

艾燃烧生成物化学评价与控制模型建立探索性研究

靳 然¹ 赵百孝² 于密密³ 郭洪祝³ 傅欣彤³ 陈有根³

(1 中国中医科学院广安门医院南区,北京,102618; 2 北京中医药大学,北京,100029; 3 北京市药品检验所,北京,102206)

摘要 目的:初步建立艾燃烧生成物化学评价与控制模型。方法:采用 SPME-GC 联用技术对艾燃烧生成物进行检测,建立了艾燃烧生成物的指纹图谱;运用 matlab 数学软件提取既有样品艾烟气相色谱图的 29 个共有峰进行聚类,绘制出艾烟特征曲线;运用 matlab 数学软件提取 29 个峰的信息进行主成分分析。结果:艾燃烧生成物指纹图谱和特征曲线 2 种方法计算得到的相似度结果相近,主成分分析中精细艾绒离聚类中心较远。结论:艾燃烧生成物指纹图谱、特征曲线的测定及主成分分析可以将艾烟更全面的加以描述,可以进一步综合利用人工神经网络或遗传算法将艾燃烧生成物的化学评价和控制模型进行优化。

关键词 艾燃烧生成物;化学评价与控制模型;特征曲线;主成份分析;指纹图谱

Exploratory Study on the Chemical Assessment and Control Model of Moxa Smoke

Jin Ran¹, Zhao Baixiao², Yu Mimi³, Guo Hongzhu³, Fu Xintong³, Chen Yougen³

(1 Guang'anmen Hospital of China Academy of Chinese Medical Sciences, Beijing 102618, China; 2 Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 100029, China; 3 Beijing Institute for Drug Control, Beijing 102206, China)

Abstract Objective: To establish a chemical assessment and control model for moxa smoke. **Methods:** Using SPME-GC technique to assess moxa smoke and establish a finger-print of that. At the same time, using matlab software to aggregate the 29 common peaks of current moxa smoke prints and draw a feature curve for moxa smoke, then analyze the main content. **Results:** The results retrieved by fingerprint and feature curve were identical, and the main content analysis showed that fine moxa has a far distance from the cluster center. **Conclusion:** Moxa smoke can be comprehensively analyzed by finger-print, feature curve and main content analysis. Artificial nerve-net or genetic algorithm can be used in optimizing the chemical assessment and control model.

Key Words Combustion Product of Moxa floss; Chemical evaluation and control model; characteristic curve; Principal component analysis; Fingerprint

中图分类号:R245. 81 文献标识码:A doi:10.3969/j.issn.1673-7202.2016.08.003

艾灸疗法是以艾绒为主要材料,点燃后在体表一定的部位进行烧、灼、熏、熨,给人体以温热、药物刺激作用,以防治疾病的一种外治法。几千年的临床实践证明其安全有效,但艾灸作用的效应机制目前不完全清楚,一般认为除温热、光效应之外,艾绒燃烧生成的烟气,可通过呼吸道及施灸部位作用于人体,起到一定的治疗作用^[1-3]。艾燃烧生成物是艾绒燃烧时生成的烟气,文献报道中有艾烟、艾灸生成物、艾燃烟、艾叶挥发性物质等多种名称。

艾燃烧生成物是艾灸疗法起效的一个很重要的因素,所以对艾燃烧生成物即艾烟进行系统研究尤为重要。艾烟的化学成分组成不但与其燃烧充分程度有关,还与艾绒质量有关,如产地、存储时间、制作比例等等。所以本研究收集大批量不同质量的艾绒,采用 SPME-GC 联用技术对艾燃烧生成物进行检

测,建立艾燃烧生成物的指纹图谱,并在此基础上建立一个稳定真实可靠的艾燃烧生成物的化学评价和控制模型。以期为艾灸诊室空气质量标准提供数据,为搭建艾灸临床、科研的技术平台 and 操作规范奠定基础。

1 艾烟指纹图谱研究

有关艾叶及艾烟的定性分析的文献很多^[4-11],靳然等人^[12-13]对艾叶及艾烟中的某几个成分也进行了定量测定,但是并不能反映艾烟的整体特征。中药指纹图谱^[14]可以全面反映中药所含内在化学成分的种类与数量,为了将艾烟更全面的加以描述,进行了艾烟指纹图谱的研究。

