

[5]

钱丽华, 施锁平, 岳豪祥. 茅苍术抗胃溃疡研究进展[J]. 实用中医药杂志, 2016, 32(2): 192-193.

[6]

李育浩, 山原條二. 苍术的胃肠促进作用及其活性成分[J]. 中药新药与临床药理, 1991(1): 27-29.

[7]

李 霞, 杨静玉, 孟大利, 等. 麸炒北苍术挥发油成分的分析 and 镇痛活性的研究 [J]. 中 草 药, 2003, 34 (10): 886-887.

[8]

李宇馨, 李瑞海. 苍术挥发油抗炎活性研究[J]. 辽宁中医药大学学报, 2013, 15(2): 71-72.

[9]

Nakai Y, Kido T, Hashimoto K, *et al.* Effect of the rhizomes of *Atractylodes lancea* and its constituents on the delay of gastric emptying[J]. *J Ethnopharmacol*, 2003, 84(1): 51-55.

[10]

Hwang J M, Tseng T H, Hsieh Y S, *et al.* Inhibitory effect of atractylon on tert-butyl hydroperoxide induced DNA damage and hepatic toxicity in rat hepatocytes[J]. *Arch Toxicol*, 1996, 70 (10): 640-644.

[11]

李 涵, 金香环, 赵百慧, 等. 北苍术的化学成分及药理活性的研究进展[J]. 吉林农业, 2019, 444(3): 78-79.

[12]

张明发, 沈雅琴. 苍术及其有效成分消化系统药理作用的研究进展[J]. 药物评价研究, 2017, 40(3): 411-419.

[13]

陈炎明, 俞桂新, 王峥涛. RP-HPLC 测定茅苍术中 β -桉叶醇的含量[J]. 中国中药杂志, 2007, 32(21): 2265-2267.

[14]

张 磊, 欧阳臻, 赵 明, 等. 茅苍术中苍术酮、茅术醇、 β -桉叶醇和苍术素的同时含量测定及其聚类分析[J]. 中国中药杂志, 2010, 35(6): 725-728.

[15]

闫雪生, 刘 青. 苍术挥发油中 β -桉叶醇的含量测定[J]. 中成药, 2004, 26(5): 414-415.

[16]

傅梅红, 王金华, 张 颖, 等. 气相色谱法测定苍术中有效成分 β -桉叶醇含量的方法学研究[J]. 中国中药杂志, 2000, 25(11): 680.

[17]

李万娟, 郭艳玲, 商春丽, 等. 北苍术苍术素、苍术酮、 β -桉叶醇测定及特征图谱研究[J]. 中草药, 2016, 47(2): 330-335.

[18]

肖春萍, 夏 炎, 张 强. 吉林省不同产地北苍术的质量评价研究[J]. 长春中医药大学学报, 2018, 34(5): 872-875.

基于 BP 人工神经网络分析滇桂艾纳香止血作用谱效关系

马雯芳, 王美琪, 姜建萍*, 张凯惠, 韦明妹, 陈 晖
(广西中医药大学药学院, 广西南宁 530001)

摘要: **目的** 基于 BP 人工神经网络分析滇桂艾纳香止血作用的谱效关系。**方法** 以 20 批不同产地的滇桂艾纳香为研究对象, 建立滇桂艾纳香 HPLC 指纹图谱; 采用华法林化模型大鼠, 测定给药后各组凝血酶原时间 (PT)、活化部分凝血活酶时间 (APTT)、凝血酶时间 (TT) 水平。采用灰色关联度法, 筛选对止血作用密切相关的色谱峰; 利用 B 人工神经网络技术, 将化学信息与药效指标数据相关联, 建立谱效关系数学模型。**结果** 20 批样品指纹图谱中 13 个共有峰与药效指标的相关系数均大于 0.740, 均与药效具有较密切的相关性, 以此为基础建立了谱效关系模型。运用神经网络模型预测综合药效值, 相对误差的绝对值均小于或等于 13.60%, 大部分数值的相对误差小于 6.7%, 模型预测具有较高的精度, 性能良好。**结论** 该谱效关系模型及综合评价体系更加合理, 可用于滇桂艾纳香质量标准的完善。

