中国农业大学学报 2024,29(4):205-214
Journal of China Agricultural University http://zgnydxxb.ijournals.cn

郑越,李霞,刘娜,王园,齐景伟,安晓萍. 基于NIR定量分析模型快速预测酶解蒲公英中多糖的含量[J]. 中国农业大学学报,2024,29(04):205-214.
ZHENG Yue, LI Xia, LIU Na, WANG Yuan, QI Jingwei, AN Xiaoping. Rapid prediction of polysaccharide content in enzymatically hydrolyzed dandelion based on NIR quantitative analysis model[J]. *Journal of China Agricultural University*, 2024, 29(04): 205-214.
DOI: 10.11841/j.issn.1007-4333.2024.04.18

基于NIR定量分析模型快速预测酶解蒲公英中多糖的含量

郑 越 李 霞 刘 娜 王 园 齐景伟* 安晓萍

(内蒙古农业大学 动物科学学院/内蒙古自治区草食家畜饲料工程技术研究中心/国家乳业技术创新中心奶牛繁育与养殖技术研究中心,呼和浩特 010018)

摘 要 为快速实时评价酶解中草药生产过程中的品质,本研究对5种蒲公英进行酶解,共收集125个酶解蒲公英样品。利用偏最小二乘回归法(PLSR)建立酶解蒲公英多糖的NIR定量分析模型。结果表明:1)使用标准正态变换(SNV)+去趋势(Detrend)+二阶导数(SD)的方法对光谱进行预处理,光谱范围为908~1 670 nm,主因子数为2时,酶解蒲公英多糖预测模型的建模效果最佳。2)模型校正集相关系数(R^2c)为0.917 5,校正集均方根误差(RMSEC)为7.714 4,校正集标准偏差(SEC)为7.753 3,校正集相对分析误差(RPDc)最高为3.480 9;验证集相关系数(R^2p)为0.878 4,验证集均方根误差(RMSECV)为9.411 5,验证集标准偏差(SEP)为9.458 2,验证集相对分析误差(RPDp)为2.867 2。3)外部检验结果显示,样品的预测值和实测值间差异不显著($P>0.05$)。综上,本研究建立的NIR分析模型可对酶解蒲公英的多糖含量进行快速无损的实时监测,为蒲公英酶解过程的质量控制提供技术支持。

关键词 近红外光谱法;定量分析模型;多糖;酶解蒲公英

中图分类号 S816.7 **文章编号** 1007-4333(2024)04-0205-10 **文献标志码** A

Rapid prediction of polysaccharide content in enzymatically hydrolyzed dandelion based on NIR quantitative analysis model

ZHENG Yue, LI Xia, LIU Na, WANG Yuan, QI Jingwei*, AN Xiaoping

(National Center of Technology Innovation for Dairy-Breeding and Production Research Center / Inner Mongolia Herbivorous Livestock Feed Engineering Technology Research Center / College of Animal Science, Inner Mongolia Agricultural University, Hohhot 010018, China)

Abstract In order to quickly and real-time evaluate the quality of Chinese herbs in the production process of enzymatic hydrolysis, the study conducted enzymatic hydrolysis on 5 type of dandelion and a total of 125 samples of five kinds of dandelions were collected. Partial least squares regression (PLSR) method was used to establish the NIR analytical model for enzymatic hydrolysis of dandelion polysaccharides. The results showed as follows: 1) When the spectrum was preprocessed by Standard Normal Variate (SNV) + Detrend + Second Derivative (SD), the spectrum range was 908-1 670 nm, and the principal factor number was 2, the modeling effect of enzymatic dandelion polysaccharide prediction model was the best. 2) The correlation coefficient of the calibration set (R^2c) was 0.917 5, the root mean square error of the

收稿日期:2023-07-14
基金项目:内蒙古自治区科技重大专项(2021ZD0023-3);内蒙古自治区科技计划项目(2022YFSJ0029);国家乳业技术创新中心项目(2022-科研攻关-2)
第一作者:郑越(ORCID:0000-0001-9055-9841),博士研究生,E-mail:Zy10015@163.com
通讯作者:齐景伟(ORCID:0000-0003-1572-0468),教授,主要从事智慧养殖及生物饲料技术创新方面研究,E-mail:qijingwei@imau.edu.cn

calibration set (RMSEC) was 7.714 4, the standard error of the calibration (SEC) was 7.753 3, and the highest relative percent deviation of the calibration set (RPDc) was 3.480 9. The correlation coefficient of the validation set (R^2p) was 0.878 4, the root mean square error of the cross validation set (RMSECV) was 9.411 5, the standard error of prediction (SEP) was 9.458 2, and the relative percent deviation of the validation (RPDp) was 2.867 2. 3) The external test results showed that there was no significant difference between the predicted value and the measured value of the sample ($P>0.05$). In summary, the NIR analytical model established in this study can be used for rapid and non-destructive real-time monitoring of the polysaccharide content of the enzymatic hydrolysis of dandelion, and can provide technical support for the quality control of the enzymatic hydrolysis process of dandelion.

