

# 麻花艽近红外定量检测模型的影响因素研究

李佩佩<sup>1,2</sup>,龙若兰<sup>1,2</sup>,李 朵<sup>1,2</sup>,冯 丹<sup>1,2</sup>,孙 菁<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>中国科学院西北高原生物研究所 青海省青藏高原特色生物资源研究重点实验室,西宁 810008;

<sup>2</sup>中国科学院大学,北京 100049

**摘要:**近红外定量检测模型的质量受谱图质量、建模方法等诸多因素影响,本研究以中藏药材麻花艽为例,探讨光谱采集条件及建模集选择对模型的影响。结果表明,扫描次数、分辨率及装样高度对谱图质量无显著影响。随着建模集样本量的增加,模型质量先升后降再升最后趋于稳定;模型质量与样本集含量间无关;而建模集 SD 值对模型的影响表明,样本量及样品浓度范围对模型质量的影响更大。可见,在进行建模集样本的选择时,样品浓度范围要大,而样本量不是越大越好,在进行低含量化合物建模时可通过转换含量单位进行建模。

**关键词:**近红外定量模型;谱图质量;建模集;麻花艽

中图分类号:O657.33

文献标识码:A

文章编号:1001-6880(2023)Suppl-0066-07

DOI:10.16333/j.1001-6880.2023.S.010

## Analysis of influencing factors to NIR qualitative models of *Gentiana straminea* Maxim.

LI Pei-pei<sup>1,2</sup>,LONG Ruo-lan<sup>1,2</sup>,LI Duo<sup>1,2</sup>,FENG Dan<sup>1,2</sup>,SUN Jing<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Qinghai Key Laboratory of Qinghai-Tibet Plateau Biological Resource,Northwest Institute of Plateau Biology,Chinese Academy of Sciences,Xining 810008,China;<sup>2</sup>University of Chinese Academy of Sciences,Beijing 100049,China

**Abstract:**The quality of NIR quantitative detection models is influenced by many factors such as spectral quality and modelling methods. In this study, the effect of spectral acquisition conditions and modelling set selection on the models were investigated using the Chinese and Tibetan herb *Gentiana straminea* Maxim. . The results showed that the scan times, resolution and sample loading height did not have significant effects on the quality of the spectra. As the sample size of the modelling set increased, the model quality increased firstly, then decreased and stabilized at last. The model quality was found independent of the sample set content. And the effect of SD values on the model indicated that the sample size and the concentration range of the sample had great influence on the model quality. It could be seen that when making the selection of the modelling set samples, the sample concentration range should be large, whereas a larger sample size was not better. And the modelling can be carried out by converting the content units when content was too low.

**Key words:**NIR quantitative model;spectra quality;modeling set;*Gentiana straminea* Maxim.

随着分析化学技术的不断发展,高效液相色谱法、紫外分光光度法、质谱法等方法在药材质量评价中的应用越来越广泛<sup>[1-3]</sup>,但是这些方法耗时、环境不友好,且具有一定的数据滞后性。与传统的湿化学分析技术相比,近红外光谱分析技术快速、高效、便宜、无污染,可以显著提高样品的日检测量,目前该技术已经被广泛用于医药<sup>[4,5]</sup>、农业<sup>[6]</sup>、林业<sup>[7]</sup>、

食品<sup>[8,9]</sup>等领域,可通过模型的构建进行化合物含量快速定量分析<sup>[10,11]</sup>,从而实现对药材品质的快速评价。定量模型的质量受诸多因素的影响,模型性能的好坏直接决定了模型的适用性与稳健性。通常情况下,谱图处理、谱图特征提取、建模方法优化等数据处理方法是影响模型质量的主要因素,常用的方法包括小波变换、神经网络、偏最小二乘等<sup>[12-14]</sup>,此外,样品的分析部位也对模型质量有影响,邹俊丞等<sup>[15]</sup>利用树叶、树皮及综合的方法建立预测柑橘黄龙病的近红外快速检测模型,结果发现以树皮为样本建立的检测模型其模型精度及预测能力均保持在

收稿日期:2022-05-16 接受日期:2022-07-07

基金项目:青海省科研基础条件平台项目(2020-ZJ-T05);中国科学院仪器功能开发技术创新项目(2022gl09)和青海省重点实验室建设专项(2021-ZJ-Y14)

