

基于 THz-TDS 技术的培氟沙星和氟罗沙星抗生素定性定量检测研究

曹瑶瑶^{1, 2, 4}, 李霞¹, 白军朋^{2, 4}, 徐蔚^{2, 4}, 倪盈^{3*}, 董创^{2, 4}, 仲红丽⁵, 李斌^{2, 4*}

1. 天津理工大学机械工程学院, 天津 300384
2. 北京农业智能装备技术研究中心, 北京 100097
3. 北京市可持续发展科技促进中心, 北京 100101
4. 国家农业智能装备工程技术研究中心, 北京 100097
5. 山东省菏泽市巨野县林业局, 山东 菏泽 274000

摘要 作为两种常用的喹诺酮类抗生素, 培氟沙星和氟罗沙星残留问题引起人们的高度关注, 研发快速、高效的检测手段成为一种需求。采用太赫兹时域光谱 (THz-TDS) 技术对鱼粉基质中的培氟沙星、氟罗沙星进行了研究。制备培氟沙星、氟罗沙星、聚乙烯和鱼粉纯净物质以及培氟沙星-鱼粉和氟罗沙星-鱼粉 17 种不同浓度二元混合物的压片样品, 共 106 个; 对所有压片样品进行太赫兹光谱测量和分析; 利用连续投影算法 (SPA) 结合支持向量机 (SVM) 和反向传播神经网络 (BPNN) 建立定性判别模型, 对培氟沙星-鱼粉和氟罗沙星-鱼粉这两种混合物进行分类判别; 利用特征频率处吸收系数建立偏最小二乘回归 (PLSR)、BPNN、多元线性回归 (MLR) 定量预测模型, 分别对两种混合物进行定量预测。结果表明: 纯净培氟沙星在 0.775 和 0.988 THz 存在明显吸收峰, 纯净氟罗沙星在 0.919 和 1.088 THz 存在明显吸收峰, 聚乙烯对太赫兹波基本没有吸收, 鱼粉无吸收峰, 两种抗生素与鱼粉混合后的峰值出现在纯净抗生素的吸收峰附近; 在定性判别中, SVM 判别结果最佳, 预测集判别准确率、精确率、召回率、F1 得分分别为 97.06%, 97.22%, 97.06% 和 97.06%; 定量回归中, SPA-BPNN 模型用于预测培氟沙星-鱼粉结果最佳, 预测集相关系数 (R_p)、预测集均方根误差 (RMSEP) 分别为 0.984 9 和 0.009 5, SPA-MLR 模型用于预测氟罗沙星-鱼粉结果最佳, R_p 和 RMSEP 分别为 0.982 7 和 0.040 6。研究表明 THz-TDS 技术对鱼粉基质中培氟沙星、氟罗沙星进行定性定量检测是可行的, 为畜禽行业中培氟沙星和氟罗沙星实际检测提供理论和技术参考。

关键词 太赫兹时域光谱; 培氟沙星; 氟罗沙星; 定性判别; 定量检测

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)06-1798-06

引言

培氟沙星 (Pefloxacin)、氟罗沙星 (Fleroxacin) 是两种常用的喹诺酮类抗生素, 因为杀菌性强、高效快速, 被广泛应用于家禽家畜, 预防疾病和促进动物生长^[1-2]。然而, 过量使用抗生素使得动物体内抗生素含量超标, 进而通过食物链进入到人的体内, 引起耐药性, 影响人体健康。国家农业部 2015 年第 2292 号公告规定在动物食品中禁止使用培氟沙星等抗生素^[3]。因此, 对这两种抗生素残留进行有效监控非常重要。农业部 2349 号公告规定饲料中喹诺酮类抗生素的标

准检测方法为液相色谱串联质谱法^[4]。常用的抗生素检测方法还有高效液相色谱法、免疫化学法、酶联免疫法、毛细管电泳法等^[5]。这些方法检测精度较高, 但需要专业人员进行操作, 且需要复杂的预处理。快速、高效的检测方法成为一种需求。

太赫兹波是指频率范围为 0.1~10 THz, 波长为 0.03~3 mm 的电磁波, 介于微波与红外波之间, 能够穿透大分子物质, 得到其物理和化学信息^[6]。相关研究人员利用太赫兹技术对不同的抗生素进行了研究。徐贤海、朱思原、戴浩等^[7-9]先后对 β -内酰胺类抗生素进行了检测, 结果显示 β -内酰胺类抗生素在太赫兹波段存在特征吸收峰。有报道对 14