Keywords near infrared spectroscopy; quantitative analysis model; polysaccharides; enzymatic hydrolysis of dandelion

中草药添加剂含有丰富的活性物质,具有抗菌、抗炎、促进动物生长、提高机体免疫力等作用,且在组织中不易产生药物化合物残留,是提高生产效益的绿色、高效的替抗添加剂。中草药在我国来源广泛,药物资源极其丰富,种类繁多,数量巨大,居世界首位[1]。蒲公英是一种常见的中草药,其主要功能成分有多糖类、黄酮类、三萜类、甾醇类和酚酸类等。近年来,研究人员探索了其多种生物活性,包括降血糖、抗氧化、抗炎[2]、抗肿瘤[3]、保肝[4]和免疫调节作用[5],可以提高畜禽的生长性能、抗氧化能力和免疫力,改善动物产品品质,提高生产效益。

多糖是从药用植物中分离和纯化得到的一类大分子化合物,是天然的免疫调节剂。多糖提取方法主要有热水浸提取法、酸碱提取法和酶解法等[6]。热水浸提法是提取多糖最常见的方法,该法简单易操作,但只能提取药用植物中水溶性多糖,提取率较低,并且耗时较长。使用酸碱提取法可以提高植物多糖的提取率,但酸碱浓度不适会引起糖苷键断裂,破坏多糖结构。生物酶解法具有特异性分解植物组织的特点,可将细胞壁中的组成成分如纤维素、半纤维素、果胶质等水解,从而使细胞内大分子活性成分迅速释放[7],具有环保、提取率高等的特点。赵茹等[8]利用纤维素酶辅助提取香菇多糖,测得香菇多糖含量达到5.73%。朱翰林等[9]利用超声辅助酶解提取五味子多糖,多糖得率提高到22.25%。但目前对于植物酶解程度的确定大多数依靠经验判断,具有主观性,无法保证准确性和每批酶解产物的质量标准。若要精准获取酶解品质信息,必须借助化学计量法,植物多糖含量的测定大多使用苯酚-硫酸法,该方法耗时长、试剂危险性高,并对环境有一定污染。因此,寻找一种快速、环保、无损的间接定量检测方法显得尤为重要。

近些年,光谱技术已被广泛用于鉴定和量化天然药物中的活性成分,如核磁共振(NMR)和液相色谱相关的X射线衍射。近红外(NIR)光谱技术综合了光谱技术、化学测定法等多学科的知识,具有快速高效、操作简单、无污染、无损检测和同时测定多组分含量等优点[10],被广泛应用于农业、食品等行业。Liu等[11]通过NIR光谱结合化学计量学对三七中的活性物质进行定量分析,采用主成分回归(PCR)、支持向量回归(SVR)、PLSR、人工神经网络(ANN)和极限学习机(ELM)等109种多元标定方法构建定量模型,结果发现PLSR是一种综合考虑预测精度、过拟合和效率的最优校准方法,适用于7个掺杂数据集的定量分析。张小斌等[12]利用偏最小二乘回归法建立了基于可见/近红外光谱的水蜜桃糖度无损检测方法。Xie等[13]建立基于全波段和PLSR的近红外模型预测油炸和烘烤马铃薯片中丙烯酰胺含量。魏尊苗等[14]利用近红外光谱技术建立了关于粗脂肪、蛋白质、淀粉和总糖的油莎豆的品质检测。目前,利用近红外技术对茶叶[15]、酿酒[16]的发酵过程中的质量监控也有部分研究,但在发酵饲料制备过程中的品质监控应用较少,并且在过程质量监控的研究中多使用台式近红外仪,台式近红外仪体积大,不方便移动,手持式便于携带、检测方便、可以快速获得实时数据,大大提高效率。针对使用手持式近红外光谱仪对蒲公英酶解过程中的多糖含量变化的快速、无损实时检测的研究还未见报道。

为快速环保的实时监测蒲公英酶解过程中多糖含量的变化,本研究使用果胶酶酶解蒲公英,结合PLSR法以RMSEC、RMSECV、SEC、SEP、R^2c、R^2p及RPD为评价指标,对最佳光谱预处理方式、最佳波段以及主因子成分数进行筛选,并通过外部

验证对模型的准确性进行测试，以期建立酶解蒲公英多糖含量预测的NIR模型，为测定蒲公英酶解过程中多糖的含量提供一种快速的无损分析方式，为精准的预测酶解蒲公英的品质评价提供理论支持。

1　材料与方法

1.1　材料

5种蒲公英（来源为山西省太原市、山西省运城市芮城县、山西省运城市盐湖区、安徽省亳州市、内蒙古呼和浩特市）和麸皮原料均购于市场，果胶酶购于夏盛实业集团有限公司；苯酚、浓硫酸购于天津市汇杭化工科技有限公司，均为分析纯。手持式微型近红外光谱仪（MicroNIR Onsite）购于VIAVI Solutions公司。

1.2　试验方法

1.2.1　蒲公英的酶解

以9∶1（$m_{蒲公英}$∶$m_{麦麸}$）的比例将5种不同来源的蒲公英和麸皮分别混合，果胶酶添加量为0.6 g，与27 mL蒸馏水充分混匀。在酶解温度60 ℃下酶解48 h，每6 h取样，每种每次取3袋，得到125份酶解蒲公英样本。将收集到的酶解蒲公英样品于45 ℃烘干并粉碎，保存备用。

1.2.2　多糖的测定

分别吸取0、0.1、0.2、0.3、0.4、0.5、0.6、0.7、0.8、0.9和1 mL的葡萄糖标准溶液至10 mL离心管中，补至1.0 mL。按苯酚-硫酸法[17]在吸光度为490 nm下测定吸光度，绘制标准曲线，标准曲线方程为$y=3.371\,4x+0.187\,6$（$R^2=0.997\,6$）。

以1∶16（$m_{料}$∶$V_{水}$）的料水比称取酶解蒲公英粉末，热水提取35 min，冷却后离心，取上清。准确吸取0.5 mL上清溶液于10 mL离心管中，加0.5 mL蒸馏水后，按照苯酚-硫酸法进行测定。根据标准曲线方程计算样品溶液的总糖含量。

