

近红外光谱法快速测定羊栖菜 生长过程中的活性成分

杨留长^{1,2}, 曹小青^{1,2}, 丁湜淳^{1,2}, 曾丽^{1,2}, 吴明江^{1,2}, 杨越^{1,2*}

(1. 温州大学生命与环境科学学院, 温州 325035; 2. 浙江省水环境与海洋生物资源保护重点实验室, 温州 325035)

摘要: 目的 利用近红外光谱法对羊栖菜生长过程中的活性成分进行快速定量分析, 并探究其生长过程中的活性成分含量变化规律。**方法** 收集羊栖菜 7 个生长阶段共 175 个羊栖菜粉末样品, 采用紫外-可见分光光度法测定多糖和多酚的含量, 高效液相色谱法测定岩藻黄质的含量。运用组合区间-偏最小二乘法(synergy interval partial least squares, Si-PLS)分别建立了近红外光谱与 3 种活性成分指标参考值之间的定量校正模型, 并采用不同的预处理方法和主因子数优化模型。**结果** 在羊栖菜的生长过程中, 多糖含量变化为栽培期>快速生长期>成熟期; 多酚含量变化为快速生长期>成熟期>栽培期; 岩藻黄质含量变化为栽培期>快速生长期~成熟期。多糖、多酚和岩藻黄质 3 种定量模型的近红外预测值与参考值之间的拟合性良好, 模型预测精度较高, 其中预测集相关系数(correlation coefficient of prediction, R_p)均大于 0.95; 预测集均方根误差(root mean square error of prediction, RMSEP)分别为 11.01、1.72、0.41 mg/g, 预测集相对偏差(relative standard of error of prediction, RSEP)分别为 8.66%、3.62%、8.67%。**结论** 本研究揭示了羊栖菜生长过程中多糖、多酚和岩藻黄质的含量变化规律; 证实了采用近红外光谱法结合 Si-PLS 可以成功用于测定羊栖菜生长过程中的活性成分含量, 且该方法操作简单、快速、准确、无损、环保。

关键词: 近红外光谱法; 羊栖菜; 生长过程; 活性成分; 快速分析

Rapid determination of active components in growth process of *Sargassum fusiforme* by near infrared spectroscopy

YANG Liu-Chang^{1,2}, CAO Xiao-Qing^{1,2}, DING Hao-Chun^{1,2},
ZENG Li^{1,2}, WU Ming-Jiang^{1,2}, YANG Yue^{1,2*}

(1. College of Life and Environmental Science, Wenzhou University, Wenzhou 325035, China; 2. Key Laboratory of Water Environment and Marine Biological Resources Protection of Zhejiang Province, Wenzhou 325035, China)

ABSTRACT: Objective To analyze the active components of *Sargassum fusiforme* during its growth process by near infrared spectroscopy, and explore the change rule of the content of active ingredients in the growth process.

Methods A total of 175 powder samples of *Sargassum fusiforme* in 7 growth stages were collected. The content of polysaccharides and polyphenols were determined by ultraviolet-visible spectrophotometry, and the content of

基金项目: 浙江省自然科学基金项目(LTGN23C020001)、国家自然科学基金项目(31900274)、温州大学 2022 年实验室开放项目(JWSK2022052)

Fund: Supported by the Zhejiang Provincial Natural Science Foundation of China (LTGN23C020001), the National Natural Science Foundation of China (31900274), and the 2022 Laboratory Opening Project of Wenzhou University (JWSK2022052)

*通信作者: 杨越, 博士, 副教授, 主要研究方向为中药/海洋药物质量快速分析和制药过程质量控制方法。E-mail: 20180209@wzu.edu.cn

*Corresponding author: YANG Yue, Ph.D, Associate Professor, College of Life and Environmental Science, Wenzhou University, Wenzhou 325035, China. E-mail: 20180209@wzu.edu.cn

fucoxanthine was determined by high performance liquid chromatography. Synergy interval partial least squares (Si-PLS) was used to establish the quantitative correction models between the near infrared spectra and the reference values of the 3 kinds of active component indexes, and different pretreatment methods and principal factors were used to optimize the model. **Results** In the process of the growth of *Sargassum fusiforme*, the polysaccharides content changed as cultivation stage>rapid growth stage>mature stage. The change of polyphenols content was rapid growth stage>mature stage>cultivation stage. The change of fucoxanthine content was cultivation stage>rapid growth stage≈mature stage. The near infrared prediction values of polysaccharides, polyphenols and fucoxanthine fitted well with the reference values, and the prediction accuracy of the model was high. The correlation coefficient of prediction (R_p) of the prediction set was greater than 0.95; the root mean square error of prediction (RMSEP) was 11.01, 1.72 and 0.41 mg/g, respectively, and the relative standard of error of prediction (RSEP) was 8.66%, 3.62% and 8.67%, respectively. **Conclusion** This study has revealed the changes of polysaccharides, polyphenols and fucoxanthin content during the growth of *Sargassum fusiforme*. It is confirmed that near infrared spectroscopy combined with Si-PLS can be successfully used to determine the content of active components in the growth process of *Sargassum fusiforme*, and this method is simple, rapid, accurate, nondestructive and environmental friendly.

KEY WORDS: near infrared spectroscopy; *Sargassum fusiforme*; growth process; active components; rapid analysis

0 引言

羊栖菜(*Sargassum fusiforme*)隶属于褐藻门褐藻纲墨角藻目马尾藻科, 又被称为小叶海藻、长寿菜、海大麦等。羊栖菜营养丰富, 其脂质和可消化吸收的糖类物质含量很低, 是一种低热量的海洋保健食品^[1-2]。同时羊栖菜也具有较高的药用价值, 在《本草纲目》《神农本草经》等药物典籍中均有其治疗病症及用药方法的记载, 并作为药物使用至今。羊栖菜中化学成分较为复杂, 其中多糖、多酚、岩藻黄质、甘露醇为主要活性成分, 具有降血压、降血糖、降血脂、抗血栓、抗病毒等功效^[3-8]。由于羊栖菜具备较高的营养和药用价值, 其早已成为我国沿海民众的传统健康美食, 具备非常广阔的市场前景。然而, 羊栖菜的生长周期较长, 主要分为栽培期、快速生长期和成熟期。不同的生长环境如温度、光照、盐度和潮汐等因素会直接影响羊栖菜体内活性物质的积累, 在羊栖菜的生长发育周期内, 其活性成分如多糖、多酚、岩藻黄质、总甾醇及叶绿素 a、类胡萝卜素和 N、P 浓度等会受到水域环境因素的影响而发生动态变化, 从而导致羊栖菜不同生长时期的品质存在明显差异^[9-10]。因此, 有必要对不同生长阶段羊栖菜的活性成分含量进行检测, 从而有效指导其采收和质量鉴定。

