

文章编号: 1001 - 9014 (2008) 03 - 0180 - 05

基于 LS-SVM 的红外光谱技术在奶粉脂肪含量无损检测中的应用

吴迪, 何勇, 冯水娟, 鲍一丹

(浙江大学生物系统工程与食品科学学院, 浙江 杭州 310029)

摘要:脂肪是奶粉中重要的组成部分, 实现对奶粉中脂肪含量的快速、无损检测十分重要, 为此研究了 $400 \sim 6666\text{cm}^{-1}$ 范围的红外光谱技术对不同品种奶粉的脂肪含量的无损检测. 采用最小二乘支持向量机 (LS-SVM) 对光谱透射率值和脂肪含量值进行建模. 模型在全红外波段范围对样本脂肪含量预测得到了较好的结果, 绝对系数 (R_p^2) 达到 0.9796, 预测误差均方根 (RMSEP) 为 0.8367. 预测结果要优于 BP 人工神经网络 (Back Propagation Neural Networks, BP-NN). 说明红外光谱技术能够实现奶粉脂肪含量的无损检测, 检测过程比化学检测方法简单快速, 操作性强. 文章同时还研究了分别基于中红外光谱范围和近红外光谱范围的建模. 模型预测结果显示分别基于中红外光谱和近红外光谱区域的模型预测效果都比全波段建模略差. 本研究为今后奶粉脂肪含量快速无损检测仪器的开发奠定了理论基础.

关键词:近红外 中红外光谱; 最小二乘支持向量机; 无损检测

中图分类号: O657.33 **文献标识码:** A

APPLICATION OF INFRARED SPECTRA TECHNIQUE BASED ON LS-SUPPORT VECTOR MACHINES TO THE NON-DESTRUCTIVE MEASUREMENT OF FAT CONTENT IN MILK POWDER

WU Di, HE Yong, FENG Shui-Juan, BAO Yi-Dan

(College of Biosystems Engineering and Food Science, Zhejiang University, Hangzhou 310029, China)

Abstract: Fat is an important component in milk powder. It is very important to detect the fat content in milk powder fast and non-destructively. To achieve this purpose, near and mid-infrared ($400 \sim 6666\text{cm}^{-1}$) spectroscopy technique was used and least-squares support vector machine was applied to build a fat prediction model based on infrared spectra transmission value. The prediction result obtained from our model is better than that obtained from the back propagation neural networks (BP-NN) while the determination coefficient for prediction (R_p^2) is 0.9796 and root mean square error for prediction (RMSEP) is 0.8367. It is concluded that infrared spectroscopy technique can detect the fat content in milk powder fast and non-destructively, and the process is simple and easy to operate. Moreover, the prediction results based on the whole infrared spectra were compared with those based only on near infrared spectra or mid-infrared spectra data. The results show that the performances of the model based only on mid-infrared spectra or near infrared spectra data are a little worse than those based on the whole infrared spectra data.

Key words: near/mid-infrared spectroscopy; least-squares support vector machines (LS-SVM); non-destructive measurement

引言

随着近年来奶粉消费量的上升,奶粉的品质越来越受到消费者的关注.脂肪是奶粉中重要的营养成分之一.脂肪的摄入量不当将会影响消费

者身体健康.现有的检测奶粉脂肪技术有罗兹哥特里 (Röse-Gottlieb)法和索氏提取法 (Soxhlet Extraction), 巴布考克法 (Babcock), 盖勃氏法 (Gerber), 色谱技术, 超临界 S-CO_2 萃取法^[1]等.这些方法虽然精度高,但操作复杂,耗时费力,并且

收稿日期: 2007 - 12 - 21, 修回日期: 2008 - 05 - 06

Received date: 2007 - 12 - 21, revised date: 2008 - 05 - 06

基金项目: 国家十一五科技支撑计划项目 (2006BAD10A0403); 国家自然科学基金项目 (30671213); 高等学校优秀青年教师教学科研奖励计划 (02411)

作者简介: 吴迪 (1984-), 男, 浙江大学生物系统工程与食品科学学院博士研究生.

