DOI: 10.19812/j.cnki.jfsq11-5956/ts.20260330001
引用格式: 韦友晨, 郜珮含, 柴静怡, 等. 基于近红外光谱技术同步快速分析纳米化番茄红素液态饮品多成分[J]. 食品安全质量检测学报, 2026, 17(15): 124–133.
Wei Youchen, Gao Peihan, Chai Jingyi, et al. Rapid and simultaneous analysis of multiple components in nanostructured lycopene liquid beverages based on near-infrared spectroscopy [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2026, 17(15): 124–133. (in Chinese with English abstract).

基于近红外光谱技术同步快速分析纳米化番茄红素液态饮品多成分

韦友晨[1], 郜珮含[1], 柴静怡[1], 徐颢媛[1], 蔡玉娇[1], 孙奕然[1], 艾克旦·阿布都沙拉木[1], 杨 婷[1], 韩二龙[2], 杨西宁[1*], 李凤灵[1], 夏静静[1*]
(1. 新疆大学药学院, 生命科学与技术学院, 乌鲁木齐 830017; 2. 新疆天盛和生物科技有限公司, 吐鲁番 838000)

摘 要: 目的 利用近红外光谱(near-infrared spectroscopy, NIRS)技术结合化学计量学手段, 对纳米化番茄红素液态饮品中的多种营养成分指标构建快速预测模型。**方法** 采用 NIRS 结合偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)算法, 提出组合预处理策略优化模型参数。针对番茄红素液态原液、纳米化甘露聚糖番茄红素液态饮、纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮 3 类样本, 分别构建番茄红素、可溶性固形物、酸度及含水量等关键指标含量的快速定量分析模型。结合模型均方根误差(root mean square error, RMSE)、预测残差平方和(residual predictive deviation, RPD)及相对误差(relative error ratio, RER)综合评估模型性能。**结果** 经组合预处理优化后, 3 类纳米化番茄红素液态饮品的多指标定量模型均呈现良好预测性能。番茄红素液态原液模型整体最优, 测试集 RMSE 为 0.9279, RPD 为 5.3659, RER 为 18.3682; 纳米化甘露聚糖修饰样品模型测试集 RPD 为 4.7333; 纳米化右旋糖苷修饰样品模型测试集 RPD 为 3.4823。所有模型 RPD 均大于 3.0, 说明模型预测精度高, 可实现番茄红素、可溶性固形物、酸度、含水量多成分同步快速定量。**结论** 综上, 基于 NIRS 结合化学计量学手段可有效检测纳米化番茄红素液态饮品中的多个关键指标, 能满足实际生产中的快速检测需求, 为该类产品的质量控制提供高效技术支持。

关键词: 近红外光谱; 纳米化番茄红素液态饮品; 预处理组合优化; 偏最小二乘回归
中图分类号: TS275 **文献识别码:** A **文章编号:** 2095–0381(2026)15–0133–10

Rapid and simultaneous analysis of multiple components in nanostructured lycopene liquid beverages based on near-infrared spectroscopy

WEI You-Chen[1], GAO Pei-Han[1], CHAI Jing-Yi[1], XU Hao-Yuan[1], CAI Yu-Jiao[1], SUN Yi-Ran[1], AIKEDAN A-Bu-Du-Sha-La-Mu[1], YANG Ting[1], HAN Er-Long[2], YANG Xi-Ning[1*], LI Feng-Ling[1*], XIA Jing-Jing[1*]
(1. *School of Pharmacy*, *College of Life Science and Technology*, *Xinjiang University*, *Urumqi* 830017, *China*; 2. *Xinjiang Tianshenghe Biotechnology Co*., *Ltd*., *Turpan* 838000, *China*)

收稿日期: 2026-03-30
基金项目: 新疆自治区重点研发计划项目(2023B02030-1)
第一作者: 韦友晨(2006—), 男, 主要研究方向为化学计量学。E-mail: sumny1210@sina.com
***通信作者:** 杨西宁(2003—), 女, 硕士, 主要研究方向为化学计量学、药物光谱分析。E-mail: 15594033976@163.com
夏静静(1993—), 女, 博士, 副教授, 主要研究方向为近红外光谱、化学计量学。E-mail: xiajing94@xju.edu.cn

ABSTRACT: Objective To establish rapid prediction models for multiple nutritional component indexes in nanostructured lycopene liquid beverages by near-infrared spectroscopy (NIRS) combined with chemometrics. **Methods** NIRS coupled with partial least squares regression (PLSR) was adopted, and a combined pretreatment optimization strategy was proposed. Rapid quantitative analysis models were constructed separately for key indexes including lycopene, soluble solids, acidity and moisture content in 3 types of samples: lycopene liquid stock solution, nanostructured mannan-modified lycopene liquid beverage and nanostructured dextran-modified lycopene liquid beverage. Model performance was comprehensively evaluated byroot mean square error (RMSE), residual predictive deviation (RPD) and relative error ratio (RER). **Results** After optimized by combined pretreatment, the multi-index quantitative models of the 3 kinds of nanostructured lycopene liquid beverages all showed favorable predictive performance. The model of lycopene liquid stock solution was the best overall, with the test set RMSE of 0.9279, RPD of 5.3659 and RER of 18.3682; the test set RPD of the model for nanostructured mannan-modified samples were 4.7333, respectively; the test set RPD of the model for nanostructured dextran-modified samples were 3.4823, respectively. All models had RPD greater than 3.0, with high prediction accuracy and strong stability, which could realize the simultaneous and rapid quantification of lycopene, soluble solids, acidity and moisture content. **Conclusion** In summary, NIRS combined with chemometrics can effectively detect multiple key indexes in nanostructured lycopene liquid beverages, meet the demand for rapid detection in actual production, and provide efficient technical support for the quality control of such products.

KEY WORDS: near-infrared spectroscopy; nanostructured lycopene liquid beverage; combined pretreatment optimization; partial least squares regression

0　引　言

番茄红素是一类天然高效的脂溶性类胡萝卜素, 亦是公认的优质抗氧化剂。已有大量研究证实其具有卓越的单线态氧清除活性及慢性疾病防控潜能[1], 可高效清除机体活性氧自由基, 素有“植物黄金”的美誉, 广泛富集于番茄、西瓜等常见果蔬中[2]。但受制于其极强的疏水性, 以及对光照、高温、氧化环境的高度敏感性, 番茄红素在食品工业化领域的应用场景与开发深度受到严重制约[3]。为突破上述技术瓶颈, 纳米乳化、微胶囊包埋(如壳聚糖载体介导)、脂质体组装、高压均质等先进载体技术被广泛应用于番茄红素的稳态化改性[4]。这类技术可精准调控番茄红素脂质颗粒粒径至 100~300 nm[5–7], 使其生物利用度提升至常规制剂的 3 倍以上, 有力推动了纳米化番茄红素液态饮品的产业化进程[8–9]。

