

便携式近红外光谱仪用于东阿阿胶鉴定及特征波长筛选研究

窦琳琳¹, 张 淹^{1,2}, 刘海滨², 徐天扬³, 李文龙^{4*}, 瞿海斌^{1*}

1. 浙江大学药学院药物信息学研究所, 浙江 杭州 310058
2. 东阿阿胶股份有限公司 国家胶类中药工程技术研究中心, 山东 聊城 252201
3. 华润昂德生物药业有限公司, 山东 聊城 252201
4. 天津中医药大学中药制药工程学院, 天津 300193

摘要: 目的 采用便携式近红外 (near infrared, NIR) 光谱仪建立东阿阿胶鉴别分析模型, 并优选出特征波段。方法 采用 BWS903 型 NIR 光谱仪和 microPHAZIR™ RX 型 NIR 光谱仪 2 款便携式光谱仪采集了 47 份阿胶样品的光谱, 并采用软独立建模聚类分析 (soft independent modeling class analog, SIMCA) 和偏最小二乘判别分析 (partial least squares discriminant analysis, PLS-DA) 等化学计量学算法, 建立了东阿阿胶的判别分析模型。**结果** 所建立模型能够准确区分东阿阿胶和其他品牌阿胶。在此基础上, 采用相关系数法优选出 BWS903 光谱特征波长为 1300~1380 nm 和 1460~1540 nm; microPHAZIR™ RX 光谱特征波长为 1600~1680 nm 和 2160~2240 nm, 上述波段分别代表 -NH₂ 和 -CONHR 肽键的 1 级倍频吸收, 这些波段可作为东阿阿胶的特征波段, 并可据此设计专用型、小型化的 NIR 光谱仪, 用于东阿阿胶的品牌鉴定。**结论** 便携式 NIR 光谱携带方便, 分析快速, 借助化学计量学算法即可进行品牌鉴别, 在名贵中药材的鉴定方面具有较好的推广应用前景。

关键词: 东阿阿胶; 品牌鉴别; 便携式近红外光谱仪; 判别分析; 特征波段

中图分类号: R286.2 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2023)09-2925-06

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2023.09.025

Identification of Dong'e Ejiao and its characteristic wavelength selecting using portable NIR spectrometers

DOU Lin-lin¹, ZHANG Yan^{1,2}, LIU Hai-bin², XU Tian-yang³, LI Wen-long⁴, QU Hai-bin¹

1. Pharmaceutical Informatics Institute, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China
2. National Engineering Research Center for Gelatin-based Traditional Chinese Medicine, Dong'e Ejiao Co., Ltd., Liaocheng 252201, China
3. China Resources Angde Biotech Pharma Co., Ltd., Liaocheng, 252201, China
4. College of Pharmaceutical Engineering of Traditional Chinese Medicine, Tianjin University of Traditional Chinese Medicine, Tianjin 300193, China

Abstract: Objective The identification models of Dong'e Ejiao hide gelatin were established by portable near infrared (NIR) spectrometers, and the characteristic bands of NIR were selected. **Methods** In this research, two portable near-infrared spectrometers, named B&W Tek BWS 903 NIR spectrometer and microPHAZIR™, are used for collecting the spectra of donkey hide gelatin, and combined with chemometric algorithms, such as soft independent modeling of class analogy (SIMCA) and partial least squares discriminant analysis (PLS-DA), the discriminant analysis models of Dong'e gelatin were established. **Results** The established discriminant analysis models can distinguish Dong'e gelatin from other brands of donkey hide gelatin accurately. The characteristic wavebands of BWS 903 spectra, 1300—1380 nm and 1460—1540 nm, and the characteristic wavebands of microPHAZIR™ spectra, 1600~1680 nm and 2160—2240 nm, were selected using correlation coefficients method, which represent the first-order double-frequency absorption of -NH₂ and -CONHR, respectively. These bands can be regarded as the characteristic bands of Dong'e

