

# 傅里叶变换中红外光谱结合偏最小二乘法快速测定蕨菜总多糖含量

徐惠敏<sup>1,2</sup>, 郝经文<sup>1,2,3</sup>, 陈乃富<sup>1,2,3\*</sup>, 陈乃东<sup>1,2,3\*</sup>

<sup>1</sup>安徽中医药大学, 合肥 230031; <sup>2</sup>皖西学院 生物与制药工程学院;

<sup>3</sup>安徽省中药资源保护与持续利用工程实验室, 六安 237012

**摘要:**本文建立了一种快速预测蕨菜总多糖含量的方法。采用蒽酮-硫酸比色法测定 140 份蕨菜总多糖含量作为参比值, 采集 140 份蕨菜样品的傅里叶变换中红外光谱图, 结合偏最小二乘法, 建立蕨菜总多糖定量分析模型。通过比较多元散射校正法、标准正态变换法、一阶导数法、二阶导数法、多元散射校正 + 一阶导数法、标准正态变换 + 一阶导数法、多元散射校正 + 二阶导数法以及标准正态变换 + 二阶导数法共 8 种不同的光谱预处理方法, 运用多糖类化合物的中红外光谱学特征吸收筛选建模波段, 对蕨菜多糖含量预测模型进行优化。结果表明: 采用标准正态变换法作为光谱数据预处理方法, 以 1 750 ~ 1 600、1 500 ~ 1 400、1 350 ~ 1 290、1 160 ~ 1 070、1 060 ~ 970、930 ~ 800  $\text{cm}^{-1}$  作为建模波段, 获得校正集相关性系数  $R^2$  为 0.930 8, 校正均方差 (RMSEC) 为 0.374%, 检验集相关性系数  $R^2$  为 0.914 5, 预测均方差 (RMSEP) 为 0.418%, 20 组样品进行完全外部验证误差为: -0.35% ~ 0.31%, 相对误差值为: -0.83% ~ 5.24%, 所构建定量模型可用于蕨菜总多糖含量预测。

**关键词:**蕨菜; 傅里叶变换中红外光谱; 总多糖; 偏最小二乘法

中图分类号: R282.5

文献标识码: A

文章编号: 1001-6880(2022)11-1857-08

DOI: 10.16333/j.1001-6880.2022.11.006

## Rapid quantification of polysaccharide in *Pteridium aquilinum* by Fourier transform mid infrared spectroscopy and partial least square method

XU Hui-min<sup>1,2</sup>, HAO Jing-wen<sup>1,2,3</sup>, CHEN Nai-fu<sup>1,2,3\*</sup>, CHEN Nai-dong<sup>1,2,3\*</sup>

<sup>1</sup>School of Pharmacy, Anhui University of Traditional Chinese Medicine, Hefei 230012, China;

<sup>2</sup>College of Biotechnology and Pharmaceutical Engineering, West Anhui University; <sup>3</sup>Anhui Engineering Laboratory for Conservation and Sustainable Utilization of Traditional Chinese Medicine Resource, Lu'an 237012, China

**Abstract:** In this paper, a method was established for rapid determination of total polysaccharides in *Pteridium aquilinum*. The real contents of total polysaccharides in 140 *P. aquilinum* samples were determined by the anthrone-sulphuric acid method. A rapid quantitative model for the contents of total polysaccharides in the *P. aquilinum* samples was established by fourier transform mid infrared spectroscopy (FTIR) combined with partial least square method (PLS). Eight different spectral preprocessing methods (multiplicative scattering correction, standard normal variate, first derivative, second derivative, first derivative combined with standard normal variate method, first derivative combined with multiplicative scattering correction method, second derivative combined with standard normal variate method and second derivative combined with multiplicative scattering correction method) were compared and the characteristic FTIR signals of polysaccharides were utilized as selection modeling bands, which were used to optimize the predicting model. The results showed that when the selected ranges for the model were 1 750-1 600, 1 500-1 400, 1 350-1 290, 1 160-1 070, 1 060-970, 930-800  $\text{cm}^{-1}$  and the standard normal transformation method was used as the preprocessing method, the correlation coefficient  $R^2$  of the calibration set was 0.930 8, the calibration mean square error (RMSEC) value was 0.374%, the correlation coefficient  $R^2$  of the test set was 0.914 5 and the mean square er-

收稿日期: 2022-03-23 接受日期: 2022-09-20

基金项目: 国家自然科学基金 (81573536, 81274021); 皖西学院大学生创新创业项目 (S202010376121, wxy2021168)

\* 通信作者 Tel: 86-018063028518; E-mail: 2004cnd@163.com

ror of prediction (RMSEP) value was 0.418%. The error of complete external validation of 20 samples was -0.35% -0.31% and the relative error of complete external validation was -0.83% -5.24%. The established quantitative model could be used to predict the contents of total polysaccharides in *P. aquilinum*.

