

# 近红外光谱法快速测定灵芝孢子粉胶囊中多糖含量的研究

华克伟<sup>1</sup>, 王璟<sup>2</sup>, 王颖<sup>1</sup>, 张毅<sup>2</sup>, 包贝华<sup>2</sup>

1. 南京中科药业有限公司, 江苏 南京 211102; 2. 南京中医药大学中药资源产业化与方剂创新药物国家地方联合工程研究中心, 江苏省中药资源产业化过程协同创新中心, 江苏省方剂高技术研究重点实验室, 江苏 南京 210023

**摘要:** **目的** 基于近红外光谱技术建立快速测定灵芝孢子粉胶囊中多糖的含量方法。**方法** 收集 35 批灵芝孢子粉胶囊样品, 采集各样品漫反射近红外光谱信息, 扫描范围为 10 000~4 000  $\text{cm}^{-1}$ , 扫描次数 64 次, 光谱分辨率为 8  $\text{cm}^{-1}$ 。每份样品重复测定 3 次。多糖参比值采用蒽酮-硫酸显色法测定。划分数据采用 Kenston 划分法, 分析多种光谱预处理方法对近红外光谱定量模型的影响, 确定最佳光谱预处理方法, 选用偏最小二乘法建立了定量预测模型。**结果** 多糖含量范围为 1.5%~3.0%, 所建立的偏最小二乘法模型中相对预测偏差为 3.40, 验证集相关系数  $r_{\text{pre}}$  为 0.960 5, 说明近红外模型验证集与多糖测定值具有良好的线性关系。**结论** 采用近红外光谱技术建立的快速预测模型能够准确测定灵芝孢子粉胶囊多糖含量, 方法操作简便, 可为灵芝孢子粉胶囊生产质量控制提供快速测定候选方法。

**关键词:** 灵芝属; 孢子; 近红外光谱; 多糖; 快速测定

DOI: 10.19939/j.cnki.1672-2809.2023.12.15

## Rapid Determination of Polysaccharide Content in Ganoderma Lucidum Spore Powder Capsules by Near Infrared Spectroscopy

HUA Kewei<sup>1</sup>, WANG Jing<sup>2</sup>, WANG Yin<sup>1</sup>, ZHANG Yi<sup>2</sup>, BAO Beihua<sup>2</sup>

1. Nanjing Zhongke Pharmaceutical Co., Ltd, Nanjing Jiangsu 211102, China; 2. National and Local Collaborative Engineering Center of Chinese Medicinal Resources Industrialization and Formulae Innovative Medicine, Jiangsu Collaborative Innovation Center of Chinese Medicinal Resources Industrialization, Jiangsu Key Laboratory for High Technology Research of Traditional Chinese Medicine Formulae, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing Jiangsu 210023, China.

**Abstract: Objective** To develop a method for the rapid determination of polysaccharide content in ganoderma lucidum spore powder capsules using near-infrared spectroscopy. **Methods** 35 ganoderma lucidum spore powder capsules samples were collected, and the near infrared spectra (NIRS) were collected by diffuse reflection in the range of 10 000~4 000  $\text{cm}^{-1}$  with 64 scans

基金项目: 江苏省科技计划项目 (BZ2022063)

