拉曼光谱与增量学习SVM结合的在线苹果香精快速检测方法

谱图融合与增量SVM学习结合的苹果香精在线检测方法

摘要：在苹果香精在线检测中，如何利用包含于由新增样本数据中的新的特征，高效地更新识别模型，以确保检测的准确是苹果香精在线检测的关键。研究表明：虽然不同批次的苹果香精的拉曼光谱走势基本一致，但是由于不同厂商配方和原料存在着化学成分的差异,导致它们的拉曼光谱之间存在一定的差别，通过增量学习SVM算法将不同批次样本数据中的特征引入分类模型，在不显著增加模型训练时间的前提下，可以有效地保持分类模型的准确性和效率。

关键词：拉曼光谱；增量学习；CCH-SVM；苹果香精；鉴别

1. 引言

食用香精香料是由各种天然或合成香料及许可使用的附加物调配的复杂化合物。由于各种原材料的差异

食用香精是由各种天然或合成香料及许可使用的附加物调配的，被现代食品行业用于改善、强化和模仿食品香气和香味的食品添加剂[1-2]，随着其使用范围与添加量的不断扩大，其安全性问题越来越引起人们的关注。因此，快速、准确地鉴别苹果香精的品牌和批次，对于食品安全具有十分重要的意义。

指纹谱图通过对样品进行整体采样，获得的谱图信息能够反映样品整体特征，适合于基质成分较复杂的样品进行鉴别。目前将指纹谱图与模式识别算法结合进行检测已被广泛应用于食品、药品等领域，并且获得了较好的准确率。

现代光谱分析技术,可充分利用全谱段或多波长下的光谱数据进行定性或定量分析。由于光谱分析技术具有速度快、效率高、成本低、测试重现性好、测量方便等特点,已经广泛应用于众多领域。

然后随着对产品质量监控的持续和广泛进行，产品生产过程中，批次之间的差异会对分类模型的准确率产生影响

通过传统模式识别算法训练而得分类模型

目前对苹果香精的检测方法主要包括用于检测折光指数、相对密度、酸度值、挥发成分总量等理化指标的气相色谱及气-质联用法、液相色谱法及液-质联用法【8】、薄层层析法、离子交换色谱法、分光光度法等，这些方法存在操作复杂、样品基质干扰较大、检测成本高以及效率底等问题。拉曼光谱技术是一种研究分子振动的光谱技术，为一种高速、便捷、无损的检测方法在化学检测、生物医学、药物、食品等领域受到越来越广泛的应用［3-7］。

本研究通过分析不同品牌和批次的苹果香精的拉曼光谱图特征及差异，通过主成份分析法选择特征，结合凸凹壳向量支持向量机算法，对苹果香精的10个品牌10个批次的样本数据进行增量学习。实验结果表明：识别效率

快速鉴别方面的研究。

中药材与中成药的药效成分复杂多样,传统的分析方法预处理繁琐.通常很难实现其品质监控的快速、实时在线检测。近年来,近红外光谱分析技术以其独特的优势应用于中药分析,显示了它在中药领域应用的巨大潜力。目前近红外光谱技术已经被广泛应用于中药质量的定性、定量及其过程分析中。

本研究提出一种将主成份分析（Principal Components Analysis, PCA）与凸凹壳向量支持向量机算法（Convex-Concave-Hull Support Vector Machine，CCH-SVM）混合的增量学习分类算法，结合拉曼光谱检测获取的苹果香精谱图，通过增量学习不断地将新训练样本中包含的新特征引入分类模型，从而提高识别的准确性和效率，研究结果对苹果香精的在线检测提供方法依据。

采用将拉曼谱图与凸凹壳向量支持向量机算法（Convex-Concave-Hull Support Vector Machine，CCH-SVM）结合，

拉曼

1. 实验材料、设备与方法
2. 模型建立及分析结果
3. 结束语

参考文献

1. 刘玉平,孙宝国. 我国食用香料香精的基本状况与发展趋势[J]. 食品科学,2004,(10):373-375. [2017-09-28].
2. 孙宝国,田红玉,刘玉平,谢建春,郑福平. 食品香料香精对食品安全的影响[J]. 现代科学仪器,2006,(01):49-51. [2017-09-28].
3. 孔梦红,吴杜轩,陈相柏. 拉曼光谱定性和定量检测青蒿素研究[J]. 光谱学与光谱分析,2017,37(03):778-782. [2017-09-28].
4. 朱颖洁,郭磊,刘易,龚莹,邱泽武,吴剑峰,谢剑炜. 基于壳层隔绝纳米粒子和在线裂解-吹扫捕集的血液氰化物表面增强拉曼光谱快速检测方法[J]. 分析化学,2017,45(05):627-632. [2017-09-28].
5. 赵迎,李明,肖兹兰,任立志,王雷. 基于拉曼光谱快速鉴别新陈大米的方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2016,36(S1):303-304. [2017-09-28].
6. 周秀军. 基于拉曼光谱的食用植物油定性鉴别与定量分析[D].浙江大学,2013.
7. 周秀军,戴连奎,李晟. 基于拉曼光谱的食用植物油快速鉴别[J]. 光谱学与光谱分析,2012,32(07):1829-1833. [2017-10-06].
8. 翟晨,彭彦昆,李永玉,DHAKAL Sagar,徐田锋,郭浪花. 基于拉曼光谱的苹果中农药残留种类识别及浓度预测的研究[J]. 光谱学与光谱分析,2015,35(08):2180-2185. [2017-09-28].
9. 李晶,徐济仓,李雪梅,周建光,朱岩,缪明明. 超高效液相色谱法同时测定香精香料中14种禁限用物质[J]. 色谱,2012,30(08):816-821. [2017-10-02].
10. 邓其馨,黄朝章,张建平,蔡国华,吴清辉,黄华发,许寒春,刘泽春,谢卫. 液相色谱串联质谱法测定烟用香精香料中的亚硝胺[J]. 现代食品科技,2014,30(01):195-199. [2017-10-02]. DOI：10.13982/j.mfst.1673-9078.2014.01.016
11. 李长于,李祖光,周示玉,叶丹凤,刘文涵. 气相色谱-串联质谱法测定香精香料中的香豆素和黄樟素[J]. 质谱学报,2011,32(05):265-270. [2017-10-02].
12. 孟冬玲,刘畅,李小兰. 离子液体双水相萃取-高效液相色谱法测定香精香料中的抗氧化剂[J]. 分析科学学报,2013,29(04):547-550. [2017-10-02].
13. 吴利敏. 近红外光谱法快速检测某些中药及中成药品质的应用研究[D].西南大学,2013.
14. 陈小康,孙素琴,李隆弟. 中药注射剂荧光光谱法的快速鉴别和热稳定性研究[J]. 分析化学,2002,(10):1168-1173. [2017-10-06].
15. 张慧敏,马书荣,王娜,张衍亮. 拉曼光谱法快速检测化妆品[J]. 分析仪器,2016,(01):33-37. [2017-10-06].