

营养饮料内主成分分析及判别分析

分析采用三维荧光指纹技术，以获取该成分特有的三维荧光光谱（荧光指纹），并对有特征的多个荧光强度进行多变量分析，未来将这一分析技术应用到食品、医药等领域的“产品分类”、“优良品和不良品分类”中。

现在为大家介绍，采用PARAFAC¹⁾法对市售营养饮料进行分析，通过成分推测和主成分分析结果进行分类的应用示例。实验中，F-7100型荧光分光光度计搭配可一次检测多个样品的微孔板附件以及可过滤散射光中的高次光的自动滤光器附件使用。



F-7100 型荧光分光光度计

1) PARAFAC: 使用平行因子分析, Solo^oR8.1.1 (Eigenvector Research, Inc., USA)

利用PARAFAC分析推测营养饮料成分

✓ 1L样品中添加100μg的硫酸奎宁 (QS: Quinone Sulphate)，样品的荧光强度即可达标 (FL No.150002)。

✓ 营养饮料主要包括药物、保健品、能量饮料（清凉饮料）。在此我们对保健品、能量饮料的每个样品均进行了三维荧光光谱测量（图1）。随后，通过PARAFAC分析进行三维光谱谱峰分离，依据以往报告推测样品成分。

营养饮料的三维荧光光谱及PARAFAC分析结果

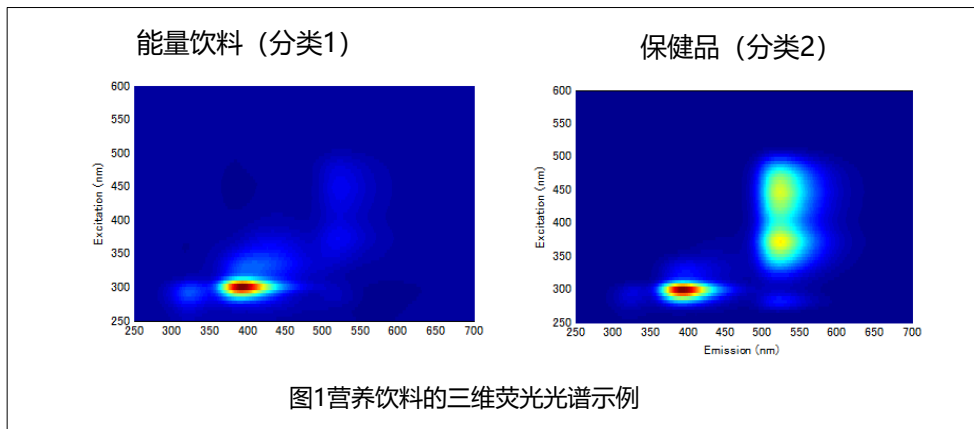


图1营养饮料的三维荧光光谱示例

测量条件

仪器：F-7100型荧光分光光度计
 激发侧狭缝：5nm
 发射侧狭缝：5nm
 扫描速度30,000nm/min
 响应：自动
 光电倍增管电压：500V
 光谱校正：ON

