中国科学: 化学 2024 年 第 54 卷 第 6 期: 961 ~ 967
SCIENTIA SINICA Chimica chemcn.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

论 文

Tchebichef图像矩方法在B族维生素中多组分同时定量分析中的应用

殷博[1,2,3], 蒋蓉[1], 冶梅[1], 赵玉霞[1,2], 朱继华[1,2,3], 张明锦[1,2,3*]

1. 青海师范大学化学化工学院, 西宁 810016
2. 青海省环境功能材料先进技术与应用重点实验室, 西宁 810016
3. 青海省人民政府-北京师范大学高原科学与可持续发展研究院, 西宁 810016
*通讯作者, E-mail: zhangmingjin@qhnu.edu.cn

收稿日期: 2023-12-04; 接受日期: 2024-01-14; 网络版发表日期: 2024-04-29
青海师范大学中青年科研基金(编号: KJQN2022012)和青海省"昆仑英才·高端创新创业人才"项目资助

摘要 化学结构相似的目标组分光谱之间信号重叠现象比较严重, 使得传统的分离定量分析方法在复杂体系多组分定量分析方面仍有不足之处. 化学计量学方法能够实现在复杂体系中分离目标组分特征信息, 排除干扰, 从而实现多组分同时定量分析. 本研究利用Tchebichef图像矩方法基于三维荧光图谱建立了B族维生素中三种组分Vitamin B1 (VB1)、Vitamin B2 (VB2)和Vitamin B6 (VB6)的定量模型, 且三个模型均具有满意的相关系数(R^2)、调整相关系数(R^2_{adj})以及均方根误差(RMSE). 同时, 三个模型的预测相关系数(R^2_p)均在0.9379以上, 表明建立的定量模型具有较高的准确性、可靠性以及良好的预测能力. 最后, 该定量模型被成功应用于不同厂家生产的复合维生素B片中三种组分的测定. 由此可见, Tchebichef图像矩方法能够很好地解决多目标组分的信号重叠与干扰, 为复杂体系中多组分的同时定量分析提供了重要基础.

关键词 Tchebichef图像矩, 信号重叠, 复杂体系, 定量分析, 多组分

1 引言

B族维生素是维持人体正常活动所必需的营养物质, 在预防心血管疾病和降低同型半胱氨酸浓度等方面发挥着重要作用[1,2]. 维生素B1 (硫胺素, VB1)、维生素B2 (核黄素, VB2)和维生素B6 (吡哆醇, VB6)是B族维生素的重要组成部分. VB1是一种含硫化合物, 它以焦磷酸盐的形式作为辅酶参与细胞过程. 临床研究表明, 缺乏VB1会导致厌食症及神经紊乱, 最终导致虚弱、心力衰竭和死亡. VB2是正常细胞生长发育所必需的物质. VB6通常参与氨基酸代谢、碳水化合物和脂肪代谢以及血红蛋白的形成. 这三种成分的结构非常相似, 产生的信号非常接近, 导致三种成分的同时定量分析具有很大难度. 传统的定量分析方法, 包括电化学方法[3,4]、液相色谱-质谱联用法[5]和电喷雾离子化串联质谱法[6]等, 均有一定的局限性, 如仪器复杂、样品预处理繁琐、操作复杂、选择性不高等. 随着纳米技术的发展, 一些纳米材料如荧光纳米粒子[7]、磁性纳米材料[8]和贵金属纳米材料[9,10]等被应用于B族维生素的检测, 但受限于组分信号之间的相

引用格式: Yin B, Jiang R, Ye M, Zhao Y, Zhu J, Zhang M. Application of Tchebichef image moment method for simultaneous quantitative analysis of multiple components in B-vitamins. *Sci Sin Chim*, 2024, 54: 961–967, doi: 10.1360/SSC-2023-0234

© 2024 《中国科学》杂志社

互干扰, 基本只能用于单一组分的定量分析, 无法进行B族维生素中多组分的同时定量分析. Duenchay等[10]通过构建一种基于金纳米颗粒(AuNPs)的比色传感平台实现了尿液样本中VB1的准确测定, 检测限达到3.002 ppb. 该传感器精度高、灵敏度好、准确度高, 可有效地用于尿液中VB1的分析. Wang等[7]将合成的蓝色荧光铜纳米粒子(F-CuNPs)作为荧光探针成功构建了同步荧光传感器, 实现了VB2的灵敏测定, 线性范围为0.51~34.64 nM, 检测限达到0.25 nM. 但以上方法均未能实现B族维生素中多种组分的同时测定. 因此, 发展简便、可靠、快速的方法来同时测定B族维生素中多组分的含量很有必要.

