

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

二维相关光谱结合偏最小二乘法测定牛奶中的掺杂尿素

Detection of urea in milk using two-dimensional correlation spectroscopy and partial least square method

投稿时间: 2011-05-08 最后修改时间: 2011-11-10

中文关键词: [红外光谱](#),[尿素](#),[模型](#),[偏最小二乘法](#),[掺杂牛奶](#)

英文关键词: [infrared spectroscopy](#) [urea](#) [models](#) [partial least square](#) [adulterated milk](#)

基金项目:国家自然科学基金(60938002, 30900275)、高等学校博士学科点专项科研基金(20090032120064)

作者 单位

[杨仁杰](#) 1. [天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室, 天津 300072](#); 2. [天津农学院机电工程系, 天津 300384](#)

[刘 蓉](#) 1. [天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室, 天津 300072](#)

[徐可欣](#) 1. [天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室, 天津 300072](#)

摘要点击次数: **219**

全文下载次数: **105**

中文摘要:

为了检验牛奶中是否掺杂尿素并将其量化测定,配置含有尿素质量浓度范围为1~20 g/L之间40个牛奶样品,以掺杂物尿素浓度为外扰,分别研究了掺杂尿素牛奶的二维相关(近红外-近红外,中红外-中红外,近红外-中红外)光谱特性,在此基础上,分别选择随浓度变化大的4 200~4 800 cm⁻¹和1 400~1 704 cm⁻¹为建模区间,采用偏最小二乘法建立定量分析模型。研究表明:4 200~4 800 cm⁻¹建模分析效果优于1 400~1 704 cm⁻¹建模结果,其交叉验证均方根误差为0.266 g/L,对未知样品集预测相关系数达到0.999,预测均方根误差为0.219 g/L,这表明所建模型具有较好的预测效果。该方法无需样品处理,成本低,为快速判别牛奶是否掺杂提供了一种新的可能的方法。

英文摘要:

For the detection and quantification of urea in milk, pure milk samples and 40 adulterated milk samples added different contents of urea were prepared. Then 2D correlation (NIR-NIR, IR-IR, NIR-IR) spectroscopy under the perturbation of adulteration concentration was calculated and the spectra in the range of 4 200-4 800 cm⁻¹ and 1 400-1 704 cm⁻¹ were selected to construct the partial least square (PLS) calibration model, respectively. The PLS calibration model showed 4 200-4 800 cm⁻¹ was the better range for calibration performance and the root mean square errors of cross validation (RMSECV) of the model was 0.266 g/L. When using this model for predicting the urea contents in prediction set, the root mean square errors of prediction (RMSEP) was 0.219 g/L and the coefficient correlation of actual values and predicted values was 0.999, which means the model has good prediction ability. The method can be used for a correct discrimination on whether the milk is adulterated and provides a new and cost-effective alternative to test the adulteration of milk.

[查看全文](#) [下载PDF阅读器](#)

[关闭](#)

您是第**5150248**位访问者

主办单位: 单位地址: 北京朝阳区麦子店街41号

服务热线: 010-65929451 传真: 010-65929451 邮编: 100125 Email: tcsae@tcsae.org
本系统由北京勤云科技发展有限公司设计