

基于近红外光谱技术检测红曲米中的红曲色素

张晓伟^{1,2}, 王加华¹, 王昌禄², 李贞景², 陈勉华²

(1. 许昌学院食品科学与工程学院, 河南许昌 461000)

(2. 食品营养与安全教育部重点实验室, 天津科技大学食品工程与生物技术学院, 天津 300457)

摘要: 采用近红外光谱技术结合化学计量学方法构建红曲米中红曲橙色素、红曲红色素、红曲黄色素的预测模型。分别采用多元线性回归 (SMLR)、偏最小二乘回归 (PLS)、主成分回归 (PCR) 构建所有色素组分的数学模型, 以相关系数 (R)、校正均方根误差 (RMSEC)、预测均方根误差 (RMSEP)、预测相对分析偏差 (RPD) 值来评价模型的综合性能。结果显示, MSC、SNV 方法能够消除红曲米粉颗粒不均对光谱的散射影响; 导数处理消除了基线漂移; 对于红曲橙色素、红曲黄色素、红曲红色素三种模型均具有良好的稳定性; 利用三种模型对未知红曲样品预测时, 预测结果具有较高的线性, 预测性能较好 (RPD=2.86~5.39), 可用于准确定量预测。结果表明近红外光谱技术可用于红曲色素的快速无损测定, 为红曲米质量的智能化控制提供了新的途径。

关键词: 近红外光谱; 化学计量学; 红曲色素; 预测模型

文章编号: 1673-9078(2014)5-273-279

Determination of Monascus Pigments in Red Yeast Rice Using Near Infrared Spectroscopy

ZHANG Xiao-wei^{1,2}, WANG Jia-hua¹, WANG Chang-lu², LI Zhen-jing², CHEN Mian-hua²

(1. College of Food Science and Engineering, Xuchang University, Xuchang 461000, China)

(2. Key Laboratory of Food Nutrition and Safety, Ministry of Education, College of Food Engineering and Biotechnology, Tianjin University of Science and Technology, Tianjin 300457, China)

Abstract: NIR combined with chemometrics was proposed to predict orange, red and yellow pigments content in red yeast rice. Stepwise multiple linear regression (SMLR), partial least squares (PLS) and principal component regression (PCR) were used to built prediction models. Correlation coefficient of calibration (R), root mean square error of calibration (RMSEC), root mean square error of prediction (RMSEP) and ratio of prediction to deviation (RPD) were suggested to evaluate the performance of models. The results showed that MSC and SNV could eliminate spectral scattering causing by uneven red yeast rice particles. Derivative treatment could eliminate the baseline drift. Three models for orange, red and yellow pigments all had good robustness. The three models were used to predict unknown monascus pigments, which all had better performance of prediction (RPD, 2.86~5.39). Therefore, the models could be used to accurately predict monascus pigments. The study shows that near-infrared spectroscopy technology has the potential beneficial for measuring the pigments content in red yeast rice online and conducive to intelligent quality control.

Key words: near infrared spectroscopy; chemometrics; Monascus pigments; prediction model

红曲色素作为一种天然食用色素, 不仅着色能力强, 对热、酸、碱稳定^[1-4], 而且具有抗氧化、抗肿瘤、抗菌、降血压、降血脂等多种功效^[5-7], 在我国二十多种食品中被允许使用^[8]。红曲米中红曲红色素、红曲黄色素、红曲橙色素的含量直接决定着红曲米的品质高低。目前, 关于红曲米中红曲色素各种成

收稿日期: 2013-12-24

基金项目: 国家自然科学基金资助 (31171729; 31330059); 河南省教育厅科技攻关项目 (13B180242)

作者简介: 张晓伟 (1982-), 男, 博士, 讲师, 研究方向为食品微生物

通信作者: 王昌禄 (1960-), 男, 博士, 教授, 研究方向为食品生物技术

分 (红曲红色素、红曲橙色素、红曲黄色素) 的检测主要是用乙醇等有机溶剂提取后, 采用紫外可见分光光度法或高效液相色谱法进行测定。化学检测法不仅破坏检测对象, 还需要消耗大量的有机溶剂, 难以实现现场快速检测。如何克服化学检测方法的不足, 探寻红曲米中红曲色素的快速无损在线检测方法成为我国红曲产业的重要任务之一。

近红外光谱检测技术以其分析速度快、分析效率高、适用的样品范围广、样品一般不需要预处理、分析成本低等优点, 在农业^[9-10], 食品^[11-14], 医药^[15]等领域被广泛应用。近红外光谱主要是由物质吸收

