

• 药剂与工艺 •

基于智能感官技术与多元统计分析的苦杏仁炒制程度快速辨识研究

王 会^{1,3}, 林叶媛^{1,3}, 马志国^{1,2,3}, 吴孟华^{1,2,3}, 曹 晖^{1,2,3*}, 张 英^{1,2,3*}

1. 暨南大学 岭南传统中药研究中心, 广东 广州 510632

2. 国家中药现代化工程技术研究中心 岭南资源分中心, 广东 广州 510632

3. 广东省中医药信息化重点实验室, 广东 广州 510632

摘要: 目的 分析苦杏仁 *Armeniacae Semen Amarum* 炒制过程中色泽、气味的动态变化规律, 建立炒苦杏仁“火候”判别模型, 为其智能化生产和应用提供科学依据。方法 制备不同炒制程度的苦杏仁样品, 利用测色仪和电子鼻技术获取各苦杏仁样品色泽、气味数据信息, 结合层次聚类分析 (hierarchical clustering analysis, HCA)、偏最小二乘-判别分析 (partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA)、秩相关分析 (rank correlation analysis, RCA) 和线性判别分析 (linear discriminant analysis, LDA) 等方法构建判别模型。结果 随着炒制程度的加深, 苦杏仁的明度 (L^*) 逐渐降低, 红绿色度 (a^*) 和黄蓝色度 (b^*) 显著增加; 气味方面, 生品在 W1S 传感器响应值最强, 而炒制品在 W5S、W1W、W2W 传感器上的响应值随炒制程度加深而增大。基于色泽参数 L^* 、 a^* 、 b^* 及气味参数建立的判别模型, 对苦杏仁生品及不同程度炒制品的判别正确率分别达到 98% 和 96%。通过百分位数法进一步计算了不同炒制程度苦杏仁的色泽和气味双侧 90% 参考范围。结论 测色仪和电子鼻技术可快速、准确地辨识苦杏仁的炒制程度, 为苦杏仁的质量控制提供了科学依据, 同时为其他种子类中药的炒制程度快速辨识研究提供了新思路。

关键词: 苦杏仁; 炒制程度; 电子鼻; 测色仪; 多元统计分析; 快速辨识; 智能感官技术; 气味; 色泽; 层次聚类分析; 偏最小二乘-判别分析; 秩相关分析; 线性判别分析

中图分类号: R283.6 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2025)14-4966-13

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2025.14.004

Research on rapid identification of roasting degree of *Armeniacae Semen Amarum* based on intelligent sensory technology and multivariate statistical analysis

WANG Hui^{1,3}, LIN Yeyuan^{1,3}, MA Zhiguo^{1,2,3}, WU Menghua^{1,2,3}, CAO Hui^{1,2,3}, ZHANG Ying^{1,2,3}

1. Research Center for Traditional Chinese Medicine of Lingnan (Southern China), Jinan University, Guangzhou 510632, China

2. National Engineering Research Center for Modernization of Traditional Chinese Medicine Lingnan Resources Branch, Guangzhou 510632, China

3. Guangdong Key Laboratory of Traditional Chinese Medicine Information Technology, Guangzhou 510632, China

Abstract: Objective This study aims to investigate the dynamic changes in color and odor during the stir-frying process of Kuxingren (*Armeniacae Semen Amarum*, ASA), and to establish a “fire control” discriminant model for stir-fried ASA, providing a scientific basis for intelligent production and application. **Methods** ASA samples with different degrees of stir-frying were prepared, and their color (L^* , a^* , b^*) and odor data were obtained using a colorimeter and electronic nose technology. Discriminant models were constructed using hierarchical clustering analysis (HCA), partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA), rank correlation analysis (RCA) and linear discriminant analysis (LDA). **Results** The results indicated that as the degree of stir-frying increased, the lightness (L^*) of ASA decreased. While the redness (a^*) and yellowness (b^*) increased significantly. In terms of odor, the raw samples exhibited the

收稿日期: 2025-02-24

基金项目: 国家重点研发计划 (2023YFC3504200); 全国名老中医药专家传承工作室建设项目 (国中医药人教函 (2022) 75 号)

作者简介: 王 会 (2000—), 女, 硕士研究生, 研究方向为中药质量评价研究。E-mail: huiwang2333@163.com

*通信作者: 曹 晖, 教授, 研究方向为本草学、中药炮制、中药材及饮片质量控制与评价。E-mail: kovhuicao@aliyun.com

张 英, 教授, 研究方向为中药材及饮片质量控制与评价。Tel: 15918818336 E-mail: carolynzy@163.com

highest response value on the W1S sensor, while the stir-fried samples showed increased response values on the W5S, W1W, and W2W sensors with increasing stir-frying degree. The discrimination models based on color parameters (L^* , a^* , b^*) and odor parameters achieved discriminant accuracies of 98% and 96%, respectively. The bilateral 90% reference ranges for color and odor of ASA with different stir-frying degrees were further calculated using the percentile method. **Conclusion** This study demonstrates that colorimeter and electronic nose technology can rapidly and accurately identify the stir-frying degree of ASA, providing a scientific basis for quality control of ASA, and offering a new approach for the study of processing degree identification of other traditional Chinese medicinal materials.

Key words: *Armeniaca Semen Amarum*; degree of stir-frying; electronic nose technology; colorimeter technology; multivariate statistical analysis; rapid identification; intelligent sensory technology; smell; color; hierarchical cluster analysis; partial least squares-discriminant analysis; rank correlation analysis; linear discriminant analysis

苦杏仁 *Armeniaca Semen Amarum* (ASA) 来源于蔷薇科杏属植物山杏 *Prunus armeniaca* L. var. *ansu* Maxim.、西伯利亚杏 *P. sibirica* L.、东北杏 *P. mandshurica* (Maxim.) Koehne 或杏 *P. armeniaca* L. 的成熟种子, 性微温味苦, 具有降气止咳平喘、润肠通便等功效, 在中医临床中占有重要地位^[1-2]。苦杏仁含有多种化学成分, 包括糖苷、有机酸、氨基酸、类黄酮、萜烯、植物甾醇、苯丙素等^[3-4]。现代药理学研究表明, 苦杏仁具有抗癌、抗氧化、抗菌、抗炎、保护心血管、神经、呼吸和消化系统、治疗糖尿病作用、保护肝肾等多种药理活性^[5-11]。临床常用苦杏仁的炮制品规格包括苦杏仁、燀苦杏仁、炒苦杏仁等, 炮制程度的适中与否会直接影响其药效和安全性^[12]。有文献报道^[13], 炒苦杏仁的止咳平喘作用强于生苦杏仁, 且炒制程度适中苦杏仁药效学作用强度与苦杏仁苷含量呈正相关。因此, 准确辨识苦杏仁的炒制程度, 对于保证其质量稳定及临床应用的安全性和有效性至关重要。

传统的苦杏仁炮制程度辨识主要依赖于感官评价, 如色泽、质地、气味等, 但该方法存在一定的主观性和经验依赖性, 难以实现标准化和精准化。随着现代科学技术的发展, 智能感官技术如测色仪、电子鼻、电子舌等已广泛应用于中药材的真伪鉴别、产地鉴别以及炮制方面的研究^[14-19]。智能感官技术的运用能弥补传统感官评价方法客观性差、准确性低和可重复性差等方面的不足。洪伟峰等^[20]应用 HPLC 法及电子鼻技术, 揭示了苦杏仁电子鼻中多根传感器的响应值与过氧化值、酸值、油脂及苦杏仁苷含量等内在成分指标存在显著相关性, 由此建立了苦杏仁及其不同炮制品的“走油”预警模型, 可为苦杏仁及其炮制品的质量监测和评价提供有价值的信息。苦杏仁炒制程度的智能辨识研究尚未见报道, 本研究旨在利用智能感官技术和

多元统计分析方法, 建立一套快速、准确的苦杏仁炒制程度辨识体系, 通过测定苦杏仁及其不同炒制程度样品的色泽、气味信息, 结合层次聚类分析 (hierarchical clustering analysis, HCA)、偏最小二乘判别分析 (partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA)、秩相关分析 (rank correlation analysis, RCA) 和线性判别分析 (linear discriminant analysis, LDA) 等多元统计方法, 探索不同炒制程度苦杏仁的特征差异, 并建立相应的辨识模型。这一研究不仅为苦杏仁的质量控制提供科学依据, 也可为其他种子类中药的炮制研究提供参考。

1 仪器与材料

1.1 仪器

YS6060 3nh 型台式分光测色仪, 深圳市三恩时科技有限公司; UT300S 型非接触式红外测温仪, 优利德科技(中国)有限公司; PEN 3.5 型电子鼻, 德国 Airsense 公司; XSR105/A 型十万分之一天平, 瑞士梅特勒-托利多公司; FA2204B 型万分之一电子天平, 上海佑科仪器仪表有限公司; M150B 型磨粉机, 中山市雕牌电器有限公司。

