王江涛, 桂宇彤, 刘凯昕, 等. 甘蔗原生态糖功效成分解析及近红外综合评价方法 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(18): 295−305. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025070036

WANG Jiangtao, GUI Yutong, LIU Kaixin, et al. Research on the Functional Components of Non-centrifugal Cane Sugar of Sugarcane and Comprehensive Evaluation of Its Efficacy Using Near-infrared Spectroscopy[J]. Science and Technology of Food Industry, 2026, 47(18): 295−305. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025070036

· 现代分析与智能检测 ·

甘蔗原生态糖功效成分解析及近红外综合评价方法

王江涛[1], 桂宇彤[1], 刘凯昕[1], 栾国庆[1], 侯小涛[2], 侯媛媛[1,*], 白　钢[1,2]

（1.南开大学药学院, 药物化学生物学全国重点实验室, 天津 300353;
2.广西中医药大学, 广西中药药效研究重点实验室, 广西南宁 530200）

摘　要: 目的：通过化学物质组学策略对甘蔗原生态糖（non-centrifugal cane sugar of sugarcane，NCS）的功效成分进行系统解析，建立一种适用于原生态糖等级综合评价的近红外快速检测技术。方法：通过超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱（Ultra Performance Liquid Chromatography/Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry，UPLC/Q-TOF-MS）技术分析鉴定原生态红糖中的潜在功效成分，结合紫外可见分光光度法对其中抗氧化功能的总酚酸含量进行测定。同时依据行业标准 QB/T 2343.2-2013 和国家标准 GB 5009.3-2016，对蔗糖、还原糖、总糖及干燥失重等关键指标进行定量分析，并引入综合评价指数（F_q）的概念，基于各检测指标相对大样本均值的偏离度优化分配各指标的权重系数，实现对甘蔗原生态糖品质的综合评估。结果：从甘蔗原生态糖中共鉴定出 21 种主要化学成分，其中 16 种为酚酸类化合物，主要包括柠檬酸、香草酸、丁香酸、p-羟基苯甲酸、绿原酸等。针对 76 批样品的关键指标进行检测，结合对应的近红外光谱构建了关键指标含量与光谱数据之间的拟合模型，蔗糖、还原糖、总酚酸、干燥失重等 4 项指标预测模型的 R^2_{cal} 分别为 0.867、0.900、0.938、0.981，均大于 0.85；其 RMSECV 分别为 1.06、1.01、0.0245、0.342，预测结果显示模型拟合良好。依据 F_q 值的正态分布情况对样品进行品质划分，实验验证结果表明高品质样品抗氧化能力优于低品质样品，证明了等级评价体系的合理性。结论：该方法在现行的监管体系基础上引入功效成分检测，结合近红外快检技术实现了品质等级的综合评价，为甘蔗原生态糖的快速功效评价提供了参考的方法。

关键词: 甘蔗原生态糖, 近红外光谱分析技术, 综合评价, 等级鉴定, 功效因子

中图分类号: TS241　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1002−0306(2026)18−0295−11

DOI: 10.13386/j.issn1002-0306.2025070036

本文网刊:

Research on the Functional Components of Non-centrifugal Cane Sugar of Sugarcane and Comprehensive Evaluation of Its Efficacy Using Near-infrared Spectroscopy

WANG Jiangtao[1], GUI Yutong[1], LIU Kaixin[1], LUAN Guoqing[1], HOU Xiaotao[2], HOU Yuanyuan[1,*], BAI Gang[1,2]

（1.State Key Laboratory of Medicinal Chemical Biology, School of Pharmacy, Nankai University, Tianjin 300353, China;
2.Guangxi Key Laboratory of Efficacy Study on Chinese Materia Medica, Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530200, China）

Abstract: Objective: The study aimed to systematically profile the functional components of non-centrifugal cane sugar of sugarcane (NCS) using a chemomics-based strategy, and to establish a near-infrared (NIR) rapid detection technique for comprehensive quality grading of NCS. Methods: The potential functional components in NCS were identified and ana-

收稿日期: 2025−07−04

基金项目: 广西创新驱动发展重大专项（桂科 AA22117003-4）;“带土移植”人才引育计划项目（桂科 AA23026008）。

作者简介: 王江涛（2000−）, 男, 硕士研究生, 研究方向: 中药质量控制, E-mail: 18332887497@163.com。

*** 通信作者:** 侯媛媛（1977−）, 女, 博士, 教授, 研究方向: 中药系统生物学与化学生物学, E-mail: houyy@nankai.edu.cn。

lyzed by ultra-performance liquid chromatography coupled with quadrupole time-of-flight mass spectrometry (UPLC/Q-TOF-MS). The total phenolic acid content was determined by ultraviolet-visible spectrophotometry. Key quality indicators, including sucrose, reducing sugar, total sugar, and loss on drying, were quantified according to industry and national standards. A comprehensive evaluation index (F_q) was introduced, in which weight coefficients for each indicator were optimally assigned based on their deviation from the mean of a large sample set, enabling integrated quality assessment of NCS. Results: A total of 21 major chemical components were identified in NCS, among which 16 were phenolic acids, primarily including citric acid, vanillic acid, syringic acid, p-hydroxybenzoic acid, and chlorogenic acid. Key indicators of 76 batches of samples were determined, and calibration models between these indicators and corresponding near-infrared spectral data were established. The determination coefficients (R^2_{cal}) of the prediction models for sucrose, reducing sugars, total phenolic acids, and loss on drying were 0.867, 0.900, 0.938, and 0.981, respectively, all exceeding 0.85. The root mean square errors of cross-validation (RMSECV) were 1.06, 1.01, 0.0245, and 0.342, respectively, indicating satisfactory model fitting. Quality classification of the samples was performed based on the normal distribution of the F_q value. Experimental validation demonstrated that high-quality samples exhibited superior antioxidant activity compared to low-quality samples, confirming the rationality of the established quality evaluation system. Conclusion: The proposed method incorporates functional component analysis into the current regulatory framework and achieves comprehensive quality evaluation through NIR rapid detection, providing a practical approach for rapid efficacy assessment of NCS.

Key words: non-centrifugal cane sugar of sugarcane; near-infrared spectroscopy; comprehensive evaluation; grade assessment; functional ingredients

甘蔗原生态糖是通过甘蔗破碎、提汁、澄清等物理处理后，未经化学助剂添加，经浓缩、结晶等工艺制得的非分蜜红糖（non-centrifugal sugar, NCS）。由于未经历离心分蜜工序，相较于白糖，较为完整地保留了甘蔗中的营养成分[1−2]。中医理论认为，红糖性温、味甘，归脾经，具有益气养血、活血化瘀、健脾暖胃及温宫养颜的功效[3−4]。甘蔗原生态糖的成分除了包含蔗糖和还原糖外，还完整保留了甘蔗中的酚酸类化合物、黄酮类物质、矿物质、维生素、蛋白质、微量元素、氨基酸等多种活性成分[5−7]。甘蔗汁中保留的功效成分具有促进生长、细胞保护、抗氧化和抗肿瘤等多种活性，尤其是酚酸类和黄酮类成分在抗氧化方面作用显著[8]。因此，甘蔗原生态糖除了营养功效外，还具有一定药用价值[9−11]。随着消费者对天然健康食品的需求增加，甘蔗原生态糖的市场需求也在增长。原生态糖采用较为原始的生产方法，且不同厂家采用的生产工艺并不统一，存在如产品澄清不彻底、糖汁纯度控制不准确、生产流程机械化不完善等许多问题，从而导致产品品质存在很大差异[12]。另外，王智能等[1]、杨婷等[13]、赵春杰等[14] 研究表明，以不同品种的甘蔗作为原料对红糖品质及抗氧化活性也具有显著影响。因此，原生态红糖需要更加全面、系统的评价方法来保证其品质，建立一种简便、快速、综合的质量评价方法来控制原生态糖品质具有重要意义。

