

· 资源与鉴定 ·

# 紫外光谱结合化学计量学区分不同产地川东獐牙菜

狄准<sup>1,2</sup>, 赵艳丽<sup>2,3</sup>, 张霁<sup>2,3</sup>, 王元忠<sup>2,3\*</sup>, 李鹞<sup>1\*</sup>

(1. 吉首大学 生物资源与环境科学学院, 湖南 吉首 416000;

2. 云南省农业科学院 药用植物研究所, 昆明 650200;

3. 云南省省级中药原料质量监测技术服务中心, 昆明 650200)

**[摘要]** 目的:分析鉴别 4 个产地川东獐牙菜,并建立预测模型,预测产地区分准确性。方法:光谱数据导入 UVProbe 2.34,比较不同产地相同部位的紫外光谱图,将原始光谱数据以及经过 8 点平滑、一阶求导和二阶求导后的数据导入 SIMCA-P 11.5,进行主成分分析(PCA),比较三维得分图的产地鉴别效果。结果:主成分分析中以叶的原始数据以及 8 点平滑处理数据鉴别效果最佳,主成分累计贡献率均为 98.8%,其余预处理方式无法取得较好的鉴别效果可能与主成分数累计值有关(一阶求导为 83.9%,二阶求导为 47.3%)。根部数据能将重庆、湖北的样品和湖南样品分开,但重庆和湖北的样品无法区分。建立偏最小二乘判别分析(PLS-DA)模型,检测鉴别模型的可靠性,并为预测更多产地的区分提供依据。将验证集带入训练集建立的模型进行偏最小二乘判别分析,能区分产地,证明该模型产地鉴别效果可行。PLS-DA 中训练集的预测值和真实值相关系数为 0.985,其评估均方差(RMSEE)为 0.159,验证集导入训练集后其预测值与真实值的相关系数为 0.927,预测均方差(RMSEP)为 0.327,RMSEE 与 RMSEP 两者相近,且都 <0.500,该模型的预测可靠性高。结论:运用紫外光谱结合主成分分析和偏最小二乘判别分析能够较好的鉴别不同产地川东獐牙菜,构建模型预测效果较好,加入未知产地样品也能较好区分。

**[关键词]** 主成分分析; 偏最小二乘判别分析; 川东獐牙菜; 产地鉴别

**[中图分类号]** R282.2 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2016)18-0021-06

**[doi]** 10.13422/j.cnki.syfjx.2016180021

**[网络出版地址]** <http://www.cnki.net/kcms/detail/11.3495.R.20160727.1607.020.html>

**[网络出版时间]** 2016-07-27 16:07

## Geographical Differentiation of *Swertia davidi* Using UV Spectroscopy Combined with Chemometrics

DI Zhun<sup>1,2</sup>, ZHAO Yan-li<sup>2,3</sup>, ZHANG Ji<sup>2,3</sup>, WANG Yuan-zhong<sup>2,3\*</sup>, LI Li<sup>1\*</sup>

(1. Resources and Environmental Sciences, Jishou University, Jishou 416000, China;

2. Institute of Medicinal Plants, Yunnan Academy of Agricultural Sciences, Kunming 650200, China;

3. Yunnan Technical Center for Quality of Chinese Materia Medica, Kunming 650200, China)

**[Abstract]** **Objective:** In this study, a high efficient and rapid method was used to identify the origin of herbal medicines in order to safeguard our country's economic interests in the international trade. **Method:** Ultraviolet (UV) spectroscopy combined with principal component analysis (PCA) and partial least square discriminant analysis (PLS-DA) was used to discriminate the *Swertia davidi* which collected from different origins and establish the prediction model to predict the accuracy of the regions. The spectra data were imported into UV Probe 2.34 software to compare the same part of *S. davidi*. Raw and pre-processed data (8 point smoothing, the first derivative and the second derivative) were imported into SIMCA-P 11.5 and the effect of discrimination of

