专题报道

DOI:10.11973/lhjy-hx202307015

超高效液相色谱指纹图谱结合化学模式识别分析艾叶质量

程银水[1]，张　勇[2]，秦志旺[2]，董　阳[2]，李志浩[3]，郝新才[1*]

(1. 湖北医药学院 药学院 武当特色中药研究湖北省重点实验室，十堰 442000；
2. 十堰市惠文药业有限公司，十堰 442000；　3. 湖北医药学院附属东风医院 药学部，十堰 442008)

摘　要：为艾叶质量控制提供参考，进行了题示方法研究。以不同产地的10批艾叶样品为研究对象，采用超高效液相色谱法(UHPLC)建立指纹图谱，通过与混合标准溶液色谱图比对指认其中的共有峰，利用中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012 A版)进行相似度评价；对UHPLC测定异绿原酸B、异绿原酸C、棕矢车菊素含量进行方法学验证，并定量分析10批样品中这3种成分；采用聚类分析、主成分分析对10批艾叶样品进行化学模式识别。结果表明：由10批艾叶样品指纹图谱得到17个共有峰，指认出其中3个共有峰，分别为异绿原酸B(峰3)、异绿原酸C(峰5)、棕矢车菊素(峰8)；异绿原酸B、异绿原酸C、棕矢车菊素的质量在一定范围内与对应的峰面积呈线性关系，检出限(3S/N)为1.0×10^{-5}～8.0×10^{-5} ng，方法学验证结果显示仪器精密度良好，并且该方法稳定性、重复性较好，10批样品中异绿原酸B、异绿原酸C、棕矢车菊素的质量分数分别为0.211 9～2.537 1 mg·g^{-1}，0.165 8～3.365 0 mg·g^{-1}，0.169 1～0.931 8 mg·g^{-1}；相似度评价结果显示，除S3样品外，其余样品的相似度均大于0.900；聚类分析和主成分分析结果一致，均将10批艾叶样品分为两类，S3样品为一类，其余样品为一类。

关键词：艾叶；指纹图谱；超高效液相色谱法(UHPLC)；化学模式识别

中图分类号：O657.72；R284.1　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：1001-4020(2023)07-0837-07

艾叶是菊科蒿属艾 *Artemisia argyi* Level.et Vant的干燥叶[1-2]，含有黄酮类[3]、挥发油[4]、多糖类[5]等多种活性成分，味苦、辛，性温，具有温经、止血、散寒和止痛等功效，以及抗菌、抗病毒[6]、抗炎[7]、抗肿瘤[8]、保肝[9]和止血凝血[10]等作用。艾叶应用极为广泛，除制成艾绒、艾灸和印泥实用物品外，也是中药复方中极为重要的一味药材；另外，艾叶与食品密切相关，目前已用艾叶制成艾叶面包[11]、艾叶生鲜面[12]、艾草酸奶[13]以及艾叶发酵麦酱[14]等多种食品。因此，对艾叶的开发和利用逐渐受到广大科研工作者的关注，而对艾叶质量的控制成为药用安全与食品安全的重要前提。

艾叶突出的挥发性气味导致大部分研究聚焦于艾叶挥发油，如文献[15]通过气相色谱-质谱法建立了艾叶挥发油的指纹图谱，对比了超临界CO_2萃取、微波萃取和水蒸气蒸馏3种提取方法对艾叶挥发油的影响，发现这3种提取方法获得的挥发油化学成分有部分差异，且超临界CO_2萃取得到的艾叶挥发油更具天然性；文献[16]研究了顶空萃取工艺对艾叶挥发油品质的影响。除此之外，当前针对艾叶的研究还包括不同用药部位的工艺优化[17]、成分分析[18]、质量控制以及生物活性[19]等，但目前关于艾叶整体质量控制和成分含量测定的研究报道较少。艾叶分布广泛，因受不同地区环境和气候条件的影响导致其质量参差不齐，这极大地影响了广大消费者的身体健康和科研工作者的工作难度。文献[20-24]分别对北艾、海艾、蕲艾、祁艾四大名艾和河南南阳宛艾等名优品种艾叶进行了品质研究。鉴于此，本工作以不同产地的艾叶为研究对象，采用超高效液相色谱法(UHPLC)建立指纹图谱，对主要化学成分进行指认，并测定其含量，结合不同的化学模

