红外光谱结合化学计量学在食品检测中的应用

张芳, 周昊, 徐寸发, 徐蓉, 徐为民* (江苏省农业科学院中心实验室, 江苏南京 210014)

摘要 综述了红外光谱分析技术在食品定性和定量检测研究中的进展, 主要包括品质检测、真假判别、品种判别、产地判别等方面, 以期作为食品行业的检验分析工作者在引进傅立叶红外光谱仪时提供参考。最后根据研究现状分析了该技术应用于食品检测存在的问题, 并展望了其在我国食品检测中的应用前景。

关键词 红外光谱; 化学计量学; 食品检测; 定性; 定量

中图分类号 TS207.3 **文献标识码** A **文章编号** 0517-6611(2018)12-0023-04

Application of Infrared Spectroscopy Combined with Chemometrics in Food Detection

ZHAGN Fang, ZHOU Hao, XU Cun-fa et al (Central Laboratory, Jiangsu Academy of Agricultural Sciences, Nanjing, Jiangsu 210014)

Abstract The progress in quantitative and qualitative analysis of food by infrared spectroscopy is reviewed. The application of this methods to food testing refers to several aspects, such as quality control analysis, distinguish true and false, breed discrimination and detection of adulteration, in order to provide the reference for workers who working in the industry of food testing when introduced Fourier infrared spectrometer. Furthermore, problems in applications are analyzed and the future development trends are prospected.

Key words Infrared spectroscopy; Chemometrics; Food detection; Qualitative analysis; Quantitative analysis

食品是人类生命活动重要的能量来源, 其主要成分是水、碳水化合物、蛋白质和脂肪, 以及其他一些以低浓度存在的成分(如维生素、矿物质等)。而不同种类食品, 或同种食品不同品种、不同产地, 其品质、营养价值、价格也不同。近年来, 食品安全事件频繁发生, 如以次充好、以假乱真、产品不过关等问题, 不仅损害了消费者利益, 甚至严重威胁人体健康, 同时也影响了食品行业的有序发展, 这使得食品检测日益重要。一般的食品检测方法主要有: 液相色谱、液相色谱-质谱法、气相色谱^[1-4]等, 虽然这些检测手段都能满足食品检测定性定量的要求, 应用也很广泛, 但是检测样品前处理繁琐、检测周期长、成本较高, 限制了其应用, 也制约了食品检测速度, 不利于食品检测的发展。近年来, 红外光谱技术在食品检测行业的引入, 为这类问题的解决提供了新的思路和方法。

红外光谱作为四大光谱之一, 通过红外特征光谱表征物质的分子结构, 被广泛应用于化工、医药、石油、高分子等领域^[5-8]。红外光谱技术应用于食品检测虽然较晚, 但由于其分析速度快、操作成本低, 样品前处理简单, 具有环保、高效的特点, 推进了食品检测行业的发展, 显示出很好的应用前景。但是, 高含水量的样品中含量低于 0.1% 的成分利用红外光谱是很难检测出的, 所以通常食品样品的红外光谱是以检测主要成分(水、碳水化合物、蛋白质和脂肪)为主^[1]; 同时, 食品的不均匀特性导致了光谱的复杂性, 光谱中的微小差别不能被有效识别, 因此直接单独运用红外光谱进行食品检测也存在较大局限。随着化学计量学的发展, 化学计量学方法被引入红外光谱数据处理领域, 在数据分析方面发挥出独特优势, 化学计量学为化学测量提供理论和方法, 为数据的解析、优化提供了新途径。化学计量学应用于红外光谱, 主要

表现在 3 个方面: 一是光谱数据预处理; 二是为红外光谱技术的定性或定量方法, 建立稳定可靠的分析检测模型; 三是用于校正模型的传递, 也叫红外光谱仪器的标准化, 实现校正模型的共享。基于与化学计量学的结合, 红外光谱分析技术在食品定性和定量分析过程中具有无可比拟的优势, 分析过程的投资及操作费用低, 可同时进行定性定量分析, 分析过程无损样品、零试剂、零污染环境。目前的食品监督管理中, 红外光谱结合化学计量学技术已是一种常规的检测工具, 在保证食品质量的一致性, 提高食品生产过程的可控性和食品的均一性方面起到很大作用。