\*通信作者 E-mail:sunj@nwipb.cas.cn

良好水平。谱图作为模型建立的基础,高质量的谱图有利于提升模型性能,而扫描次数、分辨率、扫描速度、样品状态等<sup>[16]</sup>均可影响谱图质量,且重复谱图间误差越小模型准确度越高。目前对建模集的研究集中在样本的选择方法上,常用的方法有 Kennard-Stone 方法(KS 算法)、光谱-理化值共生距离法 (sample set partitioning based on joint xy distance, SPXY)、浓度梯度法、聚类分析等方法<sup>[17,18]</sup>,而围绕建模集样本量、样本集标准差 (standard deviation, SD) 值对模型影响等的研究则较少。

麻花艽 (*Gentiana straminea* Maxim.) 为龙胆科 (Gentianaceae) 龙胆属 (*Gentiana*) 秦艽组 (sect. *Cru-ciata*) 多年生草本植物<sup>[19]</sup>,是 2020 版《中华人民共和国药典》中收载的四种正品秦艽的基源植物之一<sup>[20]</sup>,同时也是《藏药志》中收载的传统藏药材<sup>[21]</sup>,具有悠久的用药历史和较高药用价值,可用来祛风湿、清湿热、止痹痛等,围绕麻花艽药材质量评价工作,既有从传统分析化学角度开展的工作<sup>[22,23]</sup>,也有利用近红外光谱 (near infrared spectrum, NIR) 建立的评价模型<sup>[24]</sup>,但是对于影响模型质量相关的谱图采集条件及建模集因素并未涉及,使模型建立的重要因素未得到考虑。因此,本研究以传统中藏药材麻花艽为研究载体,通过开展光谱采集条件、建模集样本量、建模集样本含量浓度范围、建模集样本 SD 值等研究工作,探讨了上述因素对麻花艽近红外定量模型质量的影响,以期为后期模型性能提升提供科学依据,也为其他模型建立时建模集及谱图采集提供思路,可在一定程度上丰富近红外光谱相关研究理论。

## 1 材料与方法

### 1.1 仪器与材料

#### 1.1.1 样品来源

于目标植物花期期间,共采集 24 个不同居群样品,得到 360 份样品。原植物标本经中国科学院西北高原生物研究所孙菁研究员鉴定为龙胆科 (Gentianaceae) 龙胆属 (*Gentiana*) 麻花艽 (*Gentiana straminea* Maxim.)。

#### 1.1.2 仪器

傅里叶变换红外光谱仪近红外模块 (Nicolet iS50, ThermoFisher, 美国);高速旋转研磨仪(北京格瑞德曼仪器设备有限公司,中国);烘箱(上海一恒科学仪器有限公司,中国);纯水机 (Million-Q Integral 3, 默克化工技术(上海)有限公司,德国);万分

之一电子天平 (ME104, Mettler Toledo, 瑞士);样品筛(100 目,浙江上虞市道墟张兴纱筛厂,中国);样品杯(Thermo, 美国)。

### 1.2 采集条件对谱图质量的影响

考虑可能影响近红外光谱采集的因素,在样品颗粒度为 100 目的前提下,设计 3 因素 4 水平的正交试验表,即分辨率 (2、4、6、8 cm<sup>-1</sup>)、扫描次数 (8、16、32、64) 和装样厚度 (0.1、0.5、1.0、2.0 cm)。按 16 组正交试验条件进行全波段 (10 000 ~ 4 000 cm<sup>-1</sup>) 光谱扫描,每次试验重复 3 次。试验结果以峰-峰值(峰-峰值一定程度上反映信噪比)为指标,考察红外光谱采集条件对谱图质量的影响。

### 1.3 建模集对模型质量影响因素的考察

#### 1.3.1 建模集样本量

以 2020 版《中华人民共和国药典》规定秦艽类药材中龙胆苦苷及马钱苷酸总量(应大于 2.5%) 作为评价标准,所建定量模型为二者总和所占百分比的预测模型。以 30 个样本为一个梯度,将建模集样本量分别设置为 30、60、90、120、150、180、210、240、270、300、330、360,共得到 12 个具有不同样本量的模型。