关键词: 滇桂艾纳香; 止血; 谱效关系; 神经网络; 灰色关联度法
中图分类号: R284.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-1528(2020)06-1543-06
doi: 10.3969/j.issn.1001-1528.2020.06.029

Analysis of the spectrum-effect relationship of hemostatic effect of *Blumea riparia* based on BP artificial neural network

MA Wen-fang, WANG Mei-qi, JIANG Jian-ping*, ZHANG Kai-hui, WEI Ming-mei, CHEN Hui

收稿日期: 2019-05-27
基金项目: 广西自然科学基金项目 (2014GXNSFAA118272); 广西卫生厅中医药科技专项 (GZBZ14-06)
作者简介: 马雯芳 (1983—), 女, 博士, 副教授, 从事中药、民族药品种鉴定及品质评价研究。Tel: (0771) 4953513, E-mail: alswen@163.com
***通信作者:** 姜建萍 (1965—), 女, 博士, 教授, 从事中药、民族药成分及质量控制方向研究。Tel: (0771) 3132106, E-mail: jjpoffice@gmail.com

(College of Pharmacy, Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530001, China)

KEY WORDS: *Blumea riparia* (Bl.) DC.; hemostasis; spectrum-effect relationship; network model; grey relational analysis

中药的质量评价是中药现代研究的重要部分之一, 由于中药成分体系复杂, 单一的质量评价方法具有一定的劣势。中药谱效学将药材的化学成分和药效相联系, 具有全面性和立体性的优势, 是中药质量评价的重要研究方法^[1-3]。在中药谱效学领域, 谱效关系的复杂性使得多元线性回归等传统的建模方法无法满足其不可控的非线性关系, 较难得到理想的预测结果。人工神经网络的黑箱模型对非线性关系的建模有较大的优势, 为谱效模型的建立提供了更加科学准确的方法^[4], 可用于反映中药成分与药效相关性中内在的、综合的、多层次的隐含性信息, 以模糊的非线性观点进行比较, 可对中药的内在质量做出更加真实的评价^[5], 已成为中药质量综合评价研究的热门技术^[6-7]。

滇桂艾纳香为菊科植物假东风草 *Blumea riparia* (Bl.) DC. 的干燥全草, 又名管牙 (壮语)^[8], 在广西民间已有较长的应用历史。根据文献报道, 滇桂艾纳香毒性低^[9], 有较好的止血作用, 其 70% 乙醇提取物有最佳的止血效应^[10], 含有原儿茶酸、咖啡酸、芹菜素、木犀草素^[11-12] 等成分, 是发挥止血作用的物质基础, 其通过多种渠道发挥止血作用, 对在体子宫平滑肌的收缩频率及收缩力有增强作用, 与其产后止血的作用有较大联系。目前关于滇桂艾纳香药效物质基础的相关报道较少, 药材的质量评价体系亦较单一。本研究建立不同产地滇桂艾纳香 70% 乙醇提取物的指纹图谱, 同时获得对应批次药材的药效信息, 采用 BP 人工神经网络建立谱效关系数学模型, 综合评价滇桂艾纳香药材质量, 以期为滇桂艾纳香药材及其相关制剂的标准提高奠定基础。

1 材料

1.1 实验动物 健康 SD 大鼠, SPF 级, 雌性, 体重 180~220 g, 由广西医科大学实验动物中心提供, 实验动物生产许可证号 SCXK (桂) 2009-0002。所有动物于通风、清洁、安静、温湿度适宜的环境下饲养, 分笼饲养 1 周后使用。

1.2 药物与试剂 滇桂艾纳香药材信息见表 1, 由广西中医药大学中药鉴定教研室田慧教授鉴定为菊科艾纳香属植物滇桂艾纳香 *Blumea riparia* (Bl.) DC. 的全草。所有批次药材均经干燥处理后粉碎,

