

多元线性回归在中药研究中的应用

张慧文¹, 白云霞^{2*}, 韩 喆¹, 王焕芸¹, 孙丽君¹, 夏慧敏¹

1. 内蒙古医科大学 药学院, 内蒙古 呼和浩特 010110

2. 包头医学院 计算机科学与技术学院, 内蒙古 包头 014040

摘要: 利用多元线性回归可对待解决问题提出最优的回归方程组, 说明各个自变量对因变量的影响; 即使数据量很大, 也不需要繁琐的运算过程, 仍然能够迅速地得出结果, 而且还能够通过系数得到对各变量的理解, 因此该方法对中药研究中的有关问题特别适用。就多元线性回归联合紫外光谱 (UV) 法、红外光谱 (IR) 法和高效液相色谱 (HPLC) 法在中药生产加工、质量控制、药效物质基础研究等方面的应用进行综述, 以期对多元线性回归法在中药研究中的更广泛应用提供参考。

关键词: 多元线性回归; 中药; 生产加工; 质量控制; 药效物质基础

中图分类号: R965.1; R284.1 文献标志码: A 文章编号: 1674-6376 (2023) 06-1376-06

DOI: 10.7501/j.issn.1674-6376.2023.06.026

Application of multiple linear regression in traditional Chinese medicine

ZHANG Huiwen¹, BAI Yunxia², HAN Zhe¹, WANG Huanyun¹, SUN Lijun¹, XIA Huimin¹

1. College of Pharmacy, Inner Mongolia Medical University, Hohhot 010110, China

2. Department of Computer Science and Technology, Baotou Medical College, Baotou 014040, China

Abstract: Multiple linear regression can be used to produce an optimal set of regression equations for a problem that accounts for the effect of the respective variables on the dependent variable. It can be carried out very quickly with large amounts of data, without the need for cumbersome arithmetic, and it is also possible to obtain an understanding of the individual variables through the coefficients, making it particularly suitable for the study of problems in Chinese medicine. This paper reviews the application of multiple linear regression with ultraviolet (UV) and infrared (IR) spectroscopy and high performance liquid chromatography (HPLC) in the production and processing, quality control, and therapeutic material basis studies of traditional Chinese medicines, with a view to providing some references for future applications of multiple linear regression in the study of traditional Chinese medicines.

Key words: multiple linear regression; traditional Chinese medicine; production and processing; quality control; therapeutic material basis

中药是多成分的复杂体系, 具有多基原、多产地、加工生产方法多样性等特点, 造成了中药质量控制的复杂性, 同时中药现代分析技术如高效液相色谱 (HPLC) 法、红外光谱 (IR) 法、紫外光谱 (UV) 法等提供了大量的分析数据, 需要结合化学计量学

将药效物质与药效关联, 为中药的生产加工和质量评价提供可靠信息^[1]。在化学计量学中, 多元线性回归分析是用于寻找自变量和因变量之间关系最常用的方法, 在中药研究领域有广泛的应用^[2]。目前国内外常用于中药成分分析的 HPLC 法, 能够和

收稿日期: 2022-12-11

基金项目: 内蒙古自治区自然科学基金项目 (2022MS08023, 2020LH08002); 2021 年内蒙古自治区关键技术攻关计划项目 (2021GG0176); 内蒙古自治区蒙医药协同创新中心科学研究项目 (MYXYTYB202108); 内蒙古医科大学科技百万工程联合项目 (YKD2020KJBW[LH]054); 内蒙古医科大学博士启动基金项目 (YKD2020BSJJ014); 内蒙古自治区大学生创新创业项目 (202210132062, 202110132015); 内蒙古医科大学“三位一体”大学生创新创业培育项目 (SWYT2022025); 包头医学院科学研究基金项目 (BYJJ-QM 201903); 包头医学院花蕾计划项目 (HL2021058)

