

# 基于数据融合的藏药五脉绿绒蒿品质评价及其环境影响因素研究

龙若兰<sup>1,2</sup>, 冯丹<sup>1,2</sup>, 李佩佩<sup>1,2</sup>, 李朵<sup>1,2</sup>, 孙菁<sup>1\*</sup>(1.青海省青藏高原特色生物资源研究重点实验室, 中国科学院西北高原生物研究所, 西宁 810008; 2.中国科学院大学, 北京 101408)

**摘要:** 目的 运用光谱数据融合策略建立藏药五脉绿绒蒿总生物碱含量快速检测模型, 探讨环境因素对五脉绿绒蒿生物碱类物质积累的影响。方法 分别采集 19 个不同产地的五脉绿绒蒿的近红外光谱(near-infrared, NIR)、中红外光谱(mid-infrared, MIR)和中红外衰减全反射光谱(attenuated total reflectance, ATR), 利用紫外分光光度法测定总生物碱的含量, 采用主成分回归方法分别建立 3 个单一光谱模型和 2 个数据融合定量检测模型, 通过 Pearson 相关性分析探讨地理因子、气候因子、土壤因子等不同环境因素与总生物碱含量的关系。结果 经数据融合后, NIR+ATR 模型效果较好, 其校正集相关系数、预测集相关系数、校正集均方根误差、预测集均方根误差值分别为 0.980 3, 0.997 2, 0.060 3, 0.063 3, 且残差预测偏差>4。海拔、年均降水量与总生物碱含量呈显著正相关关系, 纬度、年均温度与总生物碱含量呈显著负相关关系, 土壤全氮和碱解氮与总生物碱含量呈极显著正相关关系。结论 光谱数据融合可以增强模型的预测能力, 五脉绿绒蒿生物碱类物质的积累同时受大的地理环境因子和小环境土壤因子及气象因子的影响。本研究可为五脉绿绒蒿快速质量评价及资源合理利用规划提供科学依据。

**关键词:** 红外光谱; 数据融合; 五脉绿绒蒿; 总生物碱; 品质评价; 环境因素

中图分类号: R284 文献标志码: B 文章编号: 1007-7693(2023)13-1810-08

DOI: 10.13748/j.cnki.issn1007-7693.20222172

引用本文: 龙若兰, 冯丹, 李佩佩, 等. 基于数据融合的藏药五脉绿绒蒿品质评价及其环境影响因素研究[J]. 中国现代应用药学, 2023, 40(13): 1810-1817.

## Quality Evaluation of Tibetan Medicine *Meconopsis Quintuplinervia* Regel. Based on Data Fusion and Study on Its Environmental Impact Factors

LONG Ruolan<sup>1,2</sup>, FENG Dan<sup>1,2</sup>, LI Peipei<sup>1,2</sup>, LI Duo<sup>1,2</sup>, SUN Jing<sup>1\*</sup>(1. Qinghai Key Laboratory of Qinghai-Tibet Plateau Biological Resource, Northwest Institute of Plateau Biology, Chinese Academy of Sciences, Xining 810008, China; 2. University of Chinese Academy of Science, Beijing 101408, China)

**ABSTRACT: OBJECTIVE** To develop a model for the quick quality evaluation of total alkaloid content and to explore the effects of environmental factors on the accumulation of alkaloids in *Meconopsis quintuplinervia* Regel.. **METHODS** The total alkaloid contents of *Meconopsis quintuplinervia* Regel. from 19 different areas in Qinghai-Tibet Plateau were detected by ultraviolet spectrophotometry. The near-infrared(NIR), mid-infrared(MIR) and mid-infrared with attenuated total reflectance(ATR) spectroscopy information of *Meconopsis quintuplinervia* Regel. were determined and integrated, respectively. Combined spectroscopy information with the content of total alkaloid, three single-spectrum and two data fusion quantitative models were performed by principal component regression. Pearson correlation analysis was utilized to explain the relationship between geographical factors, climatic factors, soil factors, and total alkaloid content. **RESULTS** It was found that the data fusion model of NIR coupled with ATR was the best model, with the related coefficient of calibration 0.980 3 and prediction 0.997 2, the root mean square error of calibration 0.060 3 and prediction 0.063 3, and residual predictive deviation>4. And altitude and annual precipitation were significantly positively correlated with total alkaloid content, while latitude and annual temperature were significantly negatively correlated with total alkaloid content. Moreover, total nitrogen and alkali-hydrolyzable nitrogen were positively correlated with total alkaloid content. **CONCLUSION** The spectral data fusion can enhance the prediction ability of the model. The accumulation of alkaloids was affected by both large geographical environmental factor, small environmental soil factors and meteorological factors. This study can provide a scientific basis for rapid quality evaluation and rational planning of resource utilization of *Meconopsis quintuplinervia* Regel.

