基于多传感器数据融合对不同贮存期温郁金的快速判别研究

秦宇雯[1,2]，周　丹[1,2]，于沐蓉[1]，陈安特[3]，汪　涛[4]，於江华[5]，任仙樱[2]，张崇生[3*]，姜程曦[1,2*]

1. 温州医科大学中医药学院，浙江 温州　325035
2. 安徽省九华山彦春堂传统医药研究所，安徽 池州　247100
3. 温州市食品药品检验科学研究院，浙江 温州　325038
4. 浙江佐力药业股份有限公司，浙江 湖州　313200
5. 无锡济煜山禾药业股份有限公司，江苏 无锡　214031

摘　要：目的　探究不同贮存期温郁金颜色、气味和光谱信息变化，结合机器学习实现不同贮存期温郁金 *Curcuma wenyujin* 的快速区分；结合化学计量学，推测其特征差异成分。**方法**　采用多传感器结合判别函数分析、判别因子分析（discriminant factor analysis，DFA），软独立建模聚类分析（soft independent modeling of class analogies，SIMCA）、变量投影重要性指标（variable importance in projection，VIP）、相关性聚类标记热图分析、机器学习等方法，对不同贮存期温郁金的颜色、气味和光谱进行数据融合分析。**结果**　基于颜色信息建立了温郁金不同贮存期的判别函数，确定其颜色参数的范围。通过对气味信息的分类和筛选，表征出丙烯醛、丙酸、丙烯酸癸酯等 9 个特征差异成分。此外，“颜色-气味-光谱”数据融合，建立了决策树（decision tree，DT）、集成学习（ensemble learning，EL）分类模型，DT 和 EL 模型的总准确度分别为 85.40%和 93.80%；经测试后的总准确度分别为 91.7%和 100.00%。**结论**　智能感官技术和近红外光谱技术可应用于贮存期的快速判别，为温郁金贮存期的快速区分与质量控制提供了新思路。

关键词：温郁金；贮存期；智能感官；傅里叶变换近红外光谱；特征差异成分；多传感器数据融合

中图分类号：R282.6　　**文献标志码：**A　　**文章编号：**0253 - 2670(2026)21 - 8696 - 13

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.21.025

Rapid discrimination of *Curcuma wenyujin* with different storage durations based on multi-sensor data fusion

QIN Yuwen[1,2], ZHOU Dan[1,2], YU Murong[1], CHEN Ante[3], WANG Tao[4], YU Jianghua[5], REN Xianying[2], ZHANG Chongsheng[3], JIANG Chengxi[1,2]

1. School of Chinese Medicine, Wenzhou Medical University, Wenzhou 325035, China
2. Anhui Jiuhua Mountain Yanchun Tang Traditional Medicine Research Institute, Chizhou 247100, China
3. Wenzhou Research Institute for Food and Drug Control, Wenzhou 325038, China
4. Zhejiang Jolly Pharmaceutical Co., Ltd., Huzhou 313200, China
5. Wuxi Jiyu Shanhe Pharmaceutical Co., Ltd., Wuxi 214031, China

Abstract: Objective　This study investigated variations in color, odor, and spectral information of *Curcuma wenyujin* samples across different storage periods, aiming to achieve rapid discrimination via machine learning and to infer characteristic differential components through chemometric analysis. **Methods**　Multi-sensor data fusion of color, odor, and spectral data was performed using discriminant function analysis (DFA), soft independent modeling of class analogies (SIMCA), variable importance in projection (VIP), correlation

收稿日期：2026-02-02

基金项目：国家自然科学基金项目（82404862）；浙江省登峰学科（温州医科大学药学）（437502548）；温州医科大学人才科研启动项目（QTJ23033）；温州医科大学本专科学生科研立项资助课题（wyx2025101234，wyx2025101235）；浙江佐力药业股份有限公司横向课题项目（KJHX2009）

作者简介：秦宇雯，女，硕士生导师，讲师，主要从事中药炮制机制及质量标准研究。E-mail: 114380@wmu.edu.cn

***通信作者：**姜程曦，男，博士生导师，研究员，主要从事中药学及质量标准研究。E-mail: jiangchengxi@126.com

张崇生，男，主任药师，主要从事食品药品质量安全控制研究。E-mail: 1018763742@qq.com

clustering with heatmap annotation, and machine learning algorithms. **Results** A discriminant function based on color information was established to classify different storage periods, and the corresponding parameter ranges were defined. Through screening of odor profiles, nine characteristic differential components, including acrolein, propionic acid, and decyl acrylate, were tentatively inferred. Furthermore, decision tree (DT) and ensemble learning (EL) classification models were developed based on "color-odor-spectrum" data fusion. They achieved overall accuracies of 85.40% and 93.80%, respectively. The overall accuracies after testing were 91.7% and 100.00%, respectively. **Conclusion** Intelligent sensory technologies combined with near-infrared spectroscopy were demonstrated to be applicable for rapid discrimination of storage periods, providing a novel strategy for the quality control of *Curcuma wenyujin* during storage.

Key words: *Curcuma wenyujin*Y. H. Chen et C. Ling; storage period; intelligent sensory; Fourier transform near-infrared spectroscopy; characteristic differential components; multi-sensor data fusion

温郁金为姜科植物温郁金 *Curcuma wenyujin* Y. H. Chen et C. Ling 的干燥块根，呈长圆形或卵圆形，表面灰褐色或灰棕色，断面灰棕色，表皮具有颜色深浅不一的纵皱纹，气微香，味微苦、辛[1]。温郁金具有活血止痛、行气解郁等功效，是临床常用中药之一[1]。现代研究表明，温郁金具有抗血小板聚集、保护心血管系统、调血脂、抗炎镇痛、保肝、抗抑郁、抗氧化、抗肿瘤、抗病毒、抗菌杀虫、保护神经等活性[2-3]，如吉马酮、β-榄香烯等活性成分可减少血小板聚集，改善血液流变性[4]。温郁金主要含萜类成分，以莪术二酮、吉马酮、β-榄香烯、呋喃二烯等倍半萜类成分为主[5]；此外，还含有多糖类、多肽类、脂肪酸类、黄酮类、木脂素类、甾醇类、树脂类、生物碱和微量元素等成分[2-3]。倍半萜类成分有一定的挥发性，随着贮存时间的延长，该类成分持续发生氧化、异构化等反应，从而影响色泽、气味等感官属性，影响其品质的稳定性和临床用药的安全。因此，准确判别不同贮藏时期，不仅有助于揭示"时间-品质"动态演变规律，筛选与贮存时间密切相关的特征差异成分，还可为温郁金的仓储养护与流通环节的快速、无损、智能化品质评估提供技术支撑。然而，当前对温郁金贮存质量的研究鲜有报道。

传统的温郁金评价标准主要依靠药材的性状、鉴别项和检查项，其中性状以传统经验鉴别[1]为主，但是传统经验鉴别难以准确评价性状无明显差异的中药，其评价指标模糊、难以量化，多以药工的判断为评价指标，具有主观性，且个体之间的视觉、嗅觉等感官也有差异[6]。在现代中药质量研究中，主流手段多依赖于高效液相色谱、气相色谱和色谱-质谱联用技术，这些方法虽能实现特定成分的精准定性定量，但在应用于温郁金贮存过程评价时存在操作繁琐、耗时长且对技术要求较高等固有局限。测色仪、电子鼻及近红外光谱等技术结合机器学习、化学计量学等分析方法，广泛应用于中药的快速判别中，已成为中药质量研究的重要发展趋势，体现了中药质量控制向数字化、智能化方向迈进的总体态势[7-10]。本研究综合运用测色仪、电子鼻和近红外光谱技术，采用单因素方差分析、变量投影重要性指标（variable importance in projection，VIP）、相关性聚类标记热图分析，系统探究并推测温郁金在贮存期间的特征差异成分；利用机器学习以"颜色-气味-光谱"的融合数据构建准确、稳定、适合仓库现场快检的中药贮存期判别模型，为温郁金在贮存期间的质量控制提供科学依据，以期进一步保障临床用药质量的均一性和可控性。

1 材料与仪器

1.1 仪器

CM-5 型分光测色计（日本柯尼卡美能达有限公司），Heracles NEO 型快速气相色谱电子鼻、配备 PAL RSI 全自动顶空进样器、非极性色谱柱 MXT-5 和中极性色谱柱 MXT-1701（法国 Alpha Mos 公司），AntarisII 傅里叶变换近红外光谱仪（美国赛默飞世尔科技公司），FA1104N 型电子分析天平（上海菁海仪器有限公司）；FTT-2500T 型高速多功能粉碎机（上海耐塞机械有限公司）。

1.2 材料与试剂

60 批温郁金（块根）样品购于浙江省瑞安市通明温郁金专业合作社，具体样品批次信息见表 1，经温州医科大学药学院姜程曦教授鉴定为 *C. wenyujin* Y. H. Chen et C. Ling 的干燥块根。所有样品以塑料袋密封保存于浙江天瑞药业有限公司的 GMP 药品常温（20 ℃）仓库中。正构烷烃 nC$_6$～nC$_{16}$ 混合对照品（美国 RESTEK 公司）。

