

[18] 郝 敏, 白 雁, 谢彩侠, 等. 近红外光谱法快速测定不同连翘饮片中连翘酯苷 A 的含量[J]. 中国实验方剂学杂志, 2016, 22(8): 78-82.

[19] Xiao Y X, Wang H L, Xie Z L, *et al.* NIRS TADF emitters and OLEDs: Challenges, progress, and perspectives[J]. *Chem Sci*, 2022, 13(31): 8906-8923.

[20] 乔 璐, 韩盼盼, 王若晨, 等. 傅里叶红外光谱结合 HPLC 对不同产地南葶苈子成分的含量测定[J]. 中华中医药学刊, 2023, 41(3): 58-62; 265-266.

[21] Zhang J B, Li Y, Wang B, *et al.* Rapid evaluation of *Radix Paeoniae Alba* and its processed products by near-infrared spectroscopy combined with multivariate algorithms[J]. *Anal Bioanalytical Chem*, 2023, 415(9): 1719-1732.

[22] 李 劲, 杨盼盼, 唐文旭, 等. 基于波长优选的小柴胡颗粒黄芩苷近红外校正模型建立[J]. 中国实验方剂学杂志, 2016, 22(18): 72-77.

[23] Yi Y, Hua H M, Sun X F, *et al.* Rapid determination of

polysaccharides and antioxidant activity of *Poria cocos* using near-infrared spectroscopy combined with chemometrics[J]. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 2020, 240: 118623.

[24] Wu L J, Wang B X, Yin Y F, *et al.* Characterization of tobacco with near-infrared spectroscopy with competitive adaptive reweighted sampling and partial least squares discrimination[J]. *Anal Lett*, 2016, 49(14): 2290-2300.

[25] Li M X, Shi Y B, Zhang J B, *et al.* Rapid evaluation of *Ziziphi Spinosae Semen* and its adulterants based on the combination of NIRS and multivariate algorithms[J]. *Food Chem*, 2023, 20: 101022.

[26] 顾志荣, 马转霞, 孙岚萍, 等. 近红外光谱法快速测定锁阳中多指标成分含量[J]. 药物分析杂志, 2020, 40(6): 1076-1089.

[27] 白 雁, 李小庆, 雷敬卫. 近红外光谱法快速测定白芍中芍药苷含量[J]. 天然产物研究与开发, 2013, 25(3): 358-362.

泽泻饮片中水分、指标成分近红外光谱定量模型建立

陆 迅<sup>1,2</sup>, 张 哲<sup>1,2</sup>, 詹庚之<sup>1,2</sup>, 蔡璐瑶<sup>1,2</sup>, 李存玉<sup>1,2,3</sup>, 郑云枫<sup>1,2,3</sup>, 王团结<sup>2</sup>, 金 玉<sup>4</sup>, 彭国平<sup>1,2,3\*</sup>

[1. 南京中医药大学药学院, 江苏 南京 210023; 2. 中药制药过程控制与智能制造技术全国重点实验室, 江苏 南京 210023; 3. 江苏省中药资源产业化过程协同创新中心, 江苏 南京 210023; 4. 上海海虹实业(集团)巢湖今辰药业有限公司, 安徽 巢湖 238007]

**摘要：**目的 建立泽泻饮片中水分、23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 的近红外光谱定量模型。**方法** 采集 95 批饮片近红外光谱 (NIRS) 数据, 烘干法测定水分含量, HPLC 法测定各指标成分含量, 偏最小二乘法结合特征提取算法建立定量模型。**结果** 模型训练决定系数分别为 0.952 6、0.958 1、0.920 8, 预测决定系数分别为 0.930 0、0.905 2、0.906 4, 剩余预测残差 (PRD) 分别为 4.00、3.58、3.46, 预测集、校正集均方根误差比值 (RMSEP/RMSEC) 分别为 1.15、1.11、1.06。**结论** 基于 NIRS 的定量模型预测效果良好, 可用于泽泻饮片的快速质量检测。

**关键词：**泽泻; 饮片; 水分; 23-乙酰泽泻醇 B; 23-乙酰泽泻醇 C; 近红外光谱 (NIRS); 定量模型  
**中图分类号：**R284.1      **文献标志码：**A      **文章编号：**1001-1528(2025)10-3184-07  
**doi:**10.3969/j.issn.1001-1528.2025.10.002

Establishment of near-infrared spectroscopy quantitative models for moisture and index components in *Alismatis Rhizoma* decoction pieces

LU Xun<sup>1,2</sup>, ZHANG Zhe<sup>1,2</sup>, ZHAN Geng-zhi<sup>1,2</sup>, CAI Lu-yao<sup>1,2</sup>, LI Cun-yu<sup>1,2,3</sup>, ZHENG Yun-feng<sup>1,2,3</sup>, WANG Tuan-jie<sup>2</sup>, JIN Yu<sup>4</sup>, PENG Guo-ping<sup>1,2,3\*</sup>

[1. School of Pharmacy, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing 210023, China; 2. State Key Laboratory for Technologies of Chinese Medicine Pharmaceutical Process Control and Intelligent Manufacture, Nanjing 210023, China; 3. Jiangsu Provincial Collaborative Innovation Center for

收稿日期: 2025-06-20  
基金项目: 安徽省中央引导地方科技发展专项“泽泻颗粒的开发与产业化”项目 (202007d06050008)  
作者简介: 陆 迅 (2001—), 男, 硕士, 研究方向为中药制药技术与产品开发。E-mail: 20230891@njucm.edu.cn  
\* 通信作者: 彭国平 (1963—), 男, 博士, 教授, 博士生导师, 从事制剂精制、新药开发研究。E-mail: 320787@njucm.edu.cn

Industrialization Process of Traditional Chinese Medicine Resources, Nanjing 210023, China; 4. Shanghai Haihong Industry (Group) Chaohu Jinchen Pharmaceutical Co., Ltd., Chaohu 238007, China]