现阶段, 纳米化番茄红素液态饮品的质量检测仍以传统分析方法为主, 比如: 分光光度法操作简便, 但易受体系内其他类胡萝卜素组分的干扰[10]; 薄层色谱法流程烦琐, 且定量精准度难以满足质控要求[11]; 高效液相色谱法作为番茄红素检测的经典金标准, 分离效能优异, 却需正己烷-丙酮混合萃取、固相萃取净化等复杂前处理步骤, 不仅检测成本高昂, 且难以适配纳米化饮品中番茄红素光谱特性的改变, 方法适用性受限[12–14]。动态光散射法是纳米颗粒粒径表征的常用手段[15], 但检测流程冗长、耗时较长, 无法实现生产全程的实时监控, 难以适配产业化高效质控需求[16]。此外, 现行 GB/T 22249—2008《保健食品中番茄红素的测定》存在前处理方法不适用于微胶囊化样品、标准品稳定性差等缺陷; GB 5009.271—2016《食品安全国家标准 食品中番茄红素的测定》虽优化了提取操作细则, 却仍未解决纳米化体系的检测痛点, 无法实现目标成分的精准定量[17–18]。

近红外光谱(near-infrared spectroscopy, NIRS)技术是一种绿色、高效的无损分析技术, 通过检测有机物分子中 C-H、O-H、N-H 等含氢基团的倍频与合频吸收信号, 间接反演样品的化学组成与物理特性[19]。凭借检测快速、样品无损、前处理极简、可实现多组分同步定量及易于在线集成等核心优势, 该技术在食品、药品质量分析领域已得到广泛应用与推广[20–22]。已有研究表明, NIRS 结合 Savitzky-Golay 卷积平滑法(S-G 平滑)可有效去除光谱噪声, 再联合偏最小二乘回归(partial least squares regression, PLSR)算法构建定量预测模型, 能够实现液态饮品中关键品质指标的快速检测[23–24]; 同时, NIRS 的散射信号与样品颗粒物理属性高度相关, 光谱基线漂移与散射效应亦可间接反映颗粒粒径特征[25–26]。

尽管 NIRS 技术在均相体系、简单粉末样品的成分分析中应用已趋于成熟, 但将其拓展至组分与结构更为复杂的纳米化液态体系时, 尤其是针对番茄红素化学含量同步定量、纳米颗粒物理特性同步表征的快速检测研究, 现有技术体系仍存在诸多不完善之处[27–28]。比如, 纳米化改性易引发光谱信号畸变, 同时饮品中辛烯基琥珀酸淀粉钠等

复合乳化剂、增稠剂等辅料亦会对光谱产生基质干扰，对定量模型的稳定性与预测精度提出了更高要求[29–30]。

基于此，为健全纳米化番茄红素系列饮品的全流程质量控制体系，本研究选取番茄红素液态原液、纳米化甘露聚糖番茄红素液态饮、纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮 3 类典型样品为研究对象，采用 NIRS 技术结合 PLSR 算法，针对番茄红素、水溶性固形物、含水量及酸度多项核心指标构建定量预测模型，并通过光谱预处理组合策略进一步优化模型性能，拟为纳米化番茄红素液态饮品的生产质控提供低成本、高效率的创新分析方法与技术支撑。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

番茄红素液态饮品、纳米化甘露聚糖番茄红素液态饮品、纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮品均由新疆天盛和生物科技有限公司(新疆吐鲁番)提供。

1.2 仪器与设备

NIR-M10-S 台式近红外光谱分析仪(荧飒光学仪器上海有限公司); PHSJF-3 酸度计、SpectraMax iD5 酶标仪(上海仪电科学仪器股份有限公司); SH10A 卤素快速水分测定仪(上海菁华科技仪器有限公司); PePo-1 总糖度折光旋光仪(广州市爱宕科学仪器有限公司)。

1.3 实验方法

(1)近红外光谱采集

NIR-M10-S 台式近红外光谱分析仪，以卤素灯为红外光源，InGaAs 探测器，分束器是石英材质。波数范围为 12000~4000 cm^{-1}，光谱分辨率为 8 cm^{-1}，采集次数 32。将纳米化番茄红素液态样品装入台式光谱仪的样品槽中，以完全遮住光斑，每个样品重复 3 次，取平均光谱作为该样品的光谱数据。

(2)不同浓度番茄红素液态饮品的制备

为建立番茄红素、酸度、水分及水溶性固形物含量的预测模型，在原有番茄红素、纳米化液态饮品的基础上，利用蒸馏水对其分别进行 1/2 倍和 1/4 倍稀释、利用旋蒸对其进行 2 倍和 4 倍的浓缩，获取不同浓度的番茄红素液态饮品、纳米化番茄红素液态饮品的样品。每个样品重复 3 次采集对应化学指标及 NIRS 数据。

(3)理化指标测定

酸度：采用经校准的酸度计进行直接测定。

番茄红素含量：分别于 2024 年 10 月—2025 年 6 月期间收集 3 个批次的番茄红素液态饮品及纳米化番茄红素液态饮品，使用酶标仪于 472 nm 波长下测定其吸光度。将所得吸光度值代入番茄红素标准曲线(Y=126.42X+0.0571, r^2>0.99)，计算不同批次不同浓度下番茄红素含量。所有样品均设 3 个平行复孔。

水分含量：使用卤素快速水分测定仪，经仪器校准后，设定对应测试模式，采用加热法完成测定。

水溶性固形物含量：借助总糖度折光旋光仪，仪器校准后，将待测溶液滴加至棱镜表面，通过观察分界线刻度或读取数显数据获得检测结果。

(4)算法

PLSR 是一种经典的多变量统计分析方法，其核心是通过数据降维处理，有效缓解小样本、高维度变量及光谱噪声干扰问题。该算法在降维过程中可最大化自变量与因变量之间的线性相关性，精准识别并剔除系统噪声，进而提升模型的预测稳定性，同时能够妥善解决光谱数据中普遍存在的多重共线性问题，尤其适用于小样本、高变量维度的建模场景。本研究以经预处理优化后的 NIRS 数据作为自变量，以样品酸度、番茄红素含量、可溶性固形物含量、含水量 4 项关键指标作为因变量，分别构建 PLSR 定量分析模型。

导数算法可有效校正基线漂移、提升光谱特征峰分辨率。尤其二阶导数能够消除线性基线偏移，进一步改善重叠峰的分离效果，强化光谱特征辨识度。本研究采用导数预处理策略，旨在凸显有效特征吸收峰，同时最大限度削弱背景噪声、基线干扰对建模的负面影响。