目前，甘蔗原生态糖的指标成分定量分析主要依赖高效液相色谱法、气相色谱法[15]、红外光谱法[16−17]、旋光法和比色法[18] 等。然而，这些方法普遍存在成本高、效率低、前处理复杂等问题，且检测指标单一，难以全面把控原生态红糖的质量。近红外光谱技术（Near-Infrared Spectroscopy, NIRS）因其测定速度快、样品无损、操作便捷、成本低廉且环保无污染等优势[19−20]，作为一种能够实现全过程自动化检测的集成分析技术，近年来在制药、农业、食品以及化工等诸多领域得到了广泛应用[21−22]。本研究利用 UPLC/Q-TOF-MS 技术对甘蔗原生态糖中的潜在药理活性化学成分进行系统鉴定，并建立相应的分析方法。同时，通过整合蔗糖、还原糖及干燥失重等关键指标的行业标准检测结果，构建基于综合评价指数（F_q）的整体评价体系，并进一步结合近红外快检技术希望实现对原生态糖品质的快速综合评估，为甘蔗原生态糖品质的监管提供新的思路。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

红糖产品 51 批（S1~S9、S11~S52） 市售；原生态红糖产品 9 批（S10, S53~S60）、安徽 3 批（S61~S63）、广东产地 1 批（S64）、云南 6 批（S68~S73）、海南 6 批（S65~S67, S74~S76） 广西凤糖有限公司，产品信息见表 1；1,1-二苯基-2-三硝基苯肼（DPPH）（货号 D807297，纯度≥99.0%）、2,2'-联氮-双-3-乙基苯并噻唑啉-6-磺酸（ABTS）（货号 D800764，纯度≥98.0%） 上海麦克林生化科技股份有限公司；甲醇、乙腈 色谱级，天津康科德科技有限公司；其他均采用分析纯试剂。

TENSOR 37 型近红外光谱仪 德国 Bruker Corporation 公司；Master10D 型傅里叶变换近红外光谱仪 中国荧飒光学公司；Q-TOFG2-XS 液质联用仪 美国 Waters Corporation 公司；XS105DU 微量天平 美国 Mettler-Toledo International Inc.公司；Spark 多功能酶标仪 瑞士 Tecan Group Ltd.公司；Mikro 220R 台式高速冷冻离心机 德国 Hettich GmbH & Co. KG 公司。

表 1　红糖样品信息

Table 1　Brown sugar sample information

样品编号	产地	生产公司	样品编号	产地	生产公司
S1	四川	成都月月红实业有限公司	S39	天津	天津市维利可食品有限公司
S2	天津	天津茂佳食品有限公司	S40	天津	天津茂佳食品有限公司
S3	云南	云南原品阁食品有限公司	S41	天津	天津市维利可食品有限公司
S4	天津	天津什福来食品科技有限公司	S42	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S5	上海	上海谷欣食品有限公司	S43	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S6	河北	河北古松农副产品有限公司	S44	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S7	天津	天津市维利可食品有限公司	S45	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S8	江苏	南京甘汁园股份有限公司	S46	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S9	天津	天津市聚荣华商贸有限公司	S47	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S10	广西	广西凤糖生化股份有限公司	S48	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S11	上海	上海谷欣食品有限公司	S49	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S12	江苏	南京甘汁园股份有限公司	S50	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S13	浙江	嘉兴市诚浩佳浓食品有限公司	S51	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S14	云南	云南王锦记大健康发展有限公司	S52	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂
S15	河北	河北古松农副产品有限公司	S53	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S16	广东	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S54	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S17	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S55	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S18	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S56	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S19	安徽	安徽华耀堂健康产业有限公司	S57	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S20	安徽	安徽华耀堂健康产业有限公司	S58	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S21	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S59	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S22	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S60	广西	广西凤糖生化股份有限公司
S23	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S61	安徽	安徽祈善堂生物科技有限公司
S24	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S62	安徽	安徽祈善堂生物科技有限公司
S25	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S63	安徽	安徽祈善堂生物科技有限公司
S26	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S64	广东	广东省丰收糖业发展有限公司
S27	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S65	海南	益民富硒古法红糖有限公司
S28	广东	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S66	海南	益民富硒古法红糖有限公司
S29	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S67	海南	益民富硒古法红糖有限公司
S30	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S68	云南	云南百川食品有限公司
S31	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S69	云南	云南百川食品有限公司
S32	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S70	云南	云南百川食品有限公司
S33	广东	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S71	云南	景洪工业园区老彭红糖加工坊
S34	广东	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S72	云南	景洪工业园区老彭红糖加工坊
S35	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S73	云南	景洪工业园区老彭红糖加工坊
S36	广东	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S74	海南	海南儋州长坡南华糖业有限公司
S37	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S75	海南	海南儋州长坡南华糖业有限公司
S38	广西	潮州市潮安区绿雅红糖厂	S76	海南	海南儋州长坡南华糖业有限公司

1.2　实验方法

1.2.1　原生态糖非糖成分的 UPLC/Q-TOF-MS 定性分析

1.2.1.1　样品的制备　取原生态糖样品约 1 g, 置具塞锥形瓶中, 加水 20 mL 溶解, 离心(转速 10000 r/min, 离心半径 10 cm)10 min, 取上清即得。

1.2.1.2　色谱条件　Q-TOFG2-XS 液质联用仪, ACQUITY UPLC HSS(2.1×100 nm, 1.7 μm)色谱柱, 柱温 30 ℃, 流动相 A 为 0.1% 甲酸-水, 流动相 B 为乙腈, 梯度洗脱(0~3 min, 0% B; 3~15 min, 0%~10% B; 15~25 min, 10%~80% B; 25~26 min, 80%~0% B; 26~30 min, 0% B), 流速 0.3 mL/min, 进样量 2 μL。

1.2.1.3　质谱条件　采用负离子扫描模式, 扫描范围 m/z 100~1500, 离子源为电喷雾离子源(ESI), 离子源温度 100 ℃, 电压为 3.0 kV; 气帘气为 50 L/h, 脱溶剂气温度 250 ℃, 脱溶剂气流速 600 L/h, 雾化器压力为 45 psig, 源偏移电压为 80 V, 锥孔电压为 30 V, 毛细管电压为 2.5 kV, 补偿电压为 80 V。

1.2.1.4　质谱鉴定　对所获得的质谱数据根据 GNPS 数据库匹配, 结合化合物精确分子量、碎片离子峰、色谱保留时间等进行解析, 鉴定原生态糖的非糖成分。

1.2.2　原生态糖中酚酸类成分的确证　为了进一步确证原生态糖中酚酸类成分, 参照潘振辉等[23] 方法,

测定原生态糖与酚酸对照品(柠檬酸、香草酸、丁香酸、p-羟基苯甲酸、绿原酸)谱图信息。色谱条件:LC-20AT 型高效液相色谱仪,色谱柱为 ZORBAX SB-C_{18}(4.6 mm×250 mm, 5 μm),进样量为 10 μL,柱温为 35 ℃,流动相 A 为 0.4% 甲酸水,流动相 B 为乙腈,流速为 1.0 mL/min,洗脱程序:0~5 min, 8% B;5~10 min, 8%~15% B;10~25 min, 15%~35% B;25~30 min, 35%~50% B;30~31 min, 50%~100% B;31~36 min, 100%~5% B。检测波长设定为 325 nm。所有对照品用 75% 甲醇溶解,配制成 0.01 mg/mL 的对照品溶液。样品配制成 1.0 mg/mL 的供试品溶液,经 0.22 μm 滤膜过滤后分析。

1.2.3 甘蔗原生态糖 NIRS 定量模型的建立

1.2.3.1 质控成分的含量测定 蔗糖、还原糖含量按照轻工行业标准 QB/T 2343.2-2013《赤砂糖试验方法》进行测定;干燥失重按照国家标准 GB 5009.3-2016《食品安全国家标准 食品中水分的测定》第二法减压干燥法进行测定;甘蔗原生态糖中的总酚酸含量参照文献 [24] 的方法,采用紫外可见分光光度法测定。取适量样品,依次加入无水乙醇、SDS 溶液及三氯化铁-铁氰化钾显色液,避光反应后,加入稀盐酸继续避光静置显色,于 720 nm 波长处测定吸光度。以没食子酸为对照品,结果以没食子酸当量计。