建模集样本量选择时,首先将样品龙胆苦苷和马钱苷酸活性成分含量总和按从低到高的顺序进行梯度排列,然后依次将样本划分为对应数量的组数,即样本量为多少个则划分为多少组,所有组的前一半取各组的第一个样品,后一半取各组的最后一个样品,以此保证不同样本量的建模集均包括化合物含量最大值及最小值,建模集样本浓度范围一致。如建模集样本量为 30 时,则将 360 份样品按含量从小到大的顺序排列,并分为 30 组,每组包含 12 个样品,在 1 ~ 15 分组中,选每组的第一个样品为建模集,在 16 ~ 30 分组中选每组的最后一个样品为建模集,以此类推,共 30 个样品组成样本集。

#### 1.3.2 建模集样本含量

建模集样本含量考察分为两部分。“1.2.1”项下建模集样本量的考察是根据麻花艽中龙胆苦苷及马钱苷酸总和的百分含量进行,改变活性成分单位后其含量数量级大小会发生变化。因此,为了考察样本浓度对建模的影响,一方面将“1.2.1”项中 12 个模型中龙胆苦苷及马钱苷酸总和由百分数改为 mg/g 单位后再建模进行比较;另一方面将样品按含量从低到高的顺序进行排列,根据“1.2.1”项中优化出的最佳建模集样本量,得到若干样本量相同但

样本含量浓度范围不同的模型,考察建模集样本含量高低对模型质量的影响。

### 1.3.3 建模集 SD 值

主要讨论了建模集样本量相同及不同情况下 SD 值对模型的影响。

## 1.4 模型评价

根据之前研究,以上所有模型的建立均使用 PLS 方法,谱图预处理条件为 MSC + D2, 谱图平滑为 Norris(5,5), 建模波段为  $8\ 843 \sim 4\ 347\ \text{cm}^{-1}$ <sup>[23]</sup>。模型的考察指标为校正相关系数(coefficient of calibration,  $R_{\text{cal}}$ ), 交叉验证相关系数(coefficient of cross validation,  $R_{\text{cv}}$ ), 校正误差均方根(root mean square errors of calibration, RMSEC) 和留一交叉验证误差均方根(root mean square errors of cross validation, RMSECV)。

## 2 结果与讨论

### 2.1 采集条件对谱图质量的影响

#### 2.1.1 正交试验

正交试验因素水平表及实验结果如表 1 和表 2 所示。由结果可知,以 16 号试验峰-峰值最高,达到了 0.337 6, 可确定为实际最优组合,其三次重复实验的相关系数分别为 1.000 0、0.999 6、0.999 6, RSD 为 0.023%, 表明实验重复性好。

#### 2.1.2 正交试验极差分析

对正交试验结果进行极差分析,结果如下(见表 3)。根据同一因素不同水平的 K 均值可知, A 因素在 L3 水平结果最好, K 值为 1.327 5; B 因素在 L4 水平结果最好, K 值为 1.322 8; C 因素在 L1 水平结果最好, K 值为 1.326 7。因此,理论最优组合为  $A_3B_4C_1$ (即分辨率 $6\ \text{cm}^{-1}$ , 扫描次数为 64, 装样厚度为 0.1 cm)。根据 R 值可知,装样厚度是影响近红外光谱采集的主要因素( $R$  值为 0.006 7),其次为分辨率( $R$  值为 0.006 0), 扫描次数( $R$  值为 0.003 7)。

表 1 近红外正交试验因素水平表

Table 1 Factor-level table of NIR orthogonal test

水平 Level	因素 Factor		
	A 分辨率 Resolution ratio ( $\text{cm}^{-1}$ )	B 扫描次数 Scan times	C 装样厚度 Sample height (cm)
L1	2	8	0.1
L2	4	16	0.5
L3	6	32	1.0
L4	8	64	2.0

