

基于近红外光谱结合化学计量学的厚朴的厚朴酚的检测研究

王 燕¹, 王燕青^{2*}

¹上海康桥中药饮片有限公司, 上海

²上海市奉贤区中心医院药剂科, 上海

收稿日期: 2025年7月9日; 录用日期: 2025年7月25日; 发布日期: 2025年8月18日

摘 要

目的: 本研究旨在建立一种近红外光谱结合化学计量学的快速检测厚朴中厚朴酚的方法。方法: 利用近红外光谱技术与化学计量学相结合的方式建立厚朴酚快速无损检测方法。结果: 本研究建立的厚朴酚快速检测模型的决定系数较高($R^2 = 0.9607$), 交叉验证的均方根的差为0.1371, 为验证模型准确性及稳定性, 使用模型对验证集进行预测, 得到结果无显著性差异。结论: 厚朴酚模型具有较高的准确性, 适用于厚朴的厚朴酚的快速检测。

关键词

厚朴, 厚朴酚, 近红外光谱技术, 偏最小二乘法

Detection Research on Magnolol of *Magnolia officinal* Is Based on Near-Infrared Spectroscopy Combined with Chemometrics

Yan Wang¹, Yanqing Wang^{2*}

¹Shanghai Kangqiao Chinese Herbal Pieces Co., Ltd., Shanghai

²Pharmacy Department, Fengxian Central Hospital, Shanghai

Received: Jul. 9th, 2025; accepted: Jul. 25th, 2025; published: Aug. 18th, 2025

Abstract

Objective: This study aims to combine near-infrared spectroscopy with chemometrics and apply the

*通讯作者。

文章引用: 王燕, 王燕青. 基于近红外光谱结合化学计量学的厚朴的厚朴酚的检测研究[J]. 药物化学, 2025, 13(3): 239-246. DOI: 10.12677/hjmce.2025.133025

established method to the rapid detection of magnolol in *Magnolia officinalis*. **Methods:** A rapid non-destructive detection method for magnolol was established by combining near-infrared spectroscopy technology with chemometrics. **Results:** The rapid detection model of magnolol established in this study has a high determination coefficient ($R^2 = 0.9607$), and the root mean square error of cross-validation is 0.1371. To verify the accuracy and stability of the model, the validation set was predicted using the model, and no significant difference was found in the results. **Conclusion:** The magnolol model has high accuracy and is suitable for the rapid detection of magnolol in *Magnolia officinalis*.

Keywords

Magnolia officinalis, Magnolol, Near Infrared Spectroscopy, Partial Least Squares Method

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

厚朴为木兰属植物厚朴(*Magnolia officinalis* Rehd. et Wils.), 产地包括我国湖北、四川、广东、浙江、陕西、广西、甘肃、河南和贵州等地[1], 临床上适用于脾胃湿热、腹胀、胸脘痞闷、痰饮喘咳等症。根据现代药理研究的结果, 厚朴在抗菌[2]、抗炎[3]、抗氧化[4]、抗抑郁[5]等方面有作用有着高效作用, 对于肠胃功能有促进作用、缓解胃肠动力障碍, 临床上用于慢性腹泻, 肠梗阻、胃轻瘫等疾病[6]-[10]。厚朴中酚类化合物主要包括酚苷、酚酸、酚酯、酚醛, 其中以活性成分厚朴酚、和厚朴酚为主, 还包括四氢厚朴酚、异厚朴酚等成分[11]-[13]。厚朴酚具有抗腹泻[14]、抗炎镇痛[15]-[17]、抗抑郁[18] [19]、抗菌及肠道菌群调节[20] [21]、抗肿瘤[22]、心肌保护[23]和神经保护[24] [25]等作用。

近红外光谱技术应用于各行业的在线检测, 取得了良好效果, 其中较常见的应用领域有化工、食品和农业、制药等行业[26]。早在 20 世纪 90 年代, 近红外分析技术就被应用于化工领域, 用于建立多元回归模型, 在线分析混合物中乙烷、乙烯、丙烷和丙烯的含量[27]。在食品和农业领域, 用于对各类水果的品质提升、肉类品质判别、高粱单宁检测等方向[28], 在制药行业主要用于药材、中间体、成品等关键指标的快速检测[29]。化学计量学作为化学、数学、统计学和计算机科学交叉融合的学科, 其核心在于从复杂的化学数据中提取有效信息、建立稳健模型并优化化学过程[30]。