**Key words:** *Pteridium aquilinum*; FTIR; total polysaccharides; partial least square method

蕨菜来自于蕨科蕨属植物蕨 *Pteridium aquilinum* (L.) Kuhn var. *latiusculum* (Desv) Underw 的幼嫩叶和茎,又名拳头菜、如意菜、龙爪菜等<sup>[1]</sup>。因其生长于山林野地,绿色天然无污染,加之食用鲜美,口感脆爽,深受人们喜爱<sup>[2,3]</sup>。蕨菜富含多种营养物质以及萜类,黄酮和多糖等多种化学成分<sup>[4-6]</sup>。相关研究表明,多糖类成分具有独特的药理作用,有降血糖、抗氧化、提高机体免疫力等多种药用保健功能<sup>[7-9]</sup>,具有很高的药用价值<sup>[10,11]</sup>。蕨菜总多糖含量是蕨菜质量评价的重要指标之一。传统测定蕨菜总多糖含量的方法有蒽酮-硫酸法<sup>[12]</sup>和苯酚-硫酸法<sup>[13]</sup>。但该类方法需要消耗大量化学试剂,检测时间较长,对检验人员技术要求高,已无法满足蕨菜产业化生产过程中大量原料快速检测的需求,因此亟需构建一种快速、绿色、操作简便的蕨菜总多糖含量测定方法。

近年来,运用傅里叶变换中红外光谱(Fourier transform mid infrared spectroscopy, FTIR)技术结合化学计量学方法构建植物中化合物含量快速预测模型的方式,在相关成分无损定量分析方面已有应用<sup>[14-20]</sup>。但尚未见通过该技术对蕨菜中总多糖进行定量分析的报道。

有鉴于此,本研究采用傅里叶变换中红外光谱分析技术结合化学计量学方法,考察不同光谱预处理方式以及选择不同的特征波段对其定量分析的影响,建立快速预测蕨菜总多糖含量模型,为蕨菜多糖含量的快速检测提供方法。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料

蕨菜样品采自2021年2月至2021年6月,分别从安徽霍山、金寨、岳西,共收集140份,经皖西学院陈乃富教授鉴定为蕨(*Pteridium aquilinum* (L.) Kuhn var. *latiusculum* (Desv) Underw)幼嫩叶和茎。将蕨菜样品从S1到S140进行编号。

将新鲜蕨菜60℃烘干至恒重,粉碎,过60目药筛(粒径为0.2 mm),干燥器中保存备用。

### 1.2 仪器

傅里叶变换中红外光谱仪(Thermo Fisher Sci-

entific Nicolet iS50 FT-IR Spectrometer)配备金刚石单反射ATR附件的样品池采集及分析软件TQ-Analyst 9.0; YGH-500S/BS型远红外快速恒温干燥箱(上海跃进医疗器械有限公司); AE124型分析天平(上海舜宇恒平科学仪器有限公司); UV-5200型紫外可见分光光度计(上海元析仪器有限公司); HH-M6型数显恒温水浴锅(江苏金坛市金城国胜实验仪器厂); AQ-180E型多用途磨粉机(慈溪市耐欧电器有限公司)。

### 1.3 方法

#### 1.3.1 ATR-FTIR 光谱采集

傅里叶变换中红外光谱仪开机预热30 min,将蕨菜粉末样品放置于光谱仪配备的金刚石单反射ATR附件的样品池上,厚度约0.5 cm。将软件设置为衰减全反射模式,傅里叶变换中红外光谱仪的测定范围4 000~600 cm<sup>-1</sup>,扫描次数32次,分辨率为4.0 cm<sup>-1</sup>,吸收光谱用log(1/R)表示,在每个样品采集前,以空气做参照,消除背景,每个样品测试6次,获得一份样品6个中红外原始光谱,并将该样品6个原始光谱进行计算获得其平均光谱用于后面建模分析。