收稿日期：2022-07-31

基金项目：湖北省科技厅重点研发项目(2020BCB040)；湖北省大学生创新创业项目(S202110929052X)

作者简介：程银水，硕士研究生，研究方向为天然药物化学

* 通信联系人。xincaih@hbmu.edu.cn

式识别方法对艾叶质量差异进行探讨，以期为艾叶的全面质量控制提供方便快捷的方法。

1　试验部分

1.1　仪器与试剂

Acquity UPLC H-Class 型高效液相色谱仪；KQ-3000DE 型数控超声波清洗仪；SQP 型电子分析天平。

单标准储备溶液：分别称取适量的棕矢车菊素、异绿原酸 B 和异绿原酸 C 对照品，用甲醇溶解并定容于 10 mL 容量瓶中，混合均匀，配制成棕矢车菊素质量浓度为 0.200 g·L^{-1}，异绿原酸 B、异绿原酸 C 质量浓度均为 0.500 g·L^{-1}的单标准储备溶液。

混合标准溶液：取适量的单标准储备溶液，用甲醇稀释并定容于 25 mL 容量瓶中，混合均匀，过滤，配制成棕矢车菊素质量浓度为 0.024 g·L^{-1}，异绿原酸 B 质量浓度为 0.080 g·L^{-1}，异绿原酸 C 质量浓度为 0.060 g·L^{-1}的混合标准溶液。

异绿原酸 B、异绿原酸 C 和棕矢车菊素对照品的纯度均不低于 98%，批号依次为 wkq20021003，wkq20401106，wkq20082109；乙腈为色谱纯；甲醇、甲酸均为分析纯；试验用水为超纯水。

10 批艾叶样品的采集时间为 2020 年 4 月至 6 月，经湖北医药学院中药学教研室邓雪华副教授鉴定均为正品，编号为 S1～S10，产地信息见表 1。

表 1　10 批艾叶样品产地信息

Tab. 1　The producing region information of 10 batches of *Artemisiae argyi* Folium

样品编号	产地	样品编号	产地
S1	湖北省房县	S6	安徽省亳州市
S2	湖北省郧西县	S7	湖南省双峰县
S3	湖北省十堰市	S8	河南省南阳市
S4	湖北省蕲春县	S9	河南省桐柏县
S5	湖北省随州市	S10	山东省莒县

1.2　色谱条件

ACQUITY UPLC BEH C_{18}色谱柱（100 mm×2.1 mm，1.7 μm）；柱温 30 ℃；流动相 A 为乙腈，B 为 0.2%（体积分数）甲酸溶液；流量 0.2 mL·min^{-1}；紫外检测器，检测波长 254 nm；梯度洗脱程序见表 2。

表 2　梯度洗脱程序

Tab. 2　Gradient elution program

时间/min	φ_A/%	φ_B/%
0	5	95
15	22	78
24	55	45
30	95	5
37	95	5

1.3　试验方法

将艾叶样品干燥、粉碎、过 6 号筛（孔径 150 μm）。称取 1 g 样品粉末，置于具塞锥形瓶中，加入 25 mL 甲醇，称重，超声提取（功率 240 kW）30 min，冷却后，再次称重，加入适量的甲醇补足减少的重量，混合均匀，抽滤去除残渣。滤液经 0.45 μm 微孔滤膜过滤，得到供试品溶液，吸取 2.0 μL，按照 1.2 节色谱条件进行测定。