化学计量学方法在分析信号处理方面具有明显的优势, 在多组分定量分析领域有着广泛的应用[11~13]. de Oliveira Neves等[14]从理论和实验角度研究了多元曲线分辨-交替最小二乘法(MCR-ALS)在定量分析中的应用, 为多元线性回归方法在定量分析领域的应用提供了重要的理论依据. 矩不变量由于其出色的图像描述能力、多分辨性以及矩不变性等特性, 成为图像处理方面的有力工具[15,16]. 切比雪夫矩(Tchebichef moment)方法能够有效地处理噪声和重叠信号的影响, 具有良好的多分辨性以及全局图像特征提取能力. 翟红林课题组利用Tchebichef图像矩(Tchebichef image moment, TiM)方法实现了对复杂样品的定性定量分析, 在色谱[17,18]和光谱[19,20]分析中均有广泛应用. Wang等[21]采用HPLC-PAD图谱结合Tchebichef图像矩方法对14批蒲地蓝消炎片进行聚类分析, 建立了快速、准确的中成药质量评价新方法. 通过对样本生产厂家以及批次间的相似性分析, 进一步证明了该方法的可靠性. 此外, 我们利用三维荧光光谱结合Tchebichef图像矩方法建立了谷胱甘肽、半胱氨酸和同型半胱氨酸三种硫醇小分子的定量模型, 实现了癌细胞中三种硫醇的同时测定[22]. 本文基于B族维生素的三维荧光光谱利用TiM方法进行了3种组分的同时定量分析, 结合逐步回归方法建立了三种目标组分的线性定量模型, 实现了复合B族维生素药片中VB1、VB2和VB6三种组分的同时测定.

2 实验部分

2.1 数据集

本文中使用的数据集来源于文献[23], 该组数据集包含23个标准样本和20个实际样本. 每个标准样本由不同浓度的3个目标组分(VB1、VB2和VB6)组成. 在实验过程中所测定的发射波长的范围为350.0~670.0 nm (波长间隔为0.1 nm, 波长点数为3201), 激发波长范围为250.0~500.0 nm (波长间隔为2.0 nm, 波长点数为126). 上述样品的三维荧光激发发射矩阵(excitation-emission matrix, EEM)数据存放于大小为3201 (发射波长点数) × 126 (激发波长点数) × 43 (样本数)的三维数据阵中.

2.2 实验方法

TiM是基于Tchebichef多项式的离散正交矩函数, 具有很强的图像特征提取能力以及多分变性. 关于TiM方法详细的介绍可参考文献[18,24,25]. Tchebichef矩的计算简要描述如下: 对于大小为$N \times M$的图像, 当阶数为$(n + m)$时, Tchebichef矩($T_{n,m}$)被定义为

$$T_{n,m} = \frac{1}{\rho(n,N)\rho(m,M)} \sum_{x=0}^{N-1} \sum_{y=0}^{M-1} t_n(x) t_m(y) f(x,y) \quad (n = 0,1,2\ldots,N-1;\ m = 0,1,2\ldots,M-1) \tag{1}$$

从式(1)中可以看出, Tchebichef矩是在图像$f(x,y)$的离散区域内直接定义的, 在计算时不需要转化图像坐标, 因此不会产生数值近似引起的误差[25].

在本研究工作中, 采用多元逐步回归方法通过选择合适的独立变量($T_{n,m}$)来建立逐步回归模型. 模型方程形式如下:

$$Y = A_0 + A_1 \times X_1 + A_2 \times X_2 + \ldots + A_k \times X_k \tag{2}$$

方程(2)中自变量X是基于三维荧光光谱计算得到的Tchebichef矩值($T_{n,m}$), 应变量Y为B族维生素中三种组分的浓度, A_0是常数项, A_1, A_2, …, A_k为自变量对应的系数.

3 结果与讨论

3.1 三维荧光光谱研究

B族维生素是一类水溶性小分子化合物, 由生物活性相似但化学成分不同的多种化合物组成. VB1、VB2和VB6作为B族维生素的重要组成部分, 其分子结构非常相似(图1), 导致这三种组分的荧光信号非常接近, 同时测定时必然会发生相互干扰.

