

## 激光与光电子学进展

## 蔷薇科植物的红外光谱分类研究

郑钧文<sup>1</sup>, 宋霄雪<sup>1</sup>, 甘玉佳<sup>1</sup>, 吴衷宇<sup>1</sup>, 杨忠钰<sup>1</sup>, 欧全宏<sup>1</sup>, 时有明<sup>2</sup>, 刘刚<sup>1\*</sup><sup>1</sup>云南师范大学物理与电子信息学院, 云南 昆明 650500;<sup>2</sup>曲靖师范学院物理与电子工程学院, 云南 曲靖 655011

**摘要** 不同蔷薇科植物种类资源信息的收集与明确其科、属间亲缘关系对蔷薇科植物资源的开发利用有重要意义。以不同种类蔷薇科植物的叶片、花瓣及雄蕊为材料,用傅里叶变换红外(FTIR)光谱结合主成分分析(PCA)、系统聚类分析(HCA)、簇类独立软模式法(SIMCA)判别模型对蔷薇科植物进行研究。结果表明,蔷薇科叶片、花瓣及雄蕊中均含有多糖、蛋白质、脂类、草酸钙、木质素等成分,花瓣和雄蕊中还含有酚类物质。不同种类叶片之间的FTIR光谱吸收特征相似,但在1660~1000 cm<sup>-1</sup>范围内吸收峰强度存在明显差异,利用此范围进行PCA,前两个主成分可获得97%以上的累计方差贡献率,用HCA可将11种植物在亚科级别正确分类。结合SIMCA判别模型,对不同叶片、花瓣及雄蕊的蔷薇科植物进行分类,用全谱4000~400 cm<sup>-1</sup>范围数据,正确分类率可达96.08%;用1800~800 cm<sup>-1</sup>范围数据,正确分类率可达100%。研究表明,FTIR光谱结合统计分析方法及判别模型,可以将不同种类蔷薇科植物在亚科、属级别上正确分类。

**关键词** 红外光谱; 蔷薇科; 化学计量学; 主成分分析; 系统聚类分析; 簇类独立软模式法

中图分类号 O657.33

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP223412

## Classification of Rosaceae Plants by Infrared Spectroscopy

Zheng Junwen<sup>1</sup>, Song Xiaoxue<sup>1</sup>, Gan Yujia<sup>1</sup>, Wu Zhongyu<sup>1</sup>, Yang Zhongyu<sup>1</sup>,  
Ou Quanhong<sup>1</sup>, Shi Youming<sup>2</sup>, Liu Gang<sup>1\*</sup><sup>1</sup>School of Physics and Electronics, Information, Yunnan Normal University, Kunming 650500, Yunnan, China;<sup>2</sup>School of Physics and Electronic Engineering, Qujing Normal University, Qujing 655011, Yunnan, China

**Abstract** For the development and utilization of Rosaceae plant resources, it is of great significance to collect information on different Rosaceae plant species and clarify their family and generic relationships. In this study, leaves, petals, and stamens of different Rosaceae plant species are analyzed through Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy combined with principal component analysis (PCA), hierarchical cluster analysis (HCA), and soft independent modelling of class analogy (SIMCA). The results revealed that the leaves, petals, and stamens of Rosaceae contained polysaccharides, proteins, lipids, calcium oxalate, lignin, and other components, while the petals and stamens contained phenols in addition. The FTIR spectra of different types of leaves are found to be similar, but the absorption peak intensities in the range of 1660–1000 cm<sup>-1</sup> differed significantly. Upon using this range for PCA, the first two principal components could achieve more than 97% of the cumulative variance contribution rate. Using HCA, 11 species of the plant could be correctly classified at the subfamily level. Combined with the SIMCA discriminant model, in the classification of Rosaceae plants with different leaves, petals, and stamens, the correct classification rate reaches 96.08% with the full spectral data in the range of 4000–400 cm<sup>-1</sup>, and 100% accuracy can be achieved with the data in the range of 1800–800 cm<sup>-1</sup>. The results reveal that FTIR spectroscopy combined with statistical analysis and discriminant modeling is a suitable method for accurately classifying different species of Rosaceae plants at subfamily and genus levels.

**Key words** infrared spectroscopy; Rosaceae; chemometrics; principal component analysis; hierarchical cluster analysis; soft independent modeling of class analogies

## 1 引言

蔷薇科物种可按经济用途归为食用、园林绿化、药

用和水果种质资源等4类资源植物<sup>[1]</sup>。蔷薇科植物生态适应能力强,且具有较高的观赏价值,被广泛种植于诸多场景。云南的蔷薇科植物种类丰富,占全国蔷薇

收稿日期: 2023-01-02; 修回日期: 2023-01-16; 录用日期: 2023-02-08; 网络首发日期: 2023-03-09

基金项目: 国家自然科学基金(31760341)、云南省教育厅基金(2022J0129)、云南省高校科技创新团队支持计划

通信作者: \*gliu66@163.com

科植物的一半以上,是云南被子植物中的第五大科<sup>[2]</sup>,按照果实和花的构造分为绣线菊亚科、李亚科、蔷薇亚科和苹果亚科。

植物资源的保护和种质资源的收集与保存是我国生态文明建设的主要内容,在新时代生物多样性保护的背景下,植物分类学的意义更加重要<sup>[3]</sup>。蔷薇科植物的分类研究目前有基于蔷薇科新鲜叶片几何特征利用图像数字化处理分类<sup>[4]</sup>和基于蔷薇科植物蜡叶标本数字化分类<sup>[5]</sup>,利用光学显微镜观察蔷薇科植物表皮细胞和气孔,从而为分类提供重要的解剖学特征<sup>[6]</sup>,以及用电子显微镜观察蔷薇科植物花粉形态进行聚类分析<sup>[7]</sup>,基于拉曼光谱对不同蔷薇科植物花粉进行分类预测<sup>[8]</sup>,利用傅里叶变换红外(FTIR)光谱结合主成分分析(PCA)对 9 种蔷薇科植物进行亲缘关系分析和鉴定<sup>[9]</sup>。但上述分析方法在不同蔷薇科植物属间分类的正确率并不理想。

FTIR 光谱是基于物质化学组成与化学键结构的光谱分析技术,具有速度快、高通量、测定精度及灵敏度高、环保且操作简便的特点,因此其在各个领域都得到广泛的应用。红外光谱常与其他技术联用,建立标准光谱特征数据库,或与化学计量学相结合,对药材质