**ABSTRACT: AIM** To establish the near-infrared spectroscopy quantitative models for moisture, 23-acetylalismol B and 23-acetylalismol C in *Alismatis Rhizoma* decoction pieces. **METHODS** The near-infrared spectroscopy (NIRS) data were collected in 95 batches of decoction pieces, after which drying method was adopted in the content determination of moisture, HPLC was applied to determining the contents of 23-acetylalismol B and 23-acetylalismol C, the quantitative models were established by partial least squares method combined with feature extraction algorithms. **RESULTS** The model training determination coefficients were 0.952 6, 0.958 1 and 0.920 8, along with the prediction determination coefficients of 0.930 0, 0.905 2 and 0.906 4, the residual prediction deviations (PRD) of 4.00, 3.58 and 3.46, and the root mean square error ratios of prediction values to calibration values (RMSEP/RMSEC) of 1.15, 1.11 and 1.06, respectively. **CONCLUSION** The quantitative models based on NIRS exhibit good prediction effects, which can be used for the rapid quality detection of *Alismatis Rhizoma* decoction pieces.

**KEY WORDS:** *Alismatis Rhizoma*; decoction pieces; moisture; 23-acetylalismol B; 23-acetylalismol C; near-infrared spectroscopy (NIRS); quantitative models

泽泻为泽泻科植物东方泽泻 *Alisma orientale* (Sam.) Juzep. 或泽泻 *Alisma plantago-aquatica* Linn. 的干燥块茎<sup>[1]</sup>, 始载于《神农本草经》, 列为上品, 其性寒, 味甘、淡, 归肾、膀胱经, 23-乙酰泽泻醇 B 和 23-乙酰泽泻醇 C 为该药材主要三萜类成分<sup>[2]</sup>, 具有利尿<sup>[3]</sup>、调节血脂<sup>[4]</sup>、抗肿瘤<sup>[5]</sup>等作用。目前, 在泽泻饮片生产过程中通常将生品除杂后水润、浸切厚片、干燥, 以主观经验为主<sup>[6]</sup>, 易导致水分过高、成分含量差异较大等问题, 并采用 HPLC<sup>[7]</sup>、指纹图谱<sup>[8]</sup>、GC-MS<sup>[9]</sup>等方式进行检测, 不适合饮片质量综合评价。

近红外光谱技术(NIRS)是一种波长范围 780~2 526 nm<sup>[10]</sup>的非可见光光谱技术, 具有快速、无损等优点, 目前已应用于烟草<sup>[11]</sup>、小麦麸皮<sup>[12]</sup>、天麻<sup>[13]</sup>等药材中, 但鲜有涉及泽泻。因此, 本实验基于 NIRS, 对泽泻饮片中水分、23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 含量建立定量模型, 通过不同预处理方式及特征波长选择算法提高精度, 从而为其质量控制提供新型快速检测方式。

## 1 材料

Antaris II FT-NIR 光谱仪(美国 Thermo Fisher Scientific 公司); Waters e2695、Waters 2998 PDA 检测器(美国 Waters 公司); 电热鼓风干燥箱(上海一恒科学仪器有限公司); KH-250B 超声波清洗器(昆山禾创超声仪器有限公司); AF-04S 高速中药粉碎机(浙江奥力电机股份有限公司); TGL-16C 离心机(上海安亭科学仪器厂); AL204 电子天平(万分之一)、MS105 电子天平(十万分之

一)[梅特勒-托利多仪器(上海)有限公司]。23-乙酰泽泻醇 B(批号 JZ24070216)、23-乙酰泽泻醇 C(批号 JZ24062003)对照品均购自南京景竹生物技术有限公司。泽泻饮片于 2023 年至 2024 年采自福建、四川, 其中前者产 38 批, 后者产 57 批, 共 95 批, 经南京中医药大学严辉教授鉴定为正品, 粉碎为粉末, 过 80 目筛, 保存在密封、干燥、无光环境下。甲醇、乙腈等试剂均购自国药集团化学试剂有限公司; 水为超纯水, 采用 Milli-Q 超纯水系统制备。

## 2 方法

2.1 水分含量测定 按照 2020 年版《中国药典》烘干法(通则 0832 第二法)进行。

2.2 HPLC 含量测定 按照 2020 年版《中国药典》泽泻含量测定项下进行。

2.2.1 色谱条件 Hadera ODS-2 色谱柱(4.6 mm×250 mm, 5 μm); 流动相乙腈(A)-水(B), 梯度洗脱(0~5 min, 45% 乙腈; 5~30 min, 45%~84% 乙腈; 30~40 min, 84% 乙腈); 体积流量 1 mL/min; 柱温 30 ℃; 检测波长 208、246 nm; 进样量 20 μL。

2.2.2 对照品溶液制备 精密称取 23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 对照品适量, 乙腈制成每 1 mL 分别含两者 456、220 μg 的溶液, 即得。

2.2.3 供试品溶液制备 将饮片干燥至恒重以消除水分干扰, 取约 1.0 g, 精密称定, 置于具塞锥形瓶中, 精密加入 25 mL 乙腈, 密塞, 称定质量, 超声(功率 250 W, 频率 50 kHz)处理 30 min,

放冷，乙腈补足减失的质量，摇匀，过滤，取续滤液，即得。

## 2.4 NIRS 数据采集和处理

2.4.1 采集 采用 Antaris II FT-NIR 光谱仪的漫反射模式，95 批饮片置于高度约为 5 cm 的石英小瓶中，填充到 2 cm 左右的高度，并稍微压缩以确保密度均匀，在 12 000~4 000  $\text{cm}^{-1}$  波数范围内获得光谱，设定分辨率 16  $\text{cm}^{-1}$ ，每个光谱进行 32 次扫描，平行 3 次，取平均值，再重复 1 次，共获得 190 份光谱数据。

2.4.2 预处理 NIRS 由于环境条件、样品本身、人为操作等因素，导致存在大量无关信息，会对模型建立及评估产生负面作用，故需对原始光谱进行预处理<sup>[14]</sup>。本实验采用 The Unscrambler X 10.4 软件，预处理方式包括 Savitzky-Golay 滤波拟合法、标准正态变量变换（SNV）、多元散射校正（MSC）、归一化、导数光谱、正交信号校正法（OSC）及其组合，并筛选最佳方式。

