网络出版时间:2026-03-13 DOI:10.13207/j.jnwafu.2026.09.008

结合太赫兹光谱与密度泛函理论的黄曲霉毒素B1指纹特征验证

张思怡[1,2,3],杨硕[1,2,3],梁晓颖[1,2,3],姚志凤[1,2,3],陈煦[1,2,3],宋怀波[1,2,3]
(1 西北农林科技大学 机械与电子工程学院,陕西 杨凌 712100;2 农业农村部农业物联网重点试验室,陕西 杨凌 712100;
3 陕西省农业信息感知与智能服务重点试验室,陕西 杨凌 712100)

[摘 要] 【目的】融合密度泛函理论(DFT)与太赫兹时域光谱(THz-TDS)技术,为黄曲霉毒素B1(AFB1)的高精度定量分析与指纹特征验证提供参考。【方法】基于DFT对AFB1分子进行结构优化与振动频率计算,获取其在0.1~5.0 THz频段内的理论吸收谱,并从分子振动模式角度对吸收峰进行解释;系统比较S-G平滑、移动平滑、归一化、标准正态变量变换(SNV)、多元散射校正(MSC)、一阶导数与二阶导数等7种光谱预处理方法对AFB1太赫兹光谱偏最小二乘回归(PLSR)建模效果的影响;最后针对传统特征提取方法(SPA/MCUVE/CARS/SFLA)对低浓度信号表征不足的问题,构建基于一维卷积神经网络(1D-CNN)和残差网络(ResNet)的黄曲霉毒素B1定量预测模型,通过卷积与池化操作,自适应地对原始光谱进行局部感知,并利用深度学习捕捉邻近波段的隐性特征,提升指纹峰的提取能力。【结果】在0.5~3.0 THz时,试验吸收峰与理论预测高度一致,验证了C═O/C—O振动模式作为AFB1特异性指纹峰的可靠性。在AFB1质量浓度为0.25~10.00 μg/mL时,1D-CNN模型预测集的决定系数为0.92,均方根误差为0.77。相较于传统方法,1D-CNN得到的特征频率与理论吸收峰具有良好的对应关系,提取的特征频率几乎完全覆盖2.114 THz处的理论峰值,而在1.108 THz处仅存在0.05 THz的偏移。【结论】1.108,1.767和2.114 THz处振动模式与试验光谱的匹配度较高。1D-CNN模型对黄曲霉毒素B1具有最佳预测能力,所建立的AFB1太赫兹指纹峰的特征验证方法为复杂基质中痕量毒素检测提供了新范式,为食品安全领域现场快检技术的建立提供了参考。

[关键词] 黄曲霉毒素B1;太赫兹时域光谱;密度泛函理论;指纹峰分析;机器学习
[中图分类号] TS207.4;O657.7 [文献标志码] A [文章编号] 1671-9387(2026)09-0078-11

Verification of the fingerprint characteristics of aflatoxin B1 using terahertz spectroscopy combined with density functional theory

ZHANG Siyi[1,2,3],YANG Shuo[1,2,3],LIANG Xiaoying[1,2,3],YAO Zhifeng[1,2,3],
CHEN Xu[1,2,3],SONG Huaibo[1,2,3]
(1 *College of Mechanical and Electronic Engineering,Northwest A&F University,Yangling,Shaanxi* 712100,*China*;
2 *Key Laboratory of Agricultural Internet of Things,Ministry of Agriculture and Rural Affairs,Yangling,Shaanxi* 712100,*China*;
3 *Shaanxi Key Laboratory of Agricultural Information Perception and Intelligent Service,Yangling,Shaanxi* 712100,*China*)

Abstract:【Objective】This study integrates Density Functional Theory (DFT) and Terahertz Time-Domain Spectroscopy (THz-TDS), to provide a reference for high-precision quantitative analysis and fingerprint verification of Aflatoxin B1 (AFB1).【Method】Based on DFT, the AFB1 molecule was structurally optimized

[收稿日期] 2025-10-17 [修回日期] 2025-12-01
[基金项目] 国家自然科学基金项目(32201662);陕西省重点研发计划项目(2024NC-YBXM-218)
[作者简介] 张思怡(2002—),女,辽宁葫芦岛人,在读硕士,主要从事太赫兹检测方法研究。E-mail:zhangsiyi122@outlook.com
[通信作者] 陈煦(1989—),女,陕西咸阳人,副教授,博士,主要从事农业信息快速感知方面的研究。E-mail:chenxu029@126.com

and its vibrational frequencies were calculated to obtain the theoretical absorption spectrum in the 0.1－5.0 THz range, with absorption peaks interpreted from the perspective of molecular vibrational modes. Seven spectral preprocessing methods, including S-G smoothing, movement smoothing, normalization, standard normal variate (SNV), multiplicative scatter correction (MSC), first derivative, and second derivative, were systematically compared to determine their effects on the PLSR modeling of AFB1 terahertz spectra. To address the inadequacy of traditional feature extraction methods (SPA, MCUVE, CARS, SFLA) in characterizing low-concentration signals, quantitative prediction models for AFB1 based on one-dimensional convolutional neural network (1D-CNN) and residual metwork (ResNet) were constructed. Through convolution and pooling operations, the models adaptively performed local perception on raw spectra, and leveraged deep learning to capture implicit features from adjacent spectral bands, thereby enhancing the extraction efficiency of fingerprint peaks.【Result】In the 0.5－3.0 THz range, the experimental absorption peaks were highly consistent with theoretical predictions, validating the reliability of the C＝O/C－O vibrational modes to obtain characteristic fingerprint peaks for AFB1. In the concentration range of 0.25－10.00 μg/mL, the prediction set of 1D-CNN model achieved a determination coefficient (R) of 0.92, with a root mean square error of 0.77. Compared to traditional methods, the characteristic frequencies extracted by the 1D-CNN model corresponded well with the theoretical absorption peaks: the extracted frequencies almost fully covered the theoretical peak at 2.114 THz, while only a 0.05 THz deviation was observed at 1.108 THz.【Conclusion】The vibrational modes at 1.108, 1.767, and 2.114 THz show a high degree of agreement with the experimental spectrum. The 1D-CNN model demonstrates optimal predictive capability for aflatoxin B1. The established method for verifying the characteristic terahertz fingerprint peaks of AFB1 provides a new paradigm for detecting trace toxins in complex matrices and serves as a valuable reference for developing on-site rapid detection technologies in the field of food safety.

