

# 近红外分析技术在中药鉴定和含量测定中的应用研究进展

战皓, 柳梦婷, 方婧, 付梅红\*

(中国中医科学院 中药研究所, 北京 100700)

**[摘要]** 近红外光谱法在中药研究和生产中的应用起步虽晚,但却发展迅猛。近年来中药质量问题一直备受争议,中药市场还相当混乱,采取一种分析技术对假、劣伪中药材的鉴定,是改善中药市场现状,保证人民用药安全的有效方法。作为一种高新分析技术,近红外光谱法在中药鉴定和含量测定中的应用更加广泛,用 NIRS 对中药进行定性分析和含量测定,具有高效、便捷、无损、环保,无前期预处理、无污染、无破坏性,结果准确等优势,在中药定性鉴别和定量检测中具有十分重要的科学意义和实用价值。然而近红外光谱的有效信息提取利用率低,对微弱信息识别困难,相对灵敏度低,不适合痕量分析等缺点也是未来需要完善的方向。文章中综述了近年来近红外光谱分析技术在中药材真伪、掺伪、产地、同属中药品种及中成药的鉴别方面和含量测定方面的研究进展。

**[关键词]** 近红外; 中药鉴别; 含量测定

**[中图分类号]** R282 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2015)12-0231-05

**[doi]** 10.13422/j.cnki.syfjx.2015120231

**Application of Near Infrared Analytical Technique in Identification and Content Determination of Traditional Chinese Medicine** ZHAN Hao, LIU Meng-ting, FANG Jing, FU Mei-hong\* (*Institute of Chinese Materia Medica China Academy of Chinese Medical Sciences, Beijing 100700, China*)

**[Abstract]** Near infrared spectroscopy in the application of traditional Chinese medicine (TCM) research and production develops rapidly although started a little bit late. In recent years, the quality problem of TCM has been controversial, and TCM market is in quite a chaos. It is an effective way to take an analysis technique to identify the false and inferior Chinese medicinal materials to control the quality to improve the present situation of TCM market, and to ensure the safety of people's drug usage. As a new analysis technique, near infrared spectroscopy in the application of identification and content determination of TCM becomes more and extensive. It is a highly effective, convenient and nondestructive and environment-friendly method to perform qualitative analysis and determine the content of TCM by using NIRS. It is of great significance and value to use NIR in the qualitative identification and quantitative detection of Chinese medicine. However, the effective information extraction rate by near infrared spectrum is low, and it is relatively difficult to identify the weak signal with relatively low sensitivity, which is not suitable for trace analysis. It needs to improve in the future. In this article, the research progresses in recent years on the application of near infrared spectral analysis technology in the identification of authenticity, adulteration, production area, and variety of TCMs, and content determination were reviewed.

**[Key words]** near infrared; traditional Chinese medicine identification; content determination

近红外光谱(near infrared reflectance spectroscopy, NIRS)是介于可见(VIS)光与中红外(MIR)光之间的电磁波,其谱区范围为 780~2 526 nm(12 820~3 959  $\text{cm}^{-1}$ ),是人们认识最早的非可见光区域,是一种间接分析技术。具有分析速度

快,可同时分析多种成分,无污染,样品不需特别预处理,不使用有毒、有害试剂,不对样品造成损伤,可实时分析和远距离测定,操作简单,分析成本低等优点<sup>[1]</sup>。近年来,中药材的真伪、掺假及是否为道地药材等直接影响了中药材的质

**[收稿日期]** 20141015(011)

**[基金项目]** 中医药行业科研专项(201407003)

**[第一作者]** 战皓, 硕士, 从事中药化学研究, Tel:17801085760, E-mail: zhanhao\_1992@163.com

**[通讯作者]** \* 付梅红, 研究员, 从事中药化学研究, Tel:010-64062692, E-mail: fu00126@sina.com

量,大大降低药材的药用效果,引起了越来越多的关注,随着计算机技术和化学计量学的发展,近红外光谱已经逐渐被人们所熟悉并认可,作为一种高新分析技术,近红外分析技术应用也越来越广泛,保护药材资源,改善药材市场现状,近红外利用其优势在中药鉴定和含量测定中具有更重要的实用价值。然而,现阶段近红外的应用在中药领域的发展还受到限制,存在有效利用率低,相对灵敏度低,不适合痕量分析等缺点,为了将近红外技术更好地应用于中药分析领域,需要结合中药材自身的特点,学习开发对中药体系的近红外光谱有效信息的提取和处理技术,本文总结了近年来近红外光谱在中药材定性和定量测定方面的研究经验,近红外可以作为一种分析技术将对中药研究和生产现代化发挥重要的推动作用。