1 定性鉴别

分子中不同的特征基团的振动能级的能量差有区别, 所以会吸收不同波段的电磁辐射, 因而在光谱上表现出不同位置的吸收峰, 相同特征基团的能级的能量差基本相同, 吸收峰的位置相对固定, 这是红外光谱定性分析的依据。由于同类样品具有相近的光谱吸收, 在分析过程中, 运用化学计量学方法将红外光谱或压缩的变量组成一个多维的变量空间, 同类物质在该多维空间位于相近的位置。未知样品的分析过程就是考察其光谱或压缩的变量是否位于某类物质所在的空间。其主要的分析过程是: 采集已知样品的光谱; 用一定的数学方法处理采集到的光谱, 生成定性判据; 用该定性判据判断未知样品属于哪类物质所在的空间^[9]。红外光谱结合化学计量学在食品检测定性方面的应用主要表现在: 产地鉴别, 品种鉴别, 易混淆、真伪鉴别, 品质分析研究等方面。

1.1 产地鉴别 不同地域来源的食品原料受气候、环境、地质等因素的影响, 其组织中化学成分、物质含量存在差异, 其相应的光谱也存在细小差别。目前, 红外光谱技术应用于食品产地溯源方面, 欧盟研究起步较早, 我国在此方面的研究相对较晚, 但近年来研究发展迅速。

在对羊肉产地进行分析时, 张宁等^[10]利用近红外光谱结合簇类独立软模式(SIMCA)识别方法对 4 个产地羊肉分别建立类模型, 基本实现了对 4 个产地羊肉的有效识别, 对

基金项目 江苏省农业科学院院基金项目(6111691)。

作者简介 张芳(1989—), 女, 江苏徐州人, 硕士研究生, 研究方向: 仪器分析。* 通讯作者, 副研究员, 从事仪器管理方面的研究。

收稿日期 2018-01-29

其他产地羊肉识别时,拒绝率达到100%。表明近红外光谱结合SIMCA模式识别方法在羊肉产地溯源中具有可行性,为解决羊肉安全问题提供了一种新的思路。朱哲燕等^[11]基于中红外光谱分析技术结合化学计量学方法,对香菇的产地识别进行研究,对3 581~689 cm^{-1} 光谱和全谱分别建立多种不同模型进行分析,发现不同模型识别效果不同,基于相关向量机(RVM)能够被更有效地应用于中红外光谱识别香菇产地的研究。说明并不是任何一种化学计量学方法建立的模型都能达到预期的试验目的,可建立多种模型进行比较,选择最合适可靠的化学计量学方法。

在对数据进行建模分析前应用化学计量学方法对数据进行预处理,消除非目标因素对光谱数据的影响,可以达到更好的试验效果。张文海等^[12]在利用FTIR对7种糯米进行产地识别时,借助特征波长的有效选择、Savitzky-Golay多项式平滑法、基线校正及SNV等方法对原始光谱进行预处理,然后结合基于主成分分析(PCA)的SIMCA模式识别方法对7种糯米分别建模,有效识别所考察的糯米,充分展示了FTIR结合SIMCA法识别糯米产地的可行性。李仲等^[13]利用傅立叶变换红外光谱,测定了来自青海省不同产地的枸杞样品的红外光谱。通过小波变换的方法压缩光谱变量,结合BP神经网络建立青海枸杞产地鉴别模型,该模型对柴达木盆地产地鉴别预测效果很好,还能鉴别伪劣枸杞或枸杞制成品,正确识别率达到100%,有较大的实用性,适合无损快速鉴别应用。

1.2 品种鉴别 稻米是黄酒发酵的主要原料,稻米品质特性的不同导致所酿造的黄酒特性也有一定差异。采集自制黄酒的红外光谱图,选取波数975~1 165和1 250~1 500 cm^{-1} 作为特征向量,建立以大米品种为分类标准的SIMCA识别模型,该模型对预测集样本的识别率和拒绝率均达到了100%。表明大米品种对黄酒的最终品质有影响,而SIMCA模式识别能恰当地反映这种影响关系^[14]。