收稿日期: 2022-09-21

基金项目: 国家发展与改革委员会、国家中医药管理局中药标准化项目 (ZYBZH-Y-SD-31)

作者简介: 窦琳琳 (1982—), 女, 硕士研究生, 主要从事中药质量控制技术研究。E-mail: wshdoulinlin@126.com

*通信作者: 李文龙 (1980—), 男, 副研究员, 博士生导师, 主要从事中药质量控制研究。E-mail: wshlwl@tjutcm.edu.cn

瞿海斌 (1969—), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事中药制药过程分析技术研究。E-mail: quhb@zju.edu.cn

donkey hide gelatin, and a special and miniaturized near-infrared spectrometer can be designed to establish the brand protection system of Dong'e donkey hide gelatin. **Conclusion** Portable near infrared spectrometer is characterized by easy to carry and fast to analyze. Brand identification of Dong'e donkey hide gelatin can be realized with the help of basic chemometrics algorithms. The established methods have a good prospect of popularization and application in the identification of precious traditional Chinese medicine.

Key words: Dong'e Ejiao; brand identification; portable near infrared spectrometers; discriminant analysis; characteristic waveband

中医药应用历史悠久,在长期的应用历史中,形成了一大批名优中药材、中药饮片和中成药品种。这类中药品种一般存在着有效成分难以确定、传统分析方法复杂耗时、质量鉴别较多依赖于人工经验、仅从外观难以评判真伪优劣、批次之间质量差异较大等特点。同时,由于这些名贵中药的药典标准相对偏低,导致该类中药的真伪优劣难以准确鉴定,伪劣品的冲击不仅严重扰乱了药材市场秩序,给生产单位带来经济损失,而且对于人民群众的安全用药也造成了严重影响。名贵中药经济价值较高,开发潜力巨大,但目前相关的质量控制技术还不够完善,在这种背景下,建立相应的品牌保护体系,以保证质量的持续提升和良性的市场秩序^[1],显得尤为重要。所谓品牌保护,是指为某一特定的名优品牌建立鉴定标准,以对市售产品是否属于这一品牌做出明确判定。鉴于多数名贵药材难以用一种或几种物理、化学性质作为判据,因此,急需发展一种信息全面、样品无损、分析快速的技术手段,以样品的特征信号作为不同品牌的鉴定标准。亚洲国家由于受中华文化的影响,有使用中医药的传统,也形成了一些名贵中药品牌,如韩国的锦红、正官庄等高丽参品牌。关于名贵药材的鉴定也开展较多,如 Kim 等^[2-5]开展系列研究,对人参、鹿茸、灵芝等名贵药材进行鉴别,建立了多种判别分析的方法,为建立中药品牌保护提供较好的借鉴。

近红外(near infrared, NIR)光谱主要反映含氢基团的吸收,具有信息丰富、样品无损、测试快速等优点,已被广泛应用于中药领域的研究^[6-9]。近年来,NIR光谱技术及其衍生出的二维NIR光谱技术和NIR高光谱成像技术在中药行业引起了日益广泛的关注和应用,相关的研究报道主要包括中药的定性鉴别、定量分析和中药制药过程分析等。本实验室的前期研究表明,NIR光谱仪可以用于不同品牌阿胶的鉴别^[9-11]。但由于大型台式NIR光谱仪价格昂贵,携带不方便,需要专业技术人员进行仪器操作和数据解析,所以难以适应阿胶的现场、快速分析,需要针对这一问题,开发出便携、价格便宜

的小型化专用仪器。2014年全国第5届NIR光谱会议上,陆婉珍院士指出:小型化、微型化和专用仪器是我国NIR仪器研制的趋势,国内已有多家单位研制出了多种分光类型的小型或微型NIR光谱试验样机,专用仪器方面也是如此。本实验目的在于为东阿阿胶的鉴别选择合适的便携式NIR光谱仪及特征波段,以便在此基础上进行改进,开发出更为适用的专用型NIR光谱仪。