**[收稿日期]** 20151013(028)

**[基金项目]** 国家自然科学基金项目(31260102,81260608)

**[第一作者]** 狄准,在读硕士,从事民族药物研究,Tel:13107234363,E-mail:dizhun@hotmail.com

**[通讯作者]** \*王元忠,硕士,助理研究员,从事药用植物资源研究,Tel:13888829994,E-mail:boletus@126.com;

\*李鹞,博士,教授,从事民族药物研究,Tel:18374375460,E-mail:lilyjsu@126.com

origins was compared by 3D score plot of PCA. **Result:** PCA indicated that the raw and 8 point smoothing data of leaves showed the best classification and the cumulative contribution rate of the first three factors was 98.8%. The other pre-processed methods could not obtain better identification and it may be related to the cumulative contribution value (the cumulative contribution rate of the data processed by the first derivative was 83.9% while the second derivative was 47.3%). Samples from Chongqing and Hubei could be distinguished with that of Hunan by the data of roots, but the samples of Chongqing and Hubei could not be separated. The model of PLS-DA may provide the basis of discrimination of more origins. The validation set was imported into the model developed by the training set and it proved that the model was feasible and effective. In PLS-DA, the correlation index of predictive value and true value in the training set was 0.985 and the RMSEE was 0.159. The correlation index of predictive value and true value after importing the validation set in the training set was 0.972 and RMSEP was 0.327. Both RMSEE and RMSEP were similar and less than 0.500. So the model had high reliability. **Conclusion:** UV spectra combined with PCA and PLS-DA can discriminate *S. davidi* from different origins and the predicted effect of the model was better. Furthermore, samples with unknown origins could also be distinguished.

[**Key words**] principal component analysis; partial least square discriminant analysis; *Swertia davidi*; origin discrimination

龙胆科川东獐牙菜是民间用于治疗糖尿病、肝损伤等疾病的药用植物,主要分布在川、湘、鄂、黔等地,被《四川常用中草药》,《湖南药物志》等收录<sup>[1-2]</sup>。药用成分为环烯醚萜类,包括芒果苷、獐牙菜苦苷、龙胆苦苷等,该类化合物的药用价值得到肯定,具有作为商品医药的价值,已知用做药物的商品有八味獐牙菜丸<sup>[3-5]</sup>。本文选取川东獐牙菜作为产地鉴别样品。

常见的产地鉴别方式主要有色谱法和光谱法,包括高效液相色谱<sup>[6-7]</sup>、气相色谱<sup>[8-9]</sup>、红外光谱<sup>[10-11]</sup>、紫外光谱<sup>[12]</sup>等。高效液相色谱灵敏度与精确度高,但实验周期长,预处理麻烦。气相色谱精密度高,对于检测物品限制较大。光谱法具有操作简单、高效、经济等优点。目前光谱应用中主要采用近红外光谱或中红外光谱的方法分析样品,紫外光谱鉴别较少。在一些文章中有关于紫外光谱结合化学计量学方法高效鉴别产品产地,例如,杨天伟等<sup>[13]</sup>采用紫外光谱结合余弦夹角、欧式距离和主成分分析快速鉴别不同产地、种类牛肝菌。牛肝菌受外界因子影响较大,同一种类不同产地以及相同产地不同种类样品图谱表现明显的指纹特性。样品夹角余弦相似度高,不利产地和种类区分。欧氏距离法和主成分分析方法显示样品差异明显,能够快速鉴别牛肝菌产地以及种类。Li 等<sup>[14]</sup>采用偏最小二乘法判别分析和聚类分析来提高紫外光谱法对茯苓产地的鉴别准确度。笔者利用三维光谱图显示紫外光谱对不同成分的吸收值,发现不同产地样品对低极性物质吸收不同。PLS-DA 得分图中楚雄、红河和普洱

的样品能够明显区分。系统聚类分析效果良好,进一步验证 PLS-DA 的结果。Wu 等<sup>[15]</sup>采用紫外光谱法结合线性判别分析、偏最小二乘和支持向量机鉴别中国白酒产地的方法可行。本文采用紫外光谱法结合主成分分析和偏最小二乘判别分析鉴别 4 个产地川东獐牙菜,为川东獐牙菜产地鉴别提供一种快速、高效的鉴别方式。

