· 788 ·

·药材与资源 ·

# 施肥和覆盖地膜对福田河菊花产量与品质的影响

刘大会<sup>1,2,3</sup>,郭兰萍<sup>2</sup>,朱端卫<sup>1\*</sup>,黄璐琦<sup>2\*</sup>

(1.华中农业大学资源与环境学院,湖北 武汉 430070;2.中国中医科学院中药研究所,北京 100700;3.云南省农业科学院药用植物研究所,云南 昆明 650231)

摘 要:目的 研究施肥和覆盖地膜等农艺措施对福田河菊花产量与品质的影响,以期为福田河菊花的规范化栽 培提供指导。方法 采用田间试验方法,测定不同农艺措施下菊花的产量,用比色法测定菊花中总黄酮,用 HPLC 法测定绿原酸。结果 偏施氮肥时,菊花产量和品质均较低;将有机肥和无机肥料(氮、磷、钾、硼、锌等)配合施用 时,菊花产量、品质与经济效益均大幅提高。高氮配方的肥料可显著提高菊花产量,但降低了其品质;而高钾配方 的肥料可显著提高菊花中总黄酮与绿原酸的量,且菊花产量也较高。采用覆盖地膜栽培时,可促进菊花花期提前, 并显著提高菊花前期花产量与总产量,从而也提高了种植菊花的经济效益。结论 在福田河菊花生产上,应采用 覆盖地膜栽培,并应施用高钾配方的有机-无机复混专用肥。

关键词:菊花;施肥;覆盖地膜;产量;黄酮;绿原酸

**中图分类号**:R282.2 **文献标识码**:A **文章编号**:0253 = 2670 (2009) 05 = 0788 = 05

Effect of fertilization and plastic film mulching on yield and quality

of Chrysanthemum morifolium flower

LIU Da-hui<sup>1,2,3</sup>, GUO Lan-ping<sup>2</sup>, ZHU Duan-wei<sup>1</sup>, HUANG Lu-qi<sup>2</sup>

(1. College of Resources and Environment, Huazhong Agricultural University, Wuhan 430070, China; 2. Institute

of Chinese Materia Medica, Chinese Academy of Chinese Medicinal Science, Beijing 100070, China;

3. Institute of Medicinal Plants, Yunnan Academy of Agricultural Sciences, Kunming 650231, China)

Abstract: Objective In order to guide the standardized cultivation on *Chrysanthemum morif olium* in Futianhe region, the effect of agronomic measure of fertilization and plastic film mulching on the yield and quality of *C. morif olium* flower was studied **Methods** Field test was adopted to study the effect of fertilization and plastic film mulching on *C. morif olium*, and spectrophotometric analysis and HPLC method were used to determine the flavonoids and chlorogenic acid in *C. morif olium* flower, respectively. **Results** Applying only with nitrogenous fertilizer in the cultivation decreased the yield and quality of *C. morif olium* flower. And the yield, quality, and production value of *C. morif olium* flower would be increased with the application of organic manure and inorganic elements, such as N, P, K, B, and Zn. The compound fertilizer with high N content could remarkably increase the yield of *C. morif olium* flower, but it would lower the quality. However, the total flavonoids and chlorogenic acid content of *C. morif olium* flower would be shortened with plastic film mulching, and the yield also be remarkably increased **Conclusion** In the cultivation of *C. morif olium* in Futianhe, it is strongly recommended to adopt plastic film mulching and to fertilize with the special compound fertilizer with high K content.

Key words: Chrysanthemum morifolium Ramat.; fertilization; plastic film mulching; yield; flavonoid; chlorogenic acid

菊花为菊科植物菊 Chrysanthemum morifolium Ramat. 的干燥头状花序,是我国传统的常用中 药材和保健茶饮,也是卫生部首批批准的药食同源 的药材。菊花按照产地和加工方法不同,分为滁菊、

<sup>\*</sup> 收稿日期:2008-08-25 基金项目:国家科技支撑计划项目(2006BAI09B03);湖北省重点科技攻关项目(2001AA304A) \*通讯作者 朱端卫 Tel:(027)87287184 E-mail:zhudw@mail.hzau.edu.cn