1.1 仪器与材料 气相色谱(GC, Agilent Technologies, 6980N),安捷伦毛细管柱(HP-5, 30 m × 0.32 mm × 0.25 μm)。Supelco 固相微萃取手柄,萃取头

基金项目:国家自然科学基金项目(编号:81373730);国家自然科学基金项目(编号:81574068);国家青年自然科学基金项目(编号:81403449);国家国际科技合作专项项目(编号:2011DFA31370)

作者简介:靳然(1982—),女,主治医师,中国中医科学院广安门医院南区针灸科

通信作者:赵百孝(1963.03—),博士,教授,博士研究生导师,北京中医药大学针灸推拿学院院长,研究方向:艾灸作用与原理,Tel: (010) 64286737, E-mail: baixiao100@vip.sina.com

型号包括 75 μm Carboxen/PDMS。定制密闭玻璃仪器(18.5L),顶盖有小孔,配有橡胶塞。

2007 年不同比例艾绒(3:1、5:1、8:1、15:1)、2008 年不同比例艾绒(3:1、5:1、8:1、15:1)、2009 年不同比例艾绒(3:1、5:1、8:1、15:1)、2010 年 3:1 艾绒、2011 年 3:1 艾绒,原料均为蕲艾,产于湖北省蕲春县,采摘于端午前后,由湖北省蕲春县李时珍医药工作办公室提供,河南南阳汉医艾绒厂加工。16 个不同产地艾叶(湖北蕲春、湖北襄樊、北京、陕西、江西、山西、安徽、甘肃、河北、辽宁、黑龙江、河南浙川、河南桐柏、河南郑州、河南固始、河南安阳),均采摘于 2010 年端午节当天(2010 年 6 月 16 日),由北京市药品检验所药师鉴定为正品,由粉碎机加工成 3:1 艾绒。市售艾绒:市售艾绒 1(3:1),市售艾绒 2(3:1),黄金艾绒 1,黄金艾绒 2,2003 年 12:1 艾绒,2005 年 5:1 艾绒,百笑灸艾绒,南阳陈艾条艾绒,苏州艾条艾绒,同仁堂艾条艾绒,均购于市场。

1.2 实验方法及条件

1.2.1 样品制备 称取样品 0.25 g,放在 18.5L 的密闭容器中点燃,燃尽后待艾烟充满玻璃缸,将萃取头插入密闭容器萃取 30 min。把饱和的纤维头在 GC 进样口解析 3 min,然后进行 GC 检测。

1.2.2 气相色谱条件 柱温采取程序升温,起始温度为 30 $^{\circ}\text{C}$,保持 3 min;以 2 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升至 100 $^{\circ}\text{C}$,保持 2 min;以 4 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升至 150 $^{\circ}\text{C}$,保持 2 min;以 8 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 升至 250 $^{\circ}\text{C}$,保持 5 min。进样口温度为 220 $^{\circ}\text{C}$;检测器温度:250 $^{\circ}\text{C}$;分流进样,分流比 10:1。

1.2.3 实验条件 固相微萃取头型号为 75 μm Carboxen/PDMS;萃取时间 30 min;解吸附温度为 220 $^{\circ}\text{C}$;解吸附时间定为 3 min。

1.2.4 方法学考察 萃取头在进样口解吸附后需再次萃取才可进样,所以精密度考察即重复性考察。分别取 2009 年 3:1 艾绒 0.2517、0.2518、0.2517、

0.2519、0.2517、0.2518 g,按 1.2.1 方法进行实验,然后进行 GC 检测。测得艾烟中苯甲醛、苯酚、邻位甲酚、萘的含量 $RSD\%$ 分别为 1.9%、0.8%、1.9%、1.8%。实验结果表明该方法重复性和精密度良好。

1.3 实验结果 将各艾烟样品色谱图输入中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2004 版),生成共有指纹图谱,相似度在 88.7%~99.7% 之间。艾烟指纹图谱匹配图见图 1。

