

基于 R 语言的近红外光谱对甘草中指标成分定量分析

雍婧姣¹, 王霞², 石思佳³, 温奎申¹, 佟月¹, 张霞¹, 赵建军¹, 王建寰¹,
高晓娟¹, 王汉卿^{1,4,5*}

- (1. 宁夏医科大学 药学院, 银川 750004; 2. 银川市第二人民医院, 银川 750004;
3. 北京市东城区食品药品安全监控中心, 北京 100027;
4. 宁夏回药现代化工程技术研究中心, 银川 750004;
5. 宁夏医科大学 回医药现代化省部共建教育部重点实验室, 银川 750004)

[摘要] 目的:建立较优的甘草质控成分(水分、总灰分、甘草苷、甘草酸)的近红外定量模型,实现快速检测。方法:基于 2015 年版《中国药典》方法测定 97 批甘草中水分、总灰分、甘草苷及甘草酸的含量。采用近红外光谱仪扫描其近红外光谱。采用 R 语言筛选最佳光谱预处理方法,建立近红外定量模型。结果:水分和甘草苷近红外定量模型的最佳预处理方法为一阶导数,其中水分测试集和验证集的相关系数分别为 0.930 0 和 0.929 9,均方根误差分别为 0.243 2 和 0.203 8,甘草苷测试集和验证集的相关系数分别为 0.930 3 和 0.907 6,均方根误差分别为 0.093 9 和 0.128 9;总灰分近红外定量模型的最佳预处理方法为 MSC,测试集和验证集的相关系数分别为 0.926 5 和 0.917 7,预测均方根误差分别为 0.109 6 和 0.103 7;甘草酸近红外定量模型的最佳预处理方法为 SNV,测试集和验证集的相关系数分别为 0.918 1 和 0.915 7,预测均方根误差分别为 0.274 8 和 0.236 0。结论:该研究建立了较优的甘草质控成分的近红外定量模型,其模型的准确度均较高,为实现快速检测奠定了基础。

[关键词] 甘草; 近红外; 偏最小二乘; 光谱预处理; 定量模型

[中图分类号] R284.1;R289;R22;R2-031 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2019)09-0176-06

[doi] 10.13422/j.cnki.syfjx.20190916

[网络出版地址] <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.3495.r.20190117.1139.013.html>

[网络出版时间] 2019-01-18 18:43

Quantitative Analysis of Index Components in Glycyrrhizae Radix et Rhizoma by Near Infrared Spectroscopy Based on R Software

YONG Jing-jiao¹, WANG Xia², SHI Si-jia³, WEN Kui-shen¹, TONG Yue¹, ZHANG Xia¹,
ZHAO Jian-jun¹, WANG Jian-huan¹, GAO Xiao-juan¹, WANG Han-qing^{1,4,5*}

(1. College of Pharmacy, Ningxia Medical University, Yinchuan 750004, China;

2. The Second People's Hospital of Yinchuan, Yinchuan 750004, China;

3. Beijing Dongcheng District Food and Drug Safety Monitoring Center, Beijing 100027, China;

4. Ningxia Engineering and Technology Research Center for Modernization of Hui Medicine, Yinchuan 750004, China;

5. Ningxia Medical University Key Laboratory of Hui Ethnic Medicine Modernization Under Ministry of Education, Yinchuan 750004, China)

[Abstract] **Objective:** To establish a better near infrared quantitative model for quality control of Glycyrrhizae Radix et Rhizoma of components (moisture, total ash, liquiritin and glycyrrhizic acid) in liquorice,

[收稿日期] 20181112(013)

[基金项目] 宁夏回族自治区重点研发项目(2016KJHM46)

[第一作者] 雍婧姣, 硕士, 实验师, 从事中药材鉴定与质量评价研究, Tel:0951-6880693, E-mail: yongjj0205@163.com