1.2.3　NIR光谱采集与分析

本研究使用VIAVI Solutions公司手持式近红外光谱仪（MicroNIR Onsite）对酶解蒲公英样品进行近红外光谱扫描。在采集过程中，使样品粉末自然填满样品容器，保证样品表面平整。仪器先以白板作为参比，保持垂直照射并避光检测，以漫反射方式设置光谱扫描波长为1 670 nm，测量单个样品的近红外光谱数据10次，积分时间为50 ms，对光谱值进行均值化处理，从而减少环境差异的影响。通过内部交叉验证的方法，对异常样本剔除并采取逐一回收的方式，剔除时观察模型评价指标，判断是否剔除，以保证最大程度的减小异常样本对模型预测能力的影响，提高构建酶解蒲公英多糖含量预测模型的精准度。

1.2.4　校正集和验证集样品的划分

选择10份样品作为完全外部验证集，供完全外部验证分析。将剩余的115份酶解蒲公英样品以6∶1的比例随机分为校正集（100份）和验证集（15份），校正集用于建立酶解蒲公英多糖含量预测模型，验证集用于检测所建模型的准确性，其中验证集中的多糖含量最高值和最低值均包含于校正集中。

1.2.5　光谱预处理方法筛选

光谱数据预处理是为了提高光谱质量，降低系统噪声，获得可靠、准确、稳定的校准模型。本研究采取一阶导数（FD）、二阶导数（SD）、标准正态变换（SNV）和去趋势（Detrend）4种方法及不同组合的预处理方法，通过比较R^2、RMSEC、RMSECV、SEC和SEP值，选择光谱最优预处理方法。

1.2.6　最佳波段的选择

采用MicroNIR™ Pro v3.1软件内的波段筛选程序，根据预处理后的光谱的吸收峰的变化，确定所需要筛选波长的范围。在本研究中将光谱范围分为908～1 000、1 001～1 120、1 124～1 354、1 360～1 546、1 552～1 670和全波段908～1 670 nm共6个光谱区间对校正集的酶解蒲公英光谱进行处理，以筛选出建立预测模型的最佳波段。

1.2.7　主成分数的选择

确定最优主成分可以降低维数，不仅减少了创建模型所需的输入数据量，而且加快了模型的运行速度，提高了预测精度[18]。在模型创建过程中，本研究对1～10的主因子数进行筛选，确定模型的最小的RMSECV值时为最优主成分数。

1.2.8　模型建立及验证

本研究使用MicroNIR™ Pro v3.1软件对光谱进行分析，利用PLSR法建立NIR分析模型。以RMSEC、SEC、R^2c、RPDc、RMSECV、SEP、R^2p和RPDp为指标对模型进行评价。符合要求的模型一般需具有较高的R^2，较小的RMSEC及RMSECV和较高的RPD，RPD一般采取阈值分割法进行评价[19]，当RPD＞2.5时，模型能够很好地满足预测标准[20]。

1.3 统计分析

使用Origin 2021作图。采用Excel 2019进行数据汇总处理，以SAS 9.2各样本中酶解蒲公英多糖进行统计分析，使用近红外光谱仪自带软件MicroNIR™ Pro v3.1对近红外光谱图进行处理和模型建立。

2 结果与讨论

2.1 酶解蒲公英多糖的化学测定

表1为125份酶解蒲公英多糖含量的化学分析结果。由表可知，校正集的多糖含量范围在110.25～231.32 mg/g，验证集酶解蒲公英多糖含量范围在120.27～225.34 mg/g。研究发现，验证集含量包含于校正集的范围内，即校正集建立模型适用于验证集的样品，并且其变化范围基本上覆盖了蒲公英多糖在不同酶解时间内可能出现的含量，因此该样本可用于建立酶解蒲公英多糖含量的近红外光谱的预测模型。

表1 酶解蒲公英样品中多糖含量的测定

Table 1 Determination of polysaccharide content in dandelion by enzymatic hydrolysis

样本 Sample	数量 Number	最小值/(mg/g) Min	最大值/(mg/g) Max
总样本 Total sample	125	110.25	231.32
校正集 Correcting set	100	110.25	231.32
验证集 Verification set	15	120.27	225.34
外部验证 External validation	10	121.22	199.95

2.2 近红外原始光谱

在908～1 670 nm波段内采集100个酶解蒲公英样品的近红外光谱(图1)。可见酶解蒲公英在光谱波长范围908～1 670 nm内存在多个吸收峰，其变化趋势未见明显差异但是不重合，在1 205 nm和1 440 nm附近均有吸收峰，分别与C-H基团的二阶倍频和O-H基团的一阶倍频的拉伸振动相关。

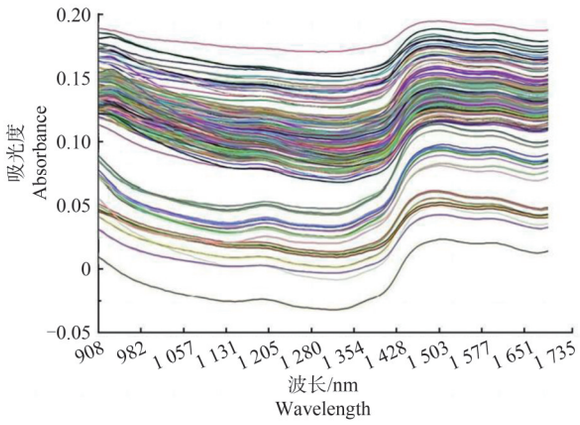

图1 酶解蒲公英的原始光谱图

Fig. 1 Raw spectra of enzymatic hydrolysis dandelion

2.3 光谱预处理方法的选择

样品NIR光谱的噪声信息，基线偏移、漂移等情况均会对光谱分析产生影响，故在光谱分析之前进行预处理是有必要的。本研究通过对4种预处理方式：去趋势(Detrend)、标准正规变换(SNV)、二阶导数(SD)和一阶导数(FD)分别组合，对酶解蒲公英原始光谱进行预处理(表2)。原始光谱经过处理后，模型的预测准确性明显提高，且最佳预处理方法为SNV+Detrend+SD，此时R^2c最大为0.903 99，R^2p为0.880 3，RMSEC和SEC值分别为8.320和8.362，RMSECV和SEP值分别为9.543和9.585，且校正集和验证集的RPD值均大于2.5，8个评价指标均达到了模型构建的标准。经过预处理后的光谱如图2，酶解蒲公英多糖样品的NIR光谱信息经预处理后吸收峰十分明显，因此选用SNV+Detrend+SD的方法处理后的光谱进行下一步的优化。