1.2.3.2 NIRS 采集 甘蔗原生态糖样品光谱的采集:Master10D 傅里叶变换近红外光谱仪开机稳定 30 min 后采集背景光谱,背景采集完毕后,将约 1 g 的供试品均匀置于直径 2 cm 的石英杯中,铺平,扫描获取近红外光谱,扫描范围 11500~4000 cm^{-1}。

对照品特征光谱的采集:取丁香酸与香草酸对照品分别配制成 10 mg/mL 的氘代 DMSO 溶液。使用布鲁克 Tensor37 型号傅里叶变换近红外光谱仪,采用 2 mm 光程的玻璃杯,应用透射检测元件、铟镓砷检测器对氘代 DMSO 溶解的对照品溶液进行光谱采集,用于酚酸类成分特征波段的筛查。

1.2.3.3 预处理方法的选取 分别采用一阶导数(First derivative, FD)、二阶导数(Second derivative, SD)、消除常数偏移量(Elimination of constant offset, ECO)、多元散射校正(Multiple scattering correction, MSC)、最大最小归一化(Minimum maximum normalization, MMN)、正态变量校正(Standard normal variate, SNV)、减去一条直线(Straight line subtraction, SAL)等方法,及 FD+MSC 和 FD+SNV 等组合方法对光谱进行预处理,结合波数范围选取最佳预处理方法。

1.2.3.4 定量模型的建立 利用 NIRS 技术以偏最小二乘法(PLS)构建甘蔗原生态糖的质控成分与光谱之间的拟合模型,并进行成分定量。选取最佳主因子数,对光谱的不同预处理方法及建模波段进行筛选,以校正集决定系数(R^2_{cal})、验证集决定系数(R^2_{pre})、校正均方根偏差(RMSEC)、预测均方根偏差(RMSEP)、交叉验证均方根误差(RMSECV)、性能偏差比(RPD)、预测相对偏差(RSEP)为指标评价模型的稳健性[25−28]。其中,R^2_{cal} 和 R^2_{pre} 用于表示样品实测值与模型预测值之间的拟合程度,数值越高表明模型的准确性越强;而 RMSECV、RMSEC、RMSEP 以及 RSEP 则常被用来评估模型的预测误差,数值越低说明模型的稳定性和预测性能越好。

1.2.4 甘蔗原生态糖的抗氧化活性考察

1.2.4.1 DPPH 自由基清除能力的测定 取 2 mL 浓度为 0.05 mg/mL 的甘蔗原生态糖水溶液,加入 0.05 mg/mL DPPH 乙醇溶液 2 mL 充分混匀,室温避光静置 30 min 后于 517 nm 处测定吸光度。以维生素 C 作为阳性对照,每组实验重复 3 次。DPPH 自由基清除率计算公式:

$$\text{DPPH自由基清除率}(\%) = [1-(A_{样品}-A_{对照})/A_{空白}]\times 100$$

式中:$A_{样品}$为实验组吸光度;$A_{对照}$为用蒸馏水代替 DPPH 溶液,按上述方法测定的吸光度;$A_{空白}$为用无水乙醇代替甘蔗原生态糖溶液,按上述方法测定的吸光度。

1.2.4.2 $ABTS^+$自由基清除能力的测定 配制 7 mmol /L ABTS 水溶液和 4.9 mmol/L 过硫酸钾溶液各 10 mL,等体积混合,于室温条件下暗处反应 16 h,用磷酸盐缓冲液稀释至 $A_{734\ nm}$ 在 0.7 左右。取 0.5 mL 浓度为 0.05 mg/mL 的甘蔗原生态糖水溶液,加入 3.0 mL 制得的 ABTS 稀释溶液,混匀,静置 6 min,在 734 nm 处测定吸光度,以维生素 C 作为阳性对照,每组实验重复 3 次。$ABTS^+$自由基清除率计算公式:

$$ABTS^+\text{自由基清除率}(\%) = (1-A_1/A_0)\times 100$$

式中:A_1 为实验组吸光度;A_0 为用蒸馏水代替甘蔗原生态糖的水溶液,按上述方法测定的吸光度。

1.3 数据处理

所有实验均独立重复 3 次,数据采用 GraphPad Prism 9 进行统计学处理,选择均值±标准差(Mean±SD)来表示。使用 t 检验对单次比较数据进行统计,$P<0.05$ 认为具有显著性差异。

2 结果与分析

2.1 甘蔗原生态糖的关键成分解析

采用 UPLC/Q-TOF-MS 对甘蔗原生态糖样品中的关键化学成分进行鉴定分析。结果如表 2 所示,共鉴定出 21 种化学成分,其主要成分为有机酸、酚苷、黄酮及其衍生物等化合物。其中酚酸类成分最为丰富,包括没食子酸、绿原酸、柠檬酸、奎尼酸、3/5-O-阿魏酰奎宁酸、对香豆酸、4-羟基苯甲酸葡糖苷、原儿茶酸、龙胆酸-2/5-O-β-葡糖苷、p-羟基苯甲酸、香草酸、香草酸葡糖苷、原儿茶酸-4-β-葡糖苷、丁香酸、咖啡酰葡糖二酸等。

表 2　甘蔗原生态糖成分鉴定

Table 2　Identification of raw brown sugar components of sugarcane

峰号	保留时间(min)	分子式	质荷比	理论值	误差(ppm)	碎片离子	鉴定结果
1	1.070	$C_7H_6O_5$	169.0177	169.0182	−2.96	127.05, 105.02, 89.00	没食子酸（Gallic Acid）
2	1.326	$C_7H_{12}O_6$	191.0582	191.0556	13.61	173.05, 127.04	奎尼酸（Quinic acid）
3	2.047	$C_6H_8O_7$	191.0214	191.0192	11.52	111.01	柠檬酸（Citric acid）
4	9.308	$C_{13}H_{16}O_8$	299.0762	299.0767	−1.67	137.02	4-羟基苯甲酸葡糖苷（4-Hydroxybenzoic acid glucoside）
5	10.354	$C_{13}H_{16}O_9$	315.0728	315.0716	3.81	153.02, 152.01, 109.03, 108.02	龙胆酸-2/5-O-*β*-葡糖苷（Gentisic acid-2/5-O-*β*-glucoside）
6	11.565	$C_{14}H_{18}O_9$	329.0893	329.0873	6.08	167.03, 152.01	香草酸葡糖苷（Vanillic acid glucoside）
7	11.572	$C_8H_8O_4$	167.0346	167.0344	1.20	152.01, 108.02	香草酸（Vanillic acid）
8	12.171	$C_{13}H_{16}O_9$	315.0728	315.0716	3.81	153.02, 109.03	原儿茶酸-4-*β*-葡糖苷（Protocatechuic acid-4-*β*-glucoside）
9	13.036	$C_9H_{10}O_5$	197.0459	197.045	4.57	123.01	丁香酸（Syringic acid）
10	13.086	$C_7H_6O_3$	137.0235	137.0239	−2.92	122.02, 104.02	p-羟基苯甲酸[25]（p-hydroxybenzoic acid）
11	14.960	$C_7H_6O_4$	153.0177	153.0188	−7.19	109.03	原儿茶酸(Protocatechuic acid）
12	16.998	$C_{16}H_{18}O_9$	353.0877	353.0873	1.13	191.03, 179.01, 161.00	绿原酸（Chlorogenic Acid）
13	16.448	$C_{17}H_{20}O_9$	367.1033	367.1029	1.09	193.05, 191.06, 173.04, 134.04	3-O-阿魏酰奎宁酸（3-O-feruloyquinic acid）
14	18.019	$C_{15}H_{16}O_{11}$	371.0611	371.0614	−0.81	173.01, 111.01	咖啡酰葡糖二酸(Caffeoylglucaric acid）
15	18.276	$C_{17}H_{20}O_9$	367.1033	367.1029	1.09	193.05, 191.06, 173.05, 134.04	5-O-阿魏酰奎宁酸（5-O-feruloyquinic acid）
16	18.333	$C_{26}H_{28}O_{14}$	563.14	563.1401	−0.18	473.11, 443.10	夏佛塔苷（Schaftoside）
17	18.411	$C_9H_8O_3$	163.0411	163.0395	9.81	119.05	对香豆酸（p-Coumaric acid）
18	18.469	$C_{22}H_{22}O_{11}$	461.1119	461.1084	7.59	443.10, 341.07, 311.08	香叶木素-8-C-葡糖苷[26]（Diosmetin-8-C-glucoside）
19	18.875	$C_{22}H_{22}O_{10}$	445.1143	445.1135	1.80	327.08, 297.04	当药黄素（Sweitisin）
20	19.161	$C_{29}H_{32}O_{17}$	651.1605	651.1561	6.76	329.07, 314.04	小麦黄素-7-O-*α*-L-鼠李糖葡糖苷酸（Tricin-7-O-*α*-L-rhamnosyl-glucuronide）
21	19.225	$C_{29}H_{34}O_{16}$	637.1792	637.1769	3.61	329.07	小麦黄素-7-O-新橙皮苷（Tricin-7-O-neohesperidoside）