收稿日期: 2021-05-05, 修订日期: 2021-07-05

基金项目: 北京农业智能装备技术研究中心开放课题 (KFZN2020W011), 北京市农林科学院 2021 年度科研创新平台建设项目 (PT2021-04), 北京市科技计划课题 (Z191100004019007), 国家自然科学基金项目 (61601034) 资助

作者简介: 曹瑶瑶, 女, 1995 年生, 天津理工大学机械工程学院硕士研究生 e-mail: 1002884450@qq.com

* 通讯作者 e-mail: cc0987cccc@163.com; lib@nrcita.org.cn

种头孢类抗生素进行了研究，其中 8 种存在吸收峰，其余 6 种可以通过折射率将它们区分出来。Albert Redo-Sanchez 和 Qin 等^[10-11]对四环素和人工合成抗生素进行研究，发现与不同基质混合后，仍然可以检测到抗生素。Long 等^[12]利用太赫兹技术对鱼粉中的诺氟沙星、恩诺沙星、氧氟沙星进行了定性定量分析，其中氧氟沙星的最优相关系数达到 0.964。有研究利用太赫兹光谱技术对高浓度和低浓度的诺氟沙星初步开展了定量分析。在利用太赫兹光谱技术对培氟沙星和氟罗沙星抗生素进行定性定量研究方面尚未见报道。

为探索上述两种抗生素的太赫兹波段吸收特性和定性定量检测方法，本研究选取培氟沙星和氟罗沙星该两种抗生素为研究对象，利用太赫兹时域光谱 (THz-TDS) 开展测试研究。研究实验流程如图 1 所示，包括：(1) 制备培氟沙星、氟

罗沙星、聚乙烯 (PE)、鱼粉纯净物以及培氟沙星-鱼粉、氟罗沙星-鱼粉 17 种不同浓度二元混合物的压片样品；(2) 得到所有样品的太赫兹光谱数据，并分析其太赫兹光谱特性；(3) 利用连续投影算法 (successive projections algorithm, SPA) 选取特征频率，基于特征频率处的吸收系数建立支持向量机 (support vector machine, SVM) 和反向传播神经网络 (back propagation neural network, BPNN) 分类判别模型，选出分类结果最优模型；(4) 利用特征频率处吸收系数建立偏最小二乘回归 (partial least squares regression, PLSR)、BPNN 和多元线性回归 (multiple linear regression, MLR) 定量回归模型，通过比较几种模型的预测结果，选出最佳预测模型。