## 1 材料

供试材料于 2014 年 7—8 月采集,经吉首大学生物资源与环境科学学院李鹏教授鉴定为龙胆科川东獐牙菜 *Swertia davidi* 的干燥全草,标本存放于吉首大学生物资源与环境科学学院植物标本馆(标本号为 201408011),样品信息见表 1。样品采集后用自来水清洗,再用超纯水润洗 2~3 次,将植株根、茎、叶分开保存,并阴干至质量无变化,粉碎,过筛,置于自封袋中保存。称取样品根、茎和叶各 0.05 g 于 25 mL 比色管中,加入甲醇 10 mL,超声提取 30 min,过滤后得到根、茎和叶的滤液,再将滤液稀释。

表 1 川东獐牙菜样品信息

Table 1 Samples information of *Swertia davidi*

地点	No.	海拔/m	经纬度
湖北恩施百福司镇	J <sub>1</sub>	280 ± 5	N 28°57'55.7" E 108°27'55.0"
湖南张家界市永定区	M <sub>1</sub>	188 ± 4	N 29°05'44.3" E 110°14'44.5"
重庆市彭水县汉葭街道长溪村	W <sub>1</sub>	258 ± 10	N 29°13'29.2" E 108°10'40.3"
重庆彭水县鹿角镇附近	W <sub>2</sub>	560 ± 9	N 29°08'04.2" E 108°19'14.2"

其中根的溶液稀释 2 倍,茎溶液稀释 5 倍,叶溶液稀释 10 倍。以甲醇溶液作为参比设定,设定扫描波长为 215 ~ 450 nm,重复 3 次,狭缝 1.0 nm,间隔 0.2 nm。

UV-2550 型双通道紫外-可见分光光度仪(日本岛津公司,自带工作站),SY3200-T 型超声波清洗机(上海声源超声仪器设备有限公司),FW-100 型高速万能粉碎机(天津市华鑫仪器厂),60 目标准筛(浙江上虞市道墟五四仪器厂),XS125A 型电子分析天平(瑞士 Precisa 公司),0.4  $\mu\text{m}$  过滤膜(天津 Aulomatic science 公司),UVProbe 2.34 软件(日本岛津公司),SIMAC-P 11.5 软件(瑞典 Umetrics 公司)。甲醇(AR)为分析纯,超纯水。

## 2 结果与分析

### 2.1 方法学考察

**2.1.1 重复性试验** 随机抽取  $W_1$  产地叶样品,精密称取 0.05 g 样品 5 份,加入甲醇 10 mL 后过滤,再稀释 10 倍后,采集 215 ~ 450 nm 光谱数据。测得 RSD 2.04% ~ 3.19%,表明该方法重复性良好。

**2.1.2 精密度试验** 按照 2.1.1 项方法制备溶液,连续进样 5 次,采集光谱数据,测得 RSD 0.71% ~ 2.08%,表明仪器的精密度良好。

**2.1.3 稳定性试验** 按照 2.1.1 项方法制备溶液,分别在 0,15,30,40,60 min 进样分析,采集光谱数据,测得 RSD 1.81% ~ 2.29%,表明供试品在 1 h 内稳定。

**2.2 数据处理** 将所测得原始光谱导入 UVProbe 2.34 软件做预处理(8 点平滑,一阶求导和二阶求导),再利用 SIMCA-P 11.5 软件进行主成分分析以及偏最小二乘判别分析。

**2.3 不同部位紫外光谱图比较** 4 个产地川东獐牙菜相同部位(根、茎和叶)的原始光谱图相似度高,无法区分。不同产地川东獐牙菜根、茎和叶原始图谱均在 240,276,324 nm 处附近有特征吸收峰。川东獐牙菜中含有环烯醚萜类成分(獐牙菜苦苷、龙胆苦苷等),其中獐牙菜苦苷在 240 nm,龙胆苦苷在 276 nm 有最大吸收峰,龙胆苦苷在 240 nm 也有吸收<sup>[16]</sup>,根、茎和叶均在 240 nm 处有特征吸收峰,结合 3 个部位的稀释倍数和图谱的吸光度,根据比尔朗伯定律推测该环烯醚萜成分在叶中含量最高,茎次之,与谷利民等<sup>[17]</sup>在对川东獐牙菜器官中獐牙菜苦苷分布规律中得到结论相似,他的结论为花 > 叶 > 全草 > 茎枝。见图 1。

