NIRS 法快速检测金银花提取液中 5 种药效成分及终点判断

臧振中[1]，易　秀[1]，李糯柔[1]，杨　明[1]，管咏梅[1,2]*

（1. 江西中医药大学，现代中药制剂教育部重点实验室，江西南昌 330004；2. 江西中医药大学，经典名方现代中药创制全国重点实验室，江西南昌 330004）

摘要：使用近红外光谱技术（NIRS）结合机器学习算法，对金银花提取过程中的 5 种药效成分［总黄酮（**1**）、绿原酸（**2**）、木犀草苷（**3**）、异绿原酸 A（**4**）及异绿原酸 C（**5**）］进行定量分析。采用紫外-可见分光光度法和 HPLC 法测定上述 5 种成分的含量，以此作为模型参考值，采集金银花提取液的近红外光谱数据，结合偏最小二乘法（PLS）与连续投影算法（SPA）建立各成分的定量校正模型，并通过光谱预处理、异常值剔除及主因子数筛选等方法优化所得模型。2 种算法下，各成分预测值与参考值均拟合良好，所有定量模型的预测相关系数（R_p）均高于 0.9，且预测均方根误差（RMSEP）分别为 0.001 5 ～ 0.027 2 和 0.001 2 ～ 0.031 2。结果表明，NIRS 结合 PLS 与 SPA 所构建的模型均具有较高的判别准确率，可有效监测金银花提取过程中 5 种药效成分的动态变化，为过程终点判断提供了一种可靠、高效的分析工具。

关键词：近红外光谱技术；机器学习算法；金银花；提取；终点判断；偏最小二乘法；连续投影算法

中图分类号：R917；R284.1　　**文献标志码：**A　　**文章编号：**1001-8255(2026)08-0942-08

引用：臧振中, 易秀, 李糯柔, 等. NIRS法快速检测金银花提取液中5种药效成分及终点判断[J]. 中国医药工业杂志, 2026, **57**(8): 942-949. DOI：10.16522/j.cnki.cjph.2026.08.008

Rapid Detection of Five Pharmacodynamic Components in Honeysuckle Extract and Endpoint Determination by NIRS

ZANG Zhenzhong[1], YI Xiu[1], LI Nuorou[1], YANG Ming[1], GUAN Yongmei[1,2]*

(*1. Key Lab of Modern Chinese Medicinal Formulations, Ministry of Education, Jiangxi University of Traditional Chinese Medicine, Nanchang 330004; 2. National Key Lab of Modern Chinese Medicinal Formulations Based on Classical Prescriptions, Jiangxi University of Traditional Chinese Medicine, Nanchang 330004*)

ABSTRACT: Near-infrared spectroscopy (NIRS) combined with machine learning algorithms was adopted for quantitative analysis of the five pharmacodynamic components during honeysuckle extraction, namely total flavonoids (**1**), chlorogenic acid (**2**), luteoloside (**3**), isochlorogenic acid A (**4**) and isochlorogenic acid C (**5**). The contents of the above five components were determined by ultraviolet-visible spectrophotometry and HPLC as reference values for model calibration. The NIRS data of honeysuckle extract solutions were collected, and quantitative calibration models for each component were established using partial least squares (PLS) and successive projections algorithm (SPA). Furthermore, the models were optimized via spectral preprocessing, outlier elimination, and optimal latent variable number selection. The predicted values for each component under both algorithms showed good agreement with the reference values. The prediction correlation coefficient (R_p) for all quantitative models were above 0.9, and the root mean square error of prediction (RMSEP) ranged from 0.0015 to 0.0272 and from 0.0012 to 0.0312, respectively. The results demonstrated that the models constructed by NIRS coupled with either PLS or SPA possessed high prediction accuracy, which could effectively monitor the dynamic changes of the five pharmacodynamic components during the honeysuckle extraction process and provide a reliable and efficient analytical tool for judging the extraction endpoint.

Key Words: near-infrared spectroscopy; machine learning; honeysuckle; extraction; end point judgment; partial least squares; successive projections algorithm

金银花为忍冬科植物忍冬（*Lonicera japonica* Thunb.）的干燥花蕾或带初开的花，又名银花、双花、二花[1]。金银花性寒，味甘，具有清热解毒的功效[2]；含有有机酸类、挥发油类、黄酮类、环烯醚萜苷类及三萜皂苷类等化学成分，具有抗炎、抗菌、抗病毒及保肝的药理作用[3-4]。中药材提取是中药制剂生产的重要步骤，直接影响产品的最终质量[5]。近红外光谱技术（near-infrared spectroscopy，NIRS）是一种间接分析技术，通过建立校正模型实现对未知样本的定性或定量分析[6-8]。该方法分析效率及性价比高、测试重现性好。NIRS 与化学计量学方法相结合，有助于从样品复杂的光谱信息中得出有效信息，通常用于中药定性和定量分析[9-11]。目前，该技术在中药材检验、评价及产地溯源研究等方面广泛应用[12]。