2.4.3 样品集划分 对 190 份光谱数据进行随机索引排序处理，分为训练集和预测集，用于模型构建和性能预测。其中，前 133 份（占比 70%）作为训练集，剩余 57 份（占比 30%）作为预测集。

2.4.4 特征波长筛选 在 NIRS 图谱中常夹杂许多与目标无关的波长，如仪器噪声、背景干扰等，为了提高模型准确性和鲁棒性，优化应用效果，需进行特征波长筛选。本实验采用竞争性自适应重加权采样-迭代保留信息变量（CARS-IRIV）、区间组合优化（ICO）、无信息变量消除（UVE）进行波长筛选，其中 CARS 算法是以生物进化的思想为基础进行特征筛选<sup>[15]</sup>，而 IRIV 算法是输入波段经过反复迭代，从而得到基于参比值的特征波段<sup>[16]</sup>，故在前者速发选定变量的基础上以后者进一步去除冗余变量，可减少模型复杂性，从而避免过拟合；ICO 算法是基于协同优化（CO）算法改进而来，将光谱划分成不同区间，并对其中的数据进行组合比对，从而得到最佳选择<sup>[17]</sup>；UVE 算法核心思想是加入一组随机噪声，利用其无关变量信息来选择光谱本身的特征变量，从而达到变量筛选的目的。

2.4.5 偏最小二乘回归（PLSR）模型建立及评价 PLSR 是一种多元分析技术，可从数据中提取潜在变量并构建回归模型，从而预测未知样本的观测值或测量值，能从光谱数据集中提取信息，分析具有大量“噪声”和冗余变量的数据，并同时几个特征变量进行建模<sup>[18]</sup>。一般认为，训练决定

系数  $R^2_c$  和预测决定系数  $R^2_p$  大于 0.8，剩余预测残差 PRD 大于 2.5，预测集、校正集均方根误差比值（RMSEP/RMSEC）在 0.8~1.2 范围内时<sup>[19]</sup>，所训练的模型准确可靠。本实验采用 Matlab（2023b）软件进行特征波长筛选及 PLSR 建模。

## 3 结果

3.1 含量测定 结果见表 1，可知均符合 2020 年版《中国药典》规定。

3.2 NIRS 图谱分析 原始图谱见图 1A。由图 1B 可知，在 8 365、5 160、4 717、4 373、4 323、4 261  $\text{cm}^{-1}$  处有均有特征吸收峰，8 365  $\text{cm}^{-1}$  处为 C-H 键第二倍频，5 160  $\text{cm}^{-1}$  处为  $\text{H}_2\text{O}$  的 O-H 合频，4 717  $\text{cm}^{-1}$  处为 C-O-H 合频吸收，4 373、4 323、4 261  $\text{cm}^{-1}$  处分别为 CH、 $\text{CH}_2$ 、 $\text{CH}_3$  合频吸收，它们主要来源于饮片成分所含的相关基团。由于成分含量差异会导致其倍频振动吸收处的 NIRS 图谱吸收不同<sup>[20]</sup>，故两者之间有一定相关性，特征吸收峰的存在有利于模型的建立<sup>[21]</sup>。

然而，直接以原始光谱建模时，模型准确率不符合预期，主要是因为 NIRS 图谱中存在大量影响模型精度的无效信息，同时除了特征吸收峰以外，可能容易忽略其他区间中对建模有用的信息<sup>[22]</sup>。因此，需对原始光谱进行预处理、特征波长选择等方式以提取有效信息，增加模型精度。

3.3 不同预处理方式比较 采用 The Unscrambler X 软件对 NIRS 图谱进行预处理，结果见表 2。由此可知，对于水分含量而言，经 MSC 处理后的模型与未经处理者相比， $R^2_c$  略有降低，而  $R^2_p$ 、PRD 显著升高，RMSEP/RMSEC 显著降低，故选择 MSC 作为其最佳预处理方式；对于 23-乙酰泽泻醇 B 含量而言，经 SNV 处理后  $R^2_c$  略有降低， $R^2_p$  略有升高，而 PRD 显著升高，RMSEP/RMSEC 显著降低，故选择 SNV 作为其最佳预处理方式；对于 23-乙酰泽泻醇 C 含量而言，由于其数值较低，结构与 23-乙酰泽泻醇 B 类似，故建模时干扰因素比 23-乙酰泽泻醇 B 更多，经 OSC 处理后  $R^2_c$  略有升高， $R^2_p$  略有降低，而 PRD 显著升高，RMSEP/RMSEC 显著降低，故选择 OSC 作为其最佳预处理方式。光谱图见图 2。

3.4 特征波长筛选 预处理后模型准确性和可靠性与实际标准相比仍有一定差距，故需作进一步特征波长筛选，提取出有效波段，结果见表 3。以水分含量为例，采用 CARS-IRIV 算法提取出 73 个特征波长，达到全波长的 4.68%，其 PLSR 模型中

表 1 水分、23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 含量测定结果

Tab. 1 Results for content determination of moisture, 23-acetylalisol B and 23-acetyl alisol C