### 2.4 川东獐牙菜紫外光谱模式识别

**2.4.1 主成分分析** 主成分分析是一种将原来繁

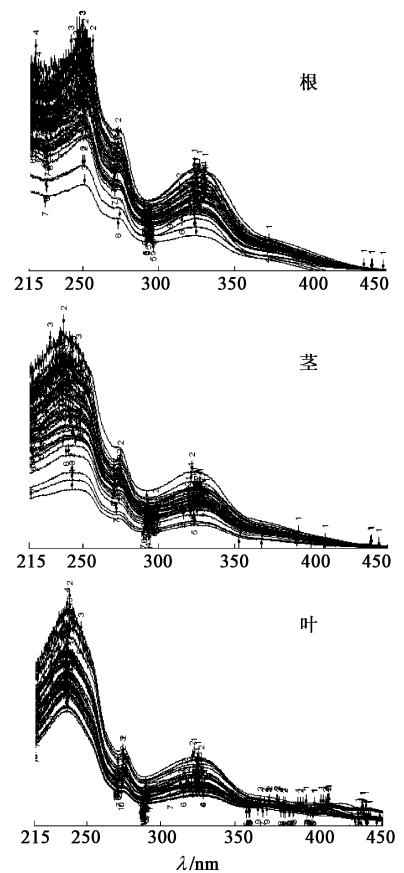


图 1 不同产地、不同部位川东獐牙菜的紫外光谱

Fig.1 UV spectra of different parts of *Swertia davidi* from different origins

杂的变量进行整合,得到具有综合信息变量的统计分析方法,也是一种非监督模式识别方法<sup>[18]</sup>。将川东獐牙菜不同部位的原始光谱数据及经过 8 点平滑、一阶求导、二阶求导的光谱数据导入 SIMCA-P 11.5 软件,进行主成分分析,用以区分不同产地。以主成分矢量为坐标轴得到主成分得分图(图 2 ~ 5),不同产地距离越远,相同产地聚集越集中,表明鉴别效果越好。

不同部位中以叶的光谱数据区分产地效果最佳。3 种预处理方法(8 点平滑、一阶求导和二阶求导)对区分产地影响不大,原始光谱数据鉴别效果最佳,这可能与主成分数累计值有关(表 2)。不同产地根部得分图中重庆、湖北样品与湖南样品区分开,但重庆与湖北的样品无法区分(一阶求导中湖南、湖北和重庆能区分,重庆中 2 个小地区不能区分)。比较不同产地叶的原始光谱,8 点平滑处理,一阶求导处理和二阶求导处理的数据,原始光谱数据和 8 点平滑处理数据的分类效果最佳,一阶求导和二阶求导分类效果不佳,比较原始数据,8 点平滑数据,一阶求导和二阶求导的前 3 个主成分累计数

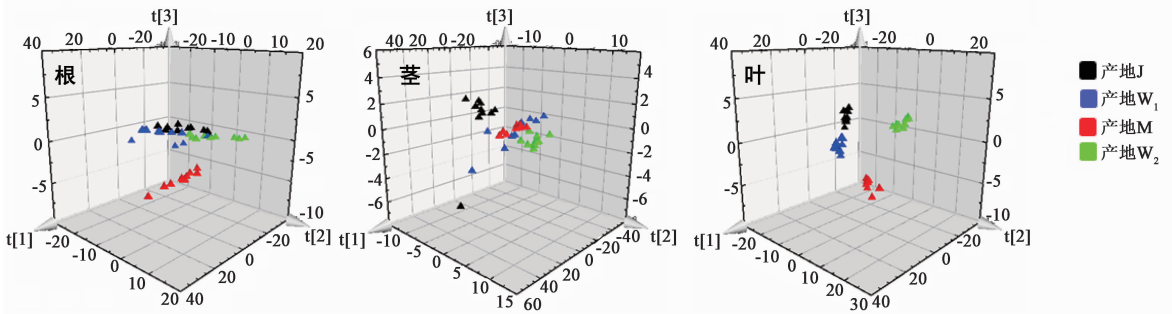


图 2 川东獐牙菜不同部位、不同产地原始数据主成分分析  
Fig. 2 PCA of original spectrum in different origins and parts of *Swertia davidi*