S-G 平滑是基于滑动窗口执行局部多项式最小二乘拟合，既可实现光谱信号降噪，也可配合完成导数光谱计算。该算法能够在抑制 NIRS 光谱噪声的同时，完整保留特征吸收峰的峰位、峰形与强度信息，最大化保留有效化学信息，进而提升定量模型的分析精度。

标准正态变量变换(standard normal variate, SNV)是针对单条光谱的标准化处理手段，常用于削弱颗粒粒径不均、光散射等物理因素引发的光谱强度波动。本研究通过 SNV 处理，有效缓解纳米化番茄红素液态样品中颗粒不均一造成的光谱干扰，强化光谱数据与番茄红素含量及相关品质指标的线性关联度。

单一光谱预处理技术仅能解决特定类型的干扰问题，而实际采集的 NIRS 通常叠加存在噪声、基线漂移、峰重叠等多重干扰。因此，本研究采用“导数+S-G 平滑+SNV”的组合预处理方案，整合各类算法的校正优势，构建稳健的光谱干扰校正体系，进一步提升番茄红素及多指标定量预测的准确性。研究中对预处理关键参数进行梯度优化：导数处理设置阶数(1、2、3)、滑动窗口(3、5、7)、多项式次数(3、5、7); S-G 平滑设置多项式次数(3、5、7)、平滑窗口(5、7、9、11、13、15、17、19、21)。其中参数组合“3、7、3、3、21”释义为：3 阶导数、7 点求导窗口、求导与平滑均采用 3 次多项式、21 点 S-G 平滑窗口。

(5)数据集划分及模型评价指标

将样本按照 3:1 的比例随机划分为训练集与测试集，训练集用于模型构建与参数优化，测试集用于独立验证最终模型的预测正确性与泛化能力。为综合评估模型的性能，

结合决定系数(R^2)、均方根误差(root mean square error, RMSE)、预测残差平方和(residual predictive deviation, RPD)及相对误差(relative error ratio, RER)指标对模型进行评价。

R^2 用于衡量模型对数据的拟合程度, 取值范围 0 到 1, 越接近 1 说明拟合效果越好。R^2 计算见公式(1)。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i-1}^{n}(y_i - \bar{y}_i)^2} \tag{1}$$

式中: y_i 为真实值, $\hat{y}_i$ 为预测值, $\bar{y}$ 为真实值的均值, n 为样本量。

RMSE 反映模型在交叉验证/预测过程中的误差, 以百分比表示, 数值越小模型预测精度越高。RMSE 计算见公式(2)。

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k}\sum_{t=1}^{n_j}(y_{ij} - \hat{y}_{ij})^2} \tag{2}$$

式中: k 为交叉验证的折数, n_j 为第 j 折的样本量, y_{ij} 为第 j 折第 i 个样本的真实值, $\hat{y}_{ij}$ 为其预测值。

RPD 是预测标准差与均方根误差的比值, 用于评估模型的预测能力, 一般认为 RPD>2 时模型具有较好的预测性能。RPD 计算见公式(3)。

$$\mathrm{RPD} = \frac{\mathrm{SD_y}}{\mathrm{RMSE}} \tag{3}$$

式中: $\mathrm{SD_y}$ 为测试集真实值的标准差, RMSE 为均方根误差。

RER 是数据范围与均方根误差的比值, 用于衡量模型的预测精度, 比值越大精度越高。RER 计算见公式(4)。

$$\mathrm{RED} = \frac{\mathrm{Max_y} - \mathrm{Min_y}}{\mathrm{RMSE}} \tag{4}$$

式中: $\mathrm{Max_y}$ 为真实值的最大值; $\mathrm{Min_y}$ 为真实值的最小值; RMSE 为均方根误差。

1.4　数据处理

预处理及其组合优化代码、PLSR 算法、模型拟合及残差图片等均是采用 Matlab 2023b 软件所计算并绘制。

2　结果与分析

2.1　理化指标分析

将所获得浓缩、稀释与番茄红素原液的样品, 利用上述实验方法测定其水分、酸度、可溶性固形物、番茄红素的含量, 重复测定 3 次, 结果汇总在表 1 中。测定结果以平均值±标准偏差表示, 对比各组数据发现标准差整体较低。其中, 酸度相对波动较大, 变异范围为 1.70%~9.32%, 但绝大多数数据点的标准偏差仍低于 8%的行业标准, 表明测定结果具备良好准确性; 水分含量(0.00%~1.00%)、可溶性固形物含量(0.00%~2.95%)及番茄红素含量(0.01%~0.10%) 3 组指标数据分布集中、稳定性高、波动较小。综合分析表明, 本研究测定数据离散程度小, 测定方法重复性良好。

其中, 水分含量与稀释倍数的相关性最为显著, 所有样品的水分含量均随稀释倍数降低呈现不同程度的上升趋势。例如, 浓缩倍数为 4 倍时, 各样品水分含量约为 85.0%; 当稀释倍数降至 1/4 时, 水分含量上升至 98.9%左右。该规律性变化直观表明, 降低稀释倍数可使水分占比呈规律性升高, 反映出物理稀释可有效调控基质浓度, 从而降低化学降解对测定结果的干扰。此外, 可溶性固形物与番茄红素含量同样与稀释倍数呈显著负相关, 进一步证实样品在稀释过程中未发生异常化学降解, 其含量变化主要源于物理浓度的改变。

番茄红素液态原液、纳米化甘露聚糖番茄红素液态饮、纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮中各理化指标随浓度的变化趋势见表 1。3 组样品的可溶性固形物含量均随稀释倍数的增加呈逐渐降低趋势。所有样品的水分含量均维持在较高水平, 且随稀释倍数的增大呈现小幅上升趋势。针对番茄红素含量, 3 组样品的浓度均与稀释倍数呈负相关关系; 组间比较结果显示, 在相同稀释倍数条件下, 原液浓度显著高于右旋糖苷组与甘露聚糖组。不同稀释倍数下各样品酸度均保持相对稳定, 未出现随稀释倍数变化的明显波动, 亦未观察到与稀释倍数相关的显著性变化。

2.2　近红外谱图分析

参照 NIRS 常用分区标准, 将光谱划分为谱区 I (12500~8500 $\mathrm{cm^{-1}}$)、谱区 II (8500~5500 $\mathrm{cm^{-1}}$)、谱区 III (5500~4000 $\mathrm{cm^{-1}}$), 据此对 3 组样品(原液、纳米化甘露聚糖、纳米化左旋糖苷)的原始 NIRS 开展对比分析, 特征规律如下: 3 组样品的光谱曲线整体均呈现“先降—后升—再降”的波动趋势, 且均存在 3 处明显的特征吸收峰。其中, 谱区 III 内可观测到两个特征吸收峰, 对应官能团分别为 O-H、C-H; 谱区 II 内存在一处特征吸收峰, 对应官能团为 O-H; 而谱区 I 及后续波数区间内, 吸光度整体呈持续下降态势。如图 1(A)(纳米化甘露聚糖)所示, 甘露聚糖组光谱曲线高度集中, 波动幅度最为平稳; 如图 1(B)(纳米化左旋糖苷)、图 1(C)(原液)所示, 右旋糖苷组与原液组的光谱曲线离散度相对偏高, 尤其在谱区 I 之后的区域, 原液组的光谱分层现象更为显著。尽管 3 组样品的光谱在细节上存在可辨识的差异, 但整体曲线变化趋势基本保持一致。