中药色谱指纹图谱相似度评价系统是根据夹角余弦算法进行相似度计算的^[14],有一定的局限性。在艾烟指纹图谱基础上,利用 matlab 数学软件对色谱数据进行进一步处理,运用 K-means 算法、主成分分析法等对数据进行建模分析。

2 艾烟特征曲线研究

运用 matlab 数学软件提取既有样品艾烟的气相色谱图的 29 个共有峰进行聚类,并将 4 个伪品艾绒样品艾烟和 8 个市售艾绒样品艾烟与绘制的艾烟特征曲线进行比较。

29 个成分峰保留时间分别为:6.5 min,6.8 min,11.4 min(3-糠醛),13.3 min,15.1 min,17.4 min(2(5H)呋喃酮),20.7 min(苯甲醛),21.2 min,22.6 min,23.0 min(苯酚),23.3 min,25.9 min(D-柠檬烯),28.3 min(邻位甲酚),28.7 min,29.9 min(对位甲酚),30.5 min,30.8 min,34.1 min,35.0 min,36.9 min(萘),37.3 min,37.9 min,40.9 min,43.6 min,46.2 min,47.8 min,48.8 min,51.3 min。

K-means 算法是数据点到原型的某种距离作为优化的目标函数,利用函数求极值的方法得到迭代运算的调整规则^[15]。K-means 算法以欧氏距离作为相似度测度,采用误差平方和准则函数作为聚类准则函数。使用艾烟指纹图谱中所得色谱结果,运用 Matlab 软件利用 K-means 方法分析计算,得出艾烟特征曲线。见图 4。