[通信作者] * 王汉卿, 博士, 副教授, 硕士生导师, 从事中药资源开发利用与保护研究, Tel:0951-6880693, E-mail: wwwhhq@163.com

in order to realize rapid detection. **Method:** The contents of moisture, total ash, liquiritin and glycyrrhizic acid were determined in 97 samples based on the methods set forth in *Chinese Pharmacopoeia*. Meanwhile, the near infrared spectrum was scanned using near infrared spectroscope. R software was used to screen out the spectral pretreatment and build the quantitative models. **Result:** The optimum spectral pretreatment method for establishing the near infrared quantitative model of moisture and liquiritin was the first order derivative. For moisture, the correlation coefficients of test and validation were 0.930 0 and 0.929 9, and the root mean square errors were 0.243 2 and 0.203 8, respectively. For liquiritin, the correlation coefficients of test and validation were 0.930 3 and 0.907 6, and the root mean square errors were 0.093 9 and 0.128 9, respectively. The optimum spectral pretreatment method for establishing the near infrared quantitative model of total ash was MSC. The correlation coefficients of test and validation were 0.926 5 and 0.917 7, and the root mean square errors were 0.109 6 and 0.103 7, respectively. The optimum spectral pretreatment method for establishing the near infrared quantitative model of glycyrrhizic acid was SNV. The correlation coefficients of test and validation were 0.918 1 and 0.915 7, and the root mean square errors were 0.274 8 and 0.236 0, respectively. **Conclusion:** In this study, a better near infrared quantitative models for quality control of components of *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma* were established, with a high accuracy, which laid a foundation for rapid detection of the components in *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*.

[**Key words**] *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*; near infrared; partial least squares; spectral pretreatment; quantitative model

甘草具有补脾益气、清热解毒、祛痰止咳、缓急止痛、调和诸药的功效^[1],素有“十方九草”之称。中药材质量的优劣是影响中药下游产业的核心因子,当下法定标准以 2015 年版《中国药典》对药材质量进行控制,甘草项下要求定量甘草苷、甘草酸、水分、总灰分,其标准中检测方法繁琐,且有化学污染。近红外光谱检测样品无需预处理,具有快速、价廉、绿色等特点,与化学计量学结合,已被用于中药材真伪、掺伪、产地、生态型等定性鉴别及中药材的定量分析^[2-5]。

近红外光谱主要是由含氢基团的倍频和组频吸收峰组成,几乎覆盖所有的有机化合物和混合物,具有广阔的应用领域和实用价值,但是由于其吸收弱,灵敏度相对较低,吸收带较宽,且重叠严重,依靠传统的建立工作曲线方法进行定量分析困难^[6-7]。此外,近红外原始光谱包含了样品自身信息、无关信息以及来源于仪器、样品及操作的噪声^[8-9],若以原始光谱直接进行定量分析会影响模型的准确度及稳定性。因此,采用化学计量学的方法进行光谱预处理,对建立准确、稳定的定量分析模型至关重要。光谱预处理通过对原始光谱进行适当的变换以减弱或消除非目标因素对光谱的影响,进而提高模型的准确度及稳定性。常用的光谱预处理方法有平滑处理,导数化,多元信号修正(MSC),标准归一化(SNV),矢量归一化等^[6,8]。平滑处理是近红外光谱分析中

消除噪声最常用的方法,可以有效平滑高频噪音,提高信噪比;一阶导数和二阶导数是常用的基线校正和光谱分辨预处理方法,可以有效消除基线及其他背景干扰,分辨重叠峰,提高分辨率及灵敏度,但同时会引入噪声,降低信噪比;SNV 可消除固体颗粒大小、表面散射及光程变化的影响;MSC 则以消除颗粒分布不均匀及颗粒大小产生的散射影响为主;矢量归一化的校正过程与 SNV 基本相同,研究表明其可以较好地改善样品稀疏时的预测结果^[7,10]。偏最小二乘法集多元线性回归和主成分分析为一体,能够在小样本情况下实现多变量对多变量的回归模型^[11],具有预测能力强、模型简单等优点,广泛用于近红外定量建模分析^[12]。R 软件具有强大的统计分析功能,进行偏最小二乘建模可以得到理想的模型,并能够通过回归系数的显著性检验进行数据的探索分析^[11]。

本研究采集了 97 批不同产地甘草近红外光谱,并基于 2015 年版《中国药典》方法测定了上述药材中水分、总灰分、甘草苷和甘草酸的含量,采用 R 软件进行偏最小二乘建模,着重比较了其光谱的不同的预处理方法对建模结果的影响,筛选出最佳预处理方法。旨在建立较优的上述成分近红外定量模型,实现快速检测。

1 材料

1260 系列高效液相色谱仪(美国 Agilent

公司);XS-205 型 1/10 万电子分析天平(瑞士梅特勒公司);Matrix-F 型傅利叶变换近红外光谱仪(德国 Bruker 公司);WFO-700W 型送风式恒温干燥箱(上海爱朗)。