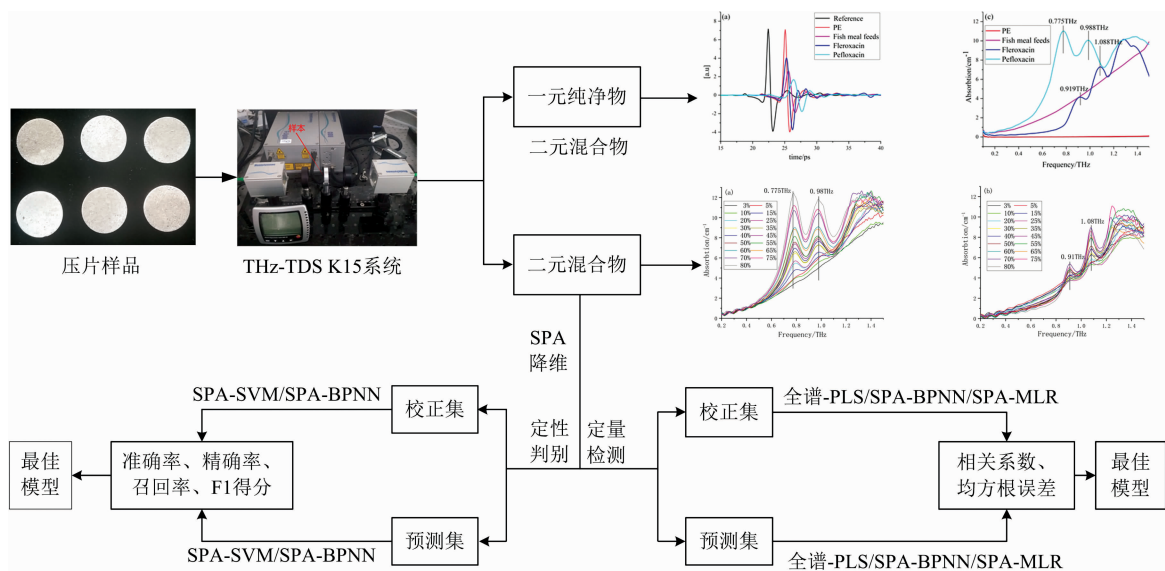


图 1 实验流程图

Fig. 1 Flowchart of the experimental process

1 实验部分

使用太赫兹时域光谱仪 (TERA K15, 德国 Menlo System 公司) 进行光谱测量，飞秒激光中心波长为 1 550 nm，重复频率为 100 MHz，脉宽小于 90 fs；使用手动压片机 (Specac GS15011, 英国) 压片；使用精密电子天平 (FA2004N, 上海菁海仪器有限公司) 称量。

培氟沙星 (CAS: 149676-40-4, 纯度为 99%) 和氟罗沙星 (CAS: 79660-72-3, 纯度为 98%) 由上海麦克林生化科技有限公司购买；鱼粉由当地超市购买，经检测无抗生素残留；聚乙烯粉末 (CAS 9002-88-4, 粒度 40~48 μm) 由西格玛-奥尔德里奇公司购买。

1.1 样品

样品制备流程为：(1) 研磨：将粉末样品置于玛瑙研钵中充分研磨；(2) 称量：使用精密电子天平按照不同浓度依次称量样品，每个压片质量约 200 mg，并将混合物搅拌均匀；(3) 制片：在 3.5 t 外力，3 min 固片条件下，运用压片机

依次制备压片，压片直径为 13 mm，厚度为 1~2 mm。样品制备信息如表 1 所示。

1.2 数据采集

测量实验在透射模式下进行，同时充入氮气进行干燥，使测试环境相对湿度低于 3%，排除空气中水分影响。每个样品在不同部位重复测量 3 次。运用自带软件 TeraMat_v10.vi 计算频谱和吸收系数。

利用多项式平滑 (Savitzky-Golay, SG) 算法对原始数据进行预处理，选择平滑窗口宽度为 5，多项式次数为 2。利用连续投影算法 (successive projections algorithm, SPA) 来选取特征频率以减少冗余信息。

1.3 模型建立及评价

支持向量机 (SVM) 是一种适合于非线性、小样本的分类算法，其分类原理是找到一个超平面使得其两侧样本距离最大。反向传播神经网络 (BPNN) 不仅可以实现分类，还可以进行回归分析，其输出结果前向传播，误差采用反向传播。偏最小二乘回归 (PLSR) 是一种常用回归方法，可以较好地解决自变量存在的严重多重相关性问题^[13]。多元线性回归

(MLR)算法能线性表示输入变量与输出变量的关系,是最常用的多变量回归方法。

表 1 实验样品制备信息

Table 1 Experimental sample preparation information

一元纯净物		二元混合物			
样品种类	测量次数/样品	培氟沙星-鱼粉		氟罗沙星-鱼粉	
		样品浓度/%	总测量次数	样品浓度/%	总测量次数
聚乙烯粉	3	3	9	3	9
		5	9	5	9
		10	9	10	9
鱼粉基质	3	15	9	15	9
		20	9	20	9
		25	9	25	9
		30	9	30	9
		35	9	35	9
		40	9	40	9
培氟沙星	3	45	9	45	9
		50	9	50	9
		55	9	55	9
氟罗沙星	3	60	9	60	9
		65	9	65	9
		70	9	70	9
		75	9	75	9
		80	9	80	9

在定性判别模型中,利用准确率、精确率、召回率、F1得分来对模型进行评价^[14],这些指标越接近 1,模型分类结果越好;在定量回归模型中,采用校正集相关系数(R_c)、校正集均方根误差(RMSEC)、预测集相关系数(R_p)、预测集均方根误差(RMSEP)对结果进行评价,其中,相关系数越接近 1,模型预测性能越好,均方根误差越接近 0,模型越稳定^[15]。