2.3　数据模型结果与分析

2.3.1　番茄红素液态饮品原液

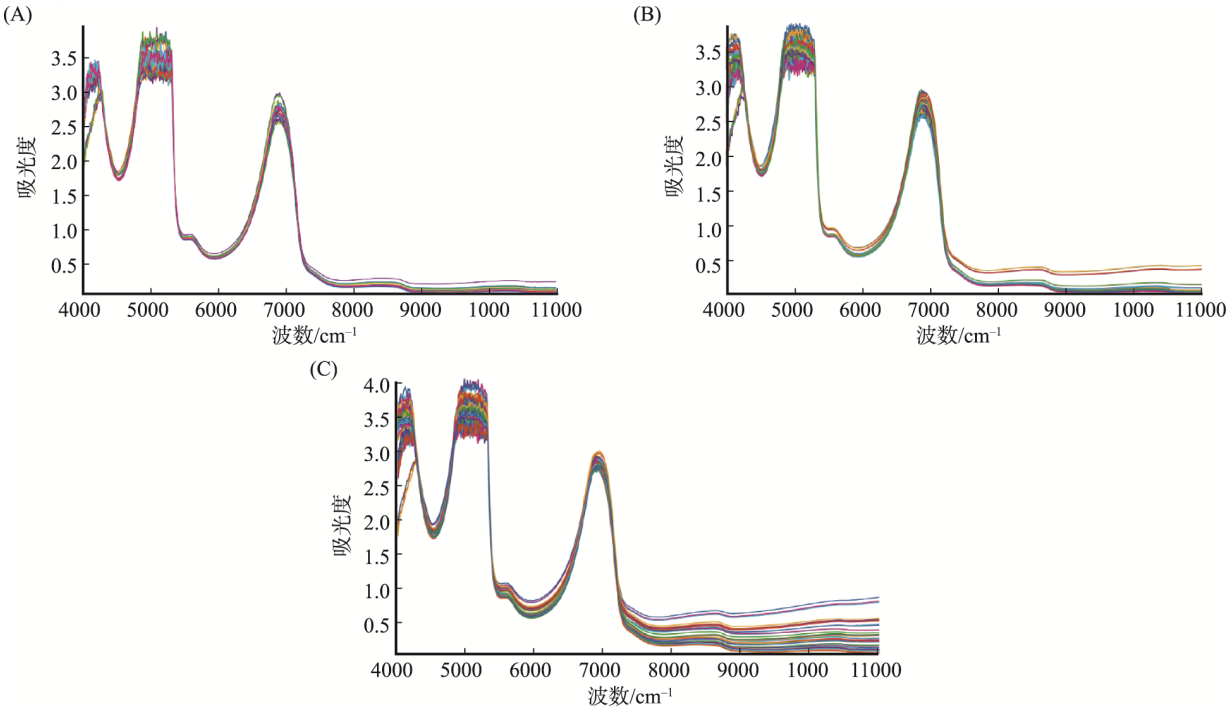
采集番茄红素液态饮原液的 NIRS 数据, 并同步测定其水分、酸度、番茄红素及可溶性固形物含量, 基于 PLSR 算法构建各指标的快速预测模型, 模型性能结果汇总于图 2 与表 2。针对酸度指标[图 2(A)], 经参数优化筛选, 最优光谱预处理参数组合为 2、43、3、3、13, 依次对应 2

表 1 不同形态番茄红素液态饮品的理化指标汇总表(n=3)

Table 1 Summary of several indicators for lycopene liquid beverages with different morphologies (n=3)

倍数	纳米化形态	水分/%	pH	可溶性固形物/%	番茄红素含量/%
4	原液	84.88±0.40	4.13±3.91	36.50±1.27	2.29±0.09
	右旋糖苷	84.95±0.88	4.08±4.39	36.25±2.95	1.39±0.07
	甘露聚糖	85.10±0.99	4.05±7.12	36.00±3.67	1.34±0.02
2	原液	92.40±0.41	4.15±3.91	16.00±0.79	1.46±0.28
	右旋糖苷	92.35±0.39	4.09±5.83	16.13±0.74	0.69±0.02
	甘露聚糖	92.30±0.45	4.06±6.13	16.33±1.03	0.72±0.02
1	原液	95.72±0.15	4.15±5.20	8.10±1.32	0.86±0.10
	右旋糖苷	95.83±0.13	4.11±3.35	9.00±0.00	0.36±0.03
	甘露聚糖	95.867±0.09	4.11±1.70	9.00±0.00	0.35±0.02
1/2	原液	97.86±0.14	4.15±8.33	4.70±0.24	0.42±0.06
	右旋糖苷	97.93±0.29	4.11±5.83	4.63±0.22	0.17±0.01
	甘露聚糖	97.90±0.08	4.10±6.13	4.67±0.24	0.18±0.00
1/4	原液	98.86±0.15	4.17±9.32	2.20±0.24	0.21±0.05
	右旋糖苷	98.90±0.00	4.13±7.30	2.25±0.25	0.08±0.01
	甘露聚糖	98.93±0.09	4.12±7.54	2.33±0.24	0.13±0.05