在实际检测过程中，校正模型会受到多重因素的制约，不同的建模方法也会影响定量校正模型的稳定性和精确性。本研究旨在利用 NIRS 快速检测金银花提取过程中 5 种药效成分的含量，使用偏最小二乘法（partial least squares regression，PLS）与连续投影算法（successive projections algorithm，SPA）构建 2 种模型，并对比二者的有效性和拟合优度，为终点判断提供新思路，同时为基于 NIRS 的定量校正模型在中药材生产过程中的质量管控提供技术参考。

1 仪器与试药

Antaris Ⅱ型傅里叶变换近红外光谱仪（美国 Thermo Fisher 公司）；1260 型高效液相色谱仪（美国 Agilent 公司）；DZTW 型电热套（上海力辰邦西仪器科技有限公司）；EL 303 型电子天平（瑞士 Mettler-Toledo 公司）；A360 型紫外分光光度计［翱艺仪器（上海）有限公司］；微孔滤膜（孔径 0.45 μm，天津市津腾实验设备有限公司）。

金银花药材采购于山东省临沂市平邑县郑城镇同一产区，批号为 20250301、20250302、20250303、20250304、20250401、20250402、20250403、20250501，采集时间为 2025 年 3 月至 5 月的春季采收期，经江西中医药大学邓可众教授鉴定为忍冬科植物忍冬的花蕾；绿原酸（**2**，批号 24101405）、木犀草苷（**3**，批号 24021901）、异绿原酸 A（**4**，批号 25101708）、异绿原酸 C（**5**，批号 23081505）的对照品（含量均≥ 98%）和芦丁对照品（含量≥ 98%，批号 23110710）均购自成都普菲德生物技术有限公司；冰乙酸、甲醇、乙腈及乙醇为分析纯，水为超纯水。

2 方法与结果

2.1 金银花提取过程的样品与光谱采集

2.1.1 样品采集方法

称量干燥金银花药材 25 g 于提取罐中，加入水 300 mL，浸泡 30 min 后煮沸。煮沸时开始计时并取样 5 mL，以此作为第 1 个取样点，取样完毕后及时补水；每隔 5 min 取样 5 mL，30 min 时停止煎煮，取完第 7 个样品后弃去剩余提取液。药渣中再加入水 250 mL，加热至沸腾时开始计时并取第 8 个样品，保持微沸状态，每隔 5 min 取样 5 mL，20 min 时停止煎煮，取完第 12 个样品后弃去剩余提取液。8 批药材均按上述方法提取，每批获得 12 个样品（编号 1 ～ 12），共取样 96 个样品。

2.1.2 光谱采集方法

取经微孔滤膜过滤的提取液适量，置玻璃比色皿中，使用傅里叶变换近红外光谱仪，通过透射方式采集 96 份金银花提取液样品的原始近红外光谱。光谱扫描范围为 4 000 ～ 10 000 cm^{-1}，以水为参比以扣除背景，分辨率为 8 cm^{-1}。每份样品扫描 6 次，扫描次数共计 576 次，求算平均近红外光谱值[13]，作为样品的光谱图。

2.2 色谱条件

色谱柱 Agilent HC-C_{18} 柱（4.6 mm×150 mm，5 μm）；流动相 A 为乙腈，B 为 0.5% 冰乙酸溶液，梯度洗脱（0—15 min，A 13%—22%；15—20 min，A 22%—23%；20—25 min，A 23%—13%）；检测波长 327 nm；柱温 30 ℃；流速 1 mL/min；进样量 10 μL。

2.3 溶液配制

总黄酮（**1**）系列对照品溶液：精密称取干燥至

收稿日期：2025-12-25

基金项目：2024 年度江西省教育厅科学技术研究项目（GJJ2400801）、2024 全国重点实验室自主部署重点研发计划项目（20243BCC31010）、委培博士启动基金项目（2023WBZR007）

作者简介：臧振中，博士研究生，专业方向：中药制剂工艺和智能装备。

通信作者：管咏梅，教授，从事中药新剂型与新技术研究。

恒重的芦丁对照品 0.076 g，置 250 mL 量瓶中，用 30% 乙醇溶解并定容，摇匀，得芦丁标准贮备液；精密吸取适量，用 30% 乙醇稀释成 0、0.01、0.02、0.03、0.04、0.05、0.06 mg/mL 的 **1** 系列对照品溶液。

1 供试品溶液：精密量取 8 批药材经微孔滤膜过滤的提取液各 1 mL，分别置 25 mL 量瓶中，加入 30% 乙醇定容，摇匀，即得。

2、**3**、**4** 和 **5** 混合对照品溶液：精确称取适量 **2**、**3**、**4** 和 **5** 对照品于 50 mL 棕色量瓶中，加 75% 甲醇溶解并定容，配制成 **2**、**3**、**4** 和 **5** 的质量浓度分别为 220.12、65.34、70.25、40.26 μg/mL 的混合对照品溶液。

2、**3**、**4** 和 **5** 供试品溶液：精密量取 8 批药材经微孔滤膜滤过的提取液各 1 mL，分别置 10 mL 量瓶中，加 75% 甲醇定容，摇匀，即得。