## 1 中药鉴定

随着我国中药材市场的快速发展,由于中药自身的特殊性以及一些商家只重视经济效益,忽视市场中法制建设的各种行为,目前中药材、中药饮片的生产、经营还相当混乱,假、劣伪中药材仍屡禁不止,严重危害人民身体健康和生命安全。因此,需要一种简便、快速、可靠、易推广的中药鉴定技术。近红外光谱分析技术可以有效的实现对中药真伪鉴别、中药掺伪鉴别、同种中药产地鉴别、同属中药种类鉴别、中成药的鉴别。

**1.1 中药真伪鉴别** 中药的真伪优劣鉴别自古以来为医家所重视,中药材的伪品直接影响了中药的质量,大大降低了医疗效果,因此中药质量的可控性研究是中医药界关注的热门课题。

吴志刚等<sup>[2]</sup>应用近红外模型的建立,结合药品检测车的运行实践,有效的用于快速鉴别中药材地骨皮和伪品毛叶探春。黄必胜等<sup>[3]</sup>应用近红外光谱技术建立相应的定性模型,看出龙齿药材各部位采集的光谱信息有所差异,药材粉末光谱信息重复性较好,利用聚类分析法快速准确鉴别龙齿真伪品。孙丽英等<sup>[4]</sup>采集不同产地的黄柏药材及其伪品的近红外漫反射光谱,用模式识别方法进行聚类分析,建立判别模型并用三重交叉验证的方法对模型稳定性进行验证,能将黄柏样品与伪品较好地地区分开。对大黄的鉴别,学者采用近红外光谱法多做研究,姜轲<sup>[5]</sup>使用近红外光谱仪对多种不同产地的大黄样品进行了图谱扫描,采用反向传播多层前向神经网络对大黄的近红外图谱进行分类判别,鉴别正品大黄和非正品大黄。将近红外光谱结合人工神经网络对正品大黄和非正品大黄进行鉴别,为药用大黄的鉴别提供了一种快速有效的方法。

**1.2 中药掺伪鉴别** 近几年随着中药市场的不断开放,中药出现蓬勃发展的一派大好景象,然而,一些不法商贩为了减少药物成本,扩大商品的用药范围,变相提高价格,擅自在商品中掺入违禁成分,极大地危害了人民的身体健康。中药掺杂违禁化合物,通常就是添加与相应中药功能相似但成本

较低的成分,以发挥快速明显的疗效。中药掺杂化学药物的预防与打击,很大程度上依赖于分析检测的能力。

胡钢亮等<sup>[6]</sup>应用近红外漫反射光谱技术和化学计量学手段,通过偏最小二乘法得到最佳校正模型,建立了快速检测川贝母中浙贝母掺入量的新方法,这种方法快速方便、结果准确,可以应用于中药材的品质分析和质量控制中。张治军等<sup>[7]</sup>利用近红外光谱仪,采用矢量归一加二阶导数法和因子化法建立质量鉴别模型,能准确无误地鉴别冰片及掺伪品,这种方法快速、准确、无损,可在药品快检车和日常的监督抽样中推广应用。方彩飞<sup>[8]</sup>采用近红外模式技术,通过车载近红外软件,建立能控制海金沙质量的定量模型,探讨近红外光谱在中药质量控制方面的应用,实现对海金沙掺伪情况的定量分析。刘荔荔等<sup>[9]</sup>利用近红外漫反射光谱技术,运用偏最小二乘法建立数学模型,测定出西洋参中人参的掺入量,实现中药掺伪的快速鉴别。