光能,使分子振动从基态向高能级跃迁时产生的。近红外光谱记录的是分子中单个化学键基频振动的倍频和合频信息,它常常受含氢基团 X-H (X, C、N、O) 倍频和合频的重叠主导,因此,在近红外光谱范围内,测量的主要是含氢基团 X-H 振动的倍频和合频吸收。红曲色素主要成分的分子结构多由这些基团构成,基团的吸收频谱表征了这些成分的化学结构。本文主要探究了近红外光谱技术在红曲米中红曲色素含量测定中的应用。近红外光谱对红曲色素含量的快速无损检测模型的建立,将在红曲米品质的快速测定、质量的智能化控制等方面发挥重要作用。

1 材料与方法

1.1 样品

所用试样一部分是实验室自制的红曲米,一部分购自武汉佳成生物制品有限公司、杭州禾田生物技术有限公司、杭州博大生物技术有限公司等生产的红曲米,红曲米样品经粉碎、过 60 目筛子,供进行光谱采集及色素测定。

1.2 基础数据采集

1.2.1 光谱测定

ANTARIS II 型傅立叶变换近红外光谱仪,美国 Thermo Nicolet Co., 用于红曲米的光谱采集,仪器使用 InGaAs 检测器,配备积分球旋转样品杯附件,仪器自带 TQ Analyst 8.0 软件,用于数据处理和构建数学模型。

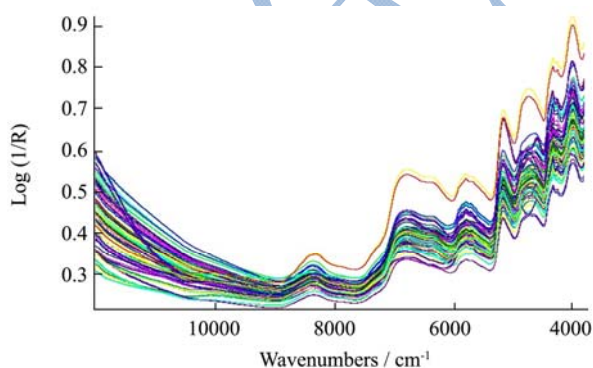


图 1 红曲米原始近红外光谱

Fig.1 Original spectra of red yeast rice

光谱采集最优参数分别为:光谱范围 12000~3800 cm^{-1} ,分辨率 8 cm^{-1} ,样品杯直径约 50 mm,偏心距 10 mm,光谱采集累积 16 次平均输出。样品混匀后,为获取代表性样品光谱,采用积分球旋转样品杯重复装样 3 次测定光谱,平均光谱作为样品

最终光谱。

由图 1 可知,红曲米粉光谱趋势一致,在 8318、6764、5786、5154、4733、4325、4015 cm^{-1} 附近有显著吸收峰,主要表征了 C-H、N-H、O-H 等基团的倍频和合频吸收。光谱散射现象严重,主要是由于红曲米粉颗粒散射引起,在后续处理中要进行光谱预处理。

1.2.2 红曲色素测定

光谱测定后,将进行光谱测定的样品放置于 70 $^{\circ}\text{C}$ 恒温干燥箱中,干燥至恒重。准确称取粉碎混合均匀的样品 0.200 g,加 100 mL 体积分数为 70% 的乙醇,60 $^{\circ}\text{C}$ 保温浸提 60 min,每隔 10 min 振荡一次,冷却至室温后定容至 100 mL,经真空抽滤后,收集滤液。红曲色素一般包含红曲黄色素、红曲橙色素和红曲红色素,其分别在 410、465、505 nm 处具有最大吸光度^[16-17]。分别测定红曲滤液在相应波长处的吸光度值 (A_{410} 、 A_{465} 、 A_{505}),代入色价计算公式 (1) 中,求得试样中红曲黄色素、红曲橙色素和红曲红色素的含量。所测样品中红曲色素各成分的统计结果如表 1 所示。

$$S = A \times n \times \frac{100}{0.200} \quad (1)$$

注: S: 试样的色价,单位为 U/g; A: 试样在相应波长处的吸光度; n: 试样的稀释倍数。

表 1 红曲色素成分含量统计表

Table 1 The statistics for the content of monascus pigments

	橙色素/(U/g)	红色素/(U/g)	黄色素/(U/g)
最小值	110.91	389.05	412.10
最大值	3758.37	10641.00	7128.53
平均值	907.82	3483.37	3311.31

1.3 数据处理方法

1.3.1 异常样本剔除

建模前,在 95% 的置信度下采用 Chauvenet 检验来识别异常光谱。所有样品光谱计算其马氏距离 (Mahalanobis distance, MD),并从小到大排列。根据 TQ 8.0 分析软件 (Thermo Nicolet Co., 美国) 推荐,当置信度在 95% 时,其 MD 阈值为 1.652,如图 2 所示,其中有两光谱 MD 值超过阈值 (灰色线右侧),被判定为异常。

由于红曲米中各种色素值的数量级差别较大,通过常用对数处理 (Log),将数值变为同一尺度。采用样品杠杆值与学生残差进行样品化学值异常判别,样品杠杆值的大小表明了样品对模型的影响程度。学生残差说明了与样品杠杆值对应的样品浓度