**KEYWORDS:** infrared spectroscopy; data fusion; *Meconopsis quintuplinervia* Regel.; total alkaloids; quality evaluation; environment factor

基金项目: 青海省科技计划项目(2020-ZJ-T05, 2022-ZJ-Y18); 中国科学院兰州区域中心功能开发技术创新项目(2022g109)

作者简介: 龙若兰, 女, 硕士生 E-mail: longruolan@nwipb.cas.cn \*通信作者: 孙菁, 女, 博士, 研究员 E-mail: sunj@nwipb.cas.cn

五脉绿绒蒿(*Meconopsis quintuplinervia* Regel.)为罂粟科(Papaveraceae)绿绒蒿属(*Meconopsis*)多年生草本植物,具有重要药用价值和悠久药用历史,在藏医中常用于治疗肺炎、肝炎、头痛、水肿等疾病<sup>[1]</sup>。研究表明,生物碱类物质是五脉绿绒蒿的主要活性成分之一。Yu 等<sup>[2]</sup>发现总生物碱对脂多糖诱导的小鼠具有明显的抗炎作用。Yi 等<sup>[3]</sup>从五脉绿绒蒿中提取出了五脉绿绒蒿碱,并证明该物质与吗啡、青藤碱具有相似的药效团结构,有镇痛效果。可见,生物碱类化学成分是五脉绿绒蒿资源中重要的药效物质基础之一,对其进行分析与测定可在一定程度上有效地评价五脉绿绒蒿药材品质。此前的五脉绿绒蒿品质评价工作大多是利用传统湿化学分析方法进行生物碱含量测定,这些方法费时费力且环境不友好,不利于资源快速评价及生产实践应用。近年来,红外光谱技术以其快速、高效、无损、无污染的优点被广泛应用于药材质量评价与控制领域。例如, Bian 等<sup>[4]</sup>通过结合近红外光谱(near infrared Spectrum, NIR)和化学计量学方法成功建立了满山红药材的质量快速评价模型。Amirvaresi 等<sup>[5]</sup>建立了藏红花的 NIR 和中红外光谱(mid-infrared spectroscopy, MIR)掺假检测判别模型。然而,单一的 NIR 或 MIR 均有其自身的不足。其中, NIR 吸收强度弱,峰重叠严重<sup>[6]</sup>, MIR 信噪比低<sup>[7]</sup>。研究发现, NIR 和 MIR 数据融合可以同时反映给定样品的各种信息,提高分析的准确性<sup>[8]</sup>。例如, Pei 等<sup>[9]</sup>研究了滇重楼产地鉴别的 NIR、MIR 数据融合策略,结果表明,基于主成分特征变量提取的高级数据融合模型精度最高,可达 100%。Tao 等<sup>[10]</sup>采集了金银花和黄花蒿混合物液相萃取过程的 NIR 和 MIR 谱图,建立和比较了 8 种化合物的 NIR、MIR 单一光谱模型和光谱数据融合模型,结果表明 NIR 和 MIR 的数据融合模型效果优于单一光谱模型。

药材中有效成分大多为植物次生代谢物<sup>[11]</sup>,而环境因素对植物次生代谢物的合成过程又具有重要诱导作用。有研究报道,年均湿度<sup>[12]</sup>、温度<sup>[13]</sup>、土壤 pH 值、有机质含量<sup>[14]</sup>等生态环境因素对药材中生物碱类活性成分的积累具有重要影响。但目前尚无关于环境因素对五脉绿绒蒿生物碱含量影响的报道。

因此,本研究基于 3 种不同红外光谱,利用数据融合策略,构建了五脉绿绒蒿中总生物碱含

量快速检测的质量评价方法,并解析了环境因素对五脉绿绒蒿药材总生物碱含量的影响。研究结果可为五脉绿绒蒿的快速质量控制和资源合理规划提供科学依据。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料

于 2018 年 6—8 月花期,在青海省典型分布区域分别采集 19 个不同产地的五脉绿绒蒿,每个产地采集 20~30 株植物全草。所有采样点的分布信息见表 1。样品采集后,洗净去除杂质后自然阴干;干燥的全草样品经粉碎后过 80 目筛,存储于干燥器中待用。原植物标本经中国科学院西北高原生物研究所卢学峰研究员鉴定为五脉绿绒蒿(*Meconopsis quintuplinervia* Regel.)。

利用四分法<sup>[15]</sup>进行土壤取样,去除杂质,阴凉处干燥,混合均匀,粉碎,过 100 目筛,待用。

表 1 五脉绿绒蒿采样点

Tab. 1 Sampling sites of *Meconopsis quintuplinervia* Regel.

序号	市(州)	所属县	样点	经度	纬度	海拔/m
1	海北	门源县	卡子沟	101.80	37.28	2 939.7
2	海北	门源县	铜矿沟口	101.95	37.45	3 328.0
3	西宁	城西区	达坂山	101.41	37.36	3 544.2
4	海北	祁连	油葫芦沟口	99.79	38.19	3 290.7
5	海北	祁连	扁都口	100.90	38.06	3 391.3
6	海北	祁连	石林	100.24	38.07	3 493.5
7	海南	同仁县	麦秀垭口	101.85	35.23	3 571.6
8	果洛州	班玛	班玛县	100.66	32.89	3 733.0
9	海东	循化县	岗察乡	102.25	35.68	3 436.5
10	海东	循化县	达里加山	102.74	35.57	3 617.3
11	海东	互助县	柏木峡	101.46	36.37	3 362.8
12	海东	化隆	青沙山	101.60	36.31	3 387.9
13	果洛	玛沁	黑土山	102.21	37.01	3 452.0
14	西宁	湟中县	拉脊山	101.97	36.28	3 536.7
15	西宁	湟中县	群加乡	100.41	34.50	3 553.7
16	黄南	同仁	双朋西林场	102.33	35.47	3 671.5
17	玉树	玉树	仲达乡	96.84	33.24	4 554.0
18	果洛	久治	隆格山	100.87	33.30	4 320.5
19	果洛藏族自治州	久治	扎拉山	101.07	33.43	4 164.0