#### 1.3.2 蕨菜总多糖含量的测定

精密称取蕨菜干粉2.0 g,置于50 mL圆底烧瓶中,以30 mL蒸馏水(g: mL, 1: 15)90℃回流提取3 h,重复3次,过滤,合并滤液于100 mL的容量瓶中,加入蒸馏水定容至刻度,得蕨菜总多糖提取液,备用。每个样品平行3份。

精密移取上述蕨菜总多糖提取液样品1.0 mL,置10 mL具塞刻度试管中,冰水浴下缓慢精密加入0.2%蒽酮-硫酸溶液4.0 mL,摇匀,冷却加盖试管塞后,置于沸水浴中加热10 min,取出后迅速冰水浴冷却10 min,采用紫外分光光度法于621 nm下测其吸光度值(A)。

以葡萄糖为对照品制标准曲线:精密称取经105℃干燥恒重的D-无水葡萄糖对照品适量,加水溶解使成0.1 mg/mL葡萄糖标准溶液,精密移取葡萄糖对照品溶液0.0、0.1、0.2、0.4、0.6、0.8、1.0 mL于具塞刻度试管中,分别加蒸馏水至1.0 mL并

摇匀,在冰水浴中缓慢滴加 4.0 mL 0.2% 蒽酮-硫酸溶液,摇匀,放至室温后盖口加盖,置沸水浴中加热 10 min 后取出,迅速冰水浴中冷却 10 min,以葡萄糖标准溶液 0.0 mL 管为空白,于 621 nm 下测吸光度值,得回归曲线:  $A = 50.029C - 0.0035$ ,  $R^2 = 0.999$  ( $C$  为试管中葡萄糖浓度, mg/mL)。

### 1.3.3 定量模型的建立

对所述同一蕨菜样品采集的 6 次中红外光谱原始谱图进行基线校正和平均谱图计算,获得其平均谱消除因人工取样误差导致的谱图,再将平均谱移动平均 15 点平滑法消除检测环境导致的光谱噪声。使用 TQ-Analyst 9.0 软件中红外定量分析软件包,选用偏最小二乘法(PLS),构建蕨菜总多糖含量原始定量分析模型。定量分析模型采用外部验证对模型的预测效果进行验证,使用 TQ-Analyst 9.0 软件设定验证样本数量为校正样本数量的 1/2,其中校正集样品 80 份,检验集样品 40 份,其余 20 份样品用于完全外部验证。

### 1.3.4 定量模型的优化

#### 1.3.4.1 光谱预处理方法的确定

在原始光谱数据信息中通常包括了因样品粉碎的粒度、样品的颜色、仪器状态等带来的基线漂移、噪音数据。在红外建模分析中,常采用光谱预处理的方法,减少噪音波段对模型准确性和稳定性影响,使所建立的模型更准确、可靠。本实验采用多元散射校正法(multiplicative signal correction, MSC)、标准正态变换法(standard normal variate, SNV)、一阶

导数法(first derivative, FD)、二阶导数法(second derivative)、多元散射校正+一阶导数法(MSC+FD)、标准正态变换+一阶导数法(SNV+FD)、多元散射校正+二阶导数法(MSC+SD)以及标准正态变换+二阶导数法(SNV+SD)共 8 种光谱预处理方法,结合偏最小二乘算法(PLS),以建立定量分析模型中  $R^2$  值和校正集均方根误差值(root mean square error calibration, RMSEC)作为评价指标,进行预处理方法的筛选。

#### 1.3.4.2 波数的选择

比较了全部波数、TQ Analyst-9 中红外定量分析软件包推荐波数、多糖特征波数和多糖特征波数组合四种不同的波数选择方法,选择与蕨菜总多糖组分相关且建立的定量模型准确度较高、稳定性较好的最佳波数范围。

## 2 结果与分析

### 2.1 蕨菜总多糖含量测定结果

采用蒽酮-硫酸比色法测定 140 份蕨菜样本的总多糖含量。蕨菜总多糖含量范围: 4.110% ~ 7.903%,其含量的分布范围广,有较强代表性,可满足定量模型要求样本含量分布要求,同时使用 TQ-analyst 9.0 软件设定 80 份校正集样品多糖含量范围是 4.110% ~ 7.903%,40 份检验集样品的多糖范围是 4.505% ~ 7.634%,且检验集样品多糖含量在校正集样品多糖含量范围内,该检验集样品可使用校正集模型进行检验,结果如表 1 所示。