表 2 近红外正交试验结果

Table 2 Orthogonal test result of NIR

试验号 No.	因素 Factor			峰峰值 Peak-to-peak value
	A 分辨率 Resolution ratio ( $\text{cm}^{-1}$ )	B 扫描次数 Scan times	C 装样厚度 Sample height (cm)	
1	1	1	1	0.330 6
2	1	2	2	0.328 7
3	1	3	3	0.325 6
4	1	4	4	0.325 2
5	2	1	2	0.328 7
6	2	2	1	0.325 3
7	2	3	4	0.320 4
8	2	4	3	0.329 1
9	3	1	3	0.334 3
10	3	2	4	0.329 1
11	3	3	1	0.333 2
12	3	4	2	0.330 9
13	4	1	4	0.325 3
14	4	2	3	0.328 3
15	4	3	2	0.328 7
16	4	4	1	0.337 6

表 3 近红外正交试验极差分析结果

Table 3 Range analysis result of NIR orthogonal test

K 值 K value	A 分辨率 Resolution ratio ( $\text{cm}^{-1}$ )	B 扫描次数 Scan times	C 装样厚度 Sample height (cm)
K1	1.310 1	1.318 9	1.326 7
K2	1.303 5	1.311 4	1.317 0
K3	1.327 5	1.307 9	1.317 3
K4	1.319 9	1.322 8	1.300 0
K1 均值 Mean value of K1	0.327 5	0.329 7	0.331 7
K2 均值 Mean value of K2	0.325 9	0.329 4	0.329 4
K3 均值 Mean value of K3	0.331 9	0.327 0	0.329 3
K4 均值 Mean value of K4	0.330 0	0.330 7	0.325 0
R	0.006 0	0.003 7	0.006 7

#### 2.1.3 正交试验方差分析

为了分析分辨率、扫描次数和装样厚度对近红外光谱采集结果的影响,对正交试验结果进行方差分析,结果见表 4。根据 F 值可知,分辨率、扫描次数和装样厚度对近光谱采集的影响均未达到显著水平。其中,装样厚度是影响近红外光谱采集的主要因素( $F$  值为 4.434),其次为分辨率( $F$  值为

4. 020)、扫描次数( $F$  值为 1. 664),与极差分析结果一致。

表 4 近红外正交试验方差分析结果

Table 4 Variance analysis result of NIR orthogonal test

因素 Factor	自由度 <i>df</i>	平方和 Sum of squares	均方 Mean square	$F$ 值 <i>F</i> value	显著性 Significance	$F_{0.05}$	$F_{0.01}$
分辨率 Resolution ratio	3	0.000 084	0.000 028	4.02	不显著	4.76	9.78
扫描次 Scan times	3	0.000 035	0.000 012	1.66	不显著	-	-
装样厚度 Sampe height	3	0.000 093	0.000 031	4.43	不显著	-	-
误差 Error	6	0.000 042	0.000 007	-	-	-	-

## 2.2 建模集对模型质量影响因素的考察

### 2.2.1 建模集样本量对模型质量的影响

不同麻花艽样本量条件下所建模型各指标结果如图 1 所示。由图 1 可知,各定量模型建模集及交叉验证集的  $R$  值及 RMSE 值随样本量的增加,变化趋势一致: $R$  值先升后降再升,最后趋于稳定,当建模集样本量为 90 时  $R$  值最大( $R_{\text{cal}} = 0.918 1, R_{\text{cv}} = 0.838 9$ );RMSE 值先降后升再降,随后趋于稳定,当建模集样本量为 90 时 RMSE 值最小(RMSEC = 0.49, RMSECV = 0.67)。当建模集样本量分别为 30 和 150 时,模型效果相对其他模型较差。由此可知,并非建模集样本量越多模型质量就越好,当样本量

达到一定程度时,模型的质量趋于稳定,基于  $R$  值及 RMSE 值的变化,建模集样本量为 90 时,模型质量最好;当样本量为 240 时,模型性能趋于稳定。严衍录等研究结果表明,建立模型应遵循“少而精”的原则,当建模样品数太多时,由于干扰信息的增强,会影响模型的质量,推荐建模数量在 50 ~ 300 之间<sup>[25]</sup>,这很好的解释了随着建模集样本量的增加,模型效果下降的现象。可见,样本量小模型效果差,且适应性也较差;而样本量过大又会因引入过多误差而降低模型质量,在开展麻花艽定量模型的建立时,应选择合适的样本量。