量<sup>[10-11]</sup>及产地<sup>[12-13]</sup>鉴别、食品质量控制<sup>[14-16]</sup>、植物的分类和鉴别<sup>[9,17-20]</sup>、生态环境监测<sup>[21-23]</sup>及地质资源勘探<sup>[24-25]</sup>提供帮助。大部分文献中 FTIR 光谱结合簇类独立软模式法(SIMCA)均用于研究食品的质量控制或掺假<sup>[17,26-27]</sup>及食品、药材的产地鉴别<sup>[13,28]</sup>。FTIR 光谱结合 SIMCA 判别分类模型研究植物间亲缘关系及其分类的文章鲜有报道。

本文利用 FTIR 光谱结合 PCA、系统聚类分析(HCA)、SIMCA 判别分类模型对不同蔷薇科植物的叶片、花瓣及雄蕊进行分析,以期获得一种在亚科、属级别上快速、准确地地区分不同蔷薇科植物的方法。

## 2 材料与方法

### 2.1 样品采集

所有的蔷薇科植物叶片、花瓣及雄蕊均在云南师范大学呈贡校区采集,采集种类如表 1 所示。采摘的样品放入聚乙烯密封袋中,并将其带回实验室,对样品进行清洗后,将所有样品分别在 40 °C 下干燥至恒重。叶片除去主叶脉,其余部分用玛瑙研钵磨成粉末状,过 200 目(0.074 mm)筛。最终获得的所有粉末样品都分别储存在自密封袋中,保存在干燥环境中以供采集光谱。

表 1 实验用蔷薇科植物信息

Table 1 Information on Rosaceae plants for experiment

Subfamily	Genus	Species	Code
Prunoideae	Cerasus	Cerasus cerasoides (D. Don) Sok.	GPYT
Prunoideae	Cerasus	Prunus serrulata var. lannesiana (Carri.) Makino	RBWY
Prunoideae	Amygdalus	Prunus persica L.	T
Prunoideae	Amygdalus	Amygdalus persica L. var. persica f. duplex Rehd.	BT
Prunoideae	Prunus	Prunus cerasifera 'Atropurpurea'	ZYL
Prunoideae	Armeniaca	Prunus mume Siebold & Zucc.	M
Rosoideae Focke	Rosa	Rosa multiflora Thunb.	YQW
Rosoideae Focke	Rosa	Rosa chinensis Jacq.	YJ
Maloideae	Eriobotrya	Eriobotrya japonica (Thunb.) Lindl.	PP
Maloideae	Pyracantha	Pyracantha angustifolia (Franch.) C. K. Schneid.	ZYHJ
Maloideae	Malus	Malus micromalus	XFHT
Maloideae	Malus	Malus halliana Koehne	CSHT
Maloideae	Photinia	Photinia serratifolia (Desfontaines) Kalkman	SN

### 2.2 仪器设备

实验所用的光谱仪为 Perkin Elmer 生产的 Frontier 型 FTIR 光谱仪,配备 DTGS 探测器,压片磨具为天津诺雷信达科技有限公司生产的 YP-2 型压片机。

### 2.3 光谱采集

利用 KBr 压片法进行红外光谱检测,样品与 KBr 以 1:12 的比例混合均匀后压片。FTIR 光谱扫描范围为 4000~400  $\text{cm}^{-1}$ ,光谱扫描次数为 16 次,分辨

率为 4  $\text{cm}^{-1}$ 。

### 2.4 数据处理

对原始光谱数据进行的预处理(基线校正、平滑处理、平均谱图和导数谱图计算)均使用 OMNIC 8.2 软件,光谱数据的处理及绘图使用 Origin 9 软件,PCA 采用 The Unscrambler X 10.4 软件,HCA 使用 SPSS 软件,并使用 SIMCA 14.1 软件对所采集的光谱数据进行判别分类模型的外部验证。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 蔷薇科植物叶片、花瓣及雄蕊光谱分析

图 1 为蔷薇科植物叶片、花瓣及雄蕊的 FTIR 原始光谱,图 1(a) 为 13 种不同蔷薇科植物叶片的 FTIR 光谱,其整体吸收趋势相似,部分峰的相对强度不同。叶片光谱主要的吸收峰有 3315、2927、2856、1737、1657、1542、1452、1321、1249、1157、1049、830 及 780  $\text{cm}^{-1}$ 。其中,3315  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰主要为 O-H 的伸缩振动;2927  $\text{cm}^{-1}$  和 2856  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰分别为亚甲基 C-H 反对称和对称伸缩振动;1737  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰为脂肪酸中羰基的伸缩振动;1657  $\text{cm}^{-1}$  和 1542  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰分别为蛋白质酰胺 I 带中 C=O 伸缩振动、酰胺 II 带中 C-N 伸缩振动<sup>[41]</sup>;1452  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰为细胞壁多糖的 C-H 弯曲振动<sup>[29]</sup>;1157  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰为淀粉中 C-O 和 C-C

的伸缩振动;1321  $\text{cm}^{-1}$  和 780  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰主要为草酸钙物质中 C-O 伸缩振动<sup>[30]</sup>;1249  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰为木质素苯羟基 C-O 伸缩振动;1049  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰为糖类物质醇、酯基、醚基或酚类的 C-O、C-C 振动吸收<sup>[9]</sup>;830  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收峰为木质素中 C-H 平面弯曲振动吸收峰<sup>[9]</sup>。综合上述可得,蔷薇科叶片中均含有多糖、蛋白质、脂类、草酸钙、木质素等成分。从亚科级别来看,李亚科的紫叶李、碧桃、桃、日本晚樱、高盆樱桃以及蔷薇亚科的野蔷薇、月季在 1657  $\text{cm}^{-1}$  和 1542  $\text{cm}^{-1}$  附近的吸收强度最为明显,而属于苹果亚科的窄叶火棘、石楠、垂丝海棠、西府海棠和枇杷在 1657  $\text{cm}^{-1}$  处的吸收峰相较其余 2 个亚科出现了红移。李亚科在 1321  $\text{cm}^{-1}$  处的吸收峰强度较强于其他 2 种亚科植物。由此可知,不同种类蔷薇科植物叶片的蛋白质、草酸钙、多糖等含量存在差异,利用这些差异可以将不同种类的蔷薇科植物在亚科级别上进行区分。