对照品甘草苷(批号 111610-201106),甘草酸(110731-201418)购于中国食品药品检定研究院;甲

醇、乙腈色谱纯;娃哈哈纯净水;其他试剂均为分析纯。

97 批甘草药材采自全国不同产区,经宁夏医科大学药学院王汉卿副教授鉴定为豆科植物甘草 *Glycyrrhiza uralensis* 的干燥根和根茎,产地分布见表 1。

表 1 97 批甘草药材产地分布及质控成分含量范围

Table 1 Distribution information and content of quality control components in 97 *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*

类别	产地	样本量/个	水分/%	灰分/%	甘草苷/%	甘草酸/%
验证集	甘肃、内蒙古、宁夏、新疆、吉林	79	0.96 ~ 5.05	3.17 ~ 4.76	1.52 ~ 3.08	1.92 ~ 6.07
测试集	甘肃、内蒙古、宁夏、新疆、黑龙江	18	1.79 ~ 4.21	3.26 ~ 4.38	1.55 ~ 2.87	2.02 ~ 4.76

2 方法

2.1 甘草苷、甘草酸含量测定 参照 2015 年版《中国药典》一部甘草中甘草苷、甘草酸含量测定方法测定,结果见表 1。

2.2 水分、总灰分测定 参照 2015 年版《中国药典》四部测定总灰分及烘干法测定水分,结果见表 1。

2.3 近红外光谱测定 甘草药材粉末适量,利用 Bruker Matrix-F 型傅利叶变换近红外光谱仪扫描近红外光谱。分辨率 8 cm^{-1} ;扫描次数 32 Scans;光谱范围 $12\ 000 \sim 4\ 000\text{ cm}^{-1}$ 。每个样品平行测定 6 次,取平均值作为该样品的原始光谱,环境条件为温度 $23\text{ }^{\circ}\text{C}$,湿度 40%。甘草近红外原始光谱见图 1。

导数 + 矢量归一化,一阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理,一阶导数 + SNV 预处理,导出各近红外光谱点数据。

3.2 偏最小二乘近红外定量建模 利用 R 软件进行偏最小二乘建模。97 个样本其中 79 个选为测试集样本,18 个作为验证集样本进行建模。以预测均方根误差(RMSEP),测试集相关系数(R_p),交叉验证均方根误差(RMSEC),验证集相关系数(R_v)为指标,筛选合理的预处理方法,进行建模。

4 结果及讨论

4.1 甘草中水分近红外定量建模 近红外光谱经不同预处理方法处理后甘草中水分含量近红外定量建模结果见表 2。近红外光谱数据经一阶导数预处理后,主因子数为 7,对甘草中水分含量进行偏最小二乘建模,测试集相关系数为 0.930 0,预测均方根误差为 0.243 2,且验证集相关系数为 0.929 9,交叉验证均方根误差为 0.203 8。其测试集及验证集的相关系数较高,且二者的相关系数及预测均方根误差均相差不大,基于整个模型的预测的准确度考虑,一阶导数预处理后建模较优于其他预处理方法建模结果。因此,甘草中水分偏最小二乘近红外定量模型以选择 7 个主因子、光谱经一阶导数预处理为佳。甘草水分含量近红外偏最小二乘模型真实值与预测值线性关系见图 2。

4.2 甘草中总灰分近红外定量建模 近红外光谱经不同预处理方法处理后甘草中总灰分含量近红外定量建模结果见表 3。近红外光谱数据经矢量归一化和 MSC 处理后,主因子数为分别为 17 和 15,对甘草中总灰分含量进行偏最小二乘建模,测试集相关系数分别为 0.925 3 和 0.926 5,预测均方根误差分别为 0.110 5 和 0.109 6,且验证集相关系数分别为

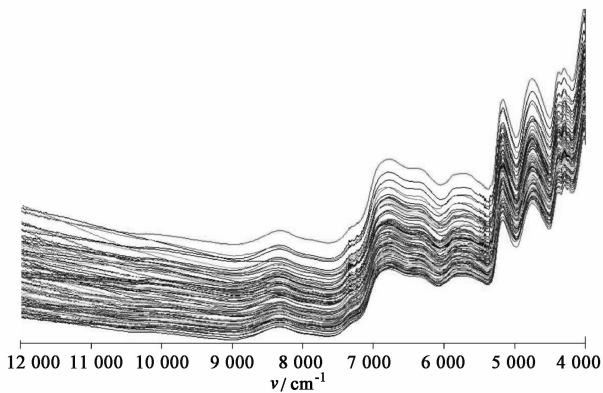


图 1 甘草近红外原始光谱

Fig.1 Near infrared spectrum of *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma*