### 1.2 仪器与试剂

Cary300 Bio 紫外-可见分光光度仪(美国 Varian); AG135 电子天平(瑞士 Mettler Toledo); 旋转蒸发器(上海爱朗仪器有限公司); UPT-I-10T 型超纯水机(上海优普实业有限公司); KQ5200DE 超声波清洗仪(江苏昆山市超声仪器有限公司); Nicolet iS50 傅里叶变换红外光谱仪(美国 Thermo Fisher)。

盐酸罂粟碱(中国食品药品检定研究院,批号:171214-200404;含量 $\geq 99.9\%$ );无水乙醇、浓盐酸、甲醇、石油醚(沸程 60~90 °C)、浓氨水、氯仿、冰乙酸、无水乙酰胺、无水乙酸钠、溴甲酚绿均为分析纯,购自天津市大茂化学试剂厂;试验用水为超纯水。

### 1.3 总生物碱含量测定

利用酸性染料比色法<sup>[16]</sup>测定五脉绿绒蒿总生物碱含量。

**1.3.1 标准曲线的绘制** 配制浓度为 88.8  $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$  的盐酸罂粟碱水溶液为工作液。然后分别将 0.2, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6 mL 的工作液转移至 50 mL 的烧瓶中,补加超纯水至 2 mL,加入 5 mL 缓冲液和 2 mL 指示剂(溴甲酚绿)。显色后,向烧瓶中加入 18 mL 氯仿。将液体转移至分离漏斗中提取。静置 2 h 后,用加有无水硫酸钠的锥形瓶接出下相,进行脱水并过滤,取滤液测定其在 418 nm 下的吸光度,绘制标准曲线。吸光度  $y$  与盐酸罂粟碱浓度  $x$  的线性回归方程为  $y=0.01x+0.0227$ ,  $r^2=0.9936$ 。表明在 8.880~71.040  $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$  内,盐酸罂粟碱浓度与吸光度呈良好的线性关系。

**1.3.2 供试品制备与总生物碱含量测定** 取五脉绿绒蒿粉末 2.000 g 与 20 mL 95%酸性乙醇(含 0.1%盐酸)混合,摇匀称重。12 h 后,室温下超声 3 次,每次超声 20 min。然后,用 95%的酸性乙醇补充质量,并过滤液体。滤液经真空旋转蒸发,所得产物用 10 mL 水溶解。用石油醚萃取,去除脂溶性成分。萃取后所得水相即为供试品溶液。

取 1 mL 样品用超纯水稀释 5 倍。按“1.3.1”项下方法显色后进行检测,将吸光度值代入回归方程,计算样品中总生物碱含量。

**1.3.3 方法学验证** 通过方法学试验来验证实验的可行性。按“1.3.1”项下方法测定同一样品的吸光度 5 次来进行精密度试验。按“1.3.2”项下方法平行实验 5 次,再按“1.3.1”项下方法分别测定样品的吸光度,进行重复性试验,计算 RSD 值。采用外标法计算回收率。

### 1.4 环境因素的获取

**1.4.1 地理因子** 采集植物样本的同时用 GPS 记录采样点的海拔、经度和纬度。

**1.4.2 气象因子** 气象数据来自于世界气候网(<https://www.worldclim.org/data/worldclim21.html>)。

**1.4.3 土壤因子** 根据中华人民共和国农业农村

部推荐标准测定土壤 pH 值(NY/T 1377—2007)、有机质(NY/T 1121.6—2006)、全盐量(NY/T 1121.16—2006)、有效磷(NY/T 1121.7—2014)和速效钾(NY/T 889—2004)含量。参照森林土壤测定标准测定土壤全氮量(LY/T 1228—2015)、全磷量(LY/T 1232—2015)、全钾量(LY/T 1234—2015)。土壤碱解氮含量参照地方标准(DB13/T 843—2007)测定。

### 1.5 红外光谱的采集

**1.5.1 NIR 光谱采集** 利用傅里叶变换红外光谱仪的积分球漫反射模块。每个样品装入圆柱形玻璃样品杯,装样高度为 0.10 cm。谱图采集时,以空气为背景,室温 25 °C,在 10 000~4 000  $\text{cm}^{-1}$  内扫描 32 次,分辨率 8  $\text{cm}^{-1}$ ,重复 3 次。

**1.5.2 MIR 光谱采集** 采用傅里叶变换红外光谱仪获得粉末样品的 MIR 谱图。样品与 KBr 比例为 1:100,以空气为背景,室温 25 °C,在 4 000~400  $\text{cm}^{-1}$  内扫描 32 次,分辨率 4  $\text{cm}^{-1}$ ,重复 3 次。

**1.5.3 ATR 光谱采集** 由傅里叶变换红外光谱仪的衰减全反射模块采集。以空气为背景,室温 25 °C,在 4 000~400  $\text{cm}^{-1}$  内扫描 32 次,分辨率 4  $\text{cm}^{-1}$ ,重复 3 次。

### 1.6 定量模型的建立

利用 OMNIC 软件分别对 NIR、MIR 和 ATR 的原始光谱进行基线校正。将不同来源的光谱数据进行简单的串联,形成融合数据块<sup>[17-18]</sup>。按 3:1 的比例划分校正集和预测集。采用 TQ 软件构建 3 种单一光谱和 2 种数据融合 PCR 定量模型。模型评价指标为校准集相关系数(related coefficient of calibration, Rc)、预测集相关系数(related coefficient of prediction, Rp)、校准集均方根误差(root mean square error of calibration, RMSEC)、预测集均方根误差(root mean square error of prediction, RMSEP)和相对预测偏差(residual predictive deviation, RPD)。

### 1.7 数据处理

利用 OMNIC 软件进行红外光谱预处理, TQ Analyst 软件建立光谱模型, SPSS 26.0 进行总生物碱含量和环境因子的 Pearson 相关性分析。