2.4　含量测定

2.4.1　1 含量的测定

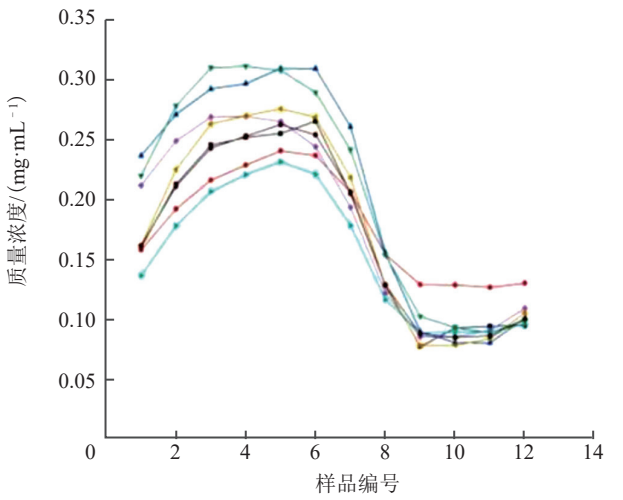
采用芦丁为对照，利用紫外 - 可见分光光度法测定金银花中 **1** 的含量。取“**2.2**”项下 **1** 系列对照品溶液，在 510 nm 处测吸光度（*D*），并以质量浓度（*c*）为横坐标，绘制标准工作曲线，所得线性方程为 $D=12.774c-0.004$，$R^2=0.999\ 26$，表明芦丁在 0 ～ 0.06 mg/mL 与吸光度线性关系良好。由标准曲线计算得各批次金银花提取液中的 **1** 含量为 0.074 ～ 0.337 mg/mL（*n*=96，每个样品平行测定 3 次），各提取时间所得样品中 **1** 含量的变化曲线（图 1）表明，在提取初期 **1** 含量迅速上升，随后趋于平稳。

2.4.2　2、3、4 和 5 的含量测定

采用 HPLC 法测定 **2** ～ **5** 的含量（样本量 *n*=96，每个样品平行测定 3 次）。取“**2.3**”项下 **2**、**3**、**4** 和 **5** 供试品溶液，按“**2.2**”项下条件进样测定。结果如图 2 所示，各提取时间所得样品中 **2** 含量为 0.385 ～ 1.006 mg/mL；**3** 含量为 0.002 ～ 0.016 mg/mL；**4** 含量为 0.008 ～ 0.078 mg/mL；**5** 含量为 0.001 ～ 0.022 mg/mL。

2.5　PLS 定量分析模型的建立

PLS 在一个算法下可同时实现回归建模、数据简化及两组变量之间的相关性分析，具有模型简单、预测能力强等优点，是近红外光谱定量建模中应用最为广泛的化学计量学算法[14]。本研究以 96 份金银花提取液为样本，对其原始光谱进行预处理，去除无关变量并筛选特征波长；借助 PLS 算法耦合 HPLC 法实测数据与近红外光谱，建立定量分析模型，所得数据作为构建近红外光谱模型的一级原始数据。将 96 份金银花提取液样品划分为校正集和验证集，以校正集的相关系数（correlation coefficient of calibration，R_C）、均方根误差（root mean square error of calibration，RMSEC），以及交叉验证均方根误差（root mean square error of cross validation，RMSECV）作为评价参数，评价建立的定量分析模型的性能[15]。



■—20250304；●—20250303；▲—20250401；▼—20250402；◆—20250403；◀—20250301；▶—20250302；◆—20250501。