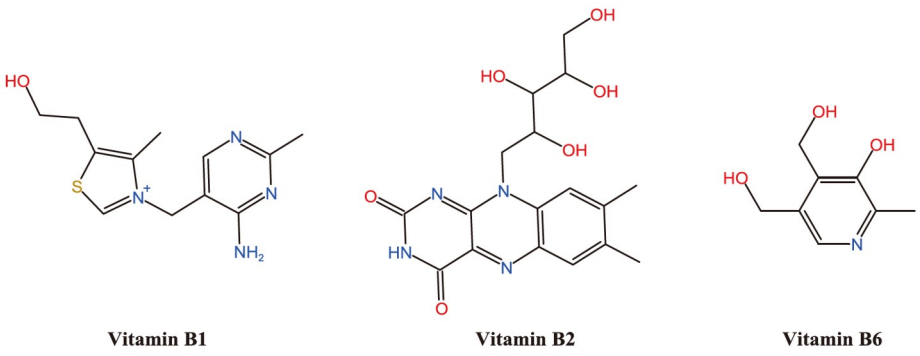


图 1　B族维生素中VB1、VB2和VB6的分子结构图(网络版彩图)
Figure 1　The chemical structures of VB1, VB2 and VB6 in vitamin B (color online).

三维荧光图谱是由激发波长、发射波长以及荧光强度组成的矩阵光谱，包含着更全面、丰富的化学信息. 三种目标组分的三维荧光图谱如图2所示. 从图中可以看出, VB1的三维荧光图中含有一组峰, VB2的三维荧光图中含有三组峰，VB6的三维荧光图中含有一组峰，且每个组分的荧光图中均含有散射信号. 图2d是混合样本的三维荧光图谱，从图中可以看出这三种组分信号部分重叠且存在散射干扰. 由此可见，即使采用三维荧光图谱，使用常规定量分析法也很难达到多组分同时定量分析的目的. 因此，本文基于目标组分的三维荧光图谱，利用TiM方法来研究多组分的同时定量分析.

3.2　Tchebichef矩值的计算

TiM方法具备强大的多分辨性和特征描述能力, 能够基于目标组分的三维荧光图谱计算得到Tchebichef矩值($T_{n,m}$)来处理多种组分的信号. 从式(1)可以看出，可以通过阶数(n,m)来计算$T_{n,m}$. 当阶数为(n,m)时, 可以得到(n + 1) × (m + 1)个Tchebichef矩值($T_{n,m}$), 这些矩值包含图谱中的特征信息. 于是, 我们计算了不同阶数下的$T_{n,m}$, 并重构出混合样本的三维荧光图谱，如图3所示. 随着阶数的改变，重构出的图像也有明显的变化趋势. 当阶数为(20,2)时，图像没有明显的组分信息. 随阶数的递增，重构图像中逐渐出现了组分信息. 直到阶数为(60,7)时，能够很好地重构出三种组分信息. 由此可见，选择较低的阶数可能导致无法提取原始图像的所有特征信息，然而并不是选取的阶数越高越好. 随着阶数的升高, 噪声信号开始增强, 且阶数越高, 矩值计算就越慢. 因此, 本实验选取的最大阶数为(60,7)，计算得到488个Tchebichef矩值. 这些矩值包含三种目标组分的特征信息，为建立定量分析模型提供基础.

3.3　建立定量模型

将计算得到的488个$T_{n,m}$随机划分为训练集和测试集，训练集用于建立模型，测试集用于模型性能的验证. 随后采用逐步回归方法来建立定量模型，逐步回归方法基于自变量的显著性来选择合适的变量，而自变量的显著性则由各个线性回归模型的F检验值来决定[26]. 本文采用逐步回归的方法从488个$T_{n,m}$中选取特定的矩值作为自变量来建立线性模型. 因此，我们建立了$T_{n,m}$与各个目标组分浓度之间的定量模型. 各个