通过对比原生态糖中酚酸类成分与柠檬酸、香草酸、丁香酸、p-羟基苯甲酸、绿原酸的保留时间(图 1)，进一步确证了原生态糖中的主要酚酸类成分。

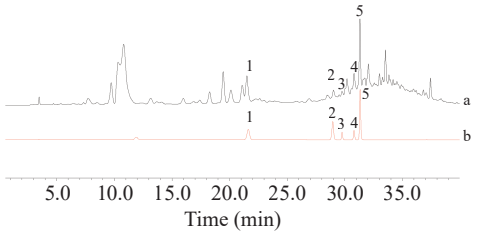


图 1　甘蔗原生态糖与主要酚酸类成分的高效液相色谱图

Fig.1　HPLC chromatography diagram of NCS and the main phenolic acid standards

注：a 为甘蔗原生态糖；b 为酚酸；1. 柠檬酸；2. 香草酸；3. 丁香酸；4. p-羟基苯甲酸；5. 绿原酸。

2.2　甘蔗原生态糖 NIRS 定量模型的构建

2.2.1　校正集与验证集样品的选择　运用 Matlab 的 randperm 函数，从甘蔗原生态糖样品中随机选取 66 个样本作为校正集、10 个样本作为验证集。依据

表 3　校正集与验证集样品中 4 项指标性成分的含量分布(%)

Table 3　Content distribution of four key components in calibration and validation set samples (%)

指标	含量范围	
	校正集(N=66)	验证集(N=10)
蔗糖	73.27~88.11	75.14~85.96
还原糖	2.82~16.08	7.53~12.42
总酚酸	0.11~0.55	0.18~0.51
干燥失重	0.15~10.18	0.91~9.79

“1.2.3.1”的方法，对样品中的 4 项指标进行评估。结果见表 3，校正集中各质控成分的含量范围均大于验证集，说明校正集与验证集的分布合理且具有代表性。

2.2.2　NIRS 波数范围、预处理方法及主因子数的选择　为提升模型预测的准确性和专属性，本研究通过对比原生态糖样品与蔗糖、香草酸及丁香酸标准品光谱中的特征吸收峰，筛选出建模最优波段。如图 2A 所示，原生态糖与蔗糖的近红外光谱对比显示，二者在 4470~4820 cm^{-1}、4900~5000 cm^{-1}、5364~5940 cm^{-1} 以及 6824~7326 cm^{-1} 范围内均表现出相似的吸收峰。此外，通过对比原生态糖与丁香酸及香草酸的光谱（图 2B 与图 2C）可以发现，在 4306~5074 cm^{-1}、5242~6030 cm^{-1} 以及 6824~7326 cm^{-1} 范围内，三者呈现出类似的吸收特征。对上述波数范围分析可知，4306~5074 cm^{-1} 为芳环 C-H 伸缩振动，弯曲振动和变形振动的组合频；5242~6030 cm^{-1} 主要为 O-H 伸缩振动，弯曲振动的组合频；6824~7326 cm^{-1} 为 O-H 伸缩振动基频的一级倍频谱带[29]。据 Cayuela 等[30] 报道水分和糖的吸收峰分别在 10416 cm^{-1} 及 6877 cm^{-1} 处，而程琳等[31] 的研究发现，总酚酸含量测定模型的光谱波段为 9403.9~7498.4、6102.1~5446.4 和 4605.5~4242.9 cm^{-1}，可知上述范围对于定量模型的建立具备一定的参考价值。

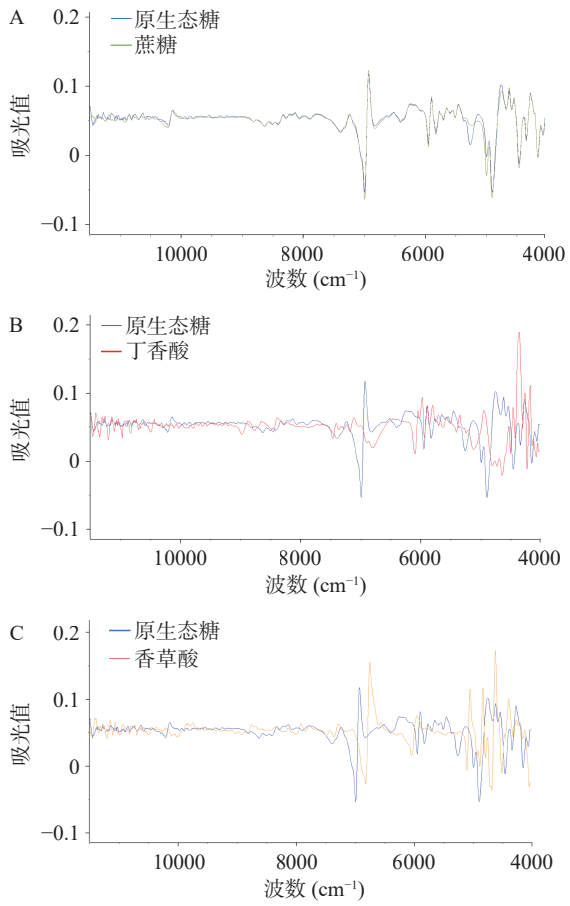


图 2　原生态糖 NIRS 的波数范围分析

Fig.2　Analysis of the wavenumber range of NIRS for raw cane sugar

主因子数的合理选择对提升模型性能和预测精度具有决定性作用。若因子数量不足，可能造成关键信息的遗漏，从而引发“欠拟合”问题，削弱模型的泛化能力；反之，若因子数量过多，则可能引入噪声，导致“过拟合”现象，进而增大预测误差[32]。本研究采用交叉验证法以 R^2_{cal}、RMSECV、RPD 作为核心指标对其进行优化。

甘蔗原生态糖样品的颗粒度、颜色以及仪器响应等因素会对光谱的采集产生影响，为排除噪声干扰，需对原始光谱信号进行预处理。结果如表 4 及图 3 所示，本研究选取 R^2_{cal} 大于 0.85 且 RMSECV 最小的模型的预处理方法为最佳预处理方法，分别为 FD+SNV、SD、SAL、MMN。

2.2.3　定量模型的建立及验证　按照“1.2.3.1”的方法对 76 批原生态糖样品的 4 项指标进行测定，依据

表 4　不同预处理方法、波数范围对模型的影响

Table 4　Effects of different spectra pretreatments, spectral section on the models

