

基于 ATR-FTIR 法快速鉴别亳州产菊花品种

荣百玲¹, 范成龙¹, 朱倩¹, 陈寅¹, 卓园园¹, 崔雪娇², 张小倩², 徐倩³, 胡云飞^{*2}

(1.江苏省人民医院宿迁医院, 江苏 宿迁 223800;

2.亳州学院 安徽省现代中药产业共性技术研究中心, 安徽 亳州 236800;

3.安徽中医药大学第二附属医院, 安徽 合肥 230061)

摘要:为建立一种快速、准确的亳州菊花品种鉴别方法,采用衰减全反射傅立叶变换红外光谱(ATR-FTIR)结合化学计量学方法,对11个不同品种的亳州菊花样品进行分析。首先采集各样品的ATR-FTIR光谱信息,并对原始光谱数据进行多种预处理和变量筛选,以降低噪声干扰、增强光谱特征并提高模型的分类能力。在此基础上,采用正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)对不同品种菊花样品进行分类识别,考察其在模式识别中的应用效果。ATR-FTIR光谱能够较好地反映不同品种亳州菊花样品的化学组成差异,结合化学计量学分析可实现对不同品种样品的快速分类与有效鉴别。OPLS-DA结果显示,不同品种菊花样品之间具有较为清晰的聚类趋势,能够较直观地反映各品种间的差异。通过对多种光谱预处理方法及变量选择方法的比较与评估,确定MSC结合2nd D为最优预处理方法。进一步采用支持向量机(SVM)建立分类预测模型。结果显示,SVM模型具有优异的分类性能和较高的预测精度,训练集准确率达到100%,测试集准确率为98.2%,表明所建立模型具有良好的识别能力和泛化性能。研究结果说明,ATR-FTIR结合化学计量学方法能够有效区分不同品种的亳州菊花。与传统鉴别方法相比,该方法具有操作简便、分析快速、效率高及结果准确可靠等优点,可为亳州菊花品种鉴别及质量评价提供新的技术手段和理论依据。

关键词:菊花; ATR-FTIR; 化学计量学; 品种鉴别; 质量评价

中图分类号: O657.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 0258-3283(2026)05-0068-08

DOI: 10.13822/j.cnki.hxsj.2026.0058

Rapid Identification of Chrysanthemum Varieties Produced in Bozhou Based on ATR-FTIR Method RONG Bai-ling¹, FAN Cheng-long¹, ZHU Qian¹, CHEN Yin¹, ZHUO Yuan-yuan¹, CUI Xue-jiao², Zhang Xiao-qian², XU Qian³, HU Yun-fei^{*2}
(1. Suqian Hospital of Jiangsu Provincial People's Hospital, Suqian 223800, China; 2. Anhui Provincial Research Center for Common Technologies of Modern Chinese Medicine Industry, Bozhou University, Bozhou 236800, China; 3. The Second Affiliated Hospital of Anhui University of Chinese Medicine, Hefei 230061, China)

Abstract: To establish a rapid and accurate method for the identification of chrysanthemum varieties in Bozhou, we analyzed 11 varieties of *Chrysanthemum morifolium* Ramat. from Bozhou by combining attenuated total reflectance Fourier-transform infrared (ATR-FTIR) spectroscopy with chemometric methods. First, ATR-FTIR spectral information was collected from all the samples, and the raw spectral data were subjected to multiple preprocessing methods and variable selection to reduce noise interference, enhance the spectral features, and improve the classification ability of the model. Orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA) was used to classify and identify samples of different chrysanthemum varieties, and its application in pattern recognition was evaluated. The ATR-FTIR spectra reflected the differences in the chemical composition among the different varieties of *Chrysanthemum morifolium* Ramat. from Bozhou. When combined with chemometric analysis, this method enabled the rapid classification and effective discrimination of different varieties. The OPLS-DA results showed a relatively clear clustering trend among samples from different varieties and visually reflected the differences among the varieties. By comparing and evaluating the various spectral preprocessing and variable selection methods, multiplicative scatter correction combined with second derivative (2nd D) was determined to be the optimal preprocessing method. Furthermore, a support vector machine (SVM)

收稿日期: 2026-03-06; 修回日期: 2026-04-02; 接受日期: 2026-04-03

基金项目: 国家重点研发计划项目(2023YFC3504105); 2024年安徽省质量工程项目(2024sysx033); 安徽省大学生创新创业训练计划项目(202412926026, S202512926049)。

作者简介: 荣百玲(1992-), 女, 江苏宿迁人, 学士, 中药师, 主要从事药品质量评价研究。

通讯作者: 胡云飞, E-mail: yunfeihu07@163.com。

model was established for classification and prediction. The results showed that the SVM model exhibited excellent classification performance and high predictive accuracy, with an accuracy of 100% for the training set and 98.2% for the test set, indicating that the established model possessed good recognition ability and generalization performance. These findings demonstrated that ATR-FTIR combined with chemometric methods can effectively distinguish different varieties of *Chrysanthemum morifolium* Ramat. from Bozhou. Compared with traditional identification methods, this method has the advantages of simple operation, rapid analysis, high efficiency, and accurate and reliable results. Therefore, this study provided a new technical method and theoretical basis for the identification of chrysanthemum varieties and quality evaluation of *Chrysanthemum morifolium* Ramat. from Bozhou.