目前羊栖菜中生物活性成分含量的测定方法有高效液相色谱法(high performance liquid chromatography, HPLC)^[11]、紫外-可见分光光度法^[12]和化学发光法^[13]等。然而这些分析方法往往存在测定耗时长、操作过程烦琐、大量化学试剂使用危害环境等缺点。不同生长阶段的羊栖菜活性成分差异较大, 而目前尚未见到羊栖菜活性成分快速测定方法的相关报道。因此, 亟需建立一种快速、简便、准确的羊栖菜活性成分测定方法。近红外光谱法(near infrared

spectroscopy, NIRS)作为一种间接的高新分析技术, 具备快速、无损、绿色, 以及多组分同时测定等特点^[14-18], 已经广泛应用于石油、化工、食品、纺织、农业等众多领域^[19-23]。本研究拟对不同生长阶段羊栖菜的活性成分含量进行检测, 探究其生长过程中的活性成分含量变化规律; 同时基于 NIRS 和化学计量学算法构建一套快速准确的羊栖菜生长过程活性成分分析方法, 克服传统分析方法费时费力的缺点, 有助于提升羊栖菜的品质控制水平、改善羊栖菜采收策略, 实现经济效益最大化。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

羊栖菜采于浙江省温州市洞头区养殖场, 采摘时间分别为 2020 年 12 月 11 日(栽培期)、2021 年 1 月 9 日(栽培期)、2021 年 2 月 1 日(快速生长期)、2021 年 3 月 5 日(快速生长期)、2021 年 3 月 20 日(快速生长期)、2021 年 4 月 4 日(成熟期)、2021 年 4 月 19 日(成熟期), 共计 7 批。在同一生长海域采集 10 kg 左右外观、长短一致的羊栖菜。经温州大学生命与环境科学学院佟海滨副研究员鉴定。

浓硫酸、苯酚、碳酸钠、甲醇(分析纯, 国药集团化学试剂有限公司); 乙腈(色谱纯)、岩藻黄质对照品(纯度>98.0%)(美国 Sigma 公司); 福林酚(生物试剂, 上海麦克林生化科技有限公司); 葡萄糖、没食子酸对照品(纯度>98.0%, 成都曼斯特生物科技有限公司)。

1.2 仪器与设备

Agilent 1260 高效液相色谱仪(美国 Agilent 公司); Waters Xbridge C₁₈ 色谱柱(250 mm×4.6 mm, 5 μm)(美国 Waters 公司); AntarisII 傅立叶变换近红外光谱仪(美国

Thermo Fisher Scientific 公司); 5901R 型高速冷冻离心机(德国 Eppendorf 公司); TU1810 紫外可见分光光度计(北京普析通用仪器有限责任公司); SQP 电子精密天平(精度 0.00001 g, 北京赛多利斯科学仪器有限公司); JP-040S 超声波清洗机(深圳市洁盟清洗设备有限公司); CT15RT 型高速冷冻离心机(上海天美生化仪器设备工程有限公司); Milli-QIQ 7000 纯水系统(美国 Merck Millipore 公司); 800Y 高速多功能粉碎机(永康铂欧五金制品有限公司); Binder 恒温鼓风干燥机(上海合测实业有限公司); 聚四氟乙烯针头滤器(直径: 13 mm, 孔径: 0.22 μm , 上海雷布斯生物科技有限公司)。

1.3 样品处理

将新鲜羊栖菜置于清水中, 去除羊栖菜表面附着的杂藻以及水生物等杂物, 然后将清洗干净的羊栖菜置于恒温鼓风干燥机, 在 80°C 下干燥 4.5 h 至恒重, 可得到干燥羊栖菜。将干燥羊栖菜置于粉碎机中粉碎打粉, 过 80 目筛网, 得到粒度均匀的羊栖菜粉末, 每批收集 25 份, 获得 7 批共计 175 份具有代表性的羊栖菜粉末样本。

1.4 光谱采集

使用 Antaris II 型傅立叶变换近红外光谱仪采集羊栖菜粉末样品的漫反射光谱, 设定光谱扫描范围为 4000~10000 cm^{-1} , 扫描次数为 64 次, 分辨率为 8 cm^{-1} , 以空气为参比, 每份样品重复测定 3 次, 取平均光谱用于后续数据处理以减小误差。

1.5 活性成分含量测定

以无水葡萄糖为对照品, 采用紫外-可见分光光度法测定羊栖菜中多糖含量^[24-26]; 以没食子酸为对照品, 采用紫外-可见分光光度法测定羊栖菜中多酚含量^[27-29]; 以岩藻黄质为对照品, 采用 HPLC 测定羊栖菜中岩藻黄质含量^[30]。

1.6 模型性能评价

模型性能的评价通常采用校正集均方根误差(root mean square error of calibration, RMSEC)、预测集均方根误差(root mean square error of prediction, RMSEP)、校正集相关系数(correlation coefficient of calibration, R_c)、预测集相关系数(correlation coefficient of prediction, R_p)、预测集相对偏差(relative standard of error of prediction, RSEP)作为评价指标考察不同建模方法的优劣^[31-32]。通常 R 值越接近于 1、RMSEC 和 RMSEP 之间的差距越小, 则代表模型的预测性能越高。

1.7 数据处理

NIR 光谱数据通过 Result-Integration 软件获取, 样本集划分和光谱预处理采用 TQ Analyst 软件, 采用浓度梯度法将样品集划分为校正集和预测集, 划分比例为 4:1, 共得到 140 个校正样本和 35 个预测样本。变量选择及模型建立采用 MATLAB 软件。制表软件为 Word 2010, 绘图软件为

Origin 2021, 统计学分析使用 Excel 2010 软件。

2 结果与分析

2.1 不同生长阶段羊栖菜活性成分含量变化

图 1 为 7 批羊栖菜活性成分含量的动态变化统计结果。羊栖菜多糖的含量在整个生长过程中呈逐渐降低而后稳定的趋势, 赵越剑等^[33]和刘树霞等^[34]研究发现, 羊栖菜幼孢子体内营养物质丰富, 生化代谢过程活跃, 这可能与羊栖菜多糖在栽培期采收时含量最高有关。多酚含量在第 5 批即 3 月下旬时达到最高, 然后开始下降。孙圆圆等^[35]研究表明羊栖菜有两个生长适温期, 第一个生长适温期为 10~11 月, 第二个生长适温期为 3~4 月, 在生长适温期内羊栖菜生长迅速, 生化物质含量增速显著, 这可能是本研究中快速生长期羊栖菜多酚含量最高的原因。对于岩藻黄质, 第 2 批的含量最高, 其他生长阶段含量变化不大。孟庆俊等^[36]研究发现, 羊栖菜的最佳生长温度为 15~25°C 范围, 超过 25°C 藻体的生长速率和光合作用会受到抑制, 30°C 时羊栖菜藻体会出现色素分解。在栽培期, 温州洞头海域海水温度是在 15~20°C 内, 最适宜羊栖菜生长, 这可能与岩藻黄质含量最高相关。综上所述, 在羊栖菜的生长过程中, 多糖含量变化为栽培期>快速生长期>成熟期; 多酚含量变化为快速生长期>成熟期>栽培期; 岩藻黄质含量变化为栽培期>快速生长期~成熟期。