表 1 温郁金样品来源信息

Table 1 Sample information of 60 batches of *C. wenyujin*

批号	药材	产地
20180724-01～20180724-10	温郁金	浙江瑞安
20190724-01～20190724-10	温郁金	浙江瑞安
20200724-01～20200724-10	温郁金	浙江瑞安
20210724-01～20210724-10	温郁金	浙江瑞安
20220724-01～20220724-10	温郁金	浙江瑞安
20230724-01～20230724-10	温郁金	浙江瑞安

2 方法与结果

2.1 不同贮存期温郁金颜色的分析

2.1.1 供试品制备 将 60 批不同贮存期的温郁金样品分别粉碎，过 5 号筛，密封冷藏备用。

2.1.2 分光测色计检测参数与方法

（1）测量条件：测定光源 D 65，测定试场 10°，视角测量口径为 φ3 mm，测量波长 360～740 nm，测量波长间隔 10 nm，照明光源脉冲氙灯，SCE 模式（不包含镜面反射光），30 mm，对仪器进行零校正（放置透明片、黑筒）与用户校正（放置透明片、白板）[11]。

（2）样品检测：取样品粉末适量，均匀平铺在 CM-5 型分光测色仪测试小皿底部，测定，记录色度值（L^*：明暗度，a^*：红绿色度，b^*：黄蓝色度）[11]。

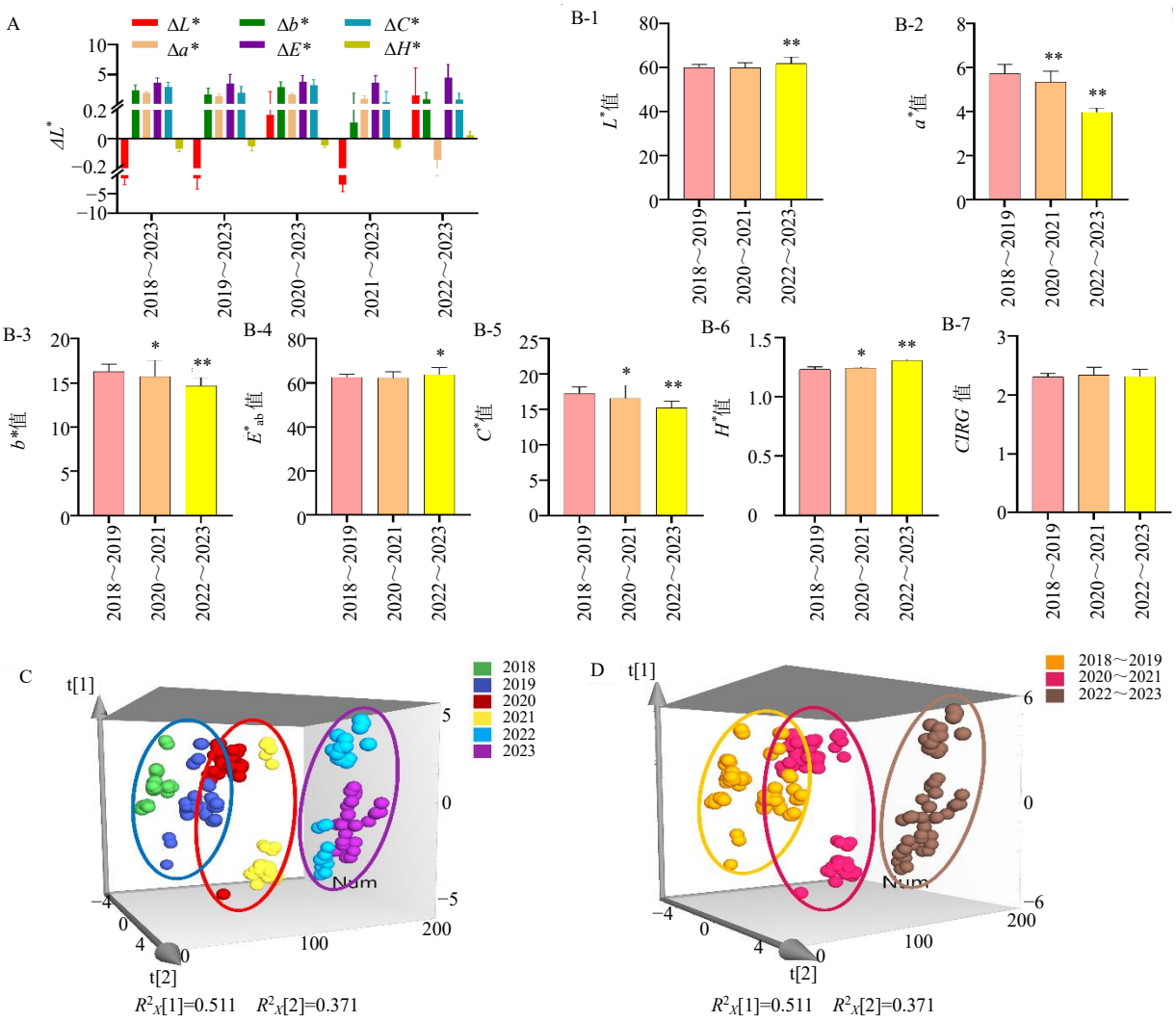
2.1.3 方法学考察 为了保证测色分析方法的稳定性和可靠性，对所建立的方法进行了方法学研究。取温郁金样品（20230724-03）粉末按照上述方法平行测量 6 次检测方法精密度；平行取 6 次样品（20230724-03）分别打粉，按照上述方法分别测量检测方法重复性；按照上述方法，在室温下以 0、2、4、6、8、10、12、24 h 时间间隔对样品（20230724-03）粉末进行测量，以检查该方法的稳定性。将测得的 L^*、a^*和 b^*值的相对标准偏差（RSD）值用作评价指标。精密度、重复性和稳定性实验的中 L^*、a^*和 b^*的 RSD 值均小于 2%，表明该方法具有良好的精密度和重复性，以及样品在室温下 24 h 内具有稳定性，该方法可用于实验分析。

2.1.4 数据采集与分析 通过数据采集软件 Spectra Magic NX 和 CIEL$^*a^*b^*$颜色空间系统，获得不同储存期温郁金颜色数据；采用 GraphPad Prism 8 软件进行单因素方差分析；采用 SPSS 27.0 统计学软件进行判别函数分析。此外，为了更全面地表征不同贮存期的温郁金的颜色特征，参考文献方法[12]计算明度差（ΔL^*）、Δa^*、Δb^*、总色度值（E^*_{ab}）、总色度值差（ΔE^*_{ab}）、色度（C^*）、色度差（ΔC^*）、色相角（H^*）、色相角差（ΔH^*）以及红葡萄色指数（*CIRG*）。以下分析将不同贮存期温郁金分为贮存 5～6 年温郁金（2018～2019），贮存温郁金 3～4 年（2020～2021），贮存 1～2 年温郁金（2022～2023）。

在 CIELAB 色度系统中，L^*轴表示明度（0～100，白色～黑色）。a^*轴表示红绿轴（−128～+127），a^*或 Δa^*的正值表示向红色偏移，负值则表示向绿色偏移。b^*表示黄蓝轴（−128～+127），b^*或 Δb^*值表示向黄色偏移，负值则表示向蓝色偏移。当总色差 ΔE＜1.0 时，差异几乎无法察觉；当 1.0≤ΔE＜2.0 时，仔细观察即可辨别差异；当 ΔE≥2.0 时，差异则十分明显。C^*表示色度，数值越高表明样品颜色越鲜艳，ΔC^*的正值表示饱和度更高。H^*定义色相角，0°、60°、120°、180°、240°、300°或 360°分别代表红色、黄色、绿色、青色、蓝色、品红色或红色。ΔH^*正值表明样本颜色位于对照色的逆时针方向。红葡萄色指数（*CIRG*）＜2 时呈现黄绿色，2≤*CIRG*＜4 时呈现粉红色，4≤*CIRG*＜5 时呈现红色，5≤*CIRG*＜6 时呈现深红色；*CIRG*≥6 时呈现蓝黑色[12]。

2.1.5 色度值测定结果与分析 根据测得的 L^*、a^*、b^*，参考文献方法[12]计算ΔL^*、Δa^*、Δb^*、E^*_{ab}、ΔE^*_{ab}、C^*、ΔC^*、H^*、ΔH^*以及 *CIRG* 数值，采用 GraphPad Prism 8 软件对上述颜色参数进行单因素方差分析（图 1）。如图 1-A 所示，与 2023 年的温郁金样品相比，2020 年和 2022 年的 ΔL^*＞0，而 2018 年、2019 年和 2021 年的 ΔL^*＜0，表明长期贮存会影响温郁金样品的明度。Δa（2022 年除外）、Δb 和 ΔC^*值均呈正值，表明长期贮存导致颜色向红黄色调偏移，色度增加，样品中的“白光”或“灰调”成分减少。ΔH^*值（2022 组除外）均呈负值，表明随着贮存时间的延长，色相角发生顺时针旋转。所有储存样品的 ΔE^*_{ab} 值均在 3～5，表明肉眼可清晰观察到颜色的差异。