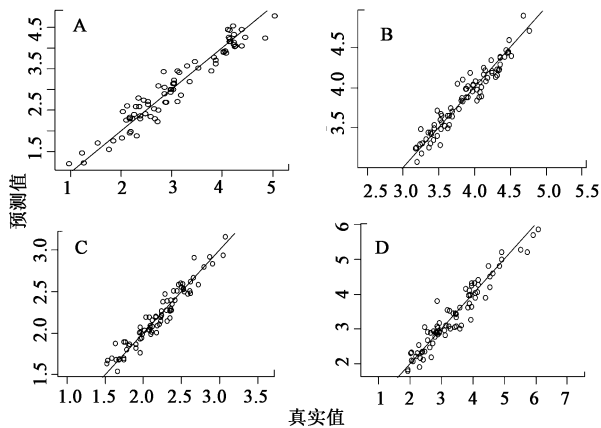
3 数据分析

3.1 近红外光谱数据预处理 采用 OPUS5.5 软件对各批次甘草近红外光谱分别进行矢量归一化, MSC, SNV, 二阶导数, 二阶导数 + MSC, 二阶导数 + 矢量归一化, 二阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理, 二阶导数 + SNV, 一阶导数, 一阶导数 + MSC, 一阶

表 2 不同光谱预处理后甘草水分偏最小二乘建模参数

Table 2 Partial least squares modeling parameters of moisture in Glycyrrhizae Radix et Rhizoma based on different spectral pretreatment

预处理方法	主成分数	Rp	RMSEP	Rv	RMSECV
不处理	14	0.901 5	0.288 4	0.883 6	0.262 7
矢量归一化	12	0.876 1	0.323 6	0.848 6	0.299 6
MSC	12	0.892 8	0.301 0	0.863 0	0.285 0
SNV	13	0.880 3	0.318 0	0.866 1	0.281 8
二阶导数	5	0.868 4	0.333 4	0.863 1	0.284 9
二阶导数 + MSC	8	0.911 5	0.273 5	0.892 8	0.252 1
二阶导数 + SNV	8	0.913 0	0.271 1	0.872 5	0.274 9
二阶导数 + 矢量归一化	7	0.909 5	0.276 5	0.892 3	0.252 7
二阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	7	0.916 8	0.265 1	0.877 0	0.270 0
一阶导数	7	0.930 0	0.243 2	0.929 9	0.203 8
一阶导数 + MSC	7	0.893 3	0.300 2	0.909 2	0.232 0
一阶导数 + SNV	7	0.930 9	0.301 0	0.910 3	0.230 7
一阶导数 + 矢量归一化	7	0.921 3	0.257 9	0.911 8	0.228 6
一阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	7	0.914 2	0.269 2	0.910 7	0.230 1



A. 水分; B. 总灰分; C. 甘草苷; D. 甘草酸

图 2 偏最小二乘模型真实值与预测值线性关系

Fig. 2 Linear relationship between real value and prediction value of partial least squares model

0.911 1 和 0.917 7,交叉验证均方根误差为 0.107 7 和 0.103 7,二者的测试集及验证集的相关系数和预测均方根误差均比较接近,但经 MSC 对光谱预处理后建模的结果略优于矢量归一化预处理;二阶导数或一阶导数与其他预处理方法联合应用进行光谱预处理后验证集的相关系数高于 MSC 预处理,但其验证集的相关系数较低,测试集与验证集的相关系数相差较大,模型预测结果的准确性略差;整体比较, MSC 光谱预处理较优于其他各预处理方法建模结果。因此,甘草中总灰分偏最小二乘近红外定量模型以选择 15 个主因子、光谱经 MSC 预处理为佳。甘草总灰分含量近红外偏最小二乘模型真实值与预测值线性关系见图 2。

4.3 甘草中甘草苷近红外定量建模 近红外光谱经不同预处理方法处理后甘草中甘草苷含量近红外定量建模结果见表 4。近红外光谱数据经一阶导数预处理后,主因子数为 8,对甘草中甘草苷含量进行偏最小二乘建模,测试集相关系数 0.903 3,预测均方根误差 0.093 9,且验证集相关系数 0.907 6,交叉验证均方根误差为 0.128 9,整体比较,较优于其他各预处理方法建模结果。因此,甘草中甘草苷偏最小二乘近红外定量模型以选择 8 个主因子、光谱经一阶导数预处理为佳。甘草中甘草苷含量近红外偏最小二乘模型真实值与预测值线性关系见图 2。