2.2 样本集的划分

样本集中各指标成分的统计结果如表 1 所示。由表 1 可知, 校正集多糖、多酚和岩藻黄质的含量范围均覆盖了预测集的含量范围, 代表样本的划分较为合理, 有利于建立高精度模型。

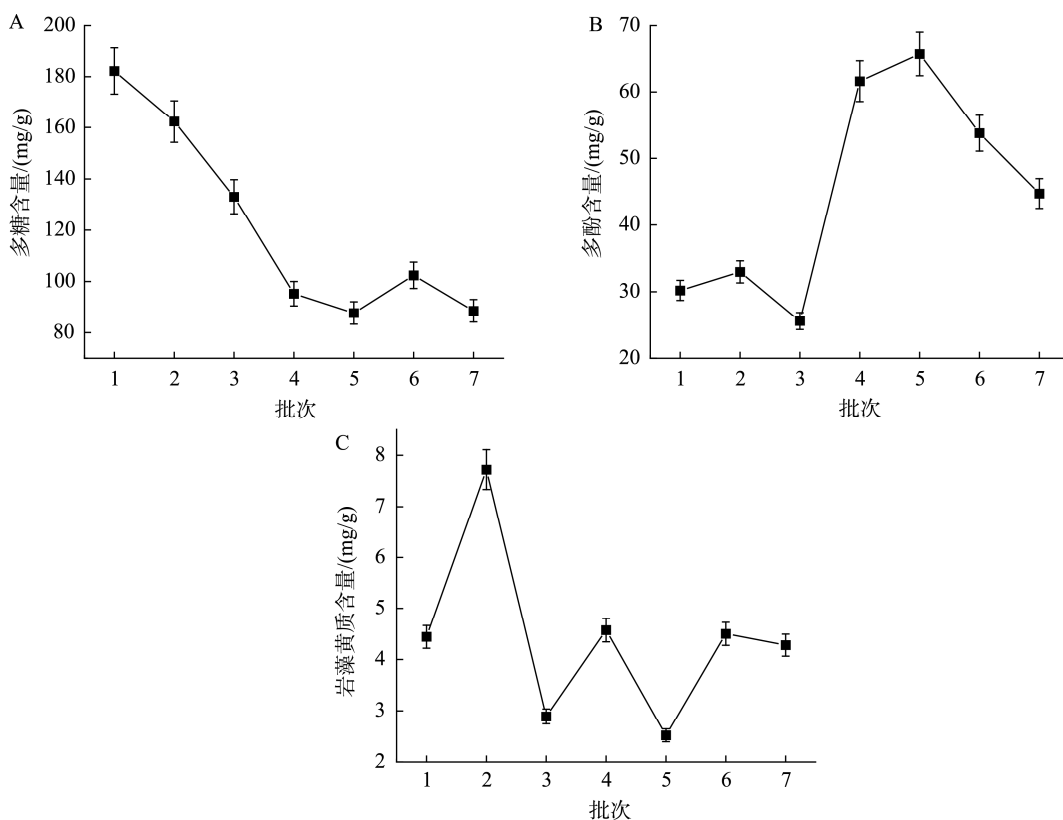
2.3 近红外光谱特征

近红外光谱区域的主要光谱信息来源于含氢基团如 -OH、-NH 和 -CH 等的倍频与合频吸收, 绝大多数生物化学样品在此区域均有相应的吸收带, 因此借助这些信息可进行定性或定量分析。图 2 为羊栖菜生长过程中的近红外原始光谱。可以看出, 不同样本的光谱特征并未见显著差异, 在 5100 和 6900 cm^{-1} 附近均有较为明显的吸收峰, 分别为 O-H 键的一级倍频和伸缩振动组合频区域。

2.4 定量模型的建立与评价

2.4.1 光谱预处理方法的选择

基线漂移、噪声、环境、背景干扰等因素会对近红外光谱产生明显干扰^[37-39], 为了提高信噪比和提升定量校正模型的准确度和稳健性^[40], 在建模之前一般要对原始光谱进行预处理。本研究采用无光谱数据预处理、一阶导数+ Savitzky-Golay (SG)卷积平滑(1D+SG)、二阶导数+SG 卷积平滑(2D+SG)、多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)和标准正态变换(standard normal variate, SNV)共 5 种不同光谱预处理方法



注: 1~2 表示栽培期; 3~5 快速生长期; 6~7 成熟期。

图 1 7 批羊栖菜活性成分含量变化曲线

Fig.1 Change trends of the content of active components in 7 batches of *Sargassum fusiforme*

表 1 校正集和预测集数据的统计结果(mg/g)

Table 1 Statistical results of samples in the calibration set and validation sets (mg/g)

成分	校正集			预测集		
	最小值	最大值	平均值	最小值	最大值	平均值
多糖	61.08	216.59	121.67	69.88	207.74	121.61
多酚	12.43	70.26	44.93	21.70	69.48	45.04
岩藻黄质	1.99	8.28	4.42	2.10	8.13	4.42

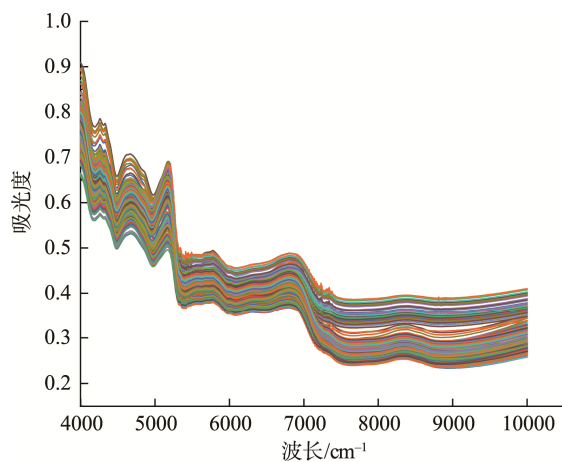


图 2 羊栖菜生长过程中的近红外原始光谱

Fig.2 Raw near infrared spectra of *Sargassum fusiforme* from the growth process

对建模效果进行考察, 结果见表 2。由表 2 可知, 多糖在选用 SNV 预处理时 RMSEP 值最小, 模型性能最好; 多酚模型在选用 1D+SG、岩藻黄质模型在选用 MSC 预处理时模型效果最好。因此, 为了提升模型预测精度, 多糖、多酚和岩藻黄质分别选择 SNV、1D+SG 和 MSC 这 3 种光谱预处理方法。