| 编号 | 23-乙酰泽泻醇 B |              |              | 编号 | 23-乙酰泽泻醇 B |              |              | 编号 | 23-乙酰泽泻醇 B |              |              | 编号 | 23-乙酰泽泻醇 B |              |              |
|----|------------|--------------|--------------|----|------------|--------------|--------------|----|------------|--------------|--------------|----|------------|--------------|--------------|
|    | 水分/%       | 23-乙酰泽泻醇 B/% | 23-乙酰泽泻醇 C/% |    | 水分/%       | 23-乙酰泽泻醇 B/% | 23-乙酰泽泻醇 C/% |    | 水分/%       | 23-乙酰泽泻醇 B/% | 23-乙酰泽泻醇 C/% |    | 水分/%       | 23-乙酰泽泻醇 B/% | 23-乙酰泽泻醇 C/% |
| 1  | 8.783      | 0.230        | 0.016 6      | 25 | 8.932      | 0.224        | 0.017 4      | 49 | 10.031     | 0.208        | 0.017 1      | 73 | 9.607      | 0.203        | 0.015 5      |
| 2  | 9.291      | 0.233        | 0.012 0      | 26 | 8.691      | 0.222        | 0.022 2      | 50 | 10.593     | 0.209        | 0.019 1      | 74 | 9.048      | 0.202        | 0.015 7      |
| 3  | 9.052      | 0.197        | 0.019 4      | 27 | 9.140      | 0.234        | 0.019 1      | 51 | 8.458      | 0.233        | 0.018 0      | 75 | 9.359      | 0.215        | 0.015 7      |
| 4  | 9.275      | 0.249        | 0.014 7      | 28 | 9.429      | 0.242        | 0.017 3      | 52 | 9.614      | 0.244        | 0.016 7      | 76 | 10.210     | 0.200        | 0.014 3      |
| 5  | 8.861      | 0.182        | 0.017 7      | 29 | 9.179      | 0.228        | 0.015 5      | 53 | 10.043     | 0.215        | 0.014 0      | 77 | 8.966      | 0.218        | 0.015 4      |
| 6  | 8.815      | 0.235        | 0.018 7      | 30 | 9.103      | 0.204        | 0.020 0      | 54 | 10.580     | 0.201        | 0.014 7      | 78 | 9.369      | 0.214        | 0.016 6      |
| 7  | 9.586      | 0.224        | 0.017 4      | 31 | 9.203      | 0.210        | 0.018 3      | 55 | 10.641     | 0.191        | 0.014 2      | 79 | 9.267      | 0.229        | 0.016 6      |
| 8  | 9.045      | 0.216        | 0.018 9      | 32 | 9.106      | 0.224        | 0.018 4      | 56 | 8.200      | 0.272        | 0.015 9      | 80 | 8.790      | 0.239        | 0.018 0      |
| 9  | 8.939      | 0.196        | 0.015 4      | 33 | 9.343      | 0.193        | 0.013 9      | 57 | 8.581      | 0.218        | 0.018 4      | 81 | 9.012      | 0.224        | 0.018 5      |
| 10 | 8.861      | 0.192        | 0.012 6      | 34 | 9.560      | 0.178        | 0.017 2      | 58 | 9.958      | 0.254        | 0.021 8      | 82 | 9.220      | 0.215        | 0.017 3      |
| 11 | 8.644      | 0.168        | 0.019 1      | 35 | 9.028 0    | 0.180        | 0.016 0      | 59 | 9.856      | 0.236        | 0.016 3      | 83 | 9.629      | 0.218        | 0.015 6      |
| 12 | 8.656      | 0.199        | 0.019 7      | 36 | 8.914      | 0.170        | 0.021 0      | 60 | 9.870      | 0.229        | 0.014 0      | 84 | 9.545      | 0.230        | 0.014 8      |
| 13 | 9.263      | 0.223        | 0.016 5      | 37 | 8.697      | 0.185        | 0.021 2      | 61 | 10.219     | 0.242        | 0.015 6      | 85 | 9.772      | 0.239        | 0.015 7      |
| 14 | 10.567     | 0.254        | 0.017 2      | 38 | 9.475      | 0.184        | 0.020 0      | 62 | 10.600     | 0.205        | 0.017 0      | 86 | 9.983      | 0.220        | 0.016 1      |
| 15 | 9.385      | 0.244        | 0.015 8      | 39 | 9.045      | 0.217        | 0.022 7      | 63 | 10.849     | 0.208        | 0.014 6      | 87 | 10.124     | 0.216        | 0.015 0      |
| 16 | 9.764      | 0.237        | 0.017 0      | 40 | 9.381      | 0.205        | 0.014 3      | 64 | 9.145      | 0.221        | 0.017 0      | 88 | 10.878     | 0.210        | 0.017 3      |
| 17 | 8.987      | 0.199        | 0.018 6      | 41 | 8.701      | 0.250        | 0.020 1      | 65 | 9.847      | 0.239        | 0.016 3      | 89 | 9.039      | 0.250        | 0.019 2      |
| 18 | 8.913      | 0.216        | 0.017 7      | 42 | 9.558      | 0.183        | 0.017 1      | 66 | 9.989      | 0.216        | 0.016 7      | 90 | 10.838     | 0.211        | 0.018 1      |
| 19 | 8.721      | 0.196        | 0.018 6      | 43 | 10.235     | 0.193        | 0.017 9      | 67 | 10.050     | 0.215        | 0.015 6      | 91 | 9.714      | 0.235        | 0.015 2      |
| 20 | 9.068      | 0.226        | 0.018 3      | 44 | 10.983     | 0.170        | 0.016 0      | 68 | 9.911      | 0.213        | 0.017 4      | 92 | 9.395      | 0.241        | 0.015 0      |
| 21 | 9.271      | 0.197        | 0.015 6      | 45 | 9.835      | 0.209        | 0.014 7      | 69 | 10.762     | 0.204        | 0.018 9      | 93 | 8.802      | 0.258        | 0.019 9      |
| 22 | 9.173      | 0.244        | 0.018 7      | 46 | 7.912      | 0.207        | 0.020 4      | 70 | 9.409      | 0.226        | 0.018 7      | 94 | 9.869      | 0.231        | 0.014 7      |
| 23 | 9.165      | 0.234        | 0.019 4      | 47 | 10.331     | 0.259        | 0.017 7      | 71 | 10.129     | 0.229        | 0.017 5      | 95 | 10.998     | 0.205        | 0.016 3      |
| 24 | 9.179      | 0.233        | 0.018 1      | 48 | 9.886      | 0.196        | 0.018 4      | 72 | 8.976      | 0.241        | 0.016 8      |    |            |              |              |