Key words: aflatoxin B1; terahertz time-domain spectroscopy; density functional theory; fingerprint peak analysis; machine learning

黄曲霉毒素（Aflatoxin，AF）主要是由黄曲霉（*Aspergillus flavus*）和寄生曲霉（*Aspergillus parasiticus*）感染产生的次级代谢产物，具有强烈生物毒性和高致癌性[1]。在适宜环境条件下，霉菌极易繁殖，目前已有在谷物和油料作物的种子及加工产品、干鲜果品、调味品、烟草、乳及乳制品、肉类、鱼虾类和动物饲料中检出黄曲霉毒素的报道[2-4]，因此其被世界卫生组织列为Ⅰ类致癌物。其中，黄曲霉毒素 B1（aflatoxin B1，AFB1）因分布最广、热稳定性强且具有免疫抑制与强致癌性，成为食品安全领域的关键监控对象。尽管各国对食品中 AFB1 的残留限值已作出严格规定，但统计显示，其在谷物、坚果、乳制品等基质中的隐蔽性污染仍然频发[5-6]。现常用的 AFB1 检测方法包括薄层色谱法、液相色谱法、荧光分光光度法等，这些方法因需要专业的检测设备和相对洁净的操作环境，不适用于毒素的现场检测[7-8]。随着经济的飞速发展和人们对食品安全的重视，我国市场上的粮食交易大幅增加，食品安全检测的压力也逐渐增大，为此先后开发出针对 AFB1 的酶联免疫法、胶体金免疫层析法以及生物传感器等新型检测方法[9-11]，这些方法虽对设备与环境的要求相对较低，但仍存在操作步骤繁琐等不足。

近年来，太赫兹时域光谱（THz-TDS）技术凭借其能量低、指纹谱识别能力强及对有机大分子的高敏感性，为 AFB1 原位检测提供了新途径。针对 AF 及其代谢产物的太赫兹光谱检测研究，国内外学者已取得了丰硕的研究成果。太赫兹波（0.1～10.0 THz）能量与分子间弱相互作用（氢键振动、晶体骨架振动）及部分官能团的低频振动模式相匹配，可揭示物质的特异性吸收特征。梁川等[12]采用 THz 时域光谱对不同品种玉米进行探测，通过采集玉米种子不同部位的时域谱、吸收谱和折射率谱，探究玉米种子测定部位、品种等因素对所得谱图的影响。刘翠玲等[13]利用 THz 衰减全反射技术结合距离匹配（DM）算法，实现对不同花生品种的快速分类鉴别。目前 THz-TDS 技术已成功应用于玉米[14]、面粉[15]中添加剂（如苯甲酸）的定量分析检测领域，并在痕量检测中展现出巨大潜力。

然而，AFB1 的 THz 光谱检测仍面临两大瓶颈：

一是低质量浓度样本的特征吸收峰因信号强度弱[16]、基质干扰显著而难以准确定位;二是传统机器学习方法(如PLS、SVM)难以有效关联THz光谱的微弱指纹特征与浓度间的非线性关系,导致模型泛化能力受限[17],极大制约了后续痕量检测技术的发展。针对上述挑战,本研究以AFB1为研究对象,利用密度泛函理论结合量子化学计算软件对AFB1的指纹谱进行仿真计算,采用基于局部感受野与权值共享机制的一维卷积神经网络(1D-CNN)构建低质量浓度黄曲霉毒素B1预测模型,并从原始光谱中提取多层次抽象特征,对其进行试验验证,以期为AFB1的THz指纹数据库建设提供理论支撑,也为AFB1的太赫兹光谱检测及专用传感器研发提供一定的理论支持。

1 材料与方法

1.1 仪器与设备

黄曲霉毒素B1标准品:乙腈基质标准溶液(质量浓度100 μg/mL,货号GBW(E)100258,伟业计量),储存于-20 ℃避光环境;溶剂与载体:色谱纯乙腈(西陇科学);密度0.92 g/cm^{3}聚乙烯粉末(过孔径0.074 mm(200目)筛网,中国石化),用于制备AFB1-聚乙烯混合压片。

CCT-1800小型太赫兹时域光谱仪,是由深圳市太赫兹研究院自主研发的紧凑型、试验室级时域光谱仪,配制有透射模块。光谱范围:0.5~6.0 THz(2.0 THz处信噪比>60 dB);时间分辨率:<50 fs;温控模块:(25±0.5) ℃(避免水分干扰);数据输出:时域谱、频域吸收系数、折射率及相位谱。

样品制备设备包括:JJ100B型电子天平(量程0.1 mg~100.0 g,精度±0.1 mg,利平仪器);101-0B型电热恒温干燥箱(控温精度±1 ℃,绍兴市严氏风机),用于压片前混合粉末脱水处理(60 ℃,4 h);HY-16型压片机(压力范围0~16 MPa,天津天光光学仪器),配备直径12 mm硬质合金压片模具;微量移液枪(量程10~100 μL,误差±1%,北京大龙星创)。

使用的量子化学计算软件为Gaussian 09(Rev. D.01版本),采用DFT/B3LYP泛函与6-311++G(d,p)基组进行AFB1分子结构优化与振动频率计算;深度学习平台为PyTorch 1.12框架,基于NVIDIA RTX 3090 GPU加速1D-CNN模型训练;光谱数据处理使用MATLAB R2022a。

1.2 基于密度泛函理论的模拟方法

密度泛函理论(density functional theory,DFT)通过电子密度分布描述多粒子体系的基态性质,当利用薛定谔方程求解系统的波函数时,往往需要计算机辅助完成。Gaussian系列软件能够对分子结构、振动、光谱、激发态能量等进行计算,选择Gaussian 09软件采用B3LYP杂化泛函与6-311++G(d,p)基组对AFB1分子进行模拟计算。首先基于X射线衍射晶体数据构建初始分子构型,利用Berny算法进行几何优化至能量变化<4.4×10^{-24} J,力常数矩阵最大残差<0.000 45;随后在优化构型下计算振动频率,通过频率校正因子消除谐性近似误差,获得0.1~5.0 THz区间的理论吸收谱。为验证计算可靠性,采用Gaussian 09内置的Onsager溶剂模型模拟乙腈介电环境(介电常数$\varepsilon=37.5$),并利用Gauss View6可视化分子振动模式与偶极矩变化方向,建立特征吸收峰与特定化学键振动的定量对应关系。理论光谱与试验数据的匹配度则通过交叉相关系数来评估,为太赫兹指纹峰归属提供量子力学层面的物理诠释。

1.3 样本制备与光谱数据采集

设定10组质量浓度梯度(0.25,0.50,0.75,1.00,2.00,4.00,5.00,6.00,8.00和10.00 μg/mL)的AFB1溶液(覆盖痕量残留至超标的典型污染范围),制备聚乙烯压片,对应制备空白对照组的聚乙烯压片。压片样本的制备过程为:

1)取10 μL AFB1标准溶液(100 μg/mL,乙腈基质)至2 mL棕色玻璃离心管,避免光解;

2)采用逐级稀释法配制不同质量浓度的AFB1,使用乙腈(色谱纯)配制目标溶液,用移液器(10~100 μL,校准误差±1%)精确控制稀释体积;

3)应用涡旋振荡器(2 000 r/min,30 s)结合后超声处理(40 kHz,5 min),使其充分振荡均匀,且消除气泡,以备后续压片使用;

4)电子天平准确称取180.00 mg聚乙烯粉末(过孔径0.074 mm筛网,比表面积2.8 m^2/g),平铺于石英培养皿内,每个样本中定量滴加稀释液10 μL,静置10 min使溶液充分渗透;

5)将样本置于真空干燥箱(70 ℃,-0.08 MPa,20 min)中确保乙腈彻底挥发,混合粉末转移至硬质合金模具(直径12 mm),采用16 MPa压力保压5 min,制成厚度(1.80±0.05) mm的均匀圆片(表面粗糙度R_a<1.6 μm)。

用 CCT-1800 型太赫兹时域光谱仪的谱线模式、透射模块获取样本的太赫兹光谱。采集前以 5 L/min 流量持续通入高纯氮气（露点＜－70 ℃）30 min，使腔体内相对湿度＜3%，并保持样品台恒温（25±0.2）℃，以减少热噪声干扰。在确保环境稳定的基础上，使用空模具压片为背景获取参考谱线。样本检测时，以压片中心为原点，在半径 2 mm 圆周上均匀选取 4 个检测点（角度间隔 90°），正反面共 8 个点位。每个点位连续采集 100 次时域信号，剔除异常脉冲后取算术平均值，共计获取 88 组（11 组质量浓度×8 点位）独立光谱数据，用于后续分析。

