

УДК 543.08

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИСУТСТВИЯ ОДНОГО ПИЩЕВОГО МАСЛА В ДРУГОМ ПО ИХ ИК-СПЕКТРАМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Чжан К. (ИТМО), Ситникова В. Е. (ИТМО)

Научный руководитель – кандидат химических наук, Ситникова В. Е. (ИТМО)

**Введение.** Контроль качества пищевых масел является одной из ключевых задач в пищевой промышленности. Современные методы инфракрасной (ИК) спектроскопии позволяют с высокой точностью анализировать состав масел, что особенно важно для выявления случаев фальсификации. Внедрение методов машинного обучения (МО) значительно расширяет возможности анализа, обеспечивая автоматизацию процессов и повышение точности предсказаний. В данном исследовании рассматривается применение ИК-спектроскопии в сочетании с методами машинного обучения для определения присутствия одного масла в другом [1-4].

**Основная часть.** Исходные данные включают ИК-спектры четырех типов пищевых масел: подсолнечное, рапсовое, оливковое и кунжутное масла, приобретенные в сетях продовольственного питания. Исследуемые масла были смешаны попарно с шагом 10%. ИК-спектры были получены на спектрометре в инфракрасном диапазоне с преобразованием Фурье «Bruker Tensor 37» по методике нарушенного полного внутреннего отражения, в среднем инфракрасном диапазоне  $4000\text{ см}^{-1} - 600\text{ см}^{-1}$ , с разрешением  $2\text{ см}^{-1}$  и усреднением по 32 сканам. В процессе предобработки данных выполняются следующие этапы: нормализация спектров (векторная нормировка); устранение шумов и выбросов. Для классификации масел и определения количества примеси одного масла в другом были использованы методы МО. Метод главных компонент (PCA) – применялся для выявления ключевых различий между спектрами и уменьшения размерности данных; Регрессия частичных наименьших квадратов (PLS) – использовался для количественного определения содержания одного масла в смеси; Метод k-ближайших соседей (k-NN) – для классификации образцов на чистые масла и их смеси.

**Выводы.** Разработанный метод, основанный на ИК-спектроскопии и методах машинного обучения, позволяет эффективно определять присутствие одного масла в другом. Наиболее точные результаты были получены при использовании искусственных нейронных сетей (ANN) и PLS-регрессии. [4]

### Список использованных источников:

1. Vesnin, V.L., Muradov, V.G. Application of infrared spectroscopy for the analysis of hydrocarbon mixtures. Ulyanovsk branch of the Institute of Radio Engineering and Electronics named after V.A. Kotelnikov of the Russian Academy of Sciences. 17.02.2014. p.6.
2. A review of chemometrics models to predict crude oil properties from nuclear magnetic resonance and infrared spectroscopy / M.K.Moro, F.D.dos Santos, G.S.Folli, W. Romão, P.R.Filgueiras // Fuel. – 2021. – V. 303. – P. 121283.
3. Motor oil classification by base stock and viscosity based on near infrared (NIR) spectroscopy data / R. M. Balabin, R. Z. Safieva // Fuel. – 2008. – V. 87. - P. 2745–2752.
4. Screening oil spills by mid-IR spectroscopy and supervised pattern recognition techniques / M.P. Gómez-Carracedo, R. Fernández-Varela, D. Ballabio, J.M. Andrade // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. – 2012. – V. 114. – P. 132-142.