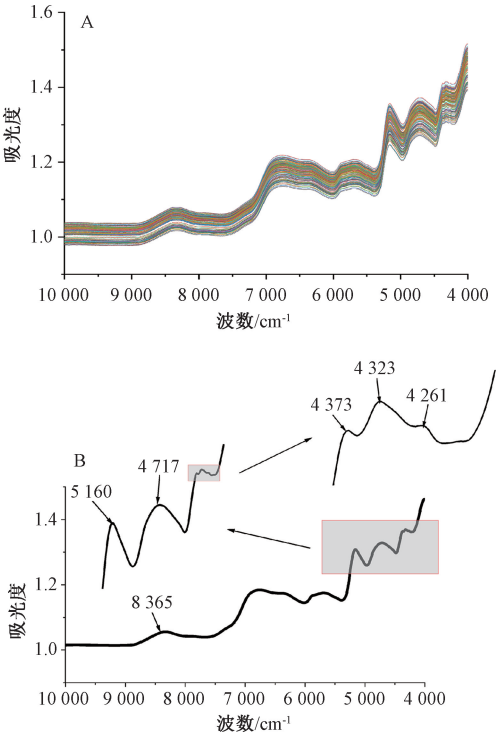


图 1 预处理前泽泻饮片 NIRS 图谱

Fig.1 NIRS spectra for *Alismatis Rhizoma* decoction pieces before pretreatment

$R^2c=0.952\ 6$ ,  $R^2p=0.930\ 0$ ,  $PRD=4.00$ 。

CARS-IRIV 算法波长筛选过程见图 3A，可知

随着采样次数由 0 次逐渐增加到 10 次时，波长由 1 557 条迅速减少，最后趋于稳定；随着采样次数由 0 次逐渐增加到 39 次时，RMESCV 逐渐降低，并在 39 次时有最小值，共筛选出 73 条特征波长，见图 3B，其中红点为特征波长位置。在 ICO 算法运行过程中，共筛选出 466 条波长，见图 3C，其不同类型对应不同颜色，见图 3D（颜色越接近蓝色，该区域波长对迭代结果的影响越小，即权重系数越小，属于无效波长；颜色越黄，该区域波长对迭代结果的影响越大，即权重系数越大，属于有效波长<sup>[23]</sup>），可知大部分黄色区域集中在 0.5~1.5、7.5~10.5、14.5~16.5 范围内，而剩余区间中大多为蓝色至深蓝色，并且在大部分黄色区域中的权重系数最高达 0.9~1，最低也有 0.6~0.7，而在蓝色区间中的最高为 0.5~0.6，最低为 0，其 PLSR 模型中  $R^2c=0.853\ 6$ ,  $R^2p=0.834\ 3$ ,  $PRD=2.32$ 。最后，采用 UVE 算法进行特征波长筛选，结果见图 3E，可知共筛选出 762 条，占全波长的 48.9%（上下水平线表示由噪声变量计算出的阈值范围，阈值线之内的波长是无信息的变量并被消除，而阈值线之外者是有价值的变量信息<sup>[24]</sup>），该算法所用波长在全波长中的位置见图 3F，其 PLSR 模型中  $R^2c=0.811\ 5$ ,  $R^2p=0.804\ 1$ ,  $PRD=2.59$ 。

表 2 不同预处理方式对 PLSR 模型的影响  
Tab. 2 Effects of different pretreatment methods on PLSR models

| 指标            | 方法     | 主因子数 | 训练集                         |               | 预测集                         |              | PRD  | RMSEP/RMSEC |
|---------------|--------|------|-----------------------------|---------------|-----------------------------|--------------|------|-------------|
|               |        |      | R <sup>2</sup> <sub>c</sub> | RMESC         | R <sup>2</sup> <sub>p</sub> | RMESP        |      |             |
| 水分含量          | RAW    | 11   | 0.916 0                     | 0.001 834     | 0.745 2                     | 0.003 232    | 2.07 | 1.76        |
|               | SG     | 11   | 0.901 2                     | 0.002 176     | 0.789 8                     | 0.002 521    | 2.13 | 1.15        |
|               | MSC    | 9    | 0.897 3                     | 0.002 135     | 0.807 3                     | 0.002 439    | 2.32 | 1.14        |
|               | SNV    | 10   | 0.940 1                     | 0.001 603     | 0.808 0                     | 0.002 999    | 2.12 | 1.87        |
|               | 1D     | 4    | 0.973 8                     | 0.001 097     | 0.746 5                     | 0.002 587    | 2.32 | 2.35        |
|               | SG+1D  | 4    | 0.943 8                     | 0.001 478     | 0.666 4                     | 0.003 731    | 1.88 | 2.52        |
|               | MSC+1D | 2    | 0.836 0                     | 0.002 566     | 0.630 3                     | 0.003 477    | 1.70 | 1.35        |
|               | SNV+1D | 2    | 0.822 5                     | 0.002 516     | 0.730 0                     | 0.002 971    | 2.33 | 1.18        |
|               | OSC    | 10   | 0.866 8                     | 0.002 124     | 0.622 8                     | 0.003 782    | 1.97 | 1.78        |
|               | Nor    | 12   | 0.955 9                     | 0.001 662     | 0.783 8                     | 0.002 891    | 2.02 | 1.73        |
| 23-乙酰泽泻醇 B 含量 | RAW    | 13   | 0.916 2                     | 0.000 061 07  | 0.654 0                     | 0.000 119 4  | 1.71 | 1.95        |
|               | SG     | 13   | 0.880 0                     | 0.000 075 66  | 0.490 6                     | 0.000 121 8  | 1.43 | 1.61        |
|               | MSC    | 9    | 0.718 4                     | 0.000 097 15  | 0.607 0                     | 0.000 124 7  | 1.89 | 1.28        |
|               | SNV    | 11   | 0.904 4                     | 0.000 068 03  | 0.661 7                     | 0.000 100 2  | 1.85 | 1.17        |
|               | 1D     | 4    | 0.923 7                     | 0.000 061 54  | -0.844 9                    | 0.000 164 0  | 1.11 | 2.66        |
|               | SG+1D  | 6    | 0.963 1                     | 0.000 042 39  | -0.647 2                    | 0.000 181 6  | 1.07 | 4.28        |
|               | MSC+1D | 3    | 0.853 5                     | 0.000 076 99  | -1.265 3                    | 0.000 172 0  | 1.26 | 2.23        |
|               | SNV+1D | 3    | 0.784 0                     | 0.000 094 53  | -1.894 2                    | 0.000 181 0  | 1.08 | 1.91        |
|               | OSC    | 11   | 0.807 6                     | 0.000 087 54  | 0.419 0                     | 0.000 141 4  | 1.51 | 1.61        |
|               | Nor    | 12   | 0.910 8                     | 0.000 063 32  | 0.588 6                     | 0.000 116 6  | 1.74 | 1.84        |
| 23-乙酰泽泻醇 C 含量 | RAW    | 12   | 0.789 2                     | 0.000 008 446 | 0.390 2                     | 0.000 013 93 | 1.56 | 1.64        |
|               | SG     | 13   | 0.808 9                     | 0.000 008 198 | 0.445 3                     | 0.000 013 02 | 1.62 | 1.58        |
|               | MSC    | 10   | 0.821 5                     | 0.000 007 395 | -0.017 29                   | 0.000 015 43 | 1.58 | 2.08        |
|               | SNV    | 13   | 0.969 1                     | 0.000 003 764 | 0.352 8                     | 0.000 012 96 | 1.46 | 3.44        |
|               | 1D     | 4    | 0.953 8                     | 0.000 004 390 | -1.088 5                    | 0.000 020 49 | 0.99 | 4.66        |
|               | SG+1D  | 5    | 0.901 3                     | 0.000 006 299 | -1.844 1                    | 0.000 020 77 | 0.97 | 3.29        |
|               | MSC+1D | 3    | 0.882 0                     | 0.000 007 074 | -0.808 8                    | 0.000 018 55 | 0.94 | 2.62        |
|               | SNV+1D | 3    | 0.868 7                     | 0.000 006 485 | -4.672 1                    | 0.000 023 86 | 0.99 | 3.68        |
|               | OSC    | 11   | 0.790 9                     | 0.000 008 671 | 0.384 1                     | 0.000 010 12 | 1.69 | 1.16        |
|               | Nor    | 12   | 0.918 9                     | 0.000 005 673 | 0.082 07                    | 0.000 014 32 | 1.45 | 2.52        |