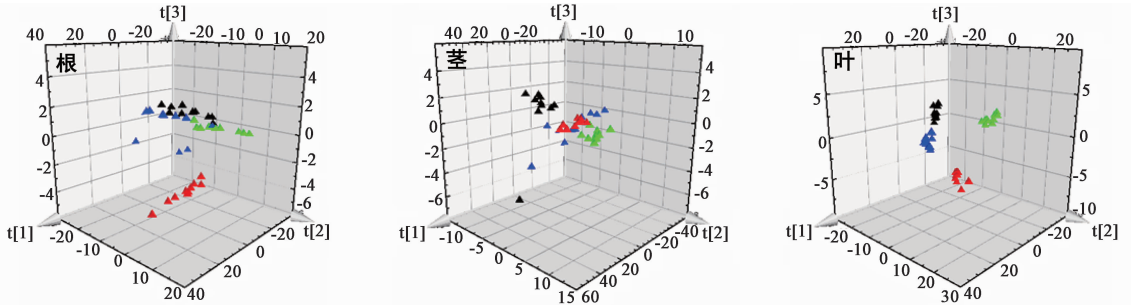


图 3 川东獐牙菜不同部位、不同产地 8 点平滑后的主成分分析  
Fig. 3 PCA of 8 point smooth in different origins and parts of *Swertia davidi*

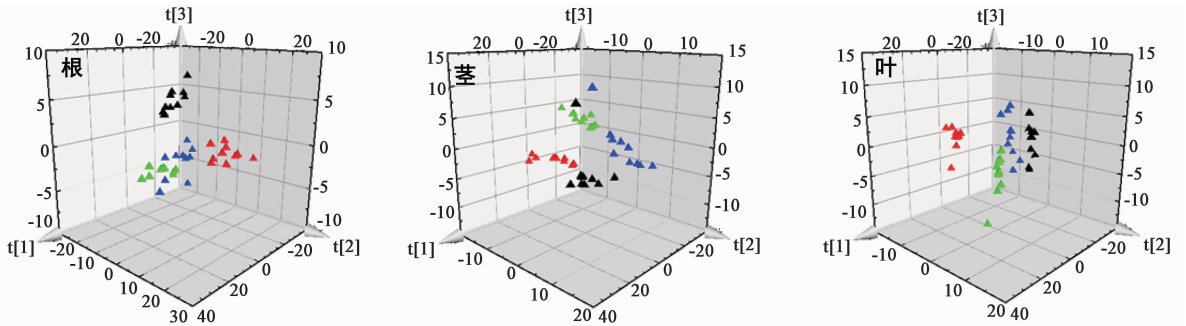


图 4 川东獐牙菜不同部位、不同产地一阶求导后的主成分分析  
Fig. 4 PCA of first derivative in different origins and parts of *Swertia davidi*

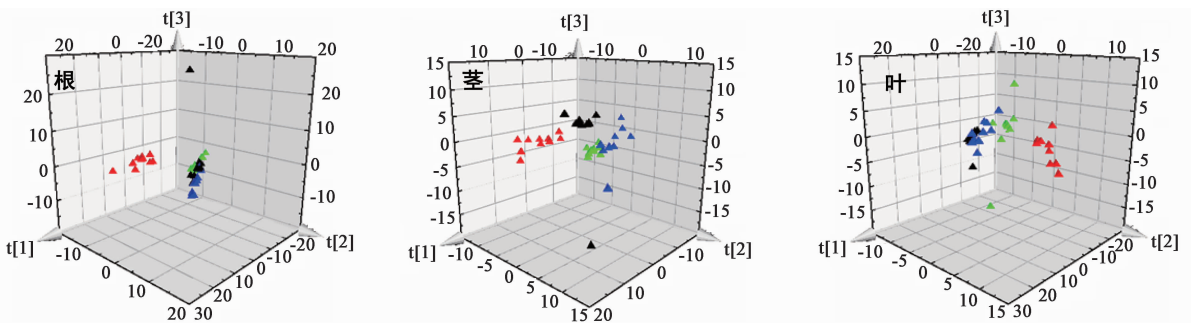


图 5 川东獐牙菜不同部位、不同产地二阶求导后的主成分分析  
Fig. 5 PCA of second derivative in different origins and parts of *Swertia davidi*