如图 1-B 所示，不同贮存期的温郁金在 L^*、a^*、b^*、E^*_{ab}、C^*和 H^*存在明显差异（P＜0.05、0.01），但在 *CIRG* 无显著性差异（P＞0.05）。在这些变化中，L^*、E^*_{ab} 和 H^*表现出相似的趋势；a^*、b^*和 C^*也表现出相似的趋势。L^*、E^*_{ab} 和 H^*的颜色值从高到低的排序为：2022～2023 组＞2020～2021 组≈2018～2019 组；温郁金的 H^*值在 0° ～60°，以红黄色为主，随着贮存时间的延长，L^*和 H^*值逐渐变小，表明温郁金的颜色越来越深、越来越红。a^*、b^*和 C^*值由高到低的顺序为 2018～2019 组＞



A-色度值差的柱形图；B-2018～2019 组（贮存 5～6 年）、2020～2021 组（贮存 3～4 年）和 2022～2023 组（贮存 1～2 年）的不同色度值差异分析（与 2018～2019 组比较：$^{*}P<0.05$ $^{**}P<0.01$）；C-按照每年分组的 PCA 图；D-按照连续 2 年分组的 PCA 图。

A-bar chart of color data; B-color parameter differences for 2018—2019 group (Store for 5—6 years), 2020—2021 group (Store for 3—4 years), and 2022—2023 group (Store for 1—2 years) (Comparison with the 2018—2019 group, $^{*}P < 0.05$, $^{**}P < 0.01$); C-PCA plot grouped by year; D-PCA plot grouped by consecutive two-year periods.

图 1 色度值差异性分析

Fig. 1 Analysis of differences in chromaticity values

2020～2021 组＞2022～2023 组，表明随着贮存时间的延长，a^{*}、b^{*}和 C^{*}值逐渐增大，表明温郁金颜色更红、更黄，且饱和度更高。

在全面分析了色度参数的变化后，基于 13 项色度参数，采用无监督主成分分析（principal component analysis，PCA）构建可视化模型（图 1-C、D），其主成分累积贡献率达 88.2%，可实现不同贮存时间温郁金之间的初步定性分类。PCA 得分图显示，样品分布随贮存年限增加呈现显著的方向性迁移，年限跨度越大，离散程度越明显。然而，相邻年限样品间存在部分区域重叠，提示 PCA 在区分临近贮存年份时，尚存在一定的局限性。

通过 SPSS 27.0 软件，将 L^{*}、a^{*}、b^{*}、E^{*}_{ab}、C^{*}、H^{*}和 *CIRG* 值进行正态性检验、秩和检验、判别分析以及色度值参考范围分析。可以看出，L^{*}、a^{*}、b^{*}、E^{*}_{ab}、C^{*}、H^{*}和 *CIRG* 值均不服从正态分布（$P<0.01$）。通过 Kruskal-Wallis H 结果可知，除了 E^{*}_{ab} 和 *CIRG* 的 $P>0.05$，符合原假设外，其他参数均不符合原假设，即在 2018～2019 组，2020～2021 组和 2022～2023 组中 L^{*}、a^{*}、b^{*}、C^{*}和 H^{*}的分布不同。通过判别分析，得到典型判别函数为：函数 1＝3.745 L^{*}＋11.263 a^{*}－11.348 b^{*}＋10.815 H^{*}＋5.676 *CIRG* 和函数 2＝

11.252 L^*－3.566 a^*＋10.708 b^*－3.324 H^*＋17.048 *CIRG*；专属性判别函数判别函数式：2018～2019 组＝16 805.252 L^*＋78 195.771 a^*－9 089.016 b^*＋1 295 433.368 H^*＋544 068.521 *CIRG*－2 082 264.032，2020～2021 组＝16 812.547 L^*＋78 196.369 a^*－9 081.653 b^*＋1 295 452.422 H^*＋544 314.829 *CIRG*－2 083 419.804 和 2022～2023 组＝16 820.479 L^*＋78 416.129 a^*－9 151.192 b^*＋1 299 749.913 H^*＋544 582.764 *CIRG*－2 089 968.117。使用留一分类方法进行交叉验证，2018～2019 组、2020～2021 组、2022～2023 组的原始对照判别率分别为 90.00%、65.00%和 100.00%，交叉验证判别率为 83.33%、65.00%、100.00%（表 2）。色度值双边 90%参考值范围的结果见表 3。

2.2 基于电子鼻对不同贮存期温郁金气味的分析

2.2.1 电子鼻检测参数与方法

（**1**）检测条件：通过对前期研究检测参数的优化[11]，确定温郁金的检测条件如下：样品瓶 20 mL；捕集阱初始温度 40 ℃，捕集阱最终温度 250 ℃，捕集阱分流速率 10 mL/min，捕集持续时间 34 s；进样口温度 200 ℃，检测器温度 260 ℃；孵化温度 70 ℃，孵化时间 20 min，孵化炉转速 500 r/min，进样体积 3 000 μL，进样体积流量 125 μL/s，进样持续时间 29 s，柱温的初始温度 40 ℃，柱温程序升温方式 4 ℃/s 至 100 ℃，1 ℃/s 至 175 ℃，0.5 ℃/s 至 204 ℃，4 ℃/s 至 250 ℃，保持 21 s；采集时间 202 s；称样量 1.0 g；FID 增益 12。

表 2 色度值的交叉验证结果

Table 2 Cross validation results of chromaticity values

项目	类别	分组	预测值			总计
			2018～2019 组	2020～2021 组	2022～2023 组	
原始	计数	2018～2019	54	6	0	60
		2020～2021	21	39	0	60
		2022～2023	0	0	60	60
	判别率/%	2018～2019	90.00	10.00	0.00	100.00
		2020～2021	35.00	65.00	0.00	100.00
		2022～2023	0.00	0.00	100.00	100.00
交叉验证	计数	2018～2019	50	10	0	60
		2020～2021	21	39	0	60
		2022～2023	0	0	60	60
	判别率/%	2018～2019	83.33	16.67	0.00	100.00
		2020～2021	35.00	65.00	0.00	100.00
		2022～2023	0.00	0.00	100.00	100.00

表 3 色值的双边 90%参考值范围

Table 3 Bilateral 90% reference value range for color values

分组	L^*	a^*	b^*	E^*_{ab}
2018～2019	59.851 5～60.406 9	5.649 0～5.824 7	16.128 9～16.483 4	62.274 7～62.864 2
2020～2021	59.434 2～60.439 5	5.248 5～5.458 8	15.335 4～16.138 6	61.621 7～62.278 1
2022～2023	61.246 0～62.583 0	3.931 4～4.016 6	14.486 1～14.901 2	63.691 3～63.655 0
分组	C^*	H^*	*CIRG*	
2018～2019	17.102 9～17.474 6	1.228 5～1.236 5	1.238 8～1.244 2	
2020～2021	16.211 2～17.037 1	2.298 3～2.322 6	2.313 9～2.370 4	
2022～2023	15.030 2～15.422 1	1.300 8～1.311 2	2.297 4～2.347 0	

（**2**）样品检测：取不同贮存期温郁金供试品粉末 1 g 和 5 μL 正构烷烃（nC$_6$～nC$_{16}$）混合对照品置于 20 mL 顶空进样瓶中，加盖密封，置于进样器 PAL RSI 全自动顶空进样器[11]。