本研究运用近红外光谱技术、化学计量学方法——偏最小二乘(PLS)相结合的方式, 快速对厚朴药材中的指标成分之一, 厚朴酚进行分析, 最终建立一个可使用的定量分析模型, 为厚朴的厚朴酚的快速检测提供一种可以实行的思路。

2. 实验部分

2.1. 仪器与试剂

厚朴药材(源于某药企相同产地, 2024 年, 炮制方法参照《药典 2020 版》); IAS-S3120 近红外光谱仪(无锡讯杰光远科技有限公司); XSE-205DU 型电子天平(梅特勒 - 托利多公司); XPR2/A 型电子天平(梅特勒 - 托利多公司); 甲醇(AR, 重庆川东化工(集团)有限公司)。甲醇(HPLC, 霍尼韦尔贸易(上海)有限公司), 厚朴酚(中国食品药品检定研究院)。

2.2. 近红外漫反射光谱采集

光谱采集条件: 采集厚朴药材粉末(过 3 号筛)样品的漫反射光谱, 光谱扫描范围 900~1700 nm, 实验采用内部参比进行光谱采集分析。采集到的厚朴药材近红外光谱如图 1 所示。

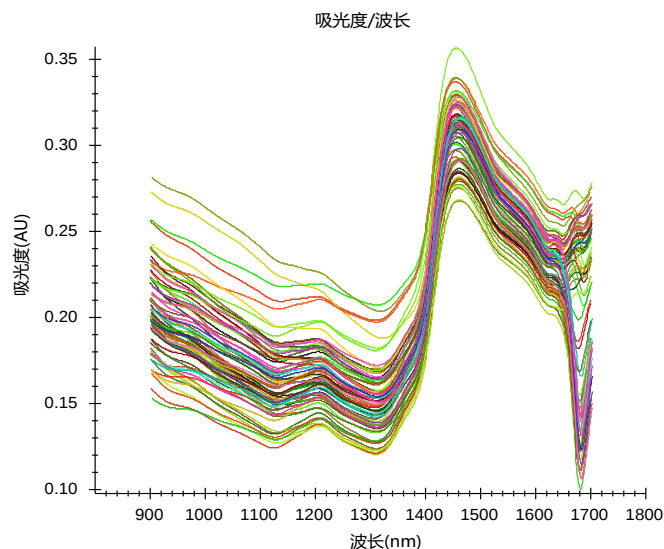


Figure 1. The original near-infrared spectrum of *Magnolia officinalis*
图 1. 厚朴药材近红外原始光谱

2.3. 厚朴药材厚朴酚的测定

照高效液相色谱法(通则 0512)测定。

对照品溶液的制备: 制 2 份每 1 ml 甲醇含 40 μg 厚朴酚对照品的溶液。

供试品溶液的制备: 取过三号筛的厚朴药材粉末 0.2 g, 精密称定, 放入具塞锥形瓶中, 加入甲醇 25 ml, 摇匀 - 密塞 - 静置 24 小时, 滤过, 取滤液 5 ml, 倒入 25 ml 容量瓶中, 加甲醇至刻度, 摇匀, 过滤头滤过至进样小瓶中, 即得。

液相条件: 高效液相色谱仪选用 Agilent 1100, 色谱柱选用中普红, RD C-18, 5 μm , 4.6*250 mm, 以甲醇 - 水(78:22)为流动相, 检测波长为 294 nm, 分别向高效液相色谱仪中注入对照品溶液 4 μl , 供试品溶液 5 μl , 测定, 即得。