2　结果与讨论

2.1　UHPLC 指纹图谱的建立及相似度评价

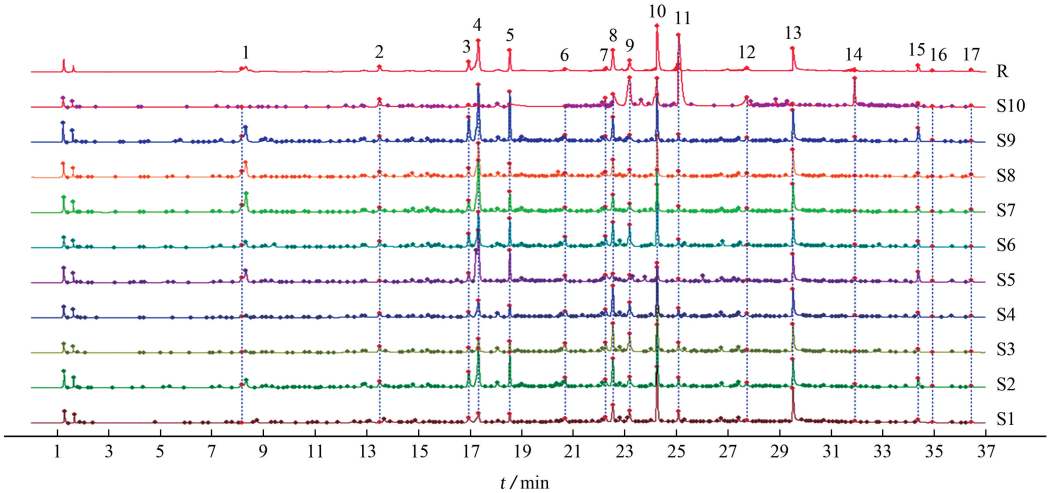
2.1.1　参照峰的选择

吸取 1.0 μL 异绿原酸 C 标准溶液和 2.0 μL 供试品溶液，按照 1.2 节色谱条件进行测定。结果显示，异绿原酸 C 色谱图和供试品溶液色谱图在相同时间有相同的色谱峰，且异绿原酸 C 色谱峰分离度较好，出峰稳定，因此选择异绿原酸 C 色谱峰为参照峰。

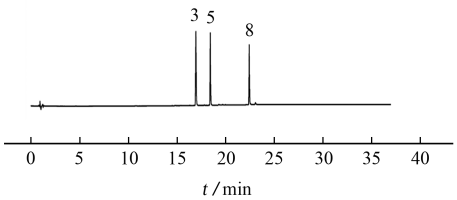
2.1.2　UHPLC 指纹图谱

按照试验方法对 10 批不同产地的艾叶样品进行分析，将结果导入中药色谱指纹图谱相似度评价系统（2012 A 版），设置 S1 样品色谱图作为参照图谱，通过中位数法及多点校正后，进行自动匹配并生成对照指纹图谱（R）。通过比较 10 批样品指纹图谱，得到 17 个共有峰，10 批样品叠加指纹图谱和对照指纹图谱如图 1（a）所示，混合标准溶液和 S6 供试品溶液色谱图如图 1（b）和（c）所示。

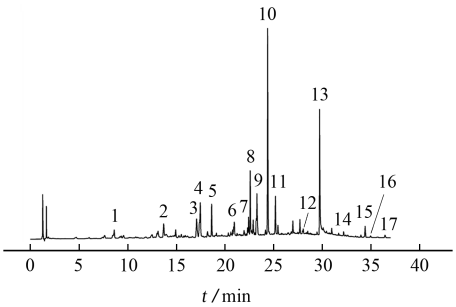
对比混合标准溶液色谱图和 S6 供试品溶液色谱图，根据保留时间指认出其中 3 个共有峰，分别为异绿原酸 B（峰 3）、异绿原酸 C（峰 5）、棕矢车菊素（峰 8），这 3 种化合物对人体的胰岛素抵抗、炎症、高血压和氧化疾病均有一定的治疗效果，是艾叶治疗疾病的重要成分。



(a)　10 批样品叠加指纹图谱和对照指纹图谱



(b)　混合标准溶液色谱图



(c)　S6 供试品溶液色谱图

3－异绿原酸 B；5－异绿原酸 C；8－棕矢车菊素

图 1　10 批样品叠加指纹图谱、对照指纹图谱、混合标准溶液色谱图和 S6 供试品溶液色谱图

Fig. 1　Superimposed fingerprints of 10 batches of samples, reference fingerprint and chromatograms of the mixed standard solution and the S6 test solution

2.1.3　相似度评价

为避免图谱直观分析的主观性对分析结果的影响，将结果导入中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012 A 版)，计算各批次样品与对照指纹图谱的相似度，结果见表 3。

表 3　相似度评价结果

Tab. 3　Results of similarity evaluation

样品编号	相似度	样品编号	相似度
S1	0.914	S6	0.909
S2	0.989	S7	0.940
S3	0.576	S8	0.993
S4	0.953	S9	0.930
S5	0.906	S10	0.977

