

基于聚类分析和主成分分析法的淡菜醇提物红外指纹图谱

王 燕¹, 王 斌^{1*}, 徐焕志¹, 郑 斌², 杨会成², 徐银峰¹

(1. 浙江海洋学院食品与药学院, 浙江 舟山 316000;

2. 浙江省海洋开发研究院, 浙江 舟山 316100)

摘要: 利用傅里叶变换红外光谱仪采集 6 个不同地区的 24 个淡菜样品的醇提物红外光谱, 原始光谱经过多点基线校正、聚类分析, 采用平均值法建立淡菜的红外指纹图谱共有模式。相似度分析表明, 各样品红外光谱与所建立的指纹图谱共有模式比较相似度良好, 所选用建立共有模式的 21 批样品相似度均大于 0.9, 符合指纹图谱要求; 而聚类分析中剔除的 3 个样品(S7、S10 和 S21)相似度均低于 0.9, 不符合指纹图谱研究要求, 相似度分析和聚类分析结果相吻合。主成分分析建模结果表明, 前两个主成分能代表原始数据 96% 的信息, 相同产地的样品在主成分散点图上聚集为同一的类群, 基本实现不同产地淡菜的鉴别。载荷因子分析结果表明, 不同产地淡菜醇提物的差别主要体现在不饱和脂肪酸和磷脂的含量上。海口、厦门产区的淡菜样品所含不饱和脂肪酸含量较高; 大连、烟台产区的淡菜样品含有较多的磷脂成分, 舟山产区不饱和脂肪酸及磷脂含量均较低。因此, 红外光谱指纹图谱结合聚类分析和主成分分析法可以快速、无损地鉴别不同产地淡菜, 并且能反映不同产地淡菜醇提物中不饱和脂肪酸和磷脂含量的差异。

关键词: 淡菜; 红外光谱; 指纹图谱; 相似度; 主成分分析; 载荷因子分析

中图分类号: Q 178; S 917

文献标志码: A

贻贝是我国分布最广泛、产量最大的养殖贝类, 其贝肉干制品俗称“淡菜”, 也叫壳菜或青口, 素有“海中鸡蛋”之称, 具有较高的营养价值和多种药理功效^[1-3]。已有的研究表明, 淡菜脂溶性提取物具有较强的抗炎效果^[4], 具有很大的开发优势, 但是不同产地的淡菜在质量上存在一定差异。因此, 建立淡菜的产地溯源和质量控制技术对于其资源开发具有重要意义。

指纹图谱技术是被国内外广泛接受的一种有效的中药材品种鉴定、产地溯源和质量控制手段^[5], 色谱和光谱技术是研究中药指纹图谱的两种主要方法^[6-12], 其中红外光谱指纹图谱因其样品用量少、不消耗化学试剂、不污染环境等优点在中药材和中成药鉴定领域发挥着重要的作用^[13-17]。但是,

目前在水产品品种鉴定、产地溯源和质量控制方面尚未见报道。本研究采用傅里叶变换红外光谱法结合聚类分析和主成分分析法对不同产地淡菜的乙醇提取物进行红外光谱研究, 旨在寻找一种快速、准确鉴别淡菜产地的方法。

1 材料与amp;方法

1.1 仪器和试剂

傅里叶变换红外光谱仪(Nicolet 5700, 美国 Thermo Nicolet 公司), 分辨率为 4 cm^{-1} , 扫描范围 $4\ 000\sim 400\text{ cm}^{-1}$; 压片机(YP-2, 上海山岳科学仪器有限公司); 中药粉碎机(FW135, 天津泰斯特仪器有限公司)。KBr 为光谱纯, 其他试剂均为分析纯, 购于国药集团化学试剂有限公司。

收稿日期: 2011-12-27 修回日期: 2012-03-18

资助项目: 国家自然科学基金项目(81001393); 浙江省水产品加工创新团队项目(2009R50031-16); 舟山市科技计划项目(2011C22060)