2.4. 数据处理与模型性能评价

偏最小二乘回归(PLSR), 有时也被称为投影到潜在结构法或简称为 PLS, 会同时对 X 矩阵和 Y 矩阵进行建模, PLS 旨在最大化 X 和 Y 之间的协方差, 以找出 X 中能够最好地预测 Y 中潜在变量的潜在(或隐藏)变量。采集近红外光谱图后, 运用 CAL-BOX 数据分析软件中的 PLS 建立厚朴药材的近红外光谱与厚朴酚含量之间的校正模型。模型建立的过程中, 需要挑选出与厚朴酚相关性高的波段用于建立模型, 此外还需要运用诸如一阶导、二阶导、归一化, 多元散射校正等光谱预处理方法将原始光谱进行处理来消除由于仪器背景、环境、装样量差异等因素带来的影响。

判断模型状态需要根据回归系数, 回归系数表明了预测特定的 Y 响应时, 每个变量的权重情况。回归系数是所有回归方法的一个特征, 并且可能为模型的质量提供解释性的见解。回归系数会显示变量的相对重要性, 同时还能展示变量之间的相互作用。 R^2 值是相关系数的值的平方, 它以正值尺度表示 0

和 1 之间的相关性, 越接近 1, 说明模型预测越准确。校准的均方根误差(RMSEC), 是衡量校准样本与回归线之间偏离程度的一个指标。均方根误差(CV)为交叉验证的均方根误差, 衡量验证样本围绕回归线分布程度的一个指标。预测的均方根误差(RMSEP)是在使用测试集验证时衡量验证样本围绕回归线分布情况的一种指标。当 RMSEC 和 RMSEP 值越小且彼此接近, 表明模型具有好的稳健性并且对未知样品的预测能力较强。

3. 结果与讨论

3.1. 厚朴药材厚朴酚含量测定结果

按照 2.3 项下的方法测定 72 个厚朴药材中厚朴酚的含量, 厚朴酚含量的范围在 0.92%~3.1%之间。

3.2. 光谱预处理

厚朴药材样本集划分方法采用 KS 算法(Kennard-Stone 算法), 根据样本间的欧氏距离判断变量, 将 72 个样本划分为 62 个校正集和 10 个验证集。近红外光谱采集过程中, 环境因素、仪器性能差异、人为因素等都会造成光谱之间的差异, 从而干扰最终结果, 因此在建模时需要对原始光谱进行光谱预处理以提高模型预测精度。CAL-BOX 数据分析软件中常用的光谱预处理方法有: SG-一阶微分、SG-二阶微分、去趋势、归一化、多元散射校正等。本研究比较了不同预处理方法对厚朴药材中厚朴酚含量建模的影响, 进一步对比选出了最佳建模参数, 结果如表 1 所示。

Table 1. Model parameters of magnolol content
表 1. 厚朴酚含量模型参数

预处理方法	校正集/RMSEC	验证集/RMSEP	校正集/R ²	验证集/R ²
移动平滑(3) + 一阶导	0.0888	0.1371	0.9607	0.9014
SVN + 一阶导	0.3217	0.7982	0.9013	0.8879
移动平滑(3) + 二阶导	0.1744	0.1431	0.8725	0.8655
Baseline	0.2458	0.6948	0.9126	0.7983

通过比较发现, 厚朴药材厚朴酚含量模型通过进行光谱预处理后得到的模型有较低的 RMSEC 值, 且相关系数 R 值更接近 1, 模型效果见图 2。

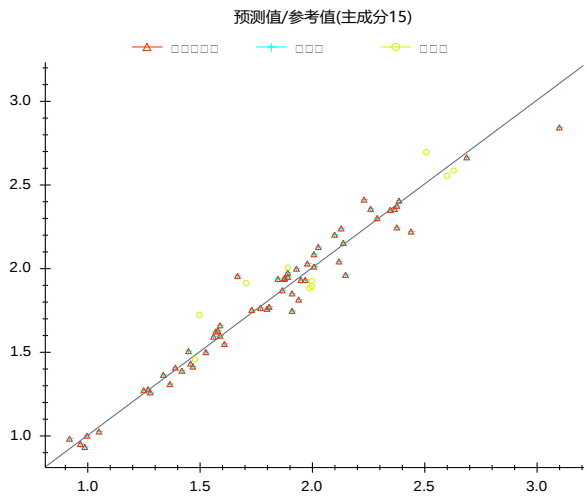


Figure 2. Schematic diagram of the magnolol model of *Magnolia officinalis*
图 2. 厚朴药材厚朴酚模型示意图