发现,原始数据和 8 点平滑数据累计率都为 98.8%,一阶求导为 83.9%,二阶求导为 47.3%,推测在后两者丢失的主成分中可能存在与聚类密切相关的因子。

#### 2.4.2 偏最小二乘判别分析 偏最小二乘判别分

析是一种监督模式识别方法,通过建立模型来预测方法的可行性<sup>[19]</sup>。本文收集 4 个产地川东獐牙菜根、茎和叶,在主成分分析中,样品叶的区分效果较好,选取 4 个产地川东獐牙菜的叶作为检测判别模型的样品。

表 2 不同预处理方法主成分分析的前 3 个主成分贡献率

Table 2 Contribution ratio of first three principal components in PCA by different pre-processing methods

部位	处理方式	主成分 1	主成分 2	主成分 3
根	原始数据	0.818	0.157	0.019
	8 点平滑	0.818	0.157	0.019
	一阶求导	0.561	0.307	0.050
茎	原始数据	0.895	0.082	0.009
	8 点平滑	0.895	0.082	0.009
	一阶求导	0.559	0.209	0.070
叶	原始数据	0.728	0.219	0.041
	8 点平滑	0.728	0.219	0.041
	一阶求导	0.577	0.199	0.063
	二阶求导	0.264	0.139	0.070

每个产地选取 20% 的样品作为验证集,即湖北恩施百福司镇( $J_3 \sim J_4$ ),湖南张家界市永定区( $M_1 \sim M_2$ ),重庆市彭水县汉葭街道长溪村( $W_{1.6} \sim W_{1.7}$ )和重庆彭水县鹿角镇( $W_{2.8} \sim W_{2.9}$ ),剩下为训练集,先将剩下 32 个样品导入 SIMCA-P 11.5 软件中进行 PLS-DA 分析。在训练集所建立的模型中第一主成分(71.0%)与第二主成分(23.6%)累计值为 94.6%。由训练集得知 4 个产地基本分开,重庆市彭水县汉葭街道长溪村和湖北恩施百福司镇产地样品部分聚在一起,重庆市彭水县汉葭街道长溪村产地有 1 个异常值(超过 95% 的置信区间),重庆彭水县鹿角镇和湖南张家界市永定区产地相同样品聚集紧密,个别较为分散。

将样品叶的训练集和验证集同时导入软件分析,4 个产地能够较好的区分,验证集  $J_3 \sim J_4, M_1 \sim M_2, W_{1.6} \sim W_{1.7}$  和  $W_{2.8} \sim W_{2.9}$  都分别和各自产地样品聚在一起,说明建立的模型能够很好的区分产地<sup>[20]</sup>。

分析 4 个产地样品真实值和预测值之前先对产地赋值,湖北恩施百福司镇产地赋值为 0,湖南张家界市永定区赋值为 1,重庆市彭水县汉葭街道长溪村赋值为 2,重庆彭水县鹿角镇赋值为 3,表 3 为 4 个产地样品真实值与预测值。以训练集的预测值和真实值构建坐标轴<sup>[21]</sup>,预测值与真实值的相关系数为 0.983,真实值和预测值的差异性由评估均方差(RMSEE)表示,  $RMSEE = 0.159$ 。将验证集导入训练集模型验证,得到真实值与预测值的相关系数为 0.927,预测 4 个产地样品模型可行性由验证集产生的预测均方差(RMSEP)表示<sup>[22]</sup>,  $RMSEP = 0.327$ 。由于 RMSEE 和 RMSEP 均  $< 0.5$ ,且两者相近,所以预测模型效果可靠<sup>[22]</sup>。