2.4 最适波长段筛选

不同吸收峰在NIR光谱代表的物质不同，构建NIR预测模型也应对最适波段进行筛选，以RMSEC、SEC最小，R^2、RPD值最大为最佳筛选结果[21]。本研究使用PLSR法进行建模，采取MicroNIR™ Pro v3.1软件内的推荐，结合预处理过后的光谱吸收峰信息，选取在908～1 000、1 001～1 120、1 124～1 354、1 360～1 546、1 552～1 670和全波段908～1 670 nm共6个光谱区间分别对校正集的酶解蒲公英光谱进行处理，并对模型的进行评价。如表3所示，当全光谱区间，即波长范围908～1 670 nm时的R^2最大，RMSEC和SEC值最小，分别为8.362 3和8.320 4，且RPD值大于2.5，综上所述，全波段建模效果最好，且明显优于其他任一波

表 2　光谱预处理方法对模型性能的影响

Table 2　Effects of spectral pretreatment methods on model performance

预处理 Pretreatment	样本数 Number of sample	RMSEC	SEC	R^2c	RPDc	RMSECV	SEP	R^2p	RPDp
无处理	100	24.379	24.502	0.175 90	1.101 6	24.834	24.959	0.146 2	1.082 2
FD	100	24.555	24.679	0.163 88	1.093 6	25.048	25.174	0.132 5	1.073 7
SD	100	22.093	22.205	0.323 22	1.215 6	23.238	23.355	0.256 4	1.159 6
SNV	100	21.888	21.999	0.335 70	1.226 9	22.418	22.531	0.304 2	1.198 8
Detrend	100	24.997	25.122	0.133 60	1.074 3	25.483	25.611	0.102 1	1.055 3
FD＋SD	100	20.230	20.332	0.432 53	1.327 5	21.157	21.263	0.380 4	1.270 5
FD＋SNV	100	17.145	17.231	0.592 41	1.566 3	17.771	17.860	0.562 3	1.511 5
FD＋Detrend	100	25.006	25.132	0.132 99	1.074 0	25.485	25.614	0.102 5	1.055 5
SD＋FD	100	22.932	23.048	0.270 82	1.171 1	23.894	24.014	0.213 1	1.127 3
SD＋SNV	100	8.916	8.961	0.889 76	3.011 8	10.219	10.266	0.861 2	2.684 3
SD＋Detrend	100	22.357	22.470	0.306 90	1.201 2	23.473	23.591	0.241 4	1.148 2
SNV＋FD	100	16.867	16.952	0.605 53	1.592 2	17.476	17.564	0.576 7	1.537 0
SNV＋SD	100	8.320	8.362	0.903 98	3.227 1	9.543	9.585	0.880 3	2.890 4
SNV＋Detrend	100	20.816	20.921	0.399 16	1.290 1	21.343	21.450	0.369 1	1.259 0
Detrend＋FD	100	24.807	24.932	0.146 75	1.082 6	25.294	25.421	0.115 6	1.063 3
Detrend＋SD	100	22.093	22.205	0.323 18	1.215 5	23.238	23.355	0.256 4	1.159 6
Detrend＋SNV	100	21.426	21.534	0.363 48	1.253 4	21.955	22.066	0.332 5	1.223 9
FD＋SD＋SNV	100	18.754	18.848	0.512 29	1.431 9	19.508	19.607	0.472 6	1.377 0
FD＋SD＋Detrend	100	20.210	20.312	0.433 62	1.328 8	21.142	21.249	0.381 3	1.271 4
FD＋SNV＋SD	100	18.931	19.027	0.503 04	1.418 5	19.695	19.794	0.462 5	1.364 0
FD＋SNV＋Detrend	100	17.411	17.498	0.579 67	1.542 4	18.103	18.194	0.545 9	1.483 9
FD＋Detrend＋SD	100	20.230	20.332	0.432 53	1.327 5	21.157	21.263	0.380 5	1.270 5
FD＋Detrend＋SNV	100	17.653	17.742	0.567 89	1.521 3	18.362	18.454	0.532 8	1.463 0
SD＋FD＋SNV	100	14.835	14.909	0.694 83	1.810 2	16.408	16.486	0.627 0	1.637 4
SD＋FD＋Detrend	100	22.938	23.054	0.270 47	1.170 8	23.897	24.018	0.212 9	1.127 1
SD＋SNV＋FD	100	15.055	15.131	0.685 71	1.783 8	16.618	16.698	0.617 4	1.616 7
SD＋SNV＋Detrend	100	8.365	8.407	0.902 98	3.210 5	9.942	9.986	0.870 0	2.773 2
SD＋Detrend＋FD	100	22.934	23.049	0.270 69	1.171 0	23.895	24.015	0.213 0	1.127 3
SD＋Detrend＋SNV	100	8.568	8.611	0.898 22	3.134 5	9.543	9.585	0.880 3	2.890 0
SNV＋FD＋SD	100	18.495	18.588	0.525 71	1.452 0	19.244	19.341	0.486 8	1.395 9
SNV＋FD＋Detrend	100	16.535	16.619	0.620 87	1.624 1	17.228	17.314	0.588 6	1.559 2
SNV＋SD＋FD	100	14.833	14.908	0.694 91	1.810 4	16.462	16.540	0.624 6	1.632 1
SNV＋SD＋Detrend	100	8.365	8.407	0.902 98	3.210 5	9.671	9.713	0.877 5	2.857 3
SNV＋Detrend＋FD	100	17.424	17.511	0.579 04	1.541 3	18.062	18.153	0.547 9	1.487 2
SNV＋Detrend＋SD	100	8.320	8.362	0.903 99	3.227 3	9.543	9.585	0.880 3	2.890 0
Detrend＋FD＋SD	100	20.276	20.378	0.429 91	1.324 4	21.144	21.251	0.381 0	1.271 0
Detrend＋FD＋SNV	100	17.146	17.232	0.592 35	1.566 2	17.772	17.861	0.562 3	1.511 5
Detrend＋SD＋FD	100	22.932	23.048	0.270 81	1.171 1	23.894	24.014	0.213 1	1.127 3
Detrend＋SD＋SNV	100	8.916	8.961	0.889 72	3.011 3	10.219	10.266	0.861 3	2.684 6
Detrend＋SNV＋FD	100	18.116	18.207	0.544 91	1.482 4	18.672	18.766	0.516 9	1.438 7
Detrend＋SNV＋SD	100	9.273	9.320	0.880 77	2.896 1	10.202	10.248	0.859 9	2.671 3