1.2 材料

10 批生苦杏仁饮片样品, 分别编号 S1~S10, 购于广州清平药材市场, 样品信息见表 1, 经暨南大学岭南传统中药研究中心张英教授鉴定, 为蔷薇科杏属植物杏 *P. armeniaca* L. 的干燥成熟种子。样品保存于暨南大学岭南传统中药研究中心样品室。

2 方法与结果

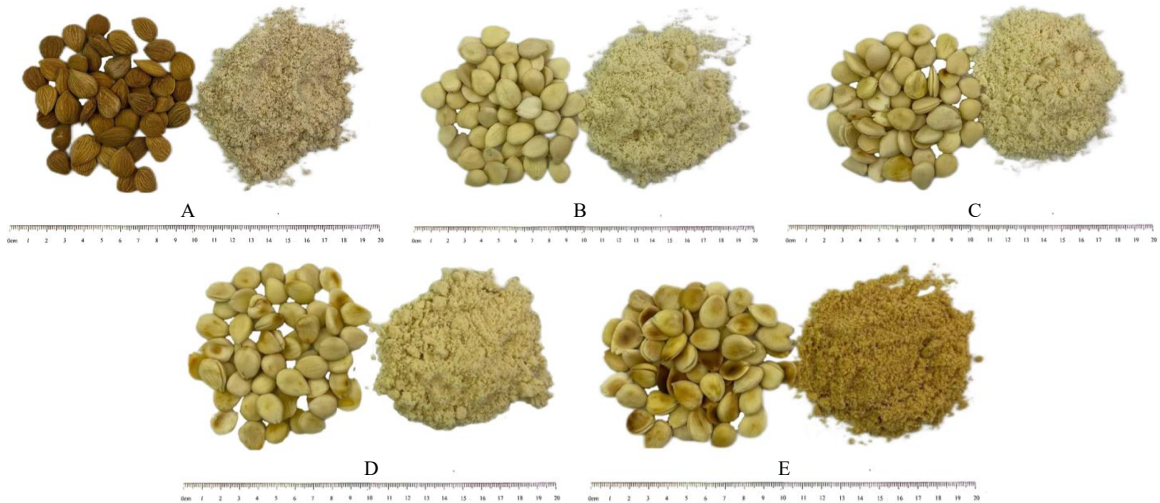
2.1 不同炒制程度苦杏仁样品的制备

2.1.1 燀苦杏仁样品 参考文献方法^[21]进行燀苦杏仁样品的制备。取生苦杏仁 (S1~S10) 各 300 g, 加入 10 倍量的沸水中, 燀制 5 min, 取出, 置于冷水中浸制 3 min, 搓去皮, 置于 50 °C 烘箱中, 干燥, 即可得燀苦杏仁样品 (C1~C10)。

表 1 样品信息

Table 1 Information of samples				
生苦杏仁	燂苦杏仁	不同炒制程度苦杏仁样品		
		炒制不及	炒制适中	炒制太过
S1	C1	BJ1	SZ1	TG1
S2	C2	BJ2	SZ2	TG2
S3	C3	BJ3	SZ3	TG3
S4	C4	BJ4	SZ4	TG4
S5	C5	BJ5	SZ5	TG5
S6	C6	BJ6	SZ6	TG6
S7	C7	BJ7	SZ7	TG7
S8	C8	BJ8	SZ8	TG8
S9	C9	BJ9	SZ9	TG9
S10	C10	BJ10	SZ10	TG10

2.1.2 不同炒制程度苦杏仁样品 根据《中国药典》2020 年版一部炒苦杏仁炒制项要求及实验室前期研究工艺,进行炒苦杏仁样品制备。精密称取煨苦杏仁(C1~C10)各 30 g,在 125~135 ℃下分别炒 1、3、5 min,得到炒制不及(样品无明显色泽变化,无焦斑,香气不明显)、炒制适中(样品表面黄色至棕黄色,微带焦斑,有香气)、炒制太过(样品表面棕黄色,焦斑多见,有焦香气)样品各 10 批(BJ1~BJ10、SZ1~SZ10、TG1~TG10)。同时取生苦杏仁 10 批(S1~S10),每批 30 g。取各批次饮片,粉碎,饮片粉末过 2 号筛后密封保存,备用。样品信息见表 1,不同炒制程度苦杏仁饮片及其粉末图见图 1。



A-生品及其粉末(S7); B-煨品及其粉末(C7); C-炒制不及品及其粉末(BJ7); D-炒制适中品及其粉末(SZ7); E-炒制太过品及其粉末(TG7)。
A-raw products and its powders (S7); B-blached products and its powders (C7); C-under-stir-fried products and its powders (BJ7); D-moderately stir-fried products and its powders (SZ7); E-over-stir-fried products and its powders (TG7).

图 1 不同炒制程度苦杏仁饮片及其粉末

Fig. 1 Different degrees of processed ASA slices and their powders

2.2 基于色泽的苦杏仁不同炒制程度快速辨识

2.2.1 色泽测定方法和条件 分别取苦杏仁及其不同炒制品粉末(过 2 号筛),置于石英玻璃皿中,填满压紧,在 D65 光源下检测,50 nm 口径测量,2°标准观察角下,利用测色仪采集样品的色差信息,经黑白校正后测定亮度值(L^*)、红绿色度 a^* 值(+ a 为偏红色,- a 为偏绿色)、黄蓝色度 b^* 值(+ b 为偏黄色,- b 为偏蓝色)。

2.2.2 色泽测定方法学考察

(1)精密度考察:取同一批样品粉末(C7),按照“2.2.1”项下检测方法对样品进行色差值测定,连续检测 6 次,考察仪器精密度,并计算色差参数 L^* 、 a^* 、 b^* 的 RSD 值,结果分别为 0.02%、1.88%、

0.53%,结果表明该仪器精密度良好。

(2)稳定性考察:取 C7 样品粉末,按照“2.2.1”项下检测方法对样品色差值数据进行采集,分别在 0、2、4、6、8 h 采集数据,每个时间点重复 3 次,并计算色差参数 L^* 、 a^* 、 b^* 的 RSD 值,结果分别为 0.05%、1.25%、0.97%,结果表明样品粉末在 8 h 内稳定性良好。

(3)重复性考察:取同一批样品粉末(C7)6 份,按照“2.2.1”项下检测方法对样品色差值数据进行采集,每份重复 3 次,并计算色差参数 L^* 、 a^* 、 b^* 的 RSD 值,结果分别为 0.16%、1.77%、1.90%,结果表明该方法重复性良好。

2.2.3 色泽提取及处理 采用分光测色仪,按照

“2.2.1”项下测定方法对所有样品粉末色泽进行测定,为了消除系统误差,每个样品粉末测定 3 次,记录 L^* 、 a^* 和 b^* 值,并根据公式 $E_{ab}^*=(L^{*2}+a^{*2}+b^{*2})$ 计算各样品的总色度值 (E_{ab}^*) [22]。

2.2.4 数据分析 采用 IBM SPSS Statistics 25 软件进行数据分析,主要采用探索性分析进行多元正态性检验和方法齐性检验、Kruskal-Wallis H 检验、秩相关分析、判别分析,参考范围应用百分位数法等。采用 SIMCA 14.1 软件进行 PLS-DA 和 HCA。采用 Origin 2022 软件进行绘图。

2.2.5 不同炒制程度苦杏仁饮片色泽变化分析 利用 IBM SPSS Statistics 25 软件进行相关性分析,结果见表 2。 L^* 代表明亮度, L^* 越大表示明亮度越高,表现为越亮,反之越暗; a^* 代表红色和绿色, $a^*>0$ 表示红色,值越大红色调越深; $a^*<0$ 表示绿色,值越小绿色调越深; b^* 代表黄色和蓝色, $b^*>0$ 表示黄色,值越大黄色调越深; $b^*<0$ 表示蓝色,值越小蓝色调越深。由表 2 可知,从生品到煨品的过程中, L^* 值与 b^* 值变大, a^* 变小,这与苦杏仁生品有种皮包被有一定关系。而在炒制不及、炒制适中和炒制太过 3 种不同火候的变化过程中, L^* 值逐渐减小,当炒制太过时,炒苦杏仁表面焦斑过多,变得暗沉; a^* 值逐渐增大, b^* 值也呈现出逐渐增大的趋势。

表 2 不同炒制程度苦杏仁粉末色泽测定 ($\bar{x} \pm s, n = 10$)

Table 2 Color measurement of bitter almond powder at different roasting degrees ($\bar{x} \pm s, n = 10$)

炒制程度	L^*	a^*	b^*	E_{ab}^*
生品	74.00±0.98 ^d	4.17±0.26 ^b	15.73±0.69 ^d	75.77±0.92 ^c
煨品	82.68±0.68 ^b	1.12±0.17 ^c	20.08±0.39 ^b	85.10±0.63 ^a
炒制不及	83.61±0.40 ^a	1.43±0.31 ^d	19.15±0.57 ^c	85.78±0.32 ^a
炒制适中	81.60±0.44 ^c	2.99±0.35 ^c	20.09±0.61 ^b	84.09±0.36 ^b
炒制太过	70.22±1.35 ^e	8.90±0.44 ^a	25.91±0.30 ^a	75.38±1.22 ^c

同列不同字母表示组间差异显著 ($P<0.05$)。

Different letters in the same column indicate significant differences between groups ($P<0.05$).