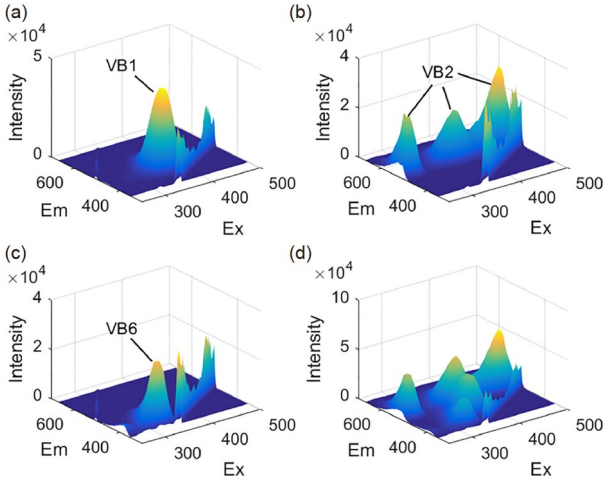


图 2　VB1 (a), VB2 (b), VB6 (c), 以及混合标准样本(d)的三维荧光光谱图(网络版彩图)
Figure 2　Fluorescence three-dimensional spectrum of (a) VB1, (b) VB2, (c) VB6 and (d) mixed standard sample (color online).

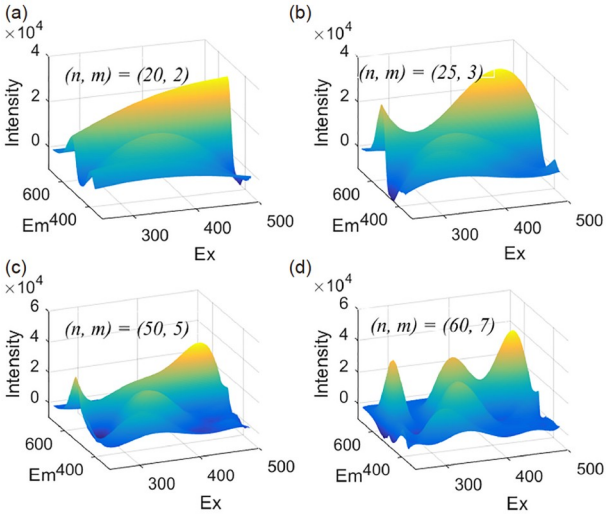


图 3 不同阶数下重构出的混合标准样本的三维荧光光谱图. (a) 阶数为(20, 2)时的三维荧光光谱重构图; (b) 阶数为(25, 3)时的三维荧光光谱重构图; (c) 阶数为(50, 5)时的三维荧光光谱重构图; (d) 阶数为(60, 7)时的三维荧光光谱重构图(网络版彩图)

Figure 3 Fluorescence three-dimensional spectrum of mixed standard sample under different orders. Fluorescence three-dimensional spectrum at order (a) (20,2), (b) (25, 3), (c) (50, 5), (d) (60, 7) (color online).

组分建立的模型如下.

对VB1建立的模型:

$$C_{\mathrm{VB1}} = -1.56\times10^{-2} + 6.63\times10^{-5}\times T_{2,2} - 5.19\times10^{-5}\times T_{3,2} + 3.21\times10^{-4}\times T_{38,6} - 4.22\times10^{-4}\times T_{58,2}$$

对VB2建立的模型:

$$C_{\mathrm{VB2}} = 1.21\times10^{-1} + 3.36\times10^{-4}\times T_{12,0} - 4.29\times10^{-4}\times T_{31,3} + 3.64\times10^{-4}\times T_{33,4} - 1.55\times10^{-4}\times T_{41,4} + 6.81\times10^{-4}\times T_{51,0}$$

对VB6建立的模型:

$$C_{\mathrm{VB6}} = -1.59\times10^{-1} + 5.44\times10^{-4}\times T_{1,1} - 7.00\times10^{-4}\times T_{4,2} - 0.20\times10^{-2}\times T_{21,0} + 0.19\times10^{-2}\times T_{44,1}$$

3.4 定量模型的性能

模型的主要统计参数见表1. 从F检验值和P值可以看出建立的线性回归定量模型具有统计学意义, 表明三种维生素组分的浓度和Tchebichef矩值之间有着显著的线性关系. 另外, 三个模型均具有满意的R、R_{adj}、$R_{\mathrm{LOO\text{-}cv}}$和RMSE, 模型的相关系数$R$在0.99以上. 同时, 三个模型均具有较高的$R_{\mathrm{p}}$值. 这些参数表明建立的定量模型具有较高的准确性、可靠性以及良好的预测能力.

从表1可以看出, 该分析方法的精密度低于3.8%, 表明该方法的精密度良好. 组分VB1、VB2和VB6的检测限分别为0.02、0.03和0.06 μg/mL, 表明该方法可以进行B族维生素中三种组分含量的同时定量分析.