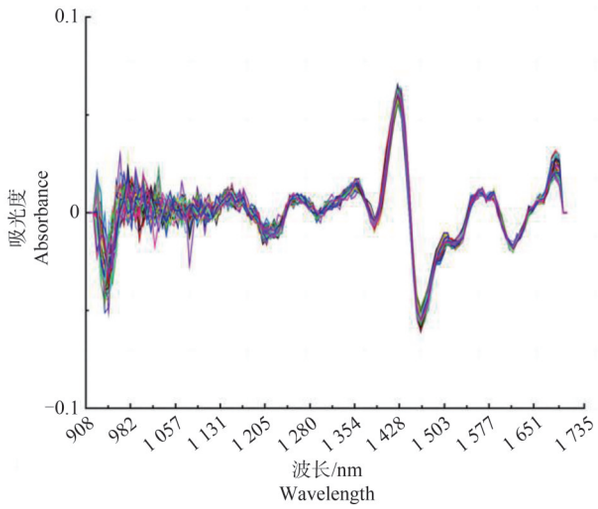

图2 酶解蒲公英多糖样本预处理光谱图

Fig. 2 Pretreatment spectra of dandelion polysaccharide samples

长范围，符合模型构建的基本要求。

2.5 主因子数筛选

通过PLSR建立NIR分析模型时，主因子数也对模型预测准确度有较大影响。主成分数过多，出现过拟合现象。因子数太少，则提取的信息不全面，模型的预测性降低。主因子数对NIR快速预测模型的影响结果如表4所示。当主因子数为2时，RMSECV值最小，故选择建模的最佳因子数为2。

2.6 酶解蒲公英多糖含量的NIR预测模型的建立

通过对校正集和验证集样品的光谱预处理方法、光谱区间和主因子数的筛选，最终构建出酶解蒲公英多糖含量的最优NIR预测模型，该模型的各参数与评价如表5所示。

2.7 模型的外部验证与评价

外部验证是使用除建模数据以外的数据，对所建模型进行验证，可以避免在建模过程中出现的过拟合的情况。使用外部验证集样本检测模型的准确性，结果如图3所示。样品的预测值与实测值均围绕在$y=x$的参考线附近，说明预测值和实测值间的差异不大。使用SAS软件对预测值与实测值进行显著性分析，结果表明二者差异不显著（$P>0.05$）。综上，本研究建立的酶解蒲公英的多糖含量预测模型具有良好的准确性，可以满足快速测定的需求。

表3 建模波段对模型性能的影响

Table 3 Effects of modeling band on model performance

波段/nm Waveband	RMSEC	SEC	R^2c	RPDc	RMSECV	SEP	R^2p	RPDp
908～1 000	14.815 5	14.890 1	0.695 6	1.812 6	16.165 7	16.246 3	0.638 1	1.662 3
1 001～1 120	22.796 7	22.911 6	0.279 4	1.178 0	25.478 5	25.605 9	0.120 4	1.066 3
1 124～1 354	19.479 4	19.577 5	0.473 9	1.378 7	21.496 7	21.604 4	0.360 6	1.250 6
1 360～1 546	20.777 0	20.881 7	0.401 4	1.292 5	21.625 0	21.733 4	0.352 8	1.243 0
1 552～1 670	21.759 1	21.868 7	0.343 5	1.234 2	22.743 1	22.857 5	0.285 4	1.183 0
908～1 670	8.320 4	8.362 3	0.904 0	3.227 3	9.542 8	9.584 7	0.880 3	2.890 0

3 讨 论

中草药和药用植物提取物因其独特的生物学特性，包括抑菌、抗氧化、免疫刺激和抗寄生虫活性，已被评价为在生产中替代抗生素的重要来源[22]。但提取物中有效成分含量的测定是一个复杂的过程，并且使用过多的有机溶剂会导致环境污染。因此，寻找一种快速、环保、无损的间接检测方法显得尤为重要。近年来，人们越来越重视近红外光谱技术在含量预测过程中的使用。为提高模型准确性，在模型建立过程中对光谱进行预处理是十分必要的。彭海洋等[23]利用PLSR法建立了快速测定文山三七4种品质指标的近红外光谱模型，其中皂苷、总灰分、酸不溶灰分和水分的最优预处理的方法为MSC、SNV、原始光谱和MSC。潘秀珍等[24]使用NIR光谱技术，建立了连翘叶中5种活性成分的动态定量模型，结果表明总黄酮、总酚、连翘酯苷A、连翘苷和芦丁的最佳预处理方法分别为S-G平滑、S-G平滑、S-G平滑、S-G平滑以及S-G平滑＋矢量归一化＋MSC。本研究发现使用4种预处理