表 2 不同光谱预处理方法对 PLS 模型性能的影响

Table 2 Effects of different spectra pretreatments on models

成分/(mg/g)	评价参数	无预处理	1D+SG	2D+SG	MSC	SNV
多糖	R_C	0.966	0.971	0.965	0.949	0.964
	R_P	0.930	0.938	0.912	0.891	0.953
	RMSEC	9.556	8.766	9.616	11.664	9.832
	RMSEP	13.437	12.660	14.938	16.674	11.079
多酚	R_C	0.987	0.994	0.997	0.988	0.989
	R_P	0.984	0.996	0.985	0.978	0.985
	RMSEC	2.385	1.578	1.156	2.314	2.155
	RMSEP	2.639	1.383	2.572	3.091	2.553
岩藻黄质	R_C	0.967	0.984	0.982	0.967	0.967
	R_P	0.953	0.951	0.937	0.963	0.963
	RMSEC	0.407	0.283	0.305	0.406	0.407
	RMSEP	0.482	0.493	0.555	0.430	0.430

注: 粗体为最优光谱预处理方法。

2.4.2 建模波段的选择

组合区间-偏最小二乘法(synergy interval partial least squares, Si-PLS)是一种基于区间子集的所有可能 PLS 的全可能区间组合检验方法^[41]。其步骤如下: 首先, 将数据集细分为若干个区间(变量); 其次, 计算二、三、四区间的所有可能的 PLS 模型组合; 选择交叉验证误差均方根(root mean square error of cross validation, RMSECV)最低的区间组合。因此, 本研究将上述预处理后的多糖、多酚和岩藻黄质的全光谱(4000~10000 cm^{-1})数据划分为 11~20 个区间, 并结合 2、3 或 4 个子区间, 以最低的 RMSECV 值实现多个区间的全局最优组合。基于不同区间组合的多糖、多酚和岩藻黄质的 Si-PLS 模型结果见表 3, 粗体标注的为最优模型。由表 3 可知, 多糖 Si-PLS 模型的最低 RMSECV 是将光谱集分割为 20 个区间, 并将区间数[5 6 8]组合得到的最佳光谱区间对应于 5203~5801 cm^{-1} 和 6106~6403 cm^{-1} ; 多酚 Si-PLS 模型的最低 RMSECV 是将光谱集分割为 14 个区间, 并将区间数[1 2 3 12]组合得到的最佳光谱区间对应于 4000~5292 cm^{-1} 和 8721~9145 cm^{-1} ; 岩藻黄质 Si-PLS 模型的

最低 RMSECV 是将光谱集分割为 20 个区间, 并将区间数[5 7 19]组合得到的最佳光谱区间对应于 5203~5500 cm^{-1} , 5805~6102 cm^{-1} 和 9411~9704 cm^{-1} 。3 种 Si-PLS 模型的最优变量区间分别包含 234、447 和 233 个变量。

2.4.3 主因子数的选择

在构建 Si-PLS 模型时, 主因子个数的选择会显著影响模型的预测性能。主因子数过少则建模信息不全, 出现“欠拟合”, 导致模型精度不足; 主因子数过多则会带入大量无关信息(如噪音), 出现“过拟合”现象, 导致预测能力明显下降^[42-43]。本研究以 RMSECV 为评价指标, 考察不同主因子数对 Si-PLS 模型预测性能的影响。RMSECV 值越小, 代表模型预测性能越高, RMSECV 最小值对应的主因子数为最佳主因子数。多糖、多酚和岩藻黄质的 Si-PLS 模型不同主因子数下的 RMSECV 值见图 3。结果表明, 3 种 Si-PLS 模型分别选取主因子数为 10、10、10 时所得的 RMSECV 值最小。因此, 本研究选择 10、10、10 分别作为多糖、多酚和岩藻黄质的最佳主因子数。

表 3 基于不同区间组合的多糖、多酚和岩藻黄质的 Si-PLS 模型结果

Table 3 Results of Si-PLS models with selected optimal spectral subintervals for polysaccharides, polyphenols and fucoxanthine

成分/(mg/g)	子区间数目	区间组合	PCs	R_C	RMSEC	R_P	RMSEP
多糖	11	[2 3]	10	0.957	10.73	0.943	12.20
	12	[2 3 5 6]	10	0.956	10.81	0.949	11.57
	13	[1 3 8]	9	0.956	10.85	0.954	11.03
	14	[2 3 6 7]	10	0.957	10.74	0.946	11.96
	15	[1 3 4 8]	9	0.956	10.86	0.952	11.30
	16	[1 5]	10	0.956	10.81	0.954	11.05
	17	[1 3 13 14]	9	0.957	10.65	0.950	11.55
	18	[3 4 7]	8	0.957	10.67	0.947	11.85
	19	[1 6 9]	10	0.956	10.85	0.954	11.05
	20	[5 6 8]	10	0.957	10.70	0.954	11.01
	11	[1 2 3 10]	10	0.986	2.45	0.993	1.70
	12	[1 2 3 9]	10	0.986	2.49	0.994	1.67
	13	[1 2 3 11]	10	0.987	2.42	0.992	1.81
	14	[1 2 3 12]	10	0.988	2.32	0.993	1.72
	15	[1 3 4 13]	10	0.987	2.35	0.993	1.77
	16	[2 3 4 14]	10	0.986	2.48	0.993	1.73
	17	[1 3 4 15]	10	0.985	2.56	0.992	1.88
	18	[1 3 4 15]	10	0.986	2.49	0.991	2.00
	19	[1 5 10 16]	10	0.987	2.38	0.993	1.79
20	[1 5 10 17]	10	0.987	2.43	0.991	1.95	
岩藻黄质	11	[4 5 11]	9	0.963	0.43	0.966	0.41
	12	[1 11]	10	0.965	0.42	0.962	0.44
	13	[5 6]	10	0.964	0.42	0.967	0.40
	14	[1 6 9 13]	9	0.964	0.43	0.968	0.40
	15	[9 11 12 13]	10	0.964	0.42	0.967	0.40
	16	[6 8 15]	10	0.966	0.42	0.965	0.42
	17	[7 10 12 13]	10	0.964	0.43	0.968	0.40
	18	[4 7 17]	10	0.965	0.42	0.962	0.43
	19	[2 7 14 16]	10	0.965	0.42	0.965	0.42
	20	[5 7 19]	10	0.967	0.41	0.967	0.41