1 材料与仪器

1.1 阿胶样品信息

本研究所用样品包括非东阿阿胶品牌的阿胶样品22份(OEJ),编号为1~22,来自9个阿胶生产企业,购自亳州中药材市场;生产年份从2007年到2016年间的东阿阿胶样品25份(DEEJ),编号为23~47,由山东东阿阿胶股份有限公司提供,经天津中医药大学李文龙副研究员鉴定均为驴*Equus asinus* L.的干燥皮或鲜皮经煎煮、浓缩制成的固体胶。

1.2 NIR光谱仪器及数据分析软件

分别采用BWS903型NIR光谱仪(B&W Tek公司)和便携式NIR光谱仪microPHAZIR™ RX(美国Thermo Fisher公司)采集了47批阿胶样品的NIR漫反射光谱,光谱采集温度为室温(约为25℃,考虑到所建方法的实际应用场景,未对测样温度进行严格控制),波段范围分别为900~1700 nm和1600~2400 nm,每份样品扫描64次取平均值。采用SIMCA(V13, Umetrics, MKS Instruments Inc)数据处理软件进行数据处理,数据导出后,采用OriginPro(V2021SR1, OriginLab)数据分析软件绘图。

2 方法与结果

2.1 光谱采集

采用“1.2”项下仪器和光谱采集条件,对47批阿胶样品进行漫反射光谱采集,所采集的NIR光谱分别如图1和图2所示。直观来看,在900~1700 nm波段,不同品牌阿胶之间光谱形状差异较大,而不同批次东阿阿胶光谱较为接近;在1600~2400

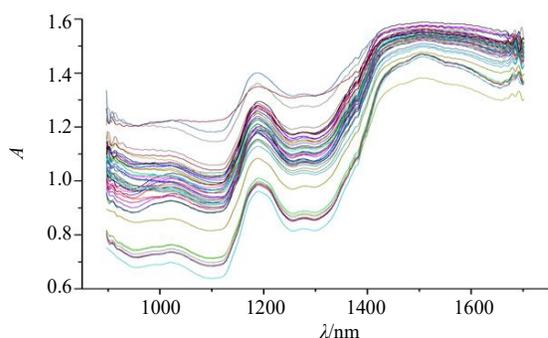


图1 采用 BWS903 型便携式 NIR 光谱仪得到的阿胶样品光谱

Fig. 1 Spectra of donkey hide gelatin samples of BWS903 portable NIR spectrometer

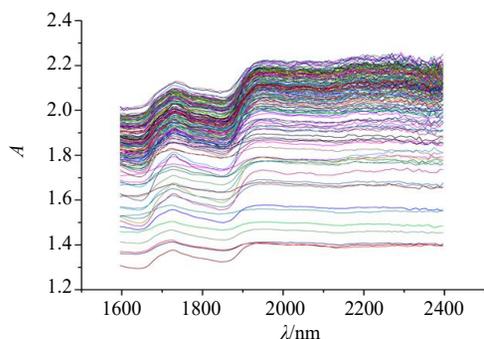


图2 采用 microPHAZIR™ RX 便携式 NIR 光谱仪得到的阿胶样品光谱

Fig. 2 Spectra of donkey hide gelatin samples obtained by microphazir™ RX portable NIR spectrometer

nm 波段, 不同品牌阿胶之间光谱形状差异不大, 但光谱吸收值存在较大差异。

2.2 数据分析

2.2.1 样本集划分 分别采用簇类独立软模式(soft independent modeling class analog, SIMCA)和偏最小二乘判别分析(partial least squares discriminant analysis, PLS-DA) 2种方法对东阿阿胶进行鉴定。

为保证鉴别结果的可比性, 采用同样的样本集划分方法。随机选取 10 份东阿阿胶样品和 10 份其他品牌阿胶样品作为验证集, 用于验证模型的预测性能; 其余样品划归校正集, 用于建立判别分析模型。预测结果的评估采用错判率作为标准, 并进一步细分为假阴性率和假阳性率, 其中假阴性率为验证集中其他品牌被误判为东阿阿胶的比率, 而假阳性率则为验证集中东阿阿胶被误判为其他品牌的比率。结果见表 1。