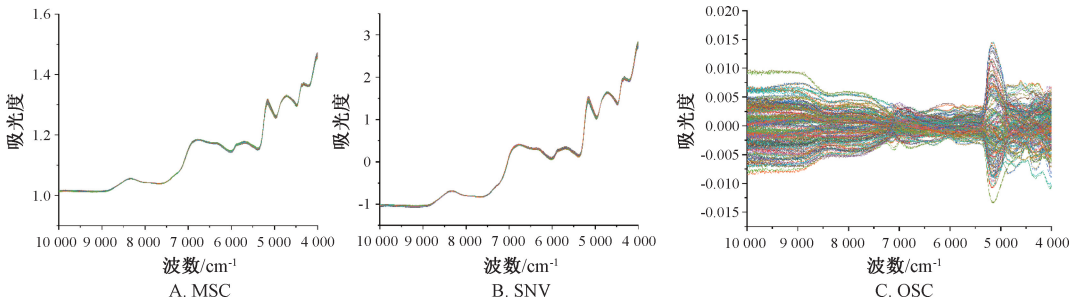


图 2 预处理后泽泻饮片 NIRS 图谱  
Fig. 2 NIRS spectra for *Alismatis Rhizoma* decoction pieces after pretreatment

综上所述，CARS-IRIV 算法所建立的 PLSR 模型中各参数均优于 ICO、UVE 算法所建立者，故本实验选择其作为水分、23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 含量定量模型特征波长筛选方式。

3.5 验证试验 结果见图 4，其中图 4A、4C、4E 分别为水分、23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 含量真实值与预测值之间的线性关系，当这些散点

趋于同一条直线时表明其线性关系良好，模型定量预测能力较强；图 4B、4D、4F 分别为各指标外部验证，红色线条代表真实值，蓝色线条代表模型通过 NIRS 光谱所得预测值，两者之间重合性越好，模型定量校正效果越理想。由此可知，各指标定量模型中 R<sup>2</sup><sub>p</sub>、R<sup>2</sup><sub>c</sub> 均大于 0.9，可用于饮片的快速质量评价。

表 3 特征波长 PLSR 模型参数

Tab. 3 PLSR model parameters for characteristic wavelengths

| 指标            | 方法                 | 波长数/条 | 主因子数 | 训练集                         |               | 预测集                         |               | PRD  | RMSEP/<br>RMSEC |
|---------------|--------------------|-------|------|-----------------------------|---------------|-----------------------------|---------------|------|-----------------|
|               |                    |       |      | R <sup>2</sup> <sub>c</sub> | RMESC         | R <sup>2</sup> <sub>p</sub> | RMESP         |      |                 |
| 水分含量          | RAW-PLSR           | 1 557 | 11   | 0.916 0                     | 0.001 834     | 0.745 2                     | 0.003 232     | 2.07 | 1.76            |
|               | MSC-CARS-IRIV-PLSR | 73    | 9    | 0.952 6                     | 0.001 429     | 0.930 0                     | 0.001 649     | 4.00 | 1.15            |
|               | MSC-ICO-PLSR       | 466   | 9    | 0.853 6                     | 0.002 446     | 0.834 3                     | 0.002 623     | 2.32 | 1.07            |
|               | MSC-UVE-PLSR       | 762   | 9    | 0.811 5                     | 0.002 666     | 0.804 1                     | 0.002 475     | 2.59 | 0.92            |
| 23-乙酰泽泻醇 B 含量 | RAW-PLSR           | 1 557 | 13   | 0.916 2                     | 0.000 061 07  | 0.654 0                     | 0.000 119 4   | 1.71 | 1.95            |
|               | SNV-CARS-IRIV-PLSR | 88    | 11   | 0.958 1                     | 0.000 048 84  | 0.905 2                     | 0.000 054 52  | 3.58 | 1.11            |
|               | SNV-ICO-PLSR       | 612   | 11   | 0.868 9                     | 0.000 070 24  | 0.707 0                     | 0.000 111 3   | 2.15 | 1.58            |
|               | SNV-UVE-PLSR       | 752   | 11   | 0.925 5                     | 0.000 055 15  | 0.044 74                    | 0.000 167 4   | 1.37 | 3.03            |
| 23-乙酰泽泻醇 C 含量 | RAW-PLSR           | 1 557 | 12   | 0.789 2                     | 0.000 008 446 | 0.390 2                     | 0.000 013 93  | 1.56 | 1.64            |
|               | OSC-CARS-IRIV-PLSR | 99    | 11   | 0.920 8                     | 0.000 005 724 | 0.906 4                     | 0.000 006 110 | 3.46 | 1.06            |
|               | OSC-ICO-PLSR       | 849   | 11   | 0.844 9                     | 0.000 007 495 | 0.431 2                     | 0.000 013 21  | 1.59 | 1.76            |
|               | OSC-UVE-PLSR       | 199   | 11   | 0.850 0                     | 0.000 007 270 | -0.648 2                    | 0.000 025 31  | 0.85 | 3.48            |