表 1 样品集中蕨菜总多糖含量

Table 1 The total polysaccharide content of *P. aquilinum* samples used in the dataset

样品集 Sample set	样品量 Number of sample	含量 Content (%)	含量范围 Range of content (%)
总样品 Total sample	140	5.670 ± 0.092	4.110 ~ 7.903
校正集 Calibration set	80	5.601 ± 0.059	4.110 ~ 7.903
检验集 Validation set	40	5.809 ± 0.057	4.505 ~ 7.634

### 2.2 原始光谱分析

用傅里叶变换中红外光谱仪采集了 140 份样本原始光谱,如图 1 所示,在 4 000 ~ 800  $\text{cm}^{-1}$  谱区内,蕨菜样品中红外全反射光谱较光滑,光谱曲线走向基本一致,但不同样本的光谱曲线又略有不同,说明各样本化学成分有差异,为蕨菜总多糖含量的定量分析提供光谱信息基础。

从原始光谱图中分析,在 4 000 ~ 800  $\text{cm}^{-1}$  波长

范围内,蕨菜多糖中存在大量-CH(3 300 ~ 2 700、1 500 ~ 1 300  $\text{cm}^{-1}$ )、-OH(4 000 ~ 3 000  $\text{cm}^{-1}$ )、-C-C-和-C-O-(1 300 ~ 1 000  $\text{cm}^{-1}$ )的基团,有强烈的光谱吸收,但该谱区包含环境空气中  $\text{CO}_2$  和水分的干扰,蕨菜样品原始光谱图有波动,为提高所构建定量模型性能,需选择合适的光谱预处理方法,提高预测模型的准确性和稳定性。

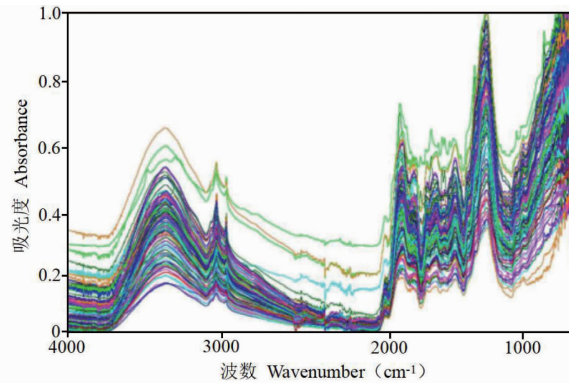


图1 蕨菜样品的中红外原始光谱

Fig. 1 The raw FTIR spectra of *P. aquilinum* samples

### 2.3 光谱预处理方法的选择

通过对原始光谱进行预处理,可减少噪音波段的影响,提高定量模型的准确度。参考相关文献做法<sup>[21-24]</sup>,在预实验的基础上,本实验选择8种光谱预处理方法:MSC、SNV、FD、SD、MSC + FD、SNV + FD、MSC + SD、SNV + SD。比较不同预处理方法PLS定量模型校正集的 $R^2$ 值和RMSEC,且 $R^2$ 值越接近于1,RMSEC值越小为最佳预处理方法,其结果见表2,采用标准正态变换法作为光谱预处理方法时,具有较高的 $R^2$ 值0.8489、较小的RMSEC值为0.547,且采用标准正态变换法预处理后的蕨菜样品近红外光谱如图2所示,其消除因样品样品粒度、样品颜色、仪器状态等引起的噪音,光谱较原始光谱更光滑,所构建的定量分析模型更稳定。

表2 不同光谱预处理方法对模型的影响

Table 2 Effect of different pretreatments on the parameter of model

光谱预处理方法 Pretreatment method	偏最小二乘法分析结果 Results of partial least squares analysis	
	$R^2_{EC}$	RMSEC
原始光谱 Original spectrum	0.796 6	0.625
MSC	0.806 8	0.402
SNV	0.848 9	0.547
FD	0.795 5	0.627
SD	0.773 5	0.655
MSC + FD	0.704 8	0.734
SNV + FD	0.830 9	0.575
MSC + SD	0.562 7	0.855
SNV + SD	0.734 4	0.702