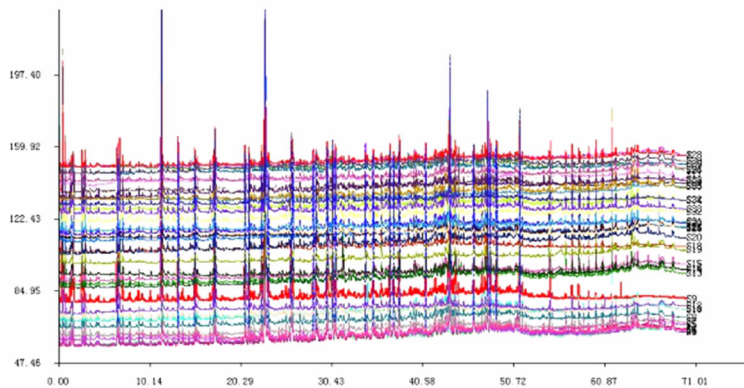


图 1 艾烟指纹图谱匹配图

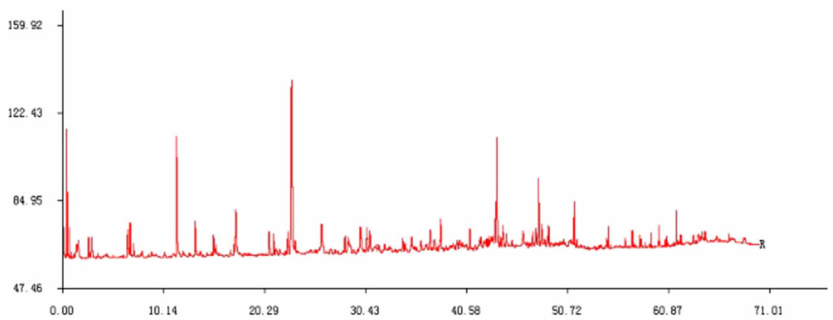


图 2 艾烟生成对照图谱

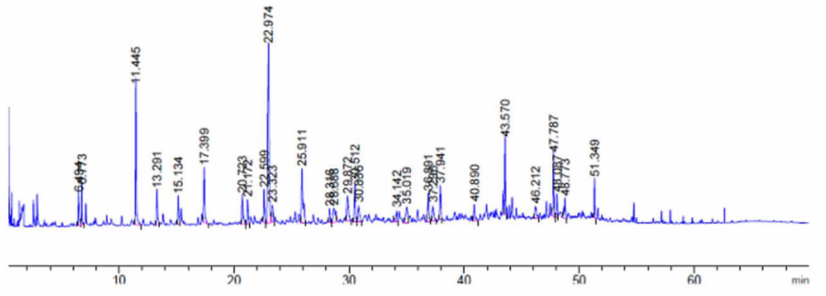


图 3 艾烟气相总离子流图

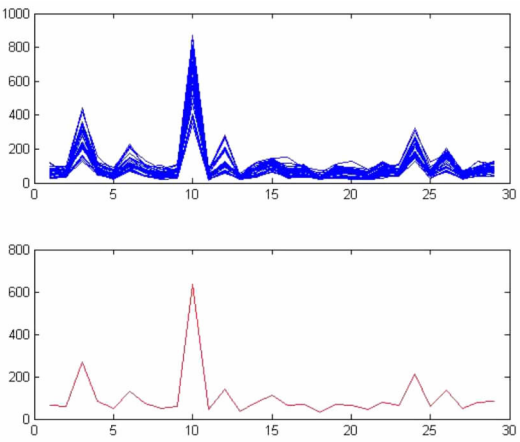


图 4 艾烟特征曲线

本实验通过 `corrcoef` 函数计算各样品(包括 4 个伪品艾叶制作的艾绒)与艾烟特征曲线的相似度,并与中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2004 版)计算的相似度进行比较。见表 1。由表 1 可知,2 种方法计算得到的相似度结果相近。用 K-means 方法计算相似度低于 95% 的样品有 2007 年 15:1 艾绒,2009 年 15:1 艾绒,黄金艾绒 1 和黄金艾绒 2 和苏州艾条艾绒等 5 个样品。其共同特点除了苏州艾条艾绒外,其他艾绒样品的加工比例都较高;而苏州艾条艾绒大部分是叶梗,所含叶肉部分较少;黄金艾绒 1 为网购产品,其精度较高,肉眼观察几乎不含叶肉组织,但其他艾绒样品均含墨绿色叶肉组织。用中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2004 版)计算所得相似度也是这 5 种较低,但均大于 85%,而 K-means 方法中黄金艾绒的相似度极低。说明 2 种方

法得到的相似度结果基本一致,而以欧氏距离计算相似度的 K-means 算法和以夹角余弦算法计算相似度的相似度软件计算结果上略有差异。

3 艾烟主成分分析

主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 是将多个变量通过线性变换以选出较少个数重要变量的一种多元统计分析方法,它对多变量表示数据点集合寻找尽可能少的正交矢量表征数据信息特征^[15]。将表 1 中编号为 1 ~ 31 的样品的色谱图输入 matlab 软件提取 29 个峰的信息进行主成分分析。

样本相关矩阵 R 的特征值及贡献率如下。

前 3 个样本主成分累计贡献率已达到 92.8%,故只需取前 3 个主成分即可,得到样本 3 个主成分为。

$$\begin{aligned} y_1 = & 0.076810405x_1 + 0.18513043x_2 - 0.012300812x_3 + \\ & 0.005326342x_4 + 0.17253542x_5 \\ & + 0.018965455x_6 + 0.12233716x_7 + 0.095492803x_8 - \\ & 0.1145388x_9 \\ & + 0.006976188x_{10} - 0.034464233x_{11} - 0.23349492x_{12} + \\ & 0.15368579x_{13} \\ & + 0.15485451x_{14} + 0.082569562x_{15} + 0.14994298x_{16} + \\ & 0.24272339x_{17} \\ & - 0.26053417x_{18} + 0.16764416x_{19} + 0.12858307x_{20} + \\ & 0.021348821x_{21} \\ & + 0.037441444x_{22} + 0.51264787x_{23} - 0.20130903x_{24} - \\ & 0.11471906x_{25} \\ & + 0.041096926x_{26} + 0.27621576x_{27} + 0.22647269x_{28} - \end{aligned}$$