表 1 阿胶样本集划分情况

Table 1 Division of donkey hide gelatin sample sets

样本	总集样品数	校正集样品数	验证集样品数
东阿阿胶 (DEEJ)	25	15	10
其他品牌阿胶 (OEJ)	22	12	10

2.2.2 光谱预处理 为消除表面效应和散射效应所导致的基线漂移和光谱噪声, 采用平滑、求导、多元散射校正和标准正则变换等对原始光谱进行预处理, 但结果表明, 预处理后的光谱分类效果并无显著改善, 原因可能在于, 不同品牌阿胶样品的表面性质在一定程度上也反映了不同生产厂家的工艺特征, 属于有效信息, 预处理过程中, 无效信息去除的同时也使得有效信息部分损失。同时, 为了提升所建方法在具体应用场景下的稳健性, 本实验直接采用原始光谱进行建模。

2.2.3 SIMCA 模型建立及验证 SIMCA 方法是由瑞典化学家 Wold 于 1976 年提出的一种基于主成分分析(principal component analysis, PCA)的有监督模式识别方法^[12-13]。该算法主要有 2 个步骤, 首先利用先验分类知识, 对训练集中的每一类样本建立一个 PCA 模型; 其次是将未知样本逐一去拟合各类的主成分模型, 从而进行判别归类。SIMCA 方法通过 F 检验设定分类的置信区间, 针对每个类, 其 F 检验的 2 个维度的自由度分别为 $(M-A)$ 和 $(n-A-1)$ ($M-A$), 其中 M 为变量数 (每类变量数相同), A 为该类的有效主成分数, n 为该类的样本数。对化学测量来说, 一般样本数 n 都远远小于测量变量数 M , 为使每个维度的自由度大于 0, 需要注意样本数、变量数和选择的主成分数之间的关系。在整个 SIMCA 方法的计算过程中对每一类样本进行了主成分建模, 因此 PCA 分析方法对结果有着决定作用。

对于 BWS903 型 NIR 光谱仪和 microPHAZIR™ RX 型 NIR 光谱仪采集到的原始光谱, 未加任何预处理, 分别采用前 2 个和前 4 个主成分 (分别解释了 96.11% 和 99.83% 的变异) 建立 SIMCA 判别分析模型, 并对验证集样品进行验证, 所得结果分别如图 3 和图 4 所示。

图中可见, DEEJ 样品聚类趋势明显, 且与大部分其他品牌阿胶样品区分较为明显, 但仍有个别样品被误判。对误判的原因进行初步分析, 认为误判的样品中, 假阴性的样品可能有个别样品和东阿阿胶较为接近, 而假阳性的样品则可能是因为个别

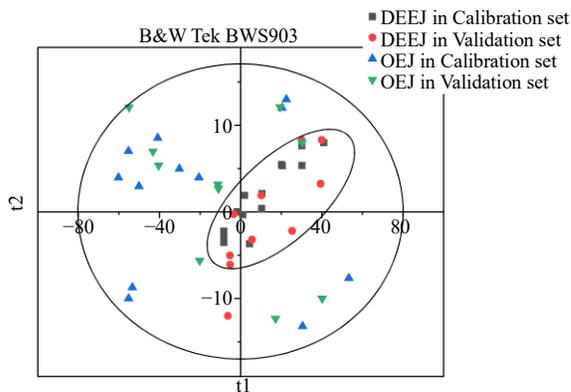


图3 采用 BWS903 型 NIR 光谱仪所建阿胶 SMICA 模型判别分析结果

Fig. 3 Discriminant analysis results of donkey hide gelatin SMICA model with BWS903 NIR spectrometer