Key words: *Chrysanthemum morifolium*; ATR-FTIR; chemometrics; variety identification; quality evaluation

菊花,花中“四君子”之一,历来被视为高雅傲霜的象征,在我国有着悠久的栽培历史,凭借其独有的花期及特征,伴随着东方文明不断发展。在《尔雅》记载“鞠,治蓄”,鞠即为菊花。在孔子的《礼记》中记载有“季秋之月,鞠有黄华”,常常被赋予坚贞不屈的象征意义。菊花最早被作为观赏植物,后因其特殊的形态、气味被医药学家们用于治疗风寒感冒、风热感冒、头痛眩晕、目赤肿痛、眼目昏花、疮痈肿毒等症^[1-3]。菊花为菊科植物菊(*Chrysanthemum morifolium* Ramat.)的干燥头状花序,性甘味苦,微寒,归肺、肝经。具有散风清热、平肝明目、清热解毒之效^[4]。现代药理学研究表明,菊花具有抗菌、抗病毒^[5]、抗心血管疾病、抗衰老^[6]、抗氧化、抗凝血、抗肿瘤、驱铅、镇痛等多种药理作用^[7-11]。菊花的化学成分复杂多样,主要含有黄酮类、挥发油类、有机酸类、氨基酸类、糖类及微量元素等。研究表明,木犀草素、绿原酸、红花苷等是菊花的主要有效成分^[12-15]。

由于多数菊花的颜色、外观和气味等极其相似,使得普通消费者很难直接区分他们的表面特征。同时,近年来市场上现在流行的菊花均为 *Chrysanthemum morifolium* 变种,是由长期的栽培引种及人为培育形成的。然而现在大量菊花品种引种于亳州,势必会引起二次变异。这使得一些正品菊花渐渐被这些品种取代,使得菊花的种质资源受到了威胁^[16]。此外,菊花作为一种重要的观赏和药用植物,在亳州地区种植广泛,且品种繁多。因此,对亳州产菊花品种真伪鉴别和质量评价具有一定的实用价值和重大的现实意义^[17-19]。

常见的鉴别方法有显微鉴别、性状特征鉴别、理化鉴别、分子鉴别等,相较于传统的鉴别方法,傅立叶变换红外光谱(FT-IR)技术能够在较短的时间内获取完整的光谱信息,而传统技术可能需要多个单点测量来获得相同的信息,这使得

FT-IR 技术更高效^[19-21]。衰减全反射(ATR)技术是红外光谱中最常用的采样技术。在光学密度更高的介质中传播的 IR 光在与光学稀有介质的界面处被全反射。ATR-FTIR 技术产生的数据可以通过计算机进行处理和分析,利用数学算法来提取更多的信息^[22-25]。该仪器通常具有较高的分辨率,能够分辨复杂样品中的细微结构和特征。采用 ATR-FTIR 法可以快速高效地对亳州产菊花进行鉴别,但也存在水分干扰、分辨率限制、数据处理复杂等缺点。

ATR-FTIR 作为一种便捷式光谱分析技术,在中药学领域中得到了广泛应用。FT-IR 技术能够快速获取菊花的红外光谱信息,而化学计量学方法则可以对这些光谱数据进行更为深入分析和处理^[26]。实验针对预处理后的光谱矩阵,建立了随机森林(RF)^[27,28]、KNN(K 邻近)^[29]、支持向量机(SVM)^[30,31]和正交偏最小二乘法判别分析(OPLS-DA)分类模型,用于鉴别不同的菊花品种^[32]。本文旨在运用 FT-IR 结合化学计量学对亳州产菊花品种鉴别,探讨该方法的原理、方法学及应用,为亳州产菊花的品种鉴别和中药材的质量评价提供一种新的思路。

1 实验部分

1.1 主要仪器与试剂

IRAffinity-1S 型傅里叶变换红外光谱仪(日本 Shimadzu 公司);AX523ZH 型分析天平(精度:0.1 mg,美国 Ohaus 公司);A11 型分析研磨机(德国 Ika 集团);DHG-91012A 型电热恒温鼓风干燥箱(上海三发科学仪器有限公司)。

11 种菊花样本,于 2024 年 11 月份在安徽省亳州市十八里镇采收,经安徽中医药大学第二附属医院徐倩副主任中药师鉴定,样品存于省现代中药产业共性技术研究中心,具体信息见表 1。

表 1 菊花样品信息表

Tab.1 Information table on *Chrysanthemum morifolium* samples

样品序号	样品编号	样品名称	产地	种植方式	采集时间
1	1~20	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Boju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
2	21~40	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Pekingju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
3	41~60	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Chuju'	安徽亳州	栽培	2023. 11
4	61~80	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Da huang-ju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
5	81~100	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Gongju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
6	101~120	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Hang bai-ju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
7	121~140	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Huai huang-ju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
8	141~160	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Jinsi huang-ju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
9	161~180	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Qiju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
10	181~200	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Subeiju'	安徽亳州	栽培	2024. 11
11	201~220	<i>Chrysanthemum morifolium</i> cv. 'Wuyuan huang-ju'	安徽亳州	栽培	2024. 11