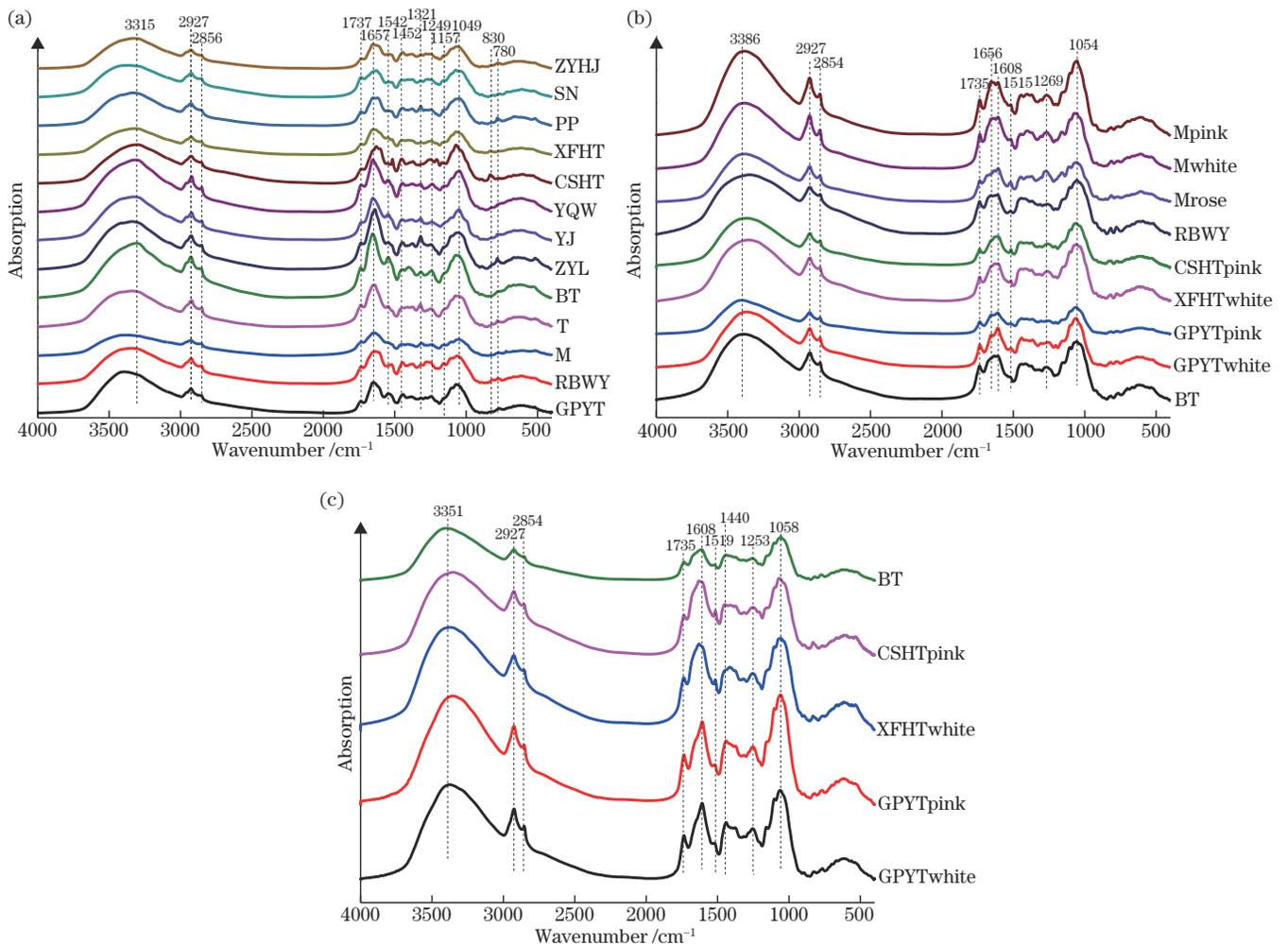


图 1 蔷薇科植物叶片、花瓣及雄蕊 FTIR 光谱。(a) 叶片;(b) 花瓣;(c) 雄蕊

Fig. 1 FTIR spectra of leaves, petals and stamens of Rosaceae plants. (a) leaves; (b) petals; (c) stamens

图 1(b)、图 1(c) 为蔷薇科植物花瓣和雄蕊的 FTIR 光谱,与叶片光谱相比,其出现 2 个不同的吸收峰,位于 1608  $\text{cm}^{-1}$  和 1519  $\text{cm}^{-1}$  附近,1608  $\text{cm}^{-1}$  处的吸收峰说明花中存在的芳香类成分,1519  $\text{cm}^{-1}$  处的吸

收峰为苯环骨架振动,这 2 个吸收峰可能源于酚类物质<sup>[29]</sup>。

PCA 利用彼此独立的少数综合指标或几个主要因素,综合反映出原有数据的多因素信息,从而简化数

据结构<sup>[8-9,18]</sup>。将所采集的 170 个叶片光谱、120 个花瓣光谱、50 个雄蕊光谱进行基线校正和平滑处理后,进行 PCA。图 2 为 PCA 在 4000~400  $\text{cm}^{-1}$  范围内的得分图,前 2 个主成分(PC)解释了 96% 的方差。对第一主成分(PC-1)贡献较大的谱带在 1658、1544、1321、1052  $\text{cm}^{-1}$  附近,这 4 个吸收峰对应酰胺 I 带

(1658  $\text{cm}^{-1}$ )、酰胺 II 带(1544  $\text{cm}^{-1}$ )、草酸钙(1321  $\text{cm}^{-1}$ )、糖类物质(1052  $\text{cm}^{-1}$ )。对第二主成分(PC-2)贡献较大的谱带在 1650、1540  $\text{cm}^{-1}$  附近,由此推断叶片与花瓣在 PCA 中的主要分类依据为蛋白质含量差异。而叶片和花瓣光谱与雄蕊光谱在 PCA 中的主要分类依据为蛋白质、草酸钙和多糖含量差异。