图 1　金银光提取过程中 1 含量变化曲线

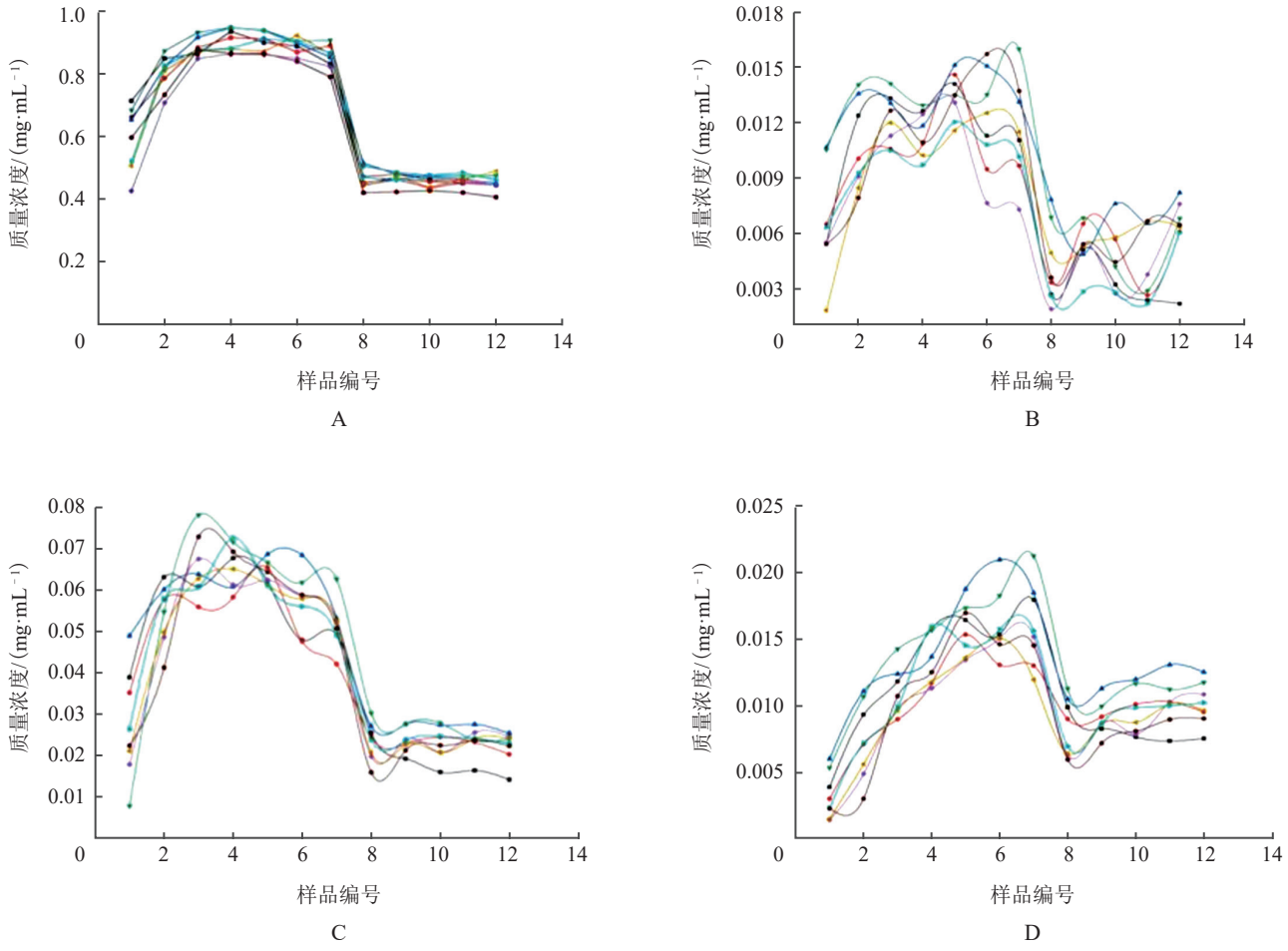
Fig.1　Variation Curves of Components **1** during Honeysuckle Extraction

2.5.1　数据预处理方法筛选

运用 SIMCA-P 14.1、MATLABR 2016a 和 TQ Analyst 9 软件，对比 3 种光谱预处理方案：无预处理、一阶导数 +Norris 平滑（平滑数为 5）和二阶导数（2D）+Norris 平滑（平滑数为 5），并完成最优主因子数筛选。结果表明，**1** ～ **5** 组分对应的优化预处理方法及主因子数分别是：2D+Norris，3 个因子；2D+Norris，7 个因子；2D+Norris，2 个因子；2D+Norris，3 个因子；2D+Norris，4 个因子。

2.5.2　校正集和验证集的划分

随机选取 1 批金银花为验证集，其余 7 批为校



A—**2** 含量变化曲线；B—**3** 含量变化曲线；C—**4** 含量变化曲线；D—**5** 含量变化曲线。

■—20250304；●—20250303；▲—20250401；▼—20250402；◆—20250403；◀—20250301；▶—20250302；◆—20250501。

图 2 金银花提取过程中 2 ～ 5 含量变化曲线

Fig.2 Variation Curves of Components **2** – **5** during Honeysuckle Extraction

正集，即将 96 份金银花提取液样品划分为 12 个验证集与 84 个校正集。验证集和校正集中各组分的数据统计结果如表 1 所示。

2.5.3 波段选择

各批次样品在 7 000 ～ 8 200 cm^{-1} 区间的光谱存在全吸收现象，故剔除。对于一级数据和预处理后的光谱，推荐选择 6 500 ～ 5 500 cm^{-1} 的波数区间进行建模。该波段主要归属于 C—H、O—H 等基团的合频与倍频吸收，与金银花中主要药效成分的分子结构高度相关。在此基础上，进一步采用 MATLAB 7.6.0 软件计算得到竞争自适应重加权采样算法对各组分进行特征波段的精细筛选，最终确定 **1** ～ **5** 的推荐波数具体如下：6 275.23 ～ 5 631.12、6 263.66 ～ 5 634.98、6 126.93 ～

表 1 验证模型数据统计结果

Tab.1 Validate the Statistical Results of Model Data

组分	验证集（n=12）			校正集（n=84）		
	最大值	最小值	平均值 [1)]	最大值	最小值	平均值 [2)]
1	0.245	0.108	0.173	0.337	0.074	0.184
2	0.915	0.400	0.680	1.006	0.385	0.682
3	0.015	0.005	0.010	0.016	0.002	0.008
4	0.068	0.014	0.040	0.078	0.008	0.041
5	0.018	0.004	0.011	0.022	0.001	0.011