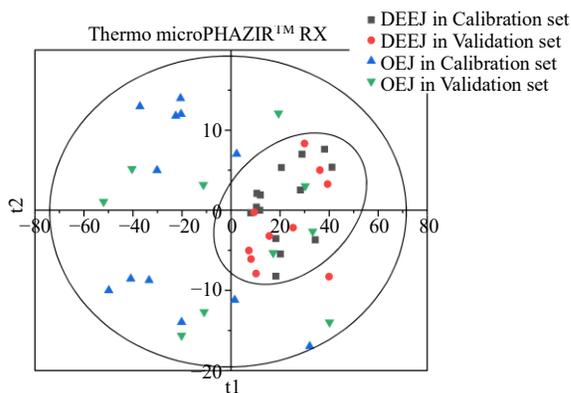


图4 采用 microPHAZIR™ RX 型 NIR 光谱仪所建阿胶 SMICA 模型判别分析结果

Fig. 4 Discriminant analysis results of donkey hide gelatin SMICA model with microPHAZIR™ RX NIR spectrometer

样品光谱异常被误判，产品的批次一致性仍有进一步提升的空间。为进一步提升模型预测的准确性，需要进一步扩大样本代表性，同时按照一定的规则剔除部分异常光谱，所建模型也需要进行持续的更新、优化和重新验证，以实现长期使用的目的。

2.2.4 PLS-DA 模型建立及验证 PLS-DA 是一种有监督的判别分析方法，能够解决线性或弱非线性数据的分类和判别问题，其原理与 PLS 回归相似，通过建立 PLS 模型，将自变量 (X) 和因变量 (Y) 投影到新变量空间后，寻找 X 与 Y 之间的函数关系。当 Y 是分类变量时，建立 PLS 模型的即为 PLS-DA 模型。PLS-DA 算法适用于大部分线性或弱线性数据，在各领域有着广泛的应用，并展示出了可靠的稳健性，如今仍是最常用的分类算法之一^[14-15]。

按照“2.2.1”项下所属的样本集划分方法进行

样本集划分，所有光谱未经任何预处理，对东阿阿胶样品赋值为“1”，对其他品牌阿胶样品赋值为“-1”，分别采用前 3 个和前 4 个潜变量建立 PLS-DA 模型，分别解释了 97.28%和 95.60%的变异，并对验证集样品进行判别分析，所得结果分别如图 5 和图 6 所示。

统计验证集样品的误判率，并细分为假阴性率和假阳性率，结果汇总于表 2 中，从表 2 可以看出，PLS-DA 模型的预测性能整体优于 SIMCA 模型，短波 NIR 所得结果优于长波 NIR，这也说明对于漫反射光谱，短波信息更为丰富^[16]。虽然 2 款仪器仍然存在一定的错判率，但 BWS903 型光谱仪只有 1 份样品被误判为东阿阿胶，而 microPHAZIR™ RX

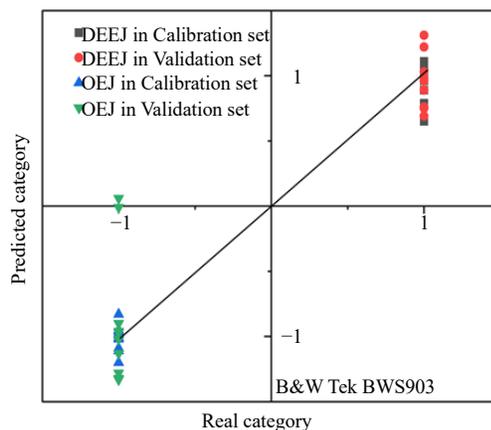


图5 采用 BWS903 型 NIR 光谱仪所建阿胶 PLS-DA 模型判别分析结果

Fig. 5 Discriminant analysis results of donkey hide gelatin PLS-DA model with BWS903 NIR spectrometer