1.4　数据分析

1.4.1　*光谱数据预处理*　原始太赫兹光谱数据采集过程中易受光源功率波动、探测器热噪声等系统噪声和残留水汽吸收峰、温漂效应等环境的干扰，本研究中可能还受聚乙烯基质散射、表面粗糙度等样本非均匀性等诸多因素的影响，极大地增加了特征峰的解析难度。为提升低质量浓度 AFB1 特征峰的信噪比并消除基线畸变，本研究分别使用 S-G 平滑、移动平滑、归一化、标准正态变量变换（standard normal variate，SNV）、多元散射校正（multiplicative scatter correction，MSC）、一阶导数和二阶导数等 7 种方法对所获得的光谱进行预处理[18]。

1.4.2　*特征提取*　太赫兹光谱的高维特性及相邻波段的强相关性易导致模型过拟合与计算冗余，直接降低模型预测的准确性。为有效筛选物理意义明确的敏感波长，深度挖掘能够显著反映物质特性的局部指纹特征，本研究通过连续投影算法（successive projections algorithm，SPA）、蒙特卡洛无信息变量消除法（monte carlo uninformative variable elimination，MCUVE）、竞争性自适应重加权采样（competitive adaptive reweighted sampling，CARS）和随机蛙跳算法（shuffled frog leaping algorithm，SFLA）4 种特征提取方法，对经过预处理的光谱数据实施特征波长提取[19]。

在对比不同预处理及特征提取方法时，为量化处理效果，本研究使用机器学习的方法对其进行建模计算。偏最小二乘回归（partial least squares regression，PLSR）是通过将自变量和因变量投影到低维空间，寻找潜在变量的统计建模方法，适用于处理高维、多重共线性和小样本数据[20]。因此，本研究选择 PLSR 进行对比试验。

1.4.3　*回归模型分析*　传统方法在低质量浓度微弱信号表征中存在明显局限，加之太赫兹光谱数据采集过程中易受多重噪声干扰，导致光谱特征湮灭。本研究基于端到端的一维卷积神经网络（one-dimensional convolutional neural network，1D-CNN）架构，深度解析 AFB1 光谱的局部指纹特征。构建的 1D-CNN 由输入层、卷积模块、池化层和全连接层组成，其中卷积模块包含首层卷积和次层卷积两部分，分别用以提取局部振动模式和捕获高频细微特征，提升模型表征能力。影响 1D-CNN 模型的参数，主要包括卷积核大小、池化层参数、卷积层深度、学习率、批次大小等。

残差网络（residual network，ResNet）通过引入残差连接或快捷连接，成功解决了深层网络中的梯度消失和退化问题，从而极大增强了模型的表达能力和性能。ResNet 的影响因素与 1D-CNN 大致相同，特点是在加入了残差块组件之后，残差块通过卷积层、批量归一化和激活函数（rectified linear unit，RELU）来提取输入数据的特征，有助于网络学习到更深层次的特征，进而提高模型的性能。因此，本研究使用 1D-CNN 和 ResNet 建立 AFB1 质量浓度预测模型，开展对比试验。

1.4.4　*模型评价*　在构建模型时，通过随机抽样将采集的光谱样本划分为校正集（80%）和预测集（20%），以均方根误差（root mean square error，RMSE），包括校正集均方根误差（root mean square error of calibration，RMSEC）和预测集均方根误差（root mean square error of prediction，RMSEP），以及决定系数 R^2（包括校正集决定系数 R_c^2 和预测集决定系数 R_p^2）和剩余预测残差（residual predictive deviation，RPD）作为评价指标[21]。其中 R^2 和 RPD 越大越好，RMSE 越小越好。通常认为 RPD＞2 表示模型具有良好的预测能力。

RMSE 由式（1）计算：

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i-y_i)^2}{n-p-1}}。\tag{1}$$

式中：y_i 为样本真实值，$\hat{y}_i$ 为样本预测值，n 为样本数，p 为自变量个数。

R^2 由式（2）计算：

$$R^2=1-\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_{i,a}-y_{i,p})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_{i,a}-\bar{y}_a)^2}。\tag{2}$$

式中：$y_{i,a}$ 为第 i 个样本的真实值，$y_{i,p}$ 为第 i 个样本的预测值，$\bar{y}_a$ 为实际值的平均值，n 为样本数。

RPD 定义为预测集中真实值的标准差（stan-

dard deviation,SD)与预测集均方根误差(RMSEP)的比值,由式(3)计算:

$$RPD=\frac{SD}{RMSEP}。\tag{3}$$

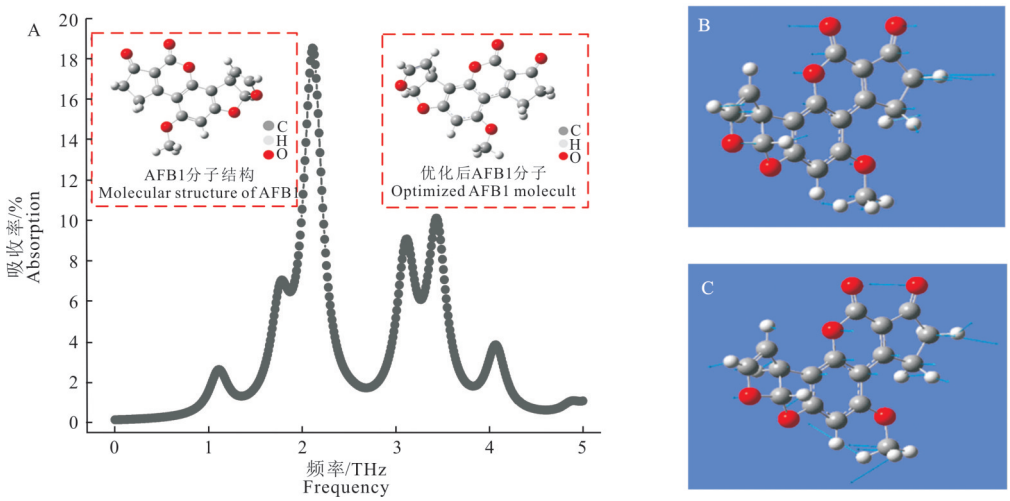
式中:SD表示预测集中真实值的标准差。

2 结果与分析

2.1 黄曲霉毒素B1太赫兹光谱的仿真

在构建分子模型时,分子的键长、键角、二面角等结构参数并非对应该分子基态结构,因此在分子模型构建完成后需对分子模型进行几何结构优化,使其对应分子能量最低时的基态。采用Gauss View 6构建AFB1的初始分子模型和优化后的结构及AFB1的吸收谱曲线如图1-A所示。