1.2 样品前处理

样品采集后,去除杂质,置于 50 °C 烘箱中烘干,然后于干燥器中冷却至室温,干燥至质量恒定。粉碎,充分研磨成粉过 200 目标准分样筛,每种菊花样品分为 20 批,分别储存于自封袋,保存于避光的干燥器中。

1.3 中红外光谱的采集

本实验采用衰减全反射傅立叶变换红外光谱(ATR-FTIR)进行分析,在(22±2) °C 下进行,检测过程中要始终保持实验环境干燥。设置测量方式为 T%;分辨率为 4 cm⁻¹;扫描范围为 4000~400 cm⁻¹;扫描 32 次。采用金刚石 ATR 附件,以空气作为参比,扣除大气背景中水分和 CO₂ 的干扰,IR Solution 软件进行样品原始光谱的扫描。总收集 11 个菊花品种,每个品种分为 25 批,每批平行测定 3 次,取 3 次光谱的平均光谱作为最终的光谱数据,每条原始光谱记录了 1764 个透过率值。

1.4 正交偏最小二乘法判别分析

在菊花样品中采集全波段 4000~400 cm⁻¹ 作为分析数据,共 220 组。将测得的数据导入到 SIMCA 14.1 软件中进行正交偏最小二乘法判别分析,作出散点图。由于菊花种属间亲缘关系相近,在主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)中无法较为明显的展示不同品种菊花间的差异性,故使用 OPLS-DA 对数据进行拟合。

1.5 异常值剔除与数据集划分

采用马氏距离^[33,34]进行异常值的剔除。该方法是一种多变量统计分析中常用的度量方法,能够衡量点与点之间的距离,同时考虑变量之间的相关性。

应用光谱-理化值共生距离算法(Sample set Partitioning based on Joint *x-y* Distances, SPXY)^[35,36]将不同品种的 220 个菊花样本按 3:1 的比例随机划分为 165 个样本作为训练集和 55 个样本作为测试集。

1.6 光谱预处理

使用 OMNIC 软件对光谱原始光谱进行基线校正、ATR 校正、自动平滑、归一化等处理后,在 SIMCA 14.1 软件中选取了多元散射校正(Multiplicative Scatter Correction, MSC)、变量标准化(Standard Normalized Variate, SNV)等多种预处理方法及其组合进行数据分析^[37-39]。

1.7 波段筛选

采用波段筛选方法使有效数据更精简,选择变量筛选方法主要有无信息变量消除(UVE)、连续投影算法(SPA)^[40]、竞争性自适应重加权采样(CARS)^[41]等。

1.8 化学模式识别

采用有监督的模式识别方法,通过已知样本的训练和学习构建模型。主要包括 K 最近邻法、簇类独立软模式方法(Soft Independent Modeling of Class Analogy, SIMCA)、支持向量机分类(Support Vector Machine, SVM)等。

2 结果与讨论

2.1 中红外光谱的采集

图 1 所示为 220 批菊花样品经大气校正、基线校正、ATR 校正和光滑处理后的红外图谱,从图中可以看出,11 种菊花的红外光谱图的峰形相似。通过对每个品种菊花的平均光谱进行整合,其吸收峰的相应波长如图 2 所示。

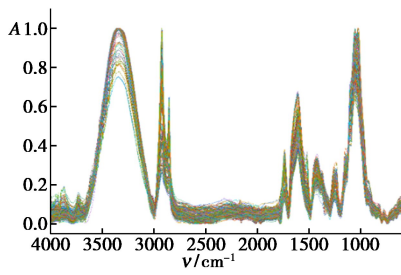


图 1 菊花样品的中红外总光谱图

Fig.1 Mid-infrared (MIR) raw spectra of *Chrysanthemum morifolium* samples

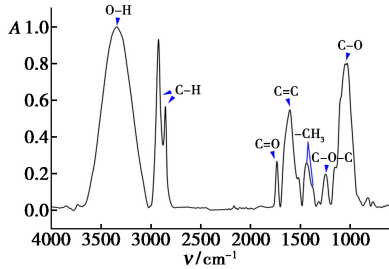


图 2 中红外光谱官能团归属图

Fig.2 Mid-infrared (MIR) spectrum with functional group assignments

图 2 为 11 个不同品种的菊花样品的平均光谱。菊花中主要含有黄酮类、挥发油类、糖类及微量元素等。其中,3336 cm^{-1} 处的吸收峰较宽,可能为缔合的 O—H 的对称伸缩振动。2917 和 2851 cm^{-1} 处的吸收峰是甲基和亚甲基的 C—H 不对称伸缩振动,是为挥发油类特征表现。同时,1433 和 1376 cm^{-1} 处的吸收峰表示—CH₃ 的弯曲振动,可以得出存在—CH₃。1736 cm^{-1} 处的吸收峰对应于羰基 C=O 的不对称伸缩振动,说明可能含有少量酯类成分。1607 cm^{-1} 处的吸收峰可能为共轭羰基 C=O 的伸缩振动吸收峰或芳香环的骨架振动,可认为是黄酮类的特征表现;1247 cm^{-1} 处的吸收峰为 C—O—C 的不对称伸缩振动,部分对称伸缩振动被掩盖。1049 cm^{-1} 处的吸收峰推测可能为 C—O 的不对称伸缩振动,可能为苷类及多糖类成分的红外吸收,具体信息如表 2 所示^[42]。