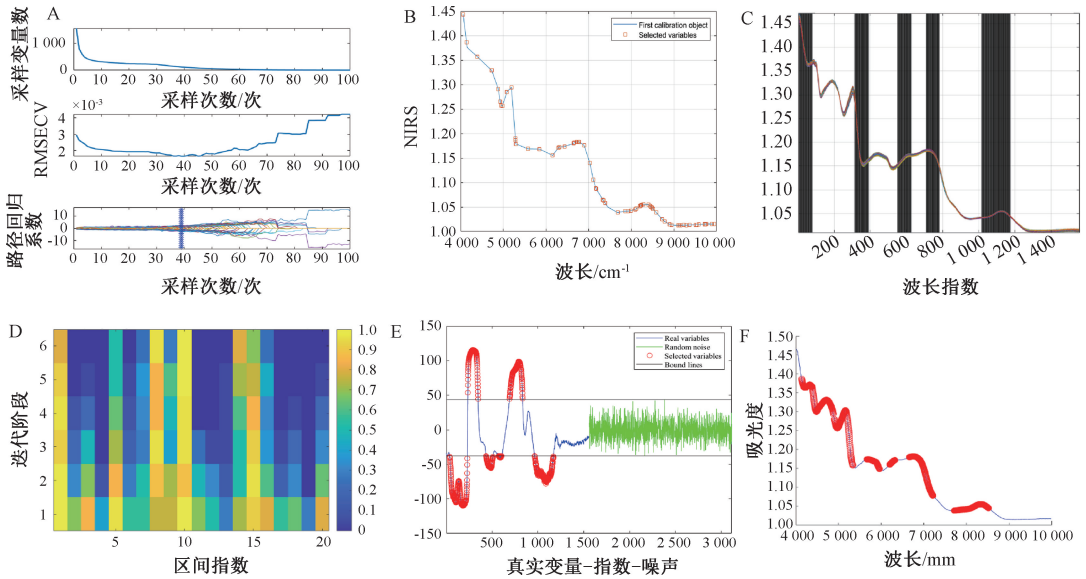


图 3 水分含量特征波长筛选结果

Fig. 3 Results for characteristic wavelength selection of moisture content

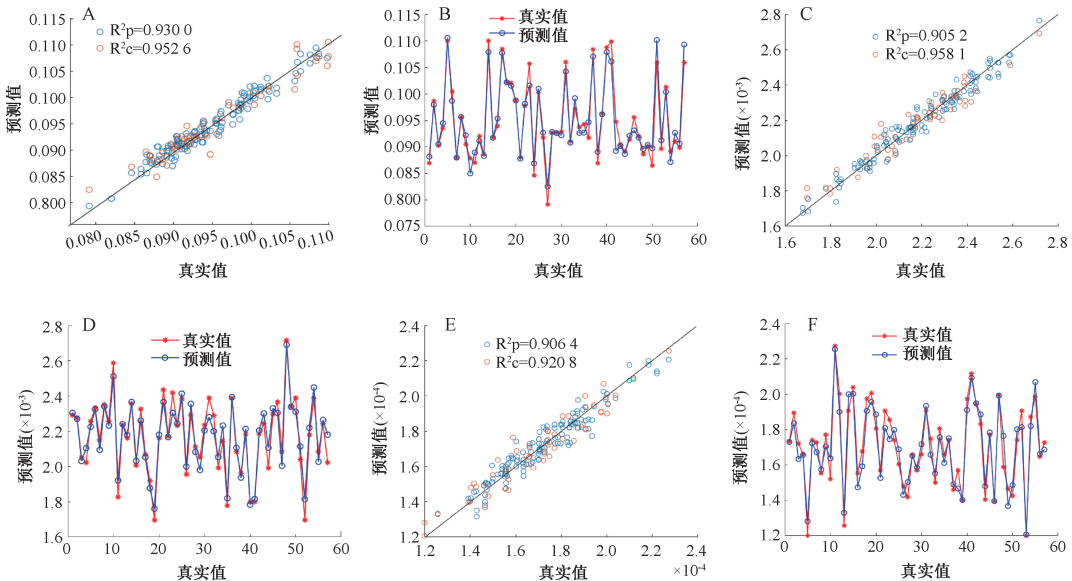


图 4 定量模型验证试验结果

Fig. 4 Results for verification tests of quantitative models

4 讨论与结论

泽泻作为传统的利水渗湿中药，对水肿、高血糖、高血脂等疾病均有疗效，并且产地广泛。同时，该药材所富含的三萜类成分既是发挥其独特药理作用的基础，也是引发其不良反应的原因。

饮片作为中药上游生产与下游制剂之间的桥梁，其质量决定了制剂疗效。本实验对 95 批泽泻饮片进行研究，发现不同批次之间的水分、指标成分含量范围较大，适合 NIRS 模型，但预处理后效果不理想，而经过特征波长选择算法选择后精度较高。验证试验结果表明，本实验所建立的泽泻饮片定量模型预测能力与水分、23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 含量之间具有良好的相关性，适用于指标成分快速检测，具有一定的指导意义。

综上所述，NIRS 技术实现了泽泻饮片中水分、23-乙酰泽泻醇 B、23-乙酰泽泻醇 C 含量的快速检测，为控制其质量提供了新的参考。

利益冲突：所有作者均声明不存在利益冲突。

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.