图1-A仿真结果显示,AFB1分子在0.1~5.0 THz的理论吸收谱共存在6个较明显的吸收峰,其振动频率经校准后分别为1.108,1.767,2.114,3.111,3.439和4.070 THz。通过Gauss View 6的振动模式可视化与偶极矩导数分析,揭示了AFB1分子特征吸收峰的振动形态(图1-B、C)。其中1.108 THz处的特征峰,主要是由呋喃环C8—C9键的对称伸缩振动(振幅±0.12 Å)耦合环戊烯酮平面摇摆(扭转角$\Delta\theta$=7.5°)导致分子偶极矩沿y轴方向的周期性变化;1.767 THz处的特征峰主要归因于甲氧基O—CH_3中C—O键的面外弯曲振动与相邻羰基C=O反对称摆动的协同作用,引发了分子整体偶极矩的协同振荡;2.114 THz处的特征峰则是由双呋喃环系统的交替收缩—扩张运动引起的。对比6种振动模式可以发现,吸收峰值位置与AFB1分子骨架及官能团的振动形式密切相关。



A. 优化前后的AFB1分子结构及计算的吸收谱曲线;B. 1.108 THz;C. 1.767 THz。

A. AFB1 molecular structures before and after optimization and calculated absorption spectra;B. 1.108 THz;C. 1.767 THz.

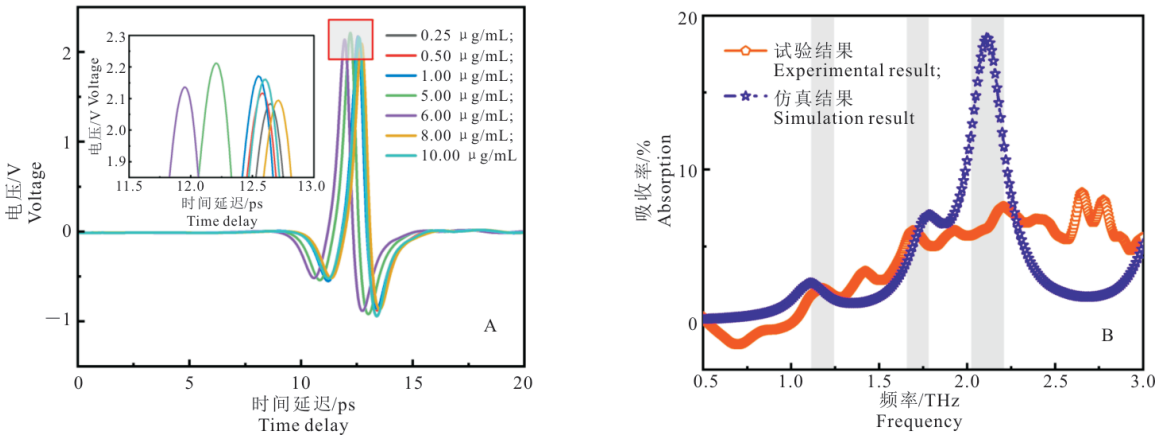
图1 AFB1计算的吸收谱曲线及其在2个典型吸收峰处的振动形态

Fig. 1 Absorption spectrum calculated by AFB1 and vibrational modes at its two characteristic absorption peaks

2.2 不同质量浓度黄曲霉毒素B1的太赫兹光谱

为进一步验证和解析AFB1的指纹峰,使用太赫兹时域光谱仪CCT-1800透射模块、谱线模式对不同质量浓度黄曲霉B1的THz光谱数据进行获取。由于3.0 THz以上频段的信号与噪声重叠增加,难以判断是否为AFB1有效特征峰;而0.5 THz以下频段,因太赫兹系统在初始响应阶段的稳定性不足导致信号可靠性差。因此选择0.5~3.0 THz频段进行后续验证。部分代表性时域光谱曲线如图2-A所示。由图2-A可以看出,不同质量浓度AFB1的时间延迟存在明显区分,局部放大图进一步验证了低质量浓度AFB1检测的可能性。利用傅里叶变换将时域谱转换为吸收率后进行后续处理,得到平均吸收系数谱与仿真计算结果的对比如图2-B所示。图2-B显示,1.108 THz试验峰(校正后1.147 THz)与1.767 THz理论峰匹配度较高,验证了C=O/C—O振动模式作为AFB1特异性指纹峰的可靠性。对比DFT计算结果与THz-TDS试验结果可以发现,理论预测的2.114 THz振动峰在试验中幅值较小且存在轻微频率偏移现象。分析原因可能是因为DFT计算基于孤立分子模型(气相)进行,未考虑AFB1与聚乙烯基质的相互作用。试验中AFB1以固态形式存在,分子间堆积可能引发晶格振动耦合,导致理论峰位与试验值存在偏移。而偏移幅度减小的原因可能是AFB1与聚乙烯混合时存在少量分布不均,局部质量浓度的波动可能导

致 2.114 THz 振动信号强度降低，加之微量乙腈溶剂分子可能通过氢键与 AFB1 的羰基相互作用，进而影响了 C═O 键的振动强度。



A. 时域光谱；B. 吸收谱。A. Time-domain spectra; B. Simulated absorption.

图 2　黄曲霉毒素 B1 的时域光谱与仿真吸收谱

Fig. 2　Time-domain and simulated absorption spectra of AFB1

2.3　光谱数据预处理

通过 S-G 平滑、移动平滑、归一化、SNV、MSC、一阶导数和二阶导数等 7 种方法对所获得光谱进行预处理，对预处理变换后的光谱建立 PLSR 回归预测模型，结果见表 1。为进一步揭示不同方法的预处理效果，绘制部分预处理后的光谱曲线如图 3 所示。

结合图 3 与表 1 可以看出，不同预处理方法对 PLSR 回归结果的影响具有显著差异。其中，经二阶导数预处理后的 PLSR 模型展现出最优的预测能力，校正集和预测集的决定系数 R_c^2 和 R_p^2 分别为 0.920 3 和 0.850 1，RMSEC 和 RMSEP 分别为 0.871 6 和 1.240 8，这可能因为二阶导数通过计算光谱数据的二阶差分，能够有效去除光谱中的基线漂移和线性趋势，同时增强光谱中特征峰的对比度和清晰度，以更准确地捕捉样品的真实化学信息，提升模型的预测精度和可靠性。使用的多项式阶数为 2，窗口宽度为 7 点，可有效抑制噪声并保留光谱特征；相比之下，移动平滑、S-G 平滑的 R_p^2 较原始光谱反而降低，观察平滑后的光谱曲线不难发现，虽然平滑对噪声有一定抑制作用，但因过度抑制高频信号导致模型对低质量浓度样本的灵敏度下降，损失了光谱中的特征信息；MSC 可有效校正压片厚度和表面不均差异引起的散射效应，但放大了噪声，从而影响了模型的预测性能。基于此，本研究选择二阶导数作为核心预处理方法，以高保真地保留分子指纹特征，为后续特征提取奠定基础。

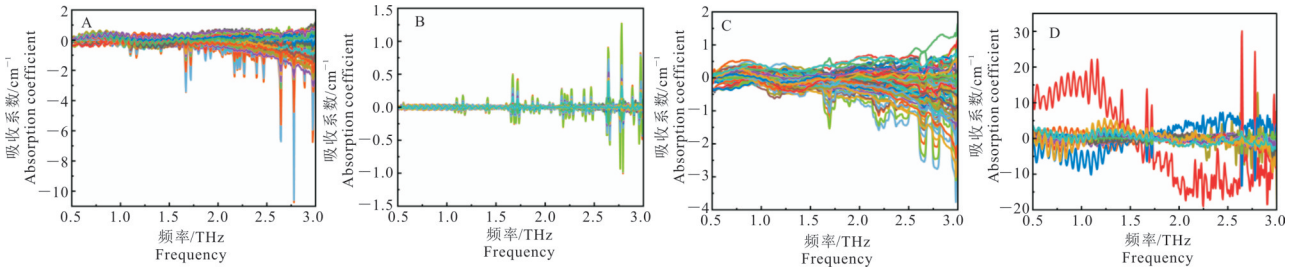
表 1　不同方法预处理后光谱曲线 PLSR 回归结果的比较

Table 1　Comparison of PLSR regression results of spectral curves using different preprocessing methods