表 2 菊花的红外光谱峰解析

Tab.2 Assignments of the main IR characteristic peaks of *Chrysanthemum morifolium* samples

吸收峰/ cm^{-1}	主要官能团	吸收峰/ cm^{-1}	主要官能团
3336	O—H, vs	1433	C—H, $\delta_{as}/\text{CH}_3, \nu$
2917	—CH ₂ , vas	1376	C—H, $\delta_s/\text{CH}_3, \nu$
2851	—CH ₂ , vas	1247	C—O, vas
1736	C=O, vas	1049	C—O, vas
1607	C=O, $\nu/\text{Ph}, \nu$		

2.2 OPLS-DA 模型的判别

将不同品种的菊花样本导入 SIMCA 14.1 软件中,建立 OPLS-DA 模型。从图 3 OPLS-DA 得分图可以看出,11 个品种的菊花样品的数据点绝大部分落在了 95% 置信区间内,且大体可分为 11 类,每一个品种的菊花都聚在一起,说明亳州产菊花的品种质量趋于稳定。其中,毫菊和贡菊距离相近,且有部分重叠,推测可能由于贡菊引种到亳州后受土壤、气候等影响发生了二次变异,形成了栽培变异种,衍生出与毫菊的某些亲缘关系,故出现与毫菊有部分重叠的现象。

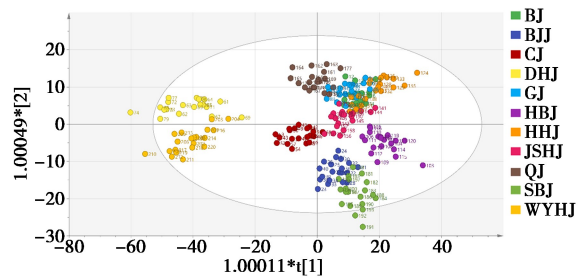


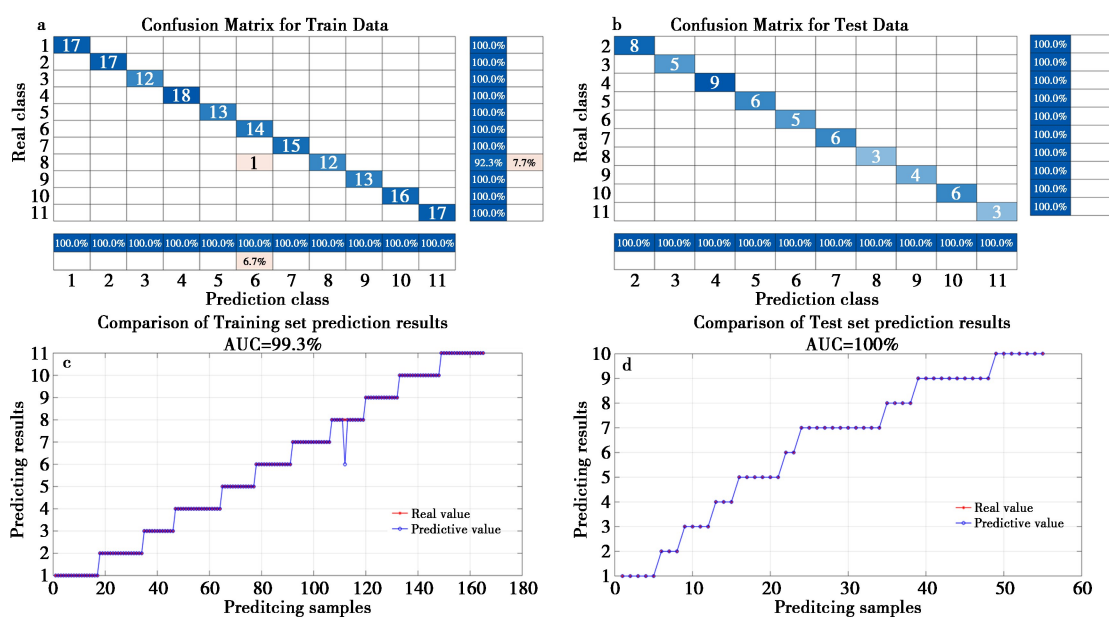
图 3 菊花样本的 OPLS-DA 的得分图

Fig.3 OPLS-DA score plot of *Chrysanthemum morifolium* samples

2.3 光谱预处理的选择

为了消除或减轻由于仪器或样品制备过程中引入的噪声、变量间的干扰、光谱基线漂移等问题,提高数据的质量和可解释性,需要对光谱进行预处理。在本实验中,MSC、SNV、S-G、1st D、2nd D、MSC+1st D、MSC+2nd D、SNV+1st D、SNV+2nd D、S-G+1st D、S-G+2nd D、MSC+SNV、S-G+MSC 和 S-G+SNV 为选取的光谱预处理的方法。交叉验证均方根误差(Root Mean Square Error of Cross Validation, RMSECV)是一种在统计学和机器学习中常用的性能评估指标,通常用于评估基于交叉验证模型的预测能力。RMSECV 值越小,则表明选择的预处理方法越好^[42]。将 RMSECV 的值作为评价指标,可以找到更适合菊花样品数据的预处理方法。如图 4 所示,再建立 SVM 分类模型,将不同品种菊花样本导入 MATLAB 2021a 软件,以创建用于判别分析的 SVM 分类器。可以较为直观的展示每种预处理方法的预测结果。