通讯作者: 王 斌, E-mail: wangbin4159@hotmail.com

1.2 样品制备

淡菜样品分别购买于大连、烟台、青岛、舟山、厦门和海口等地的超市(表 1)。精确称取过 40 目筛的淡菜样品 0.8 g, 加入 80 mL 无水乙醇, 超声提取 30 min, 过滤、蒸干, 甲醇溶解, 容量瓶定容至 10 mL, 储存备用, 并制备 KBr 压片。

1.3 红外光谱采集及数据预处理

取样品 3 滴滴于已制作好的 KBr 压片上, 挥干, 置于红外光谱仪中进行测试, 以 KBr 为背景累积扫描 32 次, 每个样品平行测定 3 次, 获得 3 个光谱图, 保存 CSV 格式数据并求其平均值, 再导入 Origin 8.0 软件绘制光谱图, 以此作为该样品的红外光谱图, 其中所有光谱图均扣除 KBr 背景光谱。原始光谱数据首先经 OMNIC 软件编写的程序进行多点基线校正, 除去基线影响, 然后将预处理后的光谱数据导入软件 Unscrambler 9.1 进行标准归一化(standard normal variate, SNV), 去除不同样本称

量的差异。

2 结果与讨论

2.1 方法学考查

精密度实验 取淡菜样品 S1 进行红外光谱采集, 连续进行 5 次, 比较所得红外光谱图。其共有峰波数 RSD 均小于 0.03%, 透过率的 RSD 均小于 1%。

稳定性实验 取淡菜样品 S1 方法制备样品溶液, 每隔 1 小时进行一次光谱采集, 连续采集 6 次, 比较所得红外光谱图。其共有峰波数 RSD 均小于 0.02%, 透过率的 RSD 均小于 3%。

重现性实验 取淡菜样品 S1, 按上述方法平行制备 5 份样品片, 分别测定 1 次。比较所得红外光谱图。其共有峰波数 RSD 均小于 0.03%, 透过率的 RSD 均小于 4%。

以上结果表明, 淡菜醇提物红外光谱指纹图谱

表 1 不同淡菜样品的来源及其红外光谱相似度
Tab. 1 Source and similarity of the mussel samples

编号 no.	产地 producing area	生产单位 manufacturer	样品收集时间 collection time	相似度 similarity
S1	大连 Dalian	大连夏方水产有限公司	2011-08	0.974 5
S2	大连 Dalian	大连江能海产品有限公司	2011-08	0.963 5
S3	大连 Dalian	大连上品堂海洋生物有限公司	2011-08	0.965 8
S4	烟台 Yantai	烟台悦泰食品有限公司	2011-07	0.982 5
S5	烟台 Yantai	烟台龙须岛水产品有限责任公司	2011-07	0.981 3
S6	烟台 Yantai	烟台新海水产食品有限公司	2011-07	0.963 8
S7	烟台 Yantai	烟台龙润食品有限公司	2011-07	0.876 0
S8	青岛 Qingdao	青岛东鹏食品有限公司	2011-07	0.958 7
S9	青岛 Qingdao	青岛海亨达商贸有限公司	2011-07	0.9867
S10	青岛 Qingdao	青岛福兴祥物流股份有限公司	2011-07	0.8741
S11	舟山 Zhoushan	浙江兴业集团有限公司	2011-07	0.934 4
S12	舟山 Zhoushan	浙江明珠海洋食品有限公司	2011-07	0.966 0
S13	舟山 Zhoushan	浙江振宇海洋食品有限公司	2011-07	0.911 6
S14	厦门 Xiamen	厦门嘉祺生物食品有限公司	2011-08	0.992 4
S15	厦门 Xiamen	厦门黄金堆贸易有限公司	2011-08	0.990 8
S16	厦门 Xiamen	厦门市鼓浪屿黄金干果经营部	2011-08	0.992 4
S17	海口 Haikou	海口鸿琛工贸有限公司	2011-08	0.988 7
S18	海口 Haikou	海南椰子郎食品有限公司	2011-08	0.988 6
S19	舟山 Zhoushan	散装	2011-08	0.942 5
S20	舟山 Zhoushan	散装	2011-08	0.924 6
S21	烟台 Yantai	散装	2011-08	0.871 8
S22	大连 Dalian	散装	2011-08	0.981 1
S23	大连 Dalian	散装	2011-08	0.976 5
S24	青岛 Qingdao	散装	2011-08	0.932 6