会对奶粉造成破坏。

近红外光谱分析技术(Near Infrared Spectroscopy, NIRS)能够分析 $4000 \sim 12500\text{cm}^{-1}$ 左右范围内的光谱信息。NIRS的信息源主要是物质内部原子间振动的倍频与合频,其包含了反映物质特性的化学成分、分子结构和状态等信息。然而NIRS包含的光谱信息也存在吸收强度弱、谱峰宽、信噪比低、基团的倍频、合频信息重叠等不足,从而导致信息提取困难^[2]。即便如此,NIRS在物质品种鉴别等方面仍得到了广泛应用^[3,4]。

中红外光谱分析技术(mid-infrared spectroscopy, MIRS)的光谱信息范围约为 $400 \sim 4000\text{cm}^{-1}$ 。MIRS包含的信息量大,能够通过检测物质中不同化学功能团在特定波段的振动所引起的光谱吸收来检测食品中的各种成分^[5]。相比较而言,NIRS能够通过漫反射光纤方便地进行光谱的采集,整个操作过程简单,样品的准备工作也少^[5]。鉴于两者各有自己的优缺点,需要在具体实践中选择使用。Reid等比较了MIRS和NIRS在不同热处理和品种的苹果汁的检测^[2]。Brás等人比较了MIRS和NIRS在大豆粉上的建模能力^[6]。

光谱分析中的建模过程虽然需要花费一定的时间,但在具体检测过程中通过建立好的模型所耗费的时间很少。支持向量机(Support Vector Machine, SVM)由Vapnik于1998年提出^[7],通过一个来自最优化理论的学习算法训练,是在高维特征空间使用线性函数假设空间的学习系统。SVM将结构风险最小化准则(Structural risk minimization principle, SRM)代替传统的经验风险最小化原则(Empirical risk minimization principle, ERM)。最小二乘支持向量机(Least-squares support vector machine, LS-SVM)是在经典SVM的基础上的改进,以求解一组线性方程代替复杂的二次优化问题来获得支持向量(Support Vectors, SVs),降低了计算复杂性,加快了求解速度^[8]。LS-SVM能够进行线性和非线性的多元建模,能够在少量的训练样本中进行高维特征空间学习,是解决多元建模的一种快速方法。

本文将研究利用MIRS和NIRS在内的红外光谱信息,通过LS-SVM建立奶粉脂肪含量预测模型。文章将对在MIRS、NIRS以及MIRS与NIRS全光谱波段所建立的模型进行评估,并对LS-SVM模型与光谱数据分析常用的BP人工神经网络(Back Propagation Neural Networks, BP-NN)模型进行比较。

1 材料与方法

1.1 材料准备,光谱检测及脂肪测定

本实验研究的奶粉样本来自伊利公司,一共7类,分别为0~6个月婴儿奶粉、6~12个月婴儿奶粉、1~3岁婴儿奶粉、3~6岁婴儿奶粉、学生加锌奶粉、女士营养奶粉和全脂奶粉。光谱测量仪器是日本JASCO Model FT/IR-4000傅立叶红外光谱仪(Fourier Transform Infrared Spectrometer)。整个实验过程保持室内温度在25左右。为了增加透射率,将98%的溴化钾和2%的奶粉样本进行混合,然后通过一个手动的压片机将混合物压成直径约5mm,厚度2mm的圆柱体,放入光谱仪中进行透射率(T%)采集。每个样本采集40次,并对采集值取平均。每个品种的奶粉约采集60个样本,最后得到409个样本。采集到的光谱波数范围从 350cm^{-1} 到 7800cm^{-1} 。由于在检测范围边界存在一定的噪声,因此最终取 $400 \sim 6666\text{cm}^{-1}$ 光谱范围进行分析。脂肪含量的定义为通过油脂提取得到的所有脂肪酸含量总和。对每个样本的脂肪含量严格按照GB/T 5413.3—1997检测。脂肪含量测定值为每百克奶粉样本中的脂肪重量(g)。