作者简介: 华克伟, 本科, 中级工程师。研究方向: 药品及保健食品检测及质量标准研究。E-mail: 17242485@qq.com

通信作者: 包贝华, 硕士, 副教授。研究方向: 中药分析。E-mail: baobh@njucm.edu.cn

## 参考文献

- [1] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 2020 年版 一部 [S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2020:178-179.
- [2] 左信丽. 吴茱萸中生物碱类成分的研究进展 [J]. 中国现代药物应用, 2015,9(9):265-267.
- [3] 杨春启, 连闻雨, 王宇光, 等. 吴茱萸碱药理与毒理研究进展 [J]. 中国中药杂志, 2021,46(20):5218-5225.
- [4] 楼璐璐, 徐姗姗, 方淡思. 吴茱萸化学成分与质量控制研究进展 [J]. 中华中医药学刊, 2017,35(8):2154-2157.
- [5] 李玲, 刘杨, 夏凡, 等. 吴茱萸碱对肺癌荷瘤小鼠生长及 HIF-1 $\alpha$ /VEGF 信号通路的影响 [J]. 世界中医药, 2023,18(13):1867-1871.
- [6] 乔依. 提取自楝科 Khaya ivorensis 的柠檬苦素类似物的杀菌活性 [J]. 世界农药, 2005,27(4):38-41.
- [7] 刘舒凌, 张晟瑞, 韦慧, 等. 炮制降低吴茱萸肝毒性作用的初步研究 [J]. 中药材, 2018,41(3):570-575.
- [8] 赵文燕, 向茜, 王蝉, 等. 吴茱萸现代炮制研究进展 [J]. 中华中医药学刊, 2022,40(5):189-196.
- [9] 江西省食品药品监督管理局. 江西省中药饮片炮制规范 [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 2008:303.
- [10] 温慧玲, 程齐来, 廖梅香, 等. 樟帮法炮制吴茱萸样品的指纹图谱 [J]. 光谱实验室, 2013,30(1):298-302.
- [11] 安徽省药品监督管理局. 安徽省中药饮片炮制规范 [M]. 合肥: 安徽科学技术出版社, 2019:147.
- [12] 重庆市食品药品监督管理局. 重庆市中药饮片炮制规范 [M]. 重庆: 重庆市食品药品监督管理局, 2006:323.
- [13] 贵州省食品药品监督管理局. 贵州省中药饮片炮制规范 [M]. 贵阳: 贵州科技出版社, 2005:125.
- [14] 睦荣春, 李金林, 周玉春, 等. HPLC 法测定蕲蛇药酒中马钱苷酸和龙胆苦苷的含量 [J]. 药品评价, 2022,19(23):1423-1426.
- [15] 邓红, 陆美霞, 欧阳歆怡, 等. 基于 HPLC 建立建昌帮姜天麻炮制前后主成分含量测定方法 [J]. 药品评价, 2022,19(18):1112-1115.
- [16] 赵俊雄, 和祎. HPLC 法测定岩鹿乳康胶囊中水晶兰苷的含量 [J]. 药品评价, 2022,19(8):469-471.

收稿日期: 2023-09-14 定稿日期: 2023-12-25

and a resolution of  $8\text{ cm}^{-1}$ . Each sample was repeated three times. The total polysaccharide content determined by anthraquinone-sulfuric acid colorimetric method was used as the reference value. The data were divided by the Kenston sample set partitioning method, and the effects of different spectral preprocessing methods on the quantitative model were compared to determine the best spectral preprocessing method, Partial least squares (PLS) was used to construct the quantitative model. **Results** The polysaccharide content ranged from 1.5% to 3.0%, and the relative prediction deviation (RPD) in the established PLS model was 3.40. The correlation coefficient  $r_{\text{pre}}$  of the validation set was 0.960 5, indicating that the validation set of the NIR model had a good linear relationship with the polysaccharide determination value. **Conclusion** The rapid prediction model established by NIR technique can accurately determine the polysaccharide content of ganoderma lucidum spore powder capsules, and the method is simple to use, which can provide a rapid determination candidate for quality control of spore powder production.

**Key words:** Ganoderma; Spore; Near-infrared spectroscopy; Polysaccharides; Rapid analysis

灵芝来源于赤芝 *Ganoderma lucidum* (Leyss.exFr.) Karst. 或紫芝 *Ganoderma sinense* Zhao, Xu et Zhang 的干燥子实体<sup>[1]</sup>。《神农本草经》将灵芝列为上品, 有上千年的使用历史, 既是中药, 又是食品, 具有极高的药用及保健价值。成分研究表明主要为灵芝多糖、三萜、核苷、多糖肽、生物碱等<sup>[2]</sup>。目前对其多糖、三萜等成分建立了多种质量检测方法<sup>[3]</sup>。灵芝成熟期后, 菌盖中形成的种子名为灵芝孢子, 具有灵芝的全部活性物质, 其中多糖和三萜等活性成分在免疫调节中发挥了重要作用<sup>[4-5]</sup>。文献研究<sup>[6]</sup>表明灵芝及其孢子粉在急性毒性, 重复给药毒性等毒理学研究中无明显毒性, 安全性高。此外文献计量分析提示灵芝孢子粉在抗肿瘤、免疫调节、抗癫痫等方面具有良好的应用前景, 但物质基础研究和质量评价方面存在局限<sup>[7]</sup>。近红外光谱分析技术 (near infrared spectroscopy, NIR) 具有分析速度快、成本低等优点, 在药品、食品等多个领域已经广泛使用<sup>[8-11]</sup>, 具有无需处理样品, 快速等特点, 可用于食品药品监管、生产在线检测 and 产品质量评价等多个方面。作为一种定量分析方法, 在灵芝孢子粉胶囊的定量研究中尚未见报道, 因此本研究基于近红外光谱技术结合化学计量学数据处理方法, 构建快速准确分析灵芝孢子粉胶囊中多糖含量的预测模型, 判断定量预测模型的可靠性, 为灵芝孢子粉胶囊的质量评价提供技术支持。