2.2.6 HCA 与 PLS-DA 将炒制过程所有样品粉末色泽测定结果导入 SIMCA 14.1 软件进行 HCA (图 2) 和 PLS-DA (图 3)。由 HCA 结果可知,苦杏仁炒制过程中生品、煨品和炒制品可各自聚为一类,表明可通过色泽来区分不同炒制程度炒制品,而在不同火候炒制品中,有 1 个炒制不及样品被聚到炒制适中品类下,说明这 2 个火候之间的炒制品色泽较为接近。以 HCA 结果建立 PLS-DA 模型,如图 3 所示,不同炒制品样品组间差异明显,所建立的

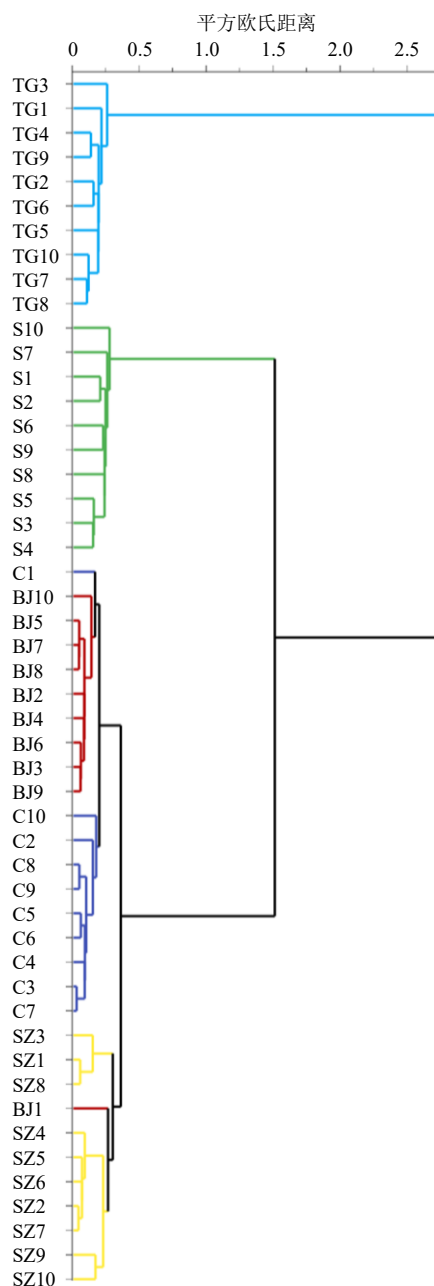


图 2 苦杏仁炒制过程中样品粉末色泽聚类分析

Fig. 2 Cluster analysis of powder color in the processing of ASA

PLS-DA 模型参数 R_X^2 为 1, R_Y^2 为 0.663, Q^2 为 0.654, 均大于 0.5, 200 次置换检验验证试验 (图 4) 显示, Q^2 拟合线的截距为 -0.198, 不超过 0.05, 样品所对应的各点均低于最右侧的原始点, 模型均有效、稳定, 且未出现过拟合现象, 色泽定性判别模型成功建立。苦杏仁炒制过程中, 不同炒制时期的色泽动态变化明显, 呈现出一定的规律性, 即苦杏仁生品与炒制过程中样品色泽变化有较大差异, 且炒制终点样品与生品和煨品色泽变化差异明显。

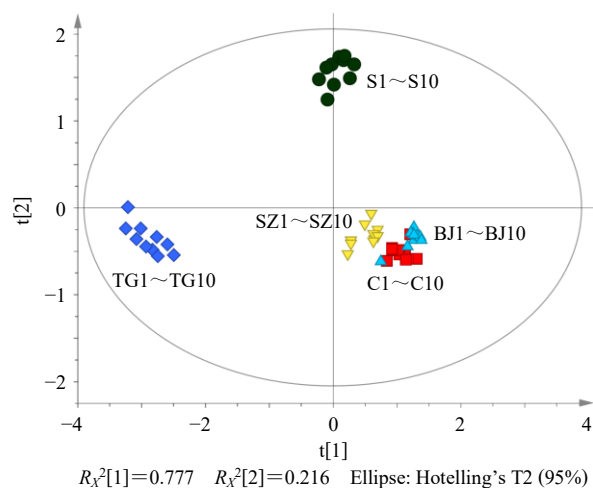


图 3 苦杏仁及其炒制品粉末色泽 PLS-DA 图

Fig. 3 PLS-DA plot of powder chromaticity for ASA and their prepared products

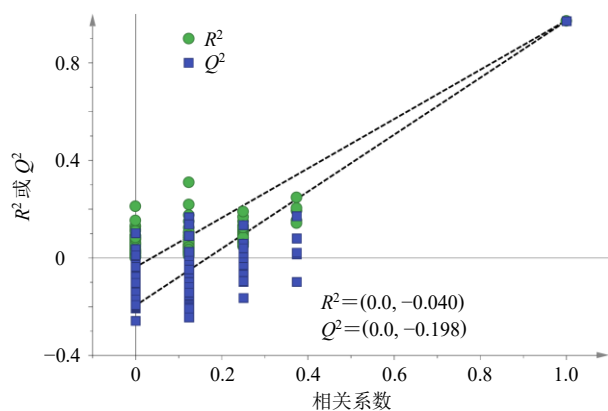


图 4 置换检验图

Fig. 4 Permutation test plot

2.2.7 多组比较的秩和检验分析 结果如表 3、4 所示,夏皮洛-威尔克检验适用于样本量小于 2000 的小样本数据的分析,本实验的样本量小于 2000,根据夏皮洛-威尔克检验,样本整体数据的 L^* 、 a^* 、 b^* 显著性 P 值均小于 0.05,因此认为数据不满足多元正态性分布和方差齐性,故数据处理选择秩和检验。将样品数据分为生品组、煨品组、炒制不及组、炒制适中组和炒制太过组, Kruskal-Wallis H 中 L^* 、

表 3 正态性检验

Table 3 Test of normality

变量	柯尔莫戈洛夫-斯米诺夫*			夏皮洛-威尔克		
	统计	自由度	显著性 P 值	统计	自由度	显著性 P 值
L^*	0.281	50	0.000	0.825	50	0.000
a^*	0.190	50	0.000	0.810	50	0.000
b^*	0.207	50	0.000	0.880	50	0.000

*里利氏显著性修正。

* Lilley's significance correction.

表 4 方差齐性检验

Table 4 Test of homogeneity of variance

变量	方法	莱文统计	自由度1	自由度2	显著性 P 值
L^*	基于平均数	5.572	4	45	0.001
	基于中位数	3.800	4	45	0.010
	基于中位数并具有调整后自由度	3.800	4	23.222	0.016
	基于剪除后平均值	5.396	4	45	0.001
a^*	基于平均数	3.078	4	45	0.025
	基于中位数	2.721	4	45	0.041
	基于中位数并具有调整后自由度	2.721	4	29.698	0.048
	基于剪除后平均值	3.048	4	45	0.026
b^*	基于平均数	2.023	4	45	0.107
	基于中位数	1.496	4	45	0.219
	基于中位数并具有调整后自由度	1.496	4	33.298	0.226
	基于剪除后平均值	1.899	4	45	0.127

a^* 、 b^* 的 X^2 分别为 45.448、45.794、42.346, $P=0.000$; 由中位数检验中 L^* 、 a^* 、 b^* 的 X^2 分别为 40.000、40.000、30.400, $P=0.000$, 故均拒绝 H_0 , 接受 H_1 , 可认为上述 5 组样品的色泽不同。

2.2.8 RCA 样品分为生品、煨品、炒制不及品、炒制适中品和炒制太过品 5 类, 分别以分类与 L^* 、分类与 a^* 、分类与 b^* 为变量, 进行秩相关检验, Kendall's tau- b 的相关系数分别为 -0.184、0.332、0.618, 双侧 P 值分别为 0.081、0.002、0.000; Spearman 相关系数分别为 -0.288、0.376、0.767, L^* 双侧 P 值分别为 0.042、0.007、0.000, 拒绝 H_0 , 接受 H_1 , 可认为 L^* 、 a^* 、 b^* 分别与苦杏仁炒制程度间有线性相关关系。