## 2 结果与讨论

### 2.1 总生物碱含量测定结果

19 个产地的五脉绿绒蒿总生物碱含量的测定结果见图 1。结果表明,五脉绿绒蒿中总生物碱含量为 0.28~1.41  $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ , 平均值为 0.71  $\text{mg}\cdot\text{g}^{-1}$ 。其

中产地 15, 18, 19 的五脉绿绒蒿中总生物碱含量较高,  $>1.00 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ 。

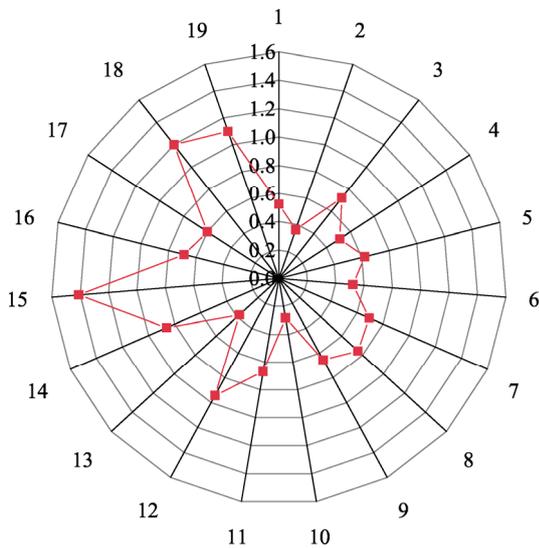


图 1 19 个产地五脉绿绒蒿总生物碱含量雷达图  
Fig. 1 Radar map of total alkaloids content of *Meconopsis quintuplinervia* Regel. in 19 locations

方法学验证结果见表 2。精密度试验的测定结果的 RSD 值为  $0.07\%(n=5)$ , 重复性试验结果的 RSD 值为  $1.23\%(n=5)$ , 表明五脉绿绒蒿中总生物碱含量测定结果具有较好的精密度和重复性。加样回收率试验结果表明, 样品的平均回收率为  $99.22\%$ , RSD 为  $1.27\%$ 。

表 2 方法学试验结果( $n=5$ )

Tab. 2 Methodological validation test results( $n=5$ )

方法学试验	平均值	RSD/%
精密度	$0.36 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$	0.07
重复性	$0.36 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$	1.23
平均回收率	$99.22\%$	1.27

## 2.2 红外光谱特征分析

不同产地的五脉绿绒蒿的 NIR 谱图的共有吸收峰有 6 个, 分别为  $6818, 5786, 5173, 4674, 4329, 4263 \text{ cm}^{-1}$ 。其中,  $6818 \text{ cm}^{-1}$  为水的 O-H 伸缩及变形振动的二级倍频。 $5786 \text{ cm}^{-1}$  处为 C-H 反对称振动的一级倍频,  $5173 \text{ cm}^{-1}$  处为多糖的 O-H 伸缩和 HOH 变形振动。 $4647 \text{ cm}^{-1}$  处的吸收峰为 C-H、C=O 伸缩和 C-H 变形振动的组合频率。 $4329 \text{ cm}^{-1}$  和  $4263 \text{ cm}^{-1}$  归属于 C-H 基团的伸缩和变形振动。结果见图 2A。

图 2B 和图 2C 分别为 19 个不同产地的五脉绿绒蒿的 MIR 和 ATR 指纹图谱。五脉绿绒蒿 MIR 谱图的共有峰位于  $3405, 2920, 2851, 1737,$