## 1 材料

Antaris II 傅里叶变换近红外光谱仪 (美国 Thermo 公司), UV2000 紫外-可见分光光度计 [尤尼柯 (上海) 仪器有限公司], LDZ 5-2 离心机 (北京医用离心机厂), KQ 5200B 超声仪 (昆山市超声设备有限公司), HH-4 水浴锅 (国华电器有限公司), BT-25S 电子分析天平 (北京赛多利斯仪器系统有限公司)。2021 年 1 月至 2023 年 1 月共收集中科牌破壁灵芝孢子粉胶囊样品 35 批次, 批号见表 1。无水葡萄糖对照品 (批号 110833-202109,

纯度 99.9%, 来源中国食品药品检定研究院)。

表1 35批次灵芝孢子粉胶囊批号及多糖含量测定结果

| 序号 | 批号       | 多糖 /% | 序号 | 批号       | 多糖 /% |
|----|----------|-------|----|----------|-------|
| 1  | 20210103 | 2.5   | 19 | 20211105 | 1.9   |
| 2  | 20210108 | 2.5   | 20 | 20211212 | 2.6   |
| 3  | 20210202 | 2.3   | 21 | 20211223 | 2.9   |
| 4  | 20210226 | 2.6   | 22 | 20220110 | 3.0   |
| 5  | 20210301 | 2.0   | 23 | 20220211 | 2.2   |
| 6  | 20210307 | 2.4   | 24 | 20220213 | 2.3   |
| 7  | 20210313 | 1.9   | 25 | 20220215 | 1.9   |
| 8  | 20210421 | 2.6   | 26 | 20220401 | 2.2   |
| 9  | 20210523 | 2.1   | 27 | 20220415 | 2.1   |
| 10 | 20210602 | 2.9   | 28 | 20220616 | 2.9   |
| 11 | 20210820 | 2.1   | 29 | 20220617 | 1.8   |
| 12 | 20210825 | 2.2   | 30 | 20220620 | 2.1   |
| 13 | 20210826 | 1.5   | 31 | 20221010 | 1.9   |
| 14 | 20210926 | 1.5   | 32 | 20221011 | 2.1   |
| 15 | 20211005 | 1.7   | 33 | 20221209 | 1.8   |
| 16 | 20211006 | 1.9   | 34 | 20221215 | 2.0   |
| 17 | 20211009 | 1.6   | 35 | 20230129 | 1.9   |
| 18 | 20211015 | 1.7   |    |          |       |

## 2 方法

### 2.1 原始光谱采集

取胶囊内孢子粉, 置于微量样品杯, 选择漫反射模式, 分辨率为  $8\text{ cm}^{-1}$ , 扫描范围为  $10\,000\sim4\,000\text{ cm}^{-1}$ , 扫描次数 64 次。以空气为参比, 采集近红外光谱数据, 每样品重复扫描 3 次, 取光谱平均结果进行分析处理。

### 2.2 灵芝孢子粉胶囊多糖的含量测定

2.2.1 供试品溶液的制备 参考《中国药典》2020 年版一部灵芝项下测定方法, 取 20 粒灵芝孢子粉胶囊, 内容物混匀, 取 2.0 g, 精密称定, 加水 60 mL, 加热回流 4 h, 滤过, 洗涤滤器和滤渣, 将滤纸和滤渣继续加水 60 mL, 回流 3 h, 滤过, 合并两次滤液, 水浴蒸干, 残渣用水 5 mL 溶解, 缓慢滴加乙醇 75 mL, 摇匀, 在冰箱放置 12 h, 离心, 弃去上清液, 沉淀物用热水溶解转移至 50 mL 量瓶, 冷却, 加水至刻度, 摇匀, 取适量, 离心, 精密移取上清液 3 mL 置于 25 mL 量瓶中, 加水定容, 摇匀。