**1.3 同种中药产地鉴别** 产地对药效的影响是多方面的,产地本身就是一个多因素的复合体,同种药材在不同产地则药效迥异,而在不同的地域及生态位上,又规律分布着不同的药材。在一定自然区域、生态环境下,药材较其他地区的所产者品质佳、疗效好,即所谓的道地药材,近红外已经成为可以快速无损的对药材产地进行鉴别的一种分析技术。

王平等<sup>[10]</sup>将人参片直接放在近红外反射光谱仪上测定比较后,发现吉林人参的光谱信号强于辽宁人参,但其二级微分图分散度和漂移小于辽宁人参,有效的对指标不明的道地药材进行鉴别。刘友刚等<sup>[11]</sup>利用近红外漫反射光谱法,采用聚类分析方法,通过对原谱求导,一些化学成分的差别能通过峰位、峰数、峰强表现出来作为药材鉴别的依据,可实现不同产地肉苁蓉及其混淆品的有效鉴别,近红外光谱的聚类分析结果与形态分类学鉴别结果一致。张晓慧等<sup>[12]</sup>采用SIMCA模式对5个产地的连翘分别建立了判别模型,能基本识别这5个产地连翘,预测集的10个样品中只有1个被错判,表明该方法具有良好的鉴别分类功能。刘沐华等<sup>[13]</sup>以白芷和丹参为例,用近红外漫反射光谱数据、应用多类支持向量机方法对中药材产地及生长条件进行自动鉴别,达到了92%的识别正确率。结果不仅显示出近红外光谱数据可以有效地应用于中药材自动鉴别递归支持向量机等方法可以有效地完成自动分类和特征谱段选择,更重要地,通过进一步研究所选择出的关键特征谱段范围,可以为今后研究不同产地和生长条件下中药材的成分差异和决定中药药效的关键因素提供重要的线索。刘沐华等<sup>[14]</sup>采用近红外漫反射光谱法结合近邻法和多类支持向量机等模式识别技术,对来自4个不同产地的269个白芷样本和6个不同产地的350个野生和栽培丹参样本进行了产域鉴别,得到的交叉验证准确率分别达到99%和95%,为中药材产地的快速无损鉴别探索了一条有效的途径。杜敏等<sup>[15]</sup>利用判别分析法建立定性模型,采用近红外漫反射光谱技术,可用于道地山药饮片的快

速无损鉴别。邢旺兴等<sup>[16-17]</sup>采用近红外漫反射光谱结合聚类分析法分别对不同产地的红曲、通光藤药材进行鉴别,结果与形态学分类结果一致,比常规的光谱鉴别法简便、准确,更具有科学性,为中药鉴定学提供了一种新的方法和手段。陆珺等<sup>[18]</sup>通过二维近红外同步和异步相关光谱对四产地枸杞进行鉴别,所有实验样本的谱图比较均有同样的差异,不同产地枸杞两谱图的差异是由于其活性成分及其含量的不同所致,可以看出,作为一种新型分析技术,二维相关近红外光谱也可在活性物质特征分析、结构分析、相互作用、化学反应等研究领域发挥更大的作用。

**1.4 同属中药种类鉴定** 近红外技术在中药分析领域已有用于药材的真伪鉴别、产地分析、成分定量分析等方面,但对同一科属内的多种形态相近的植物药的分类鉴定,尤其是药用种的种内变异及种间关系研究方面几为空白。

刘浩等<sup>[19]</sup>应用二维相关近红外光谱分析方法,辨别五加皮与香加皮的近红外指纹图谱,借助计算机,实现了快速无损鉴别。张良等<sup>[20]</sup>利用近红外漫反射光谱,并以近红外图谱作为聚类分析对象,快速实现了半夏曲与六神曲的鉴别。万定荣等<sup>[21]</sup>应用傅立叶变换近红外光谱仪,运用近红外漫反射光谱技术对卷柏属药用植物的分类鉴定及聚类分析,10 种卷柏属植物近红外一阶导数光谱的聚类分析结果表现出与传统分类结果的高度一致性,可以发现近红外光谱可简单快速地用于解决药用植物种下分类鉴定的一些疑点问题,可推断某些种间亲缘关系。作为一种形态分类的手段,近红外技术实现了同属中药种类的鉴定。