1.2 最小二乘支持向量机(LS-SVM)

LS-SVM通过非线性映射函数 (\cdot) 建立回归模型,将输入变量映射到高维特征空间^[9]。然后将优化问题改成等式约束条件。利用拉格朗日乘子求解最优化问题,对各个变量求偏微分。根据Mercer条件,存在映射函数 (\cdot) 和核函数 $K(x_i, x_j)$ 使得:

$$(x_k)^T (x_l) = K(x_k, x_l), \quad k, l = 1, \dots, N \quad (1)$$

常见的核函数有线性核函数、多项式核函数、RBF(Radial Basis Function)核函数、多层感知核函数等。本文采用了RBF核函数,从而得到LS-SVM的函数估计为:

$$y(x) = \sum_{k=1}^N K(x, x_k) + b \quad (2)$$

当进行SVM或LS-SVM运算时,有三个关键问题需要解决:决定最优输入特征子集,合适的核函数和最佳核函数参数。而现今还没有系统的方法论来选择核函数。通过和其他核函数的比较,RBF核函数作为非线性函数能够减少训练过程中计算的复杂性,因此RBF核函数被用于本文的LS-SVM计算中。RBF核函数参数的选择采用二步格点搜索法(Grid Searching Technique)和留一法(Leave One Out Cross Validation)相结合对调整参

数和 RBF核函数参数 σ^2 (σ^2) 进行选择. 决定了 SRM 和 ERM 之间的平衡, 对改进 LS-SVM 模型非常重要. σ^2 则控制函数回归误差, 并且直接影响初始的特征值和特征向量. σ^2 过小会导致大量的回归量的产生, 并且最终导致过拟合. 相反, σ^2 过大会导致回归量的减少, 模型过于简单, 从而影响预测精度. 此外, σ^2 还关系到 LS-SVM 模型对输入变量噪声的灵敏度.

2 实验结果与分析

2.1 光谱图谱分析 (NIR&MIR)

从每个品种随机选择一个样本分别绘制 MRS 区域和 NRS 区域的奶粉的光谱透射率曲线图 (图 1). 从图 1 分析可以看到在近红外部分各条曲线整体趋势相对一致, 呈平行关系. 在近红外区域有几条明显的吸收峰, 其中在 4329cm^{-1} 处左右的吸收峰为脂肪的吸收带, 4312cm^{-1} 处左右为蛋白质的吸收峰, 在 5155cm^{-1} 处的为水的吸收峰^[10]. 不同的是在 MRS 区域不同曲线间的差异性较大 (图 1). 在 1747cm^{-1} , 2854cm^{-1} 和 2925cm^{-1} 处左右脂肪的吸收峰比较明显, 而 1160cm^{-1} 处的脂肪吸收峰和 1250cm^{-1} 处的 C-O 键吸收峰相互重叠^[11].

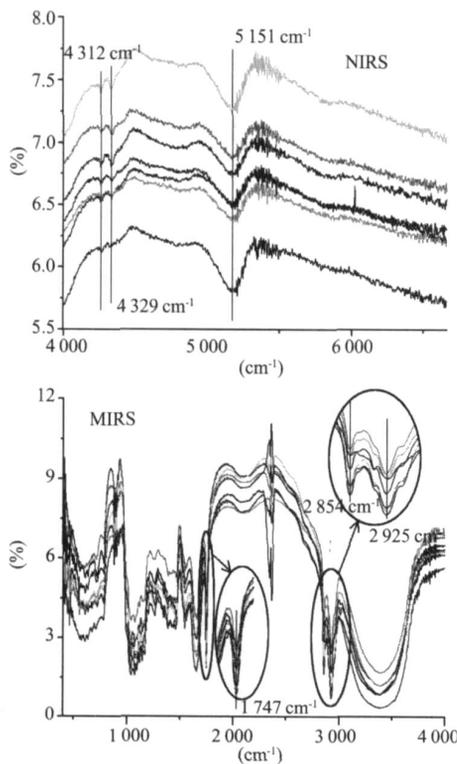


图 1 不同品种奶粉在近红外及中红外光谱透射率曲线
Fig 1 NRS and MRS transmission rate of different varieties of milk powder