第一作者: 张慧文 (1982—), 女, 博士, 研究方向为蒙药物质基础。E-mail: bjlemonzhw@126.com

***通信作者:** 白云霞 (1981—), 女, 硕士, 研究方向为多元统计分析以及化学计量学。E-mail: yxbai5346@163.com

各种化学检测器联合使用,且不受样品挥发性和稳定性的影响,因此适用于大多数中药的成分分析,然后运用多元线性回归统计学方法建立“谱-效”关系,在中药材和中药复方的谱效关系研究中应用得非常普遍^[3]。

而近红外光谱(NIRS)分析技术对中药样品具有无损、无消耗检测,但是光谱重叠严重,需要利用化学计量学实现信号挖掘和模型校准。吴海龙等^[4]在对化学多维校正的研究中认为,包括多元线性回归、主成分回归等方法在内的二维校正(常规多元校正)与NIRS等技术联合使用,在生产现场快速、无损害监测方面起重要作用。此外,紫外定量分析先测定某一类样品中所涉及的成分和其特性(如浓度、含量)构建光谱数据信息与物质特性关系的多变量校正模型,再用所构建的模型对另外部分同种样本的性质信息内容做出估算。方洪壮等^[5]针对混合干扰组分的测定采用多波长、多元回归分光光度法,测定混合溶液在选定波长处的UV吸收值,再利用多元线性回归处理所得的UV吸收值,可以构建每个组分不同浓度的数学计算模型,建立定量分析方法。

由于在中药研究中质量控制和药效作用一般不受单一因素的影响,可能与多个因素之间都有线性关系,从而造成单因素统计方法的分析结果不能反映客观规律,而多元线性回归分析可以很好地解决这样的问题。在中药学及有关范畴中的“线性关系”,研究者一般都会采用多元线性回归模型来处理相关问题。设 Y 为随机变量,研究 Y 与 m 个自变量 $X_1, X_2, \dots, X_m$ 之间存在线性关系的统计学分析方法即为多元线性回归分析。其数学模型为: $Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_m X_m + \varepsilon$ 其中 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ 为回归系数, β_0 为常数项, ε 为残差。采用最小二乘法,通过线性拟合的方法处理数据以便得到每个参数的数值。由于自变量的个数多,因此统计比较困难,所以通常在实际使用时都需要借助于统计学软件,常用软件包括SPSS、R语言和Matlab等^[6-8]。

本文就多元线性回归在中药的生产加工、质量控制、药效物质基础研究等方面的应用进行综述,以期多元线性回归法在中药研究中的更广泛应用提供参考。

1 在中药生产加工中的应用

药材的产品加工过程分为:采集、粗产品加工、炮制、贮存、烘干等工艺,生产流程一般较长,涉及的参数也较多。工艺参数的改变也可能会引起药

材中间体的品质差别,进而影响最终产品的质量。但随着现代科技的发展,更多领先的加工技术也被运用到了中药的加工过程。多元线性回归适用于生产中药材加工过程,通过建立各种影响因素与中药材质量的多元线性回归模型,可以更好地掌握各因素造成的影响,为生产加工过程提供更加合理、完善的流程,提高产率。

杨毅等^[9]研究了影响中药材品质的因素,在基本厘清了中药材质量影响因素的基础上,通过问卷调查,以中药材质量为因变量,产生影响的各种因素为不同自变量,通过构建多元线性回归模型对二者展开了关联与回归分析。结果发现除储运方式外,药材品种、土壤、气候、农艺措施等因素对中药材品质的优劣程度产生重要影响,如果改善这些影响药材品质的因素,可以使药材质量得到大幅度提升。