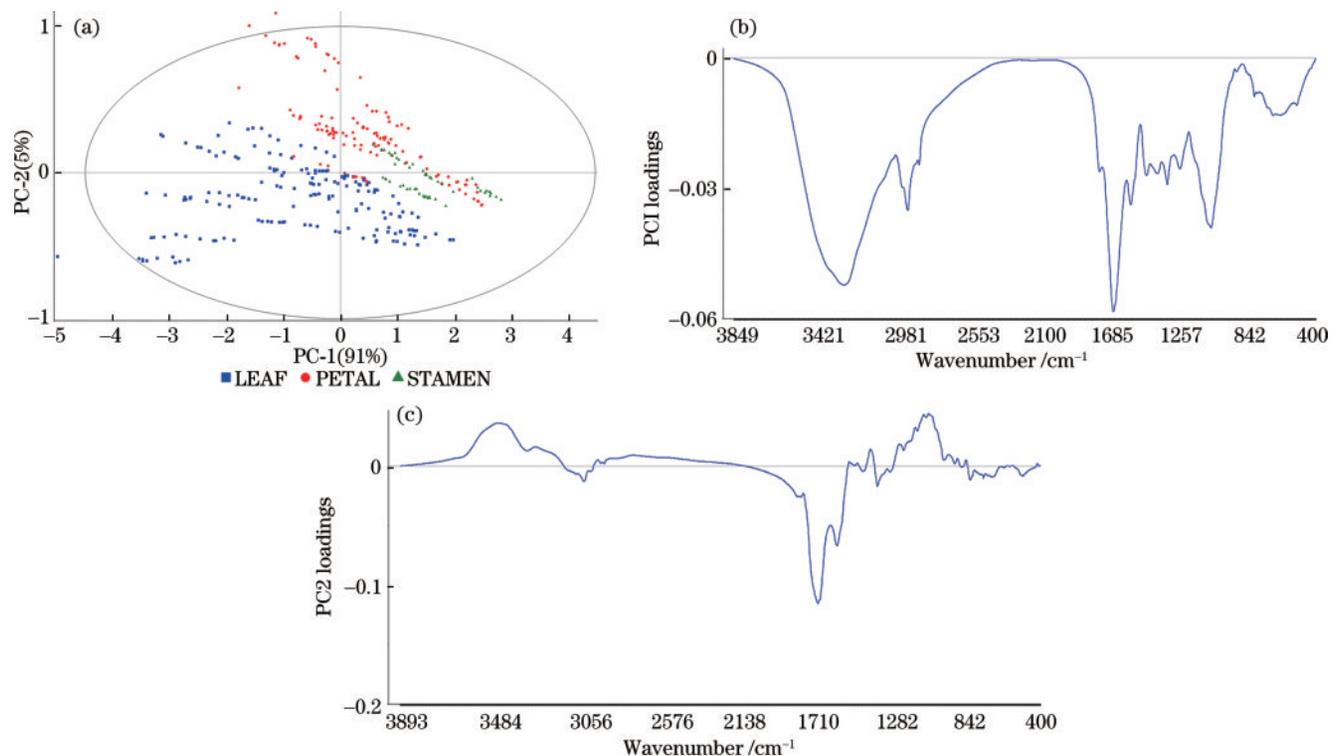


图 2 蔷薇科植物叶片、花瓣及雄蕊在 4000~400  $\text{cm}^{-1}$  范围的 PCA。(a)得分图;(b)PC-1 载荷图;(c)PC-2 载荷图

Fig. 2 PCA of leaves, petals and stamens of the Rosaceae plants in the range of 4000–400  $\text{cm}^{-1}$ . (a) Score plots; (b) PC-1 loading plots; (c) PC-2 loading plots

由图 2 可知,花瓣与叶片、雄蕊光谱在 PCA 得分图中有少部分重叠,而 SIMCA 是一种基于 PCA 的有监督模式识别方法,可以利用 SIMCA 来解决 PCA 在建模时不包含分类信息,因而不能直接用于模式识别的问题<sup>[26-28]</sup>。在本文中考虑用 SIMCA 判别分类模型(PCA-Class)对蔷薇科植物不同叶片、花瓣及雄蕊的 FTIR 光谱进行区分。按 7:3 的比例将已有的光谱数据

在 1800~800  $\text{cm}^{-1}$  范围和 4000~400  $\text{cm}^{-1}$  范围分为训练集和测试集 2 个部分,应用 SIMCA 对其进行区分。通过选择描述每个类别所需的适当数量的 PC,可以分别对每个类别(分类单元)进行建模。基于植物叶片、花瓣及雄蕊的 FTIR 光谱的 SIMCA 分类模型,如表 2 所示。由表 2 可知,在 340 个光谱中选择 102 个进行外部验证。在 4000~400  $\text{cm}^{-1}$  范围内的总正确分类率达到

表 2 基于蔷薇科不同植物叶片、花瓣及雄蕊的 FTIR 光谱的 SIMCA 分类

Table 2 Classification by SIMCA based on FTIR spectra of leaves, petals and stamens of different Rosaceae plants

Wavenumber range / $\text{cm}^{-1}$	Part of plant	Total number of spectra	Number of spectra in training set	Number of spectra in test set	Correct classification rate of test set / %
4000–400	Leaf	170	119	51	96.08
	Petal	120	84	36	100
	Stamen	50	35	15	86.67
	Total	340	238	102	96.08
1800–800	Leaf	170	119	51	100
	Petal	120	84	36	100
	Stamen	50	35	15	100
	Total	340	238	102	100

96.08%，其中雄蕊的分类正确率(86.67%)低于其他二者，叶片和花瓣的正确分类率分别达到96.08%和100%。在1800~800 cm<sup>-1</sup>范围内的正确分类率均达到100%，这可能是因为蔷薇科植物不同叶片、花瓣及雄蕊的FTIR光谱在4000~400 cm<sup>-1</sup>范围内相似性更大，尤其是4000~2000 cm<sup>-1</sup>波段，吸收趋势基本一致，仅相对强度上有所差异。因此，将范围缩小更有利于模型提取不同叶片、花瓣及雄蕊光谱的差异值，从而进行更精确的分类。

