



中成药

Chinese Traditional Patent Medicine

ISSN 1001-1528, CN 31-1368/R

《中成药》网络首发论文

题目： 基于电子鼻和电子舌技术分析紫菀药材的气味特征
作者： 王蓉，郭伟娜，刘倩倩，夏成凯
收稿日期： 2021-01-05
网络首发日期： 2021-06-17
引用格式： 王蓉，郭伟娜，刘倩倩，夏成凯. 基于电子鼻和电子舌技术分析紫菀药材的气味特征. 中成药.
<https://kns.cnki.net/kcms/detail/31.1368.R.20210617.1514.002.html>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

基于电子鼻和电子舌技术分析紫菀药材的气味特征

王 蓉^{1,2}, 郭伟娜^{1,2}, 刘倩倩³, 夏成凯^{1,2*}

(1. 亳州职业技术学院药学院, 安徽 亳州 236800; 2. 安徽省中医药科学院亳州中医药研究所, 安徽 亳州 236800; 3. 安徽中医药大学, 安徽 合肥 230031)

摘要: 目的 基于电子鼻和电子舌技术分析紫菀药材的气味特征。方法 通过电子鼻和电子舌检测出样品的响应值和味觉值, 利用主成分分析法、线性判别分析、Loading 等分析法对数据进行分析。结果 电子鼻技术能把不同药用部位区分开, 电子舌结果显示安国紫菀鲜味大于亳州, 苦味、甜味、涩味、丰富度小于亳州紫菀; 无硫紫菀鲜味大于有硫紫菀, 苦味、涩味、甜味小于有硫紫菀, 丰富度相似; 亳州紫菀根的甜味大于根茎, 亳州紫菀根的苦味小于根茎; 根占比例越大甜味、苦味、涩味越大, 根茎占比例越大丰富度越大, 根和根茎都含有鲜味。结论 基于电子鼻和电子舌技术能够快速、客观、简便地区分紫菀不同产地、不同加工方法及不同部位的气味特征, 可为紫菀药材规格鉴别提供的新方法。

关键词: 紫菀; 电子鼻; 电子舌; 主成分分析; 响应值; 味觉值

中图分类号: R284.1

文献标志码: B

中药紫菀为菊科紫菀 *Aster tataricus* L. f. 属植物紫菀的干燥根和根茎, 其性温、味辛苦^[1]。有止咳、祛痰、抗菌、消炎、抗肿瘤等功效, 主要治疗支气管哮喘、肺结核和咯血等。民间用作毒蛇咬伤和呼吸系统感染^[2-3]。野生紫菀质量较差, 一般不作为药用, 市场紫菀药材均为人工栽培。紫菀的主要栽培产区有安徽亳州, 河北安国。市场调查结果显示, 亳州药材市场货源多数是从周边乡镇购进, 紫菀药材商品规格与药用部位、干燥方法以及是否熏硫有关。

电子鼻是一种根据仿生学原理模拟人类嗅觉系统的人工智能电子仪器, 能够识别简单与复杂气味, 主要由气敏传感器阵列, 信号预处理单元和模式识别单元 3 部分组成, 对样品整体气味特征进行检测识别及分析, 对样品进行定量或定性分析的一种新型分析测试设备。电子舌将酸味、甜味、苦味、咸味、鲜味等基本味觉指标进行定量的分析, 所得到的结果反映了样品的整体信息, 又可称作“指纹数据”^[4-8]。

目前电子鼻和电子舌技术广泛应用于食品和农业的检测、环境监测、有特殊气味疾病的探测等方面^[9-10]。在中药方面主要适用于中药质量的监测、中药产地鉴别、中药采收期的判定、炮制工艺的评价、中成药及其中间品质量评价监控、中药掩味效果的评价以及中药安慰剂的效果的评价^[11]。在中药的种植、采收、加工、贮藏、鉴别、炮制、制剂等方面^[12], 电子鼻和电子舌技术发挥很大的价值。

由于电子鼻和电子舌技术具有稳定、快速、准确、测量方便、不耗材、不耗时等优点^[13], 弥补了中药其他鉴别方法“样品处理复杂、耗材耗时等”的不足之处, 因此在中药材的研究方向得到了广泛的应用价值。本实验在市场调查基础上, 采用电子鼻和电子舌技术对紫菀不同加工方法、不同产地、不同药用部位进行气味识别研究, 以期为亳州地产药材紫菀的规格鉴别提供快速、客观、简便的识别方法。