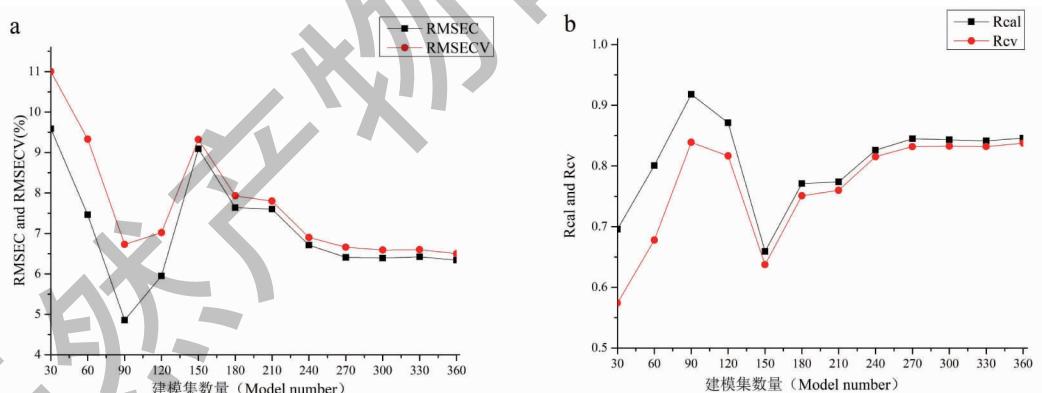


图 1 建模集不同样本量对模型效果的影响

Fig. 1 The influence of different modeling number on model performance.

### 2.2.2 建模集样本含量对模型质量的影响

#### 2.2.2.1 含量单位对模型的影响

同一样本集,在改变含量单位的情况下,其数值大小会发生改变。由图 2 可知,“2.2.1”项下各模型改变含量单位后,各模型  $R_{\text{cal}}$  值、 $R_{\text{cv}}$  值基本保持不变,RMSEC 值、RMSECV 值趋势与含量单位为% 时趋势一致,数值相对变大,但本质上是由于改变单位后数量级变大造成的。由此可见,针对同一样本集,

不论数据采用什么含量表述单位,麻花艽建模结果基本一样,也就是说含量单位的变化对麻花艽模型效果基本没有影响。通常情况下,含量低于 0.10% 的化合物在利用近红外光谱建立定量模型时具有一定的局限,由研究结果可知,利用近红外光谱技术对含量过低的化合物建模时,可考虑通过改变其含量单位、增大含量值的数量级来建模。