本研究中数据预处理、降维、绘图与建模均在 Matlab2016a 和 Origin2017 软件中完成。

2 结果与讨论

2.1 一元纯净物质的太赫兹光谱分析

各一元纯净物质的太赫兹时域谱如图 2(a)所示,可以看出,聚乙烯和参考信号的幅值基本相同,说明聚乙烯对太赫兹波无吸收,但在时间上较参考信号呈现延迟;鱼粉、培氟沙星、氟罗沙星的太赫兹时域信号不仅在时间上较参考信号发生延迟,能量也发生了严重的衰减;四种物质的幅值由大到小依次是聚乙烯、氟罗沙星、鱼粉、培氟沙星,表明它们对太赫兹的吸收依次减小。各纯净物质频域谱如图 2(b)所示,选取 0.2~1.5 THz 的有效数据进行后续分析。可以看出,各样品的幅值由大到小依次是聚乙烯、氟罗沙星、鱼粉、培氟沙星,说明对太赫兹的吸收依次减小,这与时域数据的分析结果一致。各纯净物质吸收系数曲线如图 2(c)所示,可以发现聚乙烯的吸收系数趋向于零,与已有报道一致^[6];培

氟沙星在 0.775 和 0.988 THz 处有明显吸收峰,其中 0.775 THz 处的吸收峰更强;氟罗沙星在 0.919 和 1.088 THz 有明显吸收峰,其中 1.088 THz 处的吸收峰更强;鱼粉对太赫兹没有吸收峰,但随着频率增大,其吸收系数增大。

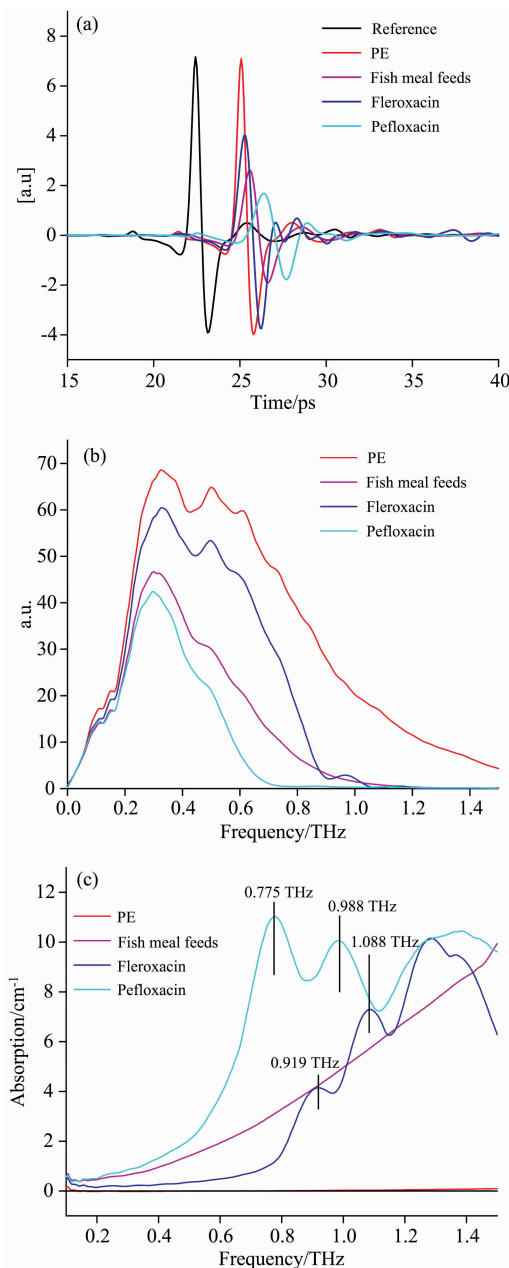


图 2 纯净物质的太赫兹光谱信息

(a): 时域谱; (b): 频域谱; (c): 吸收光谱

Fig. 2 Terahertz spectra of pure substances

(a): Time domain spectrum; (b): Frequency domain spectrum;

(c): Absorption spectrum

2.2 二元混合物定性定量分析

2.2.1 混合物的吸收系数谱分析

为进一步研究二元混合物的吸收特性,分别将培氟沙星-鱼粉、氟罗沙星-鱼粉混合物中每个浓度的光谱数据求平

均值，并利用 SG 对数据进行平滑。图 3(a)和(b)分别为培氟沙星-鱼粉和氟罗沙星-鱼粉的吸收系数曲线，由图可知，两种抗生素与鱼粉混合后吸收峰仍然存在，培氟沙星-鱼粉的吸收系数曲线峰值在 0.775 和 0.988 THz 附近，氟罗沙星-鱼粉的吸收系数曲线峰值在 0.919 和 1.088 THz 附近；当频率大于 1.3 THz 时，两种混合物的光谱信号不稳定，信噪比较低；当浓度为 3% 和 5% 时，抗生素含量太少峰值被淹没，无明显吸收峰；整体上随着浓度的减少，吸收峰的幅值发生规律的衰减，说明适合进一步开展定性定量研究。