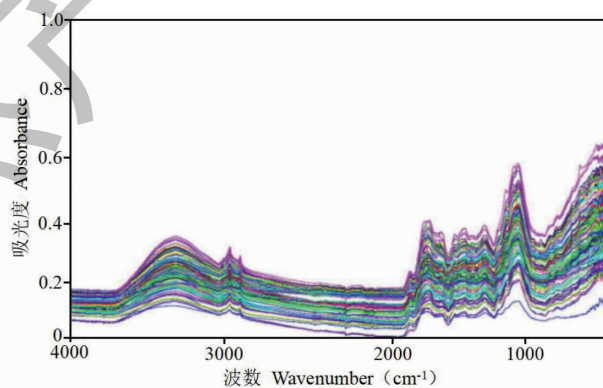


图2 蕨菜样品的标准正态变换法处理光谱图

Fig. 2 The standard normal variate spectra of *P. aquilinum* samples

### 2.4 主因子数的选择

主因子数的选择对定量分析模型的预测效果有较大影响,主因子数选择较少时,所检测化合物的光

谱信息难以完全表达,导致定量模型欠拟合,模型预测准确度下降;但主因子数选择过多,又会导致模型出现过拟合,导致模型预测能力下降,使用完全外

部验证时,预测结果误差较大。本研究考察不同主因子数,其范围从1到20时对模型的影响,模型交互检验值(root mean square error of cross-validation, RMSECV)结果如图3所示,RMSECV值越小模型的预测能力越强,主因子数<5时,模型的预型能力在

不断增加,当主因子数为5时,RMSECV值为0.549,随着主因子数的继续增加,RMSECV值虽降低,但其变化程度减少,模型的预测能力下降,故选择最佳主因子数为5。

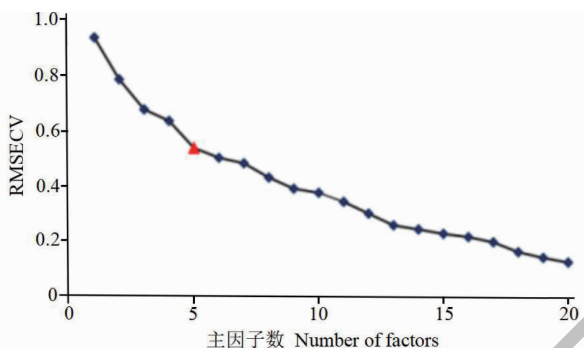


图3 不同主因子数对模型的影响

Fig. 3 Number of PLS factors versus the parameter of model

## 2.5 建模波段的选择

在中红外光谱定量模型中,存在一些高信噪比但光谱强度较低,或与化学特征相关性较弱的光谱区域,对多糖含量预测模型没有太大贡献,需从全谱中剔除,以提高模型的准确性和稳定性。结合模型内部评价参数与多糖在FTIR中的吸收波段选择建模区间。对蕨菜样品的中红外光谱信号(图1)分为以下几类:1 750~1 600  $\text{cm}^{-1}$ 为羰基C=O的伸缩振动,1 350~1 290  $\text{cm}^{-1}$ 波段为C-O伸缩振动;1 500~1 400  $\text{cm}^{-1}$ 波段为烷烃C-H伸缩振动;1 280~1 200  $\text{cm}^{-1}$ 波段是-OH的面内弯曲振动,1 060~970  $\text{cm}^{-1}$ 波

段为-OH的伸缩振动;1 160~1 070  $\text{cm}^{-1}$ 波段为C-O-C伸缩振动;930~800  $\text{cm}^{-1}$ 波段为C-H的面外振动<sup>[25-27]</sup>。根据以上多糖特征FTIR特征吸收光谱,比较了10种建模波长选择方法,结果见表3。以 $R^2$ 和RMSEC为评价标准,对比不同波长范围模型,确定适合蕨菜多糖含量预测模型的最佳波长,结果表明,采用多糖类化合物6种特征波数组合:1 750~1 600、1 500~1 400、1 350~1 290、1 160~1 070、1 060~970、930~800  $\text{cm}^{-1}$ ,获得较高的 $R^2$ 值0.9308,最小的RMSEC值0.374%,因此选择此波段组合为预测蕨菜总多糖模型的最佳建模波段。