中共有峰波数、透过率基本一致, 相似度较高, 符合指纹图谱研究的要求。

2.2 淡菜指纹图谱的建立

测定所有淡菜样品醇提物的红外光谱图(图 1), 运用 SPSS 16.0 软件对结果进行聚类分析(图 2)。结果表明: 样品 S7、S10、S21 与其余 21 个样品差异较大, 不适合用于建立淡菜指纹图谱, 从而将其剔除。剩余 21 个样品采用平均值法建立淡菜的红外指纹图谱共有模式(图 3), 并以此作为淡菜的参考指纹图谱。

从不同产地淡菜醇提物的红外光谱图(图 1)上可以看出, 不同淡菜样品整体红外光谱图的峰形、峰位、相对峰高基本相同, 其中 $3\ 384.5\ \text{cm}^{-1}$ 处吸收峰由 O-H 伸缩振动引起^[18], 该峰是明显的宽而强的吸收峰; $3\ 012.3\ \text{cm}^{-1}$ 处吸收峰由不饱和脂肪酸中=C-H 伸缩振动引起; $2\ 923.6\ \text{cm}^{-1}$ 及 $2\ 852.2\ \text{cm}^{-1}$ 两处吸收峰分别代表亚甲基的顺式及反式伸缩振动^[19]; $1\ 743.4\ \text{cm}^{-1}$ 处吸收峰是由酯 C=O 伸缩振动引起; $1\ 637.3\ \text{cm}^{-1}$ 处为不饱和脂肪酸 C=C 伸缩振动引起^[20]; $1\ 170.6\ \text{cm}^{-1}$ 处为磷脂 P=O 伸缩振动引起^[21]; $1\ 064.5\ \text{cm}^{-1}$ 处是由 C-O 及 P-O 伸缩振动引起; $721.3\ \text{cm}^{-1}$ 处为=C-H 面外弯曲振动。

2.3 不同来源淡菜红外光谱相似度分析

相似度是评价指纹图谱的一个重要参数, 它根据各样品指纹图谱的整体相似程度来计算样品化学成分的整体波动程度, 据此分析样品的质量稳定性^[22]。常用的相似度计算方法有夹角余弦法和相关系数法, 相关系数或夹角余弦值越接近 1, 说明两产品越相似。本实验以淡菜指纹图谱共有模式作为 21 批淡菜样品指纹图谱色谱峰匹配的依据, 采用夹角余弦法计算各样品指纹图谱的相似度。从相似度计算的结果(表 1)可以看出: (1)相同产地不同厂家生产的淡菜样品具有较高的相似度(>0.9), 不同产地淡菜样品的相似度也较高(>0.9), 表明样品中的化学成分具有良好的相似性, 各淡菜样品的质量较为稳定。(2)厦门、海口两产区淡菜样品的相似度均大于 0.988, 可与其他产区分开, 其原因可能是南海地区贻贝多为大规模人工移养, 人工控制的生长环境比较相似, 质量更加稳定。(3)聚类分析中剔除的 3 个样品(S7、S10 和 S21)相似度均低于 0.9, 不符合指纹图谱研究要求, 与聚类分析结果一致。