注：[1)] 每种组分的样本量 m=12，每个样品平行测定 3 次。[2)] 每种组分的样本量 n=84，每个样品平行测定 3 次。

5 671.75、6 275.23 ～ 5 631.12、6 299.25 ～ 5 874.11 cm^{-1}。

2.5.4 模型性能评价

RMSEC 和预测均方根误差（root mean square error of prediction，RMSEP）接近 1，表明模型预测性能好；R_C 和预测相关系数（prediction correlation coefficient，R_P）接近 0，表明模型拟合优度高。通常将 RMSEC、R_C、R_P、RMSEP、RMSECV 和交叉验证相关系数（correlation coefficient of cross-validation，R_{CV}）作为评价模型拟合效果的指标。在适宜的光谱预处理基础上，运用 PLS 建立 NIRS 与金银花各指标含量测定值之间的定量校正模型。各性能评价指标的计算公式①～⑥如下所示。

$$R_C=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(C_i-\hat{C}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(C_i-C_n)^2}} \quad ①$$

$$R_P=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{m}(C_i-\hat{C}_i)^2}{\sum_{i=1}^{m}(C_i-C_m)^2}} \quad ②$$

$$RMSEC=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(C_i-\hat{C}_i)^2}{n}} \quad ③$$

$$RMSEP=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{m}(\hat{C}_i-C_i)^2}{m}} \quad ④$$

$$RMSECV=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(C_i-\hat{C}_{i,cv})^2}{n}} \quad ⑤$$

$$R_{CV}=\sqrt{1-\frac{\sum_{i=1}^{n}(C_i-\hat{C}_{i,cv})^2}{\sum_{i=1}^{n}(C_i-\overline{C})^2}} \quad ⑥$$

式中，C_i 为参考方法（UV 法或 HPLC 法）测得的质量浓度值；$\hat{C}_i$ 为 NIRS 模型预测值；$\hat{C}_{i,v}$ 为交叉验证过程中对校正集样本的预测值；C_n 为校正集中 C_i 的平均值；C_m 为验证集中 C_i 的平均值；$\overline{C}$ 为参考值的阈值；n 为校正集样本数；m 为预测集样本数。

对建立的模型进行验证，结果如表 2 所示。上述 5 种药效成分在推荐波数的拟合模型 R_C、R_P 均大于 0.9，RMSEC、RMSEP 均较小，R_{CV} 接近 1，RMSECV 较小。如图 3 所示，近红外实测值与预测值表现出良好的拟合度，未出现数据的偏离和波动，表明建立的模型具有理想的精确度，可准确预测金银花提取液中的 5 种药效成分的含量。

2.6 SPA 定量分析模型的建立

SPA 是将各波长向其余波长进行投影，筛选出投影向量值最大的波长，并依次迭代，直到 RMSECV 达到最小[16]。这样可以消除原始光谱中的冗余信息，从而提高模型的精密性和效率[17]。

表 2　金银花提取物中 5 种成分 PLS 评价数据

Tab.2　Evaluation Data of PLS of the Five Components in Honeysuckle Extract

组分	R_C	RMSEC	R_P	RMSEP	R_{CV}	RMSECV
1	0.954 5	0.024 7	0.978 4	0.027 2	0.948 2	0.026 4
2	0.996 0	0.020 0	0.996 8	0.020 1	0.993 8	0.024 6
3	0.914 1	0.001 7	0.952 7	0.001 5	0.901 8	0.001 8
4	0.949 3	0.005 8	0.943 9	0.007 7	0.941 9	0.006 3
5	0.900 7	0.001 5	0.907 2	0.002 3	0.879 2	0.001 7