杭菊、毫菊、贡菊、怀菊等,其中杭菊的栽培面积和总 产量最大。早在20世纪50年代,湖北麻城福田河 一带引种杭菊获得成功,并逐渐发展成为我国杭菊 产地之一,现杭菊种植面积已有1400 hm<sup>2</sup>,该菊花 在国内药材市场上被称为福田河白菊花<sup>[1]</sup>。但由于 该地菊花栽培技术缺乏系统整理,导致菊花产量和 质量不稳定,严重制约了当地菊花产业的发展和药 农经济收入的提高。为此,本实验在当地土壤供肥 特性的基础上,结合菊花的需肥特点,开展了有机肥 和无机肥配合施用、不同肥料配比以及覆盖地膜等 农艺措施对福田河菊花产量与品质影响的研究,旨 在为当地菊花规范化栽培(GAP)提供指导。

1 材料与方法

1.1 试验材料:试验在湖北省麻城市福田河镇菊花 种植基地进行。供试土壤为花岗片麻岩发育而成的 沙泥土,基本理化性状为:pH 5.29,有机质 13.6 g/ kg,全氮 1.1 g/kg,碱解氮 75.0 mg/kg,速效磷 22.2 mg/kg,速效钾 82.0 mg/kg,有效钙 554.7 mg/kg,有效镁 77.0 mg/kg,有效硼 0.10 mg/kg, 有效锌 2.43 mg/kg。供试菊花种苗由种植基地提 供,为当地常用品种。

1.2 试验设计

1.2.1 有机肥和无机肥配合施用试验:试验设置 4 个处理,具体方案见表 1。

表1 有机肥和无机肥配合施用试验方案

Table 1 Test design of organic manure and inorganic

fertilizer application on C. morifolium

	ЫТШ	肥料种类与施用量/ (kg ·hm <sup>- 2</sup> )						
	处理	有机肥	氮	磷	钾	微肥(硼砂+硫酸锌)	- 注	
	А	750.0	165.0	-	-	-	习惯施肥	
	В	-	165.0	60.0	150.0	-	氮+磷+钾	
	С	-	165.0	60.0	150.0	7.5 + 15.0	氮+磷+钾+微	
	D	750.0	165.0	60.0	150.0	7.5+15.0	有+氮+磷+钾+微	

所用有机肥品种为猪粪与泥炭发酵后产物,并 晒干粉碎(含有机质约 42.7%);无机肥料品种为尿 素、磷酸一铵、氯化钾。各处理肥料施用前充分混 匀,肥料 60%基施,剩下于花芽分化期(8月底)追 施,施用方法为种植畦中间开沟条施。

1.2.2 不同肥料配比试验:试验根据菊花植株养分的量和种植基地土壤养分状况,设置了高氮(11

4 10)、高钾(8 5 12)、高磷(9 6 10)3个不同 氮-磷-钾配比的有机-无机复混肥[含有机肥 50%, 氮(N)+磷(P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)+钾(K<sub>2</sub>O)=25%],各肥料的施 肥量为1 500 kg/hm<sup>2</sup>,共3 个处理。试验所用肥料 品种和施肥方法同试验1。

 1.2.3 覆盖地膜试验:试验设置覆盖黑地膜和无地 膜(对照)2个处理,各处理施高氮配方(11 4 10) 的有机-无机复混肥1 500 kg/hm<sup>2</sup>,肥料 60%基施 (种植畦中间开沟条施),剩下于花芽分化期(8 月 底)追施(打坑埋施)。

田间小区面积为 13.44 m<sup>2</sup>,菊花定植株行距为 40 cm ×50 cm,每小区共定植 56 株。上述试验的各 处理均设置 3 个重复,完全随机区组排列。菊花定 植时间为 2003 年 5 月 18 日,采收时间为当年 11 月。

1.3 菊花采收与样品制备:2003年11月当花朵的 花瓣全白、花头50%左右盛开时开始采摘菊花,前 后共分3次将菊花全部采收完,并按照采收时间的 先后将菊花分第一期花(一水花)、第二期花(二水 花)和第三期花(三水花或末期花)。各小区每水花 采收完后立即称取其鲜花质量,并从中抽样按照传 统加工方法蒸晒晾干,然后将样品在烘箱中于55 以下烘至全干后进行粉碎制样。将磨碎样品过40 目筛后,用小封口袋进行装袋密封,并在-18 下 进行低温保存待测。