管骁等^[15]利用SIMCA类建模法原理建立光明乳粉、荷兰乳粉、雀巢乳粉主成分回归分类模型,模型对3种品牌乳粉的识别率分别为78%、75%、100%,拒绝率分别为100%、87%、88%,取得了较好的品牌分类的目的。何勇等^[16]用主成分分析法对苹果品种进行聚类分析并获取苹果的近红外指纹图谱,再结合人工神经网络技术进行品种鉴别,建立一种快速鉴别苹果品种的新方法,与之前一些品种鉴别相比,主成分结合人工神经网络方法,用于品种鉴别得到的识别率得到很大提高,说明该方法是一种快速准确鉴别苹果品种的方法。方慧等^[17]运用不同的数据处理方式对转基因大豆进行鉴别,效果良好。结合特征波数选择和特征信息提取方法,对转基因大豆及其亲本进行品种鉴别研究。分别采用X-loading weights、VIP和2-Der提取特征波数,并采用PCA和ICA提取特征信息。分别基于全波段光谱、特征波数、特征信息建立PLS-DA模型,建模集和预测集均取得了较好的判别正确率。研究表明,中红外光谱分析技术可以较为准确地鉴别非转基因亲本与转基因品种,为转基因大豆的无损

鉴别提供新的思路。

1.3 易混淆、真伪鉴别 驴肉具有极高的食用价值,资源的缺乏使其价格持续走高,由此引发的欺骗和掺假亟待解决。牛晓颖等^[18]选取了不同部位(脖子、肋板、后墩和腱子)的驴肉样品及牛肉、猪肉和羊肉样品建立了驴肉的近红外光谱鉴别模型,利用不同化学计量学方法及不同的光谱预处理方法,对肉块样品及大中小3个不同粉碎粒径肉糜样品建立分类模型,结果发现,模型中的驴肉样品均得到了100%的判别正确率,其中,马氏距离判别和SIMCA方法较适合肉类样品的分类,2种方法均具有判别精度高、算法简单、运算速度快等有利于实时化、仪器化的特点。

食用油的真伪对人们身体健康有着非常直接的影响。但随着社会的发展,提炼技术的进步,越来越多的不法商贩看上了泔水、动物油脂以及内脏中提炼的食用油,试图用这些伪食用油以次充好,从中获取暴利。陈学海^[19]通过构建FTIR-SIMCA分类识别模型的方式对真伪食用油进行鉴别。根据研究结果来看,通过应用FTIR-SIMCA分类识别模型对训练集和验证集进行2次识别,结果均显示拒绝率和识别率为100%,表明FTIR-SIMCA分类识别模型具有较高的可识别性。与传统的核磁共振法、理化指标测定法和薄层层析法等相比,提高了食用油真假的检出率,且检测快速,操作简单,无损样品。杨志敏等^[20]利用近红外光谱结合化学计量学方法不仅成功鉴别原料肉和掺假肉,而且还识别出不同分类的掺假肉。他们首先利用近红外结合主成分与Fisher 2类判别法,建立原料肉与掺假肉的判别函数用于判别原料类是否掺假,总的正确判别率达到90%。然后,利用近红外结合主成分与MLP神经网络建立原料肉和3种掺假肉的3层神经网络识别模型,正确识别率达到94.2%。说明利用近红外结合化学计量学方法对原料肉是否掺假及掺假种类进行鉴别是可行的。

1.4 品质分析研究 不同品质原料、不同加工方式加工出的食品,品质存在差别;食品在储存过程中,其品质也会发生改变。赵贤德等^[21]利用傅立叶变换红外光谱技术研究红葡萄酒特征光谱及其品质劣变的判别方法。选取葡萄酒劣变前后在光谱特征上具有一定差异的3个波段,通过PCA分析建模结合SIMCA分类判别方法成功识别出劣变和未劣变的葡萄酒,并证明在1 550~800 cm^{-1} 波段建模识别效果最好,识别率达到94%。这一研究为葡萄酒的变质判别提供了新的方法。由于试验过程中选择的是明显变质的葡萄酒,得出了令人满意的结果,但是对于葡萄酒轻微变质是否低于红外检测限而无法检测,有待进一步深入系统研究。欧文娟等^[22]首次利用可见-近红外反射光谱快速检测有机胡萝卜、绿色胡萝卜和无公害胡萝卜,选择最佳区间(650~700 nm),3种分类模型包括主成分分析结合k均值聚类、主成分分析结合线性判别分析、反向传播神经网络,鉴别126个胡萝卜样本的准确率分别为93.65%、100%和98.41%。结果表明,可见-近红外光谱结合化学计量学技术可以有效地验证有机胡萝卜、绿色胡萝卜和无公害胡萝卜,为质量检