注: 粗体为最优区间组合。

2.4.4 近红外定量模型的建立与验证

基于上述优化过程, 建立了多糖、多酚和岩藻黄质的 Si-PLS 定量校正模型。3 个活性成分指标 Si-PLS 模型的校

正集和预测集中的参考值和近红外预测值的相关性见图 4。从图 4 中可以看出, 近红外预测值与参考值表现出良好的拟合度, 3 个定量校正模型的 R_C 值和 R_P 值均高于 0.95,

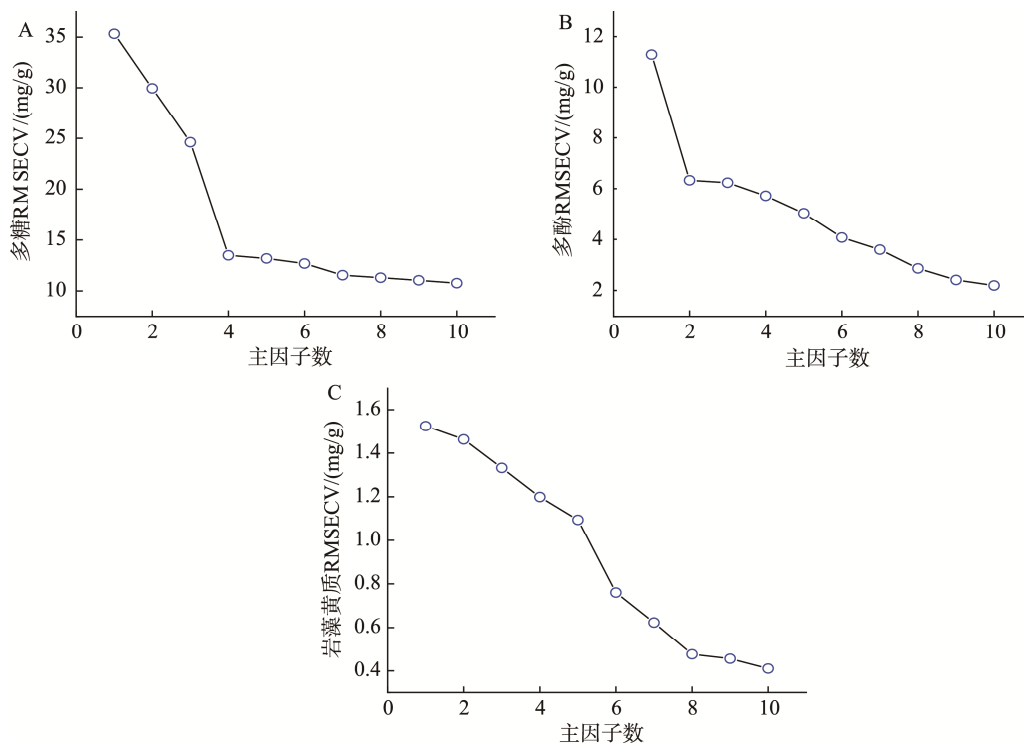


图 3 不同主因子数下的 RMSECV 值
Fig.3 RMSECV values under different principal factors

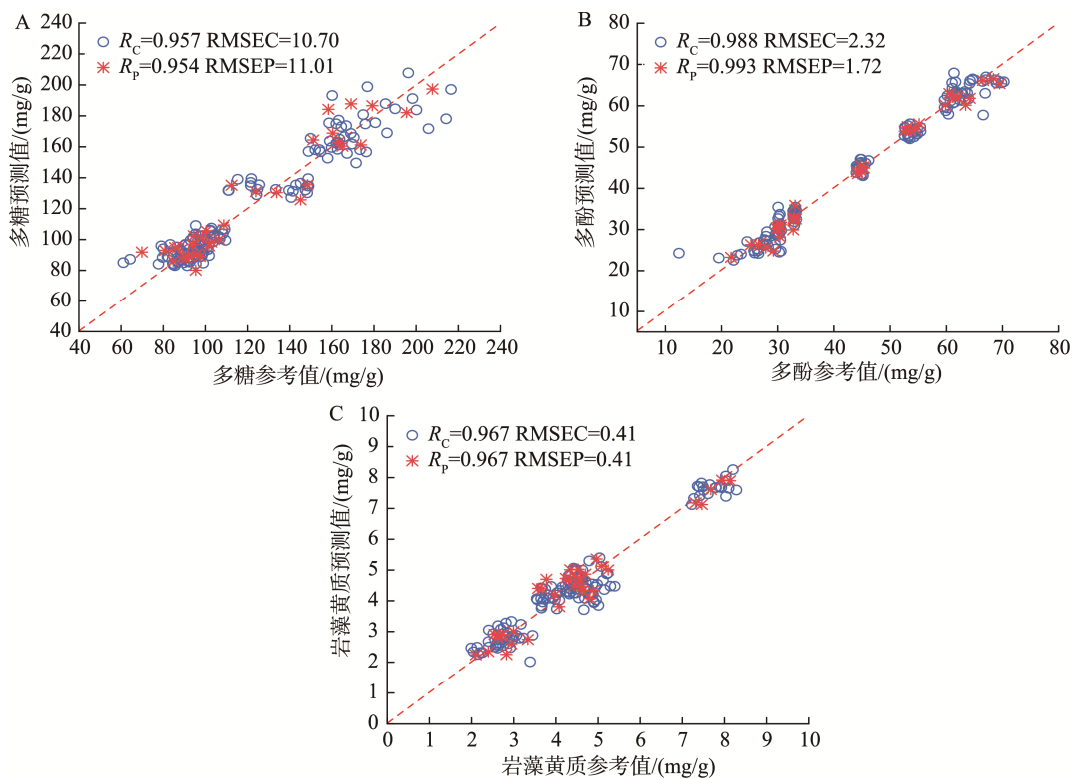


图 4 校正模型的相关性图
Fig.4 Correlation diagram of calibration models

每个模型的 RMSEC 值和 RMSEP 值较小且较为接近, 并且多糖、多酚和岩藻黄质的 RSEP 值分别为 8.66%、3.62%、8.67%, 均控制在 10% 以内。表明模型的预测精度较高, 可准确预测羊栖菜生长过程中多糖、多酚和岩藻黄质的含量。

为了进一步验证模型的预测能力, 利用已校正的模型预测 35 个 7 个生长阶段新的羊栖菜粉末样品。结果如图 5 所示, 可以看出 3 个定量模型给出的近红外预测值与参考值十分接近, 变化趋势基本保持一致, 表明采用 NIRS 可以成功预测羊栖菜生长过程中的 3 种活性指标含量变化。