表 4　主因子数对模型性能的影响

Table 4　Effect of principal factors on model performance

主因子数 Number of principal components	RMSEC	SEC	R^2c	RPDc	RMSECV	SEP	R^2p	RPDp
1	8.320 4	8.362 3	0.904 0	3.227 3	9.542 8	9.584 7	0.880 3	2.890 0
2	7.714 4	7.753 3	0.917 5	3.480 9	9.411 5	9.458 2	0.878 4	2.867 2
3	7.290 5	7.327 3	0.926 3	3.682 8	9.891 9	9.941 7	0.865 9	2.730 5
4	6.827 4	6.861 8	0.935 4	3.933 5	10.115 6	10.166 2	0.859 1	2.663 9
5	6.328 6	6.360 5	0.944 5	4.242 9	10.429 2	10.478 9	0.852 4	2.602 7
6	6.088 5	6.119 2	0.948 6	4.410 4	10.512 5	10.563 1	0.850 7	2.587 6
7	5.675 2	5.703 7	0.955 3	4.731 4	10.689 1	10.739 2	0.845 9	2.547 2
8	5.456 1	5.483 5	0.958 7	4.923 1	10.590 9	10.638 6	0.849 2	2.574 7
9	5.295 5	5.322 2	0.961 1	5.071 5	10.672 1	10.721 8	0.847 5	2.561 1
10	5.142 0	5.168 0	0.963 3	5.220 7	10.921 4	10.969 2	0.841 6	2.512 5

表 5　酶解蒲公英多糖的最优NIR预测模型参数与评价

Table 5　Optimum NIR model parameters and evaluation for enzymatic hydrolysis of dandelion polysaccharide

参数 Parameters	数据 Data
模型参数 Model parameters	
光谱预处理方法	SNV＋Detrend＋SD
光谱区间	908～1 670 nm
主因子数	2
评价参数 Evaluation parameter	
R^2c	0.917 5
RMSEC	7.714 4
SEC	7.753 3
RPDc	3.480 9
R^2p	0.878 4
RMSECV	9.411 5
SEP	9.458 2
RPDp	2.867 2

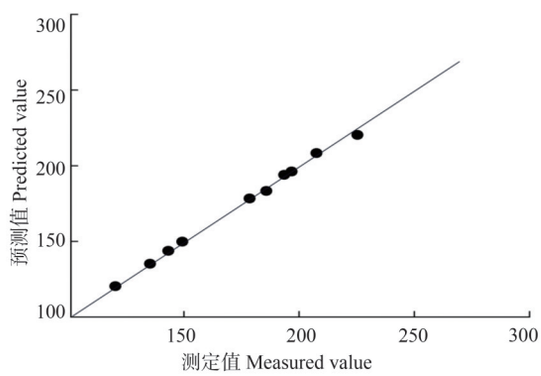

图 3　酶解蒲公英多糖的测定值与NIR模型预测值的相关性

Fig. 3　Correlation between the measured value of dandelion polysaccharides and the predicted value of NIR model

方式的不同组合均可提升模型的预测能力，模型的最佳预处理方式为SNV＋Detrend＋SD，建立的模型能够满足酶解蒲公英多糖含量的快速测定。最佳波长的选择也是建模过程中一个不可忽视的步骤。本研究对比了不同波长范围对预测模型的影响，发现波长范围在908～1 670 nm时，模型的预测效果最好。可能是因为蒲公英种类不同，许多化学成分通常存在着互相影响的情况，全光谱会包含更全面的信息。除此之外，主因子数也是提升模型准确度的重要指标。周雨枫[25]利用近红外光谱技术对三七的质量进行评价时，以RMSECV作为评价指标，确定了醇溶性浸出物含量的近红外模型最佳因子数为8。本研究通过将波长在908～1 670 nm

表6 模型外部验证与评价

Table 6 External verification and evaluation of the model

样本编号 Number of samples	测定值 Measured value	预测值 Estimated value	偏差/% Bias	*P* 值 *P* value
M1	143.271 0	143.408 9	0.097 51	
M3	149.312 5	149.293 3	0.013 58	
M4	178.546 6	178.001 9	0.385 16	
M5	207.543 5	207.154 2	0.275 28	
M6	185.807 7	186.764 6	0.676 63	0.994 10
M7	196.770 5	196.380 8	0.275 56	
M8	193.543 3	193.107 2	0.308 37	
M9	225.340 2	225.052 3	0.203 58	
M10	120.268 1	120.355 3	0.061 66	

的光谱进行SNV+Detrend+SD预处理后，以RMSECV的最小值确定了模型的最佳因子数为2。

本研究利用近红外光谱技术建立了快速预测酶解蒲公英中多糖含量的模型，与传统方法相比，更加快速环保，但由于酶解蒲公英样本获取有限，故模型具有一定局限性，为此后续可增加酶解蒲公英样本的多样性，扩大模型的使用范围。

4 结 论

本研究以酶解蒲公英多糖为研究对象，利用PLSR法，寻找到最佳酶解蒲公英多糖含量的近红外预测模型，减少了对样品进行复杂处理，缩短了分析时间，大大提高了检测效率，并可在酶解过程中进行实时检测，实现了快速、环保检测，且结果准确，分析高效，为酶解蒲公英质量评价体系的建立提供数据参考。