1 材料

1.1 仪器 电子鼻系统 PEN3 (德国 Airsense 公司); SA402B 味觉分析系统 (日本 Insent 公司)。

1.2 材料 紫菀原植物来源于亳州周边乡镇和安国。经安徽中医药大学方成武教授鉴定为正品。采挖的紫菀除去泥土, 洗净, 清除母根和杂质, 将根和根茎分开, 烘干, 称定质量, 打粉, 过 4 号筛, 用于不同产地、不同部位及其比例样品分析。紫菀药材样品来源于亳州药材市场, 将收集不同药材规格的紫菀, 打粉, 过 4 号筛。采挖的紫菀按照根与根茎不同比例混合所得 16~26 号样品。1~15 号样品信息见表 1。

收稿日期: 2021-01-05

基金项目: 安徽省教育厅自然科学基金 (KJ2019A1177, KJ2020A1015)

作者简介: 王 蓉 (1982-), 女, 硕士, 实验师, 研究方向为中药质量分析。Tel: 13856878003, E-mail: wrong4538@163.com

*通信作者: 夏成凯 (1982-), 男, 硕士, 教授, 研究方向为中药及中药制剂分析。Tel: 13225679777, E-mail: 65005441@qq.com

表 1 样品信息

序号/性质	采挖（购买）地点	干燥方法	有无硫	药用部位
1	亳州涡阳义门	烘干	无	根
2	亳州涡阳义门	烘干	无	根茎
3	亳州十九里马寨（套种桃树）	烘干	无	根
4	亳州十九里马寨（套种桃树）	烘干	无	根茎
5	亳州十九里马寨（无套种）	烘干	无	根
6	亳州十九里马寨（无套种）	烘干	无	根茎
7	亳州谯东铜关	烘干	无	根
8	亳州谯东铜关	烘干	无	根茎
9	亳州谯东怀楼	烘干	无	根
10	亳州谯东怀楼	烘干	无	根茎
11	安国	烘干	无	根
12	安国	烘干	无	根茎
13	康美中药材市场	炕干	无	根·根茎
14-1	康美中药材市场	晒干	无	根
14-2	康美中药材市场	晒干	无	根·根茎
15-1	康美中药材市场	晒干	有	根·根茎
15-2	康美中药材市场	晒干	有	根
16	100%根	-	无	根
17	90%根+10%根茎	-	无	根·根茎
18	80%根+20%根茎	-	无	根·根茎
19	70%根+30%根茎	-	无	根·根茎
20	60%根+40%根茎	-	无	根·根茎
21	50%根+50%根茎	-	无	根·根茎
22	40%根+60%根茎	-	无	根·根茎
23	30%根+70%根茎	-	无	根·根茎
24	20%根+80%根茎	-	无	根·根茎
25	10%根+90%根茎	-	无	根·根茎
26	100%根茎	-	无	根茎

2 实验方法

2.1 电子鼻技术

2.1.1 传感器信号分析 电子鼻的 10 个传感器所对应的代表化合物类型见表 2。以采样时间为横坐标，响应信号值（G/G₀）为纵坐标，得出 10 条不同颜色曲线，分别代表了 10 根传感器在 100 秒内的响应值变化。见图 1。

表 2 电子鼻传感器敏感成分

陈列序号	传感器名称	敏感成分
1	W1C	芳香成分, 苯类
2	W5S	氮氧化合物
3	W3C	氨水, 芳香成分
4	W6S	氢气
5	W5C	烷烃芳香成分
6	W1S	短链烷烃类
7	W1W	无机硫化物
8	W2S	醇类
9	W2W	芳香成分, 有机硫化物
10	W3S	长链烷烃类