杜晨阳^[10]为提升酸枣仁药材 *Semen Ziziphi Spinosae* 的质量控制及综合利用水平,设置了多组处理研究酸枣仁贮藏期间的品质变化,建立酸枣仁的HPLC-蒸发光散射检测器(ELSD)指纹图谱,以酸枣仁皂苷A和斯皮诺素为对照品,并且通过多元线性回归模型分析酸枣仁有效成分在不同温度、湿度和包装处理的变化,发现对斯皮诺素含量的影响程度从大到小依次为:贮藏时间>温度>湿度;对酸枣仁皂苷A含量的影响程度从大到小依次为:贮藏时间=温度>湿度;对酸枣仁整体质量的影响程度从大到小依次为:贮藏时间>温度=湿度;采用聚乙烯(PE40)材料包装的酸枣仁贮藏后的斯皮诺素和酸枣仁皂苷A含量显著高于其他包装。

冯鑫^[11]为评价生肌膏的生产过程中辐照灭菌工艺的可行性,构建了载药血清中游离氨基酸的指纹图谱,采用日立L-8900氨基酸分析仪,采用离子交换柱色谱法进行检测,使氨基酸依次经离子交换色谱柱洗脱后,与茚三酮溶液在135℃反应柱中衍生,生成的氨基酸衍生物通过570 nm和440 nm的波长检测,外标法定量,并将各种游离氨基酸含量分别与细胞增殖率和细胞凋亡抑制率数据运用多元线性回归分析的强迫引入法进行处理。通过建立载药血清的游离氨基酸水平和疮疡愈合作用之间的谱效关系,找到与疗效密切相关的氨基酸,证实了生肌膏使用辐照灭菌工艺的可行性。

Yue等^[12]研究制备黄芩苷固体纳米晶体,进而提高黄芩苷的口服生物利用度。采用Box-Behnken设计方法优化,利用多元线性回归分析,结果表明

压力的最佳值为850 bar,周期为25个循环,聚乙二醇1000维生素E琥珀酸酯(TPGS)与药物的比例为1:10,微晶纤维素-羧甲基纤维素钠(MCCS)与药物的百分比为10%,采用此工艺可以获得精细的黄芩苷固体纳米晶体。

2 在中药药效物质基础研究中的应用

随着中药指纹图谱和中药药理学的发展,中药谱效关系研究逐渐深入,基于中药作用的整体性和机制的复杂性,结合化学计量学将指纹图谱中化学成分的数据与药效指标相结合,寻找中药发挥药效作用的主要成分。多元线性回归所构建的模型具有较好的准确度和重复性,对中药材谱效关系和药效物质基础研究具有重要帮助,也常将其他的化学计量学方法结合使用,用于寻找中药药效物质基础。如崔露露^[13]在探索有柄石韦 *Pyrrosia petiolosa* (Christ) Ching 抗泌尿结石的活性成分与谱效关系的过程中,建立了10批不同产地的有柄石韦水回流提取HPLC指纹图谱,得到74个特征峰,建立其与大鼠尿液中钙、血清中镁、肾组织中草酸的灰色关联度模型,利用SPSS软件进行多元线性回归分析,用于验证灰色关联分析在谱效关系中的可行性,结果发现43号特征峰成分具有较高的抗泌尿系结石活性。

传统的中药汤剂具有较为复杂的组成成分,其药理作用也不够明确。王定颖^[14]得到29组组成连续变化的西青果 *Chebulae Fructus Immaturus* 乙醇提取物,共包含55组峰信息,采用逐步回归分析法建立西青果的化学组分和 α -葡萄糖苷酶抑制活性之间的谱效关系,结果发现对抑制活性影响最显著的物质为第18、29、36、4、11和7号峰对应的化合物。