参考文献 References

[1] 何彬生，邴萍萍，许涛，杨阳. 发展中医药农业实现绿色农业科技革命的创新与实践[J]. 农业展望，2022，18(2)：46-49
He B S, Bing P P, Xu T, Yang Y. Innovation and practice of developing Chinese medicine agriculture and realizing the revolution of green agricultural science and technology [J]. *Agricultural Outlook*, 2022, 18(2): 46-49 (in Chinese)

[2] Majewski M, Lis B, Juśkiewicz J, Ognik K, Borkowska-Sztachańska M, Jedrejek D, Stochmal A, Olas B. Phenolic fractions from dandelion leaves and petals as modulators of the antioxidant status and lipid profile in an *in vivo* study[J]. *Antioxidants*, 2020, 9(2): 131

[3] Ren F, Li J, Yuan X, Wang Y L, Wu K X, Kang L X, Luo Y Y, Zhang H M, Yuan Z Q. Dandelion polysaccharides exert anticancer effect on Hepatocellular carcinoma by inhibiting PI3K/AKT/mTOR pathway and enhancing immune response[J]. *Journal of Functional Foods*, 2019, 55: 263-274

[4] Ren Y S, Zheng Y, Duan H, Lei L, Deng X, Liu X Q, Mei Z N, Deng X K. Dandelion polyphenols protect against acetaminophen-induced hepatotoxicity in mice via activation of the Nrf-2/HO-1 pathway and inhibition of the JNK signaling pathway[J]. *Chinese Journal of Natural Medicines*, 2020, 18(2): 103-113

[5] Xue S Q, Xia B H, Zou Y N, Li L Y, Zhang B T, Shen Z T, Xiang Y F, Han Y, Chen W X. Dandelion extract on growth performance, immunity, stress and infection resistance in common carp[J]. *Aquaculture Reports*, 2022, 26: 101330

[6] 童洋，肖国民，潘晓梅. 响应面法优化螺旋藻中叶绿素的超声提取工艺[J]. 化工学报，2009，60(11)：2813-2819
Tong Y, Xiao G M, Pan X M. Optimization of ultrasonic extraction of chlorophylls from Spirulina platensis by response surface methodology[J]. *Journal of the Chemical Industry and Engineering Society of China*, 2009, 60(11): 2813-2819 (in Chinese)

[7] 王爱娟，张高荣，潘立卫，潘彩燕，符大彪. 酶法提取苦李根多糖的工艺优化研究[J]. 大众科技，2023，25(1)：62-65
Wang A J, Zhang G R, Pan L W, Pan C Y, Fu D B. Study on optimization of enzymatic extraction of polysaccharide process from kuli Radix distillate[J]. *Popular Science & Technology*, 2023, 25(1): 62-65

(in Chinese)

[8] 赵茹，康明丽，张琴，张扬，朱志强，周永斌．酶解辅助提取香菇多糖工艺优化及其抗氧化活性[J]．食品研究与开发，2023，44(12)：116-121
Zhao R, Kang M L, Zhang Q, Zhang Y, Zhu Z Q, Zhou Y B. Enzymatic hydrolysis-assisted extraction and antioxidant activity of polysaccharide from Lentinus edodes [J]. *Food Research and Development*, 2023, 44(12): 116-121 (in Chinese)

[9] 朱翰林，赵恒，翟博文，张卯玉，付玉杰．超声辅助酶解提取五味子多糖及其抗细胞氧化应激研究[J]．植物研究，2023，43(4)：631-640
Zhu H L, Zhao H, Zhai B W, Zhang M Y, Fu Y J. Ultrasonic-assisted enzymatic extraction of polysaccharides from schisandra chinensis and the effects on anti-oxidative stress in cells [J]. *Bulletin of Botanical Research*, 2023, 43(4): 631-640 (in Chinese)

[10] 陈争光，李鑫，范学佳．基于可见近红外光谱分析技术的马铃薯品种鉴别方法[J]．光谱学与光谱分析，2016，36(8)：2474-2478
Chen Z G, Li X, Fan X J. Method for the discrimination of the variety of potatoes with vis/NIR spectroscopy [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, 36(8): 2474-2478 (in Chinese)

[11] Liu P, Wang J, Li Q, Gao J, Tan X Y, Bian X H. Rapid identification and quantification of Panax notoginseng with its adulterants by near infrared spectroscopy combined with chemometrics [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2019, 206: 23-30

[12] 张小斌，朱怡航，赵懿滢，陈妙金，孙奇男，谢宝良，冯绍然，顾清．基于可见/近红外光谱的水蜜桃糖度无损检测方法优化研究[J]．浙江农业学报，2023，35(7)：1617-1625
Zhang X B, Zhu Y H, Zhao Y Y, Chen M J Sun Q N, Xie B L, Feng S R, Gu Q. Optimization of nondestructive testing method for soluble solid content of peach based on visible/near infrared spectroscopy [J]. *Acta Agriculturae Zhejiangensis*, 2023, 35(7): 1617-1625 (in Chinese)

[13] Xie C Q, Wang C Y, Zhao M Y, Zhao L M. Prediction of acrylamide content in potato chips using near-infrared spectroscopy [J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2023, 301:122982

[14] 魏尊苗，陈欣，程艳，刘佳遥，王占海，许方达，牟忠生．基于近红外光谱技术的油莎豆品质检测及相关性分析[J]．特产研究，2023，45(3)：120-124
Wei Z M, Chen X, Cheng Y, Liu J Y, Wang Z H, Xu F D, Mu Z S. Quality test and correlation aanalysis of Cyperus esculentus based on near infrared spectroscopy [J]. *Special Wild Economic Animal and Plant Research*, 2023, 45(3): 120-124 (in Chinese)