指标	预处理方法	波数范围（cm^{-1}）	R^2_{cal}	RMSECV	RPD
蔗糖	FD+SNV	6102.6~5447.8	0.877	1.06	2.70
	ECO	6102.6~5447.8	0.783	1.36	2.15
	FD+MSC	6102.6~5447.8	0.816	1.25	2.33
	FD	6102.6~5447.8	0.755	1.44	2.02
还原糖	SD	7033.97~6880.3, 5343.3~5008.2, 4273.58~4264.358	0.900	1.01	3.16
	SAL	7034~6880.3, 5343.3~5008.2, 4273.58~4258.21	0.876	1.12	2.84
	ECO	7034~6880.3, 5343.3~5008.2	0.825	1.33	2.39
	FD+SAL	7034~6880.3, 5343.3~5008.2, 4273.58~4258.21	0.821	1.35	2.36
总酚酸	SAL	7501.2~6099.5, 5450.9~4599.4	0.938	0.0245	4.04
	ECO	6102.6~4599.4	0.931	0.026	3.81
	SD	6102.6~4599.4	0.935	0.0251	3.94
	SD+SAL	7501.2~4599.4	0.931	0.026	3.81
干燥失重	MMN	9400.9~7498.1, 6102.6~4012.3	0.981	0.342	7.30
	MSC	9400.9~7498.1, 6102.6~4599.4	0.980	0.350	7.15
	ECO	9400.9~5447.8, 4602.5~4012.3	0.978	0.374	6.68
	SNV	9400.9~7498.1, 6102.6~4599.4	0.980	0.349	7.13

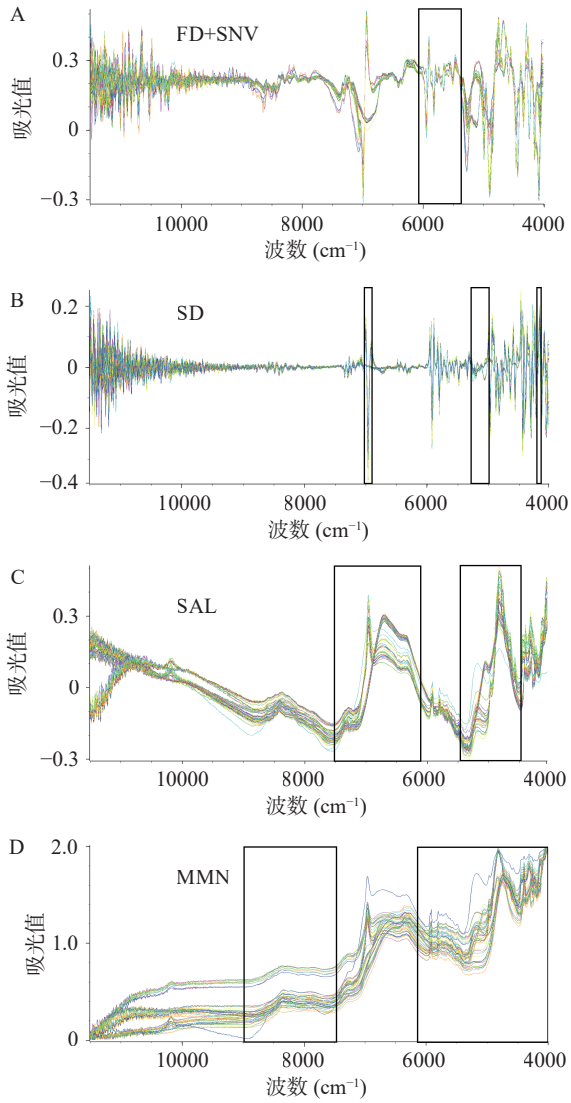


图 3　NIRS 模型的预处理方法及波数范围的选择

Fig.3　Preprocessing methods and wavenumber range selection for NIRS modeling

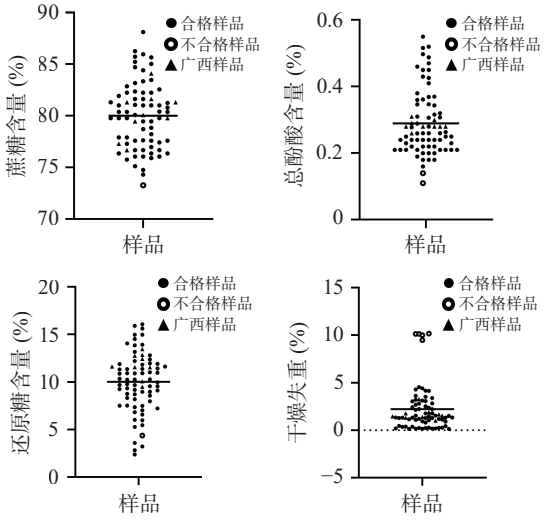


图 4　多批次原生态糖的蔗糖、总酚酸、还原糖含量及干燥失重的测定

Fig.4　Determination of sucrose, total phenolic acids, reducing sugar content and dry weight of multiple batches of raw sugar

GB/T 35885-2018《红糖》中理化性质规定，其中不合格品共有 10 个，占比为 13.15%（见图 4），可能因其购置后放置时间较长，红糖的吸水性导致干燥失重超标，或者在生产过程中糖分浓缩不足等原因导致。选取上述最佳光谱预处理方法和波数区间建立 NIRS 定量分析模型（见图 5），蔗糖、还原糖、总酚酸、干燥失重等 4 项指标预测模型的 R^2_{cal} 分别为 0.867、0.900、0.938、0.981，均大于 0.85；其 RMSECV 分别为 1.06、1.01、0.0245、0.342（见表 5），均为各自模型随变量变化的最小值。利用上述模型对 10 批验证集样品进行预测，结果显示其 4 项指标的预测值与实测值之间的 R^2_{test} 分别为 0.870、0.945、0.955 和 0.977（见表 5），表明模型预测结果具有较好的准确性。

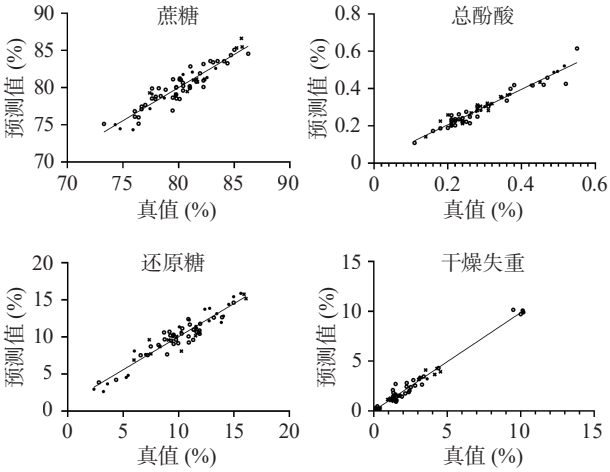


图 5　原生态糖的蔗糖、总酚酸、还原糖含量及干燥失重的近红外预测结果

Fig.5　Near-infrared prediction results of sucrose, total phenolic acids, reducing sugar content and dry weight of the original sugar

表 5　4 项指标的最终预测模型

Table 5　Final predictive model of four indicators

指标	R^2_{cal}	RMSECV	R^2_{test}	RMSEP
蔗糖	0.868	1.06	0.870	1.13
还原糖	0.900	1.01	0.945	0.416
总酚酸	0.938	0.0245	0.955	0.0307
干燥失重	0.981	0.342	0.977	0.463

2.3　甘蔗原生态糖品质的综合评价方法研究

2.3.1　样本相对离散度的规定　考虑到检测指标的量纲以及正负差异与品质内涵相关性的不同，将正相关离散度（K_{in}）按照式（1）计算，如原生态糖中的总酚酸、蔗糖、还原糖；负相关离散度（K'_{in}）依据式（2）进行处理，如干燥失重。

$$K_{in} = \frac{X_{in}}{\overline{X_i}} \qquad 式（1）$$

$$K'_{in} = \frac{\overline{X_i}}{X_{in}} \qquad 式（2）$$

式中，X_{in} 指第 i 个指标的第 n 个样品含量测定

结果；$\overline{X_i}$指第 i 个指标含量的平均值；K_{in} 和 K_{in}' 分别表示第 n 个样品中第 i 个指标的含量与其均值的比例。