1.4 菊花供试品溶液制备:采用超声提取法进行菊 花样品化学成分的提取<sup>[2]</sup>。分别精密称取不同处理 菊花粉末样品 0.25 g,置 150 mL 带塞三角瓶中,加 99.5 %甲醇 25 mL,称取三角瓶的总质量(样品+甲 醇+三角瓶),然后将样品浸泡 30 min 后在常温下 超声提取 30 min,补充三角瓶中甲醇至原质量,摇 匀滤过,滤液即为供试品溶液。

 1.5 菊花中总黄酮测定:吸取上述供试品溶液,参 照《中国药典》2005 年版铝盐比色法测定菊花中总 黄酮的量<sup>[2]</sup>。芦丁对照品由中国药品生物制品检定 所提供。

1.6 菊花中绿原酸测定:吸取上述供试品溶液,参 照《中国药典》2005 年版高效液相色谱法测定菊花 中绿原酸的量<sup>[2]</sup>。绿原酸对照品由中国药品生物制 品检定所提供。

#### 2 结果与分析

2.1 有机肥与无机肥配合施用对菊花产量与品质的 影响:有机肥和无机肥配合施用可显著提高菊花的产 量(图1)。当只施氮肥和有机肥时(处理A,习惯施 肥),菊花总产量较低;在施用氮肥的基础上增施磷、 钾肥(处理B)可显著提高菊花总产量;在氮、磷、钾肥 配合施用的基础上增施硼、锌微肥(处理C),也可继 续提高菊花总产量;当将有机肥与氮、磷、钾、硼、锌配 合施用时(处理 D),菊花总产量最高,同处理 A 相比, 总产量可增产 31.5%,差异达到显著水平。有机肥和 无机肥配合施用还明显影响菊花总产量中各期花的 比例。从图 1 可知,处理 D 的一水花和二水花产量均 最高,其次为处理 C,处理 A 最低。但各处理三水花 产量差异不大,说明有机肥与无机肥配合施用可促进 菊花提早开花,从而通过增加一水花和二水花的产量 来增加菊花总产量。由于市场上菊花一水花价格最 高,二水花价格略低,而三水花较低,其价格不及一水 花的一半。所以,有机肥与无机肥配合施用对菊花经 济效益的增效将更高。



差异检验为 LSD 法,小写字母(a、b、c)表示同一花期不同处 理间产量或不同处理间总产量5%差异水平,图2同

Using LSD method to test difference levels, different letters (a, b, and c) represent significant difference (P < 0.05) among different treatments at same florescence, Fig. 2 is same

## 图 1 有机肥和无机肥配合施用对福田河菊花产量的 影响(x ±s, n= 3)

Fig. 1 Effect of organic manure and inorganic fertilizer application on yield of C

morifolium **flower** ( $\overline{x} \pm s$ , n = 3)

从图 2 可知,有机肥和无机肥配合施用也可显 著提高菊花中总黄酮的量。不同处理间相比,处理 B 菊花中总黄酮的量最低,只为 6.22%;处理 A 菊 花中总黄酮的量较处理 B 略有提高,但两者间的差 异并不显著;处理 C 菊花总黄酮的量较处理 B 有显 著提高,这说明施用微肥可提高菊花中总黄酮的量; 将有机肥同氮、磷、钾、硼、锌等配合施用时(处理 D),菊花中总黄酮的量最高,较处理 B 提高了 10.5%,且差异达到显著水平。4个处理(A、B、C、 D)菊花中绿原酸的量分别为 0.31%、0.29%、 0.34%和 0.32%。这表明施用微肥(处理 C)和有 机肥与无机肥配合施用(处理 D)也有提高菊花中绿 原酸量的趋势,但 4 个处理间的差异不显著。



### 图 2 有机肥和无机肥配合施用对福田河菊花中 总黄酮量的影响 (x ±s, n=3)

Fig. 2 Effect of organic manure and inorganic

fertilizer application on total flavonoids of C morifolium flower ( $\overline{x} \pm s$ , n = 3)

2.2 不同肥料配比对菊花产量与品质的影响:从表 2 可知,3 种不同肥料配比相比,高氮配方处理菊花 各期花的产量均较高,说明高氮配方的肥料对福田 河菊花的增产效果最好。高磷配方处理的菊花总产 量在3 种肥料配比中虽然最低,但其一水花和二水 花产量占总产量的比例均最高,说明该配方有促进 菊花提早开花的趋势。高钾配方处理菊花的一、二 水花产量占总产量的比例均较低,而其三水花的比 例较高,说明高钾配方有推迟菊花开花的趋势。