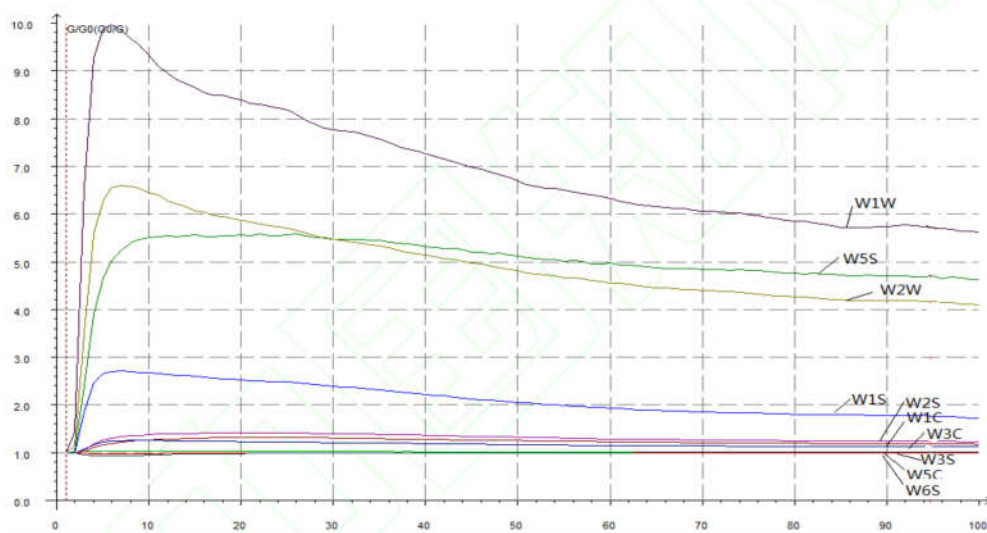


图 1 紫菀药材电子鼻传感器响应强度曲线

2.1.2 精密度试验 同一样品重复测定 5 次, 结果显示数据稳定, 各传感器响应值 RSD 值均小于 3%, 表明仪器精密度良好。

2.1.3 电子鼻待测样品制备 室温下, 取紫菀 1-26 号粉末 3 g, 放入一次性塑料杯, 用保鲜膜进行封闭。

2.1.4 电子鼻测定方法 参考文献[14], 直接顶空吸气法, 将进样针头插入含样品粉末的杯中, 电子鼻设备进行测定。以电子鼻系统测定的平稳的响应值为指标, 对进样量、进样体积流量进行考察。确定测定方法为采样时间为 100 s/组; 传感器冲洗时间为 120 s; 传感器平衡时间为 20 s; 待测样品准备时间为 5 s; 进样体积流量为 300 mL/min。

2.2 电子舌技术

2.2.1 电子舌待测样品制备 室温下, 取紫菀 1~26 号粉末 3 g 放入 250 mL 锥形瓶中, 用 80 mL 去离子水溶解, 定容到 100 mL, 超声 30 min, 4 000 r/min 离心 10 min, 取上清液。

2.2.2 电子舌测定方法 SA402B 味觉分析系统测量程序为传感器在 3 组基准液中分别清洗 90、120、120 s, 平衡位置归零 30 s, 达到平衡后进行样测试 30 s, 在另外 2 组基准液中再各清洗 3 s, 传感器在新的基准液中测试回味 30 s 循环测试 4 次。见图 2。

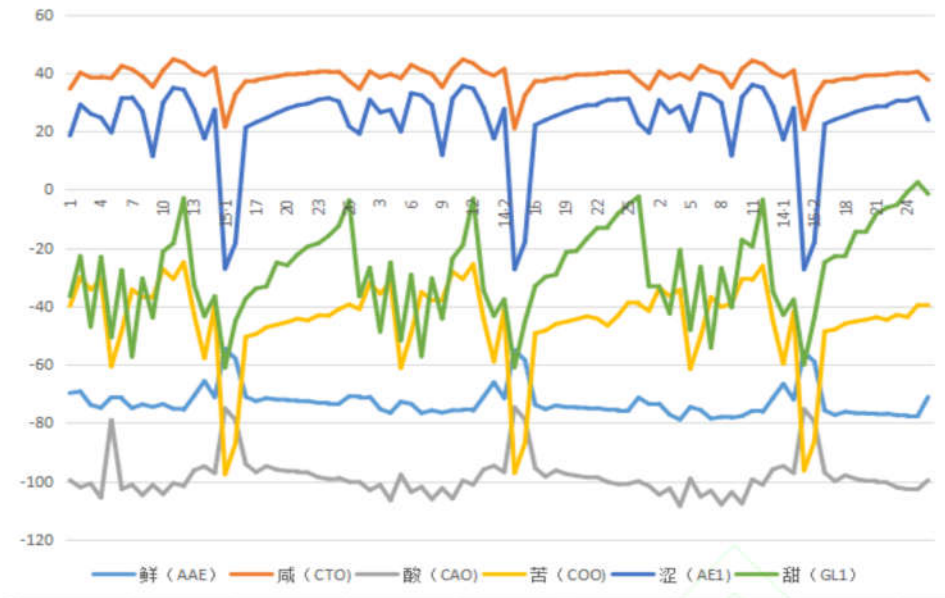


图2 电子舌紫菀原始数据后三次循环测试响应折线图

所有数据是以基准液即人工唾液为基准的绝对输出值，经测量得知酸味的无味点为-13、咸味的无味点为-6、其他无味点是0。当味觉值小于无味点表明没有相应的味道，反之则有味道。测试循环4次，去掉第1次取后3次数据的平均值结果。图1显示，该传感器反应稳定，有较好的重现性，表明数据有效。