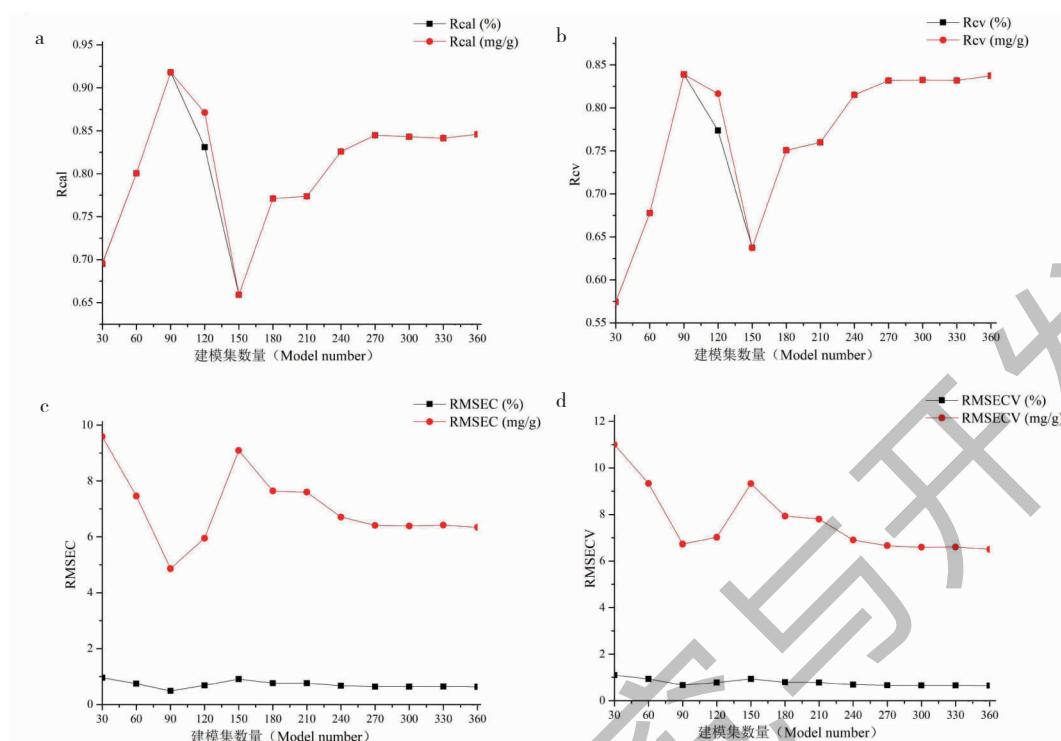


图 2 不同样本量的各模型改变含量单位对模型参数的影响

Fig. 2 Result of parameters of models in different modeling number by different units

### 2.2.2.2 建模集含量范围对模型的影响

由于同一建模集改变含量单位对模型效果影响不大,所以只考虑含量单位为%时的情况。根据“2.2.1”项中建模集样本量对麻花艽模型效果影响的考察,当样本量为90时模型质量最好。考察建模集含量高低对模型影响时,将样品按含量从低到高的顺序,以90个样品为一组分为不同含量范围来建模,360份样品分别设置1~90、91~180、181~270、

271~360 4 个含量范围进行建模,在此条件下各模型评价指数如表5所示。由表5可见,在相同样本量下,不同含量范围对建模有一定影响,所得4个模型质量均不好,模型R值较低,表明模型质量与样品含量高低之间并无内在关联,并不是样品含量越高模型质量越好,这一结果与“2.2.2.1”项中改变含量单位使数值变大对模型质量无影响的结果基本一致。

表5 不同含量浓度变化范围对建模效果的影响

Table 5 The influence of content variation on model performance

建模集 Modeling set	建模集含量 Content of modeling set(%)	SD	RMSEC	R <sub>cal</sub>	RMSECV	R <sub>cv</sub>
1~90	1.35~4.42	0.75	0.479 0	0.763 0	0.551 0	0.675 3
91~180	4.43~5.16	0.22	0.211 0	0.205 3	0.220 0	0.026 0
181~270	5.17~5.96	0.23	0.214 0	0.343 2	0.231 0	0.122 4
271~360	6.04~7.24	0.36	0.325 0	0.401 6	0.344 0	0.274 1

### 2.2.3 建模集 SD 值对模型质量的影响

在相同的建模集含量范围内,不同样本量建模集 SD 值虽然相同,但是其模型效果不同,表明在含量范围相同的情况下建模集 SD 值对模型没有影响,对模型影响较大的是建模集样本量。而对于相

同样本量的模型来说,模型的 R 值和 RMSE 值随 SD 值的升高而升高(见图3)。R 值的趋势表明,建模集的选择要有一定的离散性,麻花艽模型适应的含量范围要尽可能大。

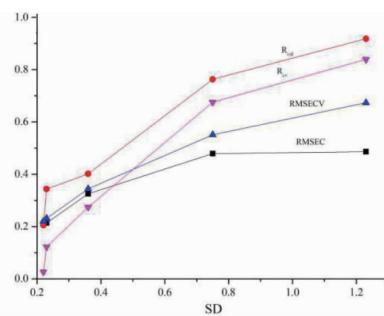


图3 相同建模集样本量在不同含量范围内各模型参数

Fig. 3 Effect of SD on parameters by models of different content range at the same modeling number

### 3 结论

在分析谱图采集条件对谱图质量影响的基础上,以360份麻花艽样品为研究对象,探讨了建模过程中建模集样本量、样本含量范围、建模集SD值对麻花艽定量模型质量的影响,结论如下:1)通过正交试验及方差分析可知,分辨率、扫描次数、装样高度对谱图质量的影响无统计学意义;2)建模集样本量对模型影响较大,随着样本量的增加模型质量出现了先升后降再升的趋势;模型质量与样本集含量间无关;而样本量相同时,模型质量随SD值的升高而升高。