2.2.2 对照品储备液的制备 精密称取无水葡萄糖对照品 ( 105 ℃干燥至恒重 ) 11.24mg, 置 100 mL 量瓶中, 加水定容, 制成葡萄糖浓度为 0.112 4 mg/mL 的储备液。

2.2.3 标准曲线的制备 精密移取对照品储备液 0.2、0.4、0.6、0.8、1.0、1.2 mL, 分别置于 10 mL 具塞试管中, 各加水至 2.0 mL, 分别精密加入硫酸蒽酮溶液 6 mL, 立即摇匀, 放置 15 min 后立即置冰浴冷却 15 min, 取出, 以相应的试剂为空白, 在 625 nm 处测定吸光度, 以浓度为横坐标 ( X ), 吸光度为纵坐标绘制标准曲线 ( Y )。

2.2.4 方法学考察 参考《中国药典》2020 年版四部中指导原则 ( 9101 ), 分别进行专属性、精密度、重复性、准确度等项目考察。

2.2.5 样品测定 精密量取供试品溶液 2.0 mL, 置于 10 mL 具塞试管中, 按照上述标准曲线制备方法, 自“迅速精密加入硫酸蒽酮溶液 6 mL”起, 同法操作, 测定吸光度, 按标准曲线法计算含量。

2.3 定量预测模型的建立与验证

基于 Matlab 平台, 选择偏最小二乘法 ( partial least squares, PLS ) 建立灵芝孢子粉胶囊样品中多糖的近红外光谱定量分析模型 [ 10, 12 ]。校正集和验证集的选择结果会直接影响所建模型的准确度, 实验中选择常用的 Kenston 样本集筛选校正样品和验证样品。按照样品比例数 2:1 划分校正集和验证集。考虑到原始光谱常含有噪音数据, 所以选择光谱预处理方法降低噪音的影响。本研究比较了标准正态变换法 ( atandard normal variate, SNV ), 多元散射校正法 ( multiplicative scatter correction, MSC )、光谱去噪 ( wavelet denoising, WDS ), S-G 平滑加 1 阶导数 ( savitzky-golay smoothing combined with first-order derivative, SG1D ), S-G 平滑加 2 阶导数 ( savitzky-golay smoothing combined with second-order derivative, SG2D ), SG 平滑 +2 阶导数 + 竞争自适应重加权法 ( SG2D+competitive adaptive reweighted sampling, CARS ) 等方法对结果的影响。