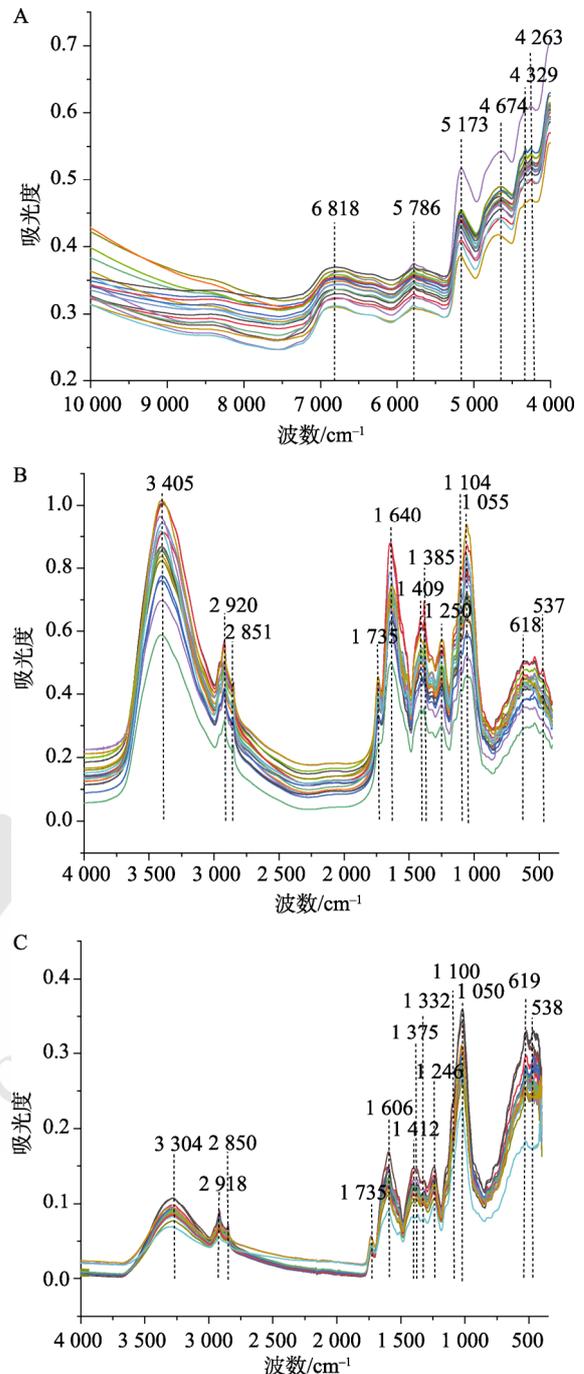


图 2 五脉绿绒蒿红外指纹图谱

A-NIR 谱图; B-MIR 谱图; C-ATR 谱图。

Fig. 2 Infrared fingerprints of *Meconopsis quintuplinervia* Regel.

A-NIR spectra; B-MIR spectra; C-ATR spectra.

$1640, 1409, 1385, 1250, 1104, 1055, 618, 537 \text{ cm}^{-1}$ 。在  $3405 \text{ cm}^{-1}$  附近有一个宽峰, 主要由蛋白质、多糖和纤维素的 O-H 和 N-H 伸缩振动产生<sup>[19-20]</sup>。在  $2920 \text{ cm}^{-1}$  和  $2851 \text{ cm}^{-1}$  附近的吸收峰归属于蛋白质和多糖的 C-H 伸缩振动<sup>[19]</sup>。 $1737 \text{ cm}^{-1}$  为 C=O 的伸缩振动峰。 $1640 \text{ cm}^{-1}$  处的峰为类黄酮酰胺吸收带 I 的 C=O 伸缩振动<sup>[20]</sup>。

1 409  $\text{cm}^{-1}$  为酮类化合物的 C-H 不对称变形振动。1 385  $\text{cm}^{-1}$  处的峰为 C-H 的对称变形振动。在 1 300~550  $\text{cm}^{-1}$  内, MIR 平均光谱的吸收带主要来自多糖和皂苷, 这是由糖和皂苷的 C-O 伸缩振动和甾体皂苷的 O-H 弯曲振动引起的<sup>[21-22]</sup>。ATR 和 MIR 谱在相似位置的峰代表相同的化学信号。研究表明, ATR 比 KBr 压片检测红外光谱更有优势, 因为 ATR 噪声相对较小, 灵敏度提高, 频率测量更准确, 样品制备更简单<sup>[23]</sup>。从图 2B、C 可以看出, ATR 谱图比 MIR 谱图在 1 332 $\text{cm}^{-1}$  附近多一个更明显的 C-N 吸收峰, 也可以印证以上观点。

### 2.3 定量模型的建立

常用的定量模型建立方法有经典最小二乘、逐步多元线性回归、偏最小二乘和主成分回归 (principal component regression, PCR)。其中, PCR 是一种有效的光谱数据压缩和信息提取方法<sup>[24]</sup>, 可通过提取几个主成分, 使结果更加可靠、准确。

**2.3.1 单一光谱条件下模型** 3 种单一光谱条件下所建模型结果见表 3。可以看出, NIR 模型效果明显优于其他单光谱模型, 其 RMSEC、RMSEP 值更小, R<sub>c</sub>、R<sub>p</sub> 值更趋近于 1, RPD 值为 2.1, 其次是 ATR 模型, 最后是 MIR 模型。与本研究结果类似, Amanah 等<sup>[25]</sup>的研究表明, 大豆籽粒异黄酮和低聚糖含量预测模型中 NIR 模型优于 MIR 模型。Hao 等<sup>[26]</sup>的研究工作也表明, 在预测霍山石斛总多酚含量方面, NIR 模型的预测性能也略好于最佳 MIR 模型。

**2.3.2 数据融合模型** 将 NIR 分别和 MIR、ATR 进行光谱数据融合后的建模结果见表 4。可以看出, NIR+ATR 模型效果优于 NIR+MIR 模型, 前者 RPD 值更高, 表示前者的模型准确性更高。

比较表 3 和表 4 中不同模型的 RPD 值, 可知

表 3 单一光谱条件下建立的生物碱模型

Tab. 3 Alkaloid models established under single spectral conditions

模型	预处理	建模区间/ $\text{cm}^{-1}$	RMSEC	RMSEP	R <sub>c</sub>	R <sub>p</sub>	RPD
NIR	Internal reference+D1+SG	7 014~4 026	0.072 8	0.134 0	0.972 5	0.927 4	2.10
MIR	constant	3 738~900	0.101 0	0.492 0	0.929 8	0.833 2	0.58
ATR	SNV	3 867~923	0.117 0	0.335 0	0.895 2	0.873 2	0.84

表 4 数据融合模型结果

Tab. 4 Data fusion models results

模型	预处理	建模区间/ $\text{cm}^{-1}$	RMSEC	RMSEP	R <sub>c</sub>	R <sub>p</sub>	RPD
NIR+MIR	constant+D2+Norris	5 381~4 827+3 867~923	0.128 0	0.077 6	0.914 3	0.990 1	3.63
NIR+ATR	MSC+D2+Norris	5 456~4656+3 738~900	0.060 3	0.063 3	0.980 3	0.997 2	4.46