$$y_2 = 0.37496969x_{20} + 0.066031218x_1 + 0.013347447x_2 - 0.11207993x_3 - 0.047906525x_4 - 0.31919843x_5 - 0.13414489x_6 - 0.21828088x_7 + 0.053445272x_8 - 0.058235083x_9 - 0.015083943x_{10} - 0.11224782x_{11} + 0.02993799x_{12} + 0.15648882x_{13} + 0.018708408x_{14} + 0.23454219x_{15} - 0.2116186x_{16} + 0.021527488x_{17} + 0.23053724x_{18} - 0.039812017x_{19} + 0.29989642x_{20} - 0.33023989x_{21} + 0.32480296x_{22} - 0.1412456x_{23} - 0.12162914x_{24} - 0.14695852x_{25} + 0.11241324x_{26} + 0.32702026x_{27} - 0.30058524x_{28} - 0.2061868x_{29}$$

$$y_3 = 0.3164807x_1 + 0.60155755x_2 + 0.16723998x_3 - 0.40407914x_4 + 0.1039996x_5 - 0.096246257x_6 + 0.085433632x_7 - 0.21366894x_8 + 0.034076083x_9 - 0.3424418x_{10} - 0.002548368x_{11} + 0.052086554x_{12} - 0.20161788x_{13} - 0.014323804x_{14} + 0.003088385x_{15} + 0.06752903x_{16} - 0.17508608x_{17} + 0.10906743x_{18} - 0.14640093x_{19} + 0.07319825x_{20} + 0.031102782x_{21} - 0.023370197x_{22} + 0.02634792x_{23} - 0.076330401x_{24} - 0.045713842x_{25} - 0.086849011x_{26} + 0.043849532x_{27} - 0.010802703x_{28} + 0.13441336x_{29}$$

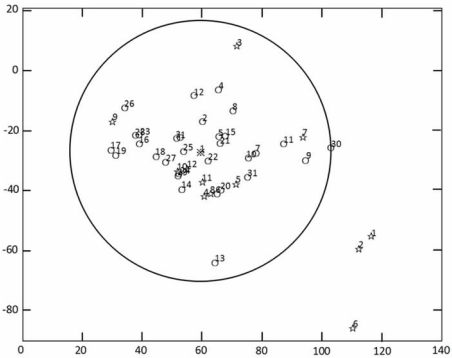


图5 主成分分析法样本聚为1类

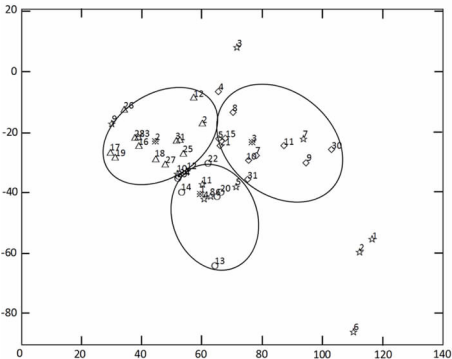


图6 主成分分析法样本聚为3类

表1 艾烟相似度

样品 编号	样品名称	特征曲线相似 度(%)	指纹图谱相似 度(%)
1	2007年3:1艾绒	98.2	98.8
2	2007年5:1艾绒	98.2	98.9
3	2007年8:1艾绒	98.5	98.8
4	2007年15:1艾绒	87.8	93.9
5	2008年3:1艾绒	99.3	99.6
6	2008年5:1艾绒	99.7	99.7
7	2008年8:1艾绒	98.8	99.3
8	2008年15:1艾绒	95.3	97.5
9	2009年3:1艾绒	98.0	99.0
10	2009年5:1艾绒	98.8	99.3
11	2009年8:1艾绒	99.1	99.5
12	2009年15:1艾绒	92.5	96.2
13	2010年3:1艾绒	97.8	98.6
14	2011年3:1艾绒	98.2	98.7
15	安徽	99.6	99.6
16	北京	96.5	98.2
17	甘肃	97.2	98.4
18	河北	98.9	98.6
19	黑龙江	98.6	99.0
20	河南安阳	97.5	98.5
21	河南固始	99.0	99.2
22	河南桐柏	98.4	98.4
23	河南淅川	98.0	97.4
24	河南郑州	98.2	98.1
25	湖北襄阳	99.6	99.5
26	江西	99.6	99.7
27	辽宁	98.4	99.0
28	山西	98.7	99.0
29	陕西	98.3	97.8
30	2003年12:1艾绒	98.3	99.3
31	2005年5:1艾绒	99.0	99.4
32(1)	百笑灸艾绒	98.1	98.7
33(2)	南阳陈艾条艾绒	98.3	99.1
34(3)	黄金艾绒2	85.3	92.9
35(4)	市售艾绒1	98.9	99.4
36(5)	市售艾绒2	99.5	99.7
37(6)	黄金艾绒1	12.4	88.7
38(7)	苏州艾条艾绒	92.5	96.4
39(9)	同仁堂艾条艾绒	98.6	98.9
40(10)	伪品S4	98.9	99.1
41(11)	伪品S1	98.8	98.8
42(12)	伪品S3	98.1	99.7
43(13)	伪品S2	95.7	98.8