2.3 数据分析 使用电子鼻自带的 WinMuster 软件中的 Loading 分析法、主成分分析法和线性判别法对实验数据进行分析。主成分分析法是从特定的方向寻找样品间不同点的一种保持原有信息的基础上降低信息维数的一种算法^[15]，每个样品在主成分轴上将形成一个集合，各集合之间的距离则表示其相互之间的相似度。各集合在主成分轴上的贡献率之和越接近1，表明样品原始信息包含度大。在此基础上结合判别率进行分析，判别率大于50%表明区分效果良好，判别率小于50%表明区分度小。线性判别法是缩小组内，扩大组间差距，组间距离越大表明区差异性越大，第一主成分和第二主成分之和的贡献率相近，样品之间气味值区分度小。Loading 分析法是对传感器进行分析，每一个传感器代表着某一类的化学成分，可以分析出传感器区分样品的能力。

3 结果与分析

3.1 不同产地紫菀气和味的分析

3.1.1 电子鼻技术分析 不同产地 W2W、W1W、W5S 对第一主成分和第二主成分贡献率较大，W1S 对第一主成分贡献率较大，对第二主成分贡献值较小。对不同产地紫菀气味上的差异主要是在 W2W、W1W、W5S、W1S 即氮氧化物、短链烷烃和硫化物，结果见图3。

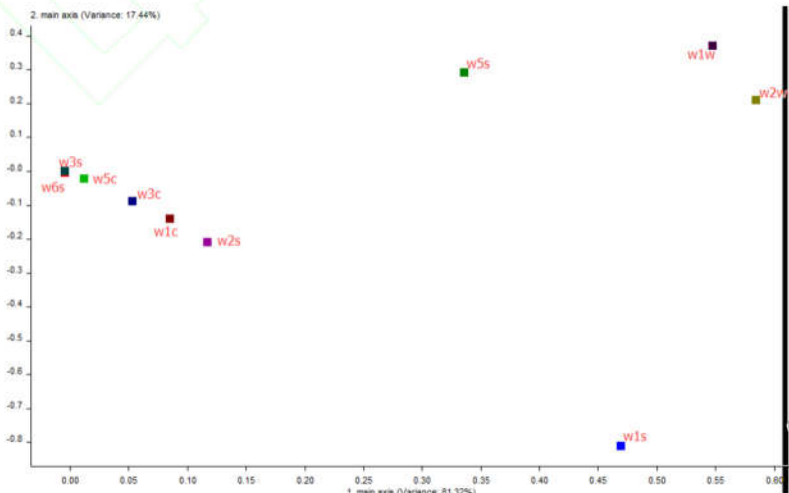


图3 不同产地紫菀 Loading 分析图

亳州和安国的主成分分析中，第一主成分和第二主成分之和为98.93%，基本涵盖了样品的原始信息。见图4。

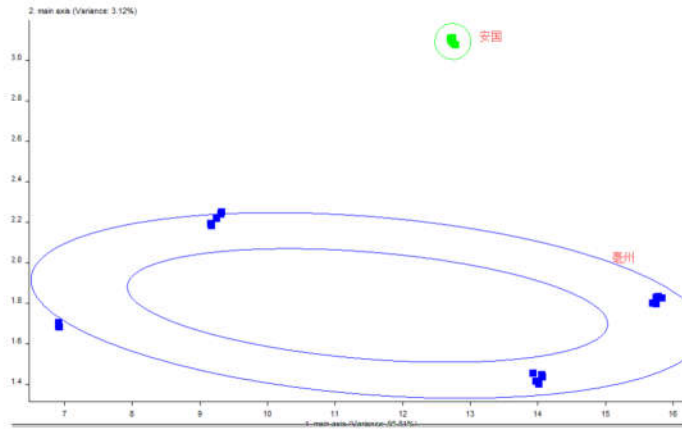


图4 不同产地紫菀主成分分析图

亳州和安国的组间距离大，安国紫菀 LDA 分析对第一主成分贡献率大，亳州紫菀 LDA 分析对第二主成分贡献率大。亳州和安国无重叠部分表明区分度显著，见图 5。利用判别因子分析能把不同产地的紫菀区分开。