预测能力好坏, 只有样品同时具备高的杠杆值和学残差, 该样品才被判定为异常。

以杠杆值 3 倍和学生残差值 3 作为异常判定阈值。如图 3 所示, 当样本橙色素对数值的杠杆值和学生残差值大于阈值 (0.25, 3), 即被判为异常。通过杠杆值和学生残差计算分析, 有 5 个样品具有较高的杠杆值和学生残差被剔除。

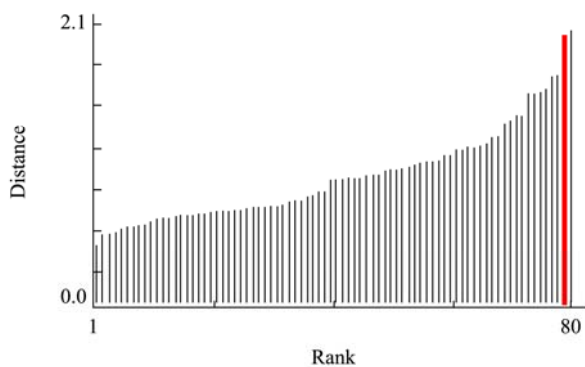


图 2 光谱异常检验

Fig.2 A summary of the Spectrum Outlier diagnostic

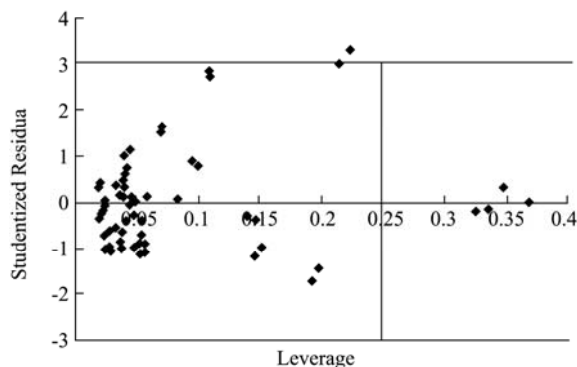


图 3 橙色素样品杠杆值和学生残差散点图

Fig.3 The distribution diagram of abnormal sample about monascus orange pigments

1.3.2 样本分集

表 2 红曲色素各成分化学值的统计结果

Table 2 Statistics of monascus pigments for calibration and prediction data sets

成分	数据集	样品数	范围	平均值	标准偏差	变异系数/%
橙色素	校正集	60	2.045~3.575	2.973	0.360	12.1
	预测集	18	2.356~3.253	2.944	0.303	10.3
红色素	校正集	58	2.590~4.027	3.461	0.341	9.9
	预测集	20	2.763~3.911	3.443	0.347	10.1
黄色素	校正集	56	2.615~3.853	3.505	0.338	9.6
	预测集	16	2.799~3.766	3.550	0.291	8.2

同样, 采用上述方法进行其他色素成分异常样本识别。最终, 余下的样品以色素含量排序, 按照 3:1 比例将样品分为校正集和预测集, 其中最大值和

最小值应在校正集。表 2 为本实验样品的统计参数, 样品值具有较大的差异性, 变异系数 (Coefficients of variation, CV) 范围较宽。