程青云^[15]为了更好地掌握破布叶 *Microcos paniculata* L. 总黄酮调节血脂的作用,采用二极管阵列检测器(PDA),甲醇-0.05%磷酸水溶液梯度洗脱,在288 nm检测波长下,建立破布叶总黄酮的HPLC指纹图谱;采用HPLC法对其进行了初步的探讨。用血清胆固醇、三酰甘油作为检测指标对调脂作用进行了研究;使用SPSS Statistic 17.0统计分析软件运用多元线性回归-后退法,分别构建破布叶总黄酮HPLC指纹图谱的17个共有特征峰与胆固醇和三酰甘油的谱效关系方程。结果表明异牡荆苷与降胆固醇效应呈显著的正相关关系,与降三酰甘油效应呈显著正相关的关系;牡荆苷与降胆固醇效应呈负相关的关系。

董书羽^[16]收集不同产地、不同年份的11批类叶牡丹 *Caulophyllum robustum* Maxim., 建立类叶牡丹总提物的HPLC指纹图谱表征其整体化学特征,检测出17个共有特征峰,指出其中9个共有峰,将抗类风湿性关节炎效果作为药效学评价指标,考察其对炎性细胞因子肿瘤坏死因子- α (TNF- α)、白细胞介素1 β (IL-1 β)、白细胞介素-6(IL-6)、白细胞介素-17(IL-17)、前列腺素E₂(PGE₂)水平及T淋巴免疫细胞CD4⁺/CD8⁺比值的影响,为了消除多个自变量之间可能存在的多重共线性问题,采用多元线性回归分析中的逐步回归分析模块对指纹图谱中各个特征峰与不同炎性因子分别进行分析,从而挑选出影响药效显著的自变量,结果发现类叶牡丹中的生物碱、皂苷与皂苷元等多种成分共同发挥了抗炎、调节免疫的功效。

赵爽^[17]采集黑龙江省大庆市林甸县14批线叶菊 *Filifolium sibiricum* (L.) Kitam, 建立HPLC指纹图谱描述其化学特征,采用乙腈-磷酸盐缓冲液(PBS)梯度洗脱,检测波长360 nm,建立18个共有特征峰,指出其中15个峰。选择线叶菊的体外抑菌效果为药效评价指标,即对耐药金黄色葡萄球菌、大肠杆菌、金黄色葡萄球菌、白色葡萄球菌、副乙型伤寒杆菌的抑菌作用。采用多元线性回归法建立方程,推测线叶菊中抑菌作用相关性较大的成分为芒果苷、圣草次苷、东莨菪内酯、异鼠李素-3-O- β -D-葡萄糖苷等成分。

Zhao等^[18]基于谱效关系模型和薄层-质谱(LC-MS)联用,筛选诃子 *Terminalia chebula* Retz. 果实中抗氧化活性成分,建立了LC指纹图谱,并确定了15个共有峰,通过多元线性回归等方法研究共有峰与抗氧化活性成分间的谱效关系,最终推断对抗氧化作用有重大贡献的为1、2、3、5、12、14、15号峰,并进一步鉴定了16种化学成分。

Ma等^[19]以常用中药复方妇科千金胶囊为研究对象,通过超高效液相色谱法建立了20批次妇科千金胶囊的化学指纹图谱,鉴定其化学成分,测定其抑制环氧合酶-2(COX-2)的抗炎生物活性,结合多元线性回归分析,结果发现绿原酸为体外最强的抗炎活性成分。

3 在中药质量控制中的应用

李波霞^[20]将近红外光谱技术与多元线性回归结合,检测4个产地的136份当归 *Angelica sinensis* (Oliv.) Diels 样本,采用70%乙醇制备醇提取物并计算得率,用HPLC法检测当归中阿魏酸的含

量,并采集当归的NIRS、一级导数光谱和二阶导数NIRS。运用遗传算法-多元线性回归(GA-MLR)对当归药材进行分析。由于中药的NIRS包含众多化学成分的光谱信息,因此需要运用GA-MLR算法对数据中冗余变量进行检测,并利用数据交互方法进行筛选,最终得到最优模型与结果,减少了模型的复杂度,而且也增强了模型的预测作用。