表 3 的结果表明,高氮配方处理菊花产量虽然 最高,但其菊花中总黄酮和绿原酸的量却较低;高钾 配方处理菊花中总黄酮和绿原酸的量在 3 种肥料配 比中最高,高磷配方处理次之。这说明在福田河菊 花种植基地,高氮的肥料配比并不利于提高菊花的 内在品质,而适当提高肥料中钾肥与磷肥的比例可 显著提高菊花中药效成分的量。

表 2 不同肥料配比对福田河菊花鲜花产量及各期花比例 的影响(x ±s, n = 3)

 
 Table 2
 Effect of different fertilizer application on fresh flower yield and proportion at different periods

**flower of** C morifolium  $(\overline{x} \pm s, n = 3)$ 

AL TER	鲜花产量/(kg ·小区 - 1)					比例/%		
处理	一水花	二水花	三水花	总产量	一水花	二水花	三水花	
高氮配方	5.37 ±0.30 a	9.50 ±0.62 a	3.80 ±0.33 a	18.66 ±0.81 a	28.76	50.89	20.35	
高钾配方	4.78 ±0.25 b	8.78 ±1.14 a	4.02 ±0.46 a	17.58 ±0.50 ab	27.19	49.94	22.87	
高磷配方	5.05 ±0.23 ab	8.83 ±0.65 a	3.08 ±0.84 a	16.94 ±0.29 b	29.81	52.12	18.17	

差异显著性检验为 LSD 法,每列小写字母(a、b)表示 5 %差异水平,表 3 相同

Using LSD method to test difference level, different letters (a and b) in same column represent significant difference (P < 0.05), Table 3 is same

## 表 3 不同肥料配比对福田河菊花中总黄酮和绿原酸量的 影响

Table 3Effect of different fertilizer application<br/>on total flavonoids and chlorogenic acid<br/>of C morifolium flower

处理	总黄酮/ %(x ±s,n=3)	绿原酸/%
高氮配方	6.87 ±0.12 b	0.32
高钾配方	7.62 ±0.19 a	0.47
高磷配方	7.11 ±0.10 b	0.45

2.3 覆盖地膜对菊花产量与品质的影响:覆盖地膜 可明显促进菊花提早开花,其花期较对照可提早 4~5 d。覆盖地膜也可显著提高一水花、二水花和 菊花总产量(表 4)。同对照相比,其一水花产量增 加 42.1%,二水花产量增加 11.2%,总产量增加 11.9%。而覆盖地膜的三水花产量较对照极显著降 低,下降幅度为 28.4%。这表明覆盖地膜能提早福 田河菊花开花,增加菊花前期花产量,减少末期花产 量,从而显著提高菊花种植经济效益。然而,覆盖地 膜虽可显著提高菊花的产量,但其菊花的内在品质 反较对照处理有一定程度的降低(表 5)。同对照处 理相比,覆盖地膜处理菊花的总黄酮的量下降了 8.0%,绿原酸的量下降了 18.7%。

#### 表4 覆盖地膜对福田河菊花产量的影响 $(\bar{x} \pm s, n=3)$

Table 4 Effect of plastic film mulching on yield

of C morifolium flower  $(\overline{\mathbf{x}} \pm \mathbf{s}, n = 3)$ 

	鲜花产量/(kg ·小区 <sup>-1</sup> )					
处理	一水花	二水花	三水花	总产量		
对照	5.37 ±0.30	9.50 ±0.62	3.80 ±0.33 * *	18.66 ±0.81		
覆盖地膜	7.63 ±0.70 * *	10.56 ±1.56	2.72 ±0.61	20.88 ±1.19 *		

\*、\*\*分别表示同列数据5%显著和1%极显著差异水平, 表5相同

\* and \* \* represent significance at 5 % and 1 % in same tier respectively, Table 5 is same