验机构提供了一个可行的检测方法,从而促进包括有机食品、绿色食品、无公害食品等安全食品的发展。刘聪^[23]利用红外光谱结合化学计量学鉴别鲜枣的完整果和裂果。运用多层感知器人工神经网络,根据一阶微分处理后的鲜枣近红外光谱数据,建立了鲜枣完好果和裂果的定性鉴别模型,获得了较高的鉴别正确率,校正集和预测集的鉴别正确率均在100%,实现了利用近红外光谱技术对鲜枣贮运过程中的完整程度的鉴别。Alamar等^[24]探讨了利用绿色、快速、高效的近红外光谱分析方法来替代目前评价冷冻番石榴和黄色西番莲果肉的质量(水分、总糖、酸度、可溶性固体、pH和抗坏血酸)的方法。用近红外光谱(NIR)和50个已知样品进行了分析,偏最小二乘回归(PLSR)用于近红外光谱和已知样品校正模型建立,结果表明,有58%的番石榴果肉样品和44%的黄色西番莲果肉样品加水掺假,PLS模型的均方根误差校准值(RMSEC)、根均方预测误差(RMSEP)较低,决定系数在0.7以上。水分和总糖的校准模型最好(番石榴果肉RMSEP分别为0.240和0.269;黄色西番莲果肉RMSEP分别为0.401和0.413),因此可通过水或糖的是否添加来测定西番莲果和黄色西番莲果肉是否掺假。该研究结果表明,近红外光谱技术结合多元校正技术可用于番石榴和黄色西番莲果肉的质量评价。

2 定量检测

红外光谱同样可用于定量分析,以郎伯-比尔(Lambert-Beer)定律为理论基础,红外光谱有许多可供选择的特征波长,因此,气体、液体及固体均可利用红外光谱定量^[25]。随着科学技术的发展,红外光谱技术的应用从中红外、到近红外、再到现在较为热门的傅立叶红外变换光谱(FTIR),技术得到不断的改进,应用领域得到不断的扩充,尤其是FT-IR,由于其可在复杂的背景分辨出待测物质,故在食品中低含量物质的检测中具有极其重要的价值。

杨家宝等^[26]采用中红外光谱对小白菜叶片中的硝酸盐含量进行快速表征。选取硝酸盐的特征吸收区(1 200~1 500 cm^{-1}),干扰程度最少的衰减全反射光谱。采用衰减全反射光谱结合偏最小二乘法进一步改进硝态氮的预测模型,预测误差显著减少,相关系数(R^2)为0.885 1,RPD值为3.19,预测模型达到很优秀水平。Mauer等^[27]把近红外光谱和中红外光谱用于婴儿奶粉的三聚氰胺的定量检测,使用PLS方法建模得到相关系数大于0.99,可以快速检测出三聚氰胺含量最低值为 1×10^{-6} 。吴迪等^[28]采用近红外及中红外光谱技术检测了不同品种奶粉的蛋白质含量,采用最小二乘支持向量机对光谱透射率值和蛋白质值建模。模型在全波段对样本蛋白质含量预测得到了较好的结果。说明红外光谱技术能够实现奶粉蛋白质含量的无损检测,且检测过程比传统化学检测方法简单、操作性强。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,中红外光谱区域的建模效果要优于近红外光谱区域。该研究为今后奶粉蛋白质含量快速无损检测提供了新的方法。方娟娟等^[29]使用偏最小二乘法建立近红外光谱与

组分浓度的多元校正模型,用于同时快速测定食醋的有效成分(总酸)和防腐剂(苯甲酸)含量,在可接受能力的误差范围内,该方法实现了同时快速检测食醋的有效成分和防腐剂含量。Revelou等^[30]用衰减全反射傅立叶变换红外光谱(ATR FT-IR)和部分最小二乘法(PLS)算法对西兰花中总异硫氰酸盐含量进行了测定,在2 150~2 020 cm^{-1} 的光谱区域中,用于全异硫氰酸盐的定量分析,相关系数为0.999 92,校准(RMSEC)的根平均平方误差为1.74,预测(RMSEP)的根平均误差为2.17,所得结果与已建立的UV-Vis分光光度法相比较,这2种方法在再现性和准确性方面是等价的(F-test, t-test)。该方法比现有的方法更简单快捷,是测定西兰花中总异硫氰酸盐含量的有效替代方法。