2.3.2 权重分配系数(W_i)及综合评价指数(F_q)的确定 采用响应面法对甘蔗原生态糖中 4 个检测指标的权重系数 W_1~W_4(蔗糖、还原糖、总酚酸、干燥失重)进行优化。基于 Design-Expert 10.0 软件进行试验设计，以 W1~W4 为自变量，F_q 不合格率(不合格品 F_q 值分布占比，以国家标准 GB/T 35885-2018 为准，低于二级样品为不合格品)为响应值，通过响应面分析确定最佳权重分配。最终得到 W_1~W_4 的优化值分别为 0.21、0.202、0.511、0.15。其中两因素交互作用对 F_q 不合格率的响应面图见图 6A(以蔗糖、总酚酸为例)，从而确定 F_q 值的计算公式：

$$F_q=\left(0.21\frac{x_1}{\overline{x_1}}+0.202\frac{x_2}{\overline{x_2}}+0.511\frac{x_3}{\overline{x_3}}+0.15\frac{\overline{x_4}}{x_4}\right)\times 100 \quad 式（3）$$

根据上述公式对每个样品得分进行计算，结果显示不合格样本的数量低于 13.15%，与实测结果基本相近。

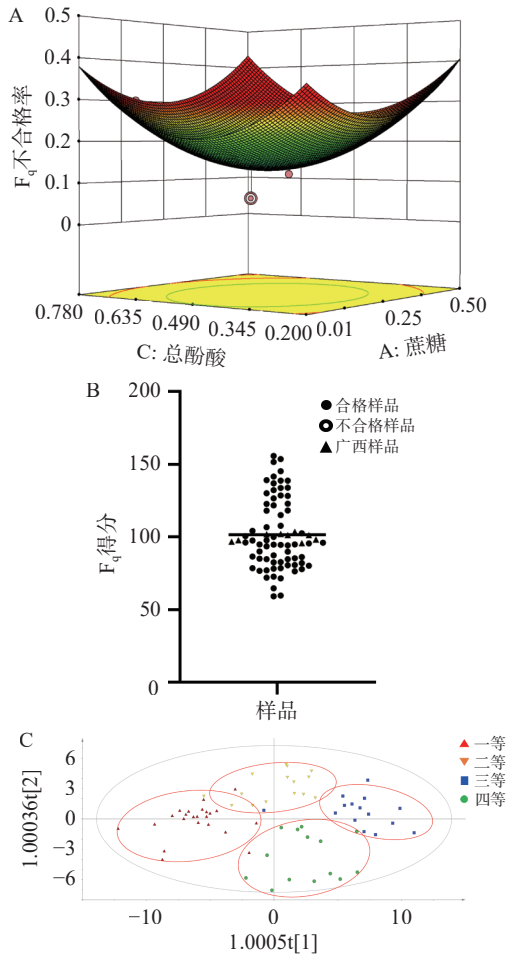


图 6 甘蔗原生态糖综合评价指数 F_q 的优化、样本分布及 OPLS-DA 等级聚类

Fig.6 Optimization of the comprehensive evaluation index F_q for raw sugar from sugarcane, sample distribution, and OPLS-DA hierarchical clustering

2.3.3 甘蔗原生态糖品质的综合评价与等级鉴定 将 76 批样本的上述 4 项检测指标输入 F_q 公式，得到样本 F_q 值的分布图(图 6B)，呈现正态分布特征(sig=0.23>0.05)。依据 F_q 值正态分布特性，将待测样品均分为四个等级：一等：101 及以上；二等：94(含)至 101(不含)之间；三等：80(含)至 94(不含)之间；四等：80 以下。基于 NIRS 光谱的 OPLS-DA 聚类分析显示，各等级的样品分布均存在交集，结果证明在小样本量下的纯光谱聚类不能实现样品等级区分(图 6C)。

2.3.4 基于 F_q 值等级评价的原生态糖抗氧化功能考察 随机选取原生态糖样品中一等、二等及四等的样品各两组，对其抗氧化活性进行考察。结果如图 7 所示，相对于蔗糖样品，原生态糖表现出良好的抗氧化活性，且一等或二等样品的抗氧化能力明显高于四等品，而蔗糖则未能体现明显的抗氧化活性，证明该评价体系对原生态糖品质的综合评价具有较好的可行性。

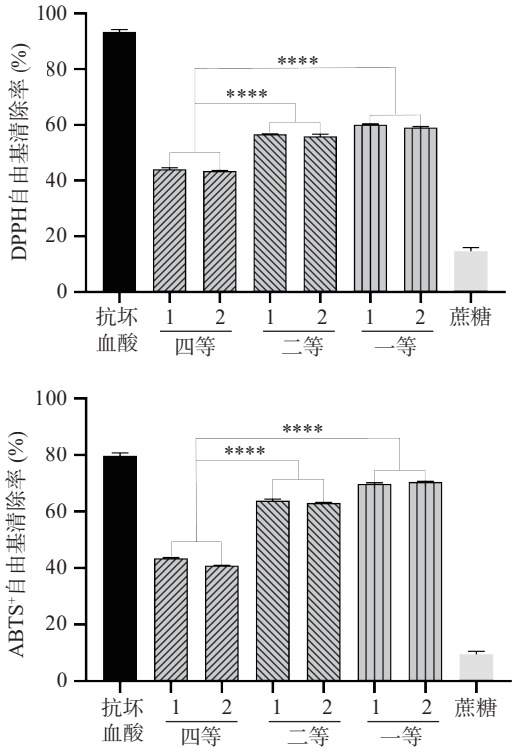


图 7 基于综合评价指数(F_q)的原生态糖抗氧化活性考察

Fig.7 Investigation on the antioxidant activity of raw cane sugar based on the comprehensive evaluation index (F_q)

注：与四等组比较，****表示 $P<0.0001$。

2.4 基于 NIRS 信息的原生态红糖聚类分析

利用 SIMCA 软件对不同来源的样品进行判别分析。将不同来源的原生态红糖样品的 NIRS 数据导出，整合成光谱矩阵，选取 4000~8000 cm^{-1} 之间的吸光度作为因变量，产地作为自变量，应用 OPLS-DA 分析方法对样品进行聚类分析。结果表明(图 8)，尽管所选样品均为桂产原生态糖，但在自然归类分析中并未完全聚为一类(红圈内样品)，且同等级原生态糖

样品也并未完全归为一类，说明其产品性质可能存在显著差异，这种差异很可能源于原料品种、生产工艺或关键操作参数（如澄清阶段的 pH 与温度、蒸发温度及熟化时间等）的不同。具体而言，较高的澄清温度会促进美拉德反应和热降解反应，导致多酚类物质减少；相反，若采用较为温和的加热条件，则有助于保留更多的天然酚酸与矿物质成分。上述工艺差异可进一步体现在蔗糖含量、水分、多酚含量等多个品质指标上[33]。因此上述结果进一步说明本研究评价体系的科学性。

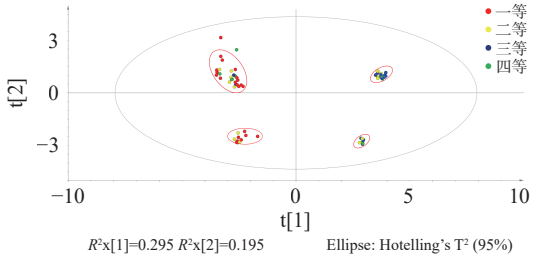


图 8　基于 NIRS 信息的原生态红糖聚类分析

Fig.8　Clustering analysis of raw brown sugar based on NIRS information

3　讨论

本研究首先采用 UPLC/Q-TOF-MS 技术从甘蔗原生态糖中鉴定出 21 种化学成分，其中 16 种为酚酸类化合物，提示酚酸类物质是其主要功效物质基础。在此基础上，建立了蔗糖、还原糖、总酚酸及干燥失重 4 项指标的近红外定量预测模型，各模型决定系数（R^2_{cal}）均大于 0.85，RMSECV 较小，表明模型预测性能良好。进一步引入样本相对离散度与响应面优化权重，构建了综合品质评价指数 F_q，并将 76 批样品按 F_q 值的正态分布特征划分为四个等级。抗氧化活性验证结果显示，高等级样品的抗氧化能力显著优于低等级样品，初步证明了该等级评价体系的合理性。