由表 3 可知，除 S3 样品(湖北省十堰市)外，其余样品的相似度均大于 0.900，表明相似度良好。

2.2　方法学验证

2.2.1　标准曲线和检出限

吸取 0.1，0.2，0.4，0.8，1.2，1.6 μL 混合标准溶液，按照 1.2 节色谱条件进行测定，以异绿原酸 B、异绿原酸 C、棕矢车菊素质量为横坐标，对应的峰面积为纵坐标绘制标准曲线，线性参数见表 4。

以信噪比(S/N)为 3 对应的质量为检出限(3S/N)，结果见表 4。

表 4　线性参数和检出限

Tab. 4　Linearity parameters and detection limits

化合物	线性范围 m/ng	线性回归方程	相关系数	检出限 m/ng
异绿原酸 B	8.0～128.0	$y=6.310\times10^3x-1.102\times10^4$	0.999 8	8.0×10^{-5}
异绿原酸 C	6.0～96.0	$y=6.688\times10^3x-5.657\times10^3$	0.999 9	2.0×10^{-5}
棕矢车菊素	2.4～38.4	$y=1.453\times10^4x-1.287\times10^4$	0.999 9	1.0×10^{-5}

2.2.2　仪器精密度试验

按照试验方法对 S6 样品重复测定 6 次。结果显示：异绿原酸 B、异绿原酸 C 和棕矢车菊素峰面积的相对标准偏差（RSD）分别为 0.79%，1.9%，0.75%，说明该仪器精密度良好。

2.2.3　稳定性试验

按照试验方法制备 S6 供试品溶液，按照 1.2 节色谱条件分别于放置 0，2，4，8，12，24 h 进样检测。结果显示：异绿原酸 B、异绿原酸 C 和棕矢车菊素峰面积的 RSD 分别为 2.4%，0.22%，0.32%，说明供试品溶液在 24 h 内稳定性良好。

2.2.4　重复性试验

按照试验方法制备 6 份 S6 供试品溶液，按照 1.2 节色谱条件依次进样检测。结果显示：异绿原酸 B、异绿原酸 C 和棕矢车菊素峰面积的 RSD 分别为 2.4%，2.9%，2.4%，说明该方法重复性良好。

2.2.5　回收试验

根据预试验结果，从配制的单标准储备溶液中吸取与 1 g S6 样品中目标物质量相等的溶液，混匀后分别加至 6 份 1 g S6 样品中，按照试验方法进行测定，计算回收率。结果显示：异绿原酸 B、异绿原酸 C、棕矢车菊素的回收率分别为 102%，103%，98.4%。

2.3　样品分析

按照试验方法分析 10 批艾叶样品，结果见表 5。

表 5　样品分析结果

Tab. 5　Analytical results of the samples

样品编号	$w_{异绿原酸B}$/(mg·g^{-1})	$w_{异绿原酸C}$/(mg·g^{-1})	$w_{棕矢车菊素}$/(mg·g^{-1})
S1	0.725 1	0.919 3	0.816 9
S2	2.537 1	3.365 0	0.931 8
S3	0.211 9	0.165 8	0.894 8
S4	0.637 4	0.688 1	0.837 4
S5	0.997 6	1.915 1	0.169 1
S6	0.542 1	0.555 9	0.420 6
S7	1.209 2	1.406 8	0.407 3
S8	1.277 4	1.747 6	0.744 2
S9	2.320 4	3.204 8	0.692 8
S10	1.013 1	0.943 4	0.504 3

结果表明：除 S3、S4、S10 样品外，其余样品中异绿原酸 C 质量分数均最高；除 S1、S3、S4 样品外，其余样品中棕矢车菊素含量均最低。

2.4　化学模式识别

2.4.1　聚类分析

聚类分析相对于相似度评价具有准确、直观的优点，且能消除人的主观意识对类别划分及称样的影响。将 10 批样品的共有峰峰面积相对于称样量量化后，进一步进行 Z-Score 标准化处理，运用 SPSS 20.0 软件进行聚类分析，聚类方法选用组间联接法，区间度量以皮尔逊（Pearson）相关性为标准，结果如图 2 所示。

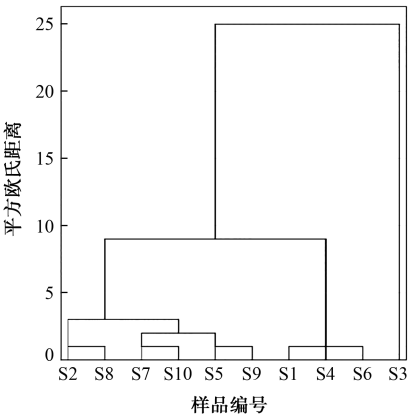


图 2　10 批艾叶样品的聚类分析树状图

Fig. 2　Dendrogram of 10 batches of *Artemisiae argyi* Folium samples by cluster analysis