2.2.9 LDA 将采集的数据按样品分类, 1 类为生品、2 类为煨品、3 类为炒制不及品、4 类为炒制适中品和 5 类为炒制太过品, 共 50 个样本作为训练样本, 建立以 L^* 、 a^* 、 b^* 为输入的苦杏仁炒制火候的鉴别函数, 再用训练样本回代对判别函数进行验证。由表 5 组间均值相等性检验结果可见, 3 个自

表 5 组间均数相等性检验结果

Table 5 Results of homogeneity of means test between groups

变量	威尔克 λ	F 值	自由度1	自由度2	显著性 P 值
L^*	0.022	489.376	4	45	0.000
a^*	0.011	968.237	4	45	0.000
b^*	0.023	472.025	4	45	0.000

变量的 P 值均为 0.000, 可认为在苦杏仁 5 种不同程度炒制火候的生品、燂品、炒制不及品、炒制适中品、炒制太过品的判别函数中, L^* 、 a^* 、 b^* 都有统计学意义, 其中, a^* 的 λ 最小, 根据 λ 统计量越接近 0, 表示组间差异越显著判别, 可认为 a^* 判别更有意义。由表 6 判别函数的检验结果可见, 建立了 3 个典则判别函数, Wils's λ 值分别为 0.000、0.008 和 0.311, P 值均为 0.000, 这 3 个典则判别函数均有统计学意义。

表 6 Wilk's λ 检验结果

Table 6 Wilk's λ test results

函数检验	威尔克 λ	卡方	自由度	显著性 P 值
1直至3	0.000	417.290	12	0.000
2直至3	0.008	216.112	6	0.000
3	0.311	52.628	2	0.000

由表 7 可知, 3 个标准化典则函数式分别为炒制程度 1= $-0.054 L^*+0.941 a^*+0.055 b^*$ 、炒制程度 2= $0.614 L^*-0.054 a^*+0.979 b^*$ 、炒制程度 3= $1.124 L^*+0.978 a^*-0.507 b^*$ 。由表 7 可得 3 个非标准化典则判别函数, 分别为炒制程度 1= $-0.063 L^*+2.942 a^*+0.104 b^*-8.115$ 、炒制程度 2= $0.722 L^*-0.169 a^*+1.834 b^*-92.987$ 、炒制程度 3= $1.320 L^*+3.059 a^*-0.950 b^*-95.741$ 。

表 7 典则判别函数系数

Table 7 Canonical discriminant function coefficients

函数	分类	变量系数			常量
		L^*	a^*	b^*	
标准化典则判别函数	1	-0.054	0.941	0.055	0.000
	2	0.614	-0.054	0.979	0.000
	3	1.124	0.978	-0.507	0.000
非标准化典则判别函数	1	-0.063	2.942	0.104	-8.115
	2	0.722	-0.169	-92.987	-92.987
	3	1.320	3.059	-95.741	-95.741

用方程式计算判别得分, 再结合表 8 重心距离远近, 完成判别分类。由表 9 可得到 Fisher 线性判别函数分别为生品= $184.354 L^*+305.626 a^*+59.755 b^*-7\ 930.181$; 燂品= $192.938 L^*+270.351 a^*+87.804 b^*-9\ 011.579$; 炒制不及品= $196.108 L^*+281.994 a^*+82.982 b^*-9\ 195.342$; 炒制适中品= $197.431 L^*+299.920 a^*+82.320 b^*-9\ 331.241$; 炒制太过品= $194.084 L^*+347.272 a^*+89.300 b^*-9\ 519.206$ 。

从图 5 可以看出, 不同炒制程度的苦杏仁在色

表 8 组质心处的函数

Table 8 Functions at group centroids

分类	重心距离			分类	重心距离		
	函数1	函数2	函数3		函数1	函数2	函数3
1	1.134	-11.454	-0.222	4	-2.374	2.221	2.042
2	-7.926	3.316	-2.224	5	16.354	3.699	-0.409
3	-7.188	2.218	0.812				

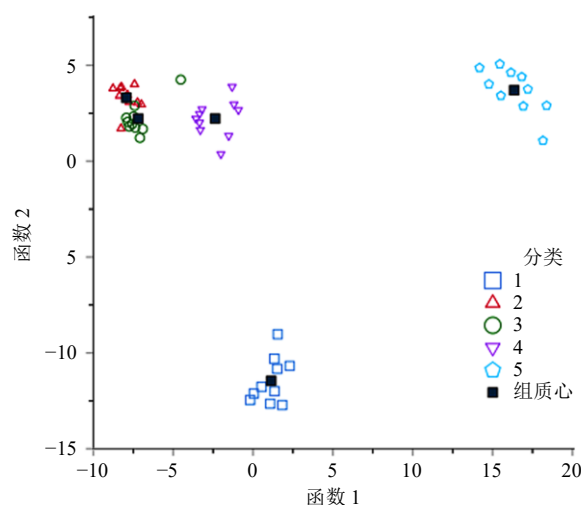
分类 1~5 分别代表生品、燂品、炒制不及品、炒制适中品、炒制太过品; 表 9、10 同。

Classification 1—5 respectively represent raw products, processed products, fried products that are inferior, moderately fried products, and over-fried products; Same as tables 9 and 10.

表 9 Fisher 判别函数系数

Table 9 Fisher discriminant function coefficients

分类	L^*	a^*	b^*	常量
1	184.354	305.626	59.755	-7 930.181
2	192.938	270.351	87.804	-9 011.579
3	196.108	281.994	82.982	-9 195.342
4	197.431	299.920	82.320	-9 331.241
5	194.084	347.272	89.300	-9 519.210



1-苦杏仁; 2-燂苦杏仁; 3-炒制不及品; 4-炒制适中品; 5-炒制太过品。

1-ASA; 2-blanching products; 3-under-stir-fried products; 4-moderately stir-fried products; 5-over-stir-fried products.

图 5 典则判别分析图

Fig. 5 Canonical discriminant analysis plot

泽上存在显著差异, 而且在函数 1 上符合一定的规律。用训练样本回代得出判别函数符合率见表 10, 10 个生品全判为 1 类, 10 个燂品全判为 2 类, 9 个炒制不及品全判为 3 类, 10 个炒制适中品全判为 4 类, 10 个炒制太过品全判为 5 类, 对照原分类组别, 判别符合率可达 98%, 表明这个判别模型效果良好。

表 10 判别函数的判别符合率

Table 10 Discriminant function's discrimination accuracy rate

分类	预测组成员计数						占比/%					
	1	2	3	4	5	总计	1	2	3	4	5	总计
原始	1	10	0	0	0	10	100	0	0	0	0	100
	2	0	10	0	0	10	0	100	0	0	0	100
	3	0	0	9	1	10	0	0	90	10	0	100
	4	0	0	0	10	10	0	0	0	100	0	100
	5	0	0	0	0	10	0	0	0	0	100	100
交叉验证*	1	10	0	0	0	10	100	0	0	0	0	100
	2	0	10	0	0	10	0	100	0	0	0	100
	3	0	0	9	1	10	0	0	90	10	0	100
	4	0	0	0	10	10	0	0	0	100	0	100
	5	0	0	0	0	10	0	0	0	0	100	100

*仅针对分析中的个案进行交叉验证;在交叉验证中,每个个案都由那些从该个案以外的所有个案派生的函数进行分类。

* cross-validation is done only for cases in the analysis. in cross-validation, each case is classified by the functions derived from all cases except the case in question.