3.5 方法比较

多道偏最小二乘(N-way partial least squares, N-PLS)和多元曲线分辨交替最小二乘(multivariate curve resolution-alternating least squares, MCR-ALS)是两种常用的化学计量方法, 已成功地应用于复杂样品中多目标组分的定量分析中[27,28]. 本文将这两种方法应用到B族维生素中VB1、VB2和VB6三种组分的建模分析, 并与TiM方法进行了比较, 如表2所示. 从表中可以看出, 三种方法均具有良好的F值和P值, 表明建立的回归定量模型均具有统计学意义. 其中, MCR-ALS方法对VB6组分建立的模型具有较低的R^2、R_{adj}^2和R_{p}^2以及较高的RMSE和$\mathrm{RMSE_p}$, 说明该方法对VB6的检测准确度不够高. N-PLS方法对三种组分都能建立良好的模型, 但模型的预测能力不够高, 特别是对VB1组分的检测. TiM方法建立的模型表现出最高的R^2、R_{adj}^2、$R_{\mathrm{LOO\text{-}cv}}$、$R_{\mathrm{p}}^2$以及较低的RMSE、$\mathrm{RMSE_{cv}}$和$\mathrm{RMSE_p}$, 同时检测结果的精密度也比较满意, 进一步证明了该方法的准确性和可靠性. 以上结果说明, TiM方法拥有强大的全局图像特征提取能力, 能够准确地预测B族维生素中多种组分的含量.

3.6 实际样品分析

为了验证基于该定量模型建立的分析方法的实用性, 将建立的模型用于不同厂家生产的复合维生素B片中VB1、VB2和VB6的含量测定. 每种组分在同一复合维生素B片中平行测定三次, 测定结果如表3所示. 从测定结果可以看出, 复合维生素B片中VB1的测定结果与维生素B片中标识含量基本一致, 而VB2的测定结果低于药片中的标识含量, VB6的测定结果高于药片中的标识含量. 该测定结果与文献[23]报道结果的一

表 1　TiM方法建立的定量模型的统计参数以及分析方法的性能

Table 1　The performance of established linear models by TiM and the proposed method

参数	目标组分		
	VB1	VB2	VB6
变量数	4	5	4
相关系数(R^2)	0.9977	0.9990	0.9948
调整相关系数(R_{adj}^2)	0.9971	0.9987	0.9934
留一法相关系数($R_{LOO\text{-}cv}$)	0.9961	0.9982	0.9914
均方根误差(RMSE)	0.0219	0.0104	0.0685
预测均方根误差($RMSE_{cv}$)	0.0006	0.0001	0.0058
F值	1.63×10^{3}	2.94×10^{3}	7.21×10^{2}
P值	1.40×10^{-19}	1.24×10^{-20}	6.04×10^{-17}
预测相关系数(R_p^2)	0.9459	0.9685	0.9379
预测均方根误差($RMSE_p$)	0.0059	0.0023	0.0227
相对标准偏差(RSD)	1.8	3.5	3.8
定量限(LOQ, μg/mL)	0.04	0.03	0.13
检测限(LOD, μg/mL)	0.02	0.03	0.06

表 2　不同计量学方法对VB1、VB2和VB6三种组分的同时定量分析

Table 2　Comparison of different methods for the quantitative analysis of VB1, VB2 and VB6

建模方法	目标组分	校正集					交互检验集		预测集		相对标准偏差 (n=3)
		R^2	R_{adj}^2	RMSE	F值	P值	$R_{LOO\text{-}cv}$	$RMSE_{cv}$	R_p^2	$RMSE_p$	
TiM	VB1	0.9977	0.9971	0.0219	1.63×10^{3}	1.40×10^{-19}	0.9961	0.0006	0.9459	0.0059	1.8
	VB2	0.9990	0.9887	0.0104	2.94×10^{3}	1.24×10^{-20}	0.9982	0.0001	0.9685	0.0023	3.5
	VB6	0.9948	0.9934	0.0685	7.21×10^{3}	6.04×10^{-17}	0.9914	0.0058	0.9379	0.0227	3.8
MCR-ALS	VB1	0.9830	0.9823	0.0582	1.39×10^{3}	9.34×10^{-23}	0.9676	0.0467	0.9006	0.0562	4.2
	VB2	0.9925	0.9922	0.0361	3.18×10^{3}	5.11×10^{-27}	0.9460	0.0358	0.9274	0.0342	3.7
	VB6	0.9722	0.9710	0.1283	8.40×10^{2}	3.47×10^{-20}	0.8975	0.0868	0.8863	0.0758	7.2
N-PLS	VB1	0.9880	0.9876	0.1028	1.99×10^{3}	1.37×10^{-24}	0.9918	0.0881	0.8975	0.0124	4.9
	VB2	0.9974	0.9870	0.0742	1.72×10^{5}	5.41×10^{-25}	0.9967	0.0227	0.9268	0.0258	5.4
	VB6	0.9974	0.9903	0.0651	3.80×10^{4}	1.01×10^{-21}	0.9947	0.0632	0.9071	0.0521	4.7