如表 3 所示,在最适宜的主因子个数下 MSC+2nd D、SNV+1st D 和 SNV+2nd D 的 RMSECV 值最小,分别为 0.0836、0.0931 和 0.0768。同时 MSC+2nd D 的训练集和测试集的精确性最高,通过系统分析,MSC+2nd D 为最佳的预处理方法。



a. 训练集所得结果; b. 测试集所得结果; c. 训练集的预测结果比对; d. 测试集的训练结果比对

图 4 SVM 分类模型对 MSC+2nd D 预处理的预测结果比对

Fig.4 Comparison of prediction results for the SVM classification model based on MSC+2nd D preprocessing

表 3 不同预处理方法建立的分类模型的结果

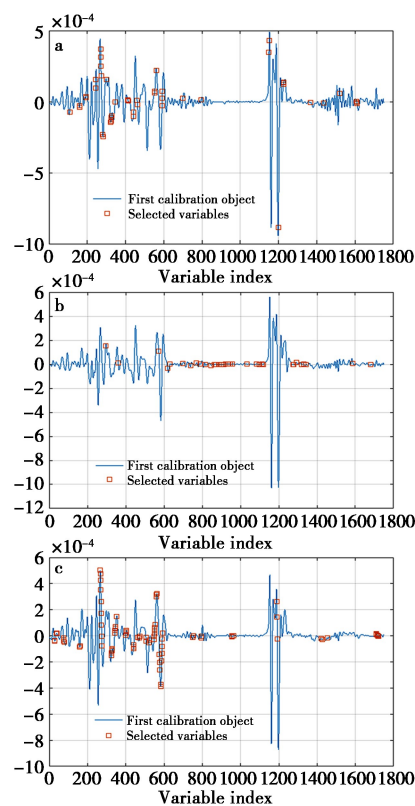
Tab.3 Performance of classification models established using different preprocessing methods

光谱预处理方法	LVs	RMSECV	训练集/%	测试集/%
1st D	14	0.1013	97.33	94.29
2nd D	14	0.0967	100.00	94.29
MSC	13	0.1279	98.67	92.86
SNV	13	0.1275	99.33	87.14
S-G	23	0.1326	98.00	78.57
MSC+1st D	18	0.1001	99.33	98.57
MSC+2nd D	13	0.0836	99.33	100.00
SNV+1st D	14	0.0931	100.00	95.71
SNV+2nd D	13	0.0768	100.00	98.57
S-G+1st D	16	0.1013	98.67	92.86
S-G+2nd D	13	0.1011	99.33	94.29
MSC+SNV	13	0.1275	96.67	91.43
S-G+MSC	13	0.1253	98.67	88.57
S-G+SNV	13	0.1252	97.34	90.00

2.4 变量筛选方法的选择

在确定 MSC+2nd D 作为最佳预处理方法后, 使用 UVE、SPA 和 CARS 3 种变量筛选算法从 MSC+2nd D 处理获得的光谱数据中提取特征变量。为了更好地观察保留的特征变量的分布, 图 5 显示了最佳预处理后样本的光谱数据和变量选择方法保留的特征量。如图所示, 3 种变量选择方法保留的变量存在部分重叠, 且不同的变量筛选方法所筛选出的变量数不同。CARS 和 UVE

方法选择的变量更倾向于在特征吸收峰附近, 较 SPA 筛选出的变量更具代表性。其中, UVE 选择



a. CARS; b. SPA; c. UVE

图 5 3 种变量筛选方法所得结果

Fig.5 Results of variable selection using three different algorithms

的变量更为全面,而 CARS 筛选出的变量较为精简,为了选择出更好的变量筛选方法,需对以上 3 种变量筛选方法进行模型评价。

为了评估变量筛选方法对数据的有效选择性,在相同的模型参数下,将 3 种变量选择方法所得的数据与 RF、KNN 和 SVM 3 个分类模型分别

进行组合,以得到最优方法。表 4 显示了不同变量筛选后的特征值以及不同模型组合下的决定系数 R^2 、平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE)、平均偏差误差 (Mean Bias Error, MBE) 和均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE)。通过评估结果来判断模型的性能。