### 3.2 13种蔷薇科叶片的PCA和HCA

在1800~1000 cm<sup>-1</sup>范围对不同种类的蔷薇科植物进行PCA，图3为13种不同蔷薇科植物的PCA得

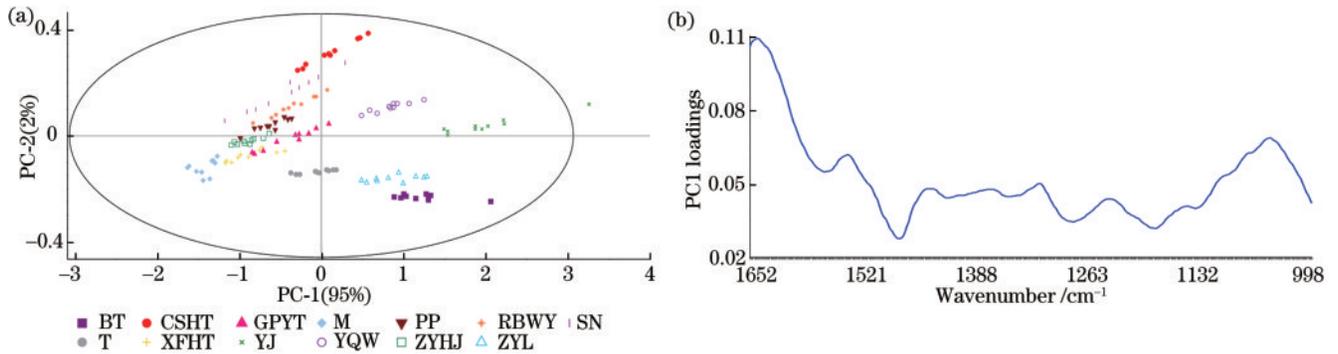


图3 13种不同蔷薇科植物叶片在1660~1000 cm<sup>-1</sup>范围的PCA。(a)得分图；(b)PC-1载荷图

Fig. 3 PCA of leaves of 13 different Rosaceae plants in the range of 1660–1000 cm<sup>-1</sup>. (a) Score plots; (b) PC-1 loading plots

HCA多用于数理统计中的分类研究，其可将具有类似属性的事物聚为一类<sup>[7,9-10]</sup>。将原始光谱数据平滑、基线校正处理后，对其进行二阶求导，在1800~800 cm<sup>-1</sup>范围进行HCA，结果如图4所示。图4中，野

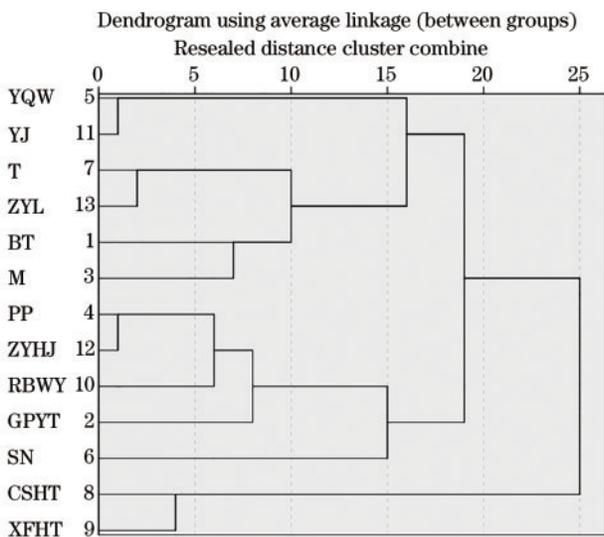


图4 13种不同蔷薇科植物叶片在1800~800 cm<sup>-1</sup>范围内的HCA  
Fig. 4 HCA of leaves of 13 different Rosaceae plants in the range of 1800–800 cm<sup>-1</sup>

蔷薇和月季被聚为一类，同为蔷薇亚科，聚类正确，且二者相关系数最高(0.926)。苹果亚科中同为苹果属的垂丝海棠和西府海棠单独聚为一类。李亚科中桃、紫叶

李、碧桃、梅聚为一类，苹果亚科中枇杷、窄叶火棘、石楠与李亚科中同为樱属的高盆樱桃和日本晚樱聚为一类。由此可知，亲缘关系最近的为蔷薇亚科中的野蔷薇和月季，与传统分类结果相一致。苹果亚科中的枇杷和窄叶火棘，桃和紫叶李次之，这与其在图3(a)中所表现出的聚集情况相符。此外，同为苹果属的2个品种的海棠聚类相关系数也达到0.892。综上所述，分属3个亚科的13种蔷薇科植物，在亚科级别的聚类正确率为85%。

李、碧桃、梅聚为一类，苹果亚科中枇杷、窄叶火棘、石楠与李亚科中同为樱属的高盆樱桃和日本晚樱聚为一类。由此可知，亲缘关系最近的为蔷薇亚科中的野蔷薇和月季，与传统分类结果相一致。苹果亚科中的枇杷和窄叶火棘，桃和紫叶李次之，这与其在图3(a)中所表现出的聚集情况相符。此外，同为苹果属的2个品种的海棠聚类相关系数也达到0.892。综上所述，分属3个亚科的13种蔷薇科植物，在亚科级别的聚类正确率为85%。

李、碧桃、梅聚为一类，苹果亚科中枇杷、窄叶火棘、石楠与李亚科中同为樱属的高盆樱桃和日本晚樱聚为一类。由此可知，亲缘关系最近的为蔷薇亚科中的野蔷薇和月季，与传统分类结果相一致。苹果亚科中的枇杷和窄叶火棘，桃和紫叶李次之，这与其在图3(a)中所表现出的聚集情况相符。此外，同为苹果属的2个品种的海棠聚类相关系数也达到0.892。综上所述，分属3个亚科的13种蔷薇科植物，在亚科级别的聚类正确率为85%。

### 3.3 蔷薇科植物不同花色植株的HCA和PCA

蔷薇科植物观赏性较高，同一种类蔷薇科植物的不同植株会存在花色不同的情况。选取粉色和白色两种不同花瓣颜色的高盆樱桃和海棠植株对应的叶片、花瓣及雄蕊在1800~800 cm<sup>-1</sup>范围的光谱数据进行HCA，分析蔷薇科植物不同种类和叶片、花瓣及雄蕊与其植株花瓣颜色之间的相关性。由图5可知，高盆樱桃白色、粉色花瓣植株，海棠白色、粉色花瓣植株，高盆樱桃白色、粉色花瓣植株所对应的叶片和雄蕊，海棠白色、粉色花瓣植株的雄蕊在树状图中距离最近。