1.3.3 光谱预处理

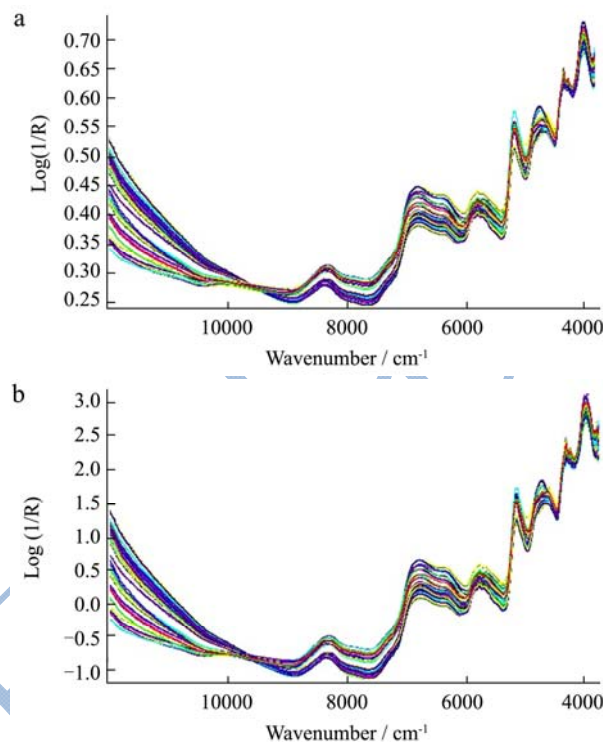


图 4 经 MSC (a) 和 SNV (b) 处理后红曲米近红外光谱

Fig.4 Spectra of red yeast rice after MSC (a) and SNV (b) treatment

近红外光谱不仅受被检测物的化学成分浓度影响, 还受其物理特性的影响, 相对来说, 光谱间差异主要是由于物理特性的影响。有必要对光谱进行预处理以提高检测目标的光谱信息。在近红外光谱分析时, 样品的均匀性、粒径大小和光程长短会影响光谱的形状, 而多元散射校正技术 (MSC) 和标准归一化 (SNV) 则在解决样品的粒径不均匀或测样容器不一致对光谱的影响上有良好的效果。经过 MSC 和 SNV 处理后, 光谱如图 4 (a) 和 (b) 所示, 基本消除了颗粒不均匀引起的光谱散射。

导数光谱可有效地消除基线和其它背景的干扰, 分辨重叠峰, 提高分辨率和灵敏度。常用的导数处理方法有一阶导数处理 (First derivative, 1D) 和二阶导数处理 (Second derivative, 2D)。经过 1D 和 2D 处理后, 光谱如图 5 (a) 和 (b) 所示, 消除了光谱基线漂移, 但局部噪声也被放大, 在实际应用时, 往往结合平滑处理使用。

近红外光谱对红曲米中红曲色素含量测定的模型构建, 主要采用多元线性回归 (Stepwise Multiple Linear Regression, SMLR)、偏最小二乘回归 (Partial

least squares, PLS)、主成分回归(Principal Component Regression, PCR)三种方法。

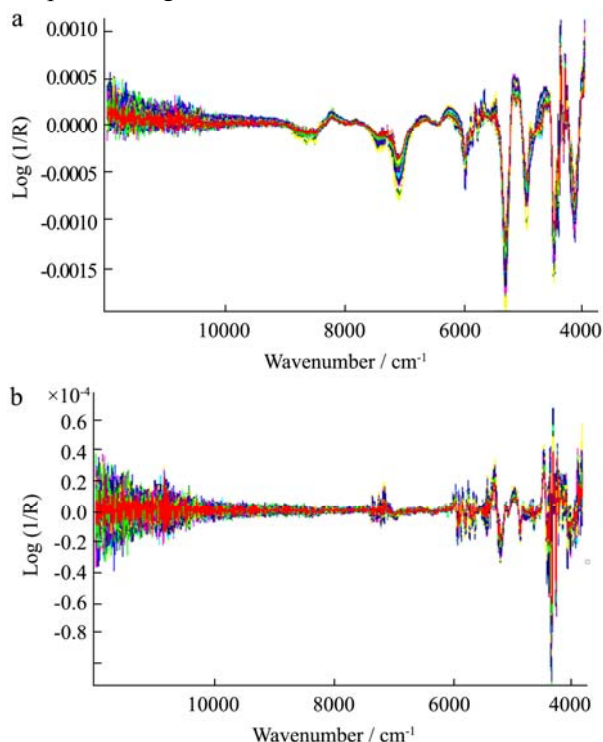


图5 经一阶导(a)和二阶导(b)处理后红曲米近红外光谱

Fig.5 Spectra of red yeast rice after 1D (a) and 2D (b) treatment

1.4 模型构建方法与评价参数

1.4.1 建模方法

近红外光谱对红曲米中红曲色素含量测定的模型构建,主要采用多元线性回归(Stepwise Multiple Linear Regression, SMLR)、偏最小二乘回归(Partial

least squares, PLS)、主成分回归(Principal Component Regression, PCR)三种方法。

1.4.2 模型评价参数

近红外模型的稳健性和适应性评定一般采用相关系数(Correlation coefficient of calibration, R)、校正均方根误差(Root mean square error of calibration, RMSEC)、预测均方根误差(Root mean square error of predication, RMSEP)、预测相对分析偏差(Ratio of prediction to deviation, RPD)来评定,具体计算方法参见参考文献^[18]。

当 $R \geq 0.90$ 时,模型具有良好稳健性;当 $0.70 \leq R < 0.89$ 时,模型具有较好稳健性;当 $0.50 \leq R < 0.69$ 时,模型可用于定性分析;当 $R < 0.49$ 时,模型稳健性较差^[19]。RMSEP 值越小,RPD 值越大,表明模型的预测性能越好^[20]。

2 结果与分析

2.1 SMLR 模型的建立

采用 SMLR 对红曲色素各成分进行模型的建立,得到各成分最优建模结果如表 3 所示。基于预测误差准则来选择建模变量,本文采用逐步选择法,在软件 TQ Analyst 8.0 (Thermo Nicolet Co., 美国)中实现。所选变量中第一个变量对模型的贡献最大,其后依次降低(各变量相互独立),当变量过少时,所用信息不足,当变量过多时引入了较多非目标信息,均会导致模型性能下降。对于红曲橙色素、红曲红色素、红曲黄色素分别选取了 5、5、4 个变量,模型达到最优(以 RMSEP 衡量)。