表 1 主成分的累计可信度

Table 1 The reliabilities of principal components						
主成分 Principal component	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6
累计可信度 Reliabilities	91.60%	95.77%	98.11%	98.96%	99.50%	99.69%
主成分 Principal component	PC7	PC8	PC9	PC10	PC11	PC12
累计可信度 Reliabilities	99.76%	99.80%	99.83%	99.86%	99.88%	99.90%

2.2 主成分分析

由于测量到的光谱数据在 $400 \sim 6666\text{cm}^{-1}$ 的范围内共得到 6500 个透射率值, 也就是得到了 6500 个输入变量. 虽然这些输入变量能够作为输入值进行 LS-SVM 建模. 但是为了提高建模运算速度, 减少运算量, 本文通过主成分分析 (Principle Component Analysis, PCA) 对原始光谱输入变量进行降维压缩. 主成分数的选择非常重要, 如果建立模型使用主成分数过少, 就不能反映未知样品被测组分产生的测量数据变化, 其模型的预测能力就会降低; 如果选择的主成分数过多, 就会将一些代表噪声的主成分加入到模型中, 同样会使模型的预测能力下降. 经主成分分析光谱数据后得到前 10 个主成分累计贡献率如表 1 所示. 本文分别用 4 至 12 个主成分进行 LS-SVM 建模. 通过比较基于不同主成分数建立的预测模型精度, 最终确定主成分数为 8 时最优, 并将这 8 个主成分作为输入变量, 进行 LS-SVM 建模.

2.3 LS-SVM 建模及预测

实验得到的 409 个奶粉样本被分为两部分, 其中 339 个样本用于 LS-SVM 模型的建立, 剩下的 70 个样本 (每种奶粉 10 个样本) 作为预测样本. 本研究中采用了二步格点搜索法 (Grid Searching Technique) 对参数 σ^2 和 γ 进行选择. 为了在选择中有适当的增量, σ^2 的选择范围为 $2^{-1} \sim 2^{10}$, γ 的选择范围为 $2 \sim 2^{15}$. 范围的选择是按照先前的研究得到的. 在参数的最优选择过程中, 将每组 σ^2 和 γ 的组合所得到的训练集交叉验证误差均方根 (Root Mean Square Error of Cross-validation, RMSECV) 最小值为指标, 在两参数张成的平面内进行搜索. 寻优过程由粗选和精选两个步骤组成: 粗选格点数 10×10 , 如图 2 中 “·” 所示, 搜索步长较大, 采用误差等高线确立最优参数范围; 精选格点数仍为 10×10 , 如图 2 中 “×” 所示, 在粗选基础上, 以较小步长更加细致地搜索, 确定最优模型参数. 对 σ^2 和 γ 作对数处理, 寻优过程与结果如图 2 所示. 最优的 σ^2 和 γ 分别为 55.1680 和 19.5531. 为了评估 LS-SVM 模型检测奶粉脂肪含量的鲁棒性, 计算了预测结果的绝对系数 (R_p^2) 和预测误差均方根 (Root Mean Square Error for Prediction,