**1.5 对中成药的鉴别** 近年来有关中成药引起的毒性反应及过敏反应这类报道频繁出现,对中成药的鉴别需要提上日程。近红外技术最大的优势在于分析速度快,以无损的方式从样本中直接获取分析信息,实现中成药的快速鉴别。

白雁等<sup>[22]</sup>采用近红外漫反射光谱法,对 25 个不同生产厂家 82 批一清颗粒制剂进行全光谱扫描,得到光谱图,对所扫描谱图进行聚类分析,分析表明近红外光谱分析可以用于不同厂家一清颗粒的聚类分析,结果与实际归类基本一致。雷永军等<sup>[23]</sup>利用车载近红外系统采集近红外光谱,并利用布鲁克公司 OPUS 软件对光谱进行预处理,建立快速比对模型,然后利用该模型对建模样品和抽验样品的每张原始光谱进行验证,实现万通筋骨片现场快速筛查。任跃龙等<sup>[24]</sup>应用近红外光谱技术,对来自不同厂家妇炎康片采集其近红外光谱,通过计算采集到的样品的近红外光谱图之间的欧氏距离和一致性指数,对 26 批真药及 34 批伪品准确做出判断,这种方法准确可靠、简便快速、不需预处理,可推广用于此类样品的快速检测。史会齐等<sup>[25]</sup>采用近红外漫反射结合判别分析法建立六味地黄丸的定性分析模型,发现同一厂家、不同批号的六味地黄丸样品可以清晰地聚为一类,类与类之间有明显的界限。NIRDIS 判别分析结果与实际样品完全一致,说明 NIRDIS 有较好的重现性和可靠性,使其对中成药进

行快速鉴别成为可能,显示出良好的使用价值和应用前景。

## 2 含量测定

近红外光谱技术是近年来新兴起的一种绿色分析技术,扫描一张光谱可以获得样品的多种信息,与传统分析技术相比,近红外光谱分析技术具有诸多优点,高效、便捷、无损、环保,无前期预处理、无污染、无破坏性,已经广泛用于中药含量测定。

近红外光谱用于定量分析中主要采用多元线性回归(MLR)、偏最小二乘回归(PLS)和主成分回归法(PCR),此外,还有人工神经网络法(ANN)、拓扑(TP)等方法,在分析实际中,有时还需要综合应用。从现有文献看,以应用偏最小二乘法最为常用。

在采用近红外光谱结合偏最小二乘法测定中药中有效成分的含量时,展晓日等<sup>[26]</sup>认为,选择合适的样本划分方法及潜变量数确定方法,能够有效地提高模型的外推能力,是十分必要的。

逯家辉等<sup>[27]</sup>采用近红外(NIR)光谱结合偏最小二乘法(PLS)建立测定八角茴香中莽草酸含量的定量分析模型,这种模型具有较高的预测精度,为中药中有效成分含量的测定提供一种新方法。白雁等<sup>[28-29]</sup>应用近红外光谱技术结合偏最小二乘法,对酒炖熟地黄饮片中的还原糖含量进行了定量分析,给出了定量分析值与偏差,其结果令人满意;对青翘中连翘苷、连翘酯苷 A 及醇浸出物的含量进行测量,为中药的快速质量控制提供了参考。张聪等<sup>[30]</sup>用 HPLC 法测定西红花中西红花苷-I 的含量,并采集相应样品粉末的近红外光谱,用偏最小二乘法建立近红外光谱校正模型来预测未知样本中西红花苷-I 的含量,所建立的校正模型相关系数(R),预测相对偏差(RSEP)分别为 0.953 8, 3.948。