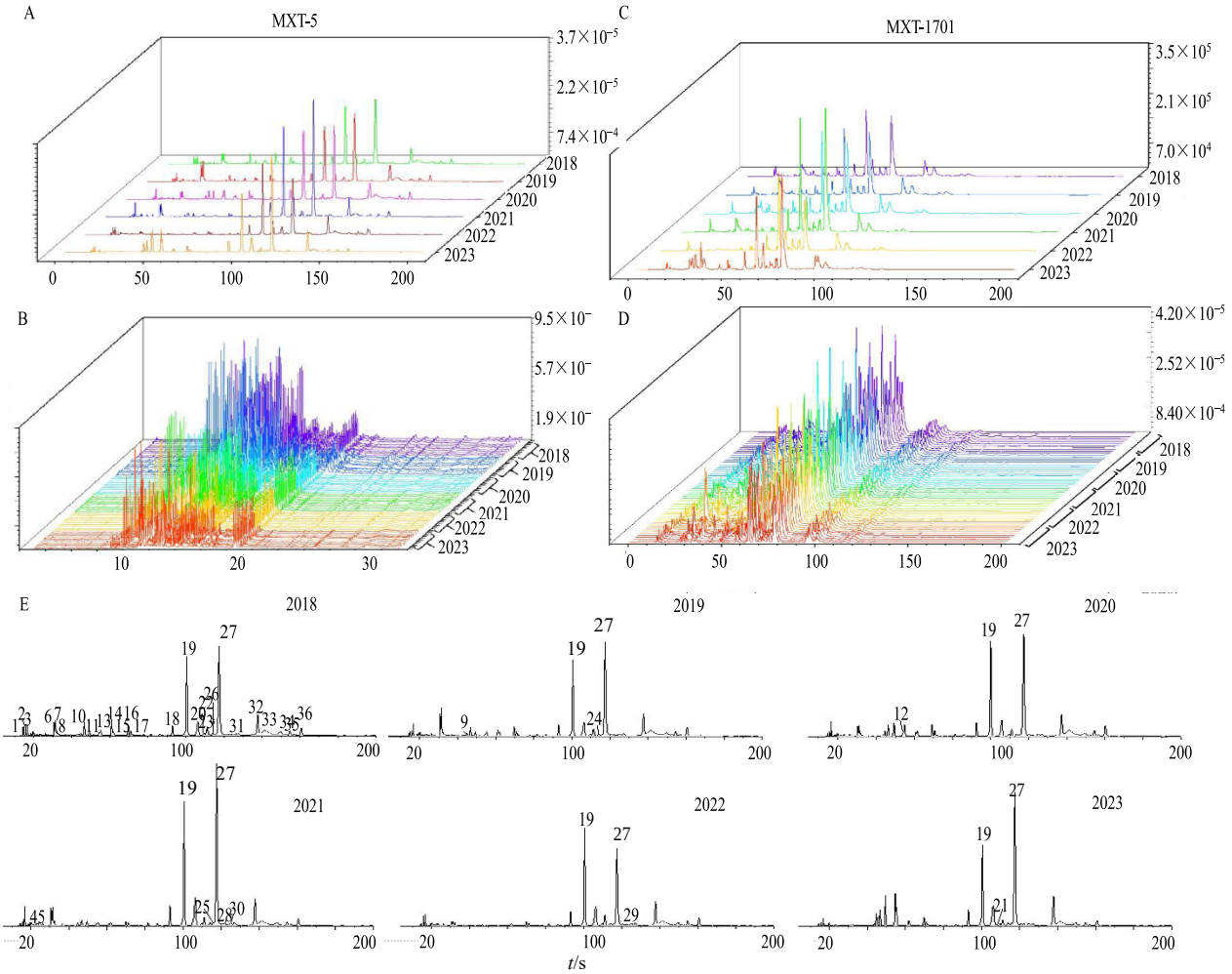
2.2.2 数据采集与分析 根据“2.2.1”项中的条件，使用 Heracles NEO 超快速气相电子鼻检测不同贮存期温郁金的气味色谱峰。通过数据采集软件 Alpha Soft 17.0 获得不同贮存期温郁金的气味色谱峰数据，并对其进行判别因子分析（discriminant factor analysis，DFA）和软独立建模聚类分析（soft independent modeling of class analogies，SIMCA）。采用正构烷烃标准溶液（nC$_6$～nC$_{16}$）进行校准，将样品色谱峰的保留时间转化为 Kovats 保留指数，并通过保留指数进行定性，在 AroChem Base 数据库进行比对分析，得出不同贮存期温郁金样品可能存在的气味化合物与之对应的感官描述息。通过 SIMCA-P 14.1 软件对色谱数据进行正交偏最小二乘判别分析（orthogonal partial least squares discriminant analysis，OPLS-DA）以及 VIP 分析。

2.2.3 电子鼻的气味色谱图结果与分析 在扣去空白

参考后，运用 Origin 2021 软件绘制非极性色谱柱 MXT-5 和中极性色谱柱 MXT-1701 的气味指纹图谱。如图 2 所示，可以观察到不同贮存期温郁金的气味分布存在显著差异：随着贮存时间的加长，30.00、31.32 s 附近分别出现了 6、7 号色谱峰，且在 40～60 s 出峰强度减弱，100.32 s 和 120.35 s 附近出现的 19 号和 27 号峰的变化较大，可作为不同贮存期温郁金的显著区分。

为进一步分析不同贮存期温郁金的原始气味信息，建立可视化的差异判别模型，通过 Alpha Soft 17.0 和 SIMCA-P 14.1 对气味色谱数据分别进行 DFA、SIMCA 和 OPLS-DA 的可视化分析。如图 3-A 所示，DF1 的贡献率为 83.358%，DF2 贡献率为 16.642%，累积贡献率为 100%，说明 DFA 模型对不同贮存期温郁金的分类效果较好。如图 3-B～D 所示，分别以 2018～2019 组（贮存 5～6 年）、2020～2021 组（贮存 3～4 年）、2022～2023 组（贮存 1～2 年）温郁金为参照，建立 SIMCA 模型，不论以哪一组别作为参照，其他组别均有重合部分。但以 2020～2021 组、2022～2023 组作为参照时（图 3-C～D），余下 2 组基本在参考区域外，说明温郁金贮存 2 年后气味成分发生了较大的变化。

如图 3-E～F 所示，不同贮存期温郁金的 OPLS-DA 得分图表明，所有数据都在 95%的置信区间内，聚类效果良好，2022～2023 组与其余两组的差异明

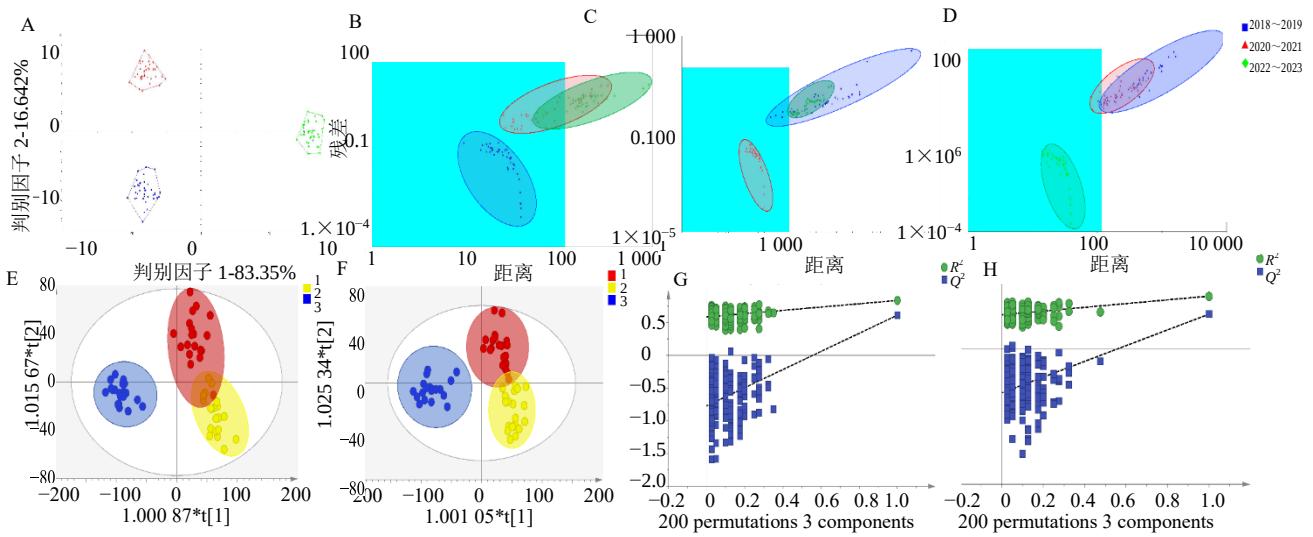


A 和 C 依次为 2018～2023 年贮存期代表性样品的 MXT-5 和 MXT-1701 色谱峰叠加图；B 和 D 分别为 60 批次温郁金 MXT-5 和 MXT-1701 色谱峰总图；E-2018～2023 年贮存期代表性样品的 MXT-5 色谱图。

A and C are the superimposed chromatographic peaks of MXT-5 and MXT-1701 from representative samples collected during the storage period from 2018—2023, respectively; B and D-Combined Chromatogram of 60 Batches of *Curcuma wenyujin* MXT-5 and MXT-1701. E-MXT-5 chromatograms of representative samples from the 2018—2023 storage period.

图 2 MXT-5 和 MXT-1701 的气味指纹图谱

Fig. 2 Odor fingerprint profiles of MXT-5 and MXT-1701



A-DFA 图；B-以 2018～2019 为参照的 SIMCA 图；C-以 2020～2021 为参照的 SIMCA 图；D-以 2022～2023 为参照的 SIMCA 图；E 和 F 依次为 60 批不同贮存期温郁金 MXT-5 和 MXT-1701 的 OPLS-DA 图；G 和 H 依次为 MXT-5 和 MXT-1701 OPLS-DA 的置换检验。

A-DFA plot; B-SIMCA plot using 2018～2019 as the reference period; C-SIMCA plot using 2020—2021 as the reference period; D-SIMCA plot using 2022—2023 as the reference period; E and F-OPLS-DA plots for 60 batches of *Curcuma wenyujin* MXT-5 and MXT-1701 with different storage periods, respectively; G and H-the permutation tests for the OPLS-DA plots of MXT-5 and MXT-1701, respectively.