预处理方法 pretreatment method	均方根误差 Root mean square error		决定系数 Determination coefficient		剩余预测残差 Residual predictive deviation (RPD)	显著性 Significance
	校正集 Calibration set	预测集 Prediction set	校正集 Calibration set	预测集 Prediction set		
原始光谱 Original spectral	1.087 4±0.227 3	1.548 9±0.605 2	0.882 4±0.045 7	0.729 8±0.180 2	2.296 7±0.180 2	***
S-G 平滑 S-G smoothing	1.316 8±0.106 0	1.849 3±0.362 4	0.836 9±0.030 6	0.664 6±0.112 2	1.822 0±0.375 7	**
移动平滑 Moving smoothing	1.339 7±0.329 1	1.668 7±0.383 3	0.821 3±0.101 3	0.720 2±0.112 7	2.010 4±0.402 9	***
矢量归一化 Vector normalization	1.376 6±0.664 7	2.152 8±0.348 8	0.769 9±0.206 9	0.549 0±0.038 9	1.593 3±0.066 2	*
标准正态变量变换 Standard normal variate	1.309 5±0.734 2	2.133 9±0.476 1	0.786 0±0.178 3	0.517 4±0.227 8	1.564 4±0.374 1	*
多元散射校正 Multiplicative scatter correction	1.755 8±0.521 9	2.228 8±0.691 1	0.677 7±0.206 6	0.532 8±0.168 7	1.568 5±0.382 1	*
一阶导数 First derivative	1.319 8±0.432 4	1.795 0±0.222 9	0.822 9±0.099 4	0.692 7±0.048 6	1.823 6±0.163 2	**
二阶导数 Second derivative	0.871 6±0.033 23	1.240 8±0.340 7	0.920 3±0.056 6	0.850 1±0.056 9	2.727 4±0.510 6	****

注：****表示预测能力优秀（RPD＞2.5）；***表示预测能力良好（2.0＜RPD≤2.5）；**表示预测能力中等（1.8＜RPD≤2.0）；*表示预测能力一般（1.4＜RPD≤1.8）。下同。

Note: **** indicates excellent predictive ability (RPD＞2.5); *** indicates good predictive ability (2.0＜RPD≤2.5); ** indicates moderate predictive ability (1.8＜RPD≤2.0); * indicates fair predictive ability (1.4＜RPD≤1.8). The same below.



A. 原始光谱;B. 二阶导数;C. S-G 平滑;D. MSC。

A. Original spectral;B. Second derivative;C. S-G smoothing;D. MSC.

图 3 不同质量浓度黄曲霉毒素 B1 吸收系数光谱曲线与处理结果的比较

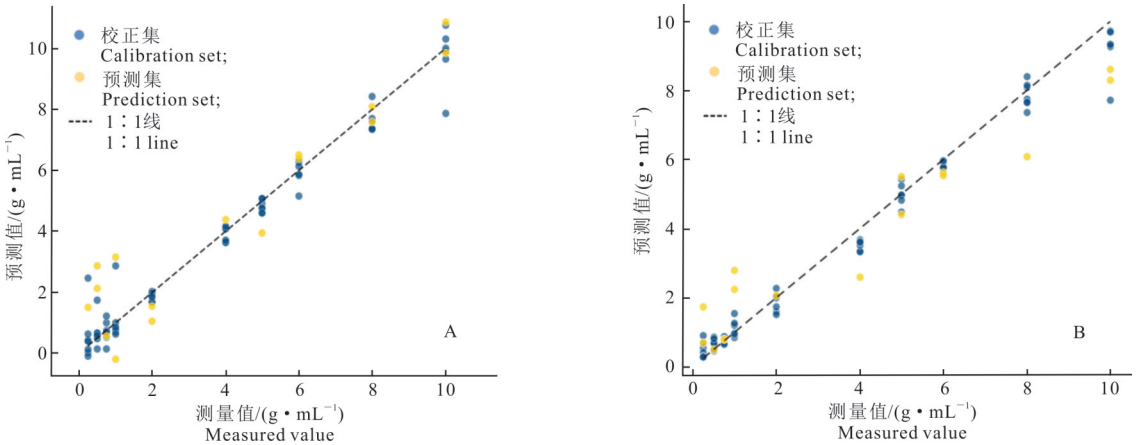
Fig. 3 Comparison of absorption coefficient spectra curve and processing results for AFB1 at different concentrations

2.4 不同质量浓度 AFB1 预测模型的构建

太赫兹光谱数据在采集过程中易受多重噪声干扰,噪声因素的叠加效应会使光谱数据中的特征峰产生展宽、偏移或湮没,导致特征提取与物质识别的难度显著增加。1D-CNN 是专门用于处理一维序列数据的深度学习模型,其通过卷积层来提取序列中的局部特征,并通过池化层来降低特征维度和增加特征振动强度,有效处理和预测一维数据的复杂模式。ResNet 通过引入残差连接或快捷连接来解决深度神经网络中的梯度消失问题,这种架构使得网络能够训练更深的层数,而不会显著增加训练难度或导致性能下降。

因此,本研究引入 1D-CNN 和 ResNet 对黄曲霉毒素 B1 振动特性和指纹峰进行进一步分析,模型的参数设置为:1D-CNN 卷积核大小为 3,卷积核数量为 128,随后连接窗口大小为 3 的最大池化,学习率为 0.001,早停耐心值为 15;ResNet 卷积核大小为 3,卷积核数量为 64,使用窗口大小为 2 的最大池化,学习率为 0.000 1,早停耐心值为 20。两种模型的最大训练轮数为 100,批次大小为 15,优化器为 Adam。

1D-CNN 与 ResNet 具有自动学习从输入数据中提取特征的能力,模型以 0.5~3.0 THz 波段的光谱作为输入,通过多层卷积与池化操作,自适应地对原始光谱进行局部感知,并利用深度学习捕捉邻近波段(±0.2 THz)的隐性特征,在不依赖人工设计变量筛选规则的前提下,显著提升提取能力,并得到如图 4 所示的回归曲线。



A. 一维卷积神经网络;B. 残差网络。

A. 1D-CNN;B. ResNet.

图 4 基于 1D-CNN 和 ResNet 的不同质量浓度黄曲霉毒素 B1 预测模型的回归曲线

Fig. 4 Regression curves of prediction models for AFB1 at different mass concentrations based on 1D-CNN and ResNet

表 2 为 1D-CNN 与 ResNet 的建模结果。由表 2 可以看出,预测集的 R_p^2 分别为 0.92 和 0.91,RPD 分别高达 3.73 和 3.32,二者均具有优秀的预测能力,为开发便携式检测设备提供了关键技术支撑。