中红外光谱技术不仅能测量出样品中的成分含量,而且还能对物质的结构成分变化进行分析。目前,用红外光谱技术(IRS)定量分析的主要方法有:峰高法、谱带比值法、峰面积法、因子分析法、内标法和导数光谱法等。因为在多成分系统中各个物质的红外吸收谱互相交叠、互相干涉,所以有必要使用多元线性回归等化学计量学方法来实现多组分体系的傅立叶红外定量分析。刘平乐等^[21]利用傅里叶变换红外光谱(FTIR)衰减全反射(ATR)来建立样品定量分析方法,选取组分浓度已知的混合溶液,并采用多元线性回归模型,完成对多组分同时在线定量分析,排除了采样所产生的不确定性,与其他方法比较优势明显,使分析结果的获得时间达到最少。

Kong等^[22]探讨丹参 *Salvia miltiorrhizae* Bunge 抑制铜绿假单胞菌生长的主要抗菌成分,对32批次不同来源的丹参进指纹图谱分析,使用多元线性回归分析、主成分分析等化学计量学方法研究指纹图谱与抗菌作用间的谱效关系,推断原儿茶醛、丹酚酸B和3种未鉴定的化合物可能是抗菌的主要活性成分,同时提示这些物质可能是丹参质量控制的重要指标。

Liu等^[23]研究了10批次蝙蝠葛 *Menispermum dauricum* DC. 提取物对人乳腺癌MCF-7细胞系的细胞毒活性,通过HPLC法建立抗肿瘤活性整合指纹图谱,选择8个峰作为共同峰来评价样品的相似性,使用聚类分析对不同样品进行分类,使用多元线性回归分析和Pearson相关系数联合分析,得出指纹图谱中峰8标准回归系数为负,与抗肿瘤活性密切相关。该研究为中药复方的质量控制提供不同的解决策略。

4 结语

线性回归最简便、最具有特色的方法就是一元线性回归模型,它考虑了2个变量间的联系,但这个模型一般忽视了许多其他因素之间的相互作用。在许多工程与科学实验的具体过程中,往往要涉及多种变量对试验结果的函数表示,也就是多元回归

问题,多元线性则是多个解释变量对被解释变量的影响。使用多元线性回归具有2种劣势:一是运算过程较繁琐,其高度复杂性随着不同自变量的逐渐增多而急剧增加,但多元线性回归和一元线性回归的基本原理与运算流程一致,且随着不同自变量的逐渐增加,使其较单个变量的预测计算更为精确有效;二是由于回归系数之间具有关联,所以在扣除了变量之后,其他数据都还需要进行运算。

多元线性回归模型和一元线性回归模型相互之间的主要差异体现在以下一些主要方面:求解变量的个数差异;模式与典型假定有所不同,多元线性回归模式较一元线性回归模型更多了“自变量彼此间不具有线性相关关系”的假说;而多元线性回归模式对参数估计方式的表述则更为复杂。

多元线性回归在中药研究中有广泛的应用前景,可以帮助人们更好地理解中药的作用机制和临床应用,促进中药现代化研究。事实上,多元线性回归与IR法、UV法、HPLC法的联合应用在对中药的定性分析、定量分析、质量控制等方面^[24]有很大的实用价值,对中药生产加工、辨别真伪和含量测定等方面也都有很大的实用意义。但线性回归中,较一元线性回归来说,多元线性回归的应用不如其广泛。截止至2023年5月13日,在中国学术期刊全文数据库(CNKI)检索出的与中药和多元线性回归相关的研究论文仅64篇,由此可知在针对中药相关问题的研究中对多元线性回归的应用未被最大限度地开发。因此,本文对未来更多地运用多元线性回归方法研究中药起到抛砖引玉作用。多元线性回归在中药学领域的应用尚有待开发,随着光谱分析、相关仪器等技术的发展,多元线性回归在药学领域会有更大的应用空间。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 石丽, 焦阳, 周广涛, 等. 基于指纹图谱结合化学计量学及多成分含量测定的壁钱质量研究 [J]. 中国药学杂志, 2022, 57(22): 1935-1941.
Shi L, Jiao Y, Zhou G T. Quality study of *Uroctea compactilis* based on fingerprint combined with chemometrics and multi-component content determination [J]. Chin Pharm J, 2022, 57(22): 1935-1941.
- [2] 王玉勤, 范国荣. 基于指纹图谱结合多模式化学计量学方法评价补骨脂药材质量 [J]. 中草药, 2021, 52(4): 1143-1150.