数据融合后的模型效果明显优于单光谱模型。尤以 NIR+ATR 数据融合模型最佳, 其 RMSEC 和 RMSEP 值相近, 且足够低, R<sub>c</sub> 和 R<sub>p</sub> 更接近 1, RPD>4, 表明经融合后的模型具有良好的稳健性, 模型的预测性能得到了提升。Sun 等<sup>[27]</sup>的研究也证明了这一点。在该课题组的研究中, 收集了 22 批姜半夏和 14 批姜虎掌南星的 NIR 和 MIR 光谱数据, 然后利用偏最小二乘-判别分析法建立单光谱数据和融合数据的判别模型, 结果表明, NIR 与 MIR 数据融合模型优于单一光谱模型。

### 2.4 总生物碱含量与环境因素的关系

**2.4.1 地理因子和气象因子对总生物碱含量的影响** 各产地的地理因子数据见表 1, 图 3 为各产地的气象因子数据。图 4 为海拔、经度、纬度、年均温度、年均降水量与总生物碱含量两两相关的 Pearson 相关系数图。

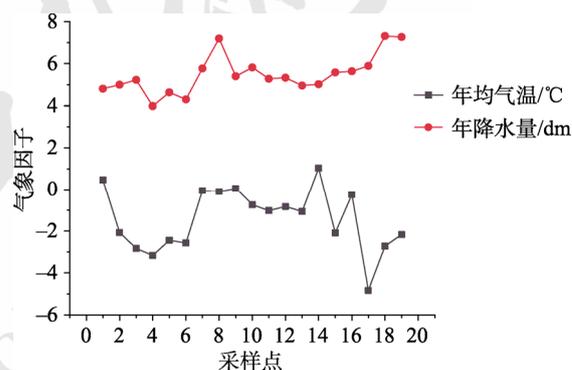


图 3 各产地的气象因子数据

Fig. 3 Meteorological data at various locations

海拔、纬度、年均温度和年均降水量对五脉绿绒蒿中总生物碱含量影响比较大, 其中海拔、年均降水量与生物碱含量的 Pearson 相关系数分别为 0.557 和 0.527, 呈显著正相关, 纬度、年均温

度与生物碱含量的 Pearson 相关系数分别为-0.545 和-0.503, 呈显著负相关, 结果见图 4。类似于本研究, Li 等<sup>[28]</sup>利用趋势对应分析揭示了纬度和海拔是影响不同类群的五脉绿绒蒿红外光谱特征的主要环境因素, 而红外光谱特征在一定程度上反映了五脉绿绒蒿中的化合物种类及含量; Ren 等<sup>[29]</sup>的研究结果表明, 景天三七中生物碱含量受日温

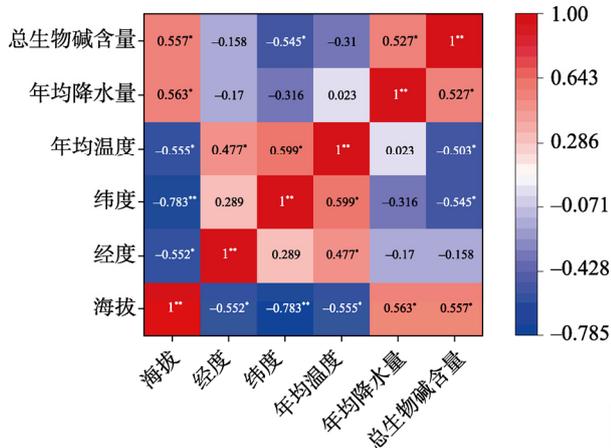


图 4 地理、气象因子与总生物碱含量的 Pearson 相关性分析  
注: \* $P < 0.05$ , \*\* $P < 0.01$ 。

Fig. 4 Pearson correlation analysis between geographical and meteorological factors and total alkaloid content  
Note: \* $P < 0.05$ , \*\* $P < 0.01$ 。

差、平均温度、经度、纬度、海拔的影响, 与降水量呈正相关。以上结果均与本研究中的相关性分析结果一致。表示高海拔、降水多、低纬度、低温地区有利于五脉绿绒蒿中生物碱含量的积累。

2.4.2 土壤因子对总生物碱含量的影响 各土壤因子含量测定结果见图 5, 土壤因子与总生物碱含量的 Pearson 相关系数见表 5。五脉绿绒蒿总生物碱含量与土壤全氮量和碱解氮的 Pearson 相关系数分别为 0.621 和 0.611, 呈极显著正相关, 其余土壤因子对生物碱物质的积累无显著相关性。Dong<sup>[30]</sup>的研究也表明, 高水平的氮肥( $71.50 \text{ kg} \cdot \text{hm}^{-2}$ )更有利于促进贝母植株的生长和鳞茎生物碱的积累。

表 5 土壤因子与总生物碱含量 Pearson 相关系数

Tab. 5 Pearson correlation coefficient between soil factors and total alkaloid content

土壤因子	Pearson 相关系数	土壤因子	Pearson 相关系数
pH	-0.015	全磷量	-0.187
全盐量	0.153	碱解氮	0.611**
有机质	0.431	速效钾	-0.268
全氮量	0.621**	有效磷	0.111
全钾量	0.136	-	-