表3 红曲色素的 SMLR 模型结果统计表

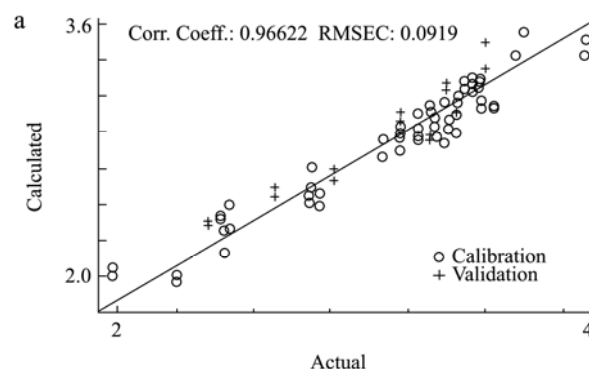
Table 3 The statistics results of monascus pigments by SMLR

成分	变量/cm ⁻¹	预处理方法	R	RMSEC	RMSEP	RPD
红曲橙色素	4393, 5940, 7324, 6838, 7062	MSC+2D+S.G (7,3)	0.966	0.0919	0.106	2.86
红曲红色素	10861, 4300, 8713, 4439, 4509	MSC+1D+NDF (5,5)	0.977	0.0723	0.0844	4.11
红曲黄色素	4358, 4539, 6101, 4292	MSC+2D+NDF (5,5)	0.995	0.0338	0.0658	4.42

注: *1D-一阶导数光谱; 2D-二阶导数光谱; SNV-标准正交化; MSC-多元散射校正; NDF-导数滤波; S.G-卷积平滑。

由表 3 可知,红曲米中橙色素、红色素、黄色素相关系数均大于 0.9,表明 SMLR 模型具有较好的稳健性。从 RPD 值来看,红色素、黄色素模型可用于精确定量预测;橙色素模型可以满足定量分级。

红曲米中红曲色素各组分 SMLR 模型对未知样品预测时,预测结果具有较高的线性,也具有良好的预测精度(RPD=2.86~4.42)。红曲橙色素、红曲红色素、红曲黄色素的 SMLR 模型的校正集和预测集样品的真实值与预测值分别如图 6 所示。



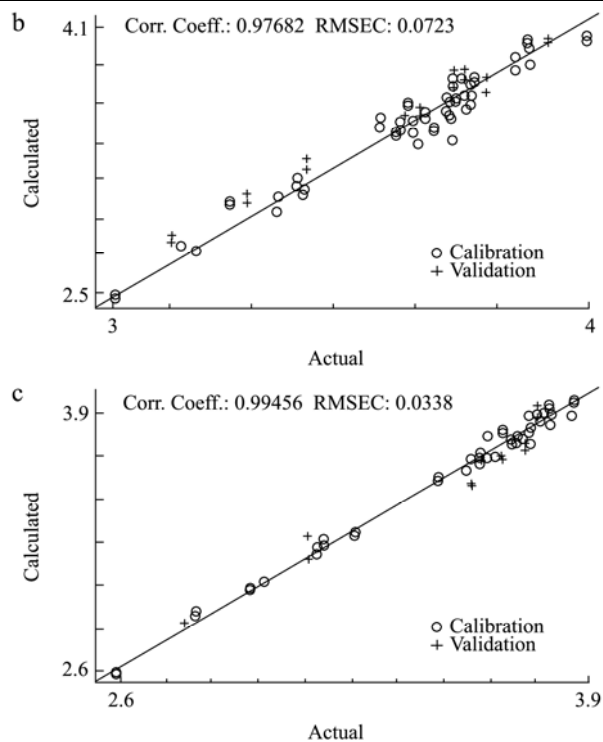


图6 红曲色素成分的 SMLR 模型预测结果

Fig.6 The plots of measured value vs. SMLR model predicted value

注：(a) 橙色素, (b) 红色素, (c) 黄色素。

2.2 PLS 模型的建立

从图4、5可以看出,红曲米粉样品光谱受到颗粒散射和仪器噪声影响,在两端信号较弱,且噪声大,建模时应予排除。PLS 通过对数据信息进行分解和筛选的方式,提取对因变量解释性最强的综合变量,辨识系统中的信息与噪声,更好地克服变量多重相关性。为了采取更多信息建模,红曲橙色素、红色素、黄色素分别采用 4080~9800、4200~9800、4200~9800 cm^{-1} 构建 PLS 模型(表4)。

由表4可知,红曲米中红曲橙色素、红色素、黄色素相关系数均大于0.9,表明PLS模型具有较好的稳健性。红曲橙色素、红色素、黄色素模型的RPD值分别为4.14、3.73和4.64,表明该模型可用于精确的定量预测。