PARAFAC分析

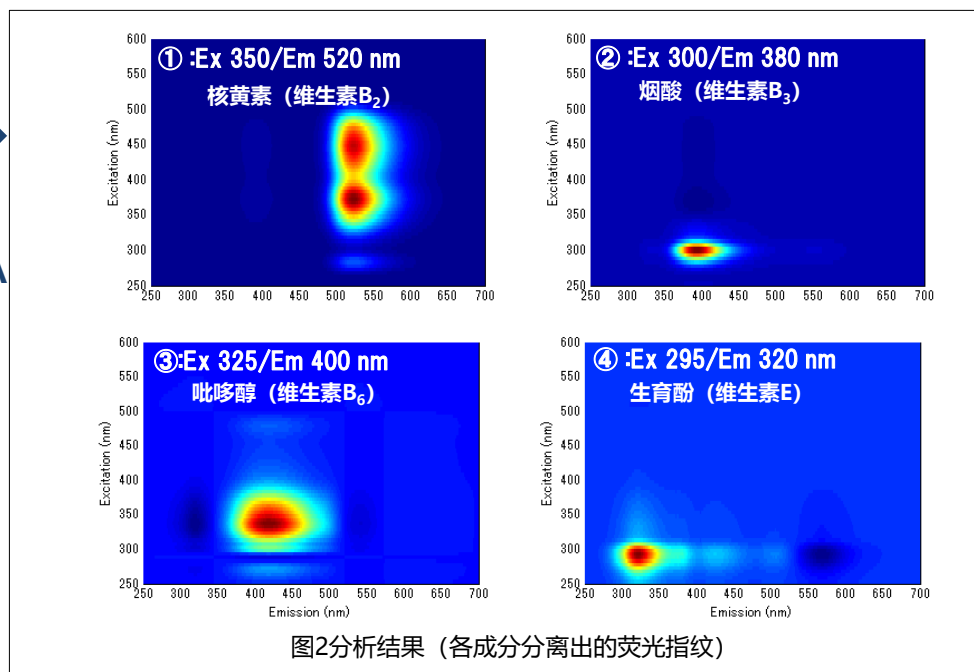


图2分析结果（各成分分离出的荧光指纹）

由PARAFAC分析结果可知，该样品至少含有4种成分。根据以往报告中各成分的激发和发射波长数据，推测出该样品的成分如下。

- ①核黄素（维生素B₂）
- ②烟酸（维生素B₃）
- ③吡哆醇（维生素B₆）
- ④生育酚（维生素E）

营养饮料成分的主成分分析

✓依据上述PARAFA分析结果，对市售营养饮料（11种）分别进行3次三维荧光光谱测量，由此推测出样品组成成分。对于推测出的①核黄素（维生素B₂）、②烟酸（维生素B₃）进行主成分分析（根据主要多变量分析法²⁾）及判别分析。分析时，使用多变量分析软件JMP^R。