过 24 目筛, 备用。

表 1 样品信息

Tab. 1 Information of samples

编号	来源	编号	来源
S-1	百色市田阳县	S-11	百色市那坡县
S-2	百色市凌云县	S-12	百色市平果县
S-3	百色市靖西县	S-13	百色市那坡县
S-4	百色市隆林县	S-14	南宁市宾阳县
S-5	越南	S-15	越南
S-6	百色市那坡县	S-16	百色市平果县
S-7	百色市隆林县	S-17	百色市凌云县
S-8	四川	S-18	百色市平果县
S-9	百色市靖西县	S-19	南宁市宾阳县
S-10	百色市平果县	S-20	越南

对照品绿原酸 (批号 110753-201716)、芦丁 (批号 100080-201409)、原儿茶酸 (批号 110809-201205)、咖啡酸 (批号 110885-200102) 均购自中国食品药品检定研究院; 甲醇、乙腈为色谱纯 (美国 Fisher 公司); 华法林钠 (俄罗斯 Orion 集团公司); 云南白药 (云南白药集团股份有限公司)。水合氯醛 (国药集团化学试剂有限公司); 含枸橼酸采血管 (山东奥塞特医疗器械有限公司); 95% 乙醇为食用级; 其他试剂为分析纯; 水为超纯水。

1.3 仪器 Agilent 1260 高效液相色谱仪 (高压四元泵, 在线真空脱气机, 标准自动进样器, 智能化柱温箱, DAD 检测器)、Agilent 1260 series 色谱工作站 (美国安捷伦科技公司); TGL-16B 高速台式离心机 (上海安亭科学仪器厂); BP211D 电子分析天平 (德国赛多利斯公司); DP5 系列超纯水仪 (法国密里博公司); Sysmex AC1500 全自动血凝仪 (日本东亚仪器有限公司)。

2 方法与结果

2.1 指纹图谱构建

2.1.1 色谱条件 Inertsil ODS-3 色谱柱 (4.6 mm×250 mm, 5 μm); 流动相乙腈 (A) -0.2% 磷酸 (B), 梯度洗脱 (0~25 min, 10%~15% A; 25~40 min, 15%~23% A; 40~60 min, 23%~34% A; 60~80 min, 34%~80% A); 进样量 10 μL; 柱温 25 ℃; 体积流量 1.0 mL/min; 检测波长 0~8 min, 230 nm; 9~27 min, 326 nm; 28~80 min, 360 nm。

2.1.2 供试品溶液制备 滇桂艾纳香药材粉碎后过 24 目筛, 取药材粉末 2 g, 精密称定, 精密加入

70%乙醇20 mL,称定质量,回流提取1 h,放至室温,再次称定质量,以70%乙醇补足减失的质量,滤过,取续滤液离心10 min (13 000 r/min),备用。

2.1.3 对照品溶液制备 分别称取原儿茶酸0.48 mg、绿原酸7.8 mg、咖啡酸0.56 mg、芦丁1.2 mg于10 mL量瓶中,加70%乙醇至刻度,即得。

2.1.4 指纹图谱建立 称取20批滇桂艾纳香药材

粉末,按“2.1.2”项下方法制备供试品溶液,在“2.1.1”项色谱条件下分别进样,记录色谱图,利用“中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012版)”生成滇桂艾纳香药材指纹图谱的共有模式并标定共有的特征峰,得到13个共有峰,2号峰为参照峰S,经指认,图谱中2号峰为原儿茶酸、3号峰为绿原酸、5号峰为咖啡酸、6号峰为芦丁。指纹图谱见图1,共有模式图谱见图2,混合对照品色谱图见图3。