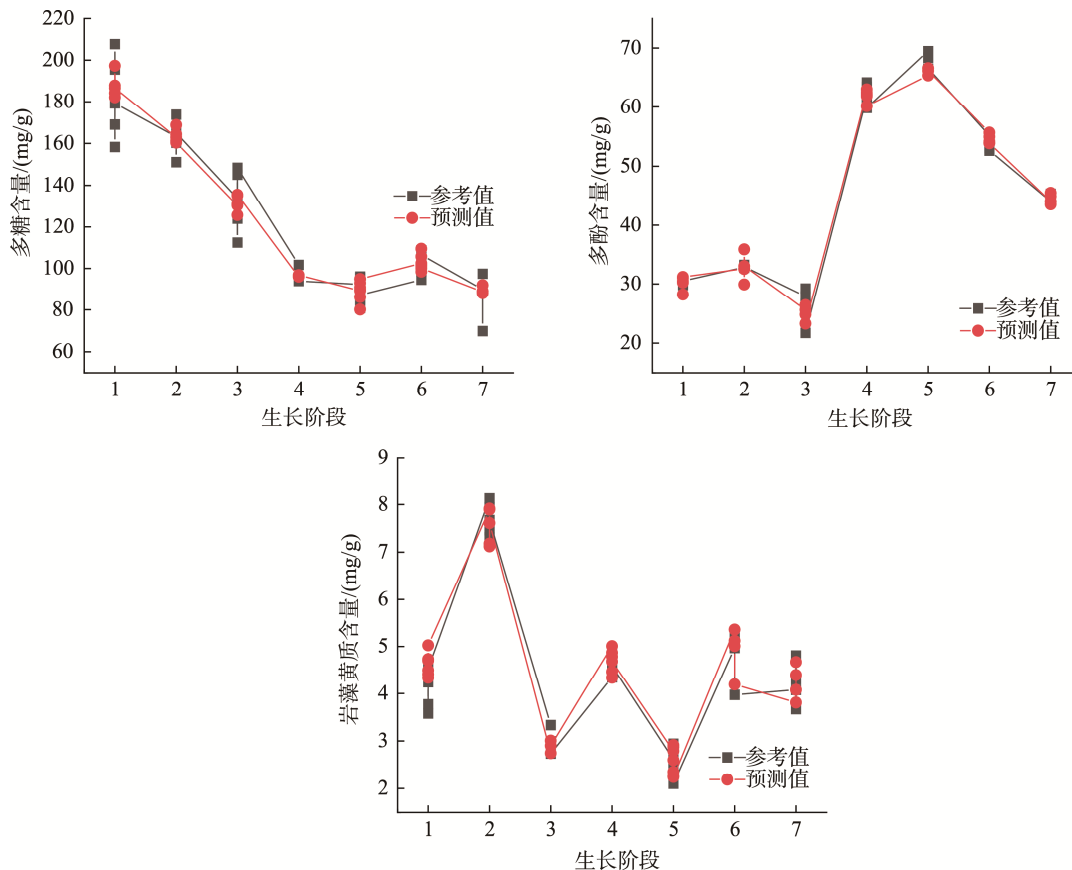


图 5 预测批次的近红外预测值与参考值对比图

Fig.5 Comparison of the predicted values with the reference values of the test batches

3 结论

本研究对不同生长阶段羊栖菜的活性成分含量进行检测, 发现在羊栖菜的生长过程中, 多糖含量变化为栽培期>快速生长期>成熟期; 多酚含量变化为快速生长期>成熟期>栽培期; 岩藻黄质含量变化为栽培期>快速生长期~成熟期。并且采用 NIRS 结合 Si-PLS 法建立定量校正模型, 实现了快速测定羊栖菜生长过程中多糖、多酚和岩藻黄质 3 种活性成分含量。所建定量模型的 R 值均在 0.95 以上, RSEP 值在 10% 以内, 模型的预测精度较高。该方法的操作简便、无需样品预处理过程, 且成本较低, 不涉及有机试剂, 绿色无污染, 弥补了常规分析方法的不足, 可推广应用于指导羊栖菜的采收工作, 这对于节约资源、提升羊栖菜品质控制水平以及揭示其生长规律具有较为重要的借鉴意义。

参考文献

- [1] 张井, 曹荣, 薛长湖. 真空软包装即食羊栖菜食品的研究与开发[J]. 食品工业科技, 2009, 30(5): 218-220.
ZHANG J, CAO R, XUE CH. Research and development on vacuum soft packing instant *Sargassum fusiforme* foods [J]. Sci Technol Food Ind, 2009, 30(5): 218-220.
- [2] 洪咏平, 戴志远. 羊栖菜食品的开发和利用[J]. 中国水产, 2002, 1: 75-76.
HONG YP, DAI ZY. Development and utilization of *Sargassum fusiforme* food [J]. China Fish, 2002, 1: 75-76.
- [3] YI XL, SI LJ, YAN XH, et al. Galactofucoidans from *Sargassum fusiforme* and their antagonistic effects against the proliferation-inhibition of RAW264.7 macrophage induced by culture supernatants of melanoma cells [J]. Carbohydr Polym Technol Appl, 2021, 2: 100090.
- [4] 梁美娜, 吴明江, 陈胜, 等. 羊栖菜多糖的提取纯化及功能活性研究进展[J]. 食品安全质量检测学报, 2021, 12(21): 8305-8312.