图 3　气味色谱数据可视化分析图

Fig. 3　Odor chromatographic data visualization and analysis plot

显，2018～2019 组和 2020～2021 组有部分重叠，表明贮存 1～2 年的温郁金与贮存超过 2 年时间的温郁金存在一定的气味差异，该结果再次验证了 SIMCA 模型结果。为了确定 OPLS-DA 模型是否过度拟合，进行了随机排列 200 次的置换检验（图 4-G～H），所有随机置换模型的 R^2_Y 和 Q^2_Y 值均低于原始模型对应数值，且 R^2_Y 和 Q^2_Y 的截距分别小于 0.6 和 0.05，证明该模型无过拟合现象，组间差异区分结果稳定可信。

2.2.4　电子鼻的气味成分结果与分析　在 AroChem Base 数据库中，采用 nC$_6$～nC$_{16}$ 进行校准，匹配不同贮存期温郁金可能存在的气味成分与各自的感官描述信息，结果见表 4 和图 4-A。该结果表明，不同贮存期温郁金共表征出 36 个气味成分，其中丙烯醛是 2018 年的特有气味成分，2019 年与 2020 年无特有气味成分，丙酸、丙烯酸癸酯、3-乙基十四烷、2-甲基十五烷是 2021 年的特有气味成分，6-甲基十五烷是 2022 年的特有气味成分，2-丁烯酸辛酯是 2023 年的特有气味成分；异丙醇、桧烯、樟脑等 12 个气味成分是不同贮存期温郁金的共有成分。其中桧烯、月桂烯、芳樟醇、丁香酚、β-石竹烯具有辛辣气味，这与温郁金味“辛”一致。

采用 GraphPad Prism 8 统计学软件对 12 个共有气味成分的峰面积进行单因素方差分析（表 5）。与 2022～2023 组相比，其余 2 组有 6 个气味成分均显著性上升（P<0.05、0.01、0.001），分别为异丙醇、樟脑、β-法呢烯（2018～2019 组除外）、覆盆子酮、1-十四醇和丁位十二内酯；有 2 个气味成分均呈下降趋势，但无显著性差异，分别为桧烯和 β-石竹烯；有 4 个气味成分先上升后下降，分别为丁香酚（2020～2021 组，P<0.001；2018～2019 组，P<0.05）、肉桂酸甲酯（2020～2021 组，P<0.001）、α-法呢烯（2020～2021 组，P<0.05）和 2,4,5,6-四氯间二甲苯。通过 SIMCA-P 14.1 对 12 个共有气味成分的峰面积进行 VIP 分析，发现了 8 个具有最高鉴别潜力的气味成分（VIP>1），依次为异丙醇、丁香酚、肉桂酸甲酯、α-法呢烯、β-法呢烯、覆盆子酮、1-十四醇和丁位十二内酯。综合单因素方差分析和 VIP 分析结果推测异丙醇、丁香酚、覆盆子酮、1-十四醇和丁位十二内酯是具有最高鉴别潜力的气味成分（VIP>1，P<0.05）。

2.2.5　颜色与气味的相关性分析　将气味成分的峰面积作为变量（Y），色度值 L^*、a^*、b^*、E^*、C^*、H^*、$CIRG$ 作为变量（X），通过联川生物云平台进行相关性聚类标记热图分析。相关系数 r 处于−1～1，当 0.5<|r|<0.8 时，表明两变量是中度相关；|r|>0.8 时，表明两变量是高度相关。相关性的显著性用 P 值表示，P<0.05 则表示具有显著性，反之则表示无显著性。根据|r|由大至小的顺序进行排序，筛选

表 4 不同贮存期温郁金中可能存在的化合物及感官描述信息

Table 4 Possible compounds and sensory descriptive information in 60 batches of *C. wenyujin*

编号	MXT-5-FID1		MXT-1701-FID2		CAS 序号	分子式	名称	相关指数	感官描述	年份					
	t_R/min	保留指数	t_R/min	保留指数						2018	2019	2020	2021	2022	2023
1	14.48	443	14.24	559	107-02-8	C_3H_4O	丙烯醛	93.55	杏仁味等	+	−	−	−	−	−
2	15.69	472	14.30	561	64-17-5	C_2H_6O	乙醇	89.27	酒精味等	+	+	−	−	+	−
3	16.55	492	14.98	583	67-63-0	C_3H_8O	异丙醇	94.42	酒精味等	+	+	+	+	+	+
4	20.11	577	15.34	594	287-92-3	C_5H_{10}	环戊烷	90.76	甜味等	−	−	−	+	+	−
5	26.13	712	24.80	905	79-09-4	$C_3H_6O_2$	丙酸	74.24	酸味等	−	−	−	+	−	−
6	30.62	779	28.62	996	79-31-2	$C_4H_8O_2$	异丁酸	82.76	酸味等	+	+	+	+	−	−
7	31.32	790	28.62	996	513-85-9	$C_4H_{10}O_2$	2,3-丁二醇	96.96	水果味等	+	+	+	+	−	−
8	32.25	803	25.16	914	626-93-7	$C_6H_{14}O$	2-己醇	74.59	酒精味等	+	+	−	+	−	−
9	44.63	945	27.47	969	7785-26-4	$C_{10}H_{16}$	(1*S*)-(−)-α-蒎烯	87.40	萜烯味等	−	+	+	−	−	+
10	46.48	964	29.42	1011	3387-41-5	$C_{10}H_{16}$	桧烯	82.84	辛辣味等	+	+	+	+	+	+
11	49.48	995	31.04	1040	123-35-3	$C_{10}H_{16}$	月桂烯	84.53	辛辣味等	+	+	+	+	−	+
12	54.72	1042	33.81	1089	470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	桉叶油醇	98.85	甜味等	−	−	+	−	+	+
13	55.24	1046	33.84	1090	99-85-4	$C_{10}H_{16}$	γ-松油烯	85.14	水果味等	+	+	+	+	−	+
14	60.81	1096	40.38	1182	78-70-6	$C_{10}H_{18}O$	芳樟醇	94.02	辛辣味等	+	+	+	−	−	−
15	61.76	1104	33.84	1090	586-62-9	$C_{10}H_{16}$	萜品油烯	90.76	水果味等	+	+	+	+	−	−
16	69.58	1168	48.76	1283	76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	樟脑	78.94	樟脑味等	+	+	+	+	+	+
17	70.89	1178	49.24	1289	98-55-5	$C_{10}H_{18}O$	α-松油醇	89.92	樟脑味等	+	+	+	−	−	+
18	92.90	1354	74.08	1542	97-53-0	$C_{10}H_{12}O_2$	丁香酚	80.98	辛辣味等	+	+	+	+	+	+
19	100.32	1410	76.85	1569	103-26-4	$C_{10}H_{10}O_2$	肉桂酸甲酯	63.73	水果味等	+	+	+	+	+	+
20	106.17	1448	67.33	1476	3853-83-6	$C_{15}H_{24}$	α-法呢烯	97.94	−	+	+	+	+	+	+
21	107.56	1457	71.64	1519	22874-79-9	$C_{12}H_{22}O_2$	2-丁烯酸辛酯	96.25	水果味等	−	−	−	−	−	+
22	109.89	1472	76.07	1561	473-13-2	$C_{15}H_{24}$	α-芹子烯	96.23	橙子味等	+	+	+	+	−	−
23	111.16	1480	73.56	1537	87-44-5	$C_{17}H_{28}$	β-石竹烯	95.52	辛辣味等	+	+	+	+	+	+
24	113.81	1497	68.68	1490	629-62-9	$C_{15}H_{32}$	十五烷	99.01	烷烃味等	−	+	+	+	+	+
25	115.64	1507	75.79	1559	2156-96-9	$C_{13}H_{24}O_2$	丙烯酸癸酯	93.60	−	−	−	−	+	−	−
26	117.65	1518	76.91	1569	1461-03-6	$C_{15}H_{24}$	β-法呢烯	97.82	−	+	+	+	+	+	+
27	120.35	1533	76.35	1564	22306-28-1	$C_{16}H_{34}$	8-甲基十五烷	89.11	−	+	+	+	+	+	−
28	121.81	1541	75.80	1559	71958-48-0	$C_{16}H_{34}$	3-乙基十四烷	86.74	−	−	−	−	+	−	−
29	122.16	1543	76.52	1566	10105-38-1	$C_{16}H_{34}$	6-甲基十五烷	89.87	−	−	−	−	−	+	−
30	125.48	1561	75.79	1559	1560-93-6	$C_{16}H_{34}$	2-甲基十五烷	80.16	−	−	−	−	+	−	−
31	127.00	1570	68.54	1488	5471-51-2	$C_{10}H_{12}O_2$	覆盆子酮	88.33	水果味等	+	+	+	+	+	+
32	137.66	1628	94.82	1742	877-09-8	$C_8H_6Cl_4$	2,4,5,6-四氯间二甲苯	89.36	−	+	+	+	+	+	+
33	141.21	1647	100.16	1793	112-72-1	$C_{14}H_{30}O$	1-十四醇	84.81	椰子味等	+	+	+	+	+	+
34	149.53	1693	95.94	1753	2156-97-0	$C_{15}H_{28}O_2$	丙烯酸月桂酯	68.69	−	+	+	+	+	+	−
35	154.48	1720	114.74	1934	713-95-1	$C_{12}H_{22}O_2$	丁位十二内酯	86.48	椰子味等	+	+	+	+	+	+
36	160.38	1752	96.15	1755	5634-30-0	$C_{17}H_{34}$	十二烷基环戊烷	92.71	−	+	+	+	+	+	−

“+”表示检出成分，“−”表示未检出成分。

“+” indicates detected components, and “−” indicates undetected components.