2.2.10 色泽参考范围建立 由于数据不满足多元正态性,求参考值范围采用百分位数法,计算苦杏仁不同炒制火候的双侧 90%参考范围,结果如表 11 所示。不同炒制火候的苦杏仁在色泽上表现出明显的差异,炒制不及品、炒制适中品、炒制太过品的 L^* 、 a^* 和 b^* 均没有重合, a^* 值在不同炒制程度下变化较大,这些差异为鉴别不同炒制火候的苦杏仁提供了重要的色泽参考数值。

表 11 不同炒制程度苦杏仁的双侧 90%色泽参考值范围

Table 11 Bilateral 90% color reference range for ASA with different degrees of processing

不同炒制程度	L^*	a^*	b^*
生品	72.46~75.83	3.73~4.52	14.85~16.91
煨品	81.84~83.97	0.87~1.34	19.22~20.25
炒制不及品	83.36~84.06	1.22~1.53	18.67~19.14
炒制适中品	81.10~82.08	2.66~3.29	19.15~20.73
炒制太过品	69.32~71.33	8.40~9.17	25.56~26.19

2.3 基于气味值的苦杏仁不同炒制程度快速辨识

2.3.1 气味值测定方法和条件 精密称取苦杏仁及其不同火候炒制品粉末(过 2 号筛)各 3 g,置于 50 mL 小塑料杯中,用双层保鲜膜将杯口密封,针式采集气味数据信息,每个样品平行制作 3 份。样品室温放置时间为 2 h,样品测定间隔时间 1 s,传感器自清洗时间为 120 s,自动调零时间 10 s,样品准备时间 5 s,分析采样时间 120 s,内部空气体积

流量 300 mL/min,进气体积流量 300 mL/min,平行测定 3 次。试验选择 108~110 s 稳态时刻的数据进行分析。气味传感器响应曲线见图 6。

2.3.2 电子鼻测定精密度考察 取样品(BJ5),按照“2.3.1”项下方法进行气味检测,重复测定 6 次,记录数据,计算各传感器稳定响应值的 RSD 值。结果(表 12)均小于 2%,表明该仪器精密度良好。

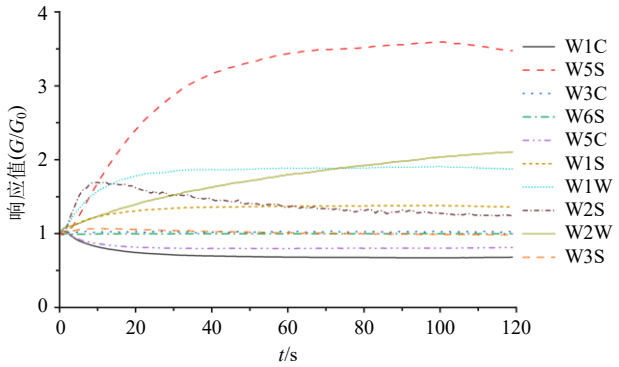


图 6 原始数据曲线图

Fig. 6 Original data curve

表 12 电子鼻精密度考察结果

Table 12 Results of precision assessment for electronic nose

试验次数	气味响应值									
	W1C	W5S	W3C	W6S	W5C	W1S	W1W	W2S	W2W	W3S
1	0.742	1.482	1.076	0.997	0.811	1.781	1.648	1.839	1.435	1.072
2	0.741	1.489	1.053	0.996	0.811	1.803	1.640	1.829	1.431	1.073
3	0.742	1.488	1.056	0.998	0.812	1.798	1.635	1.843	1.425	1.074
4	0.742	1.488	1.055	0.997	0.812	1.800	1.637	1.836	1.428	1.073
5	0.743	1.479	1.076	0.996	0.810	1.776	1.644	1.825	1.433	1.072
6	0.743	1.481	1.078	0.996	0.811	1.778	1.645	1.830	1.435	1.072
RSD/%	0.12	0.30	1.16	0.08	0.07	0.68	0.30	0.37	0.28	0.09

2.3.3 不同炒制程度苦杏仁气味传感器响应值测定 参照“2.3.1”项下方法,分别对苦杏仁及其不同火候炒制品粉末进行气味信息采集,该仪器由 10 个在高温下工作的金属氧化物半导体型化学传感器组成,可以对不同的挥发性物质进行分类和识别,即每个传感器优先响应一类有机化合物(敏感物质),即每个传感器为该类化合物的传感器^[23]: W1C-芳烃化合物、W5S-氮氧化合物、W3C-氨类、W6S-氢化物、W5C-短链烷烃芳香成分、W1S-烷类、W1W-硫化物、W2S-醇和醛酮类、W2W-芳烃化合物及硫的有机化合物、W3S-烷类和脂肪类。测得结果见表 13。

2.3.4 气味雷达图鉴别 取各传感器达到平衡时响应值构建样品气味传感器雷达图,结果见图 7。由图中可知,不同火候炒制品的雷达图差异较大,说明

表 13 苦杏仁及其不同火候炒制品气味传感器响应值

Table 13 Odor sensor response values of ASA and its roasted products at different degrees of roasting

样品	气味传感器响应值										样品	气味传感器响应值									
	W1C	W5S	W3C	W6S	W5C	W1S	W1W	W2S	W2W	W3S		W1C	W5S	W3C	W6S	W5C	W1S	W1W	W2S	W2W	W3S
S1	0.581	1.468	1.022	1.003	0.629	2.875	1.498	2.363	1.490	1.014	BJ6	0.743	1.945	1.017	1.005	0.850	1.162	1.504	1.246	1.381	1.083
S2	0.479	1.563	1.020	1.021	0.629	3.469	1.572	3.072	1.613	1.047	BJ7	0.749	1.925	1.016	1.006	0.854	1.158	1.497	1.246	1.375	1.084
S3	0.537	1.362	1.023	1.009	0.586	2.813	1.413	2.625	1.419	1.018	BJ8	0.761	1.847	1.015	1.006	0.863	1.137	1.469	1.228	1.348	1.082
S4	0.493	1.427	1.025	1.001	0.641	3.228	1.514	2.488	1.545	1.015	BJ9	0.751	1.905	1.016	1.006	0.856	1.152	1.490	1.240	1.368	1.083
S5	0.555	1.402	1.019	0.990	0.698	2.781	1.421	2.491	1.379	0.996	BJ10	0.753	1.892	1.015	1.006	0.857	1.149	1.486	1.238	1.364	1.083
S6	0.567	1.329	1.034	0.995	0.674	3.001	1.368	2.370	1.239	0.966	SZ1	0.700	2.681	1.025	0.999	0.812	1.361	1.875	1.246	1.702	0.984
S7	0.544	1.478	1.013	0.995	0.636	2.615	1.483	2.250	1.510	0.990	SZ2	0.718	2.426	1.019	1.004	0.842	1.221	1.617	1.241	1.611	1.050
S8	0.553	1.480	1.017	0.993	0.695	2.817	1.476	2.592	1.407	0.990	SZ3	0.710	2.600	1.020	1.003	0.837	1.244	1.659	1.242	1.692	1.039
S9	0.561	1.389	1.017	0.996	0.697	2.538	1.411	2.532	1.289	0.994	SZ4	0.709	2.836	1.021	1.002	0.830	1.275	1.717	1.243	1.802	1.025
S10	0.551	1.348	1.024	1.001	0.697	2.646	1.402	2.499	1.365	0.997	SZ5	0.719	2.621	1.020	1.003	0.836	1.247	1.664	1.242	1.702	1.038
C1	0.880	1.544	1.013	0.986	0.941	0.851	1.376	0.935	1.369	1.006	SZ6	0.716	2.685	1.020	1.002	0.834	1.255	1.680	1.242	1.732	1.034
C2	0.857	1.525	1.017	0.985	0.924	0.947	1.371	0.985	1.313	0.992	SZ7	0.715	2.714	1.021	1.002	0.834	1.259	1.687	1.242	1.745	1.032
C3	0.927	1.466	1.034	0.991	0.983	0.827	1.408	0.869	1.312	0.996	SZ8	0.717	2.673	1.020	1.002	0.835	1.254	1.677	1.242	1.726	1.035
C4	0.896	1.444	1.019	0.984	0.942	0.921	1.322	0.975	1.267	0.978	SZ9	0.716	2.691	1.020	1.002	0.834	1.256	1.681	1.242	1.734	1.034
C5	0.864	1.550	1.015	0.989	0.926	0.952	1.373	1.027	1.272	0.991	SZ10	0.716	2.693	1.020	1.002	0.834	1.256	1.682	1.242	1.735	1.033
C6	0.990	1.311	1.047	1.007	1.020	0.815	1.201	0.929	1.185	1.021	TG1	0.693	18.062	1.037	1.030	0.777	1.678	2.538	1.621	3.064	1.068
C7	0.858	1.511	1.013	0.997	0.943	0.942	1.348	1.010	1.299	1.021	TG2	0.699	17.902	1.027	1.010	0.787	1.798	2.627	1.816	3.165	1.007
C8	0.907	1.442	1.022	0.983	0.948	0.943	1.306	0.987	1.252	0.989	TG3	0.694	18.634	1.027	1.008	0.788	1.685	2.571	1.832	3.018	0.996
C9	0.966	1.351	1.019	0.996	0.993	0.843	1.265	0.951	1.180	1.010	TG4	0.686	19.004	1.027	1.029	0.789	1.732	2.970	1.830	3.030	1.062
C10	0.899	1.409	1.018	0.983	0.951	0.913	1.324	0.988	1.267	0.988	TG5	0.687	20.434	1.036	1.000	0.732	1.653	2.641	1.713	2.695	0.988
BJ1	0.713	2.336	1.017	1.012	0.831	1.254	1.651	1.307	1.538	1.088	TG6	0.669	18.977	1.015	1.000	0.768	1.628	2.689	1.651	2.638	0.980
BJ2	0.737	2.140	1.017	1.002	0.813	1.228	1.570	1.341	1.426	1.093	TG7	0.728	17.401	1.013	0.996	0.807	1.551	2.485	1.732	2.466	0.992
BJ3	0.728	2.003	1.020	1.002	0.840	1.177	1.523	1.248	1.400	1.081	TG8	0.713	17.899	1.016	0.997	0.791	1.657	2.474	1.652	2.487	0.963
BJ4	0.712	2.160	1.018	1.005	0.828	1.220	1.581	1.298	1.455	1.088	TG9	0.716	19.477	1.016	0.997	0.799	1.641	2.855	1.725	2.824	0.943
BJ5	0.760	1.671	1.012	1.008	0.884	1.091	1.407	1.192	1.289	1.080	TG10	0.715	18.338	1.012	0.994	0.799	1.635	2.606	1.728	2.678	0.930

W5S、W2S、W1S 为主传感器；W1C、W2W、W3S 为芳香族传感器。

W5S, W2S and W1S are main sensors; W1C, W2W and W3S are aromatic sensors.