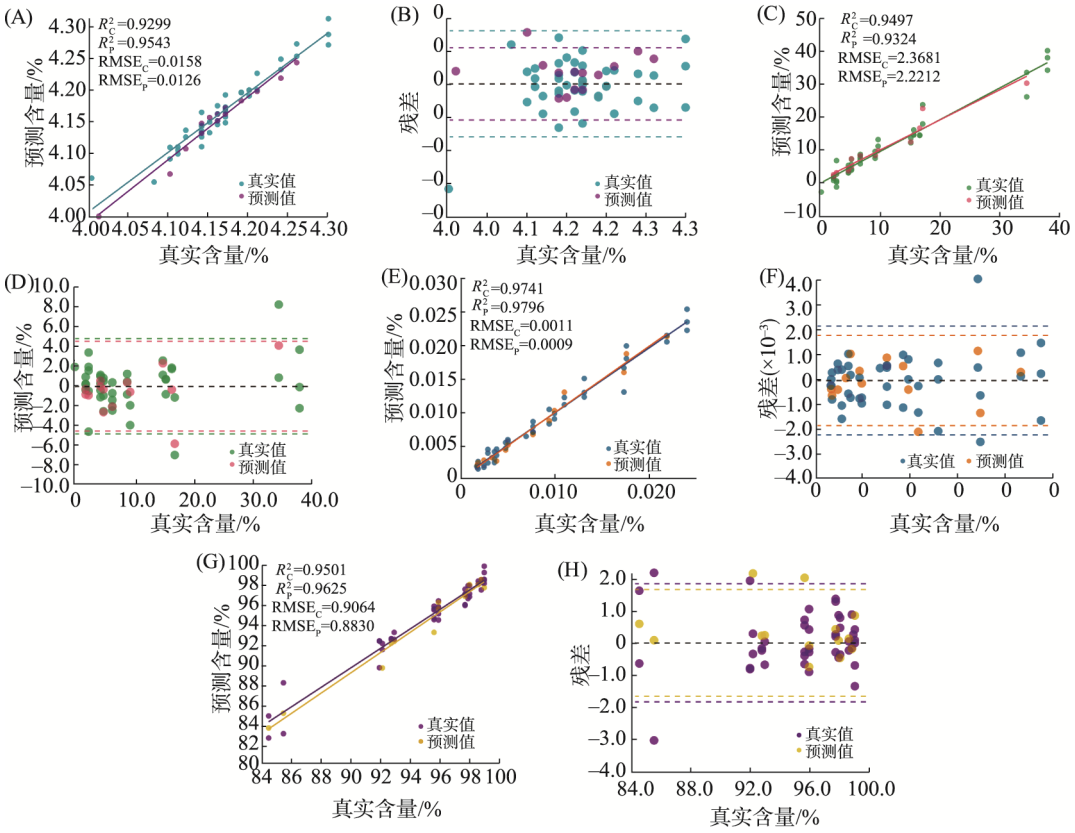
阶导数、43 点求导窗口、求导多项式阶数 3、S-G 多项式阶数 3、平滑窗口 13; 通过十折交叉验证确定最优潜变量数为 10, 该模型训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9299 和 0.9543。由模型预测残差图[图 2(B)], 真实值和模型预测值的偏差控制在 1%以内。针对可溶性固形物指标[图 2(C)~(D)], 最优预处理参数组合为 1、31、5、3、11, 最优潜变量数为 3, 训练集 R^2 为 0.9497, 测试集 R^2 为 0.9324, 真实值和模型预测值的偏差控制在 3%以内; 针对番茄红素的预测模型[图 2(E)~(F)], 最优预处理参数组合为 1、13、3、1、7, 最优潜变量数为 5, 训练集 R^2 为 0.9741, 测试集 R^2 高达 0.9796, 真实值和模型预测值的偏差控制在 5%以内。针对含水量指标[图 2(G)~(H)], 最优预处理参数组合为 1、43、3、3、5, 最优潜变量数为 10, 训练集 R^2 为 0.9501, 测试集 R^2 为 0.9625, 真实值和模型预测值的偏差控制在 2%以内。综合各项模型评价指标可见, 4 项成分指标的预测模型均展现出卓越的拟合与预测能力, 训练集和测试集的 R^2 均在 0.92 以上, 预测偏差控制均在 5%以内, 说明真实值与预测值之间具有优秀的拟合能力。



注: (A)甘露聚糖; (B)右旋糖苷; (C)原液。

图 1 不同形态的液态饮品的 NIRS 图

Fig.1 NIRS of liquid beverages with different morphologies



注: (A)~(B)为酸度的模型拟合图、预测结果残差图; (C)~(D)为可溶性固形物的模型拟合图、预测结果残差图; (E)~(F)为番茄红素的模型拟合图、预测结果残差图; (G)~(H)为水分的模型拟合图、预测结果残差图。下图同。

图 2　番茄红素液态饮原液中各指标的模型结果

Fig.2　Model results of various indicators in lycopene liquid drink stock solution

表 2　不同形态番茄红素液态饮品中各指标的最优模型汇总表

Table 2　Optimal model summary table for various indicators in different forms of lycopene liquid beverages

液态饮形态	成分指标	预处理参数	最优潜变量数	训练集				测试集			
				R^2_C	RMSE$_C$	RPD$_C$	RERc	R^2_P	RMSE$_P$	RPD$_P$	RER$_p$
番茄红素液态饮原液	酸度	2、43、3、3、13	10	0.9299	0.0158	3.8207	18.9636	0.9543	0.0126	4.8569	19.8647
	可溶性固形物	1、31、5、3、11	3	0.9497	2.3681	4.5122	16.0467	0.9324	2.2212	3.9912	14.6317
	番茄红素	1、13、3、1、7	5	0.9741	0.0011	6.2839	20.1323	0.9796	0.0009	7.2589	22.4419
	水分	1、43、3、3、5	10	0.9501	0.9064	4.5289	16.1069	0.9625	0.8830	5.3567	16.5344
纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮	酸度	1、33、3、3、7	9	0.9454	0.0107	4.3422	18.7166	0.8954	0.0142	3.2290	12.6378
	可溶性固形物	1、49、3、3、11	6	0.9689	1.9766	5.7564	18.9719	0.9013	3.8532	3.3238	9.7323
	番茄红素	3、47、3、2、9	10	0.9482	0.0010	4.4585	15.0197	0.9076	0.0013	3.4354	9.6099
	水分	2、29、3、1、5	4	0.9494	1.0428	4.5084	14.1932	0.9298	1.3137	3.9408	11.2663

表 2(续)

液态饮形态	成分指标	预处理参数	最优潜变量数	训练集				测试集			
				R^2_C	$RMSE_C$	RPD_C	RERc	R^2_P	$RMSE_P$	RPD_P	RER_p
纳米化甘露聚糖番茄红素液态饮	酸度	1、51、3、3、5	1	0.8224	0.0214	2.4199	10.2944	0.9201	0.0167	3.7529	12.5618
	可溶性固形物	3、45、3、2、7	10	0.9466	2.8619	4.4132	13.4525	0.9363	3.4348	4.2039	11.2087
	番茄红素	2、33、3、2、9	4	0.9538	0.0010	4.7460	13.9178	0.9618	0.0009	5.4252	13.8842
	水分	1、33、3、1、5	7	0.9471	1.1597	4.4351	12.9347	0.9635	1.0481	5.5510	14.3111