3 其他方面的研究

红外光谱结合化学计量学在食品检测中的应用除了定性定量外,在其他方面也有一定的应用。

采收成熟度是影响李果实贮藏质量的重要因素,适宜的采收成熟度对提高果实的耐贮性和贮藏后的商品价值至关重要^[31]。为实现快速无损判别李果实的成熟度,牛晓颖等^[32]根据开花后发育时间的不同,将李果实样品分为早期、中期和晚期3个成熟度,结合化学计量学进行了近红外分类模型的建立和优化,对不同成熟度的李果实进行了分类。对比3种分类模型结果,马氏距离判别法模型结果最优。接着对可溶性固形物、可滴定酸及坚实度数据进行差异分析,从理化指标的角度验证了不同成熟度李果实样品的近红外分类结果。研究表明,使用近红外光谱分析技术结合化学计量学方法对李果实成熟度进行鉴别是有效的、可行的。

4 讨论与展望

综上所述,红外光谱结合化学计量学是一种被广泛用于食品检测的现代分析技术,技术成熟、易用,零污染,检测快速准确,无损样品,且成本较低。然而,尽管这一技术在食品检测中显示出良好的应用效果,但仍然有一些问题需要进一步研究解决。主要表现在以下几个方面:

(1) 食品的化学组分复杂,影响检测结果。食品是混合物,其原料受多种因素(气候、环境、代谢类型、种植/养殖方式、加工工艺等)的影响,其组分各不相同且复杂,某些含量很低的组分,不在红外检测限范围内,却可能是区别不同品种、产地和品质好坏的关键组分,关键组分含量过低导致红外光谱吸收弱,灵敏度低,影响检测结果。这就需要研究人员通过广泛而深入的研究,全面掌握所研究食品的光谱信息,将红外光谱与其他技术结合起来进行食品检测研究。

(2) 取样困难,建模难度大。建立模型需要大批来源丰富的代表性样品,而食品在生长、加工过程中的变化因素很多,造成了最后的成品所含的成分各不相同,这样就给建模样品的选择带来了很大的困难,同时也限制了所建模型的普适性。针对这一问题,要求研究人员要选择尽可能大量具有代表性和多样性的建模样品,从而使所建模型的适应性满足应用需要。

(3) 结果难以直接解释。由于红外光谱结合化学计量学

这一技术是一种间接分析技术,需要依靠复杂的化学计量学方法对所得光谱数据进行提取分析,而提取分析后的数据物理意义并不明确,因此对其最终得出的结果很难直接作出解释,需要使用精确的化学分析手段对样本的化学组分进行深入研究,以求从中找出真正影响光谱差异的因素,从而更加科学地对鉴别结果作出解释。

(4) 研究系统性、深度欠缺。目前,大多数红外光谱结合化学计量学在食品检测中的研究只是进行可行性探索,研究的系统性、深入性还远远不够,而且检测抽样量比较少,还未在全球范围内建立任何关于食品产地溯源、品质鉴定、真伪鉴别等的数据库,因此还需进一步做大量的研究工作,将红外技术结合化学计量学有效地应用于食品检测中。