为考察建模集筛选样本光谱质量符合建模要求, 属于相同体系, 使用 PCA 降维后计算 Hotelling T^2 值, 结果如图 3 所示, 建模光谱无异常值, 可用于建模, 且证明上述模型使用数据具有稳定性。

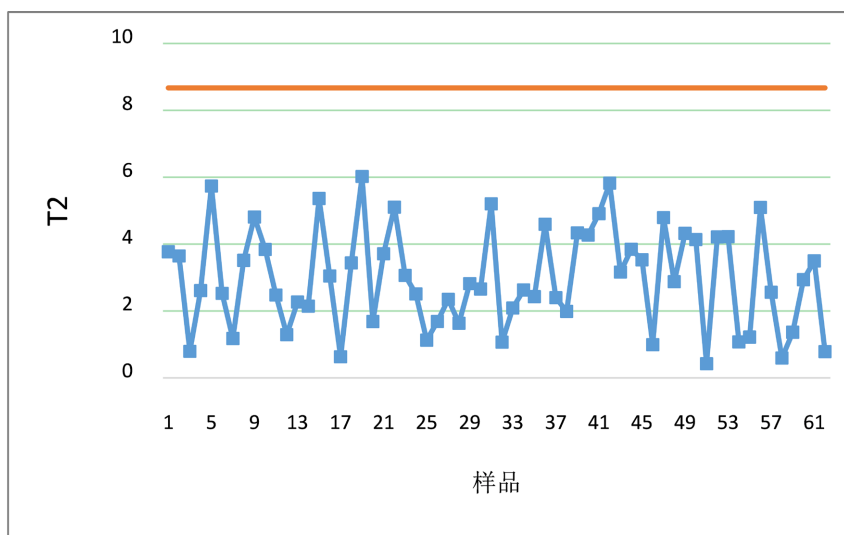


Figure 3. Modeling data of T^2 value

图 3. 建模数据 T^2 值

4. 实验结论

4.1. 准确性

从预测结果来看(图 4), 预测值与真实值接近, 符合中药分析的精度要求。用 NIR 定量校正模型验证厚朴的厚朴酚含量的预测效果优良。

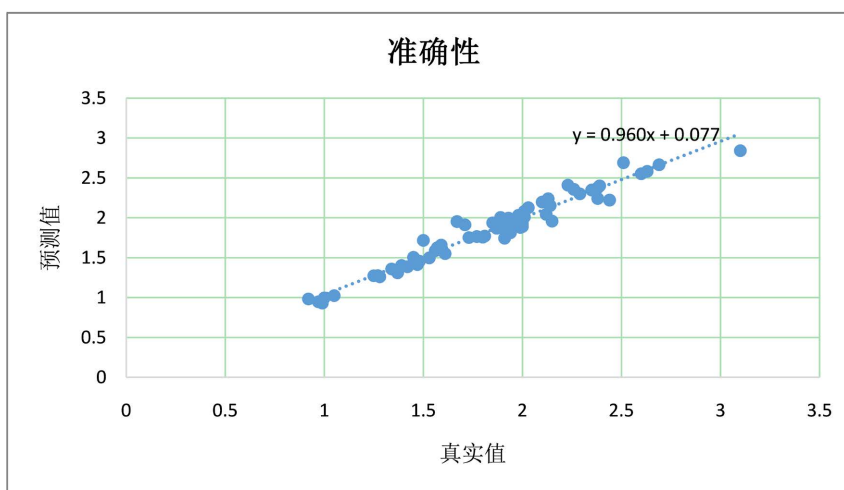


Figure 4. Prediction results of the validation set

图 4. 验证集预测结果

4.2. 显著性

根据表 2 所示, 通过进行 t-检验分析, $P > 0.05$, 真实值与预测值之间无显著性差异。

Table 2. Significance analysis
表 2. 显著性分析

t-检验：成对双样本均值分析		
	变量 1	变量 2
平均	1.811186441	1.811186
方差	0.200710637	0.192832
观测值	59	59
泊松相关系数	0.980175704	
假设平均差	0	
df	58	
P (T <= t)单尾	0.5	
t 单尾临界	1.671552762	
P (T <= t)双尾	1	
t 双尾临界	2.001717484	