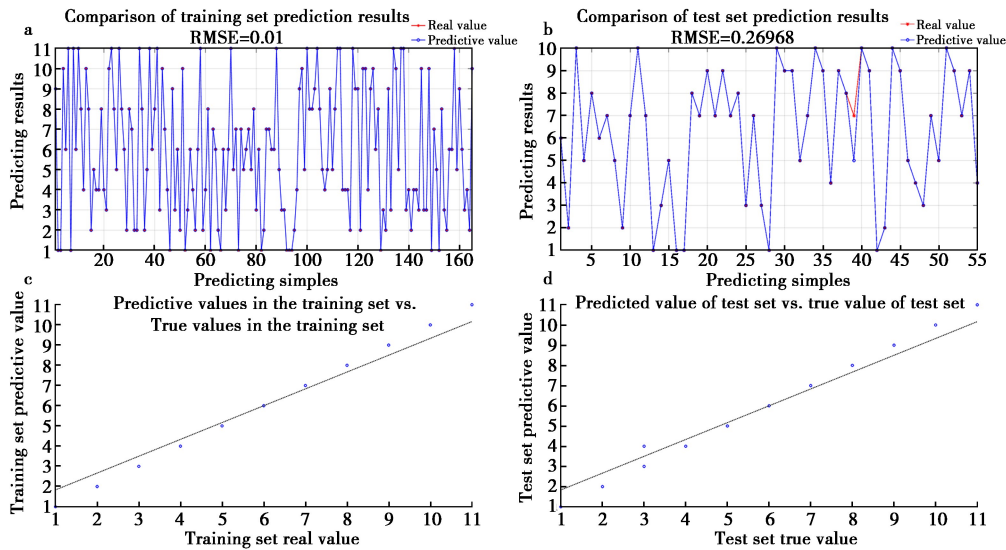
表 4 利用不同的变量筛选方法对所建立的模型进行分类结果

Tab.4 Classification performance of SVM models based on different variable selection methods

变量筛选方法	变量数	分类模型	训练集 (n = 165)				测试集 (n = 55)			
			R^2	MAE	MBE	RMSE	R^2	MAE	MBE	RMSE
SPA	35	RF	0.83	1.13	0.01	1.32	-0.04	2.46	0.69	2.97
		KNN	1.00	0.01	0.01	0.01	-0.94	3.83	2.20	4.38
		SVM	0.97	0.18	-0.04	0.49	-0.39	2.85	0.07	3.48
UVE	106	RF	0.69	1.43	-0.06	1.69	-0.03	2.97	-0.77	3.54
		KNN	1.00	0.01	0.01	0.01	-0.45	2.92	0.05	3.81
		SVM	0.95	0.22	-0.01	0.67	-0.01	2.52	0.51	3.13
CARS	55	RF	0.96	0.34	-0.01	0.53	0.91	0.63	-0.19	1.04
		KNN	1.00	0.01	0.01	0.01	0.92	0.10	0.10	0.30
		SVM	0.99	0.09	-0.01	0.09	0.93	0.46	0.17	0.77

理想情况下, R^2 范围在 -1 到 1 之间,其绝对值越接近 1,表示其相关性越强。RMSE 和 MAE 越小,表示模型预测的误差越小,预测能力越强。MBE 接近于零,表示模型的预测与实际值的平均偏差很小。综上所述,由表 4 可以得出变量数为

各波段筛选后的值,CARS 在 KNN 模型中的效果最好,校正集和验证集的 R^2 均在 0.90 以上,MAE、MBE 的值较小且 RMSE 的值更接近于 0。CARS 在 KNN 模型中的结果如图 6 所示,其预测值和真实值的差异较小,说明模型拟合的效果较好。



a. 训练集预测结果比对; b. 测试集预测结果比对; c. 训练集的预测值和真实值的线性回归; d. 测试集的预测值和真实值的线性回归

图 6 CARS 处理在 KNN 模型中的预测结果

Fig.6 Prediction results of the KNN model based on CARS variable selection

2.5 模型预测

最后,用 SPXY 划分样本得到的预测集验证了该模型的性能。根据之前的研究,采用 MSC + 2nd D 预处理方法和 CARS-KNN 模型得出的变量

筛选数据来识别菊花来源。所构建的模型对预测集的预测结果如图 7 所示,其模型可以较好的对 11 个品种的亳州产菊花进行分类,模型的预测性能较好,其训练集的预测准确率为 100%,测试集

的预测准确率为 98.2%,其中只有一批“滁菊”的样本被错误地预测为“杭白菊”样本,其他亳州产菊花样本均被正确预测,即表明所建立的模型具有良好的预测准确性和稳健性。

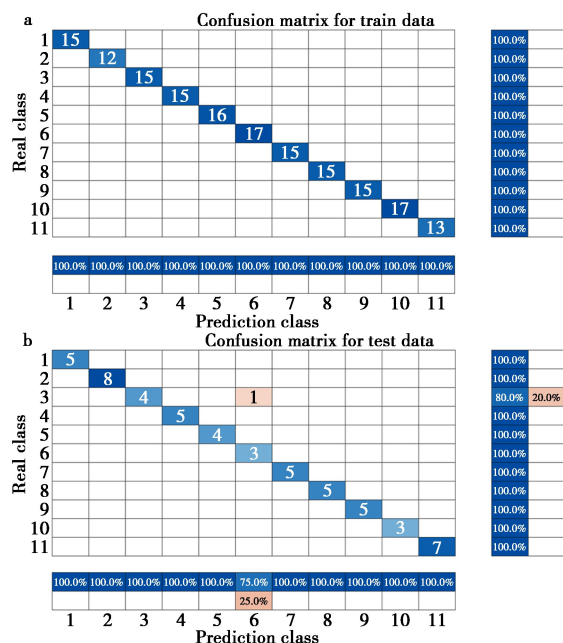


图 7 训练集(a)和测试集(b)的预测结果

Fig.7 Prediction results for the training set (a) and the test set (b)