综上,在进行麻花艽建模集样本的选择时,一方面要使建模集能够涵盖活性成分含量最大值与最小值,尽可能加大样本的离散性,使建模集具有一定的代表性;另一方面要选择合适的样本量,这也提示我们在进行后期的模型修正时不能一味地通过增加样本量来实现,要考虑对原有建模集进行适当的添加与删除。

### 参考文献

- Wang RJ, Tian Y, Wu JW, et al. Analysis of medicinal components in the flower of *Hibiscus manihot* L. [J]. Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发), 2022, 34:588-597.
- Li DH, Wu HW, Li GF, et al. Study on content of total polyphenols and total anthraquinones in rhubarb and its spectrum-effect relationship of anti-oxidation *in vitro* [J]. Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发), 2022, 34:541-552.
- Kou L, Liu YM, Liu N, et al. Uncertainty evaluation for determination of total xanthones content in ethanol extracts from *Gentianopsis paludosa* [J]. Tradit Chin Drug Res Clin Pharm(中药新药与临床药理), 2021, 32:400-405.
- Wei YH, Nie L, Gao LL, et al. An integrated strategy to identify and quantify the quality markers of Xinkeshu tablets based on spectrum-effect relationship, network pharmacology, plasma pharmacochemistry, and pharmacodynamics of zebrafish [J]. Front Pharmacol, 2022, 13:899038.
- Qi SY, Yao SC, Yin LH, et al. A strategy to assess quality consistency of drug products [J]. Front Chem, 2019, 7:171.
- Wold JP, Airado-Rodríguez D, Holtekjolen AK, et al. Rapid and nondestructive determination of aleurone content in pearl barley fractions of barley by Near-Infrared (NIR) and fluorescence spectroscopies [J]. J Agric Food Chem, 2017, 65: 1813-1821.
- Kunze DCGC, Pastore TCM, Rocha HS, et al. Correction of the moisture variation in wood NIR spectra for species identification using EPO and soft PLS2-DA [J]. Microchem J, 2021, 171:106839.
- Amorilloa T, Ciccorittib R, Carbone K. Vibrational spectroscopy as a green technology for predicting nutraceutical properties and antiradical potential of early-to-late apricot genotypes [J]. Postharvest Biol Tec, 2019, 155:156-166.
- Abasi S, Minaei S, Jamshidi B, et al. Dedicated non-destructive devices for food quality measurement: a review [J]. Trends Food Sci Tech, 2018, 78:197-205.
- Lan Z, Zhang YF, Zhang Y, et al. A mid-level data fusion approach for evaluating the internal and external changes determined by FT-NIR, electronic nose and colorimeter in Curcumae Rhizoma processing [J]. J Pharmaceut Biomed, 2021, 200:1-10.
- Caceres-Nevado JM, Garrido-Varo A, De Pedro-Sanz E, et al. NIR handheld miniature spectrometer to increase the efficiency of Iberian pig selection schemes based on chemical traits [J]. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc, 2021, 258:119865.
- Bec KB, Grabska J, Huck CW. Current and future research directions in computer-aided near-infrared spectroscopy: a perspective [J]. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc, 2021, 254:119625.
- Cardoso VGK, Poppi RJ. Non-invasive identification of commercial green tea blends using NIR spectroscopy and support