由图 2 可知，当平方欧氏距离为 10 时，10 批来自不同产地的艾叶样品聚成了两类，其中来自湖北省十堰市的 S3 样品为一类，其他产地的艾叶样品为一类，该结果与相似度评价结果基本一致，表明艾叶指纹图谱结合聚类分析能较好地评价不同产地艾叶的质量。

2.4.2　主成分分析

在聚类分析的基础上，将样品的共有峰峰面积作为变量，通过 SIMCA-P 11.5 软件对 10 批样品进行主成分分析，结果见表 6。

表 6　特征值、方差贡献率和累计方差贡献率

Tab. 6　Eigenvalues, variance contribution rates and cumulative variance contribution rates

主成分	特征值	方差贡献率/%	累计方差贡献率/%
1	7.389	43.464	43.464
2	4.203	24.725	68.189
3	2.746	16.152	84.341
4	1.178	6.928	91.269

由表 6 可知：前 4 个主成分的特征值均大于

1.000，累计方差贡献率为91.269%，表明这4个主成分能够代表17个共有峰91.269%的信息，具有极高的代表性，可用于评价艾叶药材的质量。表7为17个共有峰在前4个主成分上的初始因子载荷矩阵。

表7　初始因子载荷矩阵

Tab. 7　Initial factor load matrix

峰号	载荷值			
	主成分1	主成分2	主成分3	主成分4
1	0.763	0.424	−0.238	0.390
2	−0.382	0.043	0.759	0.054
3	0.796	0.125	0.503	0.132
4	0.908	0.244	0.064	0.259
5	0.805	0.173	0.548	0.006
6	0.329	−0.811	0.105	0.120
7	−0.859	0.084	0.365	0.109
8	0.038	−0.727	0.409	0.361
9	−0.634	−0.567	0.266	0.310
10	−0.291	−0.786	0.332	0.251
11	−0.860	0.461	0.173	0.035
12	−0.527	0.643	0.218	0.370
13	0.788	−0.569	−0.102	−0.114
14	−0.747	0.613	0.226	0.011
15	0.656	0.380	0.615	−0.135
16	0.673	0.362	0.572	−0.208
17	0.375	0.430	−0.467	0.641

由表7可知：峰1、3、4、5、7、9、11、13、14、15和16在主成分1上具有较高的载荷绝对值，说明这11个化学成分对主成分1的影响较大；峰6、8、10和12在主成分2上具有较高的载荷绝对值；峰2和5在主成分3上具有较高的载荷绝对值；峰17在主成分4上具有较高的载荷绝对值。由以上结果推测，影响艾叶药材质量的并不是单一成分，而是多成分协同作用的结果。

图3为10批艾叶样品的主成分得分图。

由图3可知，10批艾叶样品被大致分为两类，S3样品为一类，其余样品为一类，这与相似度评价和聚类分析结果一致，表明10批艾叶因种质来源不同，所含有的化学成分种类不同，即使含有相同的化学成分，若其含量有一定的差异性，也会对艾叶品质存在一定的影响。

本工作采用UHPLC建立艾叶的指纹图谱，对指认的异绿原酸B、异绿原酸C、棕矢车菊素3种成

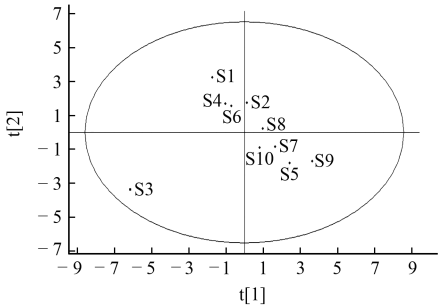


图3　10批艾叶样品的主成分得分图

Fig. 3　Principal component score plot of 10 batches of *Artemisiae argyi* Folium samples

分进行定量分析，并结合聚类分析、主成分分析对10批不同产地的艾叶样品进行化学模式识别。结果表明，不同产地的艾叶样品UHPLC指纹图谱具有相同的特征峰和一定的相似性，样品中异绿原酸B、异绿原酸C、棕矢车菊素含量存在一定的差异，并且聚类分析和主成分分析结果一致，该方法为艾叶药材的质量控制提供了参考。

参考文献：

[1]　刘涛，廖晓凤，吴燕婷，等.艾叶有效成分抗炎作用及其机制的研究进展[J].中药新药与临床药理，2021，32(3)：449-454.