2.6.1 筛选特征波长

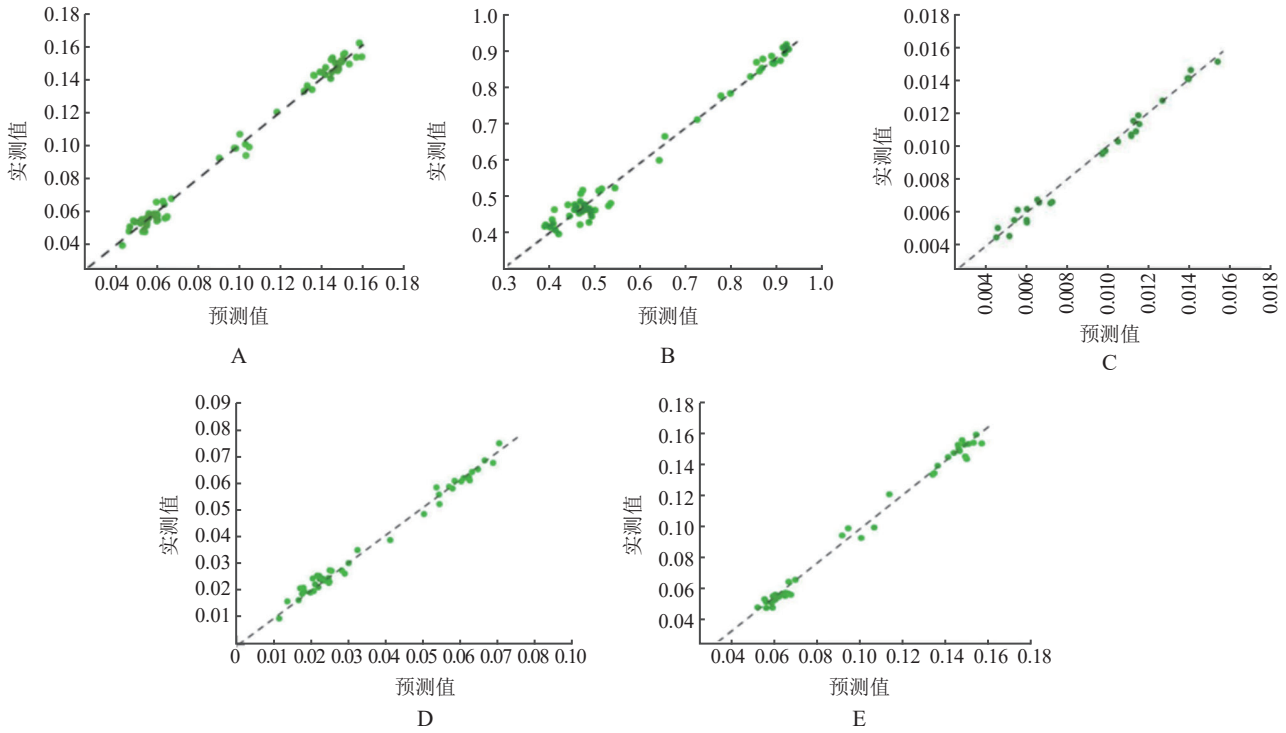
文献[18]报道，采用 SPA 筛选关键变量时，RMSECV 是变量数优选的评价指标。随着变量数增加，RMSECV 值总体呈现先快速下降后趋于平稳的趋势，当 RMSECV 达到最小值时所对应的变量数即为最优变量组合。这表明 SPA 能有效提取光谱中的特征信息，降低变量间的共线性。本研究据此采用 SPA 筛选光谱变量，后续以独立的验证集对所选变量构建的模型进行评价，采用 RMSEP 衡量其预测精度。

2.6.2 校正集和验证集的选择

样本数量是影响建模效果的主要因素。本试验采用联合 X-Y 距离样本集划分（sample set partitioning based on joint X-Y，SPXY）算法，按校正集与验证集为 3 ∶ 1 的比例进行划分，得到 72 个校正集样本，24 个验证集样本。SPXY 算法在划分样本时同时考虑了光谱变量（X）和参考值（Y）的空间分布，能够使校正集尽可能覆盖样本的整体特征空间，从而保证验证集样本的含量范围位于校正集的含量范围之内。

2.6.3 光谱预处理方法的优筛

分别采用 4 种方法：一阶导数、Savitzky-Golay（S-G）卷积平滑、多元散射校正和标准正交变换。其中，一阶导数法可有效消除基线平移与漂移干扰，凸显光谱的精细结构特征；S-G 卷积平滑在保留光谱有效信息的同时可降低随机噪声的影响。



A—**1**；B—**2**；C—**3**；D—**4**；E—**5**。

图 3 金银花提取物中 5 种成分 PLS 预测值和实测值对比图

Fig.3 Comparison of PLS Prediction Values and Reference Values of the Five Components in Honeysuckle Extracts

本研究中近红外光谱以透射方式采集于液体样品，散射效应不显著，基线漂移和随机噪声为主要干扰来源，故选择一阶导数结合 S-G 卷积平滑作为预处理方法，在消除基线干扰的同时抑制噪声，从而提高光谱数据的质量。