- vector machine[J]. *Microchem J*, 2021, 164: 106052.
- 14 Ni LJ, Chen HX, Hong SJ, et al. Near infrared spectral calibration model transfer without standards by screening spectral points with scale invariant feature transform from master samples spectra[J]. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 2021, 260: 119802.
- 15 Zou JC, Lu ZJ, Qiao N, et al. Assessment of influence sampling position variability on precision of near infrared models for Huanglongbing of navel orange[J]. *Spectrosc Spectr Anal (光谱学与光谱分析)*, 2020, 40: 2605-2610.
- 16 Wang Q, Liu L, Gao TC, et al. A study on the computational model for high spectral infrared sounder by Fourier transform technique and its influence factors[J]. *Spectrosc Spectr Anal (光谱学与光谱分析)*, 2019, 39: 1711-1716.
- 17 Chu XL. Practical Manual of Near Infrared Spectral Analysis Techniques(近红外光谱分析技术实用手册)[M]. Beijing: China Machine Press, 2016; 122-123.
- 18 Chu XL. Molecular Spectroscopy Analytical Technology Combined with Chemometrics and its Applications(化学计量学方法与分子光谱分析技术)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2011; 259-260.
- 19 Editorial Board of the Flora of China. *Flora Reipublicae Popularis Sinicae*: Vol. 62 (中国植物志: 62 卷)[M]. Beijing: Science Press Ltd, 1988; 62.
- 20 National Pharmacopoeia Committee. *Pharmacopoeia Of The People's Republic Of China(中华人民共和国药典)[M]*. Beijing: Science Press Ltd, 2020; 265-266.
- 21 Northwest Institute of Plateau Biology, Chinese Academy of Sciences. *Tibetan Medicine Flora (藏药志)[M]*. Xining: Qinghai People's Publishing House, 1991; 9-10.
- 22 Jia N, Li YW, Wu Y, et al. Comparison of the anti-inflammatory and analgesic effects of *Gentiana macrophylla* Pall. and *Gentiana straminea* Maxim., and identification of their active constituents[J]. *J Ethnopharmacol*, 2012, 144, 638-645.
- 23 Ding WZ, Wang HX, Zhou Q, et al. Establishment and application of a new HPLC qualitative and quantitative assay for *Gentiana Macrophyllae Radix* based on characteristic constituents of anofinic acid and its derivatives. *Biomed Chromatogr*, 2018, 32: 4341.
- 24 Li PP, Luan ZJ, Li D, et al. A novel method to rapidly evaluate the quality of the traditional chinese medicine *Gentiana straminea* Maxim. using NIR coupled with chemometrics[J]. *Spectrosc Lett*, 2020, 53: 1-11.
- 25 Yan YL. Fundamentals and Applications of Near Infrared Spectroscopy(近红外光谱分析基础与应用)[M]. Beijing: China Light Industry Press, 2005; 1-4.

(上接第 65 页)

- 19 Yan XT, Chen HG, Zhou X. Research progress of rheumatoid arthritis effect and mechanism of flavonoids [J]. *Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发)*, 2019, 31: 1101-1108.
- 20 Yang SH, Chen HL, Wang WQ, et al. Antiglycation activity, acetylcholine esterase and  $\alpha$ -glucosidase inhibitory activity of total flavonoids from corn silk[J]. *Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发)*, 2019, 31: 1230-1239.
- 21 Xi BT, Zhong ML, Cao HK, et al. Hepatoprotective effects and mechanism of *Cyclea hypoglauca* (Schauer) Diels total flavonoids on mice with acute liver injury induced by carbon tetrachloride[J]. *Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发)*, 2018, 30: 1208-1213.
- 22 Huang SM, Gao Y, Cao HK, et al. Protective effects and functional mechanism of *Clerodendrum philippinum* Schauer var. simplex mordenke total flavonoids on acute liver injury induced by carbon tetrachloride in mice[J]. *Nat Prod Res Dev (天然产物研究与开发)*, 2018, 30: 212-217.
- 23 Zhang SL, You SP, Liu T, et al. Preventive effects of total flavonoids from *Nymphaea candida* on  $CCl_4$  induced acute liver injury in mice[J]. *Nat Prod Res Dev(天然产物研究与开发)*, 2016, 28: 2017-2020.
- 24 Dilmurat M, Guo YJ, Cheng YF, et al. Content determination of three flavonoids in roots, stems, leaves and flowers of *Caragana altaica* Kom. Pojark by HPLC method[J]. *J Xinjiang Med Univ(新疆医科大学学报)*, 2017, 40: 1346-1348.
- 25 Feng XL, Li CY, Luo XP, et al. Determination of four components from *Hemerocallis citrina* Baroni. of different regions by HPLC[J]. *China J Tradit Chin Med Pharm(中华中医药杂志)*, 2018, 33: 1124-1127.
- 26 Yu QR, Yan LZ, Tan XX. HPLC determination of total flavonoids in the *Ginkgo biloba* extract[J]. *J Capital Norm Univ:Nat Sci(首都师范大学学报:自然科学版)*, 2009, 30: 32-34.