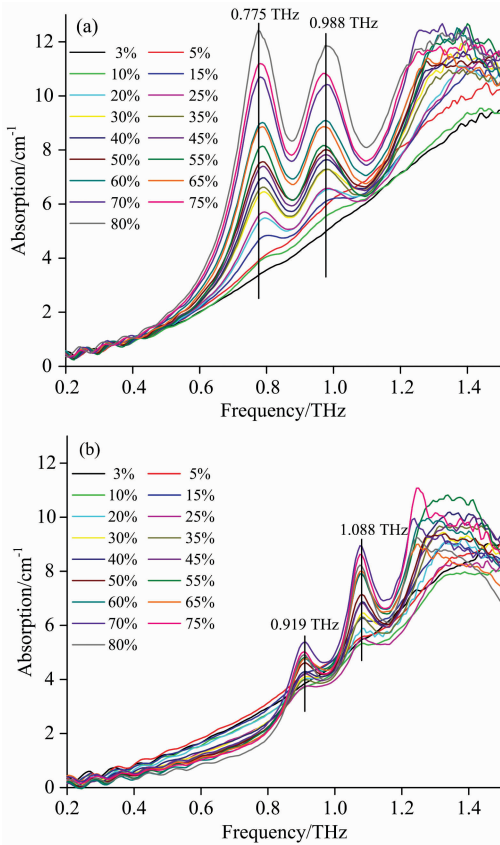


图 3 二元混合物吸收系数谱

(a): 培氟沙星-鱼粉; (b): 氟罗沙星-鱼粉

Fig. 3 Absorption coefficient of binary mixture

(a): Pefloxacin-fish meal feeds; (b): Fleroxacin-fish meal feeds

2.2.2 SPA 特征频率选择

为进行定性定量建模研究，首先利用 SPA 算法对高维数据进行降维。在定性分类中，将两种混合物的吸收系数作为输入，类别标签作为输出，选取特征频率；定量分析中，将每一种类的吸收系数作为输入，浓度作为输出，选取特征频率。定性分类中，选取的特征频率为 0.206, 0.775, 1.069 和 1.50 THz。定量分析中，培氟沙星-鱼粉选出的特征频率为 0.775, 1.275 和 1.144 THz，氟罗沙星-鱼粉选出的特征频率为 1.069, 0.988, 1.231, 1.269 和 1.50 THz。

2.2.3 定性判别建模结果分析

利用特征频率处的光谱数据建立 SVM 和 BPNN 分类判别模型。每个样本 3 次测量的数据都进行建模，一共 306 个

数据，按照 2 : 1 随机划分为校正集和预测集，每类样本中校正集为 102 个不同浓度的混合物，预测集为 51 个不同浓度的混合物。图 4(a)和(b)分别为 SVM 和 BPNN 模型预测集判别结果，可以看出，在 SVM 模型中，有 3 个培氟沙星-鱼粉被误分为氟罗沙星-鱼粉，氟罗沙星-鱼粉全部判别正确。而在 BPNN 模型中，每种混合物都有两个被误分。表 2 为两种模型的评价指标，其中精确率和召回率是两种物质的平均值。由表 2 可得，SPA-SVM 的准确率为 97.06%，精确率为 97.22%，召回率为 97.06%，F1 得分为 97.06%。SPA-BPNN 的准确率、精确率、召回率、F1 得分均为 96.08%。显然，SVM 模型的判别结果更好，同时也说明 SVM 对于小样本的分类具有优势。