[ 2 ] 肖 先, 荆 云, 李春燕, 等. 泽泻主要化学成分及药理作用研究进展[J]. 新乡医学院学报, 2024, 41(4)：378-382.

[ 3 ] Zhang X, Li X Y, Lin N, *et al.* Diuretic activity of compatible triterpene components of *Alismatis rhizoma*[J]. *Molecules*, 2017, 22(9)：1459.

[ 4 ] Zhou X, Ren Q, Wang B, *et al.* Alisol A 24-acetate isolated from the *Alismatis Rhizoma* improves hepatic lipid deposition in hyperlipidemic mice by ABCA1/ABCG1 pathway[J]. *J Nanosci Nanotechnol*, 2019, 19(9)：5496-5502.

[ 5 ] Wang J X, Li H Z, Wang X N, *et al.* Alisol B-23-acetate, a tetracyclic triterpenoid isolated from *Alisma orientale*, induces apoptosis in human lung cancer cells *via* the mitochondrial pathway[J]. *Biochem Biophys Res Commun*, 2018, 505(4)：1015-1021.

[ 6 ] 林 龙, 先 蕊, 赵璐璐, 等. 基于响应面法结合总评归一法优化泽泻趁鲜切制加工工艺[J]. 天然产物研究与开发, 2023, 35(10)：1755-1765.

[ 7 ] 张春彬, 李 琳, 康 茜, 等. HPLC 一测多评法测定泽泻饮片中 6 种三萜类成分的含量[J]. 华西药学杂志, 2023, 38(1)：79-83.

[ 8 ] 姜恒丽, 钟 鑫, 王双双, 等. 经典名方泽泻汤基准样品 HPLC 特征指纹图谱分析研究[J]. 天津中医药, 2023, 40(1)：117-125.

[ 9 ] 蔡璐瑶, 柳思洋, 郑云枫, 等. HPLC-UV-ELSD 法研究经典名方泽泻汤的量值传递规律[J]. 中草药, 2024, 55(13)：4373-4385.

[10] 武艳菲, 徐 慧, 王恺怡, 等. 融入近红外中药制造测量技术的软件研制与智能制造平台研究[J]. 中国中药杂志, 2025, 50(9)：2324-2333.

[11] 俞思名, 姚 燕, 刘 颖, 等. 化学计量学方法选取对烟草含水率近红外分析准确度的影响[J]. 中国计量大学学报, 2024, 35(1)：28-34.

[12] 杨佳欣, 阿依古丽·塔什波拉提, 田 合, 等. 基于近红外光谱的小麦麸皮功能性成分模型构建[J]. 化学研究与应用, 2025, 37(1)：197-206.

[13] 王 彬, 董佳佳, 申 柯, 等. 基于近红外光谱分析技术对不同蒸制程度天麻的质量评价研究[J]. 中草药, 2025, 56(3)：975-986.

[14] Ma H L, Zhao Y, He W X, *et al.* Quantitative analysis of three ingredients in *Salvia miltiorrhiza* by near infrared spectroscopy combined with hybrid variable selection strategy[J]. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 2024, 315：124273.

[15] 赵 昕, 石玉娜, 刘怡彤, 等. 基于 1DCNN 和 PLSDA 酸枣仁真伪高光谱图像鉴别中的关键特征分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2025, 45(3)：869-877.

[16] 霍迎秋, 凌晨东, 孙江昊, 等. 基于高光谱的猕猴桃叶片叶绿素含量智能检测研究[J]. 中国农机化学报, 2024, 45(12)：154-161.

[17] 杨育霖. 基于全透射近红外光谱技术的西瓜内部品质在线无损检测方法研究[D]. 武汉：华中农业大学，2024.

[18] Kelly J M, Bohman B, Bennett D, *et al.* Rapid dough making quality analysis of wheat flour using Fourier transform infrared spectroscopy and chemometrics[J]. *Food Chem*, 2025, 475：143335.

[19] Zhan G Z, Guo X Y, Qiu Z C, *et al.* Rapid evaluation of the quality of *Smilax glabra* Roxb. using QADS based on FT-NIR combined with multiple intelligent algorithms[J]. *Food Chem*, 2024, 453：139633.

[20] 王小亮, 牛龙青, 张秉华. 近红外光谱在线监测多潘立酮片颗粒水分含量的研究[J]. 药物分析杂志, 2024, 44(11)：1923-1931.

[21] 刘倩男, 黄 伟, 丁云花, 等. 青花菜中硫代葡萄糖苷 RAA 和 GBC 的近红外光谱快速测定[J]. 中国农业科学, 2020, 53(21)：4497-4506.

[22] 郭文川, 朱德宽, 张 乾, 等. 基于近红外光谱的掺伪油茶籽油检测[J]. 农业机械学报, 2020, 51(9)：350-357.

[23] Li M X, Shi Y B, Zhang J B, *et al.* Rapid evaluation of *Ziziphi Spinosae Semen* and its adulterants based on the combination of FT-NIR and multivariate algorithms[J]. *Food Chem X*, 2023, 20：101022.

[24] Zhang J B, Wang B, Zhang Y F, *et al.* E-eye and FT-NIR combined with multivariate algorithms to rapidly evaluate the dynamic changes in the quality of *Gastrodia elata* during steaming process[J]. *Food Chem*, 2024, 439：138148.