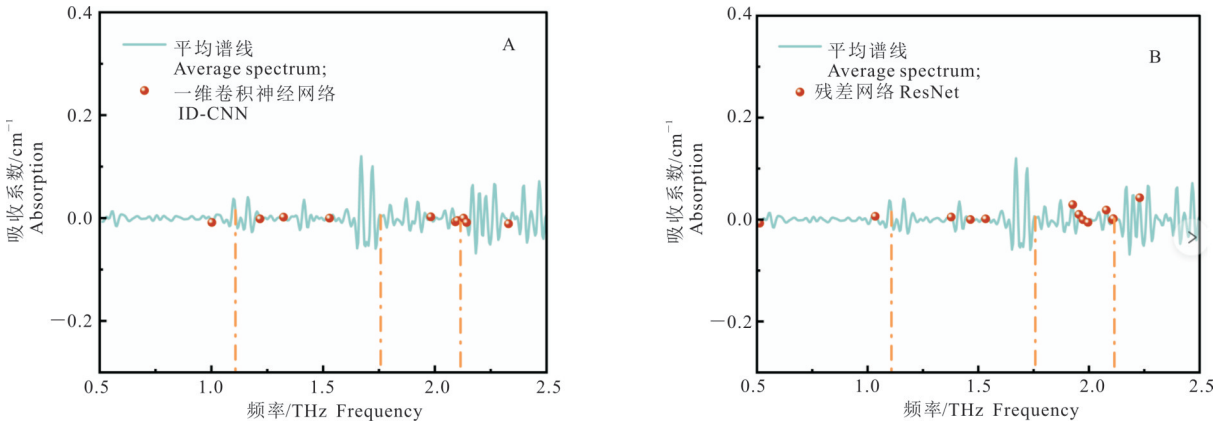
为进一步揭示 1D-CNN 在高维、多重共线性和低质量浓度样本数据统计建模中的优势,本研究绘制出 1D-CNN 与 ResNet 建模时特征频率的选择结果如图 5 所示。由图 5-A、B 可以看出,利用 1D-

CNN 和 ResNet 构建的 AFB1 质量浓度预测模型分别筛选了 10 个和 13 个特征频率，且均分布在 1.0，1.5 和 2.0 THz 附近，证实了二者特征峰的可靠性与准确性。进一步对比提取的特征点与理论吸收峰可知，通过 1D-CNN 与 ResNet 对预处理后的吸收系数谱进行特征挖掘，二者具有良好的对应关系，具体表现为：所提取的特征点几乎完全覆盖 2.114 THz 处的理论峰值，在 1.108 THz 处仅存在 0.05 THz 的轻微偏移。

表 2　基于 1D-CNN 与 ResNet 的不同质量浓度黄曲霉毒素 B1 的建模结果比较

Table 2　Comparison of models for AFB1 at different mass concentrations based on 1D-CNN and ResNet

建模方法 Feature extraction methods	均方根误差 Root mean square error		决定系数 Determination coefficient		剩余预测残差 Residual predictive deviation (RPD)	显著性 Significance
	校正集 Calibration set	预测集 Prediction set	校正集 Calibration set	预测集 Prediction set		
1D-CNN	0.87	0.77	0.93	0.92	3.73	****
ResNet	0.77	0.97	0.95	0.91	3.32	****



A. 一维卷积神经网络；B. 残差网络。

A. 1D-CNN; B. ResNet.

图 5　1D-CNN 和 ResNet 的特征频率选择结果

Fig. 5　Selected features from 1D-CNN and ResNet

对经二阶导数处理后的吸收系数谱，分别用连续投影算法（SPA）、蒙特卡洛无信息变量消除法（MCUVE）、竞争性自适应重加权采样（CARS）和随机蛙跳算法（SFLA）4 种特征提取方法进行特征提取，得到如表 3 所示的特征分布情况。对提取后得到的数据继续用 PLSR 进行建模，其性能指标如表 4 所示。结合分析表 3 和表 4 可以发现，CARS 提取的特征点与理论峰的距离偏差最小，中位数仅为 0.151 5，但由于特征数目显著少于其他 3 种特征提取方法，其对 AFB1 特征的提取可能存在疏漏现象，导致模型解释性表现最差，R_c^2 为 0.60，R_p^2 为 0.48。MCUVE 的特征提取结果优于 CARS，是因为该方法与理论峰偏移距离仅次于 CARS，但捕捉特征数目较多且较为稳定，同时其建模效果明显优于 CARS，具有中等预测能力；SFLA 在特征数目上具有极大的不确定性，虽然校正集和预测集的决定系数分别为 0.80 和 0.77，但过大的选取数目差异反映出其不稳定的特征提取能力，难以准确展现复杂光谱下 AFB1 的真实特征峰。SPA 的 RMSEP 最小，且校正与预测集决定系数 R^2 均高于其他方法，表明该方法筛选的特征频率在模型泛化性与解释性上表现最优。但结合表 3 可知，SPA 特征点与理论峰的偏移距离最大，其特征频率的筛选过度依赖校正集的统计分布，提取的特征数量最多。传统特征提取算法难以满足少量、准确挖掘 AFB1 特征频率的需求，而 1D-CNN 和 ResNet 分别仅筛选出 10 个和 13 个特征频率，但仍具有良好的预测能力。

综上可知，相较于传统特征提取方法难以有效区分噪声与真实信号的缺点，1D-CNN 与 ResNet 通过构建全连接层融合多尺度特征的方法，增强了关键频段的响应强度，建立起微弱信号与质量浓度的非线性映射关系，能有效抑制无关波动，精准捕捉光谱中的关键物理响应特征。该结果表明，1D-CNN 与 ResNet 有助于构建更全面的光谱-目标变量映射关系，改善模型对复杂光谱特征的解析能力。

表3 4种传统特征提取方法特征频率分布

Table 3 Characteristic frequency distributions of four traditional feature extraction methods

特征提取方法 Feature extraction methods	特征数目分布统计 Feature quantity distribution statistics		DFT理论峰距离偏差统计 DFT theoretical peak distance deviation statistics	
	中位数 Median	四分位数 Quartile	中位数 Median	四分位数 Quartile
连续投影算法 SPA	59	59～59	0.274 9	0.090 7～0.568 5
蒙特卡洛无信息变量消除法 MCUVE	47	42～48	0.179 4	0.081 5～0.399 6
竞争性自适应重加权采样 CARS	19	18～26	0.151 5	0.068 2～0.356 3
随机蛙跳算法 SFLA	42	16～53	0.215 3	0.116 2～0.319 4

表4 4种传统特征提取方法PLSR回归结果的比较

Table 4 Comparison of PLSR regression results of four traditional feature extraction methods

特征提取方法 Feature extraction methods	均方根误差 Root mean square error		决定系数 Determination coefficient		剩余预测残差 Residual predictive deviation (RPD)	显著性 Significance
	校正集 Calibration set	预测集 Prediction set	校正集 Calibration set	预测集 Prediction set		
连续投影算法 SPA	0.88±0.00	1.07±0.00	0.93±0.00	0.87±0.00	2.72±0.00	****
蒙特卡洛无信息变量消除法 MCUVE	1.38±0.13	1.96±0.10	0.80±0.39	0.70±0.03	1.84±0.10	**
竞争性自适应重加权采样 CARS	2.07±0.20	2.25±0.40	0.60±0.08	0.48±0.19	1.45±0.26	*
随机蛙跳算法 SFLA	1.45±0.41	1.51±0.12	0.80±0.12	0.77±0.04	2.10±0.17	***