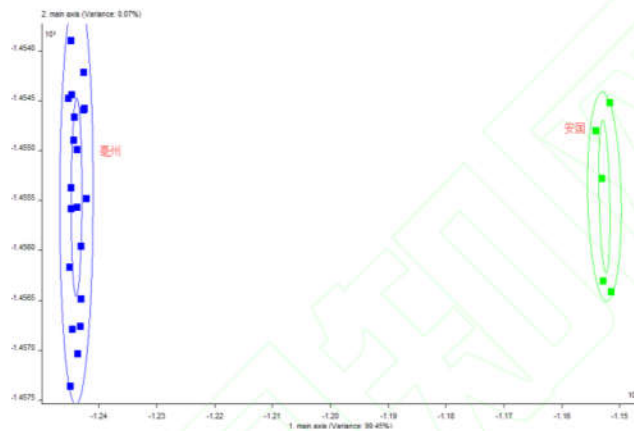


图5 不同产地紫菀的 LDA 分析图

3.1.2 电子舌技术分析 亳州(涡阳义门、十九里马寨、谯东铜关、怀楼)紫菀根的苦味和甜味比值均小于 1，表明紫菀根甜味更明显。亳州紫菀根茎的苦味和甜味比值均大于 1，表明紫菀根茎苦味更明显。安国紫菀根和根茎均大于 1，表明苦味较明显。见图 6。

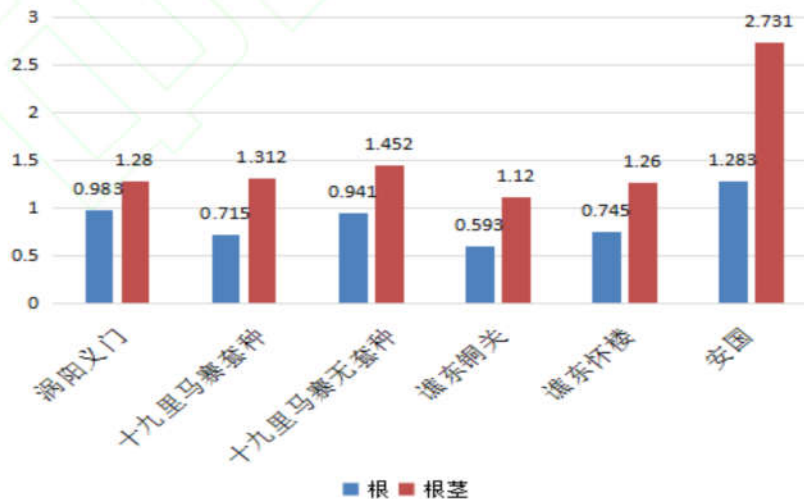


图6 不同产地紫菀根及根茎苦味与甜味的比值

3.2 不同加工方法紫菀气和味分析

3.2.1 电子鼻技术分析 对不同加工方法紫菀气味上的差异主要是在 W1S、W2W、W1W、W5S、即氮氧化合物、短链烷烃和硫化物，见图 7。电子鼻技术对紫菀中短链烷烃类化合物区分最大。氮氧化合物和硫化物相对于不同产地紫菀，第一主成分的贡献率有所下降，第二主成分贡献率提高。

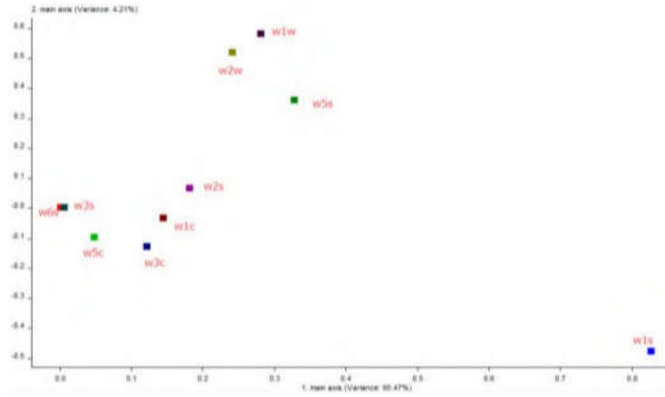


图7 不同加工方法紫菀 Loading 分析图

晒干、炕干、烘干紫菀的 PCA 主成分贡献率之和为 98.05%，基本包含样品原始信息。晒干和烘干有重叠部分表明气味上更相似，判别率为 51.7%，能区分开烘干与炕干的紫菀区分度大，判别率为 88.2%。晒干和炕干紫菀的判别率为 52.1%，表明能区分开。见图 8。