以上结果表明, 不同产地淡菜的红外特征基本相同, 指纹图谱相似度良好, 因此采用红外指纹

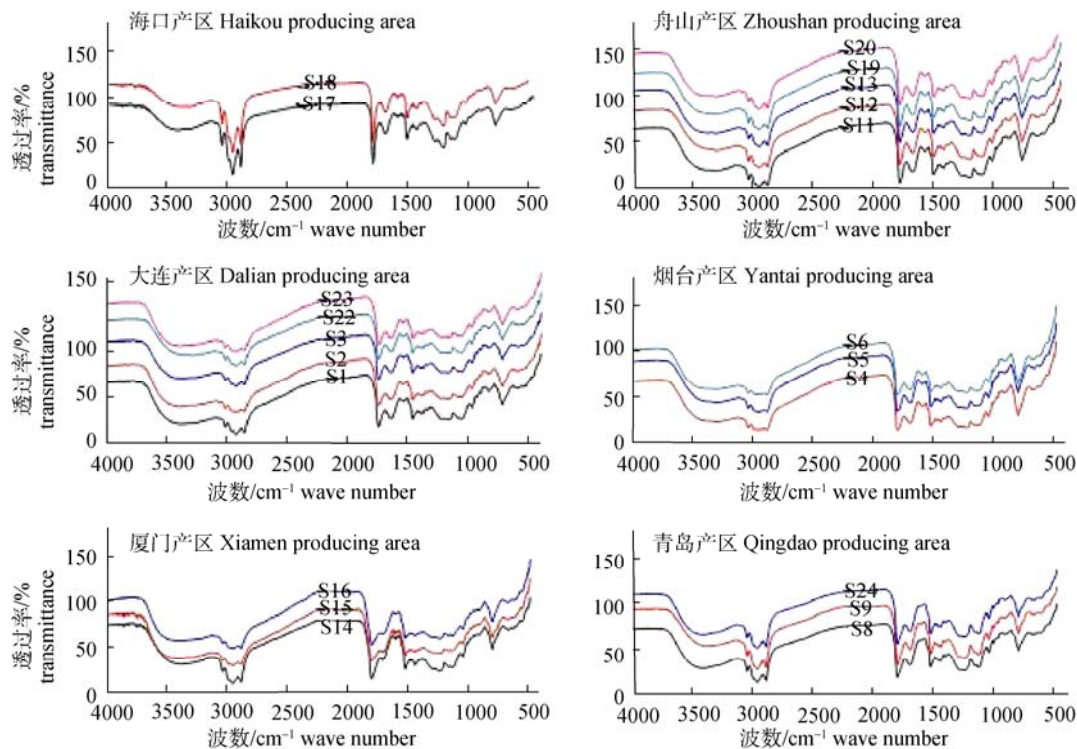


图 1 不同产地淡菜醇提物的红外光谱图

Fig. 1 IR spectra of mussel's ethanol extracts from different regions

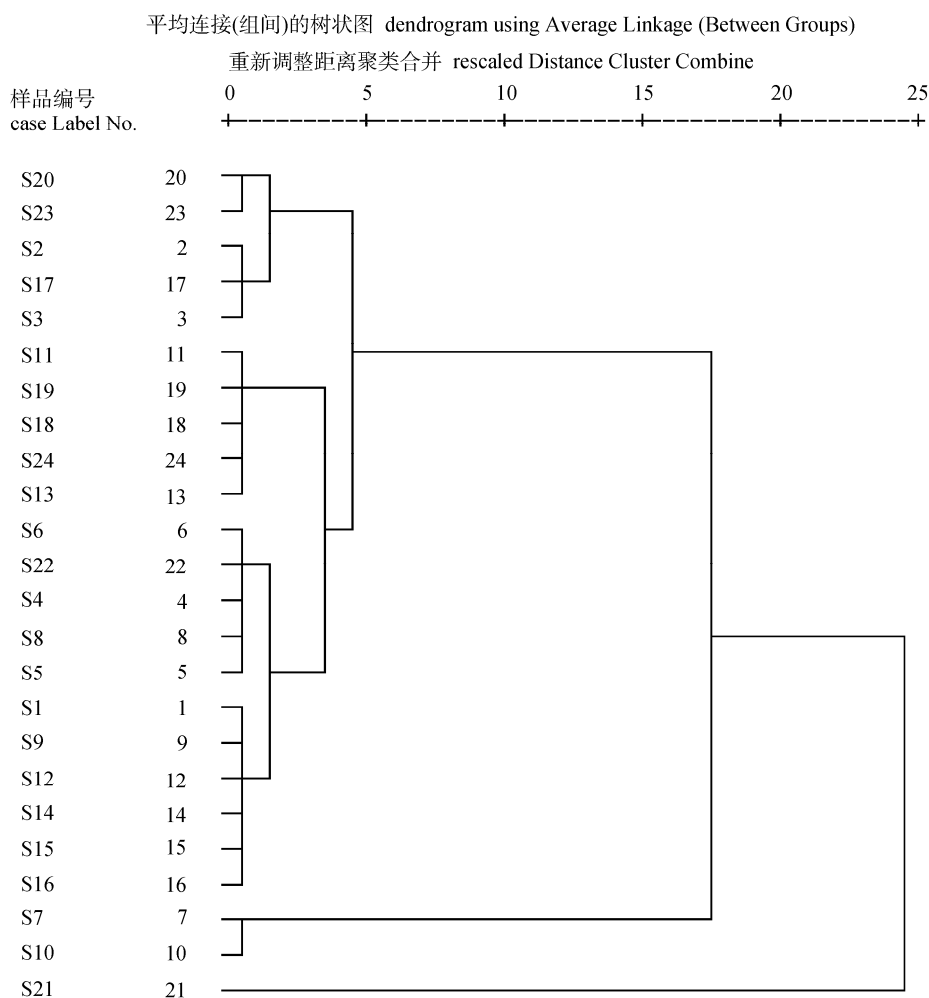


图 2 不同产地淡菜样品红外光谱的聚类结果

Fig. 2 Result of clustering analysis about IR spectra of mussel's ethanol extracts

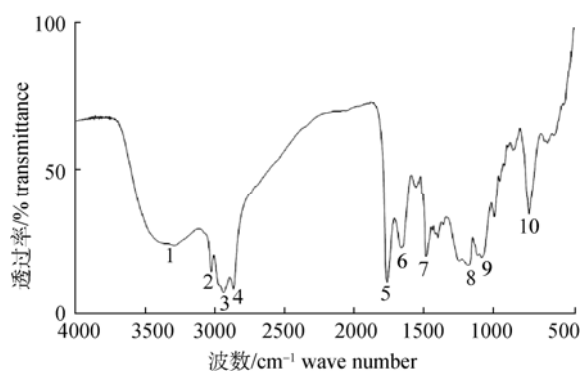


图 3 淡菜醇提取物指纹图谱的共有模式

Fig. 3 FTIR fingerprint of ethanol extracts from mussel samples

1. 3 384.5 cm^{-1} ; 2. 3 012.3 cm^{-1} ; 3. 2 923.6 cm^{-1} ; 4. 2 852.2 cm^{-1} ;