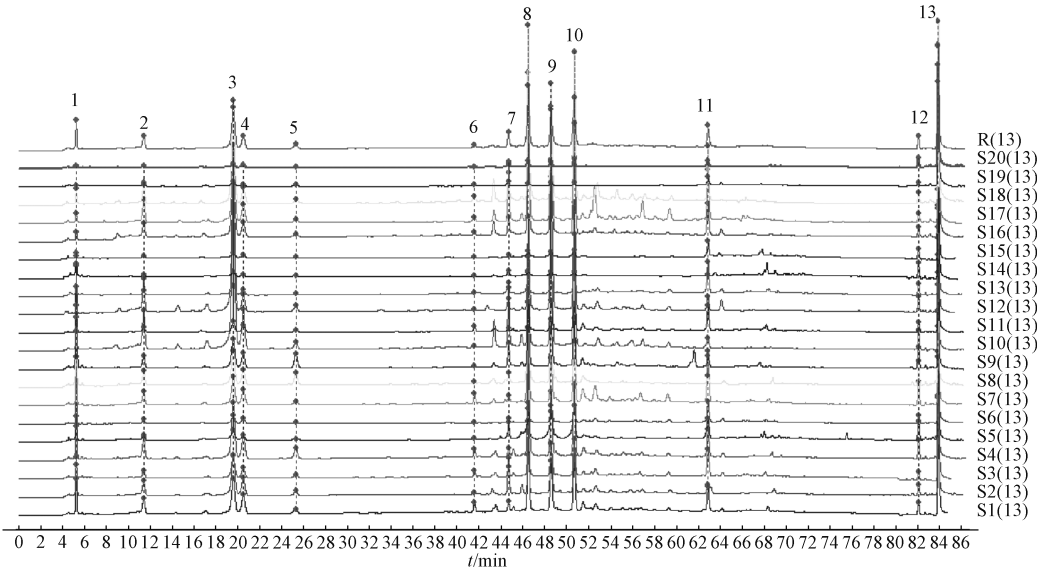


图1 20批样品HPLC指纹图谱

Fig. 1 HPLC fingerprints of twenty batches of samples

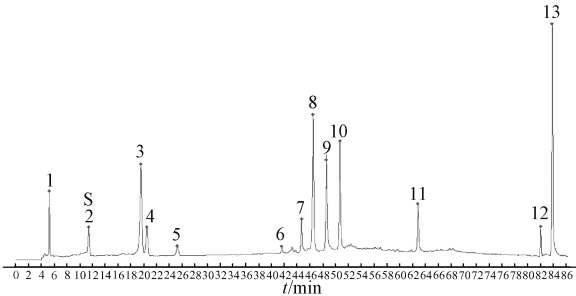
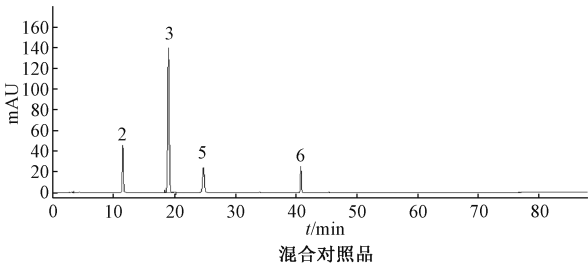


图2 滇桂艾纳香共有模式指纹图谱

Fig. 2 Common pattern fingerprint of *Blumea riparia* (BL.) DC.



2. 原儿茶酸 3. 绿原酸 5. 咖啡酸 6. 芦丁
2. protocatechuic acid 3. chlorogenic acid 5. caffeic acid 6. rutin

图3 各成分HPLC色谱图

Fig. 3 HPLC chromatograms of various constituents

2.2 止血活性测定

2.2.1 醇提液制备 称取各批次滇桂艾纳香药材525 g,加入14倍量70%乙醇,浸泡0.5 h,回流提取1 h后过滤,药渣加入10倍量70%乙醇,回流提取1 h,合并2次所得提取液,浓缩至733 mL,得到浓度为0.716 g生药/mL的药液,备用。

2.2.2 动物分组与给药 取体质量180~220 g SD大鼠(雌性)230只,随机分为23组,每组10

只,分别为空白组、模型组、阳性组、20组滇桂艾纳香给药组。空白组和模型组灌胃纯水(2 mL/100 g);阳性组灌胃0.067 g/mL云南白药药液(0.677 g生药/kg);滇桂艾纳香给药组灌胃不同批次滇桂艾纳香药液(14.32 g生药/kg),每天1次,连续7 d。末次给药2 h后,除空白组外,各组大鼠灌服华法林药液(50 mg/kg),造成华法林化模型。