表3 光谱范围对偏最小二乘法校正模型性能的影响

Table 3 Effect of different pretreatments on the parameter of model

波数选择模型 Wavenumber range selection mode	波数范围 Wavenumber range( $\text{cm}^{-1}$ )	$R^2_{\text{EC}}$	RMSEC
全部波数 Full FTIR spectrum	4 000 ~ 600	0.848 9	0.547
TQ Analyst-9 中红外定量分析软件包推荐波数 Choosing the wavenumber range suggested by TQ Analyst-9	1 300 ~ 1 170 890 ~ 800	0.836 4	0.567
多糖类化合物特征单一波数 Choosing single of the characteristic FTIR signals relative to polysaccharides	1 750 ~ 1 600	0.772 5	0.657
	1 500 ~ 1 400	0.859 6	0.528
	1 350 ~ 1 290	0.781 0	0.646
	1 280 ~ 1 200	0.427 9	0.935
	1 160 ~ 1 070	0.809 7	0.607
	1 060 ~ 970	0.819 1	0.593
	930 ~ 800	0.743 2	0.692

续表 3 (Continued Tab. 3)

波数选择模型 Wavenumber range selection mode	波数范围 Wavenumber range (cm <sup>-1</sup> )	R <sub>EC</sub> <sup>2</sup>	RMSEC
多糖类化合物特征波数组合 Choosing all of the characteristic FTIR signals relative to polysaccharides	1 750 ~ 1 600 1 500 ~ 1 400 1 350 ~ 1 290 1 280 ~ 1 200 1 160 ~ 1 070 1 060 ~ 970 930 ~ 800	0. 897 8	0. 455
多糖类化合物部分特征波数组合 Choosing parts of the FTIR signals relative to polysaccharides	1 750 ~ 1 600 1 500 ~ 1 400 1 350 ~ 1 290 1 160 ~ 1 070 1 060 ~ 970 930 ~ 800	0. 930 8	0. 374

## 2.6 建立 FTIR 光谱蕨菜中总多糖含量预测模型

利用 TQ-Analyst 9.0 分析软件,通过偏最小二乘方法建立 80 份校正集蕨菜样品的光谱图特征波长与总多糖含量之间的定量模型,并利用该定量模型对 40 份检验集蕨菜样品的总多糖含量进行验证,将蕨菜样品的 FTIR 数据进行预处理,选择标准正态变换法对光谱预处理,选择 1 750 ~ 1 600、1 500 ~

1 400、1 350 ~ 1 290、1 160 ~ 1 070、1 060 ~ 970、930 ~ 800 cm<sup>-1</sup> 为最佳建模波段。蕨菜总多糖含量的 FTIR 预测值与真实值建模结果如图 4 所示,获得校正集的相关系数为 0.930 8,均方根误差 0.374%,检验集的相关系数为 0.914 5,均方根误差为 0.418%,说明该定量模型拟合度较好,且模型预测性能较好。

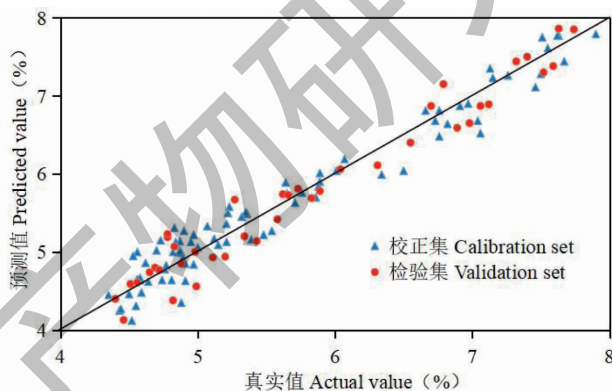


图 4 蕨菜总多糖含量的预测值与真实值的相关性

Fig. 4 Relationship between actual and predictive values of the total polysaccharides content of *P. aquilinum* samples

## 2.7 模型的外部验证与评价

为验证所建模型的预测精度用优化后的模型对未参与建模的样品进行测定。故使用 20 份蕨菜样品进行完全外部检验,结果见表 4,其 20 份蕨菜样

品总多糖含量预测误差仅为: -0.35% ~ 0.31%,相对误差值为: -0.83% ~ 5.24%,以上数据可以说明所建模型的预测能力较高。

表 4 完全外部检验集样品真实值与 FTIR 预测值比较分析

Table 4 Comparison between analytical and FTIR predictive values of validation samples