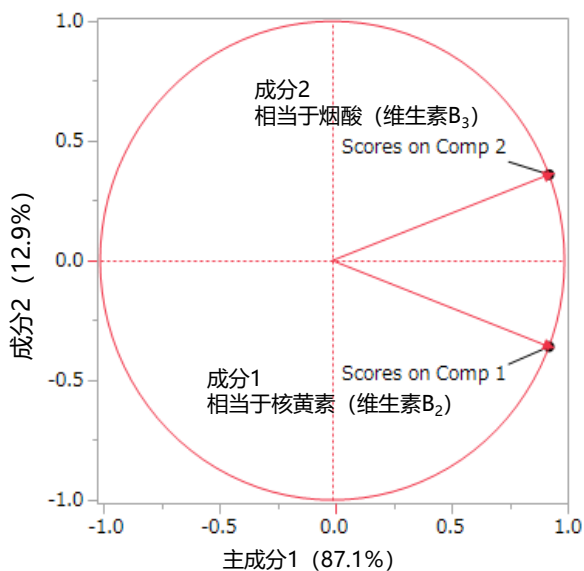
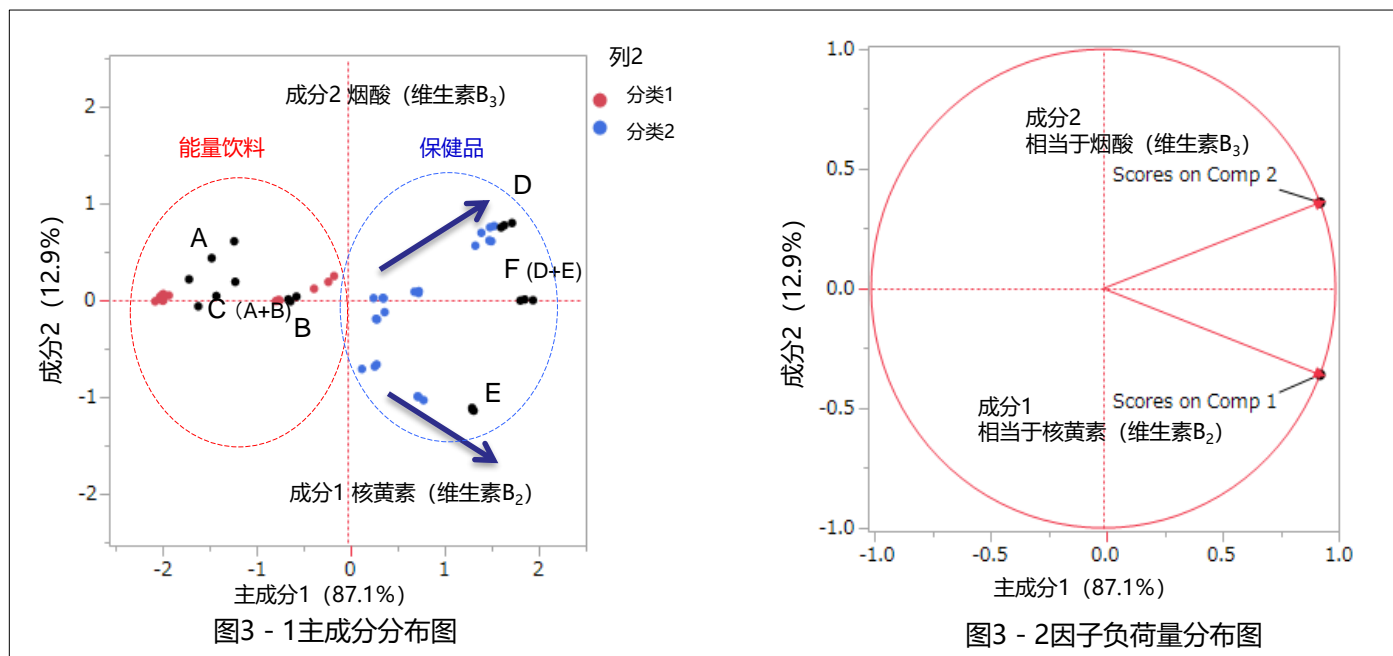
✓对属于能量饮料（分类1）的营养饮料（A、B）以及将A、B按1：1比例混合的样品（C）进行分析。此外，还对属于保健品（分类2）的营养饮料（D、E）以及将D、E按1：1比例混合的样品（F）进行分析。

2) JMP^R12.2(SAS Institute Inc.,Cary,NC,USA)

3) 主成分分析：将多变量数据转换为低维度数据的方法。

判别分析：利用已知的分类标准，对未知样品进行分类的方法。

■主成分分析



✓可根据主成分分析结果，确认各样品的所属类别。因子负荷量分布图（图3-2）矢量显示成分1和成分2比例，由此可知，图3-1矢量方向上的成分浓度较高。

✓待测样品A、B、C被划分为分类1，D、E、F被划分为分类2，以此确定待测样品分别为能量饮料和保健品。

【测量用附件】

微孔板附件
(5J0-0118)