#### 表 5 覆盖地膜对福田河菊花中总黄酮和绿原酸量的影响

Table 5 Effect of plastic film mulching on total flavonoids

and chlorogenic acid of C morifolium flower

处理	总黄酮/ %(x ±s, n = 3)	绿原酸/%
对照	6.87 ±0.12 * *	0.32
覆盖地膜	6.32 ±0.27	0.26

#### 3 讨论

麻城福田河镇地处大别山区南麓,为丘陵山区。 该地区土壤为花岗片麻岩发育的砂质土,质地粗松, 砂性重,有机质少,不保水保肥,且土壤中磷、钾、硼、 锌等元素比较缺乏。本研究表明,将有机肥和氮、 磷、钾、硼、锌等无机肥配合施用能够显著提高福田 河菊花产量与品质。而当地药农在菊花种植上习惯 偏施氮肥,忽视钾肥和微肥的施用,这极大限制了菊 花产量和品质的提高。

本实验中高氮配方肥料处理菊花中总黄酮和绿 原酸量较低,这是由于黄酮和绿原酸等多酚类物质 是植物经莽草酸次生代谢途径生成的产物<sup>[3]</sup>。其中 苯丙氨酸在苯丙氨酸解氨酶(PAL)的催化下解氨生 成反式肉桂酸 ,是莽草酸代谢途径生成黄酮和绿原 酸等次生代谢物质的第一步反应步骤,也是该代谢 途径的关键反应步骤[4,5]。而苯丙氨酸同时也是植 物体蛋白质合成的前体物质,因而蛋白质同黄酮和 绿原酸等次生物质的合成之间存在着竞争关 系<sup>[6,7]</sup>。根据碳素/营养平衡(carbon/nutrient balance, CNB)假说<sup>[8]</sup>,高氮条件下,植物体内氮素 充足,从而促进苯丙氨酸转化成蛋白质而将氮素贮 存起来:低氮条件时,植物体内氮素不足,缺氮促使 植物体内大部分苯丙氨酸解氨生成酚类物质,并将 解脱下来的氨继续用于植物体内的氮代谢,从而抑 制了苯丙氨酸转化为蛋白质。

研究已表明<sup>[9]</sup>,适当增施钾肥可显著促进菊花 中黄酮和绿原酸的合成与累积,而且高钾配方肥料 中氮量最低,所以该配方处理菊花中总黄酮和绿原 酸的量最高。高磷配方肥料中氮量也较低,所以该 处理菊花中总黄酮和绿原酸量也较高;而且,磷肥促 进植物花芽分化和早熟的作用使得高磷配方肥料处 理能促进菊花提早开花。

福田河地区在每年的8~9月份比较干旱少雨, 而本研究发现这一时期为福田河菊花花芽分化期和 菊花植株需水、需肥量最大的时期。在菊花种植地 的畦面上覆盖黑色地膜后,可为田间保水保肥,并能 抑制田间杂草,促进菊花植株花芽分化,从而显著提 高菊花的产量。本实验中覆盖地膜处理菊花中总黄 酮和绿原酸的量较露地栽培显著下降,这可能是由 两方面原因引起。一是覆盖地膜后减少土壤中肥料 的流失 ,特别是氮肥的挥发与淋溶损失 ,因而其菊花 植株吸收的氮肥较露地栽培要高。表 3 数据说明, 高氮会降低菊花中总黄酮和绿原酸的量。所以,覆 盖地膜处理菊花中总黄酮和绿原酸量较露地栽培处 理显著降低。另一方面,菊花施用的复混肥中含有 大量的氯化钾。覆盖地膜后会减少肥料中氯离子随 雨水的淋失,因而其菊花植株较露地栽培处理会吸 收和积聚更多的氯离子。而菊花又对氯化钾比较敏 感,大量使用氯化钾会降低菊花中总黄酮和绿原酸 等多酚类物质的量100,从而导致覆盖地膜处理菊花 品质的降低。研究表明,可采用适当降低肥料中氮 肥的比例而增加磷、钾肥比例和调整钾肥品种等措

施来弥补其对菊花品质的影响。

在福田河镇菊花的生产上,为提高菊花的产量 和品质、应多施有机肥、合理施用氮肥、增施钾肥和 磷肥,并适当补施微肥。同时在福田河菊花种植基 地,可采用覆盖黑地膜栽培以增进田间土壤保水保 肥能力,提早菊花花期,减少菊花末期花受霜冻的损 失、从而来提高菊花的产量和经济效益。但在采用 覆盖地膜栽培时,其应同较低的氮肥配比和硫酸钾 为钾肥肥源的高钾有机-无机复混肥进行配合使用, 以利增加菊花产量的同时也提高菊花的内在品质。 参考文献:

[1] 陈科力,李 鹏,叶从进,等. 福田河白菊与其它菊花栽培 品种 HPLC 指纹特征研究 [J]. 中草药, 2004, 35(9): 10501053

- [2]
- 中国药典 [S]. 一部. 2005. Stafford H A. Flavonoids Metabolism [M]. Boca Raton: Ĩ3Ĩ
- CRC Press, 1990. 欧阳光察, 薛应龙. 植物苯丙烷类代谢的组织, 1988, 24(3): 9-16. 植物苯丙烷类代谢的生理意义及其调控 [4]
- 程水源,顾曼如,束怀瑞.银杏叶黄酮研究进展[J].林业科学,2000,36(6):110-115. [5]
- Faust M. Physiology of anthyocyanin development in McIn-[6] tosh apple. Relationship between protein synthesis and anthyocyanin development [J]. J Am Soc Hortic Sci, 1965, 87:10-20.
- [7] Margna U, Margna E, Vainjarv T. Influence of nitrogen on the utilization of L-phenylalanine for building flavonoids in buckwheat seedling tissues [J]. J Plant Physiol, 1989, 134: 697-702.
- [8] Muzika R M. Terpenes and phenolics in response to nitrogen fertilization : A test of the carbon/ nutrient balance hypothesis
- [9]
- [J]. *Chemoecology*, 1993, 4(1): 3-7. 刘大会,杨特武,朱端卫,等. 不同钾肥用量对福田河白菊 产量和质量的影响 [J]. 中草药, 2007, 38(1): 120-124. 刘大会,刘 伟,朱端卫,等. 钾肥品种对菊花产量、活性成分 及抗氧化活性的影响 [J]. 中草药, 2007, 38(增刊): 218-222 [10]

# 不同产地麦冬<sup>1</sup> H NMR 模式识别研究

谭小燕,罗乔奇,马郑红,黄 静\*,唐 敏.钟雪梅 (四川大学华西药学院,四川 成都 610041)

·摘 要∶目的 建立一种基于氢核磁共振·模式识别的不同产地麦冬鉴别新方法。方法 以└H·NMR 技术测定样 品的全成分信息 ,并转化成数据矩阵 ,采用模式识别法中的主成分分析(PCA) 、偏最小二乘法-判别分析(PLS·DA) 以及聚类分析(HCA)进行识别分析。结果 氢核磁共振-模式识别法能有效地鉴别不同产地的麦冬样本。结论 氢核磁共振-模式识别法是一种有效的药材分类鉴别方法 ,可作为药材质量控制的手段之一。 关键词 :麦冬 ;' H-NMR ;模式识别(PR) ;主成分分析(PCA) ;偏最小二乘法-判别分析(PL&DA) ;聚类分析(HCA) 中图分类号:R282.7 文章编号:0253-2670(2009)05-0792-06 文献标识码:A

# Based on <sup>1</sup> H NMR PR to establish an identification method of Ophiopogonis japonicus from different habitats

TAN Xiao-yan, LUO Qiao-qi, MA Zheng-hong, HUANGJing, TANG Min, ZHONG Xue-mei (West China School of Pharmacy, Sichuan University, Chengdu 610041, China)

Abstract : Objective To establish a new identification method of *Ophiopogonis japonicus* from different habitats. Methods Using <sup>1</sup>H-NMR to get the all component information on *O* japonicus, and using pattern recognitions, such as principal component analysis (PCA), partial least squares-discriiminate analysis (PLS-DA), and hierarchical cluster analysis (HCA) to analyze the data from the <sup>1</sup>H-NMR spectra. **Results** The <sup>1</sup>H-NMR-pattern recognition (PR) method could identify the samples of *O. japonicus* from different habitats successively. Conclusion The <sup>1</sup> H-NMR-PR is an useful method for identification of O. *japonicus* from different habitats and could be used for the quality control of traditional Chinese medicinal materials.

**Key words:** Ophiopogonis japonicus (Thunb.) Ker-Gawl.; <sup>1</sup>H-NMR; pattern recognition (PR); principal component analysis (PCA); partial least squares-discriminate analysis (PLS-DA); hierarchical cluster analysis (HCA)