2.3.2 纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮品

纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮品体系中, 酸度、可溶性固形物、番茄红素、水分的模型结果汇总在图 3 和表 2 中。对于酸度[图 3(A)~(B)], 最优预处理参数组合为 1、33、3、3、7, 分别对应为 1 阶导数、33 点求导窗口、求导多项式阶数 3、S-G 多项式阶数 3、平滑窗口 7; 经 10 折交叉验证最优潜变量数为 9。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9454 和 0.8954, 模型预测残差控制在 1%以内。对于可溶性固形物[图 3(C)~(D)], 最优预处理参数组合为 1、49、3、3、11, 最优潜变量数为 6。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9689 和 0.9013, 模型预测残差控制在 8%以内。对于番茄红素含量[图 3(E)~(F)], 最优预处理参数组合为 3、47、3、2、9, 最优潜变量数为 10。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9482 和 0.9076, 模型预测残差控制在 3%以内。对于水分[图 3(G)~(H)], 最优预处理参数组合为 2、29、3、1、5, 最优潜变量数为 4。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9494 和 0.9298, 模型预测残差控制在 3%以内。综合各项模型评价指标可见, 4 项成分指标的预测模型均展现出卓越的拟合与预测能力, 训练集和测试集的 R^2 均在 0.89 以上, 预测偏差控制在 8%以内, 说明真实值与预测值之间具有良好的拟合能力。

2.3.3 纳米化甘露糖苷番茄红素液态饮品

纳米化甘露糖苷番茄红素液态饮品体系中, 酸度、可溶性固形物、番茄红素、水分的模型结果汇总在图 4 和表 2 中。对于酸度[图 4(A)~(B)], 最优预处理参数组合为 1、51、3、3、5, 分别对应为 1 阶导数、51 点求导窗口、求导多项式阶数 3、S-G 多项式阶数 3、平滑窗口 5; 经 10 折交叉验证最优潜变量数为 1。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.8224 和 0.9201, 模型预测残差控制在 1%以内。对于可溶性固形物[图 4(C)~(D)], 最优预处理参数组合为 3、45、3、2、7, 最优潜变量数为 10。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9466 和 0.9363, 模型预测残差控制在 8%以内。对于番茄红素含量[图 4(E)~(F)], 最优预处理参数组合为 2、33、3、2、9, 最优潜变量数为 4。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9538 和 0.9618, 模型预测残差控制在 2%以内。对于水分[图 4(G)~(H)], 最优预处理参数组合为 1、33、3、1、5, 最优潜变量数为 7。训练集和测试集的 R^2 分别为 0.9471 和 0.9635, 模型预测残差控制在 3%以内。综合各项模型评价指标可见, 4 项成分指标的预测模型均展现出卓越的拟合与预测能力, 训练集和测试集的 R^2 均在 0.82 以上, 预测偏差控制在 8%以内, 说明真实值与预测值之间具有良好的拟合能力。

2.3.4 模型性能整体评估

基于 NIRS 结合化学计量学构建了 3 种番茄红素液态饮定量模型, 以 RPD 与 RER 为指标评价其应用性能。结果显示, 番茄红素液态饮原液模型整体性能最优, 各指标测试集 RPD 均大于 3.0, 其中测试集中番茄红素指标 RPD 达 7.2589、RER 达 22.4419, 可满足高精度定量分析要求; 纳米化甘露聚糖番茄红素液态饮模型性能次之, 番茄红素(RPD=5.4252)与水分(RPD=5.5510)指标精度优秀, 仅酸度指标应用价值有限(RPD_C=2.4199), 表明甘露聚糖作为纳米化载体对大部分关键组分的光谱响应干扰较小, 仍能保留较好的定量建模能力; 纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮模型泛化能力较弱, 多数指标测试集 RPD 为 3.0~4.0 且部分 RER<10, 仅适用于初步质量控制, 无法满足高精度定量需求, 说明右旋糖苷在纳米化过程中可能引入了更强的光谱背景干扰或与番茄红素等组分发生交互作用, 降低了模型对目标成分的敏感性和预测稳定性。

总体而言, 纳米化载体种类显著影响 NIRS 定量模型的预测性能, 甘露聚糖优于右旋糖苷, 而原液模型表现最佳。推测可能是由于纳米化后的饮品因其颗粒粒径降至纳米级, 会产生更强、更复杂的散射效应, 导致光谱基线漂移、非线性散射增强[29-30]。这种散射变化往往远大于成分吸收信号的变化, 会严重干扰模型对目标成分的定量信息提取, 导致其模型性能相对于原液欠佳。综上, 本研究构建的组合预处理-PLSR 定量模型可有效抵消纳米载体引发的光谱干扰问题, 对 3 类番茄红素液态饮品的多品质指标均具备良好的同步预测能力, 模型拟合度高、误差可控、稳定性良好, 能够适配不同基质番茄红素饮品的快速定量检测需求, 可为该类纳米功能饮品的快速质量筛查与精准质控提供可靠的技术支撑。

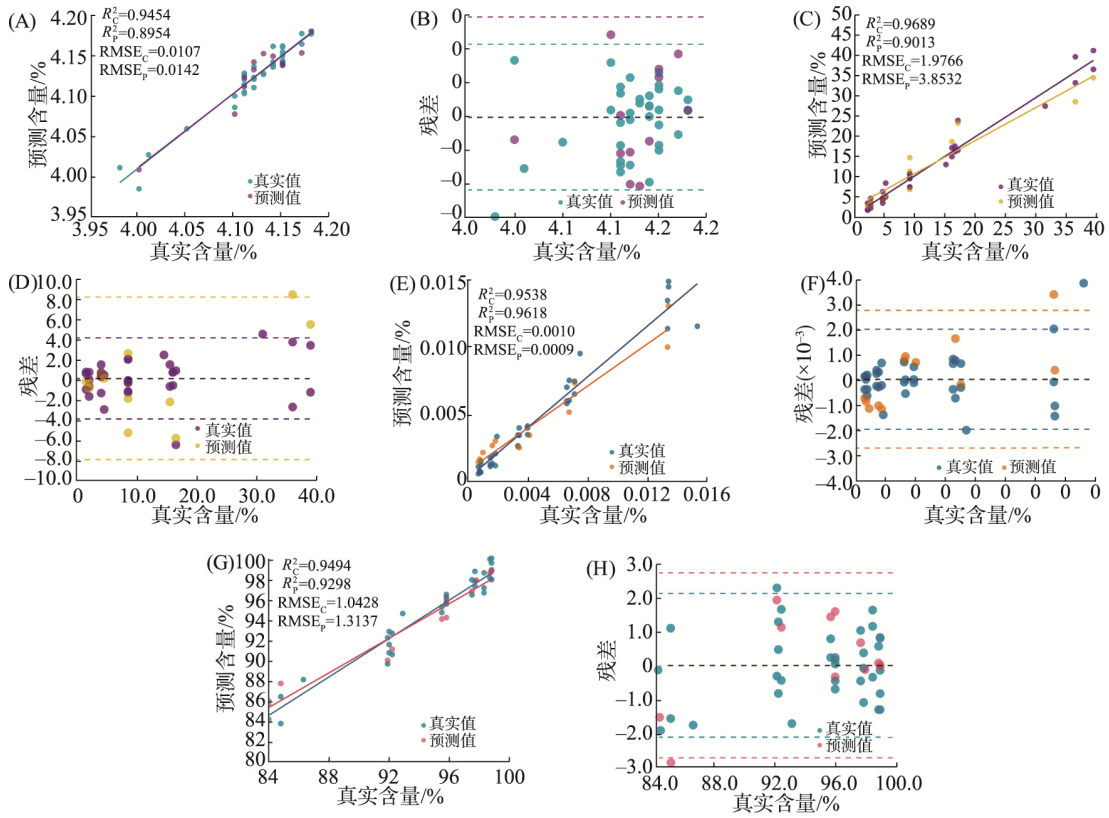


图 3　纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮品中各指标的模型结果

Fig.3　Model results of various indicators in nanostructured dextran-lycopene liquid drink