表 3 不同产地样品的真实值与预测值

Table 3 Pattern differentiation of true value and predicted value

No.	真实值	预测值	No.	真实值	预测值
$J_1$	0	0.168	$W_{1-1}$	2	2.037
$J_2$	0	-0.029	$W_{1-2}$	2	1.908
$J_3$	0	0.058	$W_{1-3}$	2	1.936
$J_4$	0	-0.078	$W_{1-4}$	2	1.979
$J_5$	0	0.049	$W_{1-5}$	2	1.850
$J_6$	0	0.060	$W_{1-6}$	2	2.016
$J_7$	0	0.093	$W_{1-7}$	2	2.262
$J_8$	0	-0.064	$W_{1-8}$	2	1.871
$J_9$	0	-0.234	$W_{1-9}$	2	2.048
$J_{10}$	0	0.137	$W_{1-10}$	2	2.020
$M_1$	1	0.878	$W_{2-1}$	3	2.807
$M_2$	1	0.878	$W_{2-2}$	3	3.068
$M_3$	1	1.056	$W_{2-3}$	3	2.949
$M_4$	1	1.041	$W_{2-4}$	3	2.954
$M_5$	1	0.898	$W_{2-5}$	3	3.094
$M_6$	1	0.984	$W_{2-6}$	3	3.041
$M_7$	1	1.140	$W_{2-7}$	3	3.204
$M_8$	1	1.073	$W_{2-8}$	3	3.000
$M_9$	1	0.971	$W_{2-9}$	3	2.963
$M_{10}$	1	1.110	$W_{2-10}$	3	2.790

### 3 结论

本文通过对川东獐牙菜不同部位紫外光谱原始数据以及预处理数据(8 点平滑、一阶求导和二阶求导)的主成分分析和偏最小二乘判别模型构建来区分产地;分析得出紫外光谱方法重现性,仪器精密度和样品稳定性的 RSD 分别为 2.3% ~ 3.3%, 0.5% ~ 2.4% 和 1.6% ~ 3.6%,表明方法可靠。川东獐牙菜不同部位的原始光谱图在 240, 276 nm 以及 324 nm 处有特征峰,经前人研究得知獐牙菜苦昔在 240 nm 处,龙胆苦昔在 276 nm 处有最大吸收峰,且龙胆苦昔在 240 nm 也有吸收峰,结合比尔朗伯定律推断在川东獐牙菜的叶中,獐牙菜苦昔和龙胆苦昔含量高于茎和根。主成分分析中川东獐牙菜叶原始数据和 8 点平滑处理数据的产地鉴别效果最佳,一阶求导和二阶求导后产地区分效果不明显,这可能与前 3 个主成分积累贡献率有关。根部的处理数据只能将重庆、湖北的样品和湖南样品区分,重庆与湖北的样品无法区分。训练集和验证集的分析能够证明模型的可靠性,真实值和预测值接近说明该模型对区分产地具有一定的预测能力,参数 RMSEE 和 RMSEP 值接近且小于 0.5 能证明预测精度较高,当加入未知产地也能较好区分。综上所述,主成分分析结合偏最小二乘判别分析能够较好的鉴别川东獐牙菜产地。文章存在一定缺陷譬如样品量少,产地个数不多,后续工作将增加产地个数以及不同采

收期和不同物种,并采集土壤样品做全面的化学分析研究物种产地区分与当地土壤是否存在联系。随着样品数量的增加,不断修正模型,提高准确率。

[参考文献]

[1] 中国科学院《中国植物志》编辑委员会. 中国植物志[M]. 北京: 科学出版社, 1988: 371.

[2] 李鹞, 黄衡宇. 川东獐牙菜小孢子发生和雄配子体形成[J]. 植物研究, 2006, 26(4): 452-460.

[3] Bellmann G, Jacot-Guillarmod A. Contribution à la phytochimie du genre gentiana I. Etude des composés flavoniques et xanthoniques dans les feuilles de *Gentiana lutea* L. (1re communication)[J]. Helv Chim Acta, 1973, 56(1): 284-294.

[4] Brahmachari G, Mondal S, Gangopadhyay A, et al. *Swertia* (gentianaceae): chemical and pharmacological aspects [J]. Chem Biodivers, 2004, 1(11): 1627-1651.