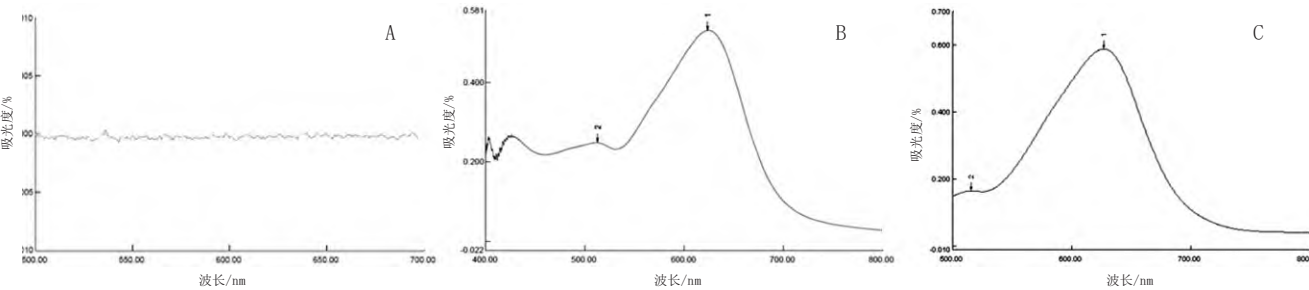


图1 多糖测定专属性考察结果: A. 空白样品; B. 供试品; C. 对照品

3 结果与讨论

3.1 灵芝孢子粉胶囊多糖的含量测定结果

3.1.1 多糖测定专属性考察结果 取水 2.0 mL, 精密加入硫酸蒽酮溶液 6 mL, 密塞, 立即摇匀, 放置 15 min 后立即置冰浴冷却 15 min, 取出, 以水为空白, 在 500~700 nm 范围内扫描, 结果见图 1A。取灵芝孢子粉胶囊供试品, 照“2.2.1”项下供试品溶液的制备和“2.2.5”项下样品测定操作, 在 400~800 nm 范围内作紫外扫描, 结果见图 1B。取“2.2.2”项下对照品储备液, 同上述方法操作, 在 500~700 nm 范围内作紫外扫描, 结果见图 1C。专属性考察结果表明灵芝孢子粉胶囊采用以蒽酮 - 硫酸比色法测定多糖含量方法可行。

3.1.2 线性关系考察结果 以吸光度为纵坐标, 质量为横坐标, 绘制标准曲线。线性方程为  $Y=6.214X-0.0157$ ,  $r=0.9996$ , 表明葡萄糖在 0.0224 8~0.134 9 mg 范围内线性关系良好。

3.1.3 精密度考察结果 以“2.2.3 线性关系考察”第三份对照品溶液为测定对象, 平行测定 6 次吸光度, 平均吸光度 0.417, RSD 值为 0.73%, 表明本法精密度符合分析要求。

3.1.4 中间精密度考察结果 在同一个实验室, 不同时间由两位分析人员用不同的紫外可见分光光度计测定灵芝孢子粉胶囊 ( 批号: 20201205 ) 含量结果之间的精密度, 结果见表 2, RSD 值为 0.84%, 结果表明本法中间精密度良好。

表2 中间精密度试验结果

| 人员 | 称样量 /g  | 平均吸光度 | 含量 /% | 平均含量 /% | RSD/% |
|----|---------|-------|-------|---------|-------|
| 1  | 2.001 3 | 0.795 | 1.36  | 1.4     | 0.84  |
|    | 2.010 6 | 0.799 | 1.36  |         |       |
|    | 2.008 8 | 0.782 | 1.33  |         |       |
|    | 2.023 7 | 0.789 | 1.33  |         |       |
|    | 2.012 5 | 0.795 | 1.35  |         |       |
|    | 2.005 4 | 0.789 | 1.34  |         |       |
| 2  | 2.010 6 | 0.792 | 1.35  | 1.35    | 1.36  |
|    | 2.023 7 | 0.799 | 1.35  |         |       |
|    | 2.022 5 | 0.802 | 1.35  |         |       |
|    | 2.004 6 | 0.800 | 1.36  |         |       |
|    | 2.011 1 | 0.798 | 1.36  |         |       |
|    | 2.008 4 | 0.800 | 1.36  |         |       |

**3.1.5 重复性考察结果** 取灵芝孢子粉胶囊粉末(批号: 20201205) 6 份, 按“2.2.1”项下方法操作, 显色后测定吸光度。每份溶液平行测定 2 次, 以吸光度值按照标准曲线法计算含量, 结果见表 3, 含量结果 RSD 值为 0.82 %, 表明样品的重复性良好。

表3 重复性考察结果

| 序号 | 称样量 /g  | 吸光度   | 含量 /% | 平均含量 /% | RSD/% |
|----|---------|-------|-------|---------|-------|
| 1  | 2.013 2 | 0.796 | 1.35  | 1.4     | 0.82  |
| 2  | 2.012 8 | 0.799 | 1.36  |         |       |
| 3  | 2.005 6 | 0.789 | 1.34  |         |       |
| 4  | 2.011 8 | 0.792 | 1.35  |         |       |
| 5  | 2.021 5 | 0.802 | 1.36  |         |       |
| 6  | 2.009 1 | 0.797 | 1.36  |         |       |