- Wang Y Q, Fan G R. Quality evaluation of *Psoralea corylifolia* by using chromatographic profiles combined with chemometric methods [J]. Chin Tradit Herb Drugs, 2021, 52(4): 1143-1150.
- [3] 刘吉楠. 北豆根细胞毒活性谱效关系研究 [D]. 哈尔滨: 黑龙江大学, 2012.
Liu J N. Study on the spectrum effect relationship of the cytotoxic activity of Bei Dougen [D]. Haerbin: Heilongjiang University, 2012.
- [4] 吴海龙, 俞汝勤. 化学多维校正的若干新进展 [J]. 化学通报, 2011, 74(9): 771-782.
Wu H L, Yu R Q. Aspects of recent developemnts of chemical multiway calibration methodologies [J]. Chemistry, 2011, 74(9): 771-782.
- [5] 方洪壮, 雷力力, 周天明. 多波长多元回归分光光度的定量分析方法 [J]. 计算机与应用化学, 1995(4): 312-313.
Fang H Z, Lei L L, Zhou T M. Method of quantitative annlysis by multiple regression spectrophptometry [J]. Comp Appl Chem, 1995(4): 312-313.
- [6] 王静. 医学数据多因素统计分析及SPSS软件实现 [M]. 北京: 科学出版社, 2020.
Wang J. *Multi-factor Statistical Analysis of Medical Data and Implementation of SPSS Software* [M]. Beijing: Science Press, 2020.
- [7] 盖尔盖伊·道罗齐. R语言数据分析 [M]. 北京: 北京人民卫生出版社, 2016.
Gergely Daroczi. *R Language Data Analysis* [M]. Beijing: People's Medical Publishing House, 2016.
- [8] 陈天华. 数字图像处理及应用: 使用MATLAB分析与实现 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2019.
Chen T H. *Digital Image Processing and Applications: Analysis and Implementation Using MATLAB* [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2019.
- [9] 杨毅, 田侃, 倪新兴, 等. 中药材品质影响因素实证研究 [J]. 中药材, 2016, 39(6): 1251-1256.
Yang Y, Tian K, Ni X X, et al. Empirical study on the factors affecting the quality of traditional Chinese medicine [J]. J Chin Med Mater, 2016, 39(6): 1251-1256.
- [10] 杜晨阳. 中药酸枣仁的规格等级建立及采收贮藏期关键因素研究 [D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2021.
Du C Y. Study on the establishment of specification and grade of *Semen Ziziphi Spinosae* and the key factors of harvesting storage period [D]. Yangling: Northwest A & F University, 2021.
- [11] 冯鑫. 辐照灭菌法对生肌膏药效影响的多元化评价 [D]. 天津: 天津医科大学, 2017.
Feng X. The multiple evaluation of the effect of Shengji Ointment after irradiation sterilization [D]. Tianjin: Tianjin Medical University, 2017.
- [12] Yue P F, Li Y, Wan J, et al. Process optimization and evaluation of novel baicalin solid nanocrystals [J]. Int J Nanomed, 2013, 8: 2961-2973.
- [13] 崔露露. 石韦的HPLC指纹图谱研究与灰色关联度分析 [D]. 济南: 山东中医药大学, 2017.
Cui L L. Analysis of the HPLC fingerprint and grey relational analysis of antilithic effects of *Pyrrosia* species [D]. Jinan: Shandong University of Traditional Chinese Medicine, 2017.
- [14] 王定颖. 基于网络药理学与多元线性回归的复杂体系活性评价模型构建 [D]. 大连: 大连工业大学, 2014.
Wang D Y. Establishment of the evaluation model of complex system activity based on network pharmacology and multiple linear regression evaluation systems [D]. Dalian: Dalian Polytechnic University, 2014.
- [15] 程青云. 布渣叶总黄酮调血脂谱效关系研究 [D]. 广州: 广州中医药大学, 2014.
Cheng Q Y. A study of the chromatogram-effect relationship on the anti-hyper lipidemia effects of the total flavonoids in *Microcos paniculata* L. [D]. Guangzhou: Guangzhou University of Chinese Medicine, 2014.
- [16] 董书羽. 类叶牡丹药材指纹图谱的构建及其抗RA谱效关系的研究 [D]. 哈尔滨: 黑龙江中医药大学, 2016.
Dong S Y. Study on fingerprint from *Caulophyllum robustum* Maxim. And spectrum-effect relationship of anti-rheumatoid arthriyis [D]. Haerbin: Heilongjiang University of Chinese Medicine, 2016.
- [17] 赵爽. 线叶菊药材抑菌"谱-效"关系的研究 [D]. 哈尔滨: 黑龙江中医药大学, 2015.
Zhao S. Study on antibacterial "chromatogram-effect" relationship of *Filifolium sibiricum* (L.) Kitam [D]. Haerbin: Heilongjiang University of Chinese Medicine, 2015.
- [18] Zhao H H, Li Y J, Guo Z H, et al. Screening of acetylcholinesterase inhibitory and antioxidant active compounds from *Terminalia chebula* fruits by spectrum-effect relationship and liquid chromatography-mass spectrometry analysis [J]. J Sep Sci, 2022, 45(18): 3412-3421.
- [19] Ma R R, Yang X J, Huang Y, et al. Study on the bioassay of anti-inflammatory effects of Fuke Qianjin Capsule based on COX-2 inhibiting activity [J]. Evid Based Comp Alter Med, 2021, 2021: 6620124.
- [20] 李波霞. 红外光谱技术及化学计量学在党参、当归定性定量模型研究中的应用 [D]. 兰州: 兰州大学, 2009.
Li B X. The application of infrared spectroscopy and chemometrics to qualitation and quantitative study