[2]　兰晓燕，张元，朱龙波，等.艾叶化学成分、药理作用及质量研究进展[J].中国中药杂志，2020，45(17)：4017-4030.

[3]　胡倩，李静，刘大会，等.艾叶总黄酮提取物体内外抗氧化活性研究[J].食品工业科技，2021，42(6)：304-309.

[4]　曹谨玲，陈剑杰，李丽娟，等.艾叶挥发油对脂多糖诱导的巨噬细胞的抗炎作用[J].动物营养学报，2021，33(6)：3479-3486.

[5]　胡岗，尹美珍，喻昕，等.艾叶多糖体外抗氧化作用研究[J].时珍国医国药，2015，26(11)：2650-2652.

[6]　冯诗杨.艾叶挥发油纳米结构脂质载体的制备及其抗乙肝病毒活性的研究[D].郑州：郑州大学，2017.

[7]　GE Y B，WANG Z G，XIONG Y，et al. Anti-inflammatory and blood stasis activities of essential oil extracted from *Artemisia argyi* leaf in animals[J]. Journal of Natural Medicines，2016，70(3)：531-538.

[8]　喻昕，尹美珍，王静晖，等.艾叶多糖的直接及免疫协同抗肿瘤作用[J].湖北理工学院学报，2014，30(3)：53-56.

[9]　杨朝令，李仲娟，喻格书，等.艾叶多糖预防乙酰氨基酚诱导肝中毒[J].微循环学杂志，2012，22(4)：98-98.

[10]　王珊珊，徐昊，陈青，等.艾叶提取物对凝血因子Ⅻ的作用机制和药效物质研究[J].中国药理学通报，

2020，36(8)：1152-1157.
[11] 姚金侠.艾叶面包的研制及保健价值[J].山东商业职业技术学院学报，2015，15(5)：59-62.
[12] 黎冬明，蓝琳舒，周明，等.艾叶生鲜面加工工艺及质构特性的研究[J].粮食与油脂，2018，31(5)：21-24.
[13] 王婷婷，贾娟.响应面法优化艾草酸奶的发酵工艺[J].安徽农业科学，2019，47(17)：151-154.
[14] 许丹妮，廖承谱，苏秀芳，等.艾叶发酵麦酱的现代工艺及抗氧化活性[J].食品研究与开发，2020，41(15)：68-74.
[15] 曾虹燕.不同方法提取的艾叶挥发油指纹图谱分析[J].广西植物，2005，25(6)：587-590.
[16] 张小俊，赵志鸿，张壮丽，等.艾叶顶空萃取的挥发油指纹图谱[J].中成药，2014，36(6)：1244-1249.
[17] 张秀芳，忻晓东，程媛，等.优选提取-共沸精馏耦合技术提取艾叶挥发油工艺[J].中国现代应用药学，2020，37(14)：1708-1713.
[18] 路露，姚琪，束成杰，等.陕西商洛艾叶精油和醇提物成分分析及其抗菌抗氧化活性研究[J].天然产物研究与开发，2020，32(11)：1852-1859.
[19] 段丽萍，孙炜炜，苗丽坤，等.艾叶总三萜的提取工艺优化及其抑菌活性[J].现代食品科技，2020，36(5)：88-95.
[20] 洪宗国，余学龙，陈艺球.蕲艾、北艾、川艾挥发油化学成分比较研究[J].中草药，1996，27(3)：138-140.
[21] 周意，卢金清，龚敏，等.SD/HS-SPME-GC-MS 分析海艾挥发性成分研究[J].湖北农业科学，2019，58(7)：96-98.
[22] 林杰，卢金清，江汉美，等.栽培蕲艾挥发油 GC-MS 指纹图谱研究[J].中药材，2016，39(8)：1793-1796.
[23] 常雅晴，薛紫鲸，杨贵雅，等.基于 GC-MS 和化学计量学的不同采收期祁艾挥发油成分动态变化研究[J].中国中药杂志，2020，45(10)：2417-2424.
[24] 王宇卿，庄果，张须学，等.多元统计分析比较宛艾及 31 个产地艾叶 HPLC 指纹图谱[J].中成药，2018，40(3)：653-658.