**3.1.6 加样回收试验结果** 多糖的提取与精制: 取 200 粒灵芝孢子粉胶囊内容物混合均匀, 取 50 g 置脂肪抽提器中, 用无水乙醇回流 2 h, 取 40 g 至锥形瓶中, 精密称定, 加水 100 mL, 沸水浴提取 2 h, 趁热过滤, 少量热水洗涤, 再次加水 100 mL 提取 1 h, 过滤, 合并滤液, 用 0.1% 的活性炭脱色处理后置水浴蒸干, 固体物用 10 mL 水溶解, 加入 10 倍体积的无水乙醇, 于 4 ℃ 静置过夜, 待沉淀完全析出后, 离心收集沉淀, 以水溶解, 用 Sevag 法去除蛋白质, 上清液加乙醇使含醇量约 80%, 静置过滤, 取沉淀物用无水乙醇、丙酮、乙醚溶剂依次多次洗涤, 干燥至恒重, 得多糖精制品, 精密称取 11.71 mg 该精制品, 置 50 mL 量瓶中, 以水定容至刻度, 再稀释 10 倍, 照“2.2.5”项下测定法测得多糖含量为 71.9%。

**加样回收率:** 取灵芝孢子粉胶囊(批号: 20201205) 供试品 9 份, 每份约 1.0 g, 精密称定, 按“2.2.1”同法制备测试液, 醇沉后分别精密加入浓度为 14.033 mg/mL 的精制多糖对照品溶液 0.8、1.0、1.2 mL, 依法测定。并计算多糖平均回收率为 94.0%, RSD 值为 1.08%, 结果见表 4。

表4 灵芝孢子粉胶囊加样回收率试验结果

| 序号 | 称样量 /g  | 本底量 /mg | 加入量 /mg | 平均吸光度 | 测得量 /mg | 回收率 /% | 平均回收率 /% | RSD /% |
|----|---------|---------|---------|-------|---------|--------|----------|--------|
| 1  | 1.012 5 | 13.67   | 11.226  | 0.711 | 24.34   | 95.05  | 94.0     | 1.08   |
| 2  | 1.005 9 | 13.58   | 11.226  | 0.708 | 24.24   | 94.96  |          |        |
| 3  | 1.008 6 | 13.62   | 11.226  | 0.710 | 24.31   | 95.23  |          |        |
| 4  | 1.012 1 | 13.66   | 14.033  | 0.785 | 26.82   | 93.78  |          |        |
| 5  | 1.022 8 | 13.81   | 14.033  | 0.784 | 26.79   | 92.50  |          |        |
| 6  | 1.031 6 | 13.93   | 14.033  | 0.788 | 26.92   | 92.57  |          |        |
| 7  | 1.008 4 | 13.61   | 16.840  | 0.865 | 29.50   | 94.36  |          |        |
| 8  | 1.014 0 | 13.69   | 16.840  | 0.866 | 29.53   | 94.06  |          |        |
| 9  | 1.015 1 | 13.70   | 16.840  | 0.864 | 29.46   | 93.59  |          |        |

**3.1.7 样品测定结果** 采用蒽酮-硫酸法对 35 批样本的多糖含量在 625 nm 下进行测定。样品多糖含

量结果见表 1。结果表明样本多糖含量分布范围较广(1.5%~3.0%), 有代表性, 可用于近红外法建立定量预测模型。

### 3.2 原始光谱分析

采集了 35 份样本原始光谱, 结果见图 2。在 10 000~4 000  $\text{cm}^{-1}$  谱区内, 灵芝孢子粉胶囊样品近红外光谱较光滑, 曲线走向基本一致, 但不同样本的光谱又稍有差异, 故能为灵芝孢子粉胶囊多糖含量预测模型分析提供光谱数据。

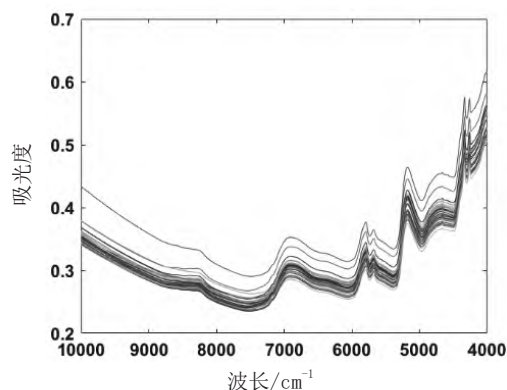


图2 灵芝孢子粉胶囊样品的原始光谱

### 3.3 校正集样品的筛选

实验中选择常用的 Kenston 样本集划分方法, 按照比例数约为 2 : 1 划分校正集和验证集的样品。表 5 显示了灵芝孢子粉胶囊多糖含量的数据分布, 其中 24 份样品为校正集, 11 份样品为验证集。所选的校正集样品涵盖了所测样品含量范围的最大值与最小值, 同时验证集含量范围包含在校正集的含量范围之内, 即可以使用校正集建立的模型分析验证集的样品。