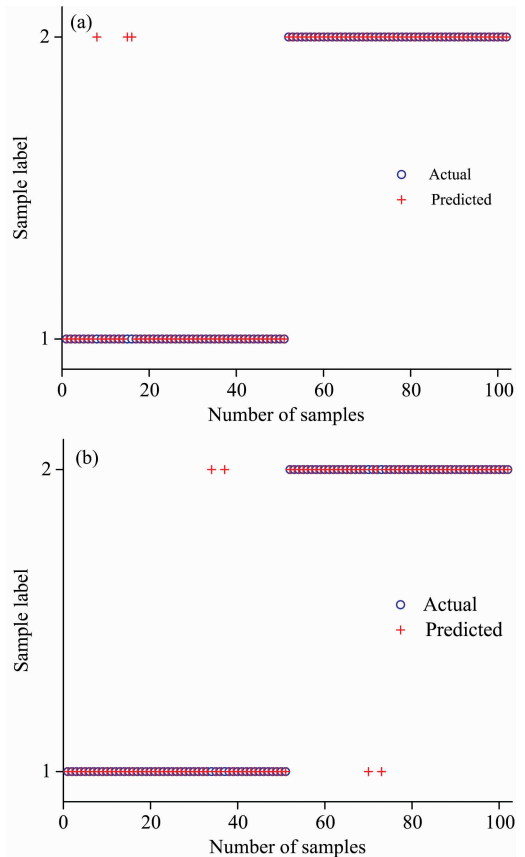


图 4 定性判别结果

(a): SVM 模型判别结果; (b): BPNN 模型判别结果

Fig. 4 Qualitative discrimination results

(a): Discrimination results of SVM model;

(b): Discrimination results of BPNN model

表 2 定性判别结果评价指标

Table 2 Evaluation index of qualitative discrimination results

建模方法	精确率 / %	召回率 / %	准确率 / %	F1 得分 / %
SPA-SVM	97.22	97.06	97.06	97.06
SPA-BPNN	96.08	96.08	96.08	96.08

表 3 二元混合物定量检测结果

混合物	建模方法	R_c	RMSEC	R_p	RMSEP
培氟沙星-鱼粉	全谱-PLSR	0.986 0	0.041 4	0.984 8	0.040 0
	SPA-BPNN	0.994 9	0.001 6	0.984 9	0.009 5
	SPA-MLR	0.989 3	0.036 2	0.983 2	0.041 3
氟罗沙星-鱼粉	全谱-PLSR	0.960 7	0.068 9	0.952 7	0.069 3
	SPA-BPNN	0.989 0	0.001 9	0.961 9	0.017 6
	SPA-MLR	0.990 1	0.034 9	0.982 7	0.040 6

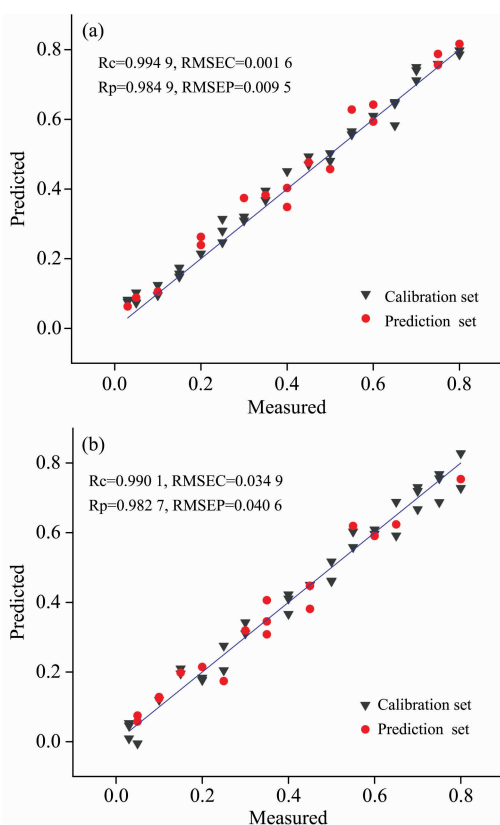


图 5 最佳预测模型测量与预测浓度散点图

(a): 培氟沙星-鱼粉; (b): 氟罗沙星-鱼粉

Fig. 5 The best prediction model measures and predicts the concentration scatter diagram

(a): Pefloxacin-fish meal feeds;