Quality Analysis of *Artemisiae Argyi* Folium by Ultra-High Performance Liquid Chromatography Fingerprint with Chemical Pattern Recognition

CHENG Yinshui[1], ZHANG Yong[2], QIN Zhiwang[2], DONG Yang[2], LI Zhihao[3], HAO Xincai[1*]

(1. *Hubei Key Laboratory of Wudang Local Chinese Medicine Research, School of Pharmaceutical Sciences, Hubei University of Medicine, Shiyan* 442000, *China*;
2. *Shiyan Huiwen Pharmaceutical Co., Ltd., Shiyan* 442000, *China*;
3. *Department of Pharmacy, Dongfeng Hospital, Hubei University of Medicine, Shiyan* 442008, *China*)

Abstract: In order to provide reference for quality control of *Artemisiae argyi* Folium, the study was conducted by the title method mentioned. The fingerprints of 10 batches of *Artemisiae argyi* Folium samples from different producing regions were established by ultra-high performance liquid chromatography (UHPLC), and the common peaks were identified by comparison with the chromatogram of the mixed standard solution, and the Similarity Evaluation System for Chromatographic Fingerprint of Traditional Chinese Medicine (2012 A edition) was used for similarity evaluation. The method for the determination of isochlorogenic acid B, isochlorogenic acid C and jaceosidin by UHPLC were verified, and the 3 components in 10 batches of samples were quantitatively analyzed. The chemical pattern recognition of 10 batches of *Artemisiae argyi* Folium samples was carried out by cluster analysis and principal component analysis. It was shown that 17 common peaks were obtained from fingerprints of 10 batches of *Artemisiae argyi* Folium samples, among which 3 common peaks were identified, that were isochlorogenic acid B (peak 3), isochlorogenic acid C (peak 5) and jaceosidin (peak 8). Linear relationships between masses and peak areas of isochlorogenic acid B, isochlorogenic acid C and jaceosidin were kept in definite ranges, with detection limits (3S/N) in the range of $1.0\times10^{-5}-8.0\times10^{-5}$ ng. The results of methodology verification showed that the precision of instrument was good, and the method had good stability and repeatability. The mass fractions of isochlorogenic acid B, isochlorogenic acid C and jaceosidin in 10 batches of samples were in the ranges of

0.211 9－2.537 1 mg・g^{-1}，0.165 8－3.365 0 mg・g^{-1} and 0.169 1－0.931 8 mg・g^{-1}，respectively. The results of similarity evaluation showed that except S3 sample，the similarities of other samples were greater than 0.900. The results of cluster analysis and principal component analysis were consistent，and 10 batches of *Artemisiae argyi* Folium samples were divided into two categories. The S3 sample was classified into one category，and the other samples were one category.

Keywords：*Artemisiae argyi* Folium；fingerprint；ultra-high performance liquid chromatography (UHPLC)；chemical pattern recognition

《理化检验-化学分册》首届青年编委招募(2023-2024 年)

《理化检验-化学分册》创刊于 1963 年，月刊，由上海科学院主管，上海材料研究所主办，为中国机械工程学会理化检验分会会刊。国际标准连续出版物编号：ISSN 1001-4020，国内统一连续出版物号：CN 31-1337/TB。

期刊主要报道化学成分检测中的新理论、新技术、新方法、新设备，化学分析、光谱、色谱、质谱、波谱、多技术联用等分析化学方法在实际检测中的应用，以及实验室实用知识、操作经验和管理经验等；报道领域涉及食品、药品、环境、地矿、商检、石化、法医鉴定等。期刊设有试验与研究、工作简报、实验室管理、知识与经验、综述等栏目，此外每年策划出版 3 个国内外最新研究动向的热点“专题”，广受读者和作者的关注。

本刊为国内理化检验行业的资深权威刊物，北大中文核心期刊，长期被中国科学引文数据库(CSCD)、美国化学文摘(CA)数据库等数据库收录。2020 年入选《我国高质量科技期刊分级目录-有色金属领域高质量科技期刊分级目录》T3 级别(国内外重要，且被学术界所认可的期刊)；2021 年入选《科技期刊世界影响力指数(WJCI)报告》。曾多次获评国家机械行业优秀期刊、华东地区优秀期刊、上海市优秀期刊和“百种中国杰出学术期刊”等称号。