从3个样本主成分可以看出, y_1 的贡献率高达63.7%, y_1 和 y_2 的累计贡献率为87.3%, 所以仅前2个主成分足以反映样本的原始信息。将31个样品信息代入 y_1 和 y_2 方程求值, 并进行聚类分析, 分别将其聚为1类、3类, 如图5、图6。将表2中编号为32~43的样品重新编号为1~12, 将数据信息代入方程, 在得到结果的基础上进行检验。图5的聚

类中心以※1 为标记,聚类半径为 43.5,参与聚类的 31 个样本在图中以圆圈标记○,待检验的 12 个样本以星号☆标记。图 6 的 3 个聚类中心以※数字为标记,其中参加聚类的 31 个样本根据 1、2、3 类不同,分别以○、△、◇标记,而待检验的 12 个样本以☆标记。

由图 5 可知所有的艾烟样品都聚在※1 的四周,进行检验的 12 个样品中百笑灸艾绒、南阳陈艾条艾绒和黄金艾绒 1 离聚类中心较远,其余所有艾烟样品(包括伪品艾叶制作的艾绒在内)差别不大,可能与艾绒的精度有关。由图 6 可知,艾烟样品以※1、2、3 聚为 3 类,在分类上没有明显规律,但百笑灸艾绒、南阳陈艾条艾绒、黄金艾绒 1 和黄金艾绒 2 离聚类中心较远。可能因为精细艾绒的样本量偏少,所以离聚类中心较远,推测收集大量样本的精细艾绒通过 matlab 的主成分分析法可以将不同精细度的艾绒分别聚类。

表 2 特征值及贡献率

特征值	贡献率(%)	累计贡献率(%)
33379.402	0.6366	0.6366
12409.311	0.2367	0.8732
2892.5405	0.0552	0.9284
1748.8942	0.0334	0.9618
687.30316	0.0131	0.9749
343.74408	0.0066	0.9814
239.49657	0.0046	0.986
152.42668	0.0029	0.9889
119.57333	0.0023	0.9912
101.61301	0.0019	0.9931
74.682716	0.0014	0.9945
64.289467	0.0012	0.9958
55.947426	0.0011	0.9968
48.757439	0.0009	0.9978
26.658358	0.0005	0.9983
23.960106	0.0005	0.9987
14.747433	0.0003	0.999
12.933166	0.0002	0.9993
12.204507	0.0002	0.9995
8.0573473	0.0002	0.9996
7.3737106	0.0001	0.9998
3.9105401	0.0001	0.9999
2.7694762	0.0001	1
2.1503599	0	1
1.4534478	0	1
0.55172396	0	1
0.45794314	0	1
0.22687015	0	1
0.14416805	0	1

4 艾燃烧生成物化学评价与控制模型的建立

根据艾烟指纹图谱、特征曲线和主成分分析实

验结果,建立艾燃烧生成物的化学评价与控制模型。

4.1 艾燃烧生成物的测定方法 准确称量 0.25 g 艾绒,置于 18.5L 密闭容器中点燃,待其燃尽烟气混匀后用 75 μm CAR/PDMS 型号固相微萃取头萃取 30 min,在进样口解吸附 3 min,然后进行 GC 分析。

色谱条件:安捷伦毛细管柱(HP-5,30 m×0.32 mm×0.25 μm);柱温采取程序升温,起始温度为 30 ℃,保持 3 min,以 2 ℃/min 升至 90 ℃,保持 2 min,以 4 ℃/min 升至 105 ℃,以 8.0 ℃/min 升至 250 ℃,保持 3 min。进样口温度为 220 ℃;检测器温度:250 ℃;分流进样,分流比 10:1。