武卫红等<sup>[31]</sup>运用偏最小二乘法(PLS),采用声光可调(AOTF)-近红外光谱(NIRS)技术在线,以 HPLC 测定丹参中丹参酮 II<sub>A</sub> 的含量。王宁等<sup>[32]</sup>建立一种用声光可调近红外光谱技术,以 HPLC 测定丹参中丹参酮 II 和丹酚酸 B 的含量,运用偏最小二乘法建立 NIR 光谱与 2 个成分 HPLC 分析值之间的多元校正模型,对未知样品进行含量预测,为中药生产过程的在线、无损定量分析提供了依据。邵玉蓝等<sup>[33]</sup>利用近红外漫反射光谱与 HPLC 分析技术相结合,采用偏最小二乘法快速测定不同批次丹参饮片中丹参酮 II<sub>A</sub> 含量。这种方法操作简单,测定速度快,效率高,无污染,费用低,无需复杂的前处理及化学反应过程,可以直接对大量未知样品进行测定,为快速鉴定饮片及质量控制提供了新的手段。

最小二乘支持向量机(least square support vector machine, LS-SVM)具有建模速度快、优化参数少、泛化能力强等优点,广泛应用于近红外定性定量分析。徐冰等<sup>[34]</sup>利用近红外分析技术,将其应用于玉米中 4 个组分和连翘中 2 个活性成分的 NIR 分析,结果表明多目标遗传算法配合自适应建模策略可保证优化收敛于全局最优解。朱向荣等<sup>[35]</sup>

应用红外光谱技术结合最小二乘支持向量机建立了国公酒中橙皮苷含量的模型,预测集的相对偏差小于5%,而且所建方法预测结果与HPLC法实测值吻合较好,该方法快速、无损且可靠,可作为围国公酒中橙皮苷含量快速测定的手段。有望应用于国公酒中大批量产品的检测,有助于提高国公酒的质量控制水平。

程伟等<sup>[36]</sup>采用透射模式采集样品近红外光谱数据,以偏最小二乘法建立光谱数据结合HPLC法,测定双黄连口服液液中黄芩苷含量,并进行验证,证实了近红外光谱能够用于双黄连口服液液中一定浓度范围的黄芩苷含量的无损快速分析。朱向荣等<sup>[37]</sup>选取清开灵注射液四混液为研究对象,应用近红外光谱分析技术结合化学计量学方法,用Kennard-Stone法对样本进行训练集和测试集分类后,采用间隔偏最小二乘法进行波段筛选和建立模型,测定其总氮和栀子苷含量,这种方法快速、无损且可靠,推广并应用于中药注射液中间体的在线质量控制。随着研究的深入近红外技术与数学模型等的结合更具综合性和灵活性,这将为近红外技术在中药制剂分析中的应用及拓展奠定坚实的基础。

除上述之外,近红外技术在含量测定中的应用还出现了几种其他的较为成熟的分析方法包括:于晓辉等<sup>[38]</sup>采用近红外光谱分析技术与径向基函数神经网络方法相结合,对42种大黄样品中的5种主要有效成分进行定量预测分析,显示了一定的准确度,应用于中药材组分浓度快速测定,准确、简便、无污染,且可同时多种组分进行检测,结果令人满意。赵玉清等<sup>[39]</sup>应用傅立叶变换近红外光谱仪透射光谱技术,采用主成分分析(PCA)和偏最小二乘回归法(PLS)对黄芪提取液中总皂苷含量进行含量测定,表明采用近红外透射光谱PLS建模直接测定黄芪提取液中总皂苷的含量是可行的。这种方法为地道药材的质量标准及中药的GAP提供了新思路,是一种非常值得推广的绿色分析方法。谷筱玉等<sup>[40]</sup>利用近红外光谱方法,尝试采用遗传算法与模拟退火算法结合的模拟退火遗传算法及物理意义相对明确的多链逐步选择对校正模型的波长进行优选,检测冰片的含量。

### 3 结语

近红外光谱法作为一种高新分析技术具有方便快捷,无污染,无破坏性,无前处理等优势,将NIRS用于对中药真伪、掺伪、产地、种类的鉴别,对中成药的鉴别,可使药材市场更加规范,人民身体健康和生命安全得到保证;用于中药的含量测定,分析速度快,准确性高,无破坏性。总之,近红外技术在中药定性鉴别和定量检测中具有十分重要的科学意义和实用价值。