现有关于红糖品质的研究多侧重于单一或少数指标。杨婷等[13]通过 DPPH 与 ABTS 法测定了红糖的总多酚与黄酮含量及抗氧化能力，邢美婵等[34]基于角度转换算法建立了蔗糖、果糖和葡萄糖的 NIR 定量模型，但这些方法均未能实现多指标的综合评价。本研究在常规理化指标基础上，新增了总酚酸这一关键功效成分的检测，并将其纳入综合评价体系。与上述研究相比，本文所构建的方法不仅保留了糖分等基础质量指标的监控，更通过抗氧化物质基础评价强化了“功能性”内涵，使得品质评价更为系统。

本研究借鉴了质量标志物（Q-Marker）与质量综合评价指数（F_q）的理念[35−38]，将多指标离散度整合为单一指数，并利用响应面法优化权重分配，使评价结果能够客观反映各指标对整体品质的贡献差异。优化后权重显示，总酚酸的权重最高（0.511），蔗糖、还原糖与干燥失重的权重依次降低，这与酚酸类化合物作为原生态糖主要抗氧化功效物质的鉴定结果相吻合，从统计分析角度佐证了化学物质组学发现的合理性。F_q 值的正态分布特性也为等级划分提供了统计学依据，避免了主观阈值的随意性。

近红外光谱技术的引入使该评价方法具备了快速、无损、可现场应用的优势，4 项指标均可通过一次光谱采集实现同步预测，结合 F_q 公式即可直接输出品质等级，为大批量原生态糖的在线质控提供了可能。然而，本研究仍存在一些局限：功效成分鉴定主要聚焦于酚酸，对黄酮及其他类成分的覆盖尚不全面；抗氧化活性验证仅基于体外化学实验，与体内补血养颜等传统功效的关联仍需深入研究；NIR 模型与权重优化均基于现有 76 批样品，样本来源和批次数目可能限制模型的普适性和稳健性。此外，F_q 指数中各项指标的权重分配虽经响应面优化，但其是否普遍适用于不同品种、产地或工艺的原生态糖，还需多中心、大样本的验证。

综上所述，本研究将功效成分评价与近红外快速检测技术相融合，首次建立了一种兼具化学物质基础和统计优化特质的原生态糖品质综合评价方法，为功能性红糖的科学监管和产业升级提供了新的技术支撑。未来工作将着重于扩大样本多样性、纳入更多功效指标（如黄酮、多糖及体内活性评价），并探索模型传递策略以提升方法的适用性。

4　结论

本研究基于化学物质组学明确了甘蔗原生态糖中酚酸类化合物为其主要功效物质基础；结合近红外光谱技术，成功建立了蔗糖、还原糖、总酚酸和干燥失重的快速预测模型，并在此基础上，通过相对离散度处理与响应面权重优化，构建了综合品质评价指数 F_q。应用该指数对 76 批原生态糖进行等级划分，高品质样品的抗氧化活性更强，验证了评价体系的有效性。该方法在现有标准基础上引入功效成分检测，利用近红外快检技术实现了原生态糖品质的综合、快速、客观评价，为功能性红糖的质量控制与真伪优劣判别提供了科学手段。当前方法对黄酮等其他功效成分的考量有限，且适用性尚需在多产地、大样本中进一步验证；后续可围绕更全面的功效成分谱、体内活性评价及模型转移技术展开深入研究，以推动原生态糖品质评价体系的持续完善。

© The Author(s) 2026. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

参考文献

[1] 王智能，杨柳，沈石妍，等. 不同品种甘蔗制成的红糖品质差异研究[J]. 食品研究与开发，2021，42(7)：33-38. [WANG Z Z，YANG L，SHEN S Y，et al. Study on the quality differences of brown sugar made from different varieties of sugarcane[J]. Food Research and Development，2021，42(7)：33-38.]

[2] 范俐, 屈艳, 姜成彪, 等. 古法红糖中多酚化合物的检测分析[J]. 农产品加工, 2021(21): 71−73. [FAN L, QU Y, JIANG X B, et al. Detection and analysis of polyphenolic compounds in ancient brown sugar[J]. Agricultural Products Processing, 2021(21): 71−73.]
[3] 刘庄蔚, 朱健萍, 谭菊英, 等. 药用红糖质量标准研究及探讨[J]. 中国药品标准, 2025, 26(2): 145−150. [LIU Z W, ZHU J P, TAN J Y, etal. Research and discussion on the quality standard of medicinal brown sugar[J]. Drug Standards of China, 2025, 26(2): 145−150.]
[4] 杨柳, 王智能, 沈石妍, 等. 红糖加工型甘蔗种质资源评价与筛选方法的建立[J]. 植物遗传资源学报, 2021, 22(2): 532−539. [YANG L, WANG Z N, SHEN S Y, et al. Establishment of evaluation and screening method for brown sugar processing sugarseed germplasm resources[J]. Journal of Plant Genetic Resources, 2021, 22(2): 532−539.]
[5] JAFFE W R. Nutritional and functional components of non centrifugal cane sugar: A compilation of the data from the analytical literature[J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2015, 43: 194−202.
[6] BARRERA C, BETORET N, SEGUÍ L. Phenolic profile of cane sugar derivatives exhibiting antioxidant and antibacterial properties[J]. Sugar Tech, 2020, 22(5): 798−811.
[7] ALARCON N L, ORJUELA A, NARVAEZ P C, et al. Thermal and rheological properties of juices and syrups during non-centrifugal sugar cane (Jaggery) production[J]. Food Bioprod Proc, 2020, 121: 76−90.
[8] SEGUÍ L, CALABUIG-JIMÉNEZ L, BETORET N, et al. Physicochemical and antioxidant properties of non-refined sugarcane alternatives to white sugar[J]. International Journal of Food Science & Technology, 2015, 50(12): 2579−2588.
[9] 车夏宁, 陈海军, 王宝, 等. 红糖营养成分评估与健康功效研究进展[J]. 中国调味品, 2020, 45(9): 194−200. [CHE X N, CHEN H J, WANG B, et al. Research progress on nutritional composition evaluation and health efficacy of brown sugar[J]. China Condiment, 2020, 45(9): 194−200.]
[10] JIN J, XIN Y, FLAVELL M, et al. Antioxidant and anti-diabetic functions of a polyphenol-rich sugarcane extract[J]. Journal of the American College of Nutrition, 2019, 38(8): 670−680.
[11] CIFUENTES J, SALAZAR V A, CUELLAR M, et al. Antioxidant and neuroprotective properties of non-centrifugal cane sugar and other sugarcane derivatives in an *in vitro* induced parkinson's model[J]. Antioxidants (Basel), 2021, 10(7): 1040−1062.
[12] 苏佳廷, 李凯, 杭方学, 等. 原生态红糖[J]. 广西蔗糖, 2014(2): 37−40. [SU J T, LI K, HANG F X, et al. Non-centrifugal cane sugar[J]. Guangxi Sucrose, 2014(2): 37−40.]
[13] 杨婷, 杨柳, 王智能, 等. 不同品种甘蔗蔗汁及其红糖抗氧化活性比较分析[J]. 甘蔗糖业, 2025, 54(2): 92−100. [YANG T, YANG L, WANG Z N, et al. Comparative analysis of antioxidant activity of different varieties of sugarseed cane juice and brown sugar[J]. Sugarcane Sugar, 2025, 54(2): 92−100.]
[14] 赵春杰, 王辉, 任军华, 等. 甘蔗品种对红糖品质及抗氧化性的比较研究[J]. 中国调味品, 2023, 48(4): 24−28. [ZHAO C J, WANG H, REN J H, et al. Comparative study on brown sugar quality and antioxidant activity of sugarcane varieties[J]. China Condiment, 2023, 48(4): 24−28.]
[15] 张海波, 付庆帅, 姚耿圳, 等. 清脂化瘀方 HPLC-CAD 特征图谱建立及 6 种糖类含量测定[J]. 中成药, 2024, 46(10): 3212−3217. [ZHANG H B, FU Q S, YAO G Z, et al. Establishment of HPLC-CAD characteristic map and determination of 6 kinds of carbohydrate content of Fat Clearing and Huayu Fang[J]. Chinese Patent Medicine, 2024, 46(10): 3212−3217.]
[16] 李秀清, 纪宝玉, 裴莉昕, 等. 槐米的红外快速鉴别与总黄酮、总酚酸、还原糖含量测定[J]. 中国食品添加剂, 2024, 35(8): 200−207. [LI X Q, JI B Y, PEI L X, et al. Infrared rapid identification and determination of total flavonoids, total phenolic acids and reducing sugar contents of Sophora locust rice[J]. China Food Additives, 2024, 35(8): 200−207.]
[17] 王桃红, 祖铁红, 侯小超, 等. 新疆薰衣草蜂蜜品质及挥发性成分分析[J]. 食品与发酵工业, 2024, 50(6): 260−266. [WANG T H, ZU T H, HOU X C, et al. Analysis of quality and volatile components of Xinjiang lavender honey[J]. Food and Fermentation Industry, 2024, 50(6): 260−266.]
[18] 徐瑾仪, 张泽锋, 曾才兴, 等. 不同光学方法测量蔗糖溶液糖度的误差分析[J]. 广西糖业, 2023, 43(5): 9−14. [XU J Y, ZH Z F, ZENG C X, et al. Error analysis of different optical methods to measure the sugar content of sucrose solution[J]. Guangxi Sugar, 2023, 43(5): 9−14.]
[19] SQUEO G, AMIGO J. Successful applications of NIR spectroscopy and NIR imaging in the food processing chain[J]. Foods, 2023, 12: 3041.
[20] TIAN W F, LI Y H, CARLOS G, et al. Quantification of food bioactives by NIR spectroscopy: Current insights, long-lasting challenges, and future trends[J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2023, 124: 105708.
[21] 闫孟琳, 丛龙飞, 张子玥, 等. 基于质量标志物的当归抗炎功效近红外快速评价[J]. 分析测试学报, 2020, 39(11): 1320−1326. [YAN M L, CONG L F, ZHANG Z Y, et al. Rapid evaluation of anti-inflammatory efficacy of *Angelica sinensis* based on quality markers[J]. Journal of Analysis and Testing, 2020, 39(11): 1320−1326.]
[22] 金丹, 张大奎, 王守凯, 等. 我国近红外光谱分析技术的发展[J]. 广东化工, 2018, 45(3): 118−119. [JIN D, ZHANG D K, WANG S K, et al. The development of near-infrared spectroscopy technology in China[J]. Guangdong Chemical Industry, 2018, 45(3): 118−119.]
[23] 潘振辉, 董宇豪, 陈显伟, 等. 桑葚、甘蔗糖蜜多酚的成分鉴定及其复配物的抗氧化活性[J]. 现代食品科技, 2023, 39(7): 246−254. [PAN Z H, DONG Y H, CHEN X W, et al. Identification of components in mulberry and sugarcane molasses polyphenols and the antioxidant activity of their mixtures[J]. Modern Food Science and Technology, 2023, 39(7): 246−254.]
[24] 董润鑫, 徐芯, 李彦妮, 等. 丹参花总酚酸和花青素的含量测定[J]. 四川农业科技, 2024(9): 70−75. [DONG R X, XU X, LI Y N, et al. Determination of total phenolic acids and anthocyanins in salvia miltiorrhiza flowers[J]. Sichuan Agricultural Science and Technology, 2024(9): 70−75.]
[25] 张雅淑. 基于多指纹图谱技术的红糖产地溯源初探研究[D]. 南宁: 广西大学, 2024. [ZHANG Y S. Preliminary study on the origin tracing of brown sugar based on multi-fingerprint mapping technology[D]. Nanning: Guangxi University, 2024.]
[26] 杨小倩. 玉蜀黍不同部位降血糖作用的活性研究[D]. 吉林: 长春中医药大学, 2021. [YANG X Q. Study on the hypoglycemic effect of different parts of corn[D]. Jilin: Changchun University of Traditional Chinese Medicine, 2021.]
[27] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 一部[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2020. [National Pharmacopoeia Committee.