参考文献

- [1] ALIAKBARZADEH G, SERESHTI H, PARASTAR H. Fatty acids profiling of avocado seed and pulp using gas chromatography-mass spectrometry combined with multivariate chemometric techniques[J]. Journal of the Iranian chemical society, 2016, 13(10): 1905-1913.
- [2] 马悦, 赵乐凤, 吕子燕, 等. 高效液相色谱-四极杆-静电场轨道阱高分辨质谱分析菜菔中黄酮类和多酚类物质[J]. 质谱学报, 2017, 38(1): 45-51.
- [3] SHI L K, ZHANG M M, LIU Y L. Concentration and survey of phthalic acid esters in edible vegetable oils and oilseeds by gas chromatography-mass spectrometry in China[J]. Food control, 2016, 68: 118-123.
- [4] 孙兴权, 赵禹, 杨春光, 等. 液相色谱-高分辨质谱联用技术在食品欺诈检测鉴别中的应用[J]. 色谱, 2016, 34(7): 647-656.
- [5] ZHAO W, LIU F, FENG X H, et al. Fourier transform infrared spectroscopy study of acid birnessites before and after Pb²⁺ adsorption[J]. Clay minerals, 2012, 47(2): 191-204.
- [6] MEHLTRETTER A H, WRIGHT D M, SMITH M A. Variation in duct tape products over time: Physical measurements and adhesive compositional analysis by Fourier transform infrared spectroscopy[J]. Forensic chemistry, 2017, 4: 1-8.
- [7] YAN R, CHEN J B, SUN S Q, et al. Rapid identification of *Lonicerae japonicae* Flos and *Lonicerae Flos* by Fourier transform infrared (FT-IR) spectroscopy and two-dimensional correlation analysis[J]. Journal of molecular structure, 2016, 1124: 110-116.
- [8] HUANG D M, GUO C N, ZHANG M Z, et al. Characteristics of nanoporous silica aerogel under high temperature from 950 °C to 1200 °C[J]. Materials & design, 2017, 129: 82-90.
- [9] 马冬红, 王锡昌, 刘利平, 等. 近红外光谱技术在食品产地溯源中的研究进展[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(4): 877-881.
- [10] 张宁, 张德权, 李淑荣, 等. 近红外光谱结合 SIMCA 法溯源羊肉产地的初步研究[J]. 农业工程学报, 2008, 24(12): 309-312.

- [11] 朱哲燕, 张初, 刘飞, 等. 基于中红外光谱分析技术的香菇产地识别研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(3): 664-667.
- [12] 张文海, 姬中伟, 艾斯卡尔·艾拉提, 等. FT-IR 结合 SIMCA 法识别糯米产地[J]. 食品科学, 2012, 33(8): 225-228.
- [13] 李仲, 刘明地, 吉守祥. 基于枸杞红外光谱人工神经网络的产地鉴别[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(3): 720-723.
- [14] 黄桂东, 毛健, 姬中伟, 等. DR-FTIR 结合 SIMCA 识别不同种类原料米酿造的黄酒[J]. 食品科学, 2013, 34(14): 285-288.
- [15] 管骁, 古方青, 刘静, 等. 近红外光谱技术的乳粉品牌溯源研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(10): 2621-2624.
- [16] 何勇, 李晓丽, 邵咏妮. 基于主成分分析和神经网络的近红外光谱苹果品种鉴别方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2006, 26(5): 850-853.
- [17] 方慧, 张昭, 王海龙, 等. 基于中红外光谱技术鉴别转基因大豆的方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(3): 760-765.
- [18] 牛晓颖, 邵利敏, 董芳, 等. 基于近红外光谱和化学计量学的驴肉鉴别方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(10): 2737-2742.
- [19] 陈学海. 傅里叶变换红外光谱结合模式识别法在食用油真伪鉴别中的实践分析[J]. 食品安全导刊, 2015(6): 94-96.
- [20] 杨志敏, 丁武. 近红外光谱技术快速鉴别原料肉掺假的可行性研究[J]. 肉类研究, 2011, 25(2): 25-28.
- [21] 赵贤德, 董大明, 郑文刚, 等. 傅里叶变换红外光谱在葡萄酒品质劣变检测中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(10): 2667-2672.
- [22] 欧文娟, 孟耀勇, 张平丽, 等. 可见-近红外光谱结合化学计量学认证有机胡萝卜、绿色胡萝卜和无公害胡萝卜[J]. 激光生物学报, 2015, 24(1): 46-54.
- [23] 刘聪. 基于近红外光谱的鲜枣品质检测及其安全判别研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2013.
- [24] ALAMAR P D, CARAMÊS E T S, POPPI R J, et al. Quality evaluation of frozen guava and yellow passion fruit pulps by NIR spectroscopy and chemometrics[J]. Food research international, 2016, 85: 209-214.
- [25] 刘崇华, 黄宗平. 光谱分析仪器使用与维护[M]. 北京: 化学工业出版社, 2010.
- [26] 杨家宝, 杜昌文, 申亚珍, 等. 基于傅里叶变换中红外光谱的小白菜硝酸盐含量的快速测定[J]. 分析化学, 2013, 41(8): 1264-1268.
- [27] MAUER L J, CHERNYSHOVA A A, HIATT A, et al. Melamine detection in infant formula powder using near-and mid-infrared spectroscopy[J]. Journal of agricultural and food chemistry, 2009, 57(10): 3974-3980.
- [28] 吴迪, 曹芳, 冯水娟, 等. 基于支持向量机算法的红外光谱技术在奶粉蛋白质含量快速检测中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(5): 1071-1075.
- [29] 方娟娟, 白雪梅, 强建华, 等. 偏最小二乘法同时测定食醋的有效成分和防腐剂的含量[J]. 计算机与应用化学, 2010, 27(3): 351-354.
- [30] REVELOU P K, KOKOTOU M G, PAPPAS C S, et al. Direct determination of total isothiocyanate content in broccoli using attenuated total reflectance infrared Fourier transform spectroscopy[J]. Journal of food composition and analysis, 2017, 61: 47-51.
- [31] 及华, 关军锋, 孙玉龙, 等. 不同采收成熟度黑宝石李冷藏期间品质变化的研究[J]. 保鲜与加工, 2010, 10(3): 22-25.
- [32] 牛晓颖, 贾东军, 王艳伟, 等. 基于近红外光谱和化学计量学的李果成熟度鉴别方法研究[J]. 现代食品科技, 2014, 30(12): 230-234.