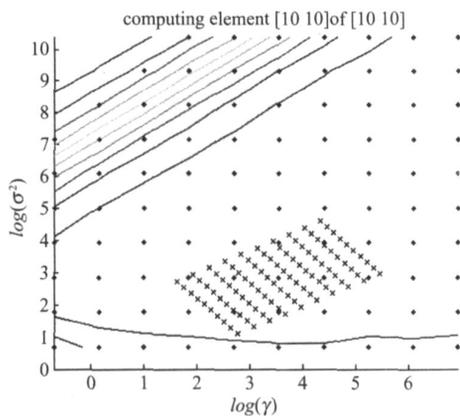
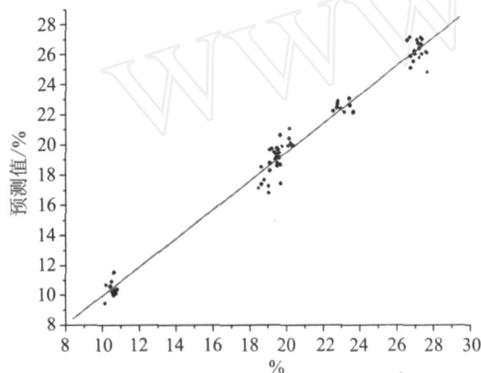
图2 和 σ^2 的寻优Fig 2 Grid search on γ and σ^2 

图3 LS-SVM模型预测结果

Fig 3 Reference vs predicted values

RMSEP). 最终 LS-SVM 预测结果如图 3 所示, 其中 R_p^2 为 0.9796, RMSEP 为 0.8367.

BP-NN 作为一种常用的光谱数据处理算法对和 LS-SVM 模型相同的样本集进行脂肪含量的预测. BP-NN 的建模部分同样采用 339 个样本, 预测部分为 70 个样本. 和 LS-SVM 一样, BP-NN 同样采用经过 PCA 获得的 8 个最优主成分作为神经网络输入. BP-NN 采用一个隐含层, 结点数为 9. Sigmoid 为传递函数. 将 BP-NN 的预测结果同 LS-SVM 模型得到的结果进行比较 (表 2). 从 R_p^2 和 RMSEP 的比较中, 可以看到 LS-SVM 模型在近红外和中红外波段对奶粉脂肪检测的能力要优于 BP-NN 模型, 说明 LS-SVM 是一个很强的回归模型建立工具.

2.4 NIRS 和 MIRS 模型比较

本文同时采用 LS-SVM 模型分别对 MIRS 范围和 NIRS 范围的光谱透射率进行奶粉脂肪检测. 样本设置和 LS-SVM 建模方法都与全波段范围 LS-SVM 建模一样. 得到预测结果如表 2 所示.

表 2 基于不同光谱范围的 LS-SVM 和 BP-NN 模型预测结果

Table 1 The performance of LS-SVM and BP-NN model based on different spectra ranges

方法	光谱范围	σ^2	R_p^2	RMSEP
BP-NN	MRS&NRS(400~6667 cm^{-1})	/	/	0.9605 1.6939
	MRS&NRS(400~6667 cm^{-1})	55.1680	19.5531	0.9796 0.8367
LS-SVM	MRS(400~4000 cm^{-1})	82.2551	11.8963	0.9556 1.6668
	NRS(4000~6667 cm^{-1})	119.377	9.5405	0.9466 2.4346

从 LS-SVM 建立的模型预测结果可以看到, 基于中红外波段建立的模型预测效果要优于近红外部分建立的模型. 通过分析原始光谱投射图可以看到, 中红外区域的曲线要比近红外的复杂, 并且有数个明显表征脂肪的波峰波谷. 而在近红外区域, 各个曲线之间的主要不同为相互间的偏移, 并且每条曲线的噪音都比较大, 这些特征都无助于模型的建立. 而在中红外区域, 曲线都相对较光滑, 没有太大的噪音, 并且不同曲线之间的差异也较大. 这主要是因为中红外区域是近红外波段的基频部分, 中红外区域比近红外区域提供了更多的物质基频信息, 而近红外主要以物质的倍频和合频为主. 虽然用肉眼分析光谱透射曲线同样难以在中红外区域对奶粉的脂肪含量进行定量分析, 但是中红外区域的曲线包含了很多能够反应奶粉脂肪含量的信息, 并且实践证明通过 LS-SVM 能够将这些信息提取出来用于建立奶粉脂肪含量的预测模型.