2.2.3 指标检测 末次给药后停食，次晨采集指标，大鼠注射 10% 水合氯醛溶液（350 mg/kg）麻醉，腹主动脉穿刺取血 4.5 mL，注入枸橼酸钠抗凝剂比例 1：9 的离心管中，混匀，以 3 000 r/min 离心 10 min，分离血浆，于 3 h 内用全自动凝血仪检测凝血酶原时间（PT）、活化部分凝血活酶时间（APTT）、凝血酶时间（TT），对比模型组与给药组的指标变化情况，考察滇桂艾纳香对华法林化大鼠 PT、APTT、TT 变化的影响，结果见表 2。

表 2 不同产地样品对华法林化大鼠凝血功能的影响（ $\bar{x}\pm s$ ， $n=10$ ）

Tab. 2 Effects of samples from different growing areas on coagulant activity of warfarin-treated rats ($\bar{x}\pm s$, $n=10$)

组别	PT/s	APTT/s	TT/s
空白组	26.67±0.85	17.57±1.17	29.75±0.81
阳性组	64.20±4.90**	24.84±1.53**	30.90±1.32**
模型组	91.68±2.55##	33.26±1.71##	32.80±1.12##
S-1 组	65.12±6.62**	25.60±1.29**	30.31±0.73**
S-2 组	62.29±2.51**	25.20±1.04**	29.07±0.92*
S-3 组	63.30±4.39**	25.23±0.59**	31.01±1.24*
S-4 组	59.40±3.50**	27.79±1.54*	31.01±1.61*
S-5 组	69.18±4.32**	27.59±0.84**	28.32±0.67**
S-6 组	60.95±2.94**	25.22±1.08**	28.95±0.53*
S-7 组	57.45±4.83**	25.77±1.57**	29.36±0.73*
S-8 组	64.88±2.42**	30.11±1.17*	29.03±0.75**
S-9 组	70.41±2.80**	27.27±0.98**	31.75±0.66*
S-10 组	72.05±4.54**	29.70±0.95*	30.22±1.10**
S-11 组	58.71±4.23**	29.40±1.46*	31.21±0.60*
S-12 组	59.20±3.21**	28.34±1.61**	30.33±0.90**
S-13 组	74.29±3.23**	27.7±1.35**	29.11±0.96**
S-14 组	65.56±6.28**	28.58±1.04**	31.20±0.61*
S-15 组	70.96±3.61**	28.64±1.61**	31.60±0.56*
S-16 组	61.71±2.72**	27.56±1.96**	28.06±0.59**
S-17 组	60.32±2.84**	26.51±2.34**	28.81±1.10*
S-18 组	65.55±2.76**	27.79±1.88**	29.34±0.78**
S-19 组	73.03±3.68**	29.43±1.67*	30.11±0.47*
S-20 组	74.64±3.81**	29.18±1.87**	29.48±0.77**

注：与模型组比较，* $P<0.05$ ，** $P<0.01$ ；与空白组比较，## $P<0.01$ 。

2.3 灰色关联度分析 将不同产地滇桂艾纳香的止血药效指标（PT、APTT、TT）作为母序列，将药材指纹图谱共有峰峰面积为子序列，输入 MATLAB R2014b 软件，对两者的灰色关联度进行分析^[13-14]。

根据研究需要，采用初始值法，以第一列数据为参照值，即新数据=原数据/参照值，得到无量纲化的数列。将无量纲化后的结果按公式 $\Delta_i(k) = |y(k) - x_i(k)|$ 计算，得到子序列与母序列的绝对差值，再计算两极最大差值和最小

差值。经计算得各序列的两极最大差值和最小差值。将计算所得各序列极差值带入公式，其中分辨系数 ρ 取值为 0.5，可得到 20 批不同产地滇桂艾纳香药材指纹图谱中 13 个共有峰与 3 个止血药效指标（PT、APTT、TT）间的关联系数。将计算所

得的关联度系数带入公式 $\gamma_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_i(k)$ ， $k=1, 2, \dots, n$ ，计算 13 个共有峰与 3 个止血药效指标结果之间的关联度，并得到其关联序，对滇桂艾纳香药材指纹图谱 13 个共有峰与其止血药效的关联程度进行评价，筛选用于建立谱效模型的共有峰。结果见表 3。结果表明，滇桂艾纳香指纹图谱 13 个共有峰与 3 个药效指标的相关系数均大于 0.740，均与药效具有较密切的相关性。