(b): Fleroxacin-fish meal feeds

2.2.4 定量回归建模结果分析

建立全谱-PLSR, SPA-BPNN, SPA-MLR 定量回归模型, 校正集与预测集比为 2:1, 每类样本中校正集个数为 34, 预测集个数为 17, 校正集和预测集随机进行划分。在 PLSR 模型中, 主因子数设置为 2。BPNN 模型中, 学习率设置为 0.1, 进行 200 次迭代训练。表 3 为二元混合物定量检测结果, 可以看出, SPA-BPNN 模型对培氟沙星-鱼粉预测结果最好, R_c , RMSEC, R_p 和 RMSEP 分别为 0.994 9, 0.001 6, 0.984 9 和 0.009 5。SPA-MLR 模型对氟罗沙星-鱼粉预测结果最好, R_c , RMSEC, R_p 和 RMSEP 分别为 0.990 1, 0.034 9, 0.982 7 和 0.040 6。图 5(a,b) 分别为最佳预测模型的实际浓度与预测浓度的散点图, 由图可知, 校正集和预测集的浓度均匀分散在直线 $y=x$ 的两侧, 说明预测效果较好。

3 结 论

应用 THz-TDS 技术对鱼粉基质中培氟沙星、氟罗沙星这两类典型喹诺酮类抗生素进行定性定量分析研究。实验采集了培氟沙星、氟罗沙星、聚乙烯、鱼粉纯净物质以及培氟沙星-鱼粉、氟罗沙星-鱼粉 17 种不同浓度混合物的太赫兹光谱数据。首先对所有压片样品太赫兹光谱特性进行研究分析, 结果发现, 培氟沙星对太赫兹的吸收峰为 0.775 和 0.988 THz, 氟罗沙星对太赫兹的吸收峰为 0.919 和 1.088 THz, 聚乙烯对太赫兹的吸收接近于零, 鱼粉对太赫兹无吸收峰, 两种抗生素与鱼粉混合后吸收峰仍然存在。接着对鱼粉中的抗生素进行了定性定量分析, 数据选取范围为 0.2~1.5 THz, 建模之前利用 SPA 进行降维选取特征频率。在建立的 SVM 和 BPNN 分类判别模型中, SVM 模型判别结果更好, 预测集判别准确率、精确率、召回率、F1 得分分别为 97.06%, 97.22%, 97.06% 和 97.06%; 在建立的全谱-PLSR, SPA-BPNN 和 SPA-MLR 定量回归模型中, 几种建模方法的预测结果都较好, 预测集相关系数均在 0.95 以上, 其中, 培氟沙星-鱼粉的最佳预测模型为 SPA-BPNN, R_p 为 0.984 9, RMSEP 为 0.009 5, 氟罗沙星-鱼粉的最佳预测模型为 SPA-MLR, R_p 为 0.982 7, RMSEP 为 0.040 6。研究表明利用 THz-TDS 技术结合化学计量学方法对喹诺酮类抗生素培氟沙星和氟罗沙星进行定性定量检测是可行的, 为利用太赫兹技术实际检测饲料中的这两种抗生素提供理论和技术参考。

References

- [1] WANG Jin-qiu, MA Jian-min, XIA Xi(王金秋, 马建民, 夏曦). Journal of Chinese Mass Spectrometry Society(质谱学报), 2014, 35 (2): 185.
- [2] JIA Guo-chao, ZHI Ai-min, LI Meng-qin, et al(贾国超, 职爱民, 李梦琴, 等). Scientia Agricultura Sinica(中国农业科学), 2014, 47 (11): 2251.
- [3] Announcement No. 2292 of the Ministry of Agriculture of the People's Republic of China(中华人民共和国农业部公告第 2292 号). [2015-9-7].
- [4] Announcement No. 2349 of the Ministry of Agriculture-May-2015(农业部 2349 号公告-5-2015). [2015-12-29].