红曲色素各组分 PLS 模型对未知样品预测时,预测结果具有较高的线性,也具有良好预测精度(RPD=3.73~4.64)。红曲橙色素、红色素、黄色素的PLS模型的校正集和预测集样品的真实值与预测值分别如图7所示。

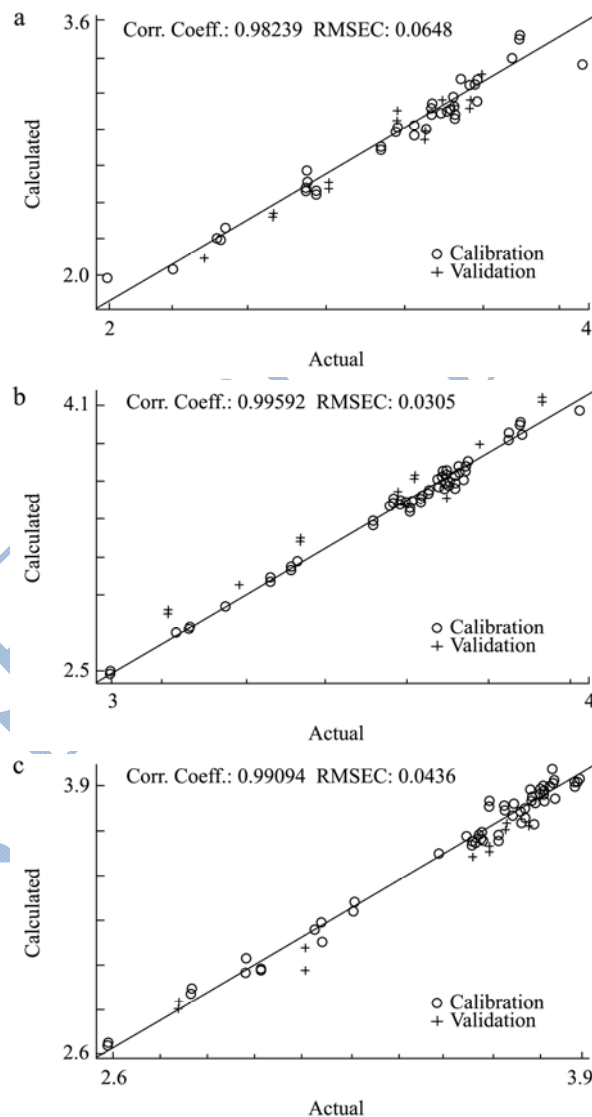


图7 红曲色素成分的 PLS 模型预测结果

Fig.7 The plots of measured value vs. PLS model predicted value

注：(a) 橙色素, (b) 红色素, (c) 黄色素。

表4 红曲色素成分的 PLS 模型结果统计表

Table 4 The statistics results of monascus pigments by PLS

成分	区间/ cm^{-1}	预处理方法	因子数	R	RMSEC	RMSEP	RPD
红曲橙色素	4080~9800	MSC+2D+S.G (7,3)	4	0.982	0.0648	0.0731	4.14
红曲红色素	4200~9800	MSC+1D+NDF (5,5)	9	0.996	0.0305	0.0929	3.73
红曲黄色素	4200~9800	MSC+2D+NDF (5,5)	6	0.991	0.0436	0.0627	4.64

注：*1D-一阶导数光谱；2D-二阶导数光谱；SNV-标准正交化；MSC-多元散射校正；NDF-导数滤波；S.G-卷积平滑。

2.3 PCR 模型的建立

PCR 通过提取量测矩阵中的有效主成分,有效降低噪声的影响,充分利用光谱信息。采用主成分分析可以压缩数据,降低数据维度,变量相互独立。当选取的主成分数过多时,可能引入噪声;当选取的主成分数过少时,可能丢失部分信息,因此,应考

察最佳主成分数选取问题。对于红曲橙色素,当选取前 15 个主成分数时,模型具有较小的 RMSECV 为 0.0676,累计可信度达到 72.876%。采用最佳预处理方法构建橙色素 PCR 模型,结果如表 5 所示,其 R=0.985、RMSEC=0.0599、RMSEP=0.0623、RPD=4.86,模型可用于精确定量预测。

表 5 红曲色素的 PCR 模型结果统计表

Table 5 The statistics results of monascus pigments by PCR

成分	区间/cm ⁻¹	预处理方法	主成分数	R	RMSEC	RMSEP	RPD
红曲橙色素	4080~9800	MSC+2D+S.G (7.3)	15	0.986	0.0599	0.0623	4.86
红曲红色素	4200~9800	MSC+1D+NDF (5,5)	10	0.987	0.0534	0.0644	5.39
红曲黄色素	4200~9800	MSC+2D+NDF (5,5)	11	0.994	0.0351	0.0584	4.98