3 讨 论

3.1 黄曲霉毒素B1的理论特征峰分析

黄曲霉毒素是一种具有强烈生物毒性的化学物质,其衍生物中黄曲霉毒素B1的毒性最大[22],因此对其进行精准检测具有十分重要的意义。利用光谱分析技术实现AFB1的精准检测,依赖于其对AFB1分子特征振动信号(即"分子指纹")的准确识别与解析,若能通过检测AFB1的特征峰,实现对痕量目标物的特异性响应,便可显著提升其定量检测能力。

目前,已有学者利用密度泛函理论(DFT)探究了物质特征与对应分子振动模式的联系。朱晨灵等[23]和WU等[24]结合DFT计算,给出了黄曲霉毒素B1拉曼特征峰所对应的分子振动模式,并分别利用PC@AuNPs与银纳米棒阵列基底进行试验观测,所获得的显著振动峰均与理论预测结果高度吻合。在此基础上,基于太赫兹光谱和DFT理论,本研究分析了AFB1在0.1～5.0 THz的吸收峰,理论计算表明吸收谱内存在6个较明显的吸收峰,并利用Gauss View 6揭示了AFB1分子特征峰的分子振动模式,发现吸收峰值的位置与AFB1分子骨架及官能团的振动形式密切相关,其中1.108 THz处的特征峰主要受呋喃环C8—C9键影响,1.767 THz处的特征峰主要受到甲氧基O—CH_3中C—O键与相邻羰基C=O的协同作用,2.114 THz处的特征峰则是由双呋喃环系统的交替收缩—扩张运动引起的。为进一步验证AFB1的指纹峰,本研究对AFB1标准品的THz光谱数据进行采集,发现1.108,1.767和2.114 THz处振动模式与试验光谱的匹配度较高,验证了C=O/C—O振动模式作为AFB1特异性指纹峰的可靠性。其中,2.114 THz处特征峰的发现与张成[25]获得的特征峰位置接近,即在2.13 THz处出现了强度较小的吸收峰,但张成[25]将其判定为聚乙烯吸收峰。

3.2 低质量浓度黄曲霉毒素B1预测模型构建

太赫兹光谱数据的高维度及其波段间的强相关性蕴含过拟合与计算冗余风险,且太赫兹光谱能量较低,这虽可减少对样品的破坏但会对特征挖掘造成极大影响,难以实现对低质量浓度待测样品的精准预测。因此,从光谱中提取有效信息,识别对物质成分变化响应显著的指纹区间成为太赫兹检测的关键步骤。

廉飞宇等[26]研究显示,AFB1溶液太赫兹时域谱的吸收系数峰值降低与其质量浓度升高相关。本研究同样发现,在质量浓度为0.25～6.00 μg/mL时,随着AFB1质量浓度增加,对应的电压峰值时间延迟减小;8.00和10.00 μg/mL时域峰值的时间延迟虽未继续减小,但仍可区分,可能与样品中AFB1分布不均及点检测偏差有关。总之,AFB1时域谱特征峰值相近,不同质量浓度间差异不明显,这与赵鹏广[27]在大豆油体系中的观测结果一致。

除线性分析外,人工智能和光谱分析技术的结

合发展为特征峰识别与低质量浓度物质的检测提供了新途径。秦建平[28]研究发现，AFB1溶液吸收系数谱无显著吸收峰且不同质量浓度谱线重叠，因此用LS-SVM在0.5～1.5 THz频段建模预测。本研究获得的AFB1-聚乙烯压片原始吸收系数谱与之相似。为提取有效光谱信息，采用1D-CNN与ResNet进行特征提取，结果显示特征峰主要分布于1.0，1.5和2.0 THz附近，覆盖2.114 THz处的理论峰值，在1.108 THz处仅偏移0.05 THz，2种算法预测集的决定系数均大于等于0.91，预测能力良好。结合理论计算可知，呋喃环C8—C9键伸缩振动和双呋喃环系统的交替收缩—扩张运动为解析AFB1特征峰的关键影响因素，该结果与李利龙等[29]在乙腈溶剂中观测到的AFB1特征吸收峰（0.50，1.05和1.35 THz）相符。相比连续投影算法（SPA）、蒙特卡洛无信息变量消除法（MCUVE）、竞争性自适应重加权采样（CARS）和随机蛙跳算法（SFLA）等传统方法（预测集决定系数最高0.87），深度学习算法表现出更优的特征挖掘与复杂光谱解析能力。

在AFB1侵染的小麦压片样本中，特征点于1.767 THz处高度重叠，部分覆盖2.114 THz，初步验证了该方法在复杂食品基质中特异性检测AFB1的可行性[30]，为拓展至花生等作物检测奠定了基础。明确AFB1特征峰是开发便携式设备的前提，目前的采集设备为台式精密仪器，未来设备开发需采用密封且充有干燥空气或氮气的紧凑光路，并集成微型干燥器以抑制水汽干扰，提升检测稳定性与毒素提取效率。此外，针对不同基质的光谱背景差异，可引入校正算法以应对实际检测中的光谱偏移。

4　结　论

通过理论计算、试验验证与机器学习方法的协同优化，探索了黄曲霉毒素B1的定量检测方法及其指纹特征验证，揭示了AFB1在太赫兹频段的特异性吸收机制，并验证了深度学习在复杂光谱解析中的优势。

1）通过密度泛函理论结合仿真软件，对黄曲霉毒素B1分子进行结构优化并计算了振动频率，揭示了其在0.1～5.0 THz频段的理论吸收特征，解析了其分子机制，并通过太赫兹时域光谱仪对AFB1标准品进行试验验证，结果表明，0.5～3.0 THz实测特征峰与理论预测结果高度匹配，但部分峰位存在轻微偏移。

2）分别使用S-G平滑、移动平滑、归一化、SNV、MSC、一阶导数和二阶导数等7种方法对所获得的光谱进行预处理并构建PLSR模型，研究了不同预处理方法对AFB1太赫兹光谱回归建模性能的影响，结果表明，使用二阶导数预处理方法时建模效果最佳。

3）通过对比1D-CNN、ResNet以及4种传统特征提取方法对太赫兹特征峰的频率选择与理论吸收峰的对应关系，得出1D-CNN与ResNet在建立微弱信号与AFB1质量浓度的非线性映射关系时具有更大优势。

本研究将密度泛函理论与太赫兹时域光谱技术相结合，实现了AFB1分子振动模式与太赫兹吸收特征的精准关联；提出基于1D-CNN的端到端光谱解析框架，突破了传统方法对微弱信号表征能力的限制，明确了其在复杂光谱非线性建模中的普适优势。该结果为AFB1的检测提供了新方法，在食品安全监管领域具有重要应用价值。

[参考文献]

[1] 苏迎利，马挺军，魏朝俊. 介质阻挡等离子体降解乙腈溶液黄曲霉毒素B_1规律解析[J]. 中国食品学报，2024，24(8)：473-485.
SU Y L，MA T J，WEI C J. Degradation mechanism of aflatoxin B_1 in acetonitrile solvent by dielectric barrier discharge plasma[J]. Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology，2024，24(8)：473-485.

[2] 谢慧，高蕾，赵丹丹，等. 生物法降解黄曲霉毒素B_1的研究进展[J]. 食品与发酵工业，2020，46(24)：249-256.
XIE H，GAO L，ZHAO D D，et al. Research progress in biodegradation of aflatoxin B_1[J]. Food and Fermentation Industries，2020，46(24)：249-256.