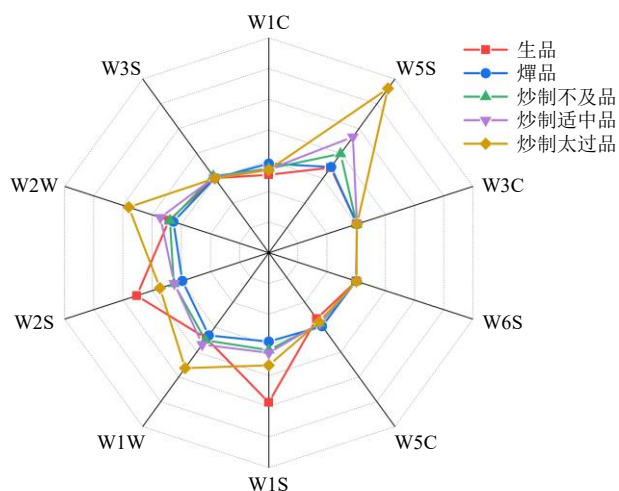


图 7 不同炒制程度苦杏仁气味雷达图

Fig. 7 Radar chart of the odor of ASA with different degrees of stir-frying

电子鼻各传感器的响应值随苦杏仁炒制程度的不同而变化。其中，生品在 W1S 传感器响应值最强。随着炒制程度的加深，气味在 W5S、W1W、W2W 传感器上的响应值逐渐增大。

2.3.5 传感器阵列优化 由于电子鼻各传感器对气体的敏感性是部分交叉且相对非特异性的，所以部分传感器间可能会出现共线等问题，造成信息冗余、重复，因此传感器响应信号的噪音较大。为了提高数据有效性，去除无关冗余信息的影响，需要对电子鼻的传感器进行阵列优化。本实验用 IBM SPSS Statistics 25 软件将电子鼻 10 个传感器响应值做 Spearman 相关性分析，当 2 个传感器的相关系数数值越大，证明其相关性越好，所获取的信息一致性也更接近，2 个可以互相替代，或剔除其中 1 个。相关性结果如表 14 和图 8 所示。其中 W5S 传感器

表 14 电子鼻传感器相关性分析结果
Table 14 Results of correlation analysis of electronic nose sensors

传感器	Spearman相关系数									
	W1C	W5S	W3C	W6S	W5C	W1S	W1W	W2S	W2W	W3S
W1C	1.000									
W5S	-0.147	1.000								
W3C	-0.312*	-0.007	1.000							
W6S	-0.232	0.326*	0.250	1.000						
W5C	0.959**	-0.172	-0.245	-0.184	1.000					
W1S	-0.953**	0.179	0.300*	0.183	-0.977**	1.000				
W1W	-0.439**	0.931**	0.146	0.387**	-0.461**	0.471**	1.000			
W2S	-0.910**	0.129	0.178	0.193	-0.961**	0.950**	0.415**	1.000		
W2W	-0.504**	0.881**	0.197	0.368**	-0.522**	0.538**	0.967**	0.455**	1.000	
W3S	0.122	0.076	-0.028	0.725**	0.195	-0.219	0.044	-0.149	-0.004	1.000

*在 0.05 级别（双尾）相关性显著；**在 0.01 级别（双尾）相关性显著。
* correlation is significant at the 0.05 level (2-tailed); ** correlation is significant at the 0.01 level (2-tailed).

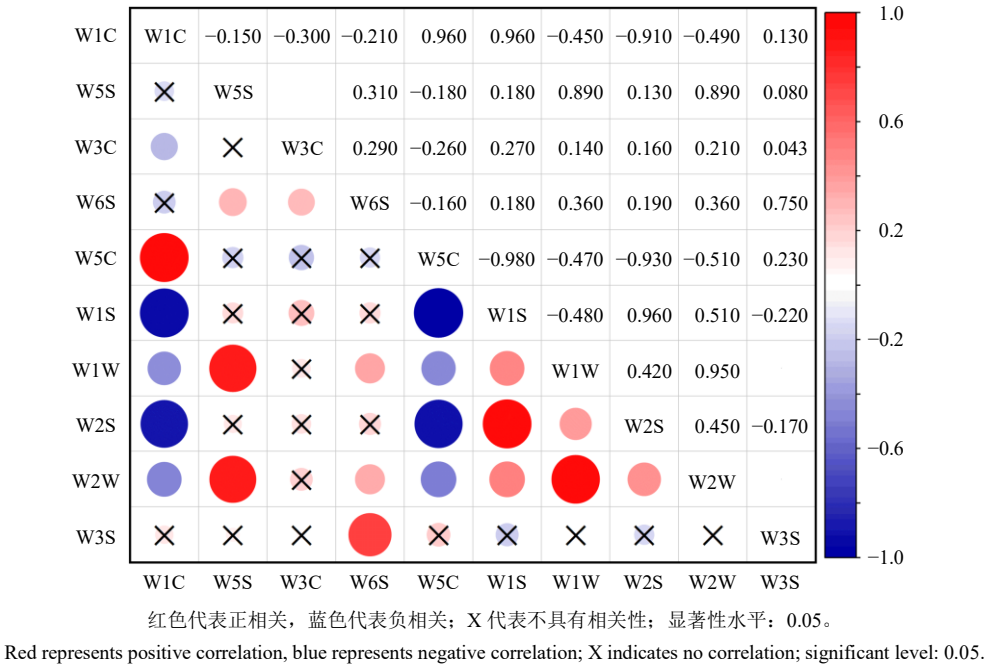


图 8 电子鼻 Spearman 相关性热图
Fig. 8 Spearman correlation heatmap of electronic nose

与 W1W、W2W 传感器相关系数都达到 0.9 以上，相似度较高，所获取的气味信息一致性较高，因此在 3 个传感器中选择 1 个代表苦杏仁及其炒制品的气味。

采用载荷分析判别各传感器的贡献率大小，有利于识别每个传感器对于模型区分的重要性，当某一传感器载荷值越大，则它对整个信息贡献率就越大。由图 9 可知，10 个传感器中传感器 W5S、W1W、W2W 的因子载荷非常接近，表明传感器 W5S 和 W1W、W2W 互为相似传感器，此结果与相关性分

析结果一致，可以剔除其中 2 个以优化传感器阵列，由于 W1W、W2W 在第 2 主成分上贡献率较小，因此剔除 W1W、W2W 传感器。在第 2 主成分上 W1S 的贡献率最小，故去除 W1S 传感器。结合相关性分析和载荷分析结果，选择传感器 W1C、W5S、W3C、W6S、W5C、W3S 和 W2S 组成新的传感器阵列以作后续分析。