注: *1D-一阶导数光谱; 2D-二阶导数光谱; MSC-多元散射校正; NDF-导数滤波; S.G-卷积平滑。

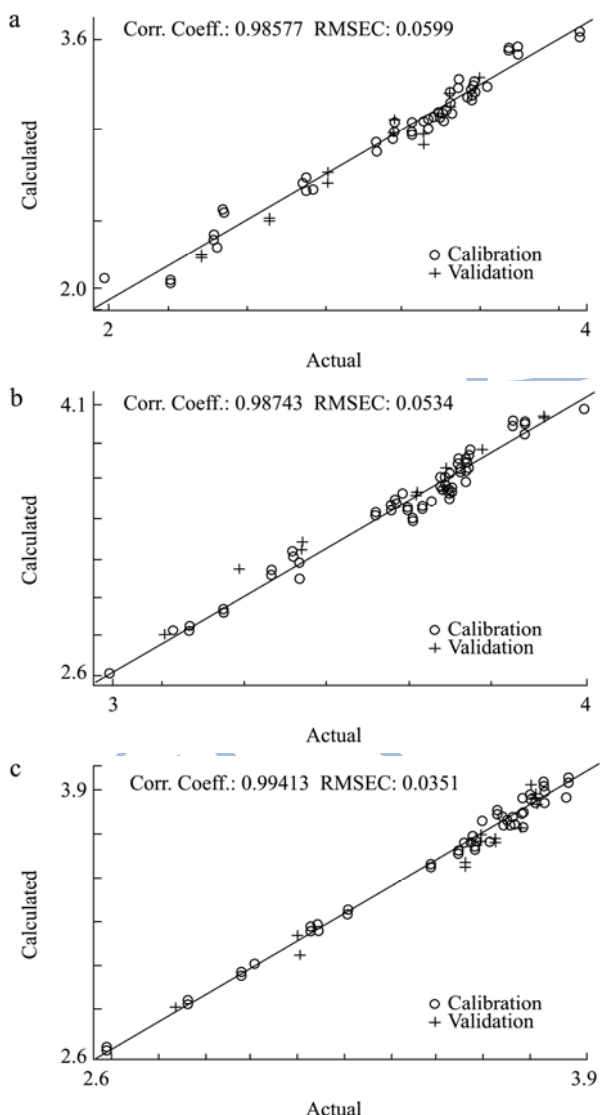


图 8 红曲色素的 PCR 模型预测结果

Fig.8 The plots of measured value vs. PCR model predicted value

注: (a) 橙色素, (b) 红色素, (c) 黄色素。

同样,在各自的最佳主成分条件下,得到了红曲米中红曲红色素、红曲黄色素的 PCR 模型,如表 5 所示。由表 5 可以看出,红曲橙色素、红色素、黄色素相关系数均大于 0.9,表明 PCR 模型具有较好的稳健性。另外红曲橙色素、红色素、黄色素模型的 RPD 值分别为 4.86、5.39 和 4.98,表明该模型可用于精确的定量预测。

红曲米中红曲色素各组分 PCR 模型对未知样品预测时,预测结果具有较好的线性,也具有良好预测精度 (RPD=4.86~5.39)。红曲橙色素、红色素、黄色素的 PCR 模型的校正集和预测集样品的真实值与预测值分别如图 8 所示。

3 结论

3.1 采用近红外光谱技术结合化学计量学方法构建红曲米中红曲橙色素、红曲红色素、红曲黄色素的预测模型。采用 MSC、SNV 方法消除红曲米粉颗粒不均对光谱的散射影响;采用导数处理消除基线漂移;采用 S-G 卷积平滑和 Norris 导数滤波去除高频噪声,提高信噪比;采用求常用对数方法消除了色素值跨度较大,数量级不等的问题;马氏距离 (MD) 可用于识别光谱异常样本,而杠杆值和学生残差可用于识别化学值异常。

3.2 分别采用 SMLR、PLS、PCR 构建所有组分的数学模型,以 RPD 值来评价模型综合性能。结果显示,对于红曲橙色素、红曲黄色素、红曲红色素 3 种模型均具有良好的稳健性,且预测性能较好 (RPD 均接近或大于 3),3 种模型对未知红曲样品预测时,预测结果具有较高的线性,也具有良好预测精度 (RPD=2.86~5.39),可用于精确的定量预测和定量分级。