然而目前NIR光谱有效信息提取利用率低,对复杂样品进行NIR光谱分析需从复杂、重叠、变动的光谱中提取微弱信息,识别非常困难,致使测量化合物时准确性会受到影响;NIRDRS技术分析灵敏度相对灵敏度较低,就组分的分析而言,不适合痕量分析,其含量一般应 $>0.1\%$ ,这将是在

近红外光谱需要开拓和完善的方向。总的来看,近红外光谱技术在中药领域的应用还很有限,但相信随着近红外及其相关技术的不断发展和成熟,近红外光谱在中药研究领域会有更广阔的应用前景,对中药材的检测和鉴定有更实际的意义。

### [参考文献]

- [1] 史春香,祝国光,元英进,等. 近红外光谱在中药质量控制中的应用[J]. 中草药,2005,36(11):1731-1733.
- [2] 吴志刚,丁华,王吉华,等. NIR法快速鉴别中药材地骨皮和其伪品毛叶探春[J]. 中国中医药咨讯,2011,3(15):224-226.
- [3] 黄必胜,袁明洋,余驰,等. 红外及近红外光谱法对真伪龙齿的快速鉴别[J]. 中国现代中药,2013,15(12):1046-1049.
- [4] 孙丽英,杨天鸣,王云英,等. 不同产地黄柏的近红外指纹图谱鉴别分析[J]. 计算机与应用化学,2008,25(3):329-332.
- [5] 姜轲. 大黄的鉴别[J]. 中国中医药现代远程教育,2010,8(12):86-89.
- [6] 胡钢亮,吕秀阳. 川贝母中浙贝母掺入量的快速检测方法研究[J]. 分析试验室,2003,22(增刊):221-223.
- [7] 张治军,饶伟文,钟建理,等. 冰片近红外光谱鉴别模型探讨[J]. 中药材,2008,31(11):1647-1648.
- [8] 方彩飞. 近红外光谱法对海金沙掺伪情况的定量分析[J]. 亚太传统医药,2012,8(2):47-48.
- [9] 刘荔荔,邢旺兴,贾暖,等. 近红外漫反射光谱法测定西洋参中人参的掺入量[J]. 中国中药杂志,2003,28(2):178-179.
- [10] 王平,谢洪平,陈泽琴,等. 中药材人参的道地性差异的近红外光谱研究[J]. 苏州大学学报:医学版,2004,24(5):648-651.
- [11] 刘友刚,徐荣,陈君,等. 近红外反射光谱聚类分析法在肉苁蓉鉴别中的应用[C]. 和田:第六届肉苁蓉暨沙生药用植物学术研讨会,2011.
- [12] 张晓慧,刘建学. 近红外光谱技术鉴别连翘产地[J]. 激光与红外,2008,38(4):342-344.
- [13] 刘沐华,张学工,孙素琴,等. 中药材产地的近红外光谱自动鉴别和特征谱段选择[J]. 科学通报,2005,50(4):393-398.
- [14] 刘沐华,张学工,周群,等. 近红外漫反射光谱法和模式识别技术鉴别中药材产地[J]. 光谱学与光谱分析,2006,26(4):629-632.
- [15] 杜敏,巩颖,吴志生,等. 基于近红外光谱技术的道地山药快速无损分析[C]. 桂林:全国第四届近红外光谱学术会,2012.

(下转封三)

(上接第 234 页)