表 3 20 批样品指纹图谱共有峰与止血药效指标灰色关联度结果

Tab. 3 Results of grey correlation analysis between common peaks in fingerprint and hemostatic effect of twenty batches of samples

关联序	PT		APTT		TT	
	关联度	峰号	关联度	峰号	关联度	峰号
1	0.956 1	13	0.935 2	13	0.966 6	13
2	0.861 3	11	0.864 4	12	0.868 7	11
3	0.857 8	12	0.852 3	11	0.862 3	12
4	0.849 9	8	0.848 6	8	0.853 6	8
5	0.849 3	9	0.842 2	9	0.852 5	9
6	0.834 8	4	0.824 8	10	0.840 3	10
7	0.831 5	10	0.821 8	4	0.840 1	4
8	0.806 5	7	0.791 6	5	0.799 4	5
9	0.800 3	5	0.783 8	7	0.798 4	2
10	0.792 8	2	0.779 8	2	0.795 4	7
11	0.787 9	6	0.769 8	6	0.790 2	6
12	0.775 0	3	0.760 0	3	0.777 2	3
13	0.752 2	1	0.741 5	1	0.755 5	1

2.4 止血作用谱效关系建立

2.4.1 应用 MATLAB 建立谱效关系模型 研究中共有 20 组实验数据，每组数据包括 13 个共有峰和 3 个（PT、APTT、TT）药效学数据，将数据分为 2 部分，其中 15 组为训练数据，5 组为验证数据^[15]。

采用 MATLAB R2014b 软件，将 15 批样品的共有峰面积作为输入，3 个药效分别作为输出，分别建立共有峰-PT 药效、共有峰-APTT 药效和共有峰-TT 药效 3 个模型。共有峰-PT 药效和共有峰-APTT 药效模型采用 13×4×1 网络结构，共有峰-TT 药效模型采用 13×3×1 结构，分别建立谱效关系模型。隐含层、输出层分别采用正切 S 型、线性神经

元, 隐含层转换函数采用 *tansig* 函数, 输出层采用 *purelin* 函数, 学习算法选择 *learngdm*。运用 *Function Approximation Network* 进行训练, 参数设置为训练次数 200, 误差限 0.01, 步长 0.1。所有模型均采用同样参数, 将 15 组数据分别输入各模型进行训练。采用峰面积和 3 项药效数据归一化后的数值作为训练向量, 得到训练结果。各模型网络均可在训练次数以内达到精度要求, 且用时极少, 表明已通过标准数据训练得到谱效模型, 需通过将测试数据与标准数据比较对模型进行验证。

2.4.2 谱效关系模型的验证与预测分析 将 5 批样品数据中的峰信息输入所得的神经网络模型, 对 3 个药效学指标的结果进行预测, 并将预测值与实测值进行比较, 结果见表 4。结果显示, 运用神经网络模型预测综合药效值, 其相对误差的绝对值均小于或等于 13.60%, 大部分数值的相对误差小于 7%, 表明神经网络模型预测具有较高的精度, 较好的泛化能力, 可用于止血药效的预测, 性能良好。

表 4 BP 人工神经网络模型对药效的预测值及预测误差
Tab.4 Prediction value and prediction error of BP artificial neural network model for pharmacodynamics

	编号	预测值	实测值	相对误差/%
PT	1	63.14	61.71	2.30
	5	62.89	60.32	4.30
	3	61.94	65.55	5.50
	4	64.56	73.03	11.60
	5	64.5	74.64	13.60
APTT	1	27.55	27.56	0.03
	5	26.51	26.51	0
	3	25.98	27.79	6.50
	4	27.47	29.43	6.70
	5	28.18	29.18	3.40
TT	1	27.54	28.06	1.80
	5	28.36	28.81	1.60
	3	28.11	29.34	4.20
	4	29.54	30.11	1.90
	5	29.48	29.48	0