4.3. 差值的正态分布

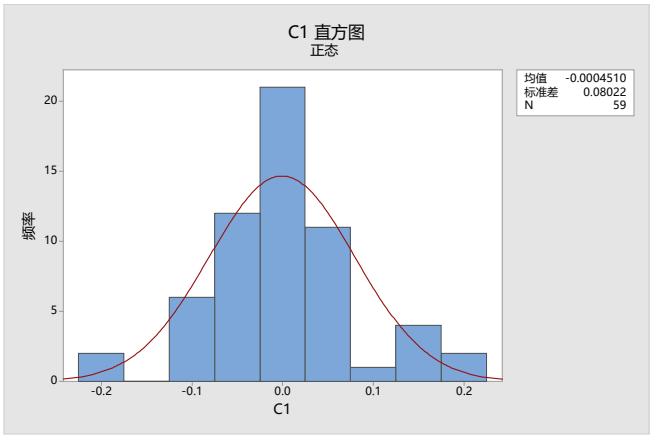


Figure 5. Histogram distribution
图 5. 直方图分布

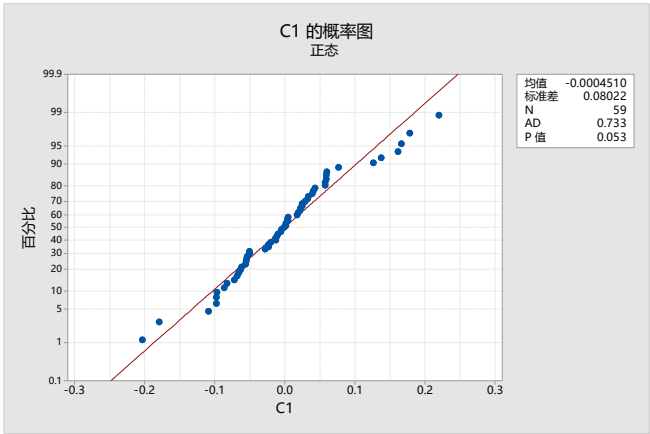


Figure 6. Probability distribution chart
图 6. 概率分布图

根据直方图及概率图可知(图 5、图 6), $P > 0.05$, 表明差值符合正态分布。

从上述三个角度来验证厚朴的厚朴酚模型, 其结果均符合要求, 可以用于快速检测厚朴的厚朴酚含量, 实现厚朴药材质量的快速检测。

5. 结论

本研究建立了一种近红外光谱法与化学计量学相结合的、可以快速检测厚朴药材中厚朴酚含量的方法, 应用 PLS 建立的厚朴药材中厚朴酚含量的定量校正模型, 其相关系数 R^2 为 0.9607, RMSEP 为 0.1371, 满足定量分析的要求。通过测定厚朴的光谱, 并将其代入至模型中, 能够在较短的时间得到厚朴药材中厚朴酚含量, 相较于传统方法(HPLC), 其更简便、快速, 并且对于样品本身无损耗。