5. 1 743.4 cm^{-1} ; 6. 1 637.3 cm^{-1} ; 7. 1 465.7 cm^{-1} ; 8. 1 170.6 cm^{-1} ;
9. 1 064.5 cm^{-1} ; 10. 721.3 cm^{-1}

图谱法可以对淡菜进行有效的鉴别。但相似度分析无法准确鉴定各淡菜样品的产地来源,加之计算时主要考察各特征峰之间的差异,忽视了很多小

峰的影响,而且在没有标准样品的情况下只能使用各光谱图的均值为参照^[23],因此要准确区分不同产地的淡菜样品需应用更加客观的分析方法。

2.4 主成分分析模型鉴别不同产地淡菜

主成分分析是一种常用的数据降维方法^[24-25],它将原始变量进行变换,组合成一组新的变量,即一组主成分,同时这些变量要尽可能多地表征原变量的数据结构特征而不丢失信息。将 10 个特征吸收峰的透过率值导入 SPSS 16.0 软件,建立主成分分析模型进行分析。其中特征值在 1 以上的主成分有 2 个(PC1 和 PC2),在主成分分析模型中累计贡献率达到 96%。因此,根据这两个主成分就能概括原始数据的大部分信息内容,基本显示各产地淡菜化学成分之间的相似性。根据主成分 PC1, PC2 得分绘制二维散点图(图 4)。由图 4 可以看出:(1)6 个产地的淡菜样品在主成分空间中呈带状分布,各产地样品处于相对独立的空间,不同产地来源