Pharmacopoeia of the People's Republic of China: Volume I[S]. Beijing: China Medical Science and Technology Press, 2020.]
[28] 王彬, 董佳佳, 申柯, 等. 基于近红外光谱分析技术对不同蒸制程度天麻的质量评价研究[J]. 中草药, 2025, 56(3): 975-986. [WANG B, DONG J J, SHEN K, et al. Quality evaluation of gastrodia gastrodia with different degrees of steaming based on near-infrared spectroscopy analysis[J]. Chinese Herbal Medicine, 2025, 56(3): 975-986.]
[29] WORKMAN J J. Interpretive spectroscopy for near-infrared[J]. Applied Spectroscopy Reviews, 1996, 31(3): 251−320.
[30] CAYUELA J A. Vis/NIR solids prediction in intact oranges (*Citrus sinensis* L) cv. Valencialate by reflectance[J]. Postharvest Biol Technol, 2008, 47(1): 75−80.
[31] 程琳, 黄开勇, 蓝肖, 等. 基于近红外光谱技术的杉木总酚含量模型构建与应用[J]. 南方农业学报, 2022, 53(7): 1981−1988. [CHEN L, HUANG K Y, LAN X, et al. Construction and application of total phenol content model of *Cunninghamia lanceolata* based on near-infrared spectroscopy[J]. Journal of Southern Agricultural Sciences, 2022, 53(7): 1981−1988.]
[32] 陈露萍, 徐芳芳, 张欣, 等. 基于偏最小二乘法建立大株红景天片素片硬度近红外光谱预测模型[J]. 中草药, 2023, 54(8): 2446−2452. [CHEN L P, XU F F, ZHANG X, et al. Near-infrared spectroscopy prediction model of hardness of large *Rhodiola rosea* flakes based on partial least squares method[J]. Chinese Herbal Medicine, 2023, 54(8): 2446−2452.]
[33] 陆保祥, 施灏, 兰能慧, 等. 配制糖生产工艺技术的优化及应用效益分析[J]. 广西糖业, 2024, 44(1): 11−15. [LU B X, SHI H, LAN N H, et al. Optimization of production technology for prepared sugar and analysis of its application benefits[J]. Guangxi Sugar Industry, 2024, 44(1): 11−15.]
[34] 邢美婵, 欧经思, 陈成, 等. 近红外光谱结合角度转换快速分析原汁红糖中蔗糖、果糖、葡萄糖[J]. 中国调味品, 2022, 47(9): 153−156162. [XING M C, OU J S, CHEN C, et al. Rapid analysis of sucrose, fructose and glucose in raw brown sugar by near-infrared spectroscopy combined with angle conversion[J]. China Condiment, 2022, 47(9): 153−156162.]
[35] 刘昌孝. 中药质量标志物(Q-Marker)研究发展的 5 年回顾[J]. 中草药, 2021, 52(9): 2511−2518. [LIU C X. A 5-year review of the research and development of quality markers in traditional Chinese medicine (Q-Marker)[J]. Chinese Herbal Medicine, 2021, 52(9): 2511−2518.]
[36] 刘昌孝, 陈士林, 肖小河, 等. 中药质量标志物 (Q-Marker): 中药产品质量控制的新概念[J]. 中草药, 2016, 47(9): 1443−1457. [LIU C X, CHEN S L, XIAO X H, et al. Quality markers in traditional Chinese medicine (Q-Marker): A new concept of quality control of traditional Chinese medicine products[J]. Chinese Herbal Medicine, 2016, 47(9): 1443−1457.]
[37] 刘昌孝. 中药质量标志物(Q-marker): 提高中药质量标准及质量控制理论和促进中药产业科学发展[J]. 中草药, 2019, 50(19): 4517−4518. [LIU C X. Quality marker of traditional Chinese medicine (Q-marker): To improve the quality standards and quality control theory of traditional Chinese medicine and promote the scientific development of traditional Chinese medicine industry[J]. Chinese Herbal Medicine, 2019, 50(19): 4517−4518.]
[38] 白钢, 刘昌孝, 张铁军, 等. 基于质量综合评价指数的药材品质快速评价[J]. 中草药, 2021, 52(2): 313−320. [BAI G, LIU C X, ZHANG T J, et al. Rapid evaluation of the quality of medicinal materials based on comprehensive quality evaluation index[J]. Chinese Herbal Medicine, 2021, 52(2): 313−320.]