4.2 艾燃烧生成物指纹图谱的测定 将所得色谱图输入中药色谱指纹图谱相似度评价软件与图 2 的生成对照图谱进行比较,相似度不得低于 85%。

4.3 艾燃烧生成物特征曲线的测定 利用 matlab 软件提取保留时间分别为 6.5 min,6.8 min,11.4 min(3-糠醛),13.3 min,15.1 min,17.4 min(2(5H)呋喃酮),20.7 min(苯甲醛),21.2 min,22.6 min,23.0 min(苯酚),23.3 min,25.9 min(D-柠檬烯),28.3 min(邻位甲酚),28.7 min,29.9 min(对位甲酚),30.5 min,30.8 min,34.1 min,35.0 min,36.9 min(萘),37.3 min,37.9 min,40.9 min,43.6 min,46.2 min,47.8 min,48.8 min,51.3 min 的 29 个成分的信息,绘制艾烟特征曲线,并与图 4 中生成的对照特征曲线进行比较,相似度不得低于 85%。

4.4 艾燃烧生成物主成分分析 艾烟 3 个主成分特征方程。

$$\begin{aligned} y_1 = & 0.076810405x_1 + 0.18513043x_2 - 0.012300812x_3 + \\ & 0.005326342x_4 + 0.17253542x_5 \\ & + 0.018965455x_6 + 0.12233716x_7 + 0.095492803x_8 - \\ & 0.1145388x_9 \\ & + 0.006976188x_{10} - 0.034464233x_{11} - 0.23349492x_{12} + \\ & 0.15368579x_{13} \\ & + 0.15485451xx_{14} + 0.082569562x_{15} + 0.14994298x_{16} + \\ & 0.24272339x_{17} \\ & - 0.26053417x_{18} + 0.16764416x_{19} + 0.12858307x_{20} + \\ & 0.021348821x_{21} \\ & + 0.0374411444x_{22} + 0.51264787x_{23} - 0.20130903x_{24} - \\ & 0.11471906x_{25} \\ & + 0.041096926x_{26} + 0.27621576x_{27} + 0.22647269x_{28} - \\ & 0.37496969x_{29} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y_2 = & 0.066031218x_1 + 0.013347447x_2 - 0.11207993x_3 - \\ & 0.047906525x_4 - 0.31919843x_5 \\ & - 0.13414489x_6 - 0.21828088x_7 + 0.053445272x_8 - \\ & 0.058235083x_9 \\ & - 0.015083943x_{10} - 0.11224782x_{11} + 0.02993799x_{12} + \\ & 0.15648882x_{13} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 0.018708408x_{14} + 0.23454219x_{15} - 0.2116186x_{16} + \\
& 0.021527488x_{17} \\
& + 0.23053724x_{18} - 0.039812017x_{19} + 0.29989642x_{20} - \\
& 0.33023989x_{21} \\
& + 0.32480296x_{22} - 0.1412456x_{23} - 0.12162914x_{24} - \\
& 0.14695852x_{25} \\
& + 0.11241324x_{26} + 0.32702026x_{27} - 0.30058524x_{28} - \\
& 0.2061868x_{29} \\
y_3 = & 0.3164807x_1 + 0.60155755x_2 + 0.16723998x_3 - 0.40407914x_4 + \\
& 0.1039996x_5 \\
& - 0.096246257x_6 + 0.085433632x_7 - 0.21366894x_8 + \\
& 0.034076083x_9 \\
& - 0.3424418x_{10} - 0.002548368x_{11} + 0.052086554x_{12} - \\
& 0.20161788x_{13} \\
& - 0.014323804x_{14} + 0.003088385x_{15} + 0.06752903x_{16} - \\
& 0.17508608x_{17} \\
& + 0.10906743x_{18} - 0.14640093x_{19} + 0.07319825x_{20} + \\
& 0.031102782x_{21} \\
& - 0.023370197x_{22} + 0.02634792x_{23} - 0.076330401x_{24} - \\
& 0.045713842x_{25} \\
& - 0.086849011x_{26} + 0.043849532x_{27} - 0.01080270x_{28} + \\
& 0.13441336x_{29}
\end{aligned}$$