为进一步推动《理化检验-化学分册》的高质量发展，促进先进前处理以及检测技术在十四五规划“持续改善环境质量”“加快发展方式绿色转型”中的应用，提升《理化检验-化学分册》在国内外学术界的影响力，同时为青年学者提供支持和服务，本刊编辑部拟组建一支青年编委队伍，诚邀相关领域的优秀青年专家加入。

一、招募人数

本次招募青年编委 20～30 名。

二、招募条件

1）学风正派，治学严谨，恪守学术道德；

2）年龄在 45 周岁以下(1978 年 1 月 1 日后出生)，具有博士学位或副高及以上职称；

3）有较高的学术影响力，以第一或通信作者在相关领域国内外权威期刊上至少发表 5 篇高质量论文；

4）主持过省级及以上的科研项目或具有专业学会工作经验者优先；

5）有责任心和工作热情，愿意承担期刊工作，关注期刊发展，有较强的组稿、撰稿、约稿、审稿能力；

6）审稿认真负责，具有分析化学学科相关权威期刊审稿经验者优先。

三、青年编委权利

1）入选后颁发青年编委聘用证书，每届聘期为 2 年(每年根据工作情况进行调整)；

2）可在本刊开设专题或专栏，作为专题或专栏主编组稿/约稿；

3）可在本刊官方媒体平台上发布青年编委信息，宣传其研究成果，提升个人学术影响力；

4）可享受更优质的学术出版服务，本人撰写或推荐的优秀稿件经同行评审后可优先发表；

5）贡献突出的青年编委可优先聘为本刊下一届编委会编委。

四、青年编委职责

1）在国内外科研学术交流活动中，积极宣传和推介本刊；

2）积极参与期刊专题策划，主动组织专题报道，组稿、约稿高水平稿件，每年约稿、组稿不少于 1 篇；

(下转第 848 页)

Rapid Identification of Quality of Walnut Kernel by Model Established by Near Infrared Hyperspectral Imaging Technology with Partial Least Square Discriminant Analysis

DING Kun, XIANG An

(*School of Electronics and Information Engineering, Tongji University, Shanghai* 201800, *China*)

Abstract: The model for rapid nondestructive identification of quality of walnut kernel was established by near infrared hyperspectral imaging technology combined with partial least square discriminant analysis (PLS-DA). The spectral data of walnut kernels with different quality were collected in the full wavelength range of 900—1 700 nm, and the average spectra were used as the original spectra. The original spectral data was pretreated by standard normal variate. The dimension of the original spectral data was reduced by principal component analysis, and 11 characteristic wavelengths were extracted, including 970, 1 151, 1 210, 1 215, 1 256, 1 309, 1 340, 1 379, 1 389, 1 404, 1 460 nm. Two PLS-DA classification models were established based on full spectra and characteristic wavelengths. The results showed that the prediction accuracy of model under full spectra condition on the calibration set and verification set was the highest, reaching 100%, while that of model under characteristic wavelengths condition on the same data sets decreased slightly, reaching 99.3%. The prediction accuracy of the both models on the testing set was 100%.

Keywords: near infrared hyperspectral imaging technology; partial least square discriminant analysis (PLS-DA); walnut kernel; quality

(上接第 843 页)

3）积极推动期刊质量建设，主动将有创新性的高水平原创成果发表在本刊，每年以第一或通信作者向本刊投稿不少于 1 篇；

4）积极为本刊审稿；

5）积极参加本刊青年编委会会议和本刊主办或协办的各类学术活动；

6）积极为本刊的发展与推广出谋献策。

五、报名与遴选流程

1）邮箱报名

填写《青年编委自荐（推荐）登记表》，发送至邮箱 hx@mat-test.com。邮件主题为“青年编委报名-姓名”。报名截止日期为 2023 年10 月31 日。

《青年编委自荐（推荐）登记表》可至网站www.mat-test.com 或《理化检验-化学分册》公众号下载。

2）遴选流程

申请材料初筛→主编、编委会遴选→邮件或微信通知→召开青年编委成立工作会→颁发聘书。

3）咨询电话

13611652596（微信同号）；021-55882970。

《理化检验-化学分册》编辑部