- [5] Guo J, Deng H, Liu Q, et al. *Journal of Spectroscopy*, 2020, 2020(5): 1.
- [6] LI Bin, LONG Yuan, LIU Huan, et al(李 斌, 龙 园, 刘 欢, 等). *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering* (农业工程学报), 2018, 34(2): 1.
- [7] XU Xian-hai, FU Xiu-hua, XIA Yi, et al(徐贤海, 付秀华, 夏 蕊, 等). *Modern Scientific Instruments*(现代科学仪器), 2012, (6): 42.
- [8] ZHU Si-yuan, ZHANG Man, SHEN Jing-ling(朱思原, 张 曼, 沈京玲). *Infrared and Laser Engineering*(红外与激光工程), 2013, 42(3): 626.
- [9] DAI Hao, XU Kai-jun, JIN Biao-bing, et al(戴 浩, 徐开俊, 金彪兵, 等). *Infrared and Laser Engineering*(红外与激光工程), 2013, 42(1): 90.
- [10] Redo-Sanchez A, Salvatella G, Galceran R, et al. *Analyst*, 2011, 136(8): 1733.
- [11] Qin J, Xie L, Ying Y. *Analytical Chemistry*, 2014, 86(23): 11750.
- [12] Long Yuan, Li Bin, Liu Huan. *Applied Optics*, 2018, 57(3): 544.
- [13] LIU Jun, WU Meng-ting, TAN Zheng-lin, et al(刘 军, 吴梦婷, 谭正林, 等). *Journal of Wuhan Institute of Technology*(武汉工程大学学报), 2017, 39(5): 496.
- [14] WANG Yan-guang, ZHU Hong-bin, XU Wei-chao(王彦光, 朱鸿斌, 徐维超). *Journal of Guangdong University of Technology*(广东工业大学学报), 2021, 38(1): 46.
- [15] Li B, Zhao X, Zhang Y, et al. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2020, 170: 105239.

Study on Qualitative and Quantitative Detection of Pefloxacin and Fleroxacin Veterinary Drugs Based on THz-TDS Technology

CAO Yao-yao^{1, 2, 4}, LI Xia¹, BAI Jun-peng^{2, 4}, XU Wei^{2, 4}, NI Ying^{3*}, DONG Chuang^{2, 4}, ZHONG Hong-li⁵, LI Bin^{2, 4*}

1. School of Mechanical Engineering, Tianjin University of Technology, Tianjin 300384, China

2. Beijing Research Center of Intelligent Equipment for Agriculture, Beijing 100097, China

3. Beijing Sustainable Development Center, Beijing 100101, China

4. National Engineering Research Center of Intelligent Equipment for Agriculture, Beijing 100097, China

5. Forestry Bureau of Juye County Heze City, Shandong Province, Heze 274000, China

Abstract As two commonly used quinolone veterinary drugs, pefloxacin and fleroxacin residues have attracted great attention, and it is a demand to develop rapid and efficient detection methods. This paper uses Terahertz Time Domain Spectroscopy (THz-TDS) to study pefloxacin and fleroxacin in fish meal feeds matrix. Firstly, 106 compressed samples of pure substances of pefloxacin, fleroxacin, polyethylene and fish meal feed, and binary mixtures of pefloxacin-fish meal feed, and fleroxacin-fish meal feeds with 17 different concentrations were prepared. Secondly, terahertz spectrum measurement and analysis were carried out on all tableting samples. Then, the continuous projection algorithm (SPA) combined with a support vector machine (SVM) and backpropagation neural network (BPNN) were used to establish a qualitative discrimination model to classify and discriminate the mixture of pefloxacin-fish meal feeds and fleroxacin-fish meal feeds. At last, partial least square regression (PLSR), BPNN and multiple linear regression (MLR) quantitative prediction models were established using the absorption coefficient at the characteristic frequency. The results showed obvious absorption peaks of pure pefloxacin at 0.775 and 0.988 THz, and obvious absorption peaks of pure fleroxacin at 0.919 and 1.088 THz. Polyethylene had no absorption of THz wave, and fish meal feeds had no absorption peak. The absorption peaks of two mixtures appeared near the absorption peaks of pure antibiotics. In qualitative discrimination, SVM was the best model, and the accuracy, precision, recall and F1 scores of the prediction set were 97.06%, 97.22%, 97.06% and 97.14%, respectively. In the quantitative regression, SPA-BPNN was the best model for predicting pefloxacin-fish meal feeds, with correlation coefficient (R_p) and root mean square error (RMSEP) of prediction set being 0.984 9 and 0.009 5 respectively, and SPA-MLR was the best model for predicting fleroxacin-fish meal feeds, with R_p and RMSEP being 0.982 7 and 0.040 6 respectively. This study shows that THz-TDS technology is feasible for qualitative and quantitative detection of pefloxacin and fleroxacin in fish meal matrix, which provides theoretical and technical reference for practical detection of pefloxacin and fleroxacin in the livestock and poultry industry.

Keywords THz-TDS; Pefloxacin; Fleroxacin; Qualitative discrimination; Quantitative detection

* Corresponding authors

(Received May 5, 2021; accepted Jul. 5, 2021)