[3] SINGH N，SHARMA B A，MANDAL K，et al. Sodium alumino silicate (SAS) neem nanocomposite：a novel seed storage tool against toxigenic *Aspergillus flavus* causing deterimental effects on seeds health and quality of rice[J]. Food Control，2025，168：110908.

[4] HUANG X R，ZHANG Q，LU B Y，et al. Time-resolved fluorescence/visual dual-readout nanobiosensors for the detection of aflatoxin B1，benzo(α)pyrene and capsaicin in edible oils using a miniaturized paper analytical device[J]. Food Chemistry，2025，467：142233.

[5] 王李惠，裴阳阳，陈晓茹，等. 1株黄曲霉毒素B_1去除菌的鉴定、去除条件优化及降解途径的转录组学分析[J]. 食品科学，2025，46(12)：137-147.
WANG L H，PEI Y Y，CHEN X R，et al. A strain capable of reducing aflatoxin B_1：identification，optimization of removal conditions and transcriptomic analysis of degradation pathways[J]. Food Science，2025，46(12)：137-147.

[6] YANG F J，ZHANG L，ZHANG Y Q，et al. Culture-depen-

dent and culture-independent approaches to reveal the aflatoxin B1-producing fungi in Pixian Doubanjiang, a typical condiment in Chinese cuisine[J]. Food Control, 2023, 149: 109711.

[7] 张红涛,王龙杰,谭联,等. 太赫兹光谱技术在食品污染检测中的研究进展[J]. 光谱学与光谱分析,2024,44(8):2120-2126.
ZHANG H T, WANG L J, TAN L, et al. Research progress of terahertz spectroscopy technology in food contamination detection[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2024, 44(8): 2120-2126.

[8] 涂春蓉,董晓娟,马良,等. 分散液液微萃取/荧光分光光度法快速测定乳制品中的黄曲霉毒素M_1[J]. 分析测试学报,2014,33(9):1062-1067.
TU C R, DONG X J, MA L, et al. Determination of aflatoxin in Dairy Products by dispersive liquid-liquid microextraction and fluorescence spectrophotometry[J]. Journal of Instrumental Analysis, 2014, 33(9): 1062-1067.

[9] 毕婷婷,张海红,田洪芸,等. 花生及其制品中黄曲霉毒素B_1胶体金快速检测方法的建立[J]. 粮油食品科技,2023,31(3):127-136.
BI T T, ZHANG H H, TIAN H Y, et al. The rapid determination of aflatoxin B_1 in peanut and its products by colloidal gold method[J]. Science and Technology of Cereals, Oils and Foods, 2023, 31(3): 127-136.

[10] YAN T T, ZHU J, LI Y, et al. Development of a biotinylated nanobody for sensitive detection of aflatoxin B1 in cereal via ELISA[J]. Talanta, 2022, 239: 123125.

[11] 黄周梅,武旭悦,黄金发,等. 基于金属有机骨架(ZIF-8)的酶联免疫法灵敏检测米粉中的黄曲霉毒素B_1[J]. 现代食品科技,2022,38(3):299-306,327.
HUANG Z M, WU X Y, HUANG J F, et al. Sensitive detection of aflatoxin B_1 in rice flour by enzyme-linked immunoassay based on metal organic framework (ZIF-8)[J]. Modern Food Science and Technology, 2022, 38(3): 299-306, 327.

[12] 梁川,戚淑叶,李曦染,等. 太赫兹时域光谱检测高油玉米油分初探[J]. 食品安全质量检测学报,2014,5(3):730-735.
LIANG C, QI S Y, LI X R, et al. Preliminary study on terahertz time-domain spectroscopy in oil detection of high oil maize[J]. Journal of Food Safety and Quality, 2014, 5(3): 730-735.

[13] 刘翠玲,胡莹,吴静珠,等. 基于太赫兹衰减全反射技术的花生霉变程度判别[J]. 农业机械学报,2019,50(4):333-338,355.
LIU C L, HU Y, WU J Z, et al. Discrimination of peanut mildew degree based on terahertz attenuated total reflection spectroscopy[J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2019, 50(4): 333-338, 355.

[14] 吴静珠,李晓琪,孙丽娟,等. 太赫兹时域光谱及成像技术在农作物品质检测中的应用研究进展[J]. 光谱学与光谱分析,2022,42(2):358-367.
WU J Z, LI X Q, SUN L J, et al. Advances in the application of terahertz time-domain spectroscopy and imaging technology in crop quality detection[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022, 42(2): 358-367.

[15] 孙一健,王继芬. 太赫兹时域光谱技术在食品、药品和环境领域中的应用研究进展[J]. 激光与光电子学进展,2022,59(16):22-31.
SUN Y J, WANG J F. Research progress of terahertz time-domain spectroscopy in food, drugs, and environment[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(16): 22-31.

[16] 胡其枫,蔡健. 基于深度学习的太赫兹时域光谱识别研究[J]. 光谱学与光谱分析,2021,41(1):94-99.
HU Q F, CAI J. Research of terahertz time-domain rime-domain spectral identification based on deep learning[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41(1): 94-99.

[17] GE H Y, JIANG Y Y, LIAN F Y, et al. Quantitative determination of aflatoxin B1 concentration in acetonitrile by chemometric methods using terahertz spectroscopy[J]. Food Chemistry, 2016, 209: 286-292.

[18] 张丽华,相启森,李顺峰,等. 基于支持向量机的近红外光谱技术鉴别掺假牛肉[J]. 西北农林科技大学学报(自然科学版),2016,44(12):201-205.
ZHANG L H, XIANG Q S, LI S F, et al. Identification of adulteration of minced beef with near infrared spectroscopy based on support vector machine[J]. Journal of Northwest A&F University (Natural Science Edition), 2016, 44(12): 201-205.

[19] 胡军,吕豪豪,乔鹏,等. 基于太赫兹成像检测技术与特征提取方法结合巴旦木饱满度检测方法研究[J]. 光谱学与光谱分析,2024,44(7):1896-1904.
HU J, LÜ H H, QIAO P, et al. Research on almond plumpness detection method based on terahertz imaging technology and feature extraction method[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2024, 44(7): 1896-1904.

[20] 袁莹,王雪峰,石蒙蒙,等. 融合光谱反射率与时频特征的坡垒叶绿素含量估测模型研究[J]. 西北农林科技大学学报(自然科学版),2023,51(11):97-105.
YUAN Y, WANG X F, SHI M M, et al. Estimation of chlorophyll content in *Hopea hainanensis* based on fused spectral reflectance and time-frequency features[J]. Journal of Northwest A&F University (Natural Science Edition), 2023, 51(11): 97-105.

[21] 朱立江,吴玫晓,闫雪清. 基于THz-TDS技术定量分析煤炭中的灰分和挥发分[J]. 太赫兹科学与电子信息学报,2024,22(9):975-982.
ZHU L J, WU M X, YAN X Q. Quantitative analysis of ash and volatile in coal based on THz-TDS[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2024, 22(9): 975-982.

[22] 娄海伟,杨创明,赵玉,等. 产漆酶食用菌的筛选及食用菌漆酶降解黄曲霉毒素B_1的研究进展[J]. 食品科学,2023,44(1):392-403.
LOU H W, YANG C M, ZHAO Y, et al. Advances in screening of edible fungi capable of secreting laccase and degradation of aflatoxin B_1 by laccase from edible fungi[J]. Food Science, 2023, 44(1): 392-403.

(下转第99页)