3 结论

本研究采用 ATR-FTIR 结合化学计量学的方法,建立了一种准确、快速的鉴别和品种鉴定方法,实现对亳州产菊花品种的分类以及起源的追溯。FT-IR 相较于其他鉴别方法,具有操作简单,测定快速、高效等优点,可表征菊花化学成分的综合信息,菊花红外光谱具有较为明显的指纹特征。比较各品种谱图的强峰位置可知,不同产地的菊花含有相似的主体成分。它们所共有的较强吸收峰均表现在 3400 cm^{-1} 附近的 O—H 伸缩振动, $3000\sim 2800\text{ cm}^{-1}$ 范围内的亚甲基的饱和 C—H 伸缩振动, 1730 cm^{-1} 处的 C=O 的伸缩振动、 1060 cm^{-1} 附近的 C—O 伸缩振动。结合菊花中所含黄酮类、挥发油类及各种苷类的红外特征,可将 $3000\sim 2800\text{ cm}^{-1}$ 区段认为是挥发油类特征表现; $1800\sim 1350\text{ cm}^{-1}$ 区段内的 C=C 伸缩振动或芳环的骨架振动吸收峰以及 1730 cm^{-1} 处的羰基的伸缩振动峰,可认为是黄酮类的特征表现; $1300\sim 1000\text{ cm}^{-1}$ 区段可表征苷类及多糖类成分的红外吸收。

基于中红外光谱数据建立了 OPLS-DA、RF、SVM 和 KNN 模型,结果表明,这些模型对不同品种的亳州产菊花具有良好的鉴别性能。其中, SVM 模型对于光谱预处理的多种方法进行了评价,综合考虑选择 MSC+2nd D 为最佳光谱预处理方法。在波段筛选中,选取了 CARS、SPA 和 UVE 3 种较为常见的波段筛选方法,为了评估其方法对数据的有效选择性,将 3 种变量选择方法所得的数据与 RF、KNN 和 SVM 3 个分类模型分别进行组合,得到 KNN 与其他模型相比其分类准确率达到 100%。因此, CARS-KNN 模型可以优先用于亳州产菊花的波段筛选及品种分类鉴别。同时,研究也为中红外在中药质量控制中的应用提供了参考。

参考文献:

- [1] Ye M Q, Deng J, Peng J, Zhang R R, Wu M H, Ma Z G, Cao H, Zhang Y. *Chin. Traditio. Patent Med.*, 2022, **44(6)**:1912-1917.
叶梦倩,邓静,彭杰,张睿蕊,吴孟华,马志国,曹晖,张英. *中成药*, 2022, **44(6)**:1912-1917.
- [2] Hao D C, Song Y J, Xiao P G, Zhong Y, Wu P L, Xu L J. *Front. Plant Sci.*, 2022, **13**:973197.
- [3] Chen L, Liu Y, Huang X J, Zhu Y Y, Li J X, Miao Y H, Du H Z, Liu D H. *Chem. Biodivers.*, 2021, **18(8)**: e2100206.
- [4] Chinese Pharmacopoeia Commission. *Pharmacopoeia of the People's Republic of China*. Beijing: China Medical Science and Technology Press, 2020.
国家药典委员会. *中华人民共和国药典-三部:2020 年版*.北京:中国医药科技出版社, 2020.
- [5] Cho S Y, Lee H G, Kwon S, Park S U, Jung W S, Moon S K, Park J M, Ko C N. *Pharmaceuticals*, 2023, **16(3)**:448.
- [6] Liu Y C, Lu C F, Zhou J, Zhou F F, Gui A J, Chu H L, Shao Q S. *J. Ethnopharmacol.*, 2024, **330**:118198.
- [7] Youssef F S, Eid S Y, Alshammari E, Ashour M L, Wink M, El-readi M Z. *Foods*, 2020, **9(10)**:1460.
- [8] Salem G A, Alamyel F B, Abushaala F A, Hussain M S, Elnory K A, Abusheba H, Sahu R P. *Biomed. Pharmacother.*, 2019, **117**:109123.
- [9] Zhang J, Su W Q, Filipczak N, Luo Y, Wan A P, He Y, Yan S J, Li X, Yang M. *Acupunct. Herb. Med.*, 2024, **4(1)**: 79-91.
- [10] Liang W L, Gong D, Zhang W K. *STEMedicine*, 2021, **2(5)**:e69.