表 3　三种组分在复合维生素B片中的含量测定

Table 3　The contents (mg) of the three target components in one B-vitamins complex tablet

厂家	VB1		VB2		VB6	
	正常值	测量值	正常值	测量值	正常值	测量值
1	3.0	2.95±0.14	1.5	1.09±0.07	0.2	0.84±0.08
2	3.0	2.94±0.12	1.5	1.03±0.04	0.2	0.87±0.11
3	3.0	2.98±0.10	1.5	0.98±0.06	0.2	0.83±0.06

致性较好, 进一步说明本分析方法是准确、可靠的, 具有较强的实用性.

4 结论

本文采用TiM方法对B族维生素中三种组分VB1、VB2和VB6的含量进行同时定量分析, 在组分信号重叠和散射信号干扰的条件下, 基于三维荧光图谱实现了对三种目标组分的同时准确定量分析. 利用TiM方法计算得到488个$T_{n,m}$, 并通过逐步回归成功建立了三种组分的线性回归定量模型. 同时, 采用MCR-ALS和N-PLS方法对三种组分进行建模分析, 并与TiM方法进行了比较. 结果表明, TiM方法建立的模型性能良好, 可靠性和准确度高, 基于该模型建立的分析方法对组分VB1、VB2和VB6的检测限分别为0.02、0.03和0.06 μg/mL, 并成功应用于不同厂家生产的复合维生素B片中VB1、VB2和VB6的含量测定. 本研究进一步拓展了图像矩方法在三维荧光图谱中的应用, 为深入探究荧光图谱提供了新的思路, 有望为生物医学图像处理领域提供重要参考.