2.3.6 PLS-DA 运用 SIMCA 14.1 软件对 50 批样品电子鼻各传感器响应值进行 PLS-DA，筛选 10 个传感器中差异贡献较大的成分。结果见图 10~12。

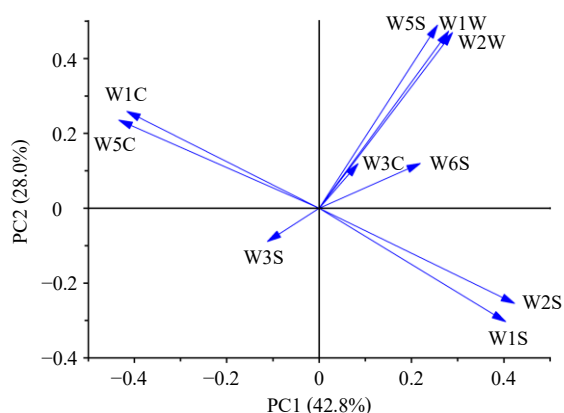


图 9 电子鼻气味传感器载荷分析图

Fig. 9 Loadings analysis chart of electronic nose odor sensors

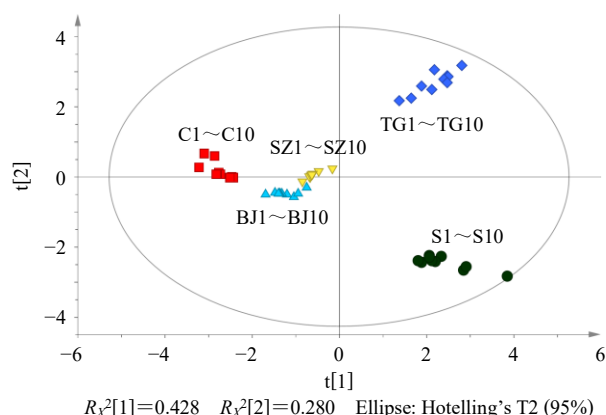


图 10 不同炒制程度苦杏仁电子鼻各传感器响应值 PLS-DA 得分

Fig. 10 PLS-DA scores of electronic nose sensor responses for ASA with different degrees of stir-frying

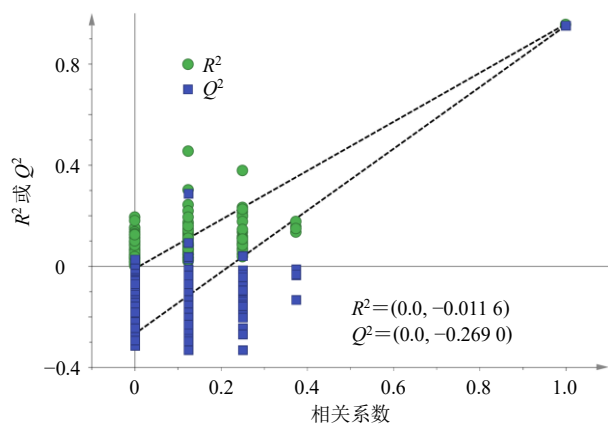


图 11 置换检验结果

Fig. 11 Results of permutation test

在 PLS-DA 模型中, 模型拟合参数 R^2_X 为 0.862, R^2_Y 为 0.649, 预测能力参数 Q^2 为 0.624, 大于 0.5, 表明所建立的 PLS-DA 数学模型稳定且预测能力较好。由 PLS-DA 图可将 50 批苦杏仁生品及其炒制

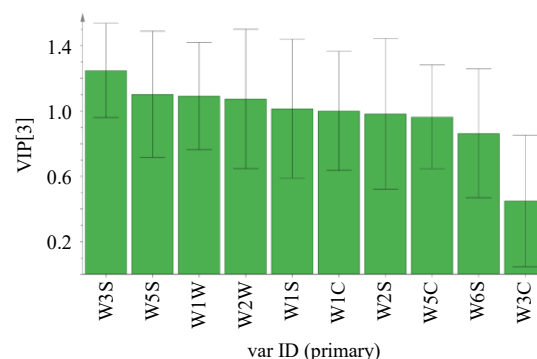


图 12 不同炒制程度苦杏仁电子鼻各传感器响应值 PLS-DA 分析 VIP 值图

Fig. 12 VIP value chart of PLS-DA analysis of electronic nose sensor responses for ASA with different degrees of stir-frying

品各自聚为一类, 炒制不及品、炒制适中品虽可各自聚为一类, 但没有明显的分界线区分开来。对 PLS-DA 模型进行 200 次置换检验, Q^2 拟合线的截距为 -0.269, 不超过 0.05, 所有的点均低于最右的原始点, 说明该模型没有出现拟合现象。VIP 值越大, 代表该传感器对于区分不同炒制品所具有的贡献越大, 如图 12 所示, 以 $VIP > 1$ 为原则, 可知 W3S、W5S、W1W、W2W、W1S、W1C 传感器响可能是影响不同炒制程度饮片分类的重要因素。

2.3.7 气味响应值的正态分布检验 将采集到的生品、煨品、炒制不及品、炒制适中品、炒制太过品气味数据分成 5 组, 采用 IBM SPSS Statistics 25 软件进行正态性检验, 检验结果见表 15, 数据不符合正态性分布。

表 15 正态性检验

Table 15 Tests of normality

传感器	柯尔莫戈洛夫-斯米诺夫*			夏皮洛-威尔克		
	统计	自由度	显著性	统计	自由度	显著性
W1C	0.168	50	0.001	0.930	50	0.006
W5S	0.438	50	0.000	0.563	50	0.000
W3C	0.197	50	0.000	0.848	50	0.000
W6S	0.109	50	0.191	0.932	50	0.007
W5C	0.126	50	0.046	0.960	50	0.089
W2S	0.243	50	0.000	0.854	50	0.000
W3S	0.126	50	0.046	0.947	50	0.027

*里利氏显著性修正。

* Lilley's significance correction.

2.3.8 判别模型预测 利用 SIMCA 14.1 软件对不同炒制程度苦杏仁进行判别预测, 判别正确率达 96%, 结果见表 16。从表中可知, 炒制不及品的 10

个样本中有 2 个被误判，究其原因有二，一方面可能是炒制过程中受热不均匀等因素，导致其与其他炒制不及品存在物化性质的差异，从而被误判；另一方面，也可能在气味信息采集过程中，电子鼻长时间运行导致“嗅觉疲劳”，从而采集的数据产生偏差，导致样本被误判。

2.3.9 气味标准建立 由于数据不符合正态性分布，所以采用百分位数法来确定苦杏仁生品、燂品、

炒制不及品、炒制适中品、炒制太过品气味标准范围，计算其双侧 90%参考范围，结果见表 17。不同炒制程度的苦杏仁各传感器的气味响应值存在明显差异，炒制不及品与炒制适中品在传感器 W1C、W5S 和 W3S 的气味响应值不重合，炒制适中品与炒制太过品在传感器 W5S、W5C 和 W2S 的气味响应值不重合，该参考范围可为实现炒苦杏仁的智能化生产提供气味参考依据。

表 16 不同炒制程度苦杏仁的判别预测
Table 16 Discriminant prediction of ASA with different degrees of stir-frying

类别	数量/批	判别率/%	生品/批	燂品/批	炒制不及品/批	炒制适中品/批	炒制太过品/批	未分类（预测值≤0）
生品	10	100	10	0	0	0	0	0
燂品	10	100	0	10	0	0	0	0
炒制不及品	10	80	0	0	8	2	0	0
炒制适中品	10	100	0	0	0	10	0	0
炒制太过品	10	100	0	0	0	0	10	0
未判别率/%	0	4	0	0	0	0	0	0
总数	50	96	10	10	8	12	10	0

表 17 不同炒制程度苦杏仁气味双侧 90%参考范围
Table 17 Bilateral 90% reference range of odor of ASA with different degrees of stir-frying

传感器	苦杏仁生品	苦杏仁燂品	炒制不及品	炒制适中品	炒制太过品
W1C	0.493~0.567	0.858~0.966	0.728~0.760	0.709~0.719	0.687~0.716
W5S	1.329~1.563	1.311~1.544	1.847~2.140	2.426~2.693	17.401~19.004
W3C	1.013~1.034	1.013~1.034	1.015~1.020	1.019~1.021	1.012~1.036
W6S	0.990~1.021	0.983~0.997	1.002~1.008	1.002~1.004	0.996~1.030
W5C	0.586~0.698	0.924~0.993	0.813~0.863	0.812~0.837	0.768~0.807
W3S	0.997~1.047	0.994~1.021	1.083~1.093	1.034~1.050	0.990~1.068
W2S	2.250~3.072	0.869~1.010	1.228~1.307	1.241~1.243	1.621~1.732

3 讨论

本研究应用智能感官技术结合多元统计分析方法，开展苦杏仁炒制程度的快速辨识，旨在为苦杏仁的炒制终点判断及质量控制提供科学依据，并探索智能感官技术在中药炮制研究中的应用潜力。研究结果表明，色泽和气味参数能够有效区分苦杏仁的不同炒制程度，且基于这些参数建立的判别模型具有较高的准确率。

色泽是评价苦杏仁炒制程度的重要指标之一。本研究中，随着炒制程度的加深，苦杏仁的 L^* 值逐渐降低，而 a^* 值和 b^* 值均呈上升趋势。这与苦杏仁在炒制过程中发生的物理变化密切相关。在炒制过程中苦杏仁表面的水分蒸发，质地变得疏松，会影响其对光线的反射和吸收，进而改变色泽参数。色泽变化不仅影响苦杏仁的外观，还可能与其药效和

安全性有关。研究表明^[24-25]，苦杏仁中的苦杏仁苷在炒制过程中会发生降解，生成具有药理活性的氢氰酸，随着炒制程度的加深，苦杏仁苷的含量逐渐降低，而氢氰酸的含量可能增加。