高盆樱桃的白色、粉色花瓣在HCA结果中相关系数最高(0.998)。其次是海棠的白色、粉色花瓣。高盆樱桃的白色、粉色花瓣植株的叶片相关系数也达到0.997，然后是其两种花色植株所对应的雄蕊。海棠的聚类相关系数比高盆樱桃略低，这可能是海棠的品种是垂丝海棠和西府海棠两个品种，亲缘关系不如两种

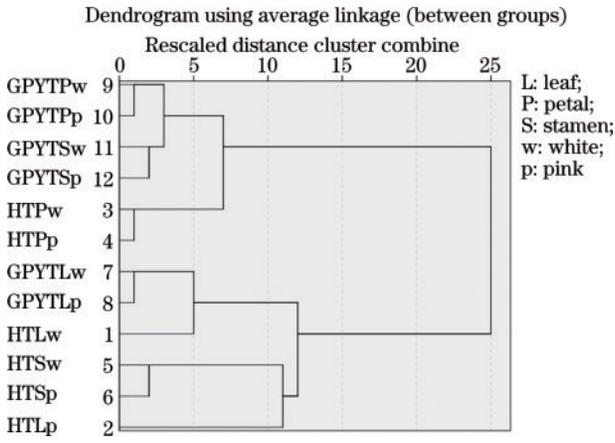


图 5 高盆樱桃和海棠在 1800~800 cm<sup>-1</sup> 范围内粉色及白色花瓣植株的叶片、花瓣及雄蕊 HCA  
Fig. 5 HCA of the leaves, petals and stamens of pink and white petals plants of *Cerasus cerasoides* (D. Don) Sok. and *Malus spectabilis* in the range of 1800~800 cm<sup>-1</sup>

不同花色植株的高盆樱桃近。

结合图 5 树状图结果及各类间相关系数可得, 不同花色植株的叶片、花瓣及雄蕊首先各自聚为小类, 说明同一种蔷薇科植物不同花色植株的叶片、花瓣及雄蕊内部化学组成成分相似度高。

图 6 为上述两种蔷薇科植物不同花色植株的叶片、花瓣及雄蕊在 1600~1000 cm<sup>-1</sup> 范围的 PCA 得分图。由图 6 可知, 两种植物两种不同颜色的叶片聚集

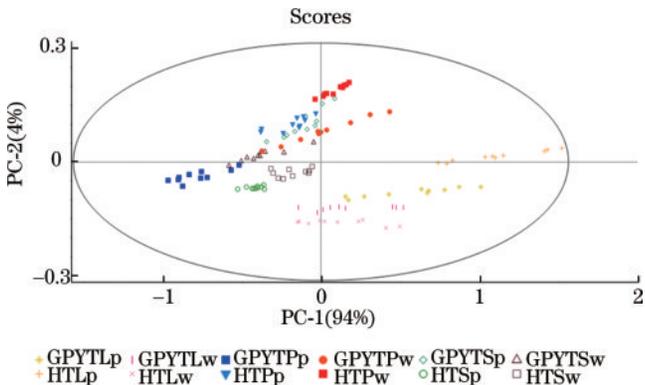


图 6 高盆樱桃和海棠的粉色及白色花瓣植株的叶片、花瓣及雄蕊在 1600~1000 cm<sup>-1</sup> 范围的 PCA  
Fig. 6 PCA of leaves, petals and stamens of pink and white petals plants of *Cerasus cerasoides* (D. Don) Sok. and *Malus spectabilis* in the range of 1600~1000 cm<sup>-1</sup>

在得分图的右下角。

不同花色的不同蔷薇科植物叶片在 1800~1000 cm<sup>-1</sup> 范围内除梅的白花、粉花植株叶片之外, 分别聚集为 7 个部分, 如图 7 所示。梅的白花与粉花植株所对应的叶片在得分图中重叠, 这可能是部分梅花品种在开花过程中会有花瓣色泽的淡化, 通常在盛开期部分花瓣由粉色逐渐减退为白色。因此, 梅花花瓣的白色与粉色可能在成分及含量上相似性较大。

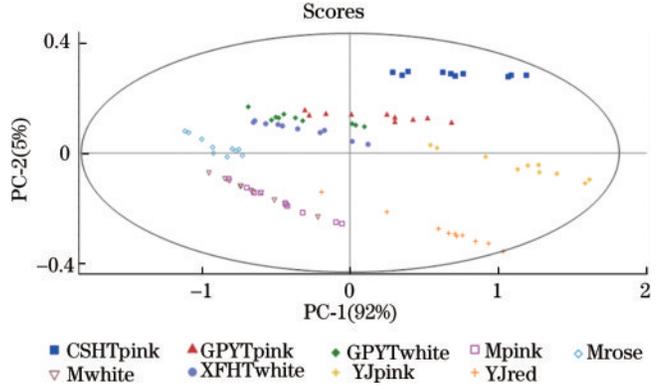


图 7 不同花瓣颜色的不同蔷薇科植物叶片在 1800~1000 cm<sup>-1</sup> 范围的 PCA  
Fig. 7 PCA of leaves of different Rosaceae plants with different petal colors in the range of 1800~1000 cm<sup>-1</sup>

### 3.4 13 种蔷薇科植物叶片光谱信息结合 SIMCA 模型分析判别

利用蔷薇科植物叶片光谱数据结合 SIMCA 判别分类模型对蔷薇科植物不同种类及不同花色进行区分。

在 1800~800 cm<sup>-1</sup> 范围内 13 种蔷薇科植物叶片 FTIR 光谱的 SIMCA 判别分类模型的结果, 如表 3 所示。鉴于表 2 的结果, 直接在 1800~800 cm<sup>-1</sup> 范围按比例将光谱数据分为训练集和测试集两个部分。由表 3 可知, 在总共 319 个光谱中, 13 种不同蔷薇科植物种类均为 100% 的正确分类率, 说明在 1800~800 cm<sup>-1</sup> 范围内的 FTIR 光谱信息能够将不同亚科、不同属的蔷薇科植物完全区分。同时, 在不同花色植株的蔷薇科植物叶片的 173 个光谱中选择 51 个进行外部验证, 每个研究分类单元的正确分类率为 100%, 不同花色植株的高盆樱桃、梅、海棠、月季叶片均按照花瓣颜色的差异被正确分开。