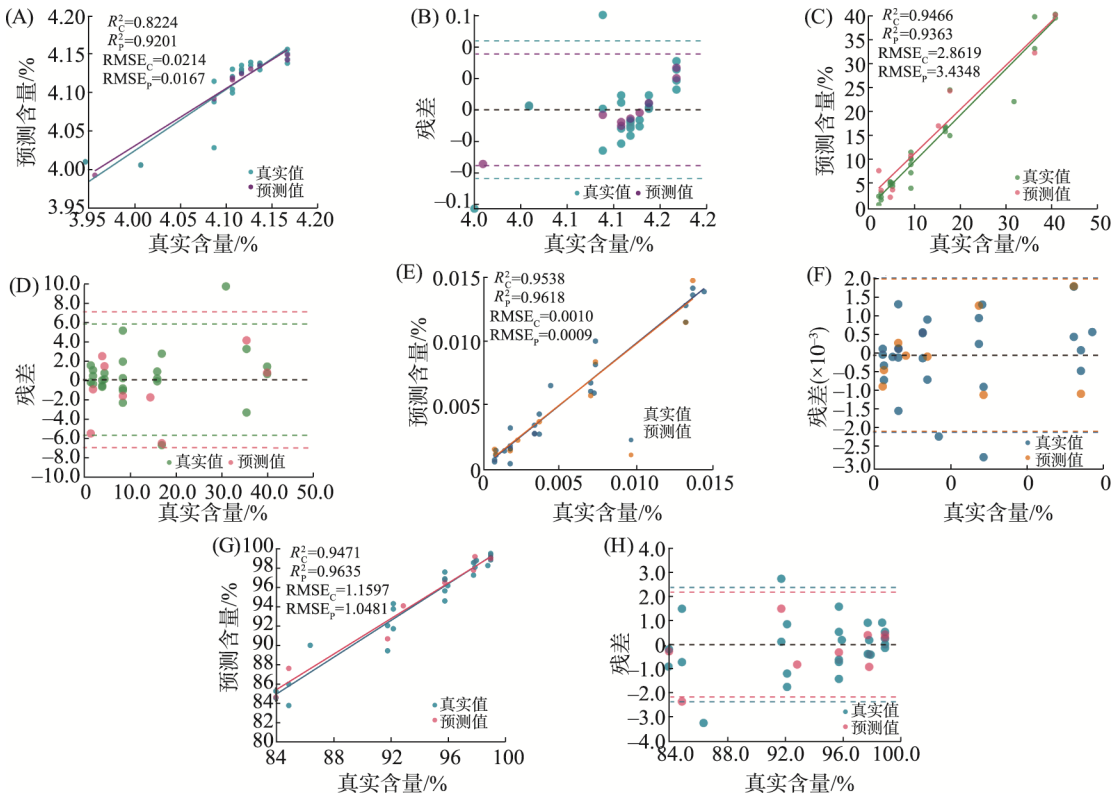


图 4　纳米化甘露糖苷番茄红素液态饮品中各指标的模型结果

Fig.4　Model results of various indicators in nanostructured mannosidic lycopene liquid drink

3 讨论与结论

本研究采用 NIRS 结合 PLSR, 通过导数+S-G 平滑+SNV 组合预处理优化, 针对番茄红素液态原液、纳米化甘露聚糖番茄红素液态饮、纳米化右旋糖苷番茄红素液态饮 3 类样品, 建立番茄红素、可溶性固形物、酸度、含水量多指标同步快速定量模型。结果显示, 3 类样品各指标模型测试集 R^2 均大于 0.89, RPD 均大于 2.4, 整体具备良好预测能力。其中番茄红素液态原液模型整体最优, 测试集 RMSE 为 0.9279, RPD 为 5.3659, RER 为 18.3682; 纳米化甘露聚糖修饰样品模型测试集 RPD 为 4.7333; 纳米化右旋糖苷修饰样品模型测试集 RPD 为 3.4823，可实现高精度定量; 纳米化甘露聚糖组模型性能优于右旋糖苷组, 表明纳米载体类型与基质复杂度直接影响建模精度, 基质越简单, 模型稳定性与预测效果越好。

与高效液相色谱、分光光度法等传统方法相比, 本方法无需复杂前处理、检测速度快、可多组分同步测定, 有效解决了现有技术流程烦琐, 难以在线应用的问题。相较于单一光谱预处理, 组合预处理可同步抑制噪声, 削弱光散射与基质干扰, 显著提升复杂纳米液态体系的建模效果, 拓展了 NIRS 在功能食品质控领域的应用场景。但本研究仍存在诸多局限, 比如样本仅包含稀释与浓缩梯度, 模型的长期适用性与现场抗干扰能力有待验证。后续可扩大样本覆盖范围, 拓展检测指标, 构建覆盖全理化特性的快速检测模型, 以充分满足工业化生产在线质控需求, 为该类产品质量控制提供高效、绿色、低成本的技术支撑。

参考文献

[1] 马永强, 隋佳琦, 黎晨晨, 等. 番茄红素光异构化及热稳定性研究[J]. 食品安全质量检测学报, 2024, 15(2): 35–43.
Ma Yongqiang, Sui Jiaqi, Li Chenchen, et al. Study on photoisomerization and thermal stability of lycopene [J]. Journal of Food Safety & Quality, 2024, 15(2): 35–43.

[2] Fahey J W, Kensler T W. Role of dietary supplements/nutraceuticals in chemoprevention through induction of cytoprotective enzymes [J]. Chemical Research in Toxicology, 2007, 20(4): 572–576.

[3] 孙世东, 李鹏冲, 孟凯丽, 等. 番茄红素的生理功能及其异构化研究进展[J]. 江苏调味副食品, 2025(1): 1–8.
Sun Shidong, Li Pengchong, Meng Kaili, et al. Physiological function and isomerization of lycopene [J]. Jiangsu Condiment and Subsidiary Food, 2025(1): 1–8.

[4] 刘晓琳, 陈雨, 潘琳, 等. 番茄中番茄红素提取及微乳液制备[J]. 广州化工, 2025, 53(8): 80–84.
Liu Xiaolin, Chen Yu, Pan Lin, et al. Lycopene extraction from tomatoes and microemulsion formulation [J]. Guangzhou Chemical Industry, 2025, 53(8): 80–84.