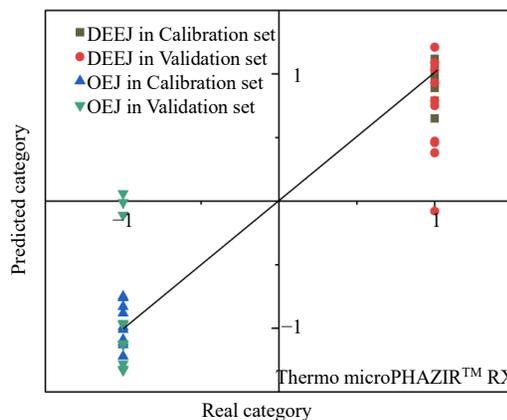


图6 采用 microPHAZIR™ RX 所建阿胶 PLS-DA 模型判别分析结果

Fig. 6 Discriminant analysis results of donkey hide gelatin PLS-DA model with microPHAZIR™ RX spectrometer

表 2 不同判别分析方法在不同仪器上的阿胶样品判别分析预测结果

Table 2 Discriminant analysis prediction results of donkey hide gelatin samples with different discriminant analysis methods on different NIR instruments

方法	BWS903 型			microPHAZIR™ RX 型		
	错判率/%	假阴性/%	假阳性/%	错判率/%	假阴性/%	假阳性/%
SIMCA	10	10	0	20	15	5
PLS-DA	5	5	0	10	5	5

型光谱仪则有 2 份样品被误判，值得注意的是，被错判的 3 份样品并不重合，这说明，2 款仪器具有一定的互补性，如能将 2 种仪器进行结合，研发出一种兼具二者之长的小型化仪器，将能对不同品牌的阿胶进行更为准确的区分。

2.3 特征波长筛选

大型、台式的 NIR 光谱仪常以迈克尔逊干涉仪作为分光系统，分辨率较高，可得到较好的分析精度，但同时也具有价格较高、操作复杂、易受环境影响的缺点，往往用于准确度较高的样品分析，难以实现现场的快速分析，大大限制了其应用范围。因而，以滤光片、光栅为分光元件的便携式、专用化的小型 NIR 光谱仪近年来发展迅速，可在一定程度上弥补台式 NIR 光谱仪的不足。以价格相对低廉的分光系统取代价格高昂的干涉仪分光系统，可以降低 NIR 光谱仪的价格，同时小型光谱仪具有携带方便、受环境影响较小等优点，适合进行现场分析。研发专用型的小型 NIR 光谱仪，关键步骤就是找到特定样品的特征波长，据此设计合理的分光部件^[17-18]。东阿阿胶作为一种名贵中药饮片，急需建立品牌保护体系，NIR 光谱技术信息丰富，分析快速，适用于阿胶生产厂家的鉴定，如能根据商用 NIR 仪器，筛选出阿胶特征的波段，并据此加工出专用于东阿阿胶品牌鉴定的小型、便携的专用设备，在用户终端对产品是否为东阿阿胶产品做出明确判断，将有助于实现东阿阿胶的品牌保护。BWS903 型为专用于漫反射分析的 NIR 光谱仪系统，内置了电容式触摸屏计算机，大光斑的采样，可选的旋转样品台使得对于大颗粒或者不均匀样品的漫反射采集具备更好的代表性，但体积较 microPHAZIR™ RX 型光谱仪大，难以随身携带以供现场分析。microPHAZIR™ RX 型光谱仪专为制药原料的现场鉴定设计，采用电池供电，质量约为 1.3 kg，携带方便，但主要依靠标准光谱比对的方式对制药原辅料进行现场鉴定。这 2 种小型化光谱仪虽然能够较好地识别阿胶样品，但并非为阿胶进行专门设计，且价格仍较为昂贵，用户终端（专卖店）仍难以大量配备满足鉴别之需。