出与 7 个色度值密切相关的 15 个气味成分（$|r|>0.5$，$P<0.05$），分别是丁位十二内酯、丙烯酸月桂酯、2-甲基十五烷、桉叶油醇、萜品油烯、十二烷基环戊烷、1-十四醇、γ-松油烯、樟脑、月桂烯、异丁酸、8-甲基十五烷、2,3-丁二醇、十五烷和芳樟醇；结合“2.2.4”项的结果，推测丁位十二内酯和 1-十四醇（VIP＞1，$|r|>0.5$，$P<0.05$）是不同贮存期温郁金之间的特征差异成分。对于不同的气味成分来说，与之相关度较强的色度值也各不相同，如丁位十二内酯与 a^*、b^*和 C^*成正相关，与 H^*呈负相关，相关系数分别为 0.74、0.68、0.63 和−0.54，表明该成分含量越多，类似于椰子味的奶油香味和果香越浓，颜色越红越黄，饱和度越高，色相角越小；1-十四醇与 a^*呈正相关，与 H^*呈负相关，相关系数分别为 0.62 和−0.56，表明该成分含量越多，类似于椰子味的蜡质气味越浓，颜色越红，色相角越小。

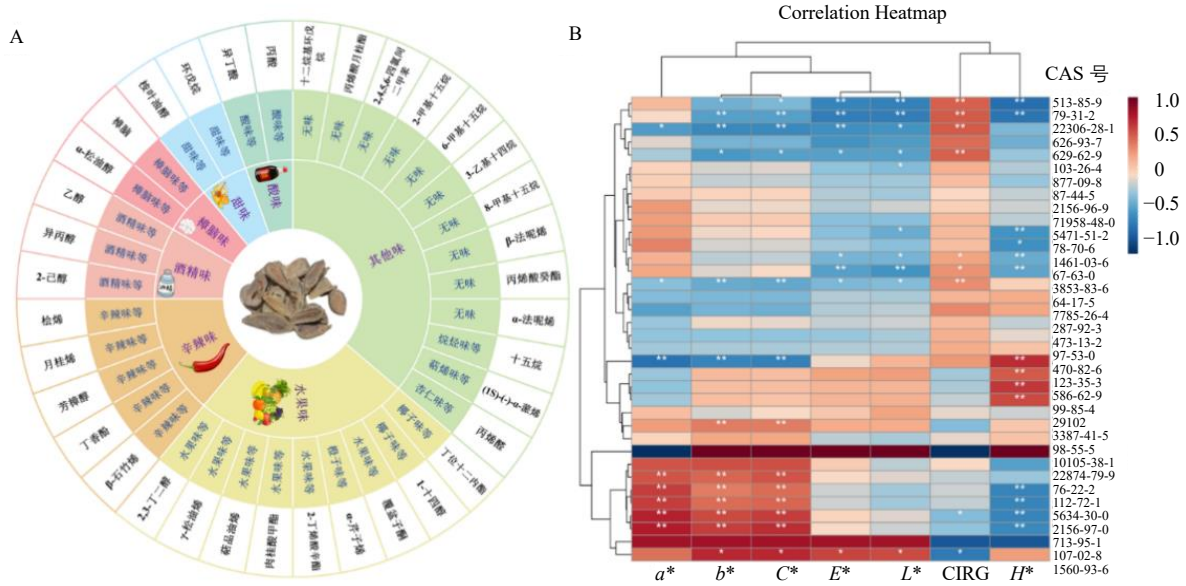


图 4　不同贮存期温郁金风味轮图 (A) 和颜色-气味相关性热图 (B)

Fig. 4　Flavor wheel of *C. wenyujin* at different storage periods (A) and color-odor correlation heat map (B)

表 5　不同贮存期温郁金共有成分的差异性分析

Table 5　Analysis of variations in compositional components of *C. wenyujin* across different storage periods

编号	保留时间/s	成分	2018～2019 组	2020～2021 组	VIP
3	16.55	异丙醇	↑*	↑***	1.129 6
10	46.48	桧烯	↓	↓	0.792 7
16	69.58	樟脑	↑***	↑*	0.949 8
18	92.90	丁香酚	↓*	↑***	1.121 1
19	100.32	肉桂酸甲酯	↓	↑***	1.045 5
20	106.17	α-法呢烯	↓	↑*	1.020 8
23	111.16	β-石竹烯	↓	↓	0.702 1
26	117.65	β-法呢烯	↑	↑***	1.098 8
31	127.00	覆盆子酮	↑**	↑***	1.073 1
32	137.66	2,4,5,6-四氯间二甲苯	↓	↑	0.600 9
33	141.21	1-十四醇	↑***	↑***	1.072 8
35	154.48	δ-二内酯	↑***	↑***	1.199 1

“↑”表示与 2022～2023 组相比该成分呈上升趋势，“↓”表示与 2022～2023 组相比该成分呈下降趋势，$^{*}P<0.05$　$^{**}P<0.01$　$^{***}P<0.001$。

“↑” indicates that the component showed an upward trend compared with the 2022—2023 group, and “↓” indicates that the component showed a downward trend compared with the 2022—2023 group; $^{*}P<0.05$　$^{**}P<0.01$　$^{***}P<0.001$.

2.3　基于近红外光谱对不同贮存期温郁金光谱信息的分析

2.3.1　近红外光谱检测参数与方法

（1）检测条件：采用 AntarisII 近红外光谱仪以漫反射的方式采集 60 批次样品的光谱信息，光谱范围为 10 000～4 000 cm^{-1}，分辨率为 16 cm^{-1} [12]。

（2）样品检测：分别取不同贮存期温郁金样品干燥粉末适量，将样品粉末倒入特制石英皿中，轻压粉末，确保粉末均匀铺满整个器皿底部，每个光谱扫描 32 次[12]。

2.3.2　数据采集与分析

采用 Origin 2021 软件绘制近红外光谱图；利用 MATLAB 2022a 软件对“颜色-气味-光谱”数据融合分析，建立分类模型。

2.3.3　近红外光谱的结果与分析

运用 Origin 2021 软件绘制在 11 000～4 000 cm^{-1} 内的代表性样品原始近红外光谱图和所有批次原始近红外光谱图（图

5）。如图 5-A 所示，所有贮存年份曲线的吸收谷、吸收峰位置完全对齐，仅强度变化，表明年份只改变成分含量，不产生新化学物质、无基质结构改变。如图 5-B 所示，不同贮存期温郁金样品的近红外光谱主要有 6 个特征吸收峰区间：8 800～7 600 cm^{-1}、7 600～6 000 cm^{-1}、6 000～5 400 cm^{-1}、5 400～5 000 cm^{-1}、5 000～4 500 cm^{-1} 和 4 500～4 200 cm^{-1}，与 C-H、O-H、N-H 等化学键有关[13-14]。

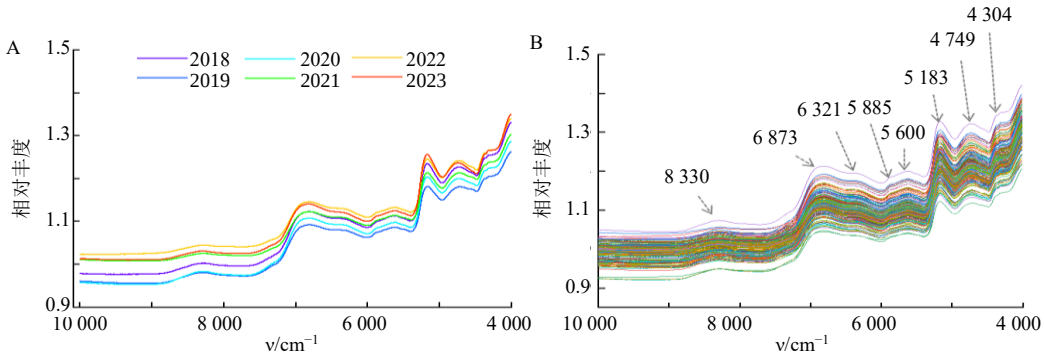


图 5　代表性样品原始近红外光谱图（A）和 60 批样品原始近红外光谱图（B）

Fig. 5　Raw near-infrared spectra of representative samples with different storage periods (A) and raw near-infrared spectra of 60 batches of samples (B)

2.4　“颜色-气味-光谱”数据融合分析

将 60 批样品的色度值、气味成分峰面积和光谱数据一起导入 Matlab 2022a 软件，通过构建决策树（decision tree，DT）、集成学习（ensemble learning，EL）模型，分类结果以混淆矩阵、受试者工作特征曲线（receiver operating characteristic curve，ROC）和平行坐标图进行可视化展示。在构建 DT 和 EL 模型之前，将交叉验证的折数设为 5，并预留 20%的数据集作为测试集来验证分类模型的准确性。在 DT 和 EL 模型中，通常，正预测值（positive predictive value，PPV）值越大、假发现率（true positive rate，FDR）值越小，表明模型的预测性能越好[15]。ROC 曲线展示了当前所选分类器在不同分类评分阈值下的真正率（true positive rate，TPR）与假负率（false positive rate，FPR），曲线下面积（area under the curve，AUC）值是衡量分类器整体质量的指标，AUC 值越接近 1，分类性能越好[15]。平行坐标图可对高维数据进行可视化，便于理解特征之间的关系，并识别用于区分不同类别的有用预测变量，其中误分类点以虚线表示（图 6）。