注: \*\* $P < 0.01$ 。

Note: \*\* $P < 0.01$ 。

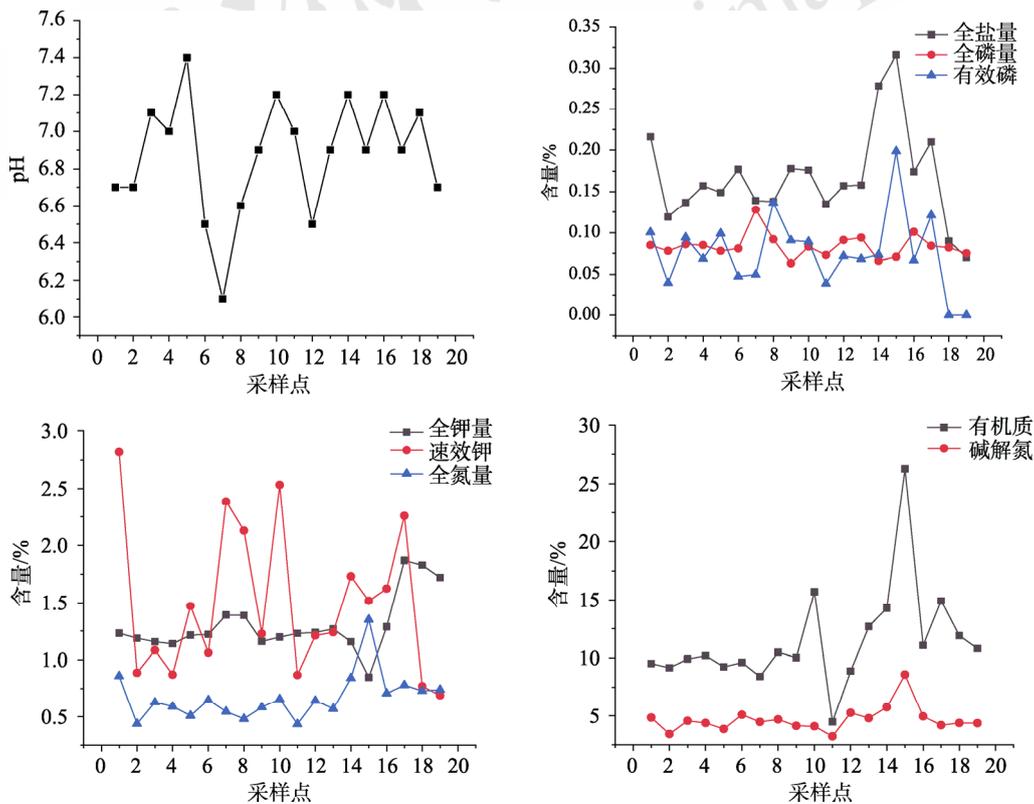


图 5 土壤因子数据测定结果

Fig. 5 Results of determination of soil factor data

### 3 讨论

本研究基于红外光谱技术和数据融合策略建立了五脉绿绒蒿总生物碱含量的快速检测模型,结果表明以 NIR+ATR 数据融合模型效果最佳,其 RMSEC 和 RMSEP 值分别为 0.060 3 和 0.063 3,  $R_c$  和  $R_p$  分别为 0.980 3 和 0.997 2,  $RPD=4.46>4$ , 模型有较好的预测效果和稳健性。数据融合模型优于单光谱模型,表明光谱数据融合可以提高模型的预测能力,可为五脉绿绒蒿的快速质量评价提供新的研究思路。

通过对环境因子与生物碱含量的相关性分析,发现五脉绿绒蒿中生物碱物质的积累是多种生态环境因素共同作用的结果。海拔高、降水量多、纬度低、温度低的地区更易培植出高品质的五脉绿绒蒿药材。土壤中的全氮量和碱解氮含量越高,总生物碱含量越高,表明土壤中的氮元素可促进五脉绿绒蒿中总生物碱的合成和积累。目前,五脉绿绒蒿药材主要来源于野外,采集难度大,且野生种质资源稀少,本研究可以为五脉绿绒蒿的资源保护和人工栽培提供参考。