本实验为优选出更多东阿阿胶的特征波长，采用 2 种品牌的小型 NIR 光谱仪，并采用 PLS-DA 建立东阿阿胶和其他品牌阿胶的判别分析模型，采用平均相关系数 (R) 法优选了特征波长，如图 7 和图 8 所示。最终优选出 BWS903 型光谱特征波长为 1300~1380 nm ($R=0.66$) 和 1460~1540 nm ($R=0.74$)；microPHAZIR™ RX 型光谱特征波长为 1600~1680 nm ($R=0.56$) 和 2160~2240 nm ($R=0.81$)，分别代表-NH₂和-CONHR 肽键的一级倍频吸收^[19-20]。

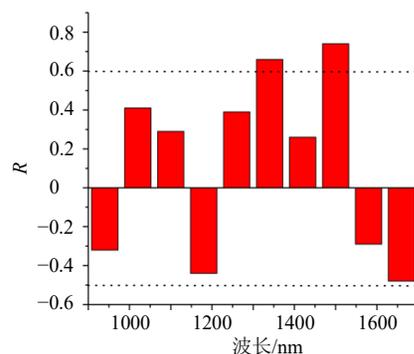


图 7 采用平均相关系数法筛选出的 BWS903 型 NIR 光谱仪的阿胶特征波段

Fig. 7 Characteristic bands of donkey hide gelatin on BWS903 portable NIR spectrometer selected by average correlation coefficients method

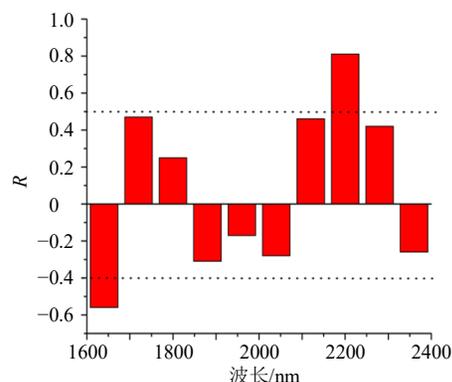


图 8 采用平均相关系数法筛选出的 microPHAZIR™ RX 型便携式 NIR 光谱仪的阿胶特征波段

Fig. 8 Characteristic bands of donkey hide gelatin on microPHAZIR™ RX portable NIR spectrometer selected by average correlation coefficients method

这些波段可作为东阿阿胶的特征波段, 据此设计专用于东阿阿胶鉴别的滤光片型小型 NIR 光谱仪, 用于市场打假和品牌保护。需要强调的是, 本实验所建方法仅适用于判断样品是否为东阿阿胶产品, 并不涉及不同生产厂家阿胶的质量优劣的评判。