- LIANG MN, WU MJ, CHEN S, *et al.* Research progress on extraction, purification and functional activity of *Sargassum fusiforme* polysaccharides [J]. *J Food Saf Qual*, 2021, 12(21): 8305–8312.
- [5] LIU X, XI X, JIA A, *et al.* A fucoidan from *Sargassum fusiforme* with novel structure and its regulatory effects on intestinal microbiota in high-fat diet-fed mice [J]. *Food Chem*, 2021, 358(7484): 129908.
- [6] NATARAJAN A, JAYAVELU A, THANGAMANI R, *et al.* *In vivo* evaluation of protective effect of *Sargassum fusiforme* on cisplatin induced hepato-renal toxicity [J]. *Physiol Mol Plant Pathol*, 2022, 117: 101748.
- [7] DING HM, CHEN XJ, CHEN HM, *et al.* Effect of *Sargassum fusiforme* polysaccharide on apoptosis and its possible mechanism in human erythroleukemia cells [J]. *Chin J Nat Med*, 2020, 18(10): 749–759.
- [8] 何传辉, 何传波, 魏好程, 等. 羊栖菜多酚提取工艺优化[J]. 食品安全质量检测学报, 2015, 6(8): 2896–2902.
- HE CH, HE CB, WEI HC, *et al.* Optimization of extraction process for polyphenols from *Sargassum fusiforme* [J]. *J Food Saf Food Qual*, 2015, 6(8): 2896–2902.
- [9] 崔海峰. 不同品系羊栖菜形态和营养成分的初步分析[D]. 哈尔滨: 东北林业大学, 2013.
- CUI HF. The preliminary analysis of the morphology and nutrient in different strain of *Sargassum fusiforme* [D]. Harbin: Northeast Forestry University, 2013.
- [10] 刘迎超, 李景玉, 宫庆礼. 羊栖菜的生长和生化组成的影响因素[J]. 河北渔业, 2016, 8: 55–60.
- LIU YC, LI JY, GONG QL. Effect factors of growth and biochemical composition of *Sargassum fusiforme* [J]. *Hebei Fish*, 2016, 8: 55–60.
- [11] 李伟, 张旭, 吴明江. HPLC 法分析羊栖菜与铜藻多糖的单糖组成[J]. 高师理科学刊, 2015, 35(7): 49–53.
- LI W, ZHANG X, WU MJ. Analysis of the monosaccharide composition of polysaccharides from *Sargassum fusiorme* and *Sargassum horneri* by HPLC [J]. *J Sci Teach Coll Univ*, 2015, 35(7): 49–53.
- [12] 李海洋. 中药海藻商品规格标准建立及安全性研究[D]. 南京: 南京中医药大学, 2022.
- LI HY. Establishment of commercial specification standard of *Sargassum* and its clinical safety evaluation [D]. Nanjing: Nanjing University of Traditional Chinese Medicine, 2022.
- [13] 汪财生, 王璐, 刘丽平, 等. 羊栖菜岩藻黄质色素的抗氧化性研究[J]. 食品工业科技, 2012, 33(23): 125–128.
- WANG CS, WANG L, LIU LP, *et al.* Study on antioxidant activities of fucoxanthin pigments from *Sargassum fusiform* [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2012, 33(23): 125–128.
- [14] 雷晓晴, 李耿, 王秀丽, 等. 基于近红外光谱法快速测定丹参中 5 种成分模型的建立[J]. 中草药, 2018, 49(11): 2653–2661.
- LEI XQ, LI G, WANG XL, *et al.* Model establishment for rapid determination the content of the five components in *Salvia miltiorrhiza* based on NIRS spectroscopy [J]. *China Tradit Herb Drugs*, 2018, 49(11): 2653–2661.
- [15] 张金巍, 张延莹, 刘岩, 等. 近红外光谱法在线质量监控白芍工业化提取[J]. 中草药, 2011, 42(12): 2459–2461.
- ZAHNG JW, ZHANG YY, LIU Y, *et al.* On-line quality control for *Paeoniae radix Alba* industrial extraction by NIRS [J]. *China Tradit Herb Drugs*, 2011, 42(12): 2459–2461.
- [16] 战皓, 吴宏伟, 张东, 等. 近红外光谱法测定不同产地黄芪中毛蕊异黄酮葡萄糖苷和黄芪甲苷含量[J]. 光谱学与光谱分析, 2017, 37(5): 1391–1396.
- ZHAN H, WU HW, ZHANG D, *et al.* Determination of calycosin-7-glucoside and astragaloside in *Astragali radix* with near infrared spectroscopy [J]. *Spectrosc Spec Anal*, 2017, 37(5): 1391–1396.
- [17] 闫珂巍, 王福, 梅国荣, 等. 基于近红外光谱技术快速定性鉴别广陈皮模型的建立[J]. 中草药, 2015, 46(20): 3096–3099.
- YAN KW, WANG F, MEI GR, *et al.* Application of near infrared spectroscopy in identification of *Citrus reticulata* [J]. *China Tradit Herb Drugs*, 2015, 46(20): 3096–3099.
- [18] 陈佳乐, 金叶, 陈红英, 等. 川芎药材的近红外多指标快速质量评价[J]. 中草药, 2016, 47(6): 1004–1009.
- CHEN JL, JIN Y, CHEN HY, *et al.* Rapid quality evaluation of *Chuanxiong rhizoma* with multi-indicators by near infrared spectroscopy [J]. *China Tradit Herb Drugs*, 2016, 47(6): 1004–1009.
- [19] 梁志勇, 孙甲. 近红外方法对新疆油田红 003 井重质稠油性能的评价[J]. 石油和化工设备, 2018, 21(9): 45–49.
- LIANG ZY, SUN J. Evaluation of heavy oil in well red 003 of Xinjiang oilfield by near infrared method [J]. *Pet Chem Equip*, 2018, 21(9): 45–49.
- [20] 丁继刚, 韩东海, 李永玉, 等. 基于可见/近红外漫透射光谱的马铃薯黑心病及淀粉含量同时在线无损检测[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(6): 1909–1915.
- DING JG, HAN DH, LI YY, *et al.* Simultaneous non-destructive on-line detection of potato black-heart disease and starch content based on visible/near infrared diffuse transmission spectroscopy [J]. *Spectrosc Spec Anal*, 2020, 40(6): 1909–1915.
- [21] ABESHU Y. Development of NIRS re-calibration model for ethiopian barley (*Hordeum vulgare*) lines traits to determine their brewing potential [J]. *J Agric Food Res*, 2021, 6: 100238.
- [22] DU WQ, ZHENG JH, LI WX, *et al.* Efficient recognition and automatic sorting technology of waste wextiles based on online near infrared spectroscopy and convolutional neural network [J]. *Resour Conserv Recycl*, 2022, 180: 106157.
- [23] MIRAI S, NAOKO Y, TATSUO K, *et al.* Clarification of the internal structure and factors of poor dissolution of substandard roxithromycin tablets by near infrared chemical imaging [J]. *Int J Pharm*, 2021, 596: 120232.
- [24] 陈霞, 杨鸽华. 五味子-黄芪不同比例配伍对混合多糖含量及体外抗氧化活性的影响[J]. 中国中医药科技, 2021, 28(4): 548–552.
- CHEN X, YANG GH. Effects of different compatibility of Wuweizi-Huangqi (*Fructus schisandrae-Astragalus*) on mixed polysaccharide content and antioxidant activity *in vitro* [J]. *Chin J Tradit Med Sci Technol*, 2021, 28(4): 548–552.
- [25] 张婷, 刘安韬, 刘喜华, 等. 四种石斛的薄层鉴别及多糖含量测定[J]. 中国医药科学, 2021, 11(3): 71–74.
- ZHANG T, LIU ANT, LIU XH, *et al.* TLC identification and polysaccharide content determination of four *Dendrobium* species [J]. *China Med Sci*, 2021, 11(3): 71–74.
- [26] 潘东梅, 蔡维珊, 梁业婷, 等. 黄精中糖类成分的含量测定方法比较及其酒蒸工艺优化[J]. 中国药房, 2021, 32(24): 2994–3000.
- PAN DM, CAI WS, LIANG YT, *et al.* Comparison of determination methods of saccharides in *Polygonatum cyrtonea* and optimization of its wine-steaming technology [J]. *China Pharm*, 2021, 32(24): 2994–3000.