表 3 1800~800 cm<sup>-1</sup> 范围内 13 种蔷薇科植物叶片 FTIR 光谱的 SIMCA 分类

Table 3 Classification by SIMCA based on FTIR spectra of leaves of 13 different Rosaceae plants in the range of 1800~800 cm<sup>-1</sup>

Plant sample code	Color of petals	Total number of spectra	Number of spectra in training set	Number of spectra in test set	Correct classification rate of test set / %
GPYT	White	20	14	6	100
	Pink	20	14	6	100
M	White	20	14	6	100
	Pink	21	14	7	100

表 3 (续)

Plant sample code	Color of petals	Total number of spectra	Number of spectra in training set	Number of spectra in test set	Correct classification rate of test set /%
	Rose	20	14	6	100
XFHT	White	20	14	6	100
CSHT	Pink	19	14	5	100
	Red	16	12	4	100
YJ	Pink	17	12	5	100
BT		16	12	4	100
PP		17	12	5	100
YQW		15	11	4	100
SN		20	14	6	100
T		20	14	6	100
YH		19	14	5	100
ZYHJ		19	14	5	100
ZYL		20	14	6	100
Total		319	227	92	100

## 4 结 论

在不同种类蔷薇科植物叶片、花瓣及雄蕊 FTIR 光谱的基础上,结合 PCA、HCA 对其亲缘关系进行研究,可以将 13 种蔷薇科植物在亚科级别上进行分类,同时结合 SIMCA 判别模型在 1800~800  $\text{cm}^{-1}$  范围可以 100% 将其叶片、花瓣及雄蕊进行正确分类。最终,利用 SIMCA 判别模型在亚科、属级别上将 13 种不同种类的蔷薇科植物叶片正确分类,同时还能根据花瓣颜色的不同,将同一蔷薇科植物叶片进一步细分。结果表明,FTIR 光谱结合多元统计分析方法可用于蔷薇科植物的分类及亲缘关系的分析、品种鉴定。

### 参 考 文 献

- [1] 邹东廷,王庆刚,罗奥,等. 中国蔷薇科植物多样性格局及其资源植物保护现状[J]. 植物生态学报, 2019, 43(1): 1-15.  
Zou D T, Wang Q G, Luo A, et al. Species richness patterns and resource plant conservation assessments of Rosaceae in China[J]. Chinese Journal of Plant Ecology, 2019, 43(1): 1-15.
- [2] 徐廷志. 云南蔷薇科植物的区系特征和地理分布[J]. 云南植物研究, 2001, 23(2): 135-142.  
Xu T Z. The floristic characteristics and geographical distribution of Rosaceae in Yunnan[J]. Acta Botanica Yunnanica, 2001, 23(2): 135-142.
- [3] 王瑞江. 中国植物分类及标本采集史简述[J]. 广西植物, 2022, 42(增刊 1): 62-70.  
Wang R J. A concise introduction to the plant taxonomy and specimen collection in China[J]. Guihaia, 2022, 42(S1): 62-70.
- [4] 金梦然,袁航,黄大庄. 基于叶形和叶脉特征的植物数字化分类研究[J]. 林业与生态科学, 2020, 35(1): 112-118.  
Jin M R, Yuan H, Huang D Z. Study on digital classification of plants based on characteristics of leaf shape and leaf vein[J]. Forestry and Ecological Sciences, 2020, 35(1): 112-118.
- [5] 孙权,周广柱,李竹林,等. 蔷薇科(Rosaceae)植物标本及其数字化处理技术研究[J]. 沈阳农业大学学报(社会科学版), 2014, 16(3): 353-357.  
Sun Q, Zhou G Z, Li Z L, et al. The digitized technology research of exsiccata of Rosaceae plants[J]. Journal of Shenyang Agricultural University (Social Sciences Edition), 2014, 16(3): 353-357.
- [6] 田欢. 7 种蔷薇科植物叶表皮特征的显微结构观察[J]. 南方农机, 2020, 51(19): 78-79, 91.  
Tian H. Microstructure observation of leaf epidermis characteristics of seven Rosaceae plants[J]. China Southern Agricultural Machinery, 2020, 51(19): 78-79, 91.
- [7] 孙佳,曾丽,刘正宇,等. 微型月季品种分类的花粉形态学[J]. 中国农业科学, 2009, 42(5): 1867-1874.  
Sun J, Zeng L, Liu Z Y, et al. Classification of Rosa hybrida var. minima cultivars by pollen morphology[J]. Scientia Agricultura Sinica, 2009, 42(5): 1867-1874.
- [8] 曹馨艺,金尚忠,侯彬,等. 基于拉曼光谱的花粉检测及分类方法[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(13): 133001.  
Cao X Y, Jin S Z, Hou B, et al. Pollen detection and classification method via Raman spectroscopy[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(13): 133001.
- [9] 邱璐,李晓勇,刘鹏,等. 九种蔷薇科植物叶片的傅里叶红外光谱与亲缘关系分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(2): 344-349.  
Qiu L, Li X Y, Liu P, et al. Analysis of leave FTIR of nine kinds of plants from Rosaceae with genetic relationship[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2014, 34(2): 344-349.
- [10] 史艳财,邹蓉,唐健民,等. FTIR 结合 DNA 条形码鉴定黄花蒿及其近缘植物[J]. 分子植物育种, 2018, 16(15): 5117-5125.