编号 No.	真实值 Actual value (%)	模型预测值 Predicted value (%)	偏差 Deviation (%)
S121	5.52	5.59	0.07
S122	6.13	6.44	0.31
S123	5.55	5.81	0.26

续表 4(Continued Tab. 4)

编号 No.	真实值 Actual value(%)	模型预测值 Predicted value(%)	偏差 Deviation(%)
S124	5.69	5.56	-0.13
S125	5.37	5.12	-0.25
S126	6.00	5.65	-0.35
S127	6.16	6.15	-0.01
S128	6.59	6.71	0.12
S129	6.48	6.63	0.15
S130	6.90	7.14	0.24
S131	6.53	6.47	-0.06
S132	6.67	6.65	-0.02
S133	6.93	6.75	-0.18
S134	5.19	4.97	-0.22
S135	7.17	6.98	-0.19
S136	7.18	7.19	0.01
S137	5.22	5.1	-0.12
S138	5.06	5.23	0.17
S139	4.67	4.57	-0.1
S140	4.39	4.62	0.23

### 3 结论

本实验采集蕨菜粉末的傅里叶变换中红外光谱,建立偏最小二乘法模型对蕨菜总多糖含量进行预测。完全外部样品检验时,蕨菜总多糖含量预测误差仅为:-0.35%~0.31%。该模型预测效果良好,与传统多糖含量测定方法相比,该方法样品预处理简单、操作快速便捷、结果准确可靠,具有较好的实用性,可用于蕨菜总多糖含量快速测定,能满足蕨菜产业化需求有利于在实际生产中推广应用,同时可为其他植物中多糖含量测定方法提供参考。

### 参考文献

- 1 Flora of Anhui Collaborative Group. Flora of Anhui: Vol I (安徽植物志:第一卷)[M]. Beijing: China Prospect Press, 1990:48-52.
- 2 Chen NF, Zhang L, Dai J, et al. Protective effect of *Pteridium aquilinum* flavanone extract on ethyl alcohol hepatic toxicity in mice[J]. Chin J Public Health(中国公共卫生), 2009, 25:87-88.
- 3 Chen CW, Chen NF, Zhang L, et al. Studies on the acute toxicity and the mutagenicity of flavonoids extracts[J]. Carcino Terato Muta(癌变. 畸变. 突变), 2008(2):157-159.
- 4 Chen ND, Chen NF, Wang T, et al. A novel homoflavonoid

- from *Pteridium aquilinum* (L.) Kuhn[J]. Nat Prod Res, 2013, 25:577-580.
- 5 Chen ND, Chen NF, Chen CW, et al. Separation and structure elucidation of a new homoflavanol derivative from *Pteridium aquilinum* (L.) Kuhn[J]. Nat Prod Res, 2013, 27:1764-1769.
- 6 Chen ND, Chen NF, Chen CW, et al. A novel bihomoflavanonol with an unprecedented skeleton from *Pteridium aquilinum*[J]. Chin Herb Med. 2013, 5:96-100.
- 7 Gu FL, Han BX, Chen NF, et al. Mechanism of lowering uric acid and renoprotective function of ethanolextract from *Pteridium aquilinum* in hyperuricemia mice[J]. Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发), 2018, 30:629-633.
- 8 Chen ND, Chen NF, Zhang L, et al. Study on the anti-oxidative activity of *Pteridium aquilinum* by chemiluminescence[J]. Food Ferment Ind(食品与发酵工业), 2013, 39:199-204.
- 9 Chen NF, Zhang L, Han BX, et al. Effects of *Pteridium aquilinum* flavanone on life-span and reproduction performance in drosophila melanogaster[J]. Acta Nutr Sin(营养学报), 2007, 29:625-626.
- 10 Song GL, Wang KW, Zhang H, et al. Purification, characterization and immunomodulating activity of polysaccharides from *Pteridium aquilinum* (Linn.) Kuhn[J]. Chin J Pharm