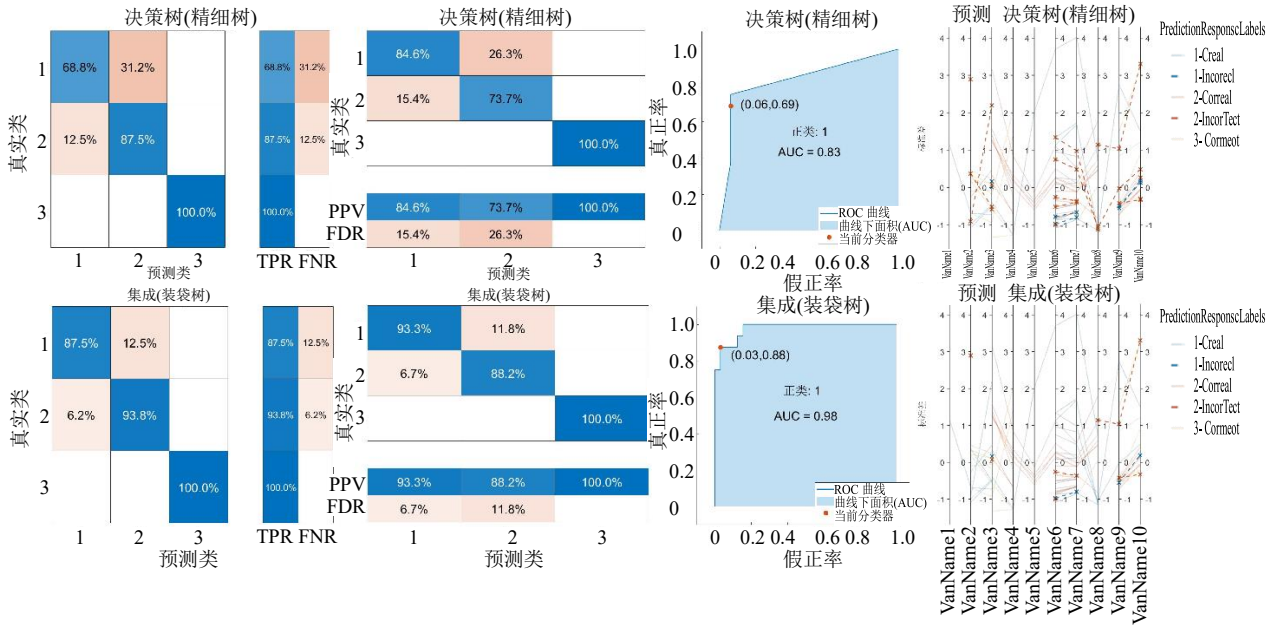


图 6　“颜色-气味-光谱”数据融合分析

Fig. 6　Data fusion analysis of “color-odor-spectrum”

DT 和 EL 模型的总准确度分别为 85.40%和 93.80%；经测试后的总准确度分别为 91.70%和 100.00%，表明这 2 个模型都适合以“颜色-气味-光谱”综合指标对不同贮存期的温郁金进行分类。在 DT 模型的优化过程中，在混淆矩阵（图 6）中，2018～2019 组、2020～2021 组和 2022～2023 组的 TPR 分别为 68.80%、87.50%和 100.00%，FNR 仅为 31.20%、12.50%和 0.00%；PPV 分别为 84.60%、73.70%和 100.00%，FDR 仅为 15.40%、26.30%和 0.00%，ROC 曲线的 AUC 值为 0.83。该结果表明 DT 模型能够完全区分 2022～2023 组温郁金，但对于 2018～2019 组和 2020～2021 组较难区分。在 EL 模型的优化过程中，在混淆矩阵（图 6）中，2018～2019 组、2020～2021 组和 2022～2023 组的 TPR 为 87.50%、93.8%和 100.00%，FNR 为 12.50%、6.20%和 0.00%；PPV 分别为 93.30%、88.20%和 100.00%，FDR 仅为 6.70%、11.80%和 0.00%，ROC 曲线的 AUC 值为 0.98。该结果表明 EL 模型可靠且能够完全区分 2022～2023 组温郁金，准确区分 2018～2019 组和 2020～2021 组。

3 讨论

中药在贮存过程中受外界温湿度、氧气、光照等因素影响，或者自身成分的不稳定，其品质会随时间推移发生复杂的变化[16]。目前，对中药贮存期的研究方法已从长期稳定性实验[17]、恒温加速实验[17]拓展至电子感官技术、近红外光谱等现代评价体系，评价指标亦涵盖性状特征、含水量、有效成分含量等多个维度。但这些电子感官和近红外光谱技术多应用于食品贮存期领域[18-19]。因此，本研究引入测色仪、电子鼻和近红外光谱技术对不同贮存期的温郁金样品进行动态监测。

测色结果表明，随着贮存时间的延长，温郁金样品颜色向深红黄色调偏移，且饱和度更高，其机制主要涉及氧化、褐变及挥发成分损失等老化过程；建立了基于 7 个色度值的不同贮存期判别函数，交叉验证结果表明 2022～2023 组可 100.00%识别，2020～2021 组最难识别，结合颜色参数趋势分析（图 1），该组样品的 L^*、E_{ab}^*和 H^*与 2018～2019 组较为接近，而 a^*、b^*、C^*则介于贮存 1～2 年与贮存 5～6 年，表明贮存 3～4 年的温郁金在色度空间中处于过渡重叠区，这可能与该阶段化学反应速率减缓有关；确定了 2018～2019 组、2020～2021 组和 2022～2023 组的 7 个色度值参考值范围，如 L^*的参考值范围依次为 59.851 5～60.406 9、59.434 2～60.439 5 和 61.246 0～62.583 0。上述结果表明，颜色分析更适用于辅助判断贮存小于 2 年与贮存大于 5 年以上的极端差异，仅依靠颜色难以实现温郁金精确的“年份断代”。因此，进一步引入气味和光谱的分析。

电子鼻结果与测色的结果类似，DFA 模型对于不同贮存期温郁金的分类效果较为显著；但是 SIMCA 和 OPLS-DA 模型中，贮存 3～4 年与贮存 5～6 年样品的气味特征发生部分重叠，表明气味的“质变”并非在某个时间点突然发生，而是一个连续的、复杂的演变过程。不同贮存期温郁金共表征出 36 个气味成分，通过与贮存 1～2 年的郁金相比，随着贮存时间延长，萜烯类持续下降，可能是因为不稳定的双键烃类发生了氧化或聚合反应，导致温郁金辛辣气味减弱；含氧衍生物显著上升，如 1-十四醇等，说明贮存过程伴随着微生物或酶促的酯化反应，使得郁金气味从“冲”转向“醇厚”。贮存 6 年郁金中成分多为稳定的烷烃和内酯，特有成分丙烯醛通常来源于油脂的氧化酸败，说明贮存 6 年郁金存在劣变；贮存 5 年郁金中成分最复杂、多样性最高，可能是贮存过程中微生物降解大分子产生新次生代谢产物的高峰期，但是没有醛或者萜烯，气味表现为酸感、蜡质。贮存 4 年郁金既没有贮存 5～6 年郁金的部分酸/醇类，又尚未积累贮存 2～3 年郁金特有的烷烃/酯类，说明第四年可能是郁金贮存过程中的成分过渡带，贮存 4～5 年的郁金无特有成分；贮存 3 年郁金中支链烷烃类和不饱和酯类爆发期，特有成分最多，呈现蜡质、油脂、轻微酸败的复杂感，表明这年是郁金成分最活跃、代谢最旺盛的转折点；贮存 1～2 年郁金的特有成分是 6-甲基十五烷和 2-丁烯酸辛酯，具有新鲜的特征。将丙烯醛、丙酸、丙烯酸癸酯、3-乙基十四烷、2-甲基十五烷、6-甲基十五烷、2-丁烯酸辛酯、丁位十二内酯和 1-十四醇可作为不同贮存期温郁金的特征差异成分。据报道，丙酸是一种短链脂肪酸，也是非甾体类抗炎药，具有抗炎与免疫调节[20-21]、调节代谢[22]、维持肠道健康[23]、止痛[24]等药理活性；丙酸直接与免疫细胞内的 p38α MAP 激酶蛋白结合，抑制 TLR 信号通路，最终减少炎症细胞、减轻肠道炎症；研究中溃疡性结肠炎患者口服丙酸盐后，肠道炎症和临床症状均显著改善[20]。丙酸通过 GPR41 在体外抑制孤立交感神经节神经元中的 *N*-type Cav 通道电

流，从而对伤害性疼痛产生止痛效果[24]。另有研究发现丙酸还可通过调节肠道菌群-肠脑轴影响神经功能[25]。上述结论与郁金的传统功效“止痛”“解郁”一致。1-十四醇是一种直链饱和脂肪醇类抗菌剂，具有抗菌及抗炎活性。Kim 等[26]研究发现 1-十四醇可能是一种潜在的预防或治疗幽门螺杆菌诱导的胃部炎症的候选药物。另外，1-十四醇也是一种优秀的生物基相变材料，作为微胶囊芯材能够显著优化储能密度和热响应灵敏度；同时，可作为功能性载体，协同银纳米粒子等改性剂，间接赋予材料抗菌性能[27]。1-十四醇在抗炎方面的作用与温郁金传统功效中的炎症消退伴随疼痛缓解的“止痛”作用相关。另外，桧烯[28]、月桂烯[28]、芳樟醇[28]、丁香酚[29]、β-石竹烯[28-29]的感官描述与《中国药典》2025 年版中温郁金的气味描述一致，表明电子鼻识别气味组分具有一定的准确性。