利用 matlab 提取所测艾烟气相色谱图的 29 个峰信息,进行主成分分析,并将其标准化后的信息代入上述前 2 个方程中,聚类后应在图 5 的范围内,半径为 43.5。

5 讨论

用 SPME-GC-MS 联用技术只能检测到艾燃烧生成物中少量的挥发油成分^[6],可能与本方法测定艾烟取样量较小有关。所以艾燃烧生成物的化学评价与控制模型的建立并没有涉及到不同艾绒样品挥发油成分,这可能是伪品所制艾绒与正品艾绒烟气差别不大的原因之一。

中药色谱指纹图谱相似度评价系统是根据夹角余弦算法进行相似度计算的,主要反映的艾烟的整体特征,有一定的局限性。而艾烟的特征曲线绘制是基于峰面积的检测,反映的是艾烟中各成分的相对含量,所以艾烟特征曲线与指纹图谱的测定可以将艾烟更全面的加以描述。

艾烟的主成分分析中,艾绒的样本量偏少。精

细艾绒离聚类中心较远,推测收集大量样本的精细艾绒通过 matlab 的主成分分析法可以将不同精细度的艾绒分别聚类。该模型中的主成分分析特征方程中特征向量较多,可以综合利用人工神经网络或遗传算法将其进一步精简,将艾燃烧生成物的化学评价和控制模型进行优化。

参考文献

- [1] 张建斌,王玲玲,胡玲,等. 艾灸温通作用的理论探讨[J]. 中国针灸,2011,31(1):51-54.
- [2] 刘均天,黄畅,刘耀萌,等. 艾灸各因素对 APP/PS-1 双转基因 AD 小鼠脑中 DNA、蛋白质、脂质氧化应激的影响[J]. 中华中医药杂志,2015,30(5):1375-1379.
- [3] 韩丽,赵百孝,刘铜华,等. 不同浓度艾烟干预对大鼠肺脏及血清 SOD、MDA 表达的影响[J]. 中国针灸,2015,35(7):687-690.
- [4] 靳然,于密密,赵百孝,等. 不同年份薪艾叶及不同比例艾绒化学成分研究[J]. 中国针灸,2010,30(5):389-392.
- [5] 张世仙,余永华,敖克厚,等. 气相色谱-质谱法测定艾叶挥发油中化学成分[J]. 理化检验:化学分册,2013,49(6):705-708.
- [6] 靳然,赵百孝,于密密,等. 艾燃烧生成物组分固相微萃取气相色谱质谱法定性分析[J]. 北京中医药大学学报,2011,34(9):632-636.
- [7] 刘美凤,周惠. 艾叶挥发油与燃烧烟雾化学成分比较[J]. 华南理工大学学报:自然科学版,2012,40(1):30-34.
- [8] 王远敏,吴红梅,杨烨,等. 艾叶 UPLC 指纹图谱[J]. 中国实验方剂学杂志,2015,21(13):50-52.
- [9] 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.
- [10] 孙伟峰,周志磊,殷春燕,等. 艾叶浸膏挥发性成分及其热裂解产物的全二维气相色谱飞行时间质谱分析[J]. 精细化工,2013,30(1):45-50.
- [11] 杨梅,江丹,易筠,等. 艾叶燃烧物清除自由基作用的观察[J]. 中国针灸,2009,29(7):547-549.
- [12] 靳然,于密密,赵百孝,等. 气相色谱法测定艾叶 4 个挥发性成分的含量[J]. 药物分析杂志,2013,33(6):1033-1036.
- [13] 于密密,靳然,赵百孝,等. SPME-GC-MS 法测定艾烟中苯酚的含量[J]. 药物分析杂志,2012,32(10):1870-1873.
- [14] 靳然,赵百孝. 气相色谱指纹图谱在中药分析及质量评价中的应用[J]. 现代科学仪器,2010,2(1):122-123,126.
- [15] 许国根,贾瑛. 模式识别与智能计算的 MATLAB 实现[M]. 北京:北京航空航天大学出版社,2012:11-15.

(2016-06-28 收稿 责任编辑:洪志强)