- Anal( 药物分析杂志),2016,36:2017-2112.
- 11 Xia HT,Liu YF,Wang R, et al. Extraction and content determination of polysaccharides and flavonoids from wild *Pteridium aquilinum* [J]. Food Sci ( 食品科学), 2010, 31 : 124-127.
  - 12 Hao JW,Chen LL,Si HY, et al. Ultrasonic-assisted extraction and determination of polysaccharide in *Pteridium aquilinum* and preliminary study of pharmacological activities [J]. Nat Prod Res Dev( 天然产物研究与开发),2019,31:957-963.
  - 13 Fang YM,Zhang P,Wang YH, et al. Ultrasonic-assisted extraction and determination of polysaccharide in Liu Panshui wild *Pteridium revolutum* [J]. Food Res Dev( 食品研究与开发),2015,36:115-118.
  - 14 Hao JW,Chen ND,Fu XC, et al. Predicting the contents of polysaccharides and its monosugars in *Dendrobium huoshanense* by partial least squares regression model using attenuated total reflectance Fourier transform infrared spectroscopy [J]. Spectrosc Lett,2019,52:297-305.
  - 15 Zhang XX,Yi JH. Research on principal component concentrations of bovine nasal cartilage by Fourier transform infrared imaging and PLS algorithm [C]//The 18th National Molecular Spectroscopy Conference( 第十八届全国分子光谱学学术会议论文集). Suzhou: Spectroscopy Committee of Chinese Optical Society,2014:105-106.
  - 16 Yu XZ,Du SK,Yue TL, et al. Trans-Fatty acid determination of edible oil by attenuated total reflection Fourier transform infrared spectroscopy ( ATR-FTIR ) [J]. J Chin Cereal Oil Ass( 中国粮油学报),2008,23:189-193.
  - 17 Khrmer A,Btcher C,Gudi G, et al. Application of ATR-FTIR spectroscopy for profiling of non-structural carbohydrates in onion (*Allium cepa* L. ) bulbs [J]. Food Chem,2021,360:129978.
  - 18 Chen Y,Wu CE,Xiong ZX. Selection of near infrared wavelengths using attenuation elimination-binary dragonfly algorithm for wheat flour protein content prediction [J]. Food Sci ( 食品科学),2022,43(14):219-225.
  - 19 Hao JW,Chen Y,Chen ND. Assessment of ATR-NIR and ATR-MIR spectroscopy as an analytical tool for the quantification of the total polyphenols in *Dendrobium huoshanense* [J]. Phytochem Anal,2020,31:366-374.
  - 20 Hao JW,Chen ND,Chen CC, et al. Rapid quantification of polysaccharide and the main onosaccharides in *Dendrobium huoshanense* by near-infrared attenuated total reflectance spectroscopy [J]. J Pharm Biomed Anal,2018,151:331-338.
  - 21 Hu YP,Bai TC,Chen HB, et al. Effects of different near-infrared spectral preprocessing methods on the detection model of water content in *Populus euphratica* leaves [J]. Jiangsu Agric Sci( 江苏农业科学),2018,46:253-257.
  - 22 Diwu PY,Bian XH,Wang ZF, et al. Study on the selection of spectral preprocessing methods [J]. Spectrosc Spect Anal( 光谱学与光谱分析),2019,39:2800-2806.
  - 23 Sun JJ,Yang WD,Feng MC, et al. Comparative study on spectral pretreatment methods of corn grain protein [J]. Agric Technol Equip( 农业技术与装备),2020,367:10-12.
  - 24 Yu ZY,Yang XW,Wang XX, et al. Establishment of predictive model for quantitative analysis of polysaccharides of Linze jujube by middle infrared spectroscopy [J]. Food Ind ( 食品工业),2021,42:249-252.
  - 25 Zhu M,Mo J,He CS, et al. Extraction, characterization of polysaccharides from *Lycium barbarum* and its effect on bone gene expression in rats [J]. Carbohydr Polym,2010,80:672-676.
  - 26 Xu YQ,Liu GJ,Yu ZY, et al. Purification, characterization and antiglycation activity of a novel polysaccharide from black currant [J]. Food Chem,2016,199:694-701.
  - 27 Wang G,Liu Y,Xia LX, et al. Feature waveband selection and predictive modelling for quantitative determination of amylose by attenuated total reflectance-Fourier transform mid-infrared spectroscopy [J]. Food Sci ( 食品科学),2021,42:335-340.