此外基于 MRS 和 NRS 波段模型的建模效果都要略低于全波段, 尤其是两者的 RMSEP 值都明显大于全波段的值. 因此基于全波段红外光谱透射率数据的 LS-SVM 奶粉脂肪含量预测模型最优. 然而分别基于 MRS 和 NRS 范围的模型效果也可以满足日常人们对奶粉脂肪含量检测的需要, 并且基于全波段建模数据处理量大, 仪器成本也较高. 因此模型建立的光谱范围应基于实际应用条件进行选择.

3 结论

基于近红外及中红外光谱技术对奶粉的脂肪含量检测进行了研究. 采用 LS-SVM 模型进行建模, 在全波段红外光谱透射率值的建模效果最优. 说明红外光谱方法能够实现对奶粉脂肪含量快速、无损检测. 检测过程比常用的化学方法简单, 操作性强. 本研究为今后奶粉脂肪含量快速无损检测提供了新的方法. 本工作下一步将研究红外光谱技术在奶粉脂肪含量检测的应用, 寻找利于仪器开发的敏感波段, 扩充奶粉品种和样本数量, 并进一步完善建模方法.

REFERENCES

- [1] Rosenthal I, Baruch R. 100 years of measuring the fat content of milk [J]. *Journal of Chemical Education*, 1993, **70** (6): 480—482.
- [2] Reid L M, Woodcock T, O'Donnell C P, et al. Differentiation of apple juice samples on the basis of heat treatment and variety using chemometric analysis of M R and N R data [J]. *Food Research International*, 2005, **38**: 1109—1115.
- [3] HE Yong, LI Xiao-Li. Discrimination of varieties of waxberry using near infrared spectra [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (何勇, 李晓丽. 近红外光谱杨梅品种鉴别方法的研究. 红外与毫米波学报), 2006, **25** (3): 192—194, 212.
- [4] HUANG Min, HE Yong, HUANG Lin-Xia, et al. Discrimination of varieties of silkworm egg based on visible-near infrared spectra [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (黄敏, 何勇, 黄凌霄, 等. 基于可见近红外光谱技术的家蚕蚕种鉴别方法的研究. 红外与毫米波学报), 2006, **25** (5): 342—344, 359.
- [5] Wang L, Lee F S C, Wang X R, et al. Feasibility study of quantifying and discriminating soybean oil adulteration in camellia oils by attenuated total reflectance M R and fiber optic diffuse reflectance N R [J]. *Food Chemistry*, 2006,

95: 529—536

- [6] Brás L P, Bernardino S A, Lopes J A, et al. Multiblock PLS as an approach to compare and combine N R and M R spectra in calibrations of soybean flour [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2005, **75**: 91—99.
- [7] Vapnik V N. *Statistical Learning Theory* [M]. John Wiley and Sons Inc: New York, 1998.
- [8] Suykens J A K, Van Gestel T, De Brabanter J, et al. *Least Squares Support Vector Machines* [M]. World Scientific Publishing: Singapore, 2002.
- [9] Zhu J Y, Chen K T, Zhang H X. Study of least squares support vector machines [J]. *Computer Science* (朱家元, 陈开陶, 张恒喜. 最小二乘支持向量机算法研究. 计算机科学), 2003, **30** (7): 157—159.
- [10] YAN Yan-Lu. *Basic and Application of Near Infrared Spectroscopy Analysis* [M]. Beijing: China Light Industry Press (严衍禄. 近红外光谱分析基础与应用. 北京: 中国轻工业出版社), 2005, 369.
- [11] Zhou Q, Sun S Q, Yu L, et al. Sequential changes of main components in different kinds of milk powders using two-dimensional infrared correlation analysis [J]. *Journal of Molecular Structure*, 2006, **799**: 77—84.