近红外结果表明，贮存时间仅对成分的含量有影响，无新成分产生；不同贮存期温郁金样品的近红外光谱主要有 6 个特征吸收峰区间，反映了挥发油、芳香成分、水分、糖类、蛋白质等物质。DT 是一种归纳学习算法，以树形数据结构将看似无序杂乱的已知数据通过训练成可预测未知数据的模型[30-31]；EL 是一种博采众长的模型，通过构建并结合多个学习器来完成相应的训练任务[31]。以“颜色-气味-光谱”为综合指标，建立的机器学习中 DT 和 EL 模型分类效果较好，经测试后的总准确度分别达到 91.7%和 100.00%，然而，EL 模型在各项评估指标上均优于 DT 模型。对于 2018～2019 组和 2020～2021 组，DT 模型的 TPR 仅为 68.8%，FNR 高达 31.2%，表明其难以有效区分这 2 个相邻年份的样品。相比之下，EL 模型的 TPR 提升至 87.5%，FNR 降至 12.5%，且 EL 模型的 AUC 值远高于 DT 模型的 AUC 值，展现出更强的判别能力。上述结果表明以“颜色-气味-光谱”为综合指标的策略比单一指标更有效捕捉不同贮存期温郁金的细微差异，为精准地“年份断代”提供了可靠的数据基础。在未来的中药贮存养护研究中，多传感器数据融合结合机器学习算法，是实现中药质量动态、精准监控的有效途径。

综上所述，本研究通过测色仪、电子鼻和近红外技术，结合 DFA、OPLS-DA、DT、EL 等分析方法，开展不同贮存期温郁金的快速判别，综合单因素方差分析、VIP 和相关性聚类标记热图分析，推测温郁金在贮存期间的特征差异成分；虽然 DT、EL 模型表现出优异的分类性能，后期会进一步扩大样本量，采用外部验证集来进一步评估模型性能。本研究中的特征差异成分尚缺乏靶向定量分析和药效学关联验证，后续拟采用靶向定量分析（如 UPLC-MS/MS 等）系统监测不同贮存期样品中上述候选成分的含量变化趋势；开展相关动物或细胞实验，阐明不同贮存期郁金的药效差异，并建立成分含量与药效指标之间的关联，以上内容旨在为后续差异标志物的确认提供实验依据。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

[1] 中国药典 [S]. 一部. 2025: 78.

[2] Li Y H, Wu Y C, Li Y M, *et al*. Review of the traditional uses, phytochemistry, and pharmacology of *Curcuma wenyujin* Y. H. *Chen* et C. Ling [J]. *J Ethnopharmacol*, 2021, 269: 113689.

[3] Ao M Y, Li X, Li M, *et al*. *Curcumae Radix*: A review of its botany, traditional uses, phytochemistry, pharmacology and toxicology [J]. *J Pharm Pharmacol*, 2022, 74(6): 779-792.

[4] Wang M, Hu T T, Li Y H, *et al*. An integrated and rapid evaluation of *Curcumae Radix* from different botanical origins based on chemical components, antiplatelet aggregation effect and Fourier transform near-infrared spectroscopy [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2025, 324: 124992.

[5] 蓝振威, 杨小露, 孟江, 等. 基于多成分定量及化学计量学的 4 种郁金特征性成分识别与质量评价 [J]. 中草药, 2024(2): 622-629.

[6] 丁羽, 戴慧莲, 姜德利, 等. 基于智能感官和近红外光谱技术结合化学计量学的酒当归炮制程度快速辨识研究 [J]. 中草药, 2025, 56(1): 68-78.

[7] Fan X Y, Wang J Y, Liu B H, *et al*. Rapid evaluation of Qingpi products using E-eye, fast GC e-nose, and FT-NIR [J]. *Phytochem Anal*, 2025, 36(5): 1580-1595.

[8] Guo Q, Li M X, Fu R, *et al*. Rapid evaluation of *Curcuma* origin and quality based on E-eye, flash GC e-nose, and FT-NIR combined with machine learning technologies [J]. *Food Chem*, 2025, 481: 143953.

[9] 张晓龙, 马小妮, 王歆竹, 等. 基于智能感官技术与多维统计分析的酒炙川芎炮制程度快速判别 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2026, 32(3): 174-182.

[10] 郭强, 李铭轩, 窦慧, 等. 中药饮片数智化质控范式变革: 技术驱动下的行业升级之路 [J]. 中国中药杂志, 2025, 50(21): 5905-5914.

[11] Qin Y W, Li M X, Zhang J B, *et al*. Characterization and intrinsic quality correlation of raw and vinegar-processed *Curcumae Radix* [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2023, 232: 115329.

[12] Li M X, Shi Y B, Zhang J B, *et al*. Rapid evaluation of *Ziziphi Spinosae Semen* and its adulterants based on the combination of FT-NIR and multivariate algorithms [J]. *Food Chem X*, 2023, 20: 101022.

[13] 彭译, 张玖捌, 李铭轩, 等. 基于分光测色和近红外光谱结合多元数理统计的酸枣仁炒制程度快速评价研究 [J]. 中国中药杂志, 2025, 50(21): 5928-5938.

[14] 赵金凯, 罗云云, 杨柳, 等. 基于近红外光谱法对温郁金源 3 种药材的快速鉴别 [J]. 中华中医药学刊, 2020, 38(9): 154-156.

[15] Zhao Q, Zhou Y C, Wang C, *et al*. Quality assessment and geographical origin traceability of *Gastrodia elata* based on machine vision, flash GC e-nose, HPLC, and machine learning algorithms [J]. *Food Res Int*, 2026, 232: 118848.

[16] 梅南菊, 赖长江生, 刘锦芮, 等. 中药原料保质期研究进展 [J]. 中草药, 2022, 53(20): 6611-6625.

[17] 汪露露, 谢绚影, 许纪锋, 等. 小包装中药饮片葛根质量稳定性研究 [J]. 食品安全质量检测学报, 2017, 8(9): 3526-3530.

[18] 刘冬青, 陈朴, 臧鹏, 等. 月饼品质指标变化规律研究和保质期预测模型的建立 [J]. 食品科学, 2022, 43(17): 221-230.

[19] 龙佳, 黄明月, 李茜, 等. 保质期内和过期奶的近红外光谱快速判别 [J]. 光谱学与光谱分析, 2023, 43(S1): 61-62.

[20] Wu Q G, Shi R K, Xiao L W, *et al*. p38 MAP kinase senses short-chain fatty acids to attenuate Toll-like receptor signaling and intestinal inflammation [J]. *Sci Adv*, 2026, 12(28): eaef1419.

[21] Kim C H. Short-, medium-, versus long-chain fatty acids: Mechanisms of immunomodulation and disease pathogenesis [J]. *Cell Mol Immunol*, 2026, 23(6): 594-606.

[22] Al-Lahham S H, Peppelenbosch M P, Roelofsen H, *et al*. Biological effects of propionic acid in humans; metabolism, potential applications and underlying mechanisms [J]. *Biochim Biophys Acta BBA Mol Cell Biol Lipids*, 2010, 1801(11): 1175-1183.

[23] 郭梅芳, 狄嘉欣, 谭周进, 等. 肠道丙酸的研究进展 [J]. 中国微生态学杂志, 2025, 37(7): 857-862.

[24] Takeda M, Sashide Y, Utugi S. Neurophysiological basis of short-chain fatty acid action in pain modulation: Therapeutic implications [J]. *Int J Mol Sci*, 2025, 26(16): 8082.

[25] 郑惠敏. 抗生素暴露与老年抑郁关联的机制研究: SCFAs 对肠脑轴体外细胞 TPH 信号的影响 [D]. 合肥: 安徽医科大学, 2024.

[26] Kim G, Kim J E, Kang M J, *et al*. Inhibitory effect of 1-tetradecanol on *Helicobacter pylori*-induced production of interleukin-8 and vascular endothelial growth factor in gastric epithelial cells [J]. *Mol Med Rep*, 2017, 16(6): 9573-9578.

[27] Geng X Y, Li W, Yin Q, *et al*. Design and fabrication of reversible thermochromic microencapsulated phase change materials for thermal energy storage and its antibacterial activity [J]. *Energy*, 2018, 159: 857-869.

[28] 饶瑶. 九种姜黄属药材的化学成分分析及温郁金欧洲药典标准研究 [D]. 天津: 天津中医药大学, 2022.

[29] 马银宇, 卢金清, 彭博. HS-SPME-GC-MS 分析温郁金不同炮制品的挥发性成分 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2019, 25(24): 136-141.

[30] 荣菡, 廖书嫣, 刘欣宇, 等. 近红外光谱与决策树算法联用快速鉴别苍耳掺伪 [J]. 中成药, 2022, 44(8): 2739-2743.

[31] 汤玉荣. 机器学习方法鉴别中药材种类和产地的比较研究 [J]. 甘肃科技, 2024, 40(1): 84-87.

[责任编辑 时圣明]