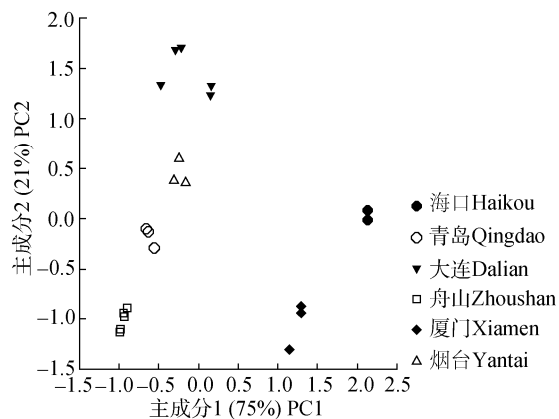


图4 不同产地淡菜样品的主成分得分图
Fig. 4 PCA score plot of the samples

的样品可以得到有效区分。厦门产区与海口产区样品的PC1得分值较高,其中海口产区PC1得分大于2.0,厦门产区PC1得分为1.0~1.5,而青岛、大连、舟山和烟台样品的PC1得分均小于1.0,且有一定的交叉,因此,通过PC1即可鉴别厦门产区与海口产区的样品;舟山与青岛产区样品的PC2得分均小于0.0,其中舟山产区PC2得分小于-0.5,青岛产区PC2得分为-0.5~0.0,烟台和大连产区PC2得分均大于0.0,烟台产区的PC2得分为0.0~1.0,大连产区的PC2得分大于1.0,因此,通过PC2可鉴别舟山、青岛、烟台和大连产区的样品。(2)不同产区淡菜样品的红外光谱在二维散点图上的位置关系与它们间的地理位置和相对地理位置有一定的对应性,反映了相近产区样品的化学成分比较相似,而产地相距较远的化学成分差异较大。

2.5 主成分分析模型载荷因子分析

载荷因子是主成分分析中重要变量贡献的集合^[19],载荷因子矩阵可以显示各变量对主成分的贡献大小。根据淡菜醇提物的载荷因子矩阵(表2),吸收峰3012.3 cm⁻¹、1743.4 cm⁻¹、721.3 cm⁻¹对PC1的贡献最大,它们是不饱和脂肪酸的特征吸收峰;吸收峰1170.6 cm⁻¹、1064.5 cm⁻¹对PC2的贡献最大,它们是磷脂的特征吸收峰,因而不同产地淡菜醇提物化学成分的差异主要体现在不饱和脂肪酸及磷脂含量的不同。由主成分得分图(图4)可以看出,海口产区的样品与PC1有最大的正相关关系,其次是厦门。该结果表明海口、厦门产区的淡菜样品不饱和脂肪酸含量较高;大连产区的样品与PC2有最大的正相关关系,其次是烟台产区,该结果表明大连、烟台产区的淡菜样品含有较多的磷脂

表2 载荷因子矩阵
Tab. 2 Component matrix

吸收峰 波数/cm ⁻¹ absorption peak wave number	因子 component	
	1	2
3384.5	0.989	-0.108
3012.3	0.995	-0.068
2923.6	0.976	0.153
2852.2	0.965	-0.165
1743.4	0.961	-0.201
1637.3	0.994	-0.038
1465.7	0.885	0.358
1170.6	0.050	0.960
1064.5	-0.075	0.947
721.3	0.990	0.123

成分,舟山产区因其特殊的地理位置,其不饱和脂肪酸及磷脂含量均较低。

3 结论

“指纹”(fingerprint)鉴定来源于法医学,是基于每个人的指纹在微小的细节构造中各有不同,中药指纹图谱即借用法医学中指纹具有“绝对唯一性”的特点而得名,不仅是一种中药质量控制技术,更可以成为水产品及其食品鉴定的一种方法。

指纹图谱已成为中药材产地溯源、品种评价和质量控制的重要手段之一,而目前有关水产品红外指纹图谱的研究尚少。本实验建立了淡菜的红外指纹图谱,不同产地样品的红外光谱图与生成的指纹图谱共有模式比较,相似度良好,符合指纹图谱要求。

提取10个特征吸收峰的透过率值进行主成分分析,前两个主成分可以表达原始数据的主要信息,在PC1~PC2得分图上能够将6个产地的样品较好地分类,取得令人满意的分析结果。对主成分分析模型的载荷因子进行分析,可以看出,不同产地淡菜醇提物的差别主要体现在不饱和脂肪酸及磷脂的含量上。因此,红外光谱技术结合主成分分析法可以有效鉴别淡菜的产地来源,并且能反映不同产地淡菜醇提物成分含量的差异,也为其品质评价和质量控制提供一种客观有效的方法,对其他水产品的鉴别分析提供参考。

参考文献:

[1] 中华海洋本草编委会. 中华海洋本草 [M]. 四部. 上海: 上海科学技术出版社, 2009.