[15] 邓余良，胡强，夏康炎，陈伟东，董春旺．基于近红外的红茶发酵中TFs/TRs评价模型研究[J]．现代农业装备，2019，40(4)：64-70
Deng Y L, Hu Q, Xia K Y, Chen W D, Dong C W. Evaluation model by near-infrared spectroscopy of theaflavins and thearubigins ratio in black tea fermentation[J]. *Modern Agricultural Equipment*, 2019, 40(4): 64-70 (in Chinese)

[16] 胡铁功，周慧，杨丽晔，于帅华，李泽霞．近红外光谱技术快速检测老白干香型发酵酒醅指标的研究[J]．酿酒科技，2022(10)：111-115
Hu T G, Zhou H, Yang L Y, Yu S H, Li Z X. Rapid detection of fermented grains of Laobaigan Baijiu by near-infrared spectroscopy[J]. *Liquor-Making Science & Technology*, 2022(10): 111-115 (in Chinese)

[17] 左琦，杨海锋，邢增涛，韩烨，顾赛红．食用菌总糖含量测定方法的研究[J]．食用菌学报，2008，15(4)：57-61
Zuo Q, Yang H F, Xing Z T, Han Y, Gu S H. Determination of total sugar in fruit bodies of five edible mushroom species [J]. *Acta Edulis Fungi*, 2008, 15(4): 57-61 (in Chinese)

[18] Kuai J E, Xu S Y, Guo C, Lu K, Feng Y Z, Zhou G S. Prediction model of the key components for lodging resistance in rapeseed stalk using near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS)[J]. *Journal of Spectroscopy*, 2019: 1-10

[19] 颜辉，陈斌，朱文静．近红外光谱分析法快速检测奶粉的品质[J]．中国乳品工业，2009，37(3)：49-52
Yan H, Chen B, Zhu W J. Rapid determination of milk powder quality by near-infrared spectroscopy analysis [J]. *China Dairy Industry*, 2009, 37(3): 49-52 (in Chinese)

[20] Yang F C, Hou H R, Sun Z Y. Quantitative model optimizing of milk powder protein and fat by near infrared spectroscopy [J]. *Food Science and Technology*, 2016, 41(11): 253-258

[21] 张卫民，何文，吴拥军．近红外光谱结合偏最小二乘法测定复方阿司匹林/双嘧达莫成分含量[J]．云南化工，2019，46(8)：84-86
Zhang W M, He W, Wu Y J. Determination of the content of compound aspirin/dicyanidone by near-infrared spectroscopy combined with partial least square method [J]. *Yunnan Chemical Technology*, 2019, 46(8): 84-86 (in Chinese)

[22] Gong X, Yang M, He C N, Bi Y Q, Zhang C H, Li M H, Xiao P G. Plant pharmacophylogeny: Review and future directions [J]. *Chinese Journal of Integrative Medicine*, 2022, 28(6): 567-574

[23] 彭海洋，姜子烨，巫忠东，刘宏程，林涛，顾颖．基于近红外光谱技术快速检测文山三七品质指标[J]．食品安全质量检测学报，2023，14(17)：215-222
Peng H Y, Jiang Z Y, Wu Z D, Liu H C, Lin T, Gu Y. Rapid detection of quality indexes of Wenshan Panax notoginseng based on near infrared spectroscopy technology [J]. *Journal of Food Safety & Quality*, 2023, 14(17): 215-222 (in Chinese)

[24] 潘秀珍，刘路路，任晓红，耿泽宇，左旭丽，马威，李卫东．基于近红外光谱技术建立连翘叶中5种活性成分动态定量模型[J]．北京中医药大学学报，2023，46(9)：1280-1290
Pan X Z, Liu L L, Ren X H, Geng Z Y, Zuo X L, Ma W, Li W D.

Establishing dynamic quantitative models of five active ingredients in Forsythia suspensa leaves were established based on near-infrared spectroscopy[J]. *Journal of Beijing University of Traditional Chinese Medicine*, 2023, 46(9): 1280-1290 (in Chinese)

[25] 周雨枫. 近红外光谱法应用于三七质量评价[D]. 天津:天津医科大学, 2019

Zhou Y F. Application of near infrared spectroscopy in quality evaluation of Panax notoginseng[D]. Tianjin: Tianjin Medical University, 2019 (in Chinese)

责任编辑:秦梅

第一作者简介: 郑越,在读博士研究生,2021—2023年均获得自治区级学业奖学金,主要研究中草药发酵饲料方向,发表中文论文1篇。

通讯作者简介: 齐景伟,博士,教授,内蒙古农业大学副校长。主要从事智慧养殖及生物饲料技术创新方面的教学与科研工作。建成全国首个云畜牧创新平台,研发了畜牧数据中心平台、畜牧资源共享平台、创新教学培训平台和畜牧业务云服务平台,构建了虚实结合四维教学模式,形成"教学、科研及社会服务三位一体联动闭环"的人才培养模式,实现了Email大数据科研,创新了农牧领域教学的手段和方法,引领了智慧畜牧业的发展。构建粗饲料发酵用菌种库、木质纤维分解酶系,建成糠麸类发酵饲料、中草药发酵饲料的多维评价模型,构建发酵饲料图像数据库,推动固态发酵饲料的数字化和精准化。主持国家级、自治区级科研项目20余项,总经费达5 000余万元。获得内蒙古自治区科技进步一等奖1项、三等奖2项、自然科学三等奖1项、自治区农牧业丰收三等奖1项,自治区教学成果一等奖1项;获国家发明专利5项、软件著作权66项;出版专著4部,教材2部;在国内外重要科技期刊上文发表论文150余篇,其中SCI和EI收录20余篇。