表5 校正集和验证集灵芝孢子粉胶囊样品中多糖含量范围

| 样品集 | 最大值 | 最小值 | 平均值  |
|-----|-----|-----|------|
| 总样品 | 3.0 | 1.5 | 2.16 |
| 校正集 | 3.0 | 1.5 | 2.19 |
| 验证集 | 2.6 | 1.7 | 2.08 |

### 3.4 光谱不同预处理方法的考察

近红外原始光谱数据信息通常包括多种噪音及自身和外界各因素的干扰, 影响所建模型的准确性和可靠性。为了更好地获取光谱中与待测成分指标关联的特征信息, 则需对原始近红外光谱进行预处理分析, 减少噪音波段等的影响, 从而保证所建立的模型更准确、可靠。本研究选择了 SNV 和 MSC 等 2 种校正方法。同时采用 WDS、SG1D、SG2D, SG2D+CARS 等光谱预处理方法以强化谱带特征, 应用基线校正和正则化交换等方法消除变异

导致的光谱变动。通过考察潜变量因子数量对模型预测能力的影响,采用内部交叉验证法,对比选择合适的预处理方法,结果见表6。

表6 不同预处理方法的建模结果

| 预处理方法     | 校正集 (calibration set) |           |         |         | 验证集 (validation set) |         |      |
|-----------|-----------------------|-----------|---------|---------|----------------------|---------|------|
|           | LVs                   | $r_{cal}$ | RMSECV  | RMSEC   | $r_{pre}$            | RMSEP   | RPD  |
| RAW       | 1                     | 0.204 5   | 0.459 9 | 0.441 0 | 0.639 1              | 0.233 0 | 1.08 |
| MSC       | 4                     | 0.504 3   | 0.457 2 | 0.389 0 | 0.105 0              | 0.284 8 | 0.89 |
| SNV       | 4                     | 0.501 2   | 0.458 2 | 0.389 8 | 0.098 7              | 0.286 8 | 0.88 |
| WDS       | 1                     | 0.205 5   | 0.459 8 | 0.440 9 | 0.640 5              | 0.232 9 | 1.08 |
| SG        | 1                     | 0.204 5   | 0.459 9 | 0.441 0 | 0.639 1              | 0.233 0 | 1.09 |
| SG1D      | 10                    | 0.999 9   | 0.427 4 | 0.004 0 | 0.139 8              | 0.290 7 | 0.87 |
| SG2D      | 5                     | 0.999 7   | 0.443 1 | 0.011 2 | 0.397 5              | 0.248 8 | 1.01 |
| SG2D+CARS | 7                     | 0.999 8   | 0.126 0 | 0.009 4 | 0.960 5              | 0.074 1 | 3.40 |

### 3.5 模型的评价与外部验证

选择最佳光谱预处理方法 (SG2D+CARS) 建立了所测样品多糖的定量预测模型,如图3。结果表明校正集相关系数  $r_{cal}$  为 0.999 8 和交叉验证均方差 RMSECV 为 0.126 0,  $r_{cal}$  越大, RMSECV 越小,表明所建模型的性能越好。通过验证集相关系数  $r_{pre}$  为 0.960 5 和预测均方根误差 (RMSEP) 为 0.074 10 及相对预测偏差 (RPD) 为 3.40,表明所建定量模型效果较好,预测结果准确度较高,可用于实际样品的检测。