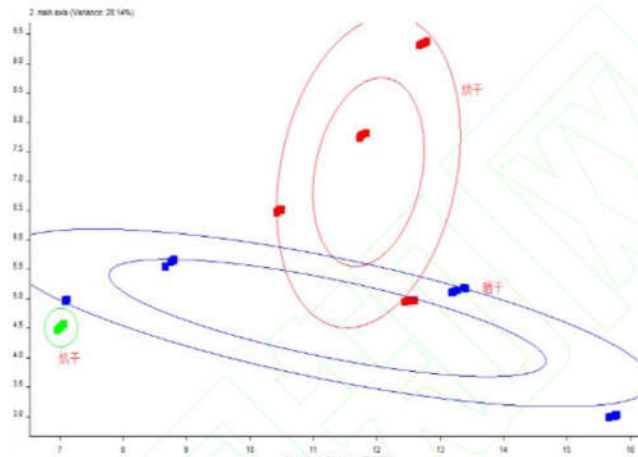


图8 不同干燥方法紫菀的 PCA 区分度分析图

有硫和无硫的紫菀 PCA 第一主成分和第二主成分之和为 99.686%，判别率为 15.3%。有硫的紫菀第一主成分贡献值大，无硫的紫菀对第二主成分贡献率大，有硫和无硫有重叠部分，表明区分度低，见图 9。

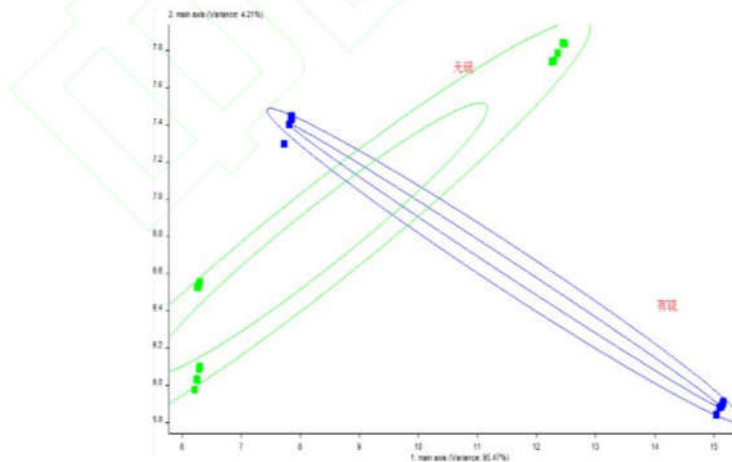


图9 有硫和无硫紫菀 PCA 区分度分析

有硫和无硫的紫菀利用 LDA 判别因子分析，主成分之和为 99.702%，表明区分明显。其中有硫紫菀对第一主成分贡献率较大，无硫紫菀对第二主成分贡献率大。见图 10。

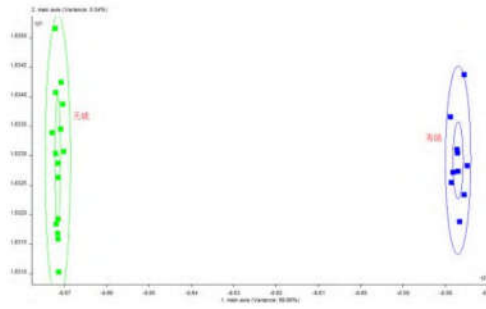


图 10 有硫和无硫紫菀 LDA 分析图

3.2.2 电子舌技术分析 15-1 和 15-2 为有硫紫菀，13、14-1、14-2 为无硫紫菀。有硫紫菀的苦、涩、甜的味觉值比无硫紫菀的大，鲜味的味觉值比无硫紫菀小。丰富度有硫和无硫味觉值相似。经过硫磺熏后，气味发生变化，见图 11。晒干、烘干、炕干只是干燥方法的不同，对紫菀表面气味的影响较小，味觉值变化小。