2.6.4 SPA 模型的结果

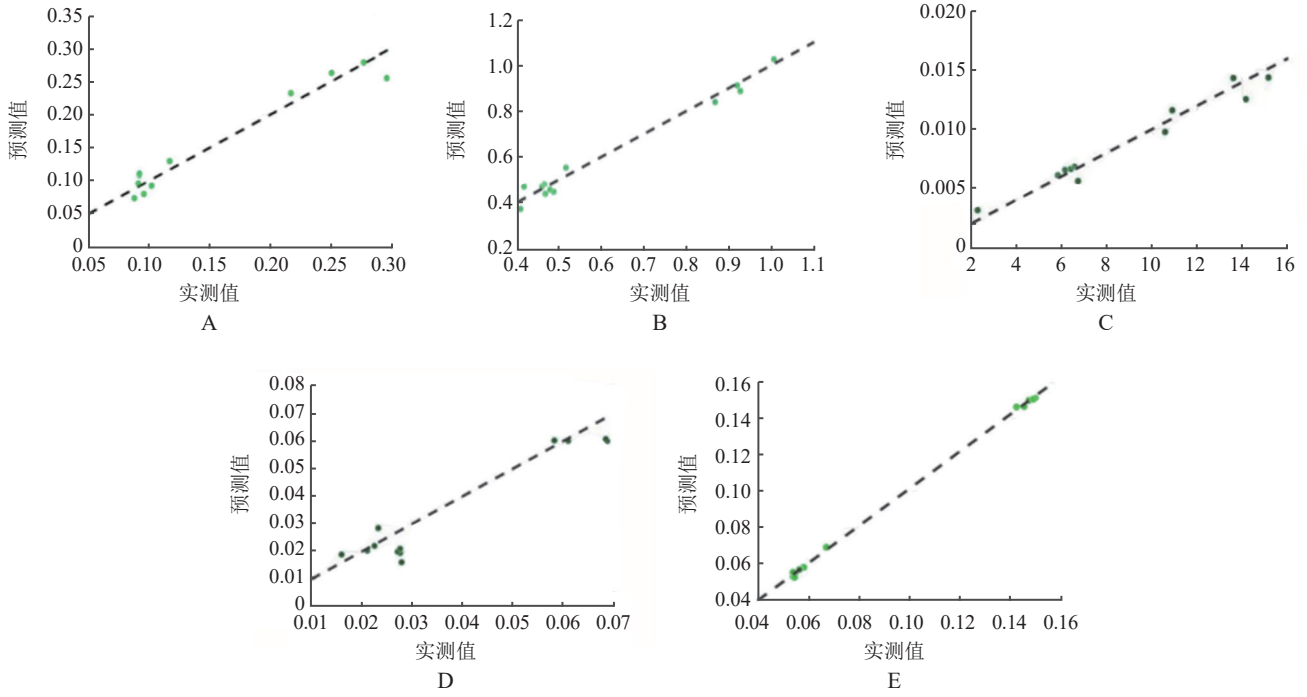
基于上述优化过程，建立了 **1** ～ **5** 的 SPA 定量校正模型。如图 4 所示，SPA 模型的实测值与预测值均表现出较高的拟合优度。**1** ～ **5** 定量模型的 R_p 分别为 0.963 3、0.990 6、0.959 6、0.962 4、0.996 8，均大于 0.900 0，每个模型的 RMSEP 分别为 0.022 3、0.031 2、0.012 4、0.006 3、0.001 2，均较小，表现出较高的模型预测精度，可准确预测金银花提取液中 5 种药效成分的含量。

2.7 建模方法比较

结果表明，采用 PLS 和 SPA 法建立模型的预测能力均良好，变化趋势具有一致性，表明 NIRS 结合 PLS 或 SPA 均可成功预测金银花提取过程中 5 种药效成分的含量。如表 3 所示，R_p 值数据表示 SPA 和 PLS 建模方式均具有优异的可行度和线性关系，相对而言，**1**、**2** 用 PLS 模型优化更理想；**3**、**4** 和 **5** 则采用 SPA 模型更优。比较 2 种建模方法的 RMSEP 可知，SPA 模型的 RMSEP 总体而言较小，这得益于其矢量空间共线性最小化原理。本试验采用 SPA 在全波段中筛选少量特征波长，有效降低了特征波段间的多重共线性，在保证模型预测正确率的同时显著提升了运算速度，实现了金银花中各药效成分的快速、精准监测。

3 讨论

本研究运用 NIRS 实现了对金银花水提过程中 **1** ～ **5** 五种关键药效成分含量的快速、同步检测。结果表明，PLS 和 SPA 所建立的定量校正模型，均表现出优异的预测性能，为中药提取过程的实时监控与精准终点判断提供了可靠的技术支持。相较于传统方法，本法在特征提取和分类能力方面具有明显优势。将提取过程快速监测的方法应用于终点判断，



A—**1**；B—**2**；C—**3**；D—**4**；E—**5**。

图 4　金银花提取物中 5 种成分的 SPA 预测值和实测值对比图

Fig.4　Comparison of SPA Predicted Values and Reference Values of the Five Components in Honeysuckle Extracts

表 3　金银花提取物中 5 种成分的 PLS、SPA 计算数据统计

Tab.3　Calculation Data Statistics of PLS and SPA of the Five Components in Honeysuckle Extracts

组分	R_p		RMSEP	
	PLS（n=84，m=12）	SPA（n=72，m=24）	PLS（n=84，m=12）	SPA（n=72，m=24）
1	0.978 4	0.963 3	0.027 2	0.022 3
2	0.996 8	0.990 6	0.020 1	0.031 2
3	0.952 7	0.959 6	0.014 8	0.012 4
4	0.943 9	0.962 4	0.007 7	0.006 3
5	0.907 2	0.996 8	0.002 3	0.001 2