- [16] 邢旺兴,刘荔荔,贾暖,等.不同产地红曲的近红外漫反射光谱聚类分析鉴别[J].中药材,2001,24(8):561-563.
- [17] 邢旺兴,谷娜,郭胜才,等.近红外漫反射光谱聚类分析法在通光藤鉴别中的应用[J].解放军药学学报,2005,21(5):325-328.
- [18] 陆珺,相秉仁,刘浩,等.二维相关近红外光谱及其应用[J].药学进展,2007,31(7):303-308.
- [19] 刘浩,相秉仁,屈凌波,等.香加皮和五加皮的二维相关近红外光谱快速无损鉴别[J].中国药科大学学报,2006,37(2):181-184.
- [20] 张良,周霞,刘文刚,等.近红外光谱技术无损快速鉴别半夏曲和六神曲[J].中国实用医药,2013,8(1):251.
- [21] 万定荣,江燕,陈科力,等.近红外光谱用于卷柏属药用植物种下类型鉴定及种间关系探讨[C].南昌:第九届全国中药和天然药物学术研讨会,2007.
- [22] 白雁,李艳英.近红外光谱法快速分析不同厂家的一清颗粒[J].中国中药杂志,2008,33(20):2413-2416.
- [23] 雷永军,戴山卫,谢海,等.利用近红外光谱比对技术快速筛查万通筋骨片假药[J].中国药事,2011,25(5):493-494,509.
- [24] 任跃龙,常磊,吕天姿,等.近红外光谱技术对妇炎康片的快速检测[J].中国误诊学杂志,2011,11(33):8192-8193.
- [25] 史会齐,白雁,龚海燕,等.近红外漫反射光谱法快速鉴别不同厂家的六味地黄丸[J].实验技术与管理,2011,28(10):34-37.
- [26] 展晓日,朱向荣,史新元,等.SPXY 样本划分法及蒙特卡罗交叉验证结合近红外光谱用于橘叶中橙皮苷的含量测定[J].光谱学与光谱分析,2009,29(4):964-968.
- [27] 逮家辉,郭伟良,越柏玲,等.基于偏最小二乘法的近红外光谱定量分析模型测定八角茴香中莽草酸含量[J].林产化学与工业,2008,28(5):26-30.
- [28] 白雁,贾永,王东,等.应用近红外漫反射光谱技术测定酒炖熟地黄中的还原糖含量[J].中药材,2006,29(10):1035-1038.
- [29] 白雁,段小彦,雷敬卫,等.近红外漫反射光谱法在青翘含量测定中的应用[J].中国实验方剂学杂志,2013,19(23):111-114.
- [30] 张聪,胡馨,张英华,等.近红外光谱法测定西红花中西红花苷 I 含量的研究[J].中成药,2010,32(9):1559-1561.
- [31] 武卫红,王宁,蔡绍松,等.声光可调-近红外光谱技术用于丹参回流提取过程中丹参酮 II<sub>A</sub> 含量的测定[J].中药材,2009,32(1):118-121.
- [32] 王宁,蔡绍松,魏红,等.声光可调-近红外光谱技术快速分析复方丹参片中丹参酮 II<sub>A</sub> 和丹酚酸 B 的新方法[J].中国中药杂志,2008,33(3):261-264.
- [33] 邵玉蓝,曹岗.HPLC 结合近红外光谱技术快速测定丹参饮片中丹参酮 II<sub>A</sub> 的含量[J].中国医药导报,2014,11(9):135-137,141.
- [34] 徐冰,王星,Dhaene T,等.基于遗传算法的多目标最小二乘支持向量机在近红外多组分定量分析中的应用[J].光谱学与光谱分析,2014,34(3):638-642.
- [35] 朱向荣,单杨,李高阳,等.基于最小二乘支持向量机的国公酒中橙皮苷含量测定[J].光谱学与光谱分析,2009,29(9):2471-2474.
- [36] 程伟,史新元,乔延江,等.双黄连口服液和黄芩苷含量近红外测定方法的建立与验证[J].世界科学技术——中医药现代化,2012,14(4):1871-1876.
- [37] 朱向荣,李娜,史新元,等.近红外光谱与组合的间隔偏最小二乘法测定清开灵四混液中总氮和栀子苷的含量[J].高等学校化学学报,2008,29(5):906-911.
- [38] 于晓辉,张卓勇,马群,等.径向基函数神经网络和近红外光谱用于大黄中有效成分的定量预测[J].光谱学与光谱分析,2007,27(3):481-485.
- [39] 赵玉清,杨天鸣,罗源,等.近红外透射光谱法测定黄芪提取液中总皂苷含量[J].化学与生物工程,2009,26(2):73-75.
- [40] 谷筱玉,徐可欣,汪曦,等.波长选择算法在近红外光谱法中药有效成分测量中的应用[J].光谱学与光谱分析,2006,26(9):1618-1620.

[责任编辑 邹晓翠]