- models of *Codonopsis Pilosulae* and *Angelicae Sinensis* [D]. Lanzhou: Lanzhou University, 2009.
- [21] 刘平乐, 刘华杰, 罗和安. 多元线性回归模型的FTIR/ATR多组分定量分析 [J]. 湘潭大学自然科学学报, 2008(3): 109-112.
- Liu P L, Liu H J, Luo H A. Quantitative multi-component analysis by FTIR/ATR with multiple regression [J]. J Xiangtan Univ Nat Sci Ed, 2008(3): 109-112.
- [22] Kong W J, Zhang S S, Zhao Y L, et al. Combination of chemical fingerprint and bioactivity evaluation to explore the antibacterial components of *Salvia miltiorrhizae* [J]. Sci Rep, 2017, 7(1): 8112.
- [23] Liu L J, Liu J N. A strategy for quality control of *Menispermum dauricum* DC based on cytotoxic activity and HPLC fingerprint analysis [J]. Indian J Pharm Sci, 2016, 78(1): 143-150.
- [24] 李天娇, 包永睿, 王帅, 等. 中药质量控制与评价创新方法研究进展及应用 [J]. 中草药, 2022, 53(20):6319-6327.
- Li T J, Bao Y R, Wang S, et al. Research progress and application of innovative methods for quality control and evaluation of traditional Chinese medicine [J]. Chin Tradit Herb Drugs, 2022, 53(20):6319-6327.

[责任编辑 李红珠]

•公益广告•