弥补了传统终点判断方法耗时长、成本高、操作复杂等缺点。

本研究用 8 个批次的金银花药材建立了近红外预测模型，模型表现出优异的统计特征，PLS 与 SPA 定量模型对 5 种药效成分的 R_p 分别为 0.907 2 ～ 0.978 4 和 0.963 3 ～ 0.996 8，RMSEP 分别为 0.002 3 ～ 0.027 2 和 0.001 2 ～ 0.031 2，显著优于文献[2]中采用较少样本建立的近红外模型（R_p ≈ 0.94，RMSEP ≈ 0.25），以及传统多元线性回归等常规定量方法[5]所报道的预测精度（R_p ≈ 0.95，RMSEP ≈ 0.20）。金银花的质量受产地、采收季节和储存条件等多重因素影响，当前模型的训练集尚未充分覆盖其自然变异范围，导致在面对极端或无采样来源的原料时可能出现预测偏差。未来应通过扩大样本库、纳入不同产地和年份的代表性样本来增强模型的稳健性。后续研究可将本建模方法拓展应用于不同提取溶剂体系及复方中药提取过程中，同时进一步挖掘深度学习、支持向量机等算法在中药近红外光谱建模中的应用潜力。

参考文献：

[1] Yang H L, Bao L Y, Liu Y F, *et al*. Identification and quantitative analysis of salt-adulterated honeysuckle using infrared spectroscopy coupled with multi-chemometrics [J]. *Microchemical J*, 2021, **171**: 106829.

[2] 崔彭帝. 基于近红外光谱的金银花饮片及其制剂的质量控制研究[D]. 天津: 天津中医药大学, 2021: 1.

[3] 曾安琪, 华桦, 陈朝荣, 等. 金银花、山银花抗炎药理作用研究[J]. 中国中药杂志, 2020, **45**(16): 3938-3944.

[4] 张前熙. 金银花的药理作用及应用研究进展[J]. 山东化工, 2023, **52**(3): 121-122.

[5] 王晴, 韩冰晶, 霍志鹏, 等. 试验设计方法及其在中药新产品工艺优化中的应用进展[J]. 中国现代中药, 2025, **27**(12): 2395-2402.

[6] 付迪, 贾丽, 魏树龙, 等. 基于红外光谱技术结合化学计量学对柴胡产地鉴别的应用[J]. 计量与测试技术, 2025, **51**(10): 96-98.

[7] 符国成, 李贱娥, 陆美清, 等. 近红外光谱法快速测定复方感冒灵颗粒中对乙酰氨基酚的含量[J]. 中国医药工业杂志, 2023, **54**(12): 1768-1773.

[8] 韩莹, 曾文珊, 刘红果, 等. 利用近红外光谱法及一致性检验模型鉴别肚痛健胃整肠丸[J]. 今日药学, 2024, **34**(3): 196-199.

[9] Wu L, Gao Y, Ren W C, *et al*. Rapid determination and origin identification of total polysaccharides contents in Schisandra chinensis by near-infrared spectroscopy [J]. *Spectrochim Acta A*, 2022, **264**: 120327.

[10] 耿泽宇, 左旭丽, 潘秀珍, 等. 金银花近红外定性定量快检模型的建立[J]. 中南药学, 2023, **21**(8): 2076-2082.

[11] Wu S J, Cui T C, Li Z, *et al*. Real-time monitoring of the column chromatographic process of Phellodendri Chinensis Cortex part Ⅰ: end-point determination based on near-infrared spectroscopy combined with machine learning [J]. *New J Chem*, 2022, **46**(19): 9085-9097.

[12] 余代鑫, 郭盛, 张霞, 等. 近红外光谱技术结合化学计量学和机器学习算法的干姜产地溯源研究[J]. 中国中药杂志, 2022, **47**(17): 4583-4592.

[13] 孙雪宁, 刘瑞琛, 梁会亮, 等. 芪龙胶囊君药黄芪水提过程中近红外光谱分析技术的应用研究[J]. 药学研究, 2021, **40**(1): 24-28.

[14] 张瑾, 粟晖, 李彤彤, 等. 紫外导数光谱结合PLS同时测定辣椒提取液中的辣椒素类物质和辣椒红素[J]. 中国调味品, 2026, **51**(1): 204-211.

[15] Lan Z W, Zhang Y, Su Y, *et al*. Rapid quantitative detection of the discrepant compounds in differently processed Curcumae Rhizoma products by FT-NIR combined with VCPA-GA technology [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2021, **195**: 113837.

[16] 宋子怡, 常庆瑞, 郑智康, 等. 基于高光谱和连续投影算法的猕猴桃叶片氮平衡指数的估测[J]. 江苏农业学报, 2024, **40**(7): 1260-1267.

[17] 栾景然, 冯国红, 朱玉杰. 基于连续投影算法-遗传算法-BP神经网络的可见/近红外光谱木材识别[J]. 浙江农林大学学报, 2022, **39**(3): 671-678.

[18] 倪鸿飞, 斯乐婷, 黄家鹏, 等. 近红外光谱结合遗传算法优化的极限学习机实现银杏叶纯化过程有效成分快速测定[J]. 中国中药杂志, 2021, **46**(1): 110-117.