- Shi Y C, Zou R, Tang J M, et al. Combination of FTIR and DNA barcode for identification of artemisia annual L. and its closely related species[J]. Molecular Plant Breeding, 2018, 16(15): 5117-5125.
- [11] Thummajitsakul S, Samaikam S, Tacha S, et al. Study on FTIR spectroscopy, total phenolic content, antioxidant activity and anti-amylase activity of extracts and different tea forms of *Garcinia schomburgkiana* leaves[J]. LWT, 2020, 134: 110005.
- [12] 张娇, 王元忠, 杨维泽, 等. ATR-FTIR 和 UV-Vis 结合数据融合策略鉴别滇黄精产地[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(5): 1410-1416.  
Zhang J, Wang Y Z, Yang W Z, et al. Data fusion of ATR-FTIR and UV-vis spectra to identify the origin of polygonatum kingianum[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41(5): 1410-1416.
- [13] 顾志荣, 马天翔, 孙岚萍, 等. 基于傅里叶变换红外光谱及化学计量学方法的不同产地锁阳药材分类鉴别[J]. 中国实验方剂学杂志, 2019, 25(22): 159-165.  
Gu Z R, Ma T X, Sun L P, et al. Classification and identification of cynomorii herba from different producing areas based on Fourier transform infrared spectroscopy and chemometrics[J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2019, 25(22): 159-165.
- [14] 张惠敏, 侯黔东, 吴亚维, 等. 基于 Raman 和 FTIR 揭示避雨栽培甜樱桃叶片光合色素变化的光谱学分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2021, 41(4): 1171-1176.  
Zhang H M, Hou Q D, Wu Y W, et al. Spectral analysis of changes in photosynthetic pigment composition in leaves of sweet cherry tree under rain-shelter cultivation based on Raman and FTIR[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021, 41(4): 1171-1176.
- [15] Kucharska-Ambrożej K, Martyna A, Karpińska J, et al. Quality control of mint species based on UV-VIS and FTIR spectral data supported by chemometric tools[J]. Food Control, 2021, 129: 108228.
- [16] Zhao M T, Zhang D W, Zheng L L, et al. Rapid quantitative detection of mineral oil contamination in vegetable oil by near-infrared spectroscopy[J]. Chinese Optics Letters, 2020, 18(4): 043001.
- [17] Li L, Zhao Y L, Li Z M, et al. Multi-information based on ATR-FTIR and FT-NIR for identification and evaluation for different parts and harvest time of *Dendrobium officinale* with chemometrics[J]. Microchemical Journal, 2022, 178: 107430.
- [18] 余格, 刘惠, 樊启猛, 等. 不同花期发育时期金银花的 ATR-FTIR 结合模式识别分析[J]. 时珍国医国药, 2020, 31(11): 2670-2672.  
Yu G, Liu H, Fan Q M, et al. Analyzing lonicera japonicae flos in different flower development stages by ATR-FTIR and mode identification methods[J]. Lishizhen Medicine and Materia Medica Research, 2020, 31(11): 2670-2672.
- [19] Akwu N A, Naidoo Y, Singh M. A comparative study of the proximate, FTIR analysis and mineral elements of the leaves and stem bark of *Grewia lasiocarpa* E.Mey. ex Harv.: an indigenous southern African plant[J]. South African Journal of Botany, 2019, 123: 9-19.
- [20] Mees C, Souard F, Delporte C, et al. Identification of coffee leaves using FT-NIR spectroscopy and SIMCA[J]. Talanta, 2018, 177: 4-11.
- [21] 王德发, 张体强, 刘智勇, 等. 一氧化氮标准气体中二氧化氮杂质 FTIR 定量方法研究及标气质量分析[J]. 中国环境监测, 2022, 38(2): 185-190.  
Wang D F, Zhang T Q, Liu Z Y, et al. Measurement of nitrogen dioxide impurity in nitrogen monoxide standard gas by FTIR with discussion on the influence factors to the mixture quality[J]. Environmental Monitoring in China, 2022, 38(2): 185-190.
- [22] 盛润坤, 陈晨, 王大伟, 等. 基于 FTIR 和 UV-DOAS 联用技术的烟气在线监测系统的应用研究[J]. 中国环保产业, 2020(7): 64-67, 72.  
Sheng R K, Chen C, Wang D W, et al. Research on the application of on-line monitoring system for flue gas emission based on the combination of FTIR and UV-DOAS[J]. China Environmental Protection Industry, 2020(7): 64-67, 72.
- [23] Esther Elizabeth Grace C, Lakshmi P K, Meenakshi S, et al. Biomolecular transitions and lipid accumulation in green microalgae monitored by FTIR and Raman analysis[J]. Spectrochimica Acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2020, 224: 117382.
- [24] 何沐飞, 张景坤, 米巨磊, 等. 烃源岩中可溶有机质的 FTIR 地球化学意义探讨: 以准噶尔盆地二叠统风城组为例[J]. 石油实验地质, 2021, 43(6): 1048-1053, 1063.  
He M F, Zhang J K, Mi J L, et al. Organic geochemical study of FTIR analysis on source rock extracts: a case study of Lower Permian Fengcheng Formation in Junggar Basin, NW China[J]. Petroleum Geology & Experiment, 2021, 43(6): 1048-1053, 1063.
- [25] Pärnpuu S, Astover A, Tonutare T, et al. Soil organic matter qualification with FTIR spectroscopy under different soil types in Estonia[J]. Geoderma Regional, 2022, 28: e00483.
- [26] Foschi M, D'Addario A, Antonio D'Archivio A, et al. Future foods protection: supervised chemometric approaches for the determination of adulterated insects' flours for human consumption by means of ATR-FTIR spectroscopy[J]. Microchemical Journal, 2022, 183: 108021.
- [27] Khanban F, Bagheri Garmarudi A, Parastar H, et al. Evaluation of FT-IR spectroscopy combined with SIMCA and PLS-DA for detection of adulterants in pistachio butter[J]. Infrared Physics & Technology, 2022, 127: 104369.
- [28] 夏立娅, 李小亭, 李晓杨, 等. 矿物元素结合簇类独立软模式法对冬枣产地判别模型的优化[J]. 河北大学学报(自然科学版), 2016, 36(4): 374-379.  
Xia L Y, Li X T, Li X Y, et al. Optimization of traceability model of Ziziphus jujuba geographic origin by multi-element analysis combined SIMCA[J]. Journal of Hebei University (Natural Science Edition), 2016, 36(4): 374-379.
- [29] 薛欣欣, 王文斌, 罗雪华, 等. 钾镁胁迫对橡胶幼苗叶

片物质成分影响的 FTIR 表征[J]. 光谱学与光谱分析, 2022, 42(1): 74-79.

Xue X X, Wang W B, Luo X H, et al. FTIR spectroscopic characterization of material composition in leaf of hevea brasiliensis seedlings under potassium and magnesium deficiency[J]. Spectroscopy and Spectral

Analysis, 2022, 42(1): 74-79.

[30] 孙素琴, 周群, 陈建波. 中药红外光谱分析与鉴定[M]. 北京: 化学工业出版社, 2010.

Sun S Q, Zhou Q, Chen J B. Analysis of traditional Chinese medicine by infrared spectroscopy[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2010.