[5] Zhang Chuanxiang, Li Xiaolong, Liu Younian, et al. Utilization of microcapsule technology in foods [J]. Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 2015, 15(12): 9330–9340.

[6] Heath J R. Nanotechnologies for biomedical science and translational medicine [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2015, 112(47): 14436–14443.

[7] Godelmann R, Kost C, Patz C D, et al. Quantitation of compounds in wine using 1H NMR spectroscopy: description of the method and collaborative study [J]. Journal of AOAC International, 2016, 99(5): 1295–1304.

[8] Zhou Zhengming, Zhang Qile, Li Lei, et al. Amylose content modulates lycopene isomerization and anti-oxidative activity of starch-lycopene complexes during small intestinal digestion [J]. Food Chemistry, 2025, 495: 146501.

[9] Carvalho G C, Sábio R M, Chorilli M. An overview of properties and analytical methods for lycopene in organic nanocarriers [J]. Critical Reviews in Analytical Chemistry, 2021, 51(8): 1-13.

[10] Zorzi M, Senore C, Da Re F, et al. Quality of colonoscopy in an organised colorectal cancer screening programme with immunochemical faecal occult blood test: the EQuIPE study (Evaluating Quality Indicators of the Performance of Endoscopy) [J]. Gut, 2015, 64(9): 1389–1396.

[11] Bicanic D, Swarts J, Luterotti S, et al. Optothermistor as a breakthrough in the quantification of lycopene content of thermally processed tomato-based foods: verification versus absorption spectrophotometry and high-performance liquid chromatography [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2005, 53(9): 3295–3299.

[12] 马雪红, 刘婷, 李传天, 等. HPLC 法测定番茄红素胶束中番茄红素 Z/E 异构体含量[J]. 新疆农业科学, 2022, 59(9): 2209-2216.
Ma Xuehong, Liu Ting, Li Chuantian, et al. Determination of Z/E isomers of lycopene in lycopene micelles by HPLC [J]. Xinjiang Agricultural Sciences, 2022, 59(9): 2209-2216.

[13] Carvalho G C, Marena G D, Nascimento A L C S, et al. Physicochemical characterization of a lycopene-loaded mesoporous silica nanoparticle formulation [J]. Nano Select, 2024, 5: 2300131.

[14] 刘泽奇, 仪显亨, 蔡天意, 等. 纳米颗粒粒径、形貌及大体积分数颗粒粒径测量[J]. 中国粉体技术, 2025, 31(1): 118–129.
Liu Zeqi, Yi Xianheng, Cai Tianyi, et al. Measurement of nanoparticle size, morphology and large volume fraction particle size [J]. China Powder Science and Technology, 2025, 31(1): 118–129.

[15] 孙葭北, 万方劼, 吴昀, 等. 纳米药物粒径测定方法的研究进展[J]. 中国药事, 2025, 39(12): 1434–1443.
Sun Jiabei, Wan Fangjie, Wu Yun, et al. Research progress on particle size determination methods for nanomedicines [J]. Chinese Pharmaceutical Affairs, 2025, 39(12): 1434–1443.

[16] He Hongju, Sun Dawen. Microbial evaluation of raw and processed food products by visible/infrared, Raman and fluorescence spectroscopy [J]. Trends in Food Science & Technology, 2015, 46(2): 199–210.

[17] Davies A M C, Grant A. Review: near infra-red analysis of food [J]. International Journal of Food Science & Technology, 1987, 22(3): 191–207.

[18] 秦华俊. 近红外光谱分析技术在食品、饲料中的应用研究[D]. 南昌: 南昌大学, 2007: 10.
Qin Huajun. Research on the application of near-infrared spectroscopy analysis technology in food and feed [D]. Nanchang: Nanchang University, 2007: 10.

[19] 何思颖, 孙安, 赵蒙, 等. 基于近红外光谱技术的酒精度智能检测[J]. 传感器与微系统, 2025, 44(6): 47–50.
He Siying, Sun An, Zhao Meng, et al. Intelligent detection of alcohol content based on near IR spectroscopy [J]. Transducer and Microsystem Technologies, 2025, 44(6): 47–50.

[20] Fodor M, Matkovits A, Benes E L, et al. The role of near-infrared spectroscopy in food quality assurance: a review of the past two decades [J]. Foods, 2024, 13(21): 3501.

[21] Mia N, Hashem M A, Halim M A, et al. Application of NIR spectroscopy with machine learning in the food industry: a comprehensive review [J]. Food Physics, 2026, 3: 100089.

[22] Tomar M, Bhardwaj R, Singh P, et al. From grain to Gain: bridging conventional methods with chemometric innovations in cereal quality analysis through near-infrared spectroscopy (NIRS) [J]. Food Control, 2025, 178: 111482.

[23] Prieto N, Pawluczyk O, Dugan M E R, et al. A review of the principles and applications of near-infrared spectroscopy to characterize meat, fat, and meat products [J]. Applied Spectroscopy, 2017, 71(7): 1403–1426.

[24] Luo Jianwen, Ying Kui, He Ping, et al. Properties of savitzky: golay digital differentiators [J]. Digital Signal Processing, 2005, 15(2): 122–136.

[25] Wang Lu, Sun Dawen, Pu Hongbin, et al. Quality analysis, classification, and authentication of liquid foods by near-infrared spectroscopy: A review of recent research developments [J]. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 2016. https://doi.org/10.1080/10408398.2015.1115954.

[26] Zheleznov Y A, Khomich V Y, Platov Y V, et al. Mobile spectrophotometric complex [J]. Atmospheric and Oceanic Optics, 2011, 24(5): 508–513.

[27] Rinnan Å, Bruun S, Lindedam J, et al. Predicting the ethanol potential of wheat straw using near-infrared spectroscopy and chemometrics: the challenge of inherently intercorrelated response functions [J]. Analytica Chimica Acta, 2017, 962: 15–23.

[28] Salguero-Chaparro L, Palagos B, Peña-Rodríguez F, et al. Calibration transfer of intact olive NIR spectra between a pre-dispersive instrument and a portable spectrometer [J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2013, 96: 202–208.

[29] Lim X X, Zulkurnain M, Yussof N S, et al. Effects of dry heating, acetylation and acid pretreatment on octenyl succinic anhydride (OSA)-modified potato starch [J]. e-Polymers, 2023. DOI:10.1515/epoly-2022-8090.

[30] Ding Fangchen, Zuo Changzhou, GARCÍA-MARTÍN J F, et al. Non-invasive prediction of mango quality using near-infrared spectroscopy: Assessment on spectral interferences of different packaging materials[J]. Journal of Food Engineering,2023.

(责任编辑: 蔡世佳 韩晓红)