参考文献

1 Chambers JC, Ueland PM, Obeid OA, Wrigley J, Refsum H, Kooner JS. *Circulation*, 2000, 102: 2479–2483
2 House AA, Eliasziw M, Cattran DC, Churchill DN, Oliver MJ, Fine A, Dresser GK, Spence JD. *JAMA*, 2010, 303: 1603–1609
3 Ebrahim Z, Jamali MR, Bagheri J. *J Anal Chem*, 2019, 74: 1213–1222
4 David IG, Florea MA, Cracea OG, Popa DE, Buleandra M, Iorgulescu EE, David V, Badea IA, Ciucu AA. *Chem Papers*, 2015, 69: 901–910
5 Ertugrul S, Yucel C, Sertoglu E, Ozkan Y, Ozgurtas T. *Chem Phys Lipids*, 2020, 230: 104932
6 Bhandari D, Van Berkel GJ. *J Agric Food Chem*, 2012, 60: 8356–8362
7 Wang H, Mu W, Wang S, Liu Y, Ran B, Shi L, Ma T, Lu Y. *Talanta*, 2023, 256: 124267
8 Yamini Y, Tahmasebi E, Ranjbar L. *Biol Trace Elem Res*, 2012, 147: 378–385
9 Sangili A, Veerakumar P, Chen SM, Rajkumar C, Lin KC. *Microchim Acta*, 2019, 186: 299
10 Duenchay P, Kaewjua K, Chailapakul O, Siangproh W. *New J Chem*, 2020, 44: 9223–9229
11 Jiao L, Bing S, Zhang X, Wang Y, Li H. *Anal Methods*, 2015, 7: 4535–4540
12 Han L, Cui X, Cai W, Shao X. *Talanta*, 2020, 217: 121036
13 Zhai HL, Li BQ, Chen J, Wang X, Xu ML, Liu JJ, Lu SH. *TrAC Trends Anal Chem*, 2018, 103: 119–125
14 de Oliveira Neves AC, Zougagh M, Ríos Á, Tauler R, Wakamatsu K, Galván I. *Chemometrics Intelligent Lab Syst*, 2021, 217: 104406
15 Benouini R, Batioua I, Zenkouar K, Zahi A, Najah S, Qjidaa H. *Pattern Recogn*, 2019, 86: 332–343
16 Yang M, Bian Y, Yang J, Liu G. *Appl Sci*, 2018, 8: 2331
17 Xu ML, Li BQ, Wang X, Chen J, Zhai HL. *J Sep Sci*, 2016, 39: 3054–3061
18 Li BQ, Chen J, Li JJ, Wang X, Zhai HL. *Analyst*, 2015, 140: 630–636
19 Li BQ, Lu SH, Wang X, Xu ML, Zhai HL. *Chemometrics Intelligent Lab Syst*, 2017, 167: 36–43
20 Liu JJ, Li BQ, Zhai HL, Wang X, Xu ML. *Chemometrics Intelligent Lab Syst*, 2018, 173: 14–20
21 Wang X, Li BQ, Xu ML, Liu JJ, Zhai HL. *J Chromatogr B*, 2017, 1040: 8–13
22 Yin B, Li SS, Lu SH, Mi JY, Zhai HL. *Analyst*, 2019, 144: 4575–4581
23 Chen J, Li BQ, Cui YQ, Yu E, Zhai HL. *J Food Compos Anal*, 2015, 41: 122–128
24 Mukundan R. *IEEE Trans Image Process*, 2004, 13: 1055–1059
25 Yin B. New approaches study on the quantification of some important biomolecules and disease diagnosis. *Dissertation for Doctoral Degree*. Lanzhou: Lanzhou University, 2020 (in Chinese) [殷博. 一些重要生物分子的定量及疾病诊断新方法研究. 博士学位论文. 兰州: 兰州大学, 2020]
26 Sharma MJ, Yu SJ. *Appl Math Comput*, 2015, 253: 126–134
27 Debus B, Kirsanov DO, Panchuk VV, Semenov VG, Legin A. *Talanta*, 2017, 163: 39–47
28 Castro RC, Páscoa RNMJ, Saraiva MLMFS, Cunha SC, Santos JLM, Ribeiro DSM. *Food Control*, 2023, 153: 109934

Application of Tchebichef image moment method for simultaneous quantitative analysis of multiple components in B-vitamins

Bo Yin[1,2,3], Rong Jiang[1], Mei Ye[1], Yuxia Zhao[1,2], Jihua Zhu[1,2,3], Mingjin Zhang[1,2,3*]

[1] *College of Chemistry & Chemical Engineering, Qinghai Normal University, Xining 810016, China*
[2] *Qinghai Key Laboratory of Advanced Technology and Application of Environmental Functional Materials, Xining 810016, China*
[3] *Academy of Plateau Science and Sustainability, People's Government of Qinghai Province & Beijing Normal University, Xining 810016, China*
**Corresponding author (email: zhangmingjin@qhnu.edu.cn)*

Abstract: The serious overlap of the spectra signals of multiple components with similar chemical structures makes the traditional quantitative analysis methods still have shortcomings for multi-component quantitative analysis of complex systems. The chemometrics methods could separate the characteristic information of the target components and eliminate interference, realizing the quantitative analysis of multi-components at the same time. Herein, the Tchebichef image moment method was employed to establish the quantitative models of Vitamin B1 (VB1), Vitamin B2 (VB2) and Vitamin B6 (VB6) in B-vitamins based on three-dimensional fluorescence spectra. The established models have satisfactory correlation coefficient (R^2), adjusted correlation coefficient (R_{adj}^2) and root mean square error (RMSE). At the same time, the prediction correlation coefficients (R_p^2) of the three models are above 0.9379, indicating that the established quantitative models have high accuracy, reliability and good prediction ability. Finally, the quantitative models have been successfully applied in the determination of three components of B-vitamin complex tablets produced by different manufacturers. It could be seen that the Tchebichef image moment method can solve the signal overlap and interference of multi-target components and provides an important basis for the simultaneous quantitative analysis of multi-components in complex systems.

Keywords: Tchebichef image moment, signal overlapping, complex system, quantitative analysis, multi-component

doi: 10.1360/SSC-2023-0234