- [27] 罗一甲, 祝赫, 李潇涵, 等. 赤霞珠酿酒葡萄总酚含量的近红外光谱定量分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(7): 2036–2042.
LUO YJ, ZHU H, LI XH, *et al.* Quantitative analysis of total phenol content in Cabernet Sauvignon grape based on near infrared spectroscopy [J]. Spectrosc Spec Anal, 2021, 41(7): 2036–2042.
- [28] 冯晓翎, 曹诗瑜, 徐晓瑜, 等. 11个鲜食葡萄品种总酚含量和抗氧化活性的评价[J]. 食品工业科技, 2019, 40(6): 68–75.
FENG XL, CAO SY, XU XY, *et al.* Antioxidant capacities and total phenolic contents of 11 grape varieties [J]. Sci Technol Food Ind, 2019, 40(6): 68–75.
- [29] 邹晓红, 曹骋, 曾元儿, 等. 不同产地砂仁总酚测定及抗氧化活性比较[J]. 中国现代中药, 2018, 20(7): 811–815.
ZOU XH, CAO C, ZENG YER, *et al.* Determination of total phenolic content and antioxidant activities of *Fructus amomifrom* various habitats [J]. Mod Chin Med, 2018, 20(7): 811–815.
- [30] 张怡评, 杨婷, 阎光宇, 等. 高效液相色谱法测定海胆黄中岩藻黄质与岩藻黄醇[J]. 中国海洋药物, 2020, 39(1): 38–42.
ZHANG YP, YANG T, YAN GY, *et al.* Determination of fucoxanthin and fucoxanthinol in sea urchin gonad by HPLC [J]. Chin J Mar Drugs, 2020, 39(1): 38–42.
- [31] DU CS, SUN LJ, BAI HY, *et al.* Quantitative detection of azodicarbonamide in wheat flour by near infrared spectroscopy based on two-step feature selection [J]. Chem Intell Lab Sys, 2021, 219: 104445.
- [32] YANG Y, TONG HB, YANG LC, *et al.* Application of near infrared spectroscopy and chemometrics for the rapid quality assessment of *Sargassum fusiforme* [J]. Postharvest Biol Technol, 2021, 173: 111431.
- [33] 赵越剑, 吴红艳, 邹定辉, 等. 阳光紫外辐射对羊栖菜人工幼苗生长和光合电子传递速率的影响[J]. 海洋通报, 2009, 28(6): 51–56.
ZHAO YJ, WU HY, ZOU DH, *et al.* Effects of solar UVR on the growth and photosynthetic electron transfer rate in artificially raised young seedlings of *Hizikia fusiformis* [J]. Mar Sci Bull, 2009, 28(6): 51–56.
- [34] 刘树霞, 邹定辉, 徐军田. 羊栖菜幼孢子体对不同 N 水平生长条件和阳光紫外辐射的响应[J]. 生态学报, 2010, 30(20): 5562–5568.
LIU SX, ZOU DH, XU JT. Response of the young sporophytes of *Hizikia fusiformis* to different N growth conditions and the solar radiation [J]. Acta Ecol Sin, 2010, 30(20): 5562–5568.
- [35] 孙圆圆, 孙庆海, 孙建璋. 温度对羊栖菜生长的影响[J]. 浙江海洋学院学报, 2009, 28(3): 342–347.
SUN YY, SUN QH, SUN JZ. The effect temperature on the growth of *Sargassum fusiforme* [J]. J Zhejiang Ocean Univ, 2009, 28(3): 342–347.
- [36] 孟庆俊, 王华芝, 陈暖, 等. 环境因子对羊栖菜氮磷吸收速率、生长速率和叶绿素 a 含量的影响[J]. 海洋环境科学, 2010, 29(5): 723–727.
MENG QJ, WANG HZ, CHEN N, *et al.* Effects of environmental factors on uptake rate of nitrogen and phosphate, growth rate and content of chlorophyll-a in *Sargassum fusiforme* [J]. Mar Environ Sci, 2010, 29(5): 723–727.
- [37] 余梅, 李尚科, 杨菲, 等. 基于近红外光谱技术与优化光谱预处理的陈皮产地鉴别研究[J]. 分析测试学报, 2021, 40(1): 65–71.
YU M, LI SK, YANG F, *et al.* Identification on different origins of *Citri reticulata pericarpium* using near infrared spectroscopy combined with optimized spectral pretreatments [J]. J Instrum Anal, 2021, 40(1): 65–71.
- [38] 李浩光, 于云华, 逢燕, 等. 粒子群算法的近红外光谱定性分析预处理及特征提取参数优化方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(9): 2742–2747.
LI HG, YU YH, FENG Y, *et al.* Research of parameter optimization of preprocessing and feature extraction for NIRS qualitative analysis based on PSO method [J]. Spectrosc Spec Anal, 2021, 41(9): 2742–2747.
- [39] AN CQ, YAN X, LU C, *et al.* Effect of spectral pretreatment on qualitative identification of adulterated bovine colostrum by near infrared spectroscopy [J]. Infrared Phys Technol, 2021, 118: 103869.
- [40] 卢洁, 田婧, 梁振华, 等. 近红外光谱法快速测定香菇总糖含量[J]. 食品科学, 2021, 42(12): 189–194.
LU J, TIAN J, LIANG ZH, *et al.* Application of near infrared spectroscopy in the rapid detection of total sugar content in *Lentinula edodes* [J]. Food Sci, 2021, 42(12): 189–194.
- [41] MULLER ALH, PICOLOTO RS, MELLO PD, *et al.* Total sulfur determination in residues of crude oil distillation using FT-IR/A TR and variable selection methods [J]. Spectrochim Acta A, 2012, 89(4): 82–87.
- [42] 阿地力江·依米提, 马晋芳, 肖雪, 等. 近红外光谱技术快速测定孕马尿中雌酮硫酸钠的含量[J]. 新疆医科大学学报, 2020, 43(7): 936–941.
YIMITI A, MA JF, XIAO X, *et al.* Rapid determination of sodium estrone sulfate in pregnant mare's urine by near infrared spectroscopy [J]. J Xinjiang Med Univ, 2020, 43(7): 936–941.
- [43] 陈泽, 张绍宁, 江磊, 等. 一种基于近红外光谱技术的苹果甜度无损快速检测方法: 中国, CN105738311A [P]. 2016-07-06.
CHEN Z, ZHANG SN, JIANG L, *et al.* A nondestructive and rapid detection method of apple sweetness based on near infrared spectroscopy: China, CN105738311A [P]. 2016-07-06.

(责任编辑: 郑丽 韩晓红)

作者简介



杨留长, 硕士, 主要研究方向为药用天然活性物质开发利用。
E-mail: 1508348103@qq.com



杨越, 博士, 副教授, 主要研究方向为中药/海洋药物质量快速分析和制药过程质量控制方法。
E-mail: 20180209@wzu.edu.cn