- [2] 章超桦, 洪鹏志, 邓尚贵, 等. 翡翠贻贝肉的食品化学特性及其在海鲜调味料的应用[J]. 水产学报, 2000, 24(3): 267-270.
- [3] 毋瑾超, 汪依凡, 方长富. 贻贝蛋白酶解降血压肽的降压活性及相对分子质量与氨基酸组成[J]. 水产学报, 2007, 31(2): 165-170.
- [4] 袁高峰, 姚婷励, 炯张治, 等. 厚壳贻贝脂溶性提取物抗炎生物活性研究[J]. 浙江大学学报: 农业与生命科学版, 2007, 33(2): 169-173.
- [5] 国家药典委员会. 中国药典 [M]. 1 部 北京: 中国医药科技出版社, 2010.
- [6] 田进国, 张静, 任健, 等. 同仁大活络丹与同仁牛黄清心丸红外指纹图谱的研究[J]. 中国中药杂志, 2004, 29(4): 326-330.
- [7] Zhang X G, Han T, Zhang Q Y, *et al.* Chemical fingerprinting and hierarchical clustering analysis of *Centella asiatica* from different locations in China [J]. *Chromatographia*, 2009, 69(1/2): 51-57.
- [8] Niu F, Niu Z Q, Xie G B, *et al.* Development of an HPLC fingerprint for quality control of *Radix Semiaquilegiae* [J]. *Chromatographia*, 2009, 64(9/10): 593-97.
- [9] Wang L C, Cao Y H, Xing X P, *et al.* Fingerprint studies of *radix scutellariae* by capillary electrophoresis and high performance liquid chromatography [J]. *Chromatographia*, 2005, 62(5/6): 283-288.
- [10] Li S P, Yang F Q, Tsim K W K. Quality control of *Cordyceps sinensis*, a valued traditional Chinese medicine [J]. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2006, 41(5): 1571-1584.
- [11] Xie B G, Gong T, Tang M H, *et al.* An approach based on HPLC-fingerprint and chemometrics to quality consistency evaluation of Liuwei Dihuang Pills produced by different manufacturers [J]. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2008, 48(4): 1261-1266.
- [12] Wang B, Zhang Y B, Li G Q, *et al.* Fingerprint chromatogram analysis of *Radix Glehniae* by LC coupled with hierarchical clustering analysis [J]. *Chromatographia*, 2009, 70(5/6): 811-816.
- [13] 刘岩, 刘顺航, 王俊全, 等. 红外光谱应用新进展及其与色谱指纹图谱对比分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27(6): 1093-1097.
- [14] 邹华彬. 双指标信息显著相似序列聚类分析桂附地黄丸、金匱肾气丸无水乙醇提取物红外指纹图谱[J]. 中国中药杂志, 2009, 34(18): 2325-2330.
- [15] 邹华彬, 张新玲, 翟红, 等. 明目地黄丸知柏地黄丸无水乙醇提取物指纹图谱双指标等级序列模式识别[J]. 中国中药杂志, 2008, 33(13): 1543-1549.
- [16] 邹华彬, 袁久荣, 杜爱琴, 等. 甘草氯仿提取物红外指纹图谱共有峰率和变异率双指标序列分析法[J]. 中国中药杂志, 2005, 30(1): 16-20.
- [17] 陈惠清. 红外指纹图谱鉴别丹参的研究[J]. 中国中药杂志, 2006, 31(15): 1285-1286.
- [18] 时有明, 刘刚, 刘剑虹, 等. 不同产地黑木耳的傅里叶变换红外光谱鉴别[J]. 光学学报, 2007, 27(1): 129-132.
- [19] 柴阿丽, 李宝聚, 石延霞, 等. 基于傅里叶变换红外光谱的黄瓜褐斑病早期检测[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(6): 1506-1509.
- [20] 关明, 李晓静, 郭勇, 等. 不同地理居群大蒜 FTIR 图谱比较研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2010, 31(6): 1494-1497.
- [21] 王凤玲, 刘爱国, 朱宏吉, 等. 注射用大豆卵磷脂的提取纯化与质量分析[J]. 食品科学, 2005, 26(4): 183-186.
- [22] 王启帅, 杨云, 肖功胜, 等. 北柴胡 HPLC-ELSD 指纹图谱的建立及色谱数据的分析[J]. 中成药, 2011, 33(3): 373-378.
- [23] Tistaer C, Dejaegjer B, Heyden Y V. Chromatographic separation techniques and data handling methods for herbal fingerprints: A review [J]. *Analytica Chimica Acta*, 2011, 290(2): 148-161.
- [24] 韦记青, 孔德鑫, 唐辉, 等. 基于主成分分析和聚类分析的野生战骨红外指纹图谱比较研究[J]. 广西植物, 2011, 31(4): 559-563.
- [25] 袁玉峰, 陶站华, 刘军贤, 等. 红外光谱结合主成分分析鉴别不同产地黄柏[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(5): 1258-1261.