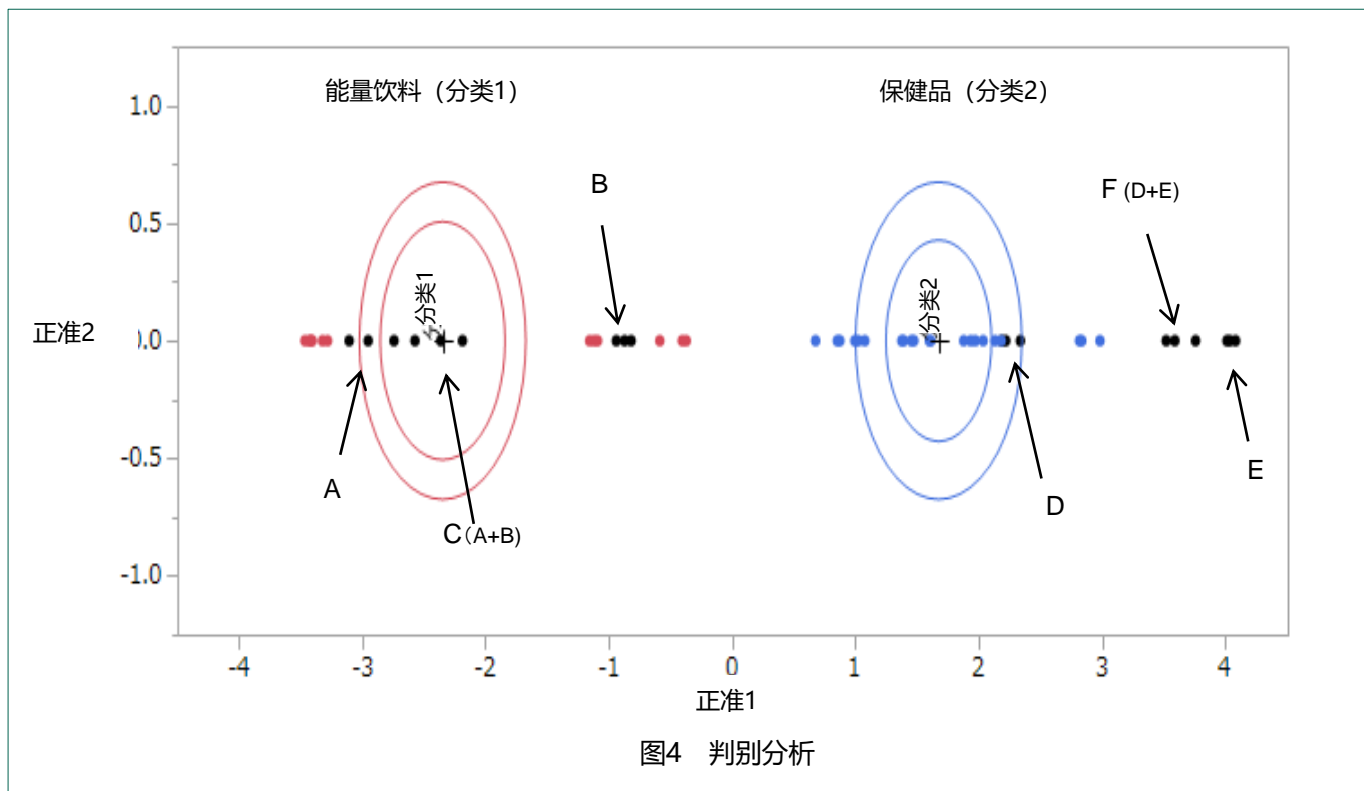
自动滤光器附件
(5J0-0157)



根据营养饮料成分的判别分析进行分类

- ✓主成分分析完成后，进行判别分析。判别分析和主成分分析相同，均使用多变量分析软件JMP[®]。
- ✓和主成分分析时使用的样品相同，样品为属于能量饮料（分类1）的营养饮料（A、B）以及将A、B按1：1比例混合的样品（C），和属于保健品（分类2）的营养饮料（D、E）以及将D、E按1：1比例混合的样品（F）。

■ 判别分析



- ✓依据判别分析结果可知，市售营养饮料以横轴正准1为分界线划分能量饮料（分类1）和保健品（分类2）。经确认，营养饮料A、B、C被划分为能量饮料（分类1），D、E、F被划分为保健品（分类2）。

注意1：本资料中刊登的数据仅为测试示例，不保证性能。

注意2：依据日本《药机法》和所含成分类别，营养饮料可分为一般药物和保健品两种。

本方法旨在用于研究开发或工程管理等，与日本《药机法》中规定的分类标准有所不同。

【KEY WORDS】

生物·医学·食品·制药、食品、荧光光度计、F-7000、F-7100、F-2700、硫酸奎宁、荧光强度标准化、PARAFAC、多变量分析、荧光指纹、Food、Quinine Sulfate Dihydrate, FL Intensity Standardization