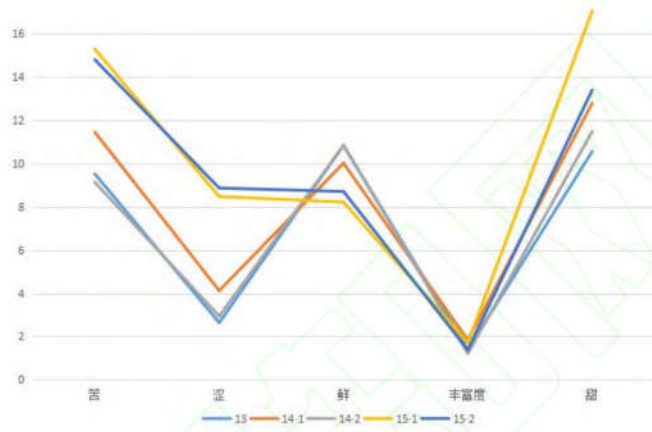


图 11 不同加工方法紫菀味觉值

3.3 不同药用部位、根和根茎及其不同比例紫菀气和味的分析

3.3.1 电子鼻技术分析 利用电子鼻技术 PCA 分析法对紫菀根和根茎区分不开。紫菀根和根茎的第一主成分和第二主成分之和为 93.99%，原始信息包含度小。判别率低，根和根茎的表面挥发性气味相似，区分不开。见图 12。

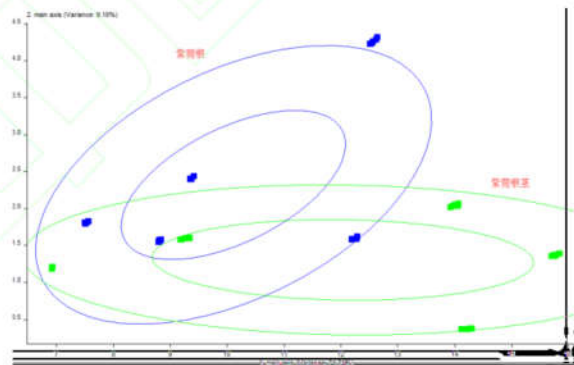


图 12 不同药用部位紫菀 PCA 区分度分析图

通过 LDA 判别因子分析，紫菀根和根茎区分度大。紫菀根茎对第一主成分贡献率大。紫菀根对第二主成分贡献率大，见图 13。不同比例的紫菀，16 号样品（100%根）和 26 号样品（100%根茎）区分度大，其他根与根茎比例的紫菀区分度不明显。

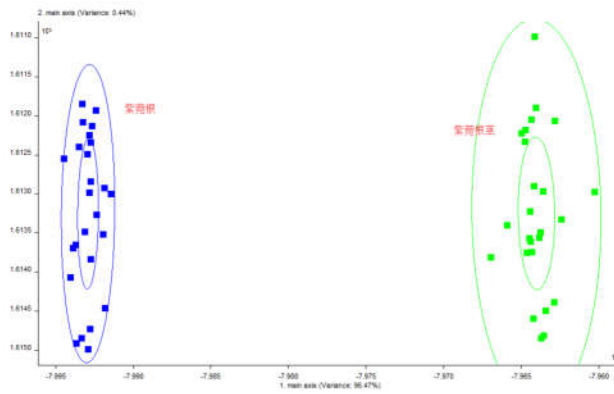


图 13 不同药用部位紫菀的 LDA 分析图

3.3.2 电子舌技术分析 紫菀根的苦、涩、甜味的味觉值比紫菀根茎大。根与根茎差异最大的是甜味。紫菀根的丰富度和鲜味的味觉值比紫菀根茎小，见图 7。不同比例紫菀，紫菀根占比越大则甜、苦、涩的味觉值越大。紫菀根占比越小，丰富度的味觉值越大。紫菀根和根茎和鲜味的味觉值无相关关系，见图 14。