参考文献

- [1] 赖祯, 黄国英, 杨滨, 等. 厚朴不同部位本草考证及研究进展[J]. 亚太传统医药, 2019, 15(1): 69-72.
- [2] 许润梅, 金耶智, 陈欣缘, 等. 厚朴酚衍生物的合成及其抗菌效果研究[J]. 化学研究与应用, 2023, 35(6): 1407-1416.
- [3] 张转转, 张文森, 曾元宁, 等. 厚朴化学成分与炮制工艺研究进展[J]. 现代中药研究与实践, 2025, 39(3): 91-97.
- [4] 叶佳仪. 厚朴酚对仔猪生长性能及抗氧化功能的影响[J]. 现代畜牧兽医, 2024(12): 38-41.
- [5] 张明发, 沈雅琴. 厚朴酚及和厚朴酚抗抑郁药理作用及机制的研究进展[J]. 药物评价研究, 2024, 47(2): 450-456.
- [6] 李凤, 练志辉, 张浩怡, 等. 厚朴不同炮制品中挥发性成分比较[J]. 西部中医药, 2020, 33(7): 33-38.
- [7] 康振兴. 厚朴生物碱种类及其毒性辨析[J]. 海峡药学, 2019, 31(10): 53-57.
- [8] 谭珍媛, 邓家刚, 张彤, 等. 中药厚朴现代药理研究进展[J]. 中国实验方剂学杂志, 2020, 26(22): 228-234.
- [9] 王艳艳, 王团结, 丁琳琳. 基于系统药理学的厚朴药理作用机制探究[J]. 中草药, 2019, 50(24): 6024-6031.
- [10] 王晓燕. 洋金花、厚朴化学成分和生物活性的研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 北京中医药大学, 2019.
- [11] 张晓娟, 左冬冬, 胡妮娜, 等. 厚朴的化学成分及药理作用研究进展[J]. 中医药信息, 2023, 40(2): 85-89.
- [12] 曾红, 周秋贵, 罗婷, 等. 厚朴酚与和厚朴酚对小鼠腹泻及胃肠排空抑制的影响比较[J]. 中药材, 2015, 38(10): 2160-2162.
- [13] 李明, 李琦, 罗佳晶, 等. 厚朴酚调节 MAPK/NF- κ B/NLRP3 信号通路对动脉粥样硬化大鼠主动脉炎性损伤的影响[J]. 中医药导报, 2023, 29(3): 49-53.
- [14] Wang, N., Yang, Y., Liu, Y., Huang, L., Gu, M., Wu, Y., et al. (2022) Magnolol Limits NF κ B-Dependent Inflammation by Targeting PPAR γ Relieving Retinal Ischemia/Reperfusion Injury. *International Immunopharmacology*, **112**, Article ID: 109242. <https://doi.org/10.1016/j.intimp.2022.109242>
- [15] Zhang, L., Qiu, J., Hong, J., Xu, X., Zhang, G. and Li, G. (2021) Magnolol Attenuates Inflammatory Pain by Inhibiting Sodium Currents in Mouse Dorsal Root Ganglion Neurons. *Inflammopharmacology*, **29**, 869-877. <https://doi.org/10.1007/s10787-021-00809-8>
- [16] Tao, W., Hu, Y., Chen, Z., Dai, Y., Hu, Y. and Qi, M. (2021) Magnolol Attenuates Depressive-Like Behaviors by Polarizing Microglia Towards the M2 Phenotype through the Regulation of Nrf2/HO-1/NLRP3 Signaling Pathway. *Phytomedicine*, **91**, Article ID: 153692. <https://doi.org/10.1016/j.phymed.2021.153692>
- [17] Bai, Y., Song, L., Dai, G., Xu, M., Zhu, L., Zhang, W., et al. (2018) Antidepressant Effects of Magnolol in a Mouse Model of Depression Induced by Chronic Corticosterone Injection. *Steroids*, **135**, 73-78. <https://doi.org/10.1016/j.steroids.2018.03.005>
- [18] 刘畅, 王潇, 刘芳, 等. 厚朴酚对便秘型肠易激综合征大鼠 5-HT 通路及肠道菌群的影响[J]. 中成药, 2023, 45(9): 3067-3072.
- [19] Oufensou, S., Scherm, B., Pani, G., Balmas, V., Fabbri, D., Dettori, M.A., et al. (2019) Honokiol, Magnolol and Its Monoacetyl Derivative Show Strong Anti-Fungal Effect on Fusarium Isolates of Clinical Relevance. *PLOS ONE*, **14**, e0221249. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0221249>
- [20] Xie, Y., Hua, H. and Zhou, P. (2022) Magnolol as a Potent Antifungal Agent Inhibits Candida Albicans Virulence Factors via the PKC and Cek1 MAPK Signaling Pathways. *Frontiers in Cellular and Infection Microbiology*, **12**, Article 935322. <https://doi.org/10.3389/fcimb.2022.935322>

-
- [21