3 讨论

本研究采用整体动物模型, 因动物模型是给药后动物经吸收代谢后才发挥药效, 实验结果更接近于人服药后的药物体内过程, 实验结果准确度更高, 所以项目采用整体动物模型开展相关药效实验。实验考察了采用华法林造模对大鼠凝血系统的影响, 此模型的作用机制主要是影响凝血因子的合成, 通过抑制外源性凝血途径, 引起凝血机制障碍

导致出血^[16], 本实验选用该模型, 观察华法林对凝血四项的影响, 结果表明, 华法林化大鼠的 PT、APTT、TT 均得到一定程度的延长, FIB 值同时降低, 造模效果较好。

实验以滇桂艾纳香对凝血系统的影响为指标, 对其止血效果进行研究。预实验中考察了滇桂艾纳香对华法林化大鼠凝血四项 (PT、APTT、TT、FIB) 的影响, 结果表明, 所有给药组 PT、APTT、TT 均有不同程度的缩短, 与模型组比较有显著性差异, 给药组大鼠 FIB 与模型组比较有升高趋势, 但趋势较不明显, 结果差异无统计学意义。综合各项药效指标, 选择药效较显著的 PT、APTT、TT 作为药效学评价指标。

灰色关联分析法在中药谱效关系研究中的应用十分广泛, 是解决多指纹峰与药效直接相关分析问题的重要方法之一, 具有更好的准确性和代表性^[17-18]。本研究中, 13 号特征峰对药效的关联度均达到 0.9 以上, 与药效作用关联度达到 0.8 以上的有 8 个特征峰, 与药效作用关联度达到 0.7 以上的有 4 个特征峰, 特征峰与药效的相关系数均大于 0.740。中药、民族药是多成分、多靶点协同发挥药效, 指纹图谱建立的 13 个特征峰, 原儿茶酸、绿原酸、咖啡酸、芦丁以及某些未确定结构的化合物是滇桂艾纳香止血活性的基础, 与其止血药效均呈正相关, 对其发挥止血作用均有贡献, 与药效相关性较为密切。但各成分间的协同作用对药效的影响有待开展进一步研究。

研究通过 15 批样品的共有峰和药效信息的训练, 建立 BP 人工神经网络谱效模型, 模型能利用化学成分信息对相应的药效进行预测, 5 批供试品的 APTT、TT 预测结果相对误差均小于 6.7%, 预测值与实际值误差较小, 表明采用人工神经网络模型来建立滇桂艾纳香止血谱效关系是可行的。但 PT 相对误差较大, 预测的 5 批药材有 2 批相对误差大于 10%, 分别达到 1.60%、13.60%, 模型验证的研究体现出实际值与预测值之间的一定差异, 可能是由于样本量较小, 输入信息量较少, 导致不同药效输出的预测值准确率有一定的差异, 可以通过增大样本量对模型进行进一步训练以提高模型的稳健性。

在实际应用中, 只需要输入相同条件下获得的指纹图谱峰信息, 即可通过数学模型得到预测的药效结果, 在一定程度上解决了化学成分与药效断层的问题, 以期对药材进行更为合理的质量评价。

参考文献:

[1] 蔡 靛,张 倩,杨丰庆. 中药谱效学的应用进展[J]. 中草药,2017,48(23): 5005-5011.

[2] 李宇驰,徐 妍,肖培云,等. 中药谱效学的研究进展[J]. 时珍国医国药,2017,28(3): 673-675.

[3] 孙亮亮,吴 剑,张 叶,等. 基于偏最小二乘回归分析法怀牛膝药材抗炎镇痛谱效关系[J]. 中成药,2018,40(12): 2786-2792.

[4] 吴 忠. 质量计量学——中药色谱指纹图谱的解析与特征表达[J]. 中药材,2003,26(8): 598-600.

[5] 蒋政萌. 小一点红药材质量控制与抗炎谱效关系研究[D]. 贵阳:贵州师范大学,2017.

[6] 许雯雯,王 帅,孟宪生,等. 神经网络结合灰色关联度法对气滞胃痛颗粒复方药材抗炎活性谱效关系研究[J]. 中国中药杂志,2013,38(11): 1806-1811.