(上接第6页)

3 结论

该试验通过对料液比、提取温度、提取时间、提取次数4个因素进行响应面分析,并由回归模型的方差分析结果可知4个因素的影响均显著。三百棒多糖的最佳提取工艺条件:料液比1:15,提取温度93 °C,提取时间4 h,提取次数3次。在此条件下得到的多糖提取率为4.75%,接近预测值4.99%,表明采用响应面法优化三百棒多糖的提取工艺准确可靠,科学可行,具有很好的参考价值。

参考文献

- [1] 《全国中草药汇编》编写组. 全国中草药汇编[M]. 北京: 人民卫生出版社, 1978.
- [2] 胡兴尧, 曾凡波, 崔晓瑞, 等. 飞龙掌血乙醇提取物的镇痛抗炎作用及其毒性的研究[J]. 中国中医药科技, 2004, 7(4): 231-232.
- [3] 何小萍, 任先达. 飞龙掌血水提取物对垂体后叶素所致大鼠缺血心肌的

- 保护作用[J]. 中国病理生理杂志, 1998, 14(3): 283-285.
- [4] 张廷胜. 飞龙掌血治疗家畜胃肠炎[J]. 中兽医医药杂志, 1998, 17(1): 22-23.
- [5] 丁文, 文赤夫, 陈建华, 等. 飞龙掌血提取物抑菌作用初步研究[J]. 生物质化学工程, 2007, 41(5): 33-35.
- [6] 田春莲, 文赤夫, 吴文滔. 飞龙掌血多糖提取工艺研究[J]. 中药材, 2010, 33(3): 462-464.
- [7] 王鹏, 田春莲, 田启建. 超声波预处理提飞龙掌血多糖的工艺优化[J]. 林产化学与工业, 2013, 33(4): 108-112.
- [8] 王婉冰, 徐子恒, 王宏军, 等. 响应面法优化海藻子外种皮水溶性多糖提取工艺及其抗菌活性[J]. 食品科学, 2015, 36(14): 5-9.
- [9] 吴诗云, 钟益宁, 张焱, 等. 熟地黄多糖含量测定方法研究[J]. 安徽农业科学, 2016, 44(35): 154-156, 161.
- [10] 张桂春, 刘玉静, 解卫海, 等. 响应面法优化灰树花发酵全液多糖提取工艺及其抗肿瘤活性[J]. 食品科学, 2013, 34(24): 30-35.
- [11] 李加兴, 李敏利, 陈建伏, 等. 微波辅助提取猕猴桃多糖工艺优化[J]. 食品科学, 2010, 31(4): 42-45.
- [12] 薛丹, 黄豆豆, 黄光辉, 等. 植物多糖提取分离纯化的研究进展[J]. 中药材, 2014, 37(1): 157-161.
- [13] 刘颖, 赵雪, 柴智, 等. 响应面法优化白首乌多糖提取的研究[J]. 农产品加工, 2017(1): 1-4.