气味是反映苦杏仁炒制程度的另一个重要特征。电子鼻技术的应用使得气味的量化分析成为可能。研究发现，苦杏仁生品在 W1S 传感器上的响应值最强，而随着炒制程度的加深，气味在 W5S、W1W、W2W 传感器上的响应值逐渐增大，这可能与苦杏仁在炒制过程中挥发性成分的变化有关。在炒制过程中，苦杏仁中的脂肪油、蛋白质等成分发生热分解和氧化反应，产生了一系列挥发性化合物，如醛类、酮类、酯类等，这些化合物的种类和含量随着炒制程度的不同而发生变化，从而导致气味的改变^[26]。有研究和文献报道^[27-28]，苦杏仁中的

苦杏仁苷在炒制过程中会分解产生苯甲醛等挥发性成分, 这些成分的释放与炒制程度密切相关。

在本研究中, 采用了 PLS-DA、秩和分析、RCA 等多种分析方法对苦杏仁炒制程度的色泽和气味数据进行分析, 3 种方法各有优缺点及适用范围。其中, PLS-DA 在处理分类问题时表现优异, 能够有效区分不同类别, 并且可以通过置换检验来评估模型的稳定性和过拟合情况。但 PLS-DA 需要较多的样本量来建立可靠的模型, 且对数据的预处理要求较高。

秩和分析与 RCA 都属于非参数统计方法, 适用于不满足正态分布的数据分析。秩和分析主要用于比较多个独立样本的中位数是否存在显著差异, 而 RCA 用于评估变量之间的相关性。秩和分析优点在于对数据的分布形态要求较低, 可适用于小样本数据分析, 但其统计功效相对较低, 尤其是在样本量较大时, 不如参数检验方法敏感。

智能感官技术在中药炮制研究中的应用越来越广泛。本研究展示了测色仪和电子鼻技术在苦杏仁炒制程度辨识中的应用潜力。与传统的感官评价方法相比, 智能感官技术具有客观、精确、可重复性强等优点, 能够克服人为因素的干扰, 为中药材炮制程度的评价提供更加科学、准确的依据^[29-30]。

当然, 本研究也存在一定的局限性, 首先, 研究样本量相对较小, 可能影响统计分析的准确性和可靠性。其次, 本研究应用的测色仪和电子鼻技术主要关注于苦杏仁的色泽和气味变化, 并不能全面评估苦杏仁的化学成分变化。因此, 后续研究将增大样品批次, 结合多种检测技术, 如 HPLC 和 GC-MS 等, 全面评估苦杏仁在不同炒制程度下的化学成分变化, 为苦杏仁的质量控制提供更全面的评价依据。此外, 未来还将进一步研究苦杏仁在不同炒制程度下的药效和安全性, 通过动物实验和临床试验验证其药理作用和毒性, 为苦杏仁的临床应用提供更可靠的数据。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 赵玉升, 胡杰, 吴佳姝, 等. 苦杏仁炮制方法及药理作用研究进展 [J]. 中医药导报, 2021, 27(3): 175-180.
- [2] 柏寒, 贺梦媛, 徐洋, 等. 中药苦杏仁研究进展及质量标志物的预测分析 [J]. 中华中医药学刊, 2024, 42(9): 199-209.
- [3] Tang S, Wang M M, Peng Y H, et al. *Armeniacae Semen*

Amarum: A review on its botany, phytochemistry, pharmacology, clinical application, toxicology and pharmacokinetics [J]. *Front Pharmacol*, 2024, 15: 1290888.

- [4] 黄浩宇, 孙彬, 徐阳, 等. HPLC 法同时测定苦杏仁中亚麻酸、亚油酸和油酸含量 [J]. 人参研究, 2024, 36(2): 40-41.
- [5] 柴玉霞. 苦杏仁中苦杏仁苷的提取纯化、功能性质及异构化研究 [D]. 沈阳: 沈阳农业大学, 2023.
- [6] 岳星海, 赵克明. 苦杏仁的药理作用和临床应用研究概况 [J]. 中国民族民间医药, 2023, 32(2): 45-49.
- [7] 张德珂, 聂金娥, 钱芳芳. 中药苦杏仁药理作用研究进展 [J]. 山东化工, 2021, 50(22): 100-102.
- [8] 闫萌萌, 徐林丽, 刘岩岩, 等. 苦杏仁苷对糖尿病肾病大鼠肾小管上皮细胞损伤的影响 [J]. 中国临床药理学杂志, 2024, 40(7): 1019-1023.
- [9] 王祎, 曲书焱, 姜琪琦, 等. 苦杏仁苷对流感病毒 FM1 诱导的微血管内皮细胞通透性的影响 [J]. 中国临床药理学杂志, 2024, 40(6): 820-824.
- [10] 章阳, 刘晖杰, 曹立功, 等. 基于 ERK/NF- κ B 通路探讨苦杏仁苷对乳腺癌 MDA-MB-231 细胞增殖、侵袭、迁移的影响 [J]. 中国老年学杂志, 2024, 44(1): 81-85.
- [11] 中国药典 [S]. 一部. 2020: 210-211.
- [12] 闫蓓蓓, 邵冰梅, 吕志强, 等. 人工智能感官技术在中药炮制研究中的应用 [J]. 时珍国医国药, 2023, 34(11): 2665-2669.
- [13] 陈霞, 李计萍. 苦杏仁及其制剂的质量控制体系探讨 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2021, 27(19): 200-205.
- [14] 罗雨婷, 陈雪梅, 卢晓梅, 等. 基于智能感官技术及 BP 神经网络的制枳壳饮片发酵程度快速判别研究 [J]. 中草药, 2025, 56(4): 1159-1170.
- [15] 金鑫宁. 基于电子眼和电子舌信息融合的黄芪产地溯源检测研究 [D]. 淄博: 山东理工大学, 2024.
- [16] 刘娟娟, 龚华乾, 李思霓, 等. 基于智能感官与多元统计分析的紅芪药材快速辨识方法研究 [J]. 中国中医药信息杂志, 2024, 31(10): 129-134.
- [17] 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.
- [18] 修慧迪, 程磊, 王文全, 等. 基于智能感官分析技术探讨茯苓药性理论及其产地差异 [J]. 文山学院学报, 2023, 36(5): 7-12.
- [19] 吴鑫雨, 邱丽媛, 王又迪, 等. 基于智能感官与多源信息融合技术的香附炮制程度快速辨识方法研究 [J]. 中草药, 2023, 54(21): 7007-7016.
- [20] 洪伟峰, 赵丽莹, 拱健婷, 等. 基于电子鼻建立不同炮制规格苦杏仁“走油”预警模型 [J]. 中药材, 2021, 44(8): 1844-1847.

- [21] 种振, 高波, 罗川, 等. 正交试验法优选燂苦杏仁的炮制工艺 [J]. 广州化工, 2021, 49(13): 78-80.
- [22] Gómez-Polo C, Portillo Muñoz M, Lorenzo Luengo M C, *et al.* Comparison of the CIELab and CIEDE2000 color difference formulas [J]. *J Prosthet Dent*, 2016, 115(1): 65-70.
- [23] 李大龙, 郭潇雨, 李铁梅, 等. 利用电子鼻评价树莓果实香气 [J]. 东北农业大学学报, 2022, 53(7): 78-87.
- [24] 杨红. 炮制改变苦杏仁功效及归经的体内作用机制 [J]. 亚太传统医药, 2012, 8(11): 37-38.
- [25] 李贵海, 董其宁, 孙付军, 等. 不同炮制对苦杏仁毒性及止咳平喘作用的影响 [J]. 中国中药杂志, 2007, 32(12): 1247-1250.
- [26] 陈慧荣. 基于颜色气味数字化及信息融合的苦杏仁走油监测系统研究 [D]. 北京: 北京中医药大学, 2019.
- [27] 杨国辉, 魏丽娟, 王德功, 等. 中药苦杏仁的药理研究进展 [J]. 中兽医学杂志, 2017(4): 75-76.
- [28] 张国琴, 李娜, 郝冰玉, 等. 基于超快速气相电子鼻结合化学计量学比较不同方法炮制苦杏仁的挥发性成分差异 [J]. 中华中医药杂志, 2023, 38(10): 4670-4675.
- [29] 江如蓝, 雷结语, 陈文礼, 等. 基于人工智能感官技术的中药质量控制方法研究进展 [J]. 药学前沿, 2024, 27(11): 550-556.
- [30] 赵高亮, 贾红政, 贾永涛, 等. 智能感官技术在中药饮片品质评价中的应用探究 [J]. 中国医药导刊, 2024, 26(7): 726-730.

[责任编辑 郑礼胜]