4.4 甘草中甘草酸近红外定量建模 近红外光谱经不同预处理方法处理后甘草中甘草酸含量近红外定量建模结果见表 5。近红外光谱数据经 SNV 处理后,主因子数为 14,对甘草中甘草酸含量进行偏最小二乘建模,测试集相关系数为 0.918 1,预测均方根误差为 0.274 8,且验证集相关系数为 0.915 7,交叉验证均方根误差为 0.236 0,整体比较,较优于其他各预处理方法建模结果,因此,甘草中甘草酸偏最小二乘近红外定量模型以选择 14 个主因子、光谱经 SNV 预处理为佳。甘草中甘草酸含量近红外偏最小二乘模型真实值与预测值线性关系见图 2。

4.5 讨论 ZHU 等^[13]采用一阶导数和 5 点平滑处理进行甘草近红外光谱预处理,研究光谱波段对偏最小二乘建模的影响,研究结果显示采用遗传算法进行偏最小二乘建模可以建立较优的模型,实现甘草中甘草苷和甘草酸的快速检测。本研究考察了

表 3 不同光谱预处理后甘草灰分偏最小二乘建模参数

Table 3 Partial least squares modeling parameters of total ash in *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma* based on different spectral pretreatment

预处理方法	主因子数	Rp	RMSEP	Rv	RMSECV
不处理	12	0.910 2	0.121 1	0.889 9	0.119 9
矢量归一化	17	0.925 3	0.110 5	0.911 1	0.107 7
MSC	15	0.926 5	0.109 6	0.917 7	0.103 7
SNV	11	0.923 2	0.112 1	0.901 9	0.113 2
二阶导数	6	0.909 9	0.121 3	0.761 9	0.176 3
二阶导数 + MSC	7	0.934 7	0.103 3	0.861 2	0.134 6
二阶导数 + SNV	7	0.933 9	0.103 7	0.864 3	0.133 1
二阶导数 + 矢量归一化	6	0.913 9	0.118 6	0.874 8	0.127 8
二阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	6	0.917 1	0.116 4	0.891 1	0.119 2
一阶导数	10	0.931 5	0.105 8	0.880 3	0.125 0
一阶导数 + MSC	8	0.933 5	0.104 3	0.905 1	0.111 3
一阶导数 + SNV	8	0.932 9	0.104 7	0.903 4	0.112 3
一阶导数 + 矢量归一化	8	0.930 7	0.106 4	0.913 3	0.106 4
一阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	11	0.933 9	0.103 9	0.882 5	0.123 9

表 4 不同光谱预处理后甘草中甘草苷偏最小二乘建模参数

Table 4 Partial least squares modeling parameters of liquiritin in *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma* based on different spectral pretreatment

预处理方法	主成分数	Rp	RMSEP	Rv	RMSECV
不处理	9	0.919 8	0.100 7	0.899 4	0.134 5
矢量归一化	9	0.909 8	0.106 9	0.884 4	0.144 2
MSC	9	0.920 8	0.100 2	0.894 3	0.137 8
SNV	9	0.918 3	0.101 7	0.902 7	0.132 3
二阶导数	6	0.853 4	0.136 3	0.859 5	0.158 9
二阶导数 + MSC	7	0.919 2	0.101 2	0.892 5	0.139 0
二阶导数 + SNV	7	0.916 8	0.102 7	0.891 1	0.139 9
二阶导数 + 矢量归一化	6	0.886 0	0.120 2	0.881 9	0.145 7
二阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	6	0.899 4	0.112 9	0.871 0	0.152 3
一阶导数	8	0.930 3	0.093 9	0.907 6	0.128 9
一阶导数 + MSC	7	0.912 2	0.105 5	0.901 5	0.133 1
一阶导数 + SNV	7	0.911 3	0.106 0	0.904 6	0.131 0
一阶导数 + 矢量归一化	4	0.906 5	0.108 8	0.874 6	0.150 2
一阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	8	0.904 7	0.109 8	0.891 4	0.139 8

近红外光谱预处理方法对偏最小二乘建模结果的影响, 研究结果显示甘草苷和甘草酸近红外偏最小二乘建模的最佳预处理方法分别为一阶导数和 SNV。二者研究结果表明, 光谱预处理及光谱波段对近红外偏最小二乘建模均会产生影响。