(上接 171 页)

相关的缺陷偶极子的具体构型,包括组成缺陷偶极子的荷电单元和偶极矩的大小等。

4 结论

同均一相 PZT 薄膜材料相比,由致密层和多孔层交替排列形成的近周期 PZT 多层膜具有铁电、介电增强效应。在 500 kV/cm 的极化电场下,多层膜的平均剩余极化强度高达 $42.3\ \mu\text{C/cm}^2$,矫顽场仅为 43 kV/cm 。较大的膜厚和多孔结构有助于释放膜内张应力,从而使 PZT 多层膜的极化强度增强;PZT 多层膜的室温低频表现巨介电常数主要来自空间电荷极化的贡献;与氧空位相关的极性缺陷复合体对交变电场的响应很可能是 PZT 多层膜高频介电损耗峰的微观起因。

REFERENCES

- [1] LI N TIE, SUN Jing-Lan, MENG Xiang-Jian, et al. Ferroelectric film thickness dependence of infrared detector with an SiO_2 aerogel thermal insulation layer [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (林铁, 孙兰, 孟祥建, 等. 用 SiO_2 气凝胶做隔热层的铁电薄膜红外探测器性能与铁电薄膜厚度的关系. 红外与毫米波学报), 2007, **26**: 329—331.
- [2] Hu G J, Chen J, An D L, et al. Fabrication of ferroelectric $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$ multilayers by sol-gel process [J]. *Appl Phys Lett*, 2005, **86**: 162905—162907.
- [3] Hu G J, Hong X K, Chu J H, et al. Ferroelectric and optical properties of quasiperiodic $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$ multilayers grown on quartz wafers [J]. *Appl Phys Lett*, 2007, **90**: 162904—162906.

- [4] HU Gu-Jin, HONG Xue-Kun, CHEN Jing, et al. Formation mechanism of periodical ferroelectric multilayers with high optical reflectivity [J]. *J. Infrared Millim. Waves* (胡古今, 洪学鹂, 陈静, 等. 高反射率周期性铁电多层膜形成机理研究. 红外与毫米波学报), 2007, **26** (2): 89—91.
- [5] Hu G J, Hong X K, Sun J L, et al. Peculiar ferroelectric and dielectric properties of quasiperiodic $\text{PbZr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6}\text{O}_3$ multilayers [J]. *New J. Phys*, 2006, **8**: 386 (1—7).
- [6] Kumazawa T, Kumagai Miura Y H. Effect of external stress on polarization in ferroelectric thin films [J]. *Appl Phys Lett*, 1998, **72**: 608—610.
- [7] Kui Y, Yu Sh H, Francis E T, et al. Residual stress analysis in ferroelectric $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3$ thin films fabricated by sol-gel process [J]. *Appl Phys Lett*, 2003, **82**: 4540—4542.
- [8] Wei Chuan Goh, Kui Y, Ong C K. Pseudo-epitaxial lead zirconate titanate thin film on silicon substrate with enhanced ferroelectric polarization [J]. *Appl Phys Lett*, 2005, **87**: 072906—072908.
- [9] Pike G E, Warren W L, Dimos D, et al. Voltage offsets in $(\text{Pb},\text{La})(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ thin films [J]. *Appl Phys Lett*, 1995, **66**: 484—486.
- [10] Chen Ang and Zhi Yu. Dielectric behavior of $\text{PbZr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48}\text{O}_3$ thin films: Intrinsic and extrinsic dielectric responses [J]. *Appl Phys Lett*, 2004, **85**: 3821—3823.
- [11] Erbil A, Kim Y, and Gerhardt R A. Giant permittivity in epitaxial $\text{PbTiO}_3/\text{Pb}_{1-x}\text{La}_x\text{TiO}_3$ heterostructures [J]. *Phys Rev Lett*, 1996, **77**: 1628—1631.
- [12] Lunkenheimer P, Bobnar V, Pronin A V, et al. Origin of apparent colossal dielectric constants [J]. *Phys Rev B*, 2002, **66**: 052105 (1—4).
- [13] Steinsvik S, Bugge R, Gjonnes J, et al. The defects structure of $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{TiO}_{3-y}$ investigated by electrical conductivity measurements and electron energy loss spectroscopy (EELS) [J]. *Phys Chem. Solids*, 1997, **58**: 969—976.