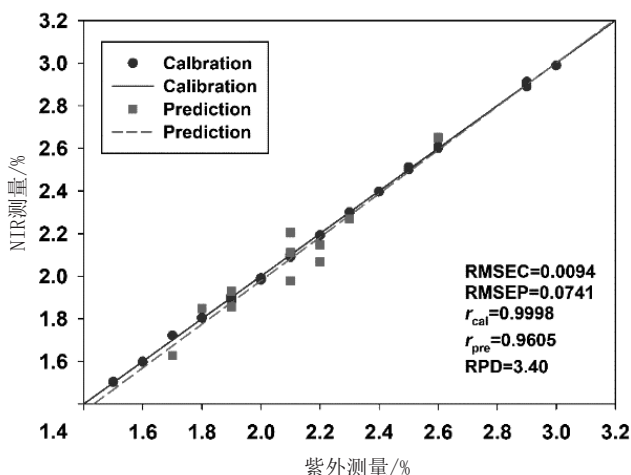


图3 灵芝孢子粉胶囊多糖的定量校正模型

通过定量预测模型对验证集中样品进行外部验证,分析表明 NIR 预测模型对样品中多糖含量的预测值与实测值十分接近,提示采用近红外漫反射光谱建立定量预测模型对灵芝孢子粉胶囊中

多糖含量进行预测,预测结果准确,能满足快速检测的需求。

### 4 讨论

近红外光谱技术在食品、中药等产品的产地分析、真伪鉴别、质量评价等方面已经取得了迅速的发展<sup>[13-16]</sup>。本研究采用近红外漫反射光谱结合化学计量学分析技术建立了灵芝孢子粉胶囊多糖含量的预测模型,实现了灵芝孢子粉胶囊多糖含量的快速检测。本方法操作快速简便,且样品用量少,绿色无污染,可节省大量时间和人力物力,可用于灵芝孢子粉胶囊日常生产中的质量检测。

### 参考文献

- [1] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典:2020年版 一部[S]. 北京:中国医药科技出版社,2020:195-196.
- [2] 武美华,张胜男,敬隆鑫,等. 灵芝的活性成分及其药理作用的研究进展[J]. 中国林副特产,2023(2):76-79.
- [3] 罗虹建,林冬梅,王联福,等. 灵芝活性成分分析与质量评价研究进展[J]. 药物分析杂志,2023,43(1):51-60.
- [4] 冯鹏,胡珀,李慧,等. 灵芝孢子粉在免疫调节中的作用及机制研究进展[J]. 药物生物技术,2021,28(3):308-314.
- [5] 张若冰,杨玉赫,李陈雪,等. 灵芝多糖药理作用及机制的研究进展[J]. 天然产物研究与开发,2023,35(5):879-887.
- [6] 俞宇寒,宋翼升,张立将. 灵芝及灵芝孢子粉的毒理学与安全性评价研究进展[J]. 中国现代应用药学,2023,40(8):1147-1154.
- [7] 赵建霞,李振宇,张国亮,等. 基于 CiteSpace 的灵芝孢子粉研究知识图谱分析[J]. 中国现代应用药学,2021,38(12):1416-1425.
- [8] 杨唯瀚,郝经文,黄和平,等. 近红外漫反射光谱法快速测定蕨菜多糖含量的研究[J]. 中国现代应用药学,2023,40(5):597-602.
- [9] 崔天宇,卢中领,薛琳,等. 基于近红外反射光谱的番茄糖分快速检测模型研究[J]. 光谱学与光谱分析,2023,43(4):1218-1224.
- [10] 戴胜云,蒋双慧,高妍,等. 近红外光谱法快速测定附子中总灰分、酸不溶性灰分和胆巴残留[J]. 药物分析杂志,2022,42(10):1856-1863.
- [11] 陈承武,王天舒,胡孔法,等. 基于卷积神经网络与投票机制的蒲黄炮制品近红外判别方法[J]. 光谱学与光谱分析,2022,42(11):3361-3367.
- [12] 戴胜云,马青青,蒋双慧,等. 近红外光谱法快速测定附子中6个生物碱的含量[J]. 分析测试学报,2021,40(1):57-64.
- [13] 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.
- [14] 张霞,郭盛,王天舒,等. 基于图像颜色及纹理特征的真伪酸枣仁鉴别方法研究[J]. 中药材,2022,45(10):2346-2351.
- [15] 张振宇,常相伟,严辉,等. 基于近红外光谱分析技术的干姜质量快速评价研究[J]. 中草药,2022,53(23):7516-7523.
- [16] 范林宏,何林,谭超群,等. 基于便携式近红外光谱技术快速检测川贝母掺伪问题[J]. 中国实验方剂学杂志,2022,28(3):131-138.

收稿日期:2023-10-15 定稿日期:2023-12-25