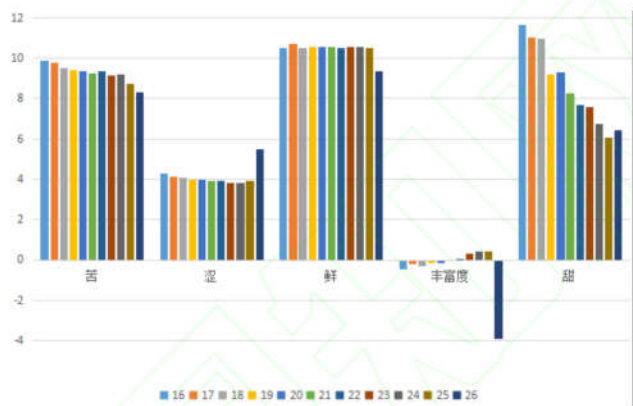


图 14 不同比例紫菀的味觉值

4 讨论

本研究发现不同产地的紫菀受各产地气候、温度、土壤、栽培方法等的影响，表面气味不同，电子鼻和电子舌技术对不同产地的紫菀区分显著。对不同加工方法的紫菀的气和味的检测，有硫紫菀和无硫紫菀差异性明显。烘干、晒干、炕干区分度不大。不同药用部位的鉴别主要是性状鉴别。电子鼻技术对不同药用部位根和根茎及其不同比例区分度不明显。通过电子舌技术显示紫菀根偏甜，紫菀根茎偏苦。当单独使用电子鼻技术或者电子舌系统技术不能够区分时，使用电子鼻与电子舌融合技术，能提高检测的区分率。嗅觉味觉技术的气味融合方法在实现中药材品质鉴别中效果更佳。

目前对中药材的鉴别方法主要是性状鉴别和显微鉴别。性状鉴别和显微鉴别适用于鉴别中药材的真伪，而对于不同产地、不同加工方法等的鉴别有一定的局限。TLC、HPLC、GC、GC-MS 等现代技术应用虽然比较广泛，但是样品前处理复杂、且以上鉴别方法通常是对样品的单一成分或一类成分进行定性定量的研究。电子鼻和电子舌技术样品前处理和分析过程简单、分析速度快、对样品气和味是整体信息的研究。所以电子鼻和电子舌技术实现了气味的客观性表达，是气和味成为可以量化的指标，以期为中药材的鉴别提供了新思路和新方法。

参考文献:

- [1]国家药典委员会. 中华人民共和国药典:2015 年版一部[S].北京: 中国医药科技出版社,2015:342.
- [2]牛 倩, 孙 鹏, 张慢慢, 等. 中药紫菀的化学成分研究进展[J].安徽农学通报,2016,22(13):30-31.
- [3]范 玲, 王 鑫, 朱晓静, 等. 紫菀化学成分及药理作用研究进展[J].吉林中医药,2019,39(2):269-273.
- [4]曹 煌, 张铁军, 张静雅, 等. 基于电子鼻和电子舌技术的辛味中药气-味的表征研究[J].中草药,2016,47(11):1962-1967.
- [5]陆晨浩, 王曦如, 仲梦涵, 等. 基于 GC-MS 和电子感官技术分析发芽对黑麦茶风味的影响[J].食品科学,2020,41(10):192-197.
- [6]邓 龙, 刘雄飞, 刘贤标, 等. GC-MS-O 结合电子鼻对橄榄油挥发性成分的分析与鉴别[J].中国食品学报, 2019(0):276-286.
- [7]拱健婷, 赵丽莹, 徐 东, 等. 基于电子鼻气味指纹图谱与 XGBoost 算法鉴别姜黄属中药[J].中国中药杂志, 2019(24):5375-5381.

- [8]李佳慧, 陈欣, 邹慧琴, 等. 电子鼻联合支持向量机建立苦杏仁不同炮制品及走油程度快速判别模型[J].中国中药杂志,2020(10):2389-2394.
- [9]张冬月, 吴浩善, 李思雨, 等. 电子鼻技术鉴别通关藤真伪及其道地性[J].中成药,2018,40(10):2228-2233.
- [10]周福, 连梨梨, 张劲松, 等. 基于电子鼻的社区获得性肺炎常见病位间的气味图谱特征识别[J].中华中医药杂志,2019(12):5954-5956.
- [11]黄得栋, 何微微, 晋玲, 等. 基于电子鼻技术区分不同产地的南五味子[J].中国实验方剂学杂志,2017,23(23):22-26.
- [12]付智慧, 李淑军, 刘鹏, 等. 电子舌在中药研究中的应用现状及前景展望[J].中成药,2016,38(11):2454-2457.
- [13]朱涛, 张云, 岳显可, 等. 在法定标准中谨慎扩大部分中药来源的可行性研究[J].中国现代应用药学,2019,36(1):90-93.
- [14]黄勤挽, 范润勇, 陈晓玉, 等. 基于味觉指纹技术的中药附子 10 种炮制品快速辨别研究[J].时珍国医国药,2017,28(2):369-373.
- [15]夏成凯, 宋芊芊, 方成武. 基于电子鼻技术区分不同产地的牡丹皮药材[J].中国现代应用药学,2019,36(21):2633-2637.