3 讨论

特定品牌的名贵中药实际上包括了产地、原料、加工工艺、以及历史文化等多方面的特征, 在没有明确的质量指标判断各种品牌的产品孰优孰劣的情况下, 对其实施基于综合性质的品牌鉴别至关重要。阿胶应用历史悠久, 但由于原料、工艺的不同, 不同品牌阿胶质量之间也存在较大差异, 难以采用具体指标区分优劣, 因而急需建立相应的鉴别技术。本实验结果表明, 2 款便携式光谱仪所采集到的 NIR 光谱能够反映阿胶样品的信息, 可用于东阿阿胶的准确鉴别。如果采用更多、更有代表性的样品, 进一步优化实验条件和建模算法, 当可得到更为满意的实验结果。同时, 采用相关系数法优选了东阿阿胶的特征波段, 可据此设计小型化专用型 NIR 光谱仪, 用于东阿阿胶的快速鉴别和品牌保护, 并可为其他名优中药材、中药饮片和中成药的品牌保护提供借鉴。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 李文龙. 中药标准化的模式分析及思考 [N]. 中国中医药报, 2018-11-15(05)
- [2] Woo Y A, Kim H J, Ze K R, *et al.* Near-infrared (NIR) spectroscopy for the non-destructive and fast determination of geographical origin of *Angelicae gigantis Radix* [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2005, 36(5): 955-959.
- [3] Woo Y A, Kim H J, Cho J H, *et al.* Discrimination of herbal medicines according to geographical origin with near infrared reflectance spectroscopy and pattern recognition techniques [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 1999, 21(2): 407-413.
- [4] Cho C H, Woo Y A, Kim H J, *et al.* Rapid qualitative and quantitative evaluation of deer antler (*Cervus elaphus*) using near-infrared reflectance spectroscopy [J]. *Microchem J*, 2001, 68(2/3): 189-195.
- [5] Woo Y A, Kim H J, Cho J. Identification of herbal medicines using pattern recognition techniques with near-infrared reflectance spectra [J]. *Microchem J*, 1999, 63(1): 61-70.
- [6] 李文龙, 瞿海斌. 近红外光谱技术在中药质量控制及过程监控上的应用进展 [J]. 浙江大学学报: 医学版, 2017, 2: 80-88.
- [7] 李文龙, 瞿海斌. 近红外光谱用于中药定量分析的技术规范化研究进展 [J]. 中国中药杂志, 2016, 41(19): 3511-3514.
- [8] 张振宇, 常相伟, 严辉, 等. 基于近红外光谱分析技术的干姜质量快速评价研究 [J]. 中草药, 2022, 53(23): 7516-7523.
- [9] Li W L, Han H F, Zhang L, *et al.* Manufacturer identification and storage time determination of "Dong'e Ejiao" using near infrared spectroscopy and chemometrics [J]. *J Zhejiang Univ Sci B*, 2016, 17(5): 382-390.
- [10] 张淹, 张路, 田守生, 等. 近红外光谱分析技术在复方阿胶浆生产全程中的应用进展及相关思考 [J]. 中国中药杂志, 2016, 41(19): 3574-3578.
- [11] 李文龙, 张淹, 刘海滨, 等. 胶类中药的质量控制方法研究进展 [J]. 中国中药杂志, 2019, 44(13): 2748-2752.
- [12] Hermene A T, Pierre-Yves S, Pierre L, *et al.* A probabilistic class-modelling method based on prediction bands for functional spectral data: Methodological approach and application to near-infrared spectroscopy [J]. *Anal Chim Acta*, 2021, 1144: 130-149.
- [13] Brendel R, Schwolow S, Gerhardt N, *et al.* MIR spectroscopy versus MALDI-ToF-MS for authenticity control of honeys from different botanical origins based on soft independent modelling by class analogy (SIMCA) - A clash of techniques? [J]. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 2021, 263: 120225.
- [14] Yuan R R, Liu G S, He J G, *et al.* Classification of Lingwu long jujube internal bruise over time based on visible near-infrared hyperspectral imaging combined with partial least squares-discriminant analysis [J]. *Comput Electron Agric*, 2021, 182: 106043.
- [15] Bian X H, Zhang C X, Liu P, *et al.* Rapid identification of milk samples by high and low frequency unfolded partial least squares discriminant analysis combined with near-infrared spectroscopy [J]. *Chemom Intell Lab Syst*, 2017, 170: 96-101.
- [16] Cen H Y, He Y. Theory and application of near infrared reflectance spectroscopy in determination of food quality [J]. *Trends Food Sci Technol*, 2007, 18(2): 72-83.
- [17] Casale M, Sinelli N, Oliveri P, *et al.* Chemometrical strategies for feature selection and data compression applied to NIR and MIR spectra of extra virgin olive oils for cultivar identification [J]. *Talanta*, 2010, 80(5): 1832-1837.
- [18] Li X L, He Y, Wu C Q, *et al.* Nondestructive measurement and fingerprint analysis of soluble solid content of tea soft drink based on Vis/NIR spectroscopy [J]. *J Food Eng*, 2007, 82(3): 316-323.
- [19] Burns D A, Ciurczak E W. *Handbook of near-infrared analysis, third edition* [M]. New York: CRC Press, 2007: 355-357.
- [20] Workman J, Weyer L. *Practical Guide to Interpretive Near-Infrared Spectroscopy* [M]. New York: CRC Press, 2008: 68-73.

[责任编辑 时圣明]