参考文献

- [1] Silveira ST, Daroit DJ, Sant Anna V, et al. Stability modeling of red pigments produced by *Monascus purpureus* in submerged cultivations with sugarcane bagasse [J]. Food and Bioprocess Technology, 2013, 6(4): 1007-1014
- [2] Li HR, Du ZW, Zhang JR. Study on the stability of *Monascus* pigment [J]. Food Science, 2003, 24:59-62
- [3] Huang L, Cheng X, Wei S J, et al. Research on the stability for *Monascus* pigment produced by *Monascus purpureus* J R [J]. Journal of Food Science, 2011, 36(3): 93-96
- [4] Espinoza-Hernández T C, Rodríguez-Herrera R, Aguilar-González C, et al. Characterization of three novel pigment-producing *Penicillium* strains isolated from the Mexican semi-desert [J]. African Journal of Biotechnology, 2013, 12(22): 3405-3413
- [5] 屈炯,王斌,吴佳佳,等.红曲色素组份分离及其抗氧化活性研究[J].现代食品科技,2008,24(6):527-531
QU Jiong, WANG Bin, WU Jia-jia, et al. Study on separation of *Monascus* pigments and their antioxidative properties [J]. Modern Food Science and Technology, 2008, 24(6): 527-531
- [6] Hong S, Lee I, Kim S, et al. Improved functionality of soft soybean curd containing *Monascus* fermented soybean ethanol extract [J]. Food Science and Biotechnology, 2012, 21(3): 701-707
- [7] Lee CL, Pan TM. Development of *Monascus* fermentation technology for high hypolipidemic effect [J]. Applied Microbiology and Biotechnology, 2012, 94(6): 1449-1459
- [8] Gheith O, Sheashaa H, Abdelsalam M, et al. Efficacy and safety of *Monascus purpureus* went rice in subjects with secondary hyperlipidemia [J]. Clinical and Experimental Nephrology, 2008, 12(3): 189-194
- [9] 丁海泉,卢启鹏.近红外光谱技术在土壤养分分析中的研究进展及应用前景[J].光谱学与光谱分析, 2012, 32(1): 88-91
DING Hai-quan, LU Qi-peng. Research progress and application prospect of near infrared spectroscopy in soil nutrition analysis [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2012, 32(1): 88-91
- [10] Cozzolino D. Use of near infrared spectroscopy (NIRS) to analyse animal feeds [J]. Agrocencia, 2002, 6: 25-32
- [11] Nicolai B M, Beullensa K, Bobelyna E, et al. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: a review [J]. Postharvest Biology and Technology, 2007, 46(2): 99-118
- [12] 王田子,郑丽敏,田立军,等.近红外在乳及乳制品质量检测中的研究进展[J].光谱学与光谱分析,2010,30(12):3208-3212
WANG Tian-zi, ZHENG Li-min, TIAN Li-jun, et al. Analysis of milk and dairy products by near-infrared spectroscopy: A review [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2010, 30(12): 3208-3212
- [13] 徐霞,成芳,应义斌.近红外光谱技术在肉品检测中的应用和研究进展[J].光谱学与光谱分析,2009,29(7):1876-1880
XU Xia, CHENG Fang, YING Yi-bin. Application and recent development of research on near-infrared spectroscopy for meat quality evaluation [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009, 29(7): 1876-1880
- [14] 王加华,王一方,屈凌波.粮食品质近红外光谱无损检测研究进展[J].河南工业大学学报(自然科学版),2011,32(6): 80-87
WANG Jia-hua, WANG Yi-fang, QU Ling-bo. Research progress on nondestructive detection of grain quality by near infrared spectroscopy [J]. Journal of Henan University of Technology (Natural Science Edition), 2011, 32(6): 80-87
- [15] 钱慧敏,陈海燕,王旻,等.近红外标记技术在生物医药领域的应用[J].药物生物技术,2006,13(4):306-309
QIAN Hui-min, CHEN Hai-yan, WANG Min, et al. The near-infrared labeling conjugates and their application in biopharmaceutics [J]. Pharmaceutical Biotechnology, 2006, 13(4): 306-309
- [16] Dhale Mohan A, Puttananjaiah Mohan-kumari H, Sukumaran Umesh-kumar, et al. Production of *Monascus Purpureus* pigments; influenced by amidase and acid protease activity [J]. Journal of Food Biochemistry, 2011, 35: 1231-1241
- [17] Chung Chao-chin, Huang Tzou-chi, Chen Ho-hsien, et al. The optimization of *Monascus* fermentation process for pigments increment and citrinin reduction [C]. Ninth IEEE International Conference on Bioinformatics and BioEngineering, IEEE, 2009, 77-83
- [18] 严衍录,赵龙莲,韩东海,等.近红外光谱分析基础与应用[M].北京:中国轻工业出版社,2005
YAN Yan-lu, ZHAO Long-lian, HAN Dong-hai, et al. Near infrared spectroscopy analysis and application [M]. Beijing: China Light Industry Press, 2005
- [19] Urbano Cuadrado M, Luque de Castro MD, MA Gómez-Nieto. Study of spectral analytical data using finger prints and scaled similarity measurements [J]. Analytical and

Bioanalytical Chemistry, 2005, 381 (4): 953-963
PR (Eds.), Handbook of vibrational spectroscopy [M].
[20] Fearn T. Discriminant analysis. In: Chalmers JM, Griffiths
Chichester: Wiley, 2002, 2086-2093