Infrared fingerprint analysis of ethanol extracts from mussel coupled with cluster analysis and principal component analysis

WANG Yan¹, WANG Bin^{1*}, XU Huan-zhi¹, ZHENG Bin², YANG Hui-cheng², XU Yin-feng¹

(1. School of Food and Pharmacy, Zhejiang Ocean University, Zhoushan 316000, China;

2. Zhejiang Marine Development Research Institute, Zhoushan 316100, China)

Abstract: It was well known that aquatic products collected from different locations might considerably differ in their types and quantities of nutrient components, therefore, resulting in different quality. It is generally believed that these differences are essentially caused by various environmental conditions and habitats where the aquatic products are grown and harvested. Therefore, the quality control of aquatic products was a major concern for both the health authorities and the public. Hence, a validated method was essential for a quality assessment point of view. Because of its advantages and popularity, fingerprint analysis was widely accepted and used in quality control systems of herbal medicines, and some methods have been proposed for the fingerprint analysis, including infrared spectrum (IR), gas chromatography (GC), high-pressure liquid chromatography (HPLC) and gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS); but fingerprint technology was rarely used in the quality control of aquatic products at present. For the first time, a validated infrared spectrum method coupled with cluster analysis, principal component analysis and load factor analysis methods had been developed for the study of the infrared fingerprint of mussel, and Fourier transform infrared (FTIR) spectrometer was performed on the 24 batches samples collected from Dalian, Yantai, Qingdao, Zhoushan, Xiamen and Haikou. Similarity analysis results indicated that similarity of 21 batches samples was higher than 0.9, which accords with the fingerprint technique criterion. The samples from the same region had the similar characteristic peaks of infrared spectra and could be clustered together. The normalized spectra was selected to construct principal component analysis model in the range of fingerprint region $1\ 800\text{-}800\ \text{cm}^{-1}$, and according to the model, the first two principal components (PC1 and PC2) accounted for 96% of the variance information in the fingerprint region, and each sample was able to form distinct cluster in the principal component space, then the identification of mussel from the six regions was basically achieved. Besides, to some extent, the sparse density of the samples distribution reflected the genetic relationship. The loading factors of the model were analyzed, and the results indicated that the differences between mussel samples mostly depended on the contents of unsaturated fatty acids and phosphatides. The contents of unsaturated fatty acids in mussel from Haikou and Xiamen were highest in all samples, and the contents of phosphatides in mussel from Dalian and Yantai were highest in all samples. On the whole, FTIR combined with cluster analysis, principal component analysis and load factor analysis provided an effective way to identify the regions of mussel rapidly and nondestructively, and could detect the unsaturated fatty acids and phosphatide contents in mussel from different areas.

Key words: mussel; infrared spectrum; fingerprint; similarity; principal component analysis; load factor analysis

Corresponding author: WANG Bin. E-mail: wangbin4159@hotmail.com