5 结论

本研究考察了常用近红外光谱预处理方法单用或混合使用对甘草在 2015 年版《中国药典》规定的

检测项及指标成分含量定量建模的影响, 研究结果显示, 不同预处理方法对不同成分预测模型的影响不同。其中, 水分和甘草苷的预处理方法以一阶导数处理较优; 总灰分的预处理方法以 MSC 处理较优, 但与矢量归一化差别不大; 甘草酸的预处理方法则以 SNV 处理较优。本研究结果建立了较优的甘草药典检测成分的近红外定量模型, 其模型的准确度均较高, 为实现甘草各成分的快速检测奠定了基础。

表 5 不同光谱预处理后甘草中甘草酸偏最小二乘建模参数

Table 5 Partial least squares modeling parameters of glycyrrhizic acid in *Glycyrrhizae Radix et Rhizoma* based on different spectral pretreatment

预处理方法	主成分数	Rp	RMSEP	Rv	RMSECV
不处理	19	0.919 9	0.271 7	0.907 3	0.247 5
矢量归一化	17	0.920 6	0.270 6	0.886 7	0.273 6
MSC	14	0.920 1	0.271 5	0.909 4	0.244 7
SNV	14	0.918 1	0.274 8	0.915 7	0.236 0
二阶导数	9	0.823 3	0.403 6	0.828 5	0.336 7
二阶导数 + MSC	8	0.925 3	0.262 3	0.868 8	0.294 4
二阶导数 + SNV	8	0.923 2	0.266 2	0.873 6	0.289 0
二阶导数 + 矢量归一化	10	0.868 9	0.347 7	0.879 0	0.282 8
二阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	9	0.885 0	0.325 6	0.892 7	0.266 2
一阶导数	10	0.934 2	0.246 4	0.903 8	0.252 1
一阶导数 + MSC	10	0.940 8	0.233 6	0.867 6	0.295 8
一阶导数 + SNV	10	0.938 5	0.238 0	0.868 8	0.294 5
一阶导数 + 矢量归一化	10	0.938 2	0.238 7	0.847 0	0.317 9
一阶导数 + 矢量归一化 + 平滑处理	10	0.934 3	0.246 1	0.858 4	0.305 8

[参考文献]

[1] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典. 一部[M]. 北京:中国医药科技出版社,2015:86.

[2] Roggo Y, Chalus P, Maurer L, et al. A review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies [J]. J Pharmaceut Biomed Anal,2007,44(3):683-700.

[3] 李晓明,杨滨. 近红外光谱技术的研究进展及其在中药领域的应用[J]. 中国实验方剂学杂志,2006,12(12):69-72.

[4] 张清娜,臧恒昌. 近红外光谱技术在中药领域的研究进展[J]. 食品与药品,2017,19(4):302-305.

[5] 狄天云,高晓娟,张霞,等. 基于指标成分与近红外光谱对宁夏野生和栽培甘草的比较鉴别研究[J]. 中国中药杂志,2017,42(3):536-541.

[6] 褚小立,袁洪福,陆婉珍. 近红外分析中光谱预处理及波长选择方法进展与应用[J]. 化学进展,2004,16(4):528-542.

[7] 柳艳云,胡昌勤. 近红外分析中光谱波长选择方法进展与应用[J]. 药物分析杂志,2010,30(5):968-975.

[8] 吴静珠,李慧,王克栋,等. 光谱预处理在农产品近红外模型优化中的应用研究[J]. 农机化研究,2011,33(3):178-181.

[9] 蔡剑华,王先春. 基于经验模态分解的近红外光谱预处理方法[J]. 光学学报,2010,30(1):267-271.

[10] 尼珍,胡昌勤,冯芳. 近红外光谱分析中光谱预处理方法的作用及其发展[J]. 药物分析杂志,2008,28(5):824-829.

[11] 齐琛,方秋莲. 偏最小二乘建模在 R 软件中的实现及实证分析[J]. 数学理论与应用,2013,33(2):103-111.

[12] 张琳,张黎明,李燕,等. 偏最小二乘法在傅里叶变换红外光谱中的应用及进展[J]. 光谱学与光谱分析,2005,25(10):1610-1613.

[13] ZHU Y, CHEN X, WANG S, et al. Simultaneous measurement of contents of liquirtin and glycyrrhizic acid in liquorice based on near infrared spectroscopy [J]. Spectrochim Acta A,2018,196:209-214.

[责任编辑 顾雪竹]