- [11] Zhou H P, Ren M X, Guan J Q, Liu Y L, Xiong Y X, Zhong Q F, Jiang S, Wu S X. *Chin. Tradition. Herbal Drugs*, 2019, **50**(19):4785-4795.
周衡朴,任敏霞,管家齐,刘艳莉,熊友香,钟全发,蒋珊,吴素香. *中草药*, 2019, **50**(19):4785-4795.
- [12] Wang Z J, Wu T, Wang Y, Xu J, Yao Z G, Li Y R. *Storage Process.*, 2019, **19**(6):216-224.
王忠杰,吴涛,王怡,许杰,姚志刚,李宇茹. *保鲜与加工*, 2019, **19**(6):216-224.
- [13] Yuan H W, Jiang S, Liu Y K, Daniyal M, Jian Y Q, Peng C Y, Shen J L, Liu S F, Wang W. *J. Ethnopharmacol.*, 2020, **261**:113043.
- [14] Wang Y, Li Y Y, Guo W, Yang X, Qu J M, Gao M, Chen S T, Dong J R, Li Q, Wang T J. *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**(22):13767.
- [15] Xiong S H, Xie J C, Xiang F, Yu J H, Li Y M, Xia B H, Zhang Z M, Li C, Lin L M. *J. Ethnopharmacol.*, 2025, **338**:119094.
- [16] Peng L, He M L, Wang X, Guo S B, Zhang Y Z, Li W L. *J. Agric. Food Chem.*, 2024, **72**(14):7707-7715.
- [17] Wang J, Hu Y F. *Environ. Pollut. Bioavailab.*, 2023, **35**(1):2223768.
- [18] Yang J, Yin C L, Miao X, Meng X R, Liu Z M, Hu L Q. *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2021, **248**:119251.
- [19] He G, Zhu X Y, Shen T, Wang Y Z. *Infrared Phys. Technol.*, 2024, **136**:105062.
- [20] Chen X D, Choong Y, Zhang W W, Li G Q, Lan J. *J. Mol. Struct.*, 2020, **1199**:126917.
- [21] Wang Y Y, Li J Q, Liu H G, Wang Y Z. *Molecules*, 2019, **24**(12):2210.
- [22] Ramer G, Lendl B. *Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation*. New York: John Wiley & Sons, Ltd, 2013.
- [23] Milosevic M. *Appl. Spectrosc. Rev.*, 2004, **39**(3):365-384.
- [24] Wang H P, Chen P, Dai J W, Liu D, Li J Y, Xu Y P, Chu X L. *Trac Trends Anal. Chem.*, 2022, **153**:116648.
- [25] Xiao S J, Wang Q H, Li C F, Liu W J, Zhang J J, Fan Y K, Su J D, Wang H T, Luo X L, Zhang S J. *Food Control*, 2022, **134**:108659.
- [26] Chen P, Dai J W, Li J Y, Xu Y P, Liu D, Chu X L. *Chem. Reagents*, 2023, **45**(6):105-112.
陈瀑,戴嘉伟,李敬岩,许育鹏,刘丹,褚小立. *化学试剂*, 2023, **45**(6):105-112.
- [27] Rimal Y, Sharma N, Alsadoon A. *Multimed. Tools Appl.*, 2024, **83**(30):74349-74364.
- [28] Janitza S, Tutz G, Boulesteix A L. *Comput. Stat. Data Anal.*, 2016, **96**:57-73.
- [29] Zhang Z H. *Ann. Transl. Med.*, 2016, **4**(11):218.
- [30] Dinesh P, Vickram A S, Kalyanasundaram P. *Fifth Int. Conf. Appl. Sci. ICAS2023*, 2024, **3097**:020140.
- [31] Hu Y R, Li J Q, Liu H G, Fan M P, Wang Y Z. *Food Sci.*, 2021, **42**(8):248-256.
胡翼然,李杰庆,刘鸿高,范茂攀,王元忠. *食品科学*, 2021, **42**(8):248-256.
- [32] Zhou R, Chen X M, Zhang L L, Zhang L, Xu D F, Zhang S Y, Dai X X, Mao H C, Xie F, Dai H C, Song Y, Guo J, Chen W Y. *Food Ferment. Ind.*, 2023, **49**(5):88-93.
周瑞,陈晓明,张莉丽,张良,许德富,张宿义,代小雪,毛洪川,谢菲,代汉聪,宋艳,郭佳,陈雯月. *食品与发酵工业*, 2023, **49**(5):88-93.
- [33] Ghorbani H. *Facta Univ. Ser. Math. Inform.*, 2019, DOI: 10.22190/FUMI1903583G.
- [34] Drumond D A, Rolo R M, Costa J F C L. *Nat. Resour. Res.*, 2019, **28**(1):145-152.
- [35] Chen W H, Chen H Z, Feng Q X, Mo L N, Hong S Y. *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2021, **248**:119182.
- [36] Yang Z F, Xiao H, Zhang L, Feng D J, Zhang F Y, Jiang M S, Sui Q M, Jia L. *Anal. Methods*, 2019, **11**(31):3936-3942.
- [37] Silalahi D D, Midi H, Arasan J, Mustafa M S, Caliman J P. *Vib. Spectrosc.*, 2018, **97**:55-65.
- [38] An C Q, Yan X, Lu C, Zhu X H. *Infrared Phys. Technol.*, 2021, **118**:103869.
- [39] Liu Y, Liu Y L, Chen Y Y, Zhang Y, Shi T Z, Wang J J, Hong Y S, Fei T, Zhang Y. *Remote. Sens.*, 2019, **11**(4):450.
- [40] Bommert A, Sun X D, Bischl B, Rahnenführer J, Lang M. *Comput. Stat. Data Anal.*, 2020, **143**:106839.
- [41] Guo P, Li T, Gao H, Chen X W, Cui Y F, Huang Y R. *Remote. Sens.*, 2021, **13**(19):4000.
- [42] Cao S Y, Li S Y, Yue Y S, Zhu S C, Zhang Z S Y, Zhang X W. *Chem. Reagents*, 2025, **47**(11):81-86.
曹书妍,李思瑶,岳岩松,朱思聪,张朱珊莹,张献文. *化学试剂*, 2025, **47**(11):81-86.