[7] 包永睿,王 帅,孟宪生,等. 气滞胃痛颗粒促胃肠动力作用谱效关系网络模型的构建[J]. 中药材,2014,37(5): 828-832.

[8] 广西壮族自治区食品药品监督管理局. 广西壮族自治区壮药质量标准(第一卷)[M]. 南宁:广西科学技术出版社,2008: 196-197.

[9] 姜建萍,刘喜华,杜 秀,等. 滇桂艾纳香不同提取物急性毒性研究[J]. 华夏医学,2009,22(5): 808-810.

[10] 姜建萍,陈 晨,蓝仁青,等. 滇桂艾纳香不同提取物凝血作用的比较研究[J]. 中国实验方剂学杂志,2010,16(1): 104-106.

[11] 曹家庆,王亚男,周玉枝,等. 滇桂艾纳香化学成分的分离与鉴定(Ⅱ)[J]. 中国药物化学杂志,2008,18(6): 449-451.

[12] 郑 丹,张晓琦,王 英,等. 滇桂艾纳香地上部分的化学成分[J]. 中国天然药物,2007,5(6): 421-424.

[13] 谌松霖,张利红,陈 聪,等. 基于灰色理论联合多元统计方法的中药研究模式的探讨[J]. 中草药,2016,47(1): 1-5.

[14] 李宏艳. 关于灰色关联度计算方法的研究[J]. 系统工程与电子技术,2004,26(9): 1231-1233; 1270.

[15] 闻 新,周 露,李 翔,等. MATLAB 神经网络仿真与应用[M]. 北京:科学出版社,2003: 258-281.

[16] 刘秀娥,杨林花,侯丽虹,等. 消瘀止血片治疗凝血障碍性出血性疾病的药效学研究[J]. 山西医药杂志,2008,37(3): 204-206.

[17] 刘思峰,蔡 华,杨英杰,等. 灰色关联分析模型研究进展[J]. 系统工程理论与实践,2013,33(8): 2041-2046.

[18] 陈晓颖,黄跃前,陈玉婵,等. 沉香挥发性成分与其抗肿瘤活性的灰色关联度分析[J]. 中成药,2018,40(1): 224-227.

狗脊微波炮制过程中指标成分与粉末颜色关联性分析

梁志毅, 黄贵发, 崔 婷, 张 正, 孙冬梅*
(广东一方制药有限公司, 广东省中药配方颗粒企业重点实验室, 广东 佛山 528244)

摘要: **目的** 研究狗脊 *Cibotium baronetz* (L.) J. sm. 微波炮制过程中指标成分含有量与粉末颜色的相关性。**方法** 采用 Adobe Photoshop 软件获取各炮制品色度值 (L、a、b), 采用 HPLC 法测定狗脊微波炮制过程中原儿茶酸、5-羟甲基糠醛的含有量变化, 并考察指标成分含有量与色度值的相关性。**结果** 随着炮制时间的延长, 温度逐渐升高, 原儿茶酸、5-羟甲基糠醛含有量逐渐升高, 当温度高于 215 ℃ 时, 其含有量逐渐降低。原儿茶酸、5-羟甲基糠醛含有量与色度值 L 值呈负相关, 与色度值 a 值呈正相关。**结论** 狗脊微波炮制品粉末颜色与指标成分含有量之间具有一定相关性, 可作为微波炮制过程中监测炮制品质量评价的依据。

关键词: 狗脊; 微波炮制; 原儿茶酸; 5-羟甲基糠醛; 关联性

中图分类号: R284.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-1528(2020)06-1548-05

doi:10.3969/j.issn.1001-1528.2020.06.030

收稿日期: 2019-05-08

基金项目: 广东省级科技计划项目 (2018B030323004); 广东特支计划科技创业领军人才 (2017TY04R197)

作者简介: 梁志毅 (1986—) 男, 执业中药师, 从事中药配方颗粒研究。Tel: 18665428047, E-mail: liangzy112@163.com

* 通信作者: 孙冬梅 (1969—) 女, 教授, 博士生导师, 从事中药配方颗粒研究。Tel: 13503042955, E-mail: 10268667@qq.com