### REFERENCES

- [1] 青海省药品检验所,青海省藏医药研究所. 中国藏药[M]. 上海:上海科学技术出版社,1996.
- [2] YU R X, ZHANG Y P, WU N. Study on anti-inflammatory effects of total alkaloids extracted from *Meconopsis quintuplinervia* Regel.[J]. Tradit Chin Drug Res Clin Pharmacol(中药新药与临床药理), 2021, 32(4): 461-466.
- [3] YI P G, HU R D, YU Q S, et al. Theoretical study on the structures and properties of a Tibetan medicine meconoquintupline[J]. Acta Chim Sin(化学学报), 2005, 63(1): 44-50, 93.
- [4] BIAN Y, TONG Z J, WEI X Y, et al. Rapid evaluation of the quality of *Rhododendri Daurici Folium* by AOTF-NIR[J]. Chin J Mod Appl Pharm(中国现代应用药理学), 2020, 37(6): 694-697.
- [5] AMIRVARESI A, NIKOUNEZHAD N, AMIRAHMADI M, et al. Comparison of near-infrared(NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopy based on chemometrics for saffron authentication and adulteration detection[J]. Food Chem, 2021 (344): 128647.
- [6] WU Z S. Research on basic theories and methods of NIR technology in process analysis of traditional Chinese medicine[D]. Beijing: Beijing University of Chinese Medicine, 2012.
- [7] LI Q Q, WU Z S, LIN L, et al. High-level fusion coupled with mahalanobis distance weighted(MDW) method for multivariate calibration[J]. Sci Rep, 2020, 10(1): 5478.
- [8] AZCARATE S M, RÍOS-REINA R, AMIGO J M, et al. Data handling in data fusion: Methodologies and applications[J]. Trac Trends Anal Chem, 2021(143): 116355.
- [9] PEI Y F, ZUO Z T, ZHANG Q Z, et al. Data fusion of Fourier transform mid-infrared(MIR) and near-infrared (NIR) spectroscopies to identify geographical origin of wild *Paris Polyphylla* var. *Yunnanensis*[J]. Molecules, 2019, 24(14): 2559.
- [10] TAO L Y, VIA B, WU Y J, et al. NIR and MIR spectral data fusion for rapid detection of *Lonicera japonica* and *Artemisia annua* by liquid extraction process[J]. Vib Spectrosc, 2019(102): 31-38.
- [11] HOU Y, MA Y, ZOU L S, et al. The Effects of ecological factors on the secondary metabolites in medicinal plants and their research methods[J]. Lishizhen Med Mater Med Res(时珍国医国药), 2015, 26(1): 187-190.
- [12] DU B J, ZHANG P G, SHENG P. Analysis of relation between soil, climate, genetic factors and active ingredient content of *Fritillariae Pallidiflorae Bulbus* in Xinjiang[J]. Chin J Mod Appl Pharm(中国现代应用药理学), 2017, 34(6): 789-793.
- [13] LU P Z, CHANG C R, LONG Q D, et al. Effect of ecological factors on accumulation of *Sophora flavescens* in roots, stems and leaves from Guizhou[J]. Chin J Exp Tradit Med Form(中国实验方剂学杂志), 2017, 23(6): 43-47.
- [14] TANG Y J, HUANG X G, YAN X N, et al. Accumulation dynamics of alkaloids during the growth of *Fritillaria thunbergii* Miq. and its correlation with rhizosphere microenvironment[J]. J Zhejiang Chin Med Univ(浙江中医药大学学报), 2021, 45(8): 816-823.
- [15] DONG X, XIN Z M, HUANG Y R. Soil stoichiometry in typical shrub communities in the Ulan Buh Desert[J]. Acta Eco Sin(生态学报), 2019, 39(17): 6247-6256.
- [16] SOULAT J, ANDUEZA D, GRAULET B, et al. Comparison of the potential abilities of three spectroscopy methods: Near-infrared, mid-infrared, and molecular fluorescence, to predict carotenoid, vitamin and fatty acid contents in cow milk[J]. Foods, 2020, 9(5): 592.
- [17] LI Y, XIONG Y M, MIN S G. Data fusion strategy in quantitative analysis of spectroscopy relevant to olive oil adulteration[J]. Vib Spectrosc, 2019(101): 20-27.
- [18] MÁRQUEZ C, LÓPEZ M I, RUISÁNCHEZ I, et al. FT-Raman and NIR spectroscopy data fusion strategy for multivariate qualitative analysis of food fraud[J]. Talanta, 2016(161): 80-86.
- [19] YAO S, LI T, LIU H G, et al. Identification of geographical origin of *Boletus tomentipes* by multi-spectral data fusion[J]. Food Sci(食品科学), 2018, 39(8): 212-217.
- [20] CHENG C G, LIU J, CAO W Q, et al. Classification of two species of *Bidens* based on discrete stationary wavelet transform extraction of FTIR spectra combined with probability neural network[J]. Vib Spectrosc, 2010, 54(1): 50-55.
- [21] CHEN J B, SUN S Q, ZHOU Q. Direct and model-free

- detection of carbohydrate excipients in traditional Chinese medicine formula granules by ATR-FTIR microspectroscopic imaging[J]. *Anal Bioanal Chem*, 2017, 409(11): 2893-2904.
- [22] CHEN J B, SUN S Q, MA F, et al. Vibrational microspectroscopic identification of powdered traditional medicines: Chemical micromorphology of poria observed by infrared and Raman microspectroscopy[J]. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 2014(128): 629-637.
- [23] TOUITOU E, MEIDAN V M, HORWITZ E. Methods for quantitative determination of drug localized in the skin[J]. *J Control Release*, 1998, 56(1/2/3): 7-21.
- [24] TANG S P, YAO X F, YAO X, et al. Near infrared multi-component prediction model based on principal component analysis and wavelet neural network[J]. *Chin J Anal Chem(分析化学)*, 2009, 37(10): 1445-1450.
- [25] AMANAH H Z, TUNNY S S, MASITHOH R E, et al. Nondestructive prediction of isoflavones and oligosaccharides in intact soybean seed using Fourier transform near-infrared (FT-NIR) and Fourier transform infrared (FT-IR) spectroscopic techniques[J]. *Foods*, 2022, 11(2): 232.
- [26] HAO J W, CHEN Y, CHEN N D. Assessment of ATR-NIR and ATR-MIR spectroscopy as an analytical tool for the quantification of the total polyphenols in *Dendrobium huoshanense*[J]. *Phytochem Anal*, 2020, 31(3): 366-374.
- [27] SUN F, CHEN Y, WANG K Y, et al. Identification method of ginger-processed *Pinelliaternata* based on infrared spectroscopy data fusion[J]. *J Beijing Univ Tradit Chin Med(北京中医药大学学报)*, 2019, 42(10): 862-868.
- [28] LI P P, LUAN Z J, LI D. Infrared spectra analysis of different groups about the traditional Tibetan medicine-*Meconopsis quintuplinervia* Regel.[J]. *Chinese J Analyt Chem(分析试验室)*, 2020, 39(5): 550-555.
- [29] REN P, FU B, LIU C, et al. Correlation between the active components and soil and meteorological factors of *Sedum aizoon*[J]. *Ecol Environ Sci(生态环境学报)*, 2019, 28(5): 908-917.
- [30] DONG T W. The effect of combined application of nitrogen phosphorus fertilizer and microbial fertilizer on growth and quality of two-year-old *Fritillaria taipaiensis* P. Y. LI[D]. Shanxi: Northwest A&F University, 2018.

收稿日期: 2022-06-16

(本文责编: 陈怡心)