[5] Vishwakarma S, Rajani M, Bagul M, et al. A rapid method for the isolation of swertiamarin from *Enicostemma littorale*[J]. Pharmaceut Biol, 2004, 42(6): 400-403.

[6] Li N, Chen Y Y, Zhang L, et al. Fingerprint analysis of *Ophiopogonis Radix* by HPLC-UV-ELSD coupled with chemometrics methods[J]. J Chinese Pharmaceut Sci, 2013, 22(1): 55-63.

[7] He X Y, Li J K, Zhao W, et al. Chemical fingerprint analysis for quality control and identification of Ziyang green tea by HPLC [J]. Food Chem, 2015, 171: 405-411.

[8] Shen M Y, Xie M Y, Nie S P, et al. Discrimination of different ganoderma species and their region based on GC-MS profiles of sterols and pattern recognition techniques[J]. Anal Lett, 2011, 44(5): 863-873.

[9] Pan R J, Guo F Q, Lu H M, et al. Development of the chromatographic fingerprint of *Scutellaria barbata* D. Don by GC-MS combined with chemometrics methods [J]. J Pharmaceut Biomed, 2011, 55(3): 391-396.

[10] Gok S, Severcan M, Goormaghtigh E, et al. Differentiation of Anatolian honey samples from different botanical origins by ATR-FTIR spectroscopy using multivariate analysis[J]. Food Chem, 2015, 170: 234-240.

[11] Zhao Y L, Zhang J, Yuan T J, et al. Discrimination of wild *Paris* based on near infrared spectroscopy and high performance liquid chromatography combined with

multivariate analysis [J]. PLoS One, 2014, 9(2): e89100.

[12] 严斌俊, 刘爽悦, 郭正泰, 等. 基于紫外光谱的丹红提取液质量快速分析技术[J]. 中国中药杂志, 2013, 38(11): 1676-1678.

[13] 杨天伟, 李涛, 张霁, 等. 紫外光谱结合欧氏距离和主成分分析法快速鉴别牛肝菌[J]. 食品科学, 2014, 35(16): 105-109.

[14] Li Y, Zhang J, Zhao Y L, et al. Characteristic fingerprint based on low polar constituents for discrimination of *Wolfiporia extensa* according to geographical origin using UV spectroscopy and chemometrics methods [J]. J Anal Methods Chem, 2013, 2014: 519424.

[15] Wu Z Z, Li H Y, Long J, et al. Discrimination of Chinese rice wines of different geographical origins by UV-vis spectroscopy and chemometrics [J]. J Inst Brewing, 2015, 121(1): 167-174.

[16] 丁兰, 谭桂山, 李福双, 等. 两种獐牙菜属植物中两种苦苷的含量分析[J]. 中药材, 2008, 31(4): 533-535.

[17] 谷利民, 陈刚, 田华咏, 等. 川东獐牙菜植物器官獐牙菜苦苷含量分布规律研究[J]. 中国民族医药杂志, 2010, 16(2): 58-59.

[18] Cordeiro J R, Martinez M I V, Li R W C, et al. Identification of four wood species by an electronic nose and by LIBS[J]. Int J Electrochem, 2012, 2012. doi: 10.1155/2012/563939.

[19] De Lucia F C, Gottfried J L. Influence of variable selection on partial least squares discriminant analysis models for explosive residue classification [J]. Spectrochim Acta B, 2011, 66(2): 122-128.

[20] 范玛莉, 李震宇, 李爱平, 等. 偏最小二乘方法在不同食醋判别分析中的应用[J]. 食品工业科技, 2014, 35(21): 324-328.

[21] Yang S O, Shin Y S, Hyun S H, et al. NMR-based metabolic profiling and differentiation of ginseng roots according to cultivation ages[J]. J Pharmaceut Biomed, 2012, 58(1): 19-26.

[22] Tankeu S Y, Vermaak I, Kamatou G P P, et al. Vibrational spectroscopy and chemometric modeling: an economical and robust quality control method for lavender oil[J]. Ind Crop Prod, 2014, 59: 234-240.

[责任编辑 邹晓翠]