的可见光谱。最深的绿线是纯EVOO；随着颜色变浅，大豆油的用量增加。

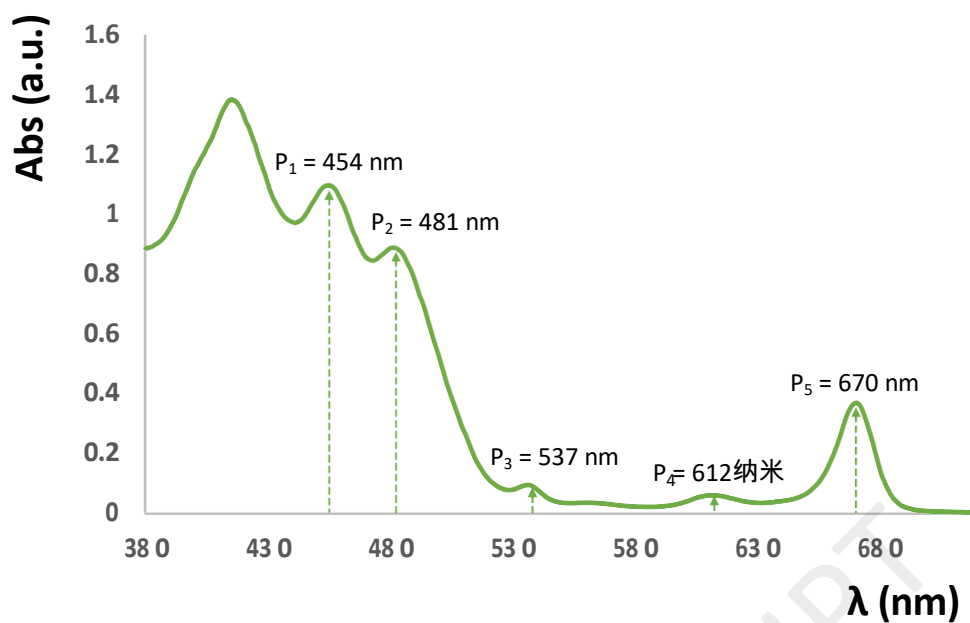


图3.纯净的特级初榨橄榄油（Arbequina，原产地保护名称 "Siruana"）样品的可见光谱和用于模型的吸收峰（P1-P5）。

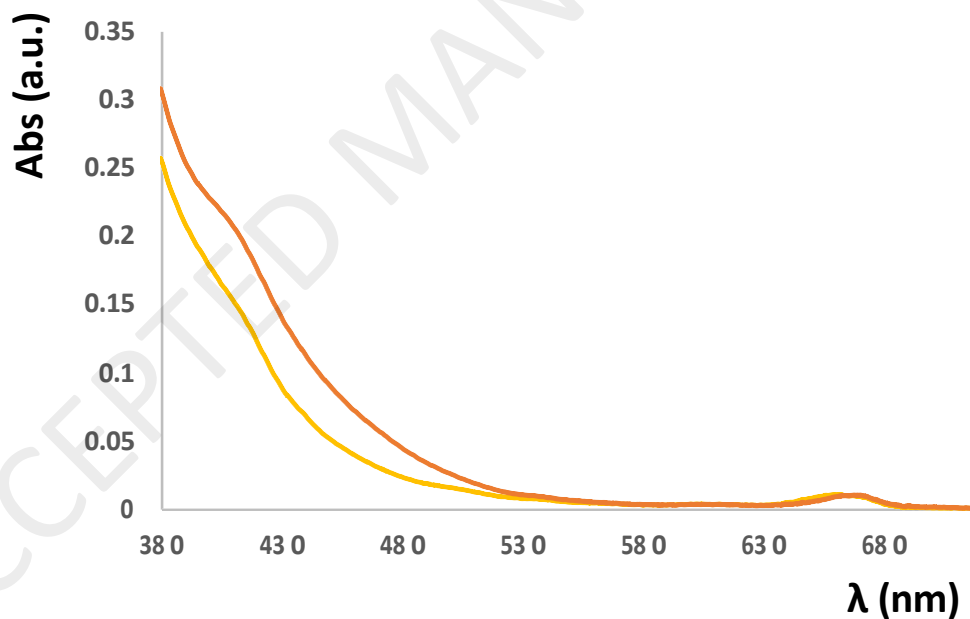


图4.纯大豆油（橙线）和纯甜杏仁油（黄线）样品的可见光谱。

表1.在线性PLS回归模型中获得的平均绝对误差 ( MAE )。

	MAE (%)			
	吸收峰		AUC	
	二进制	三元	二进制	三元
大豆油量 (%)	2.67	4.29	2.63	4.05
杏仁油量(%)	3.12	4.16	2.42	3.77

表2.MLP模型的优化参数。

HNN	10
Lc	0.9
Lcd	0.1
Lci	10

表3.PLS和MLP模型获得的统计结果摘要。

模型	数据集		MAE (%)	
			大豆油量	杏仁油量
辽宁省	吸收峰值	三元制	4,29	4,16
		二进制	2,67	3,12
	AUCs	三元制	4,05	3,77
		二进制	2,63	2,42
MLP	AUCs	二进制和三元制	2,80	2,78

表4.使用AUC作为独立变量的MLP模型的k倍交叉验证的统计结果摘要。

K-fold sets		MAE (%)	
		大豆 油量	杏仁 油量
	1	2.92	2.82
	2	3.08	2.88
	3	2.79	2.59
	4	2.69	2.37
	5	3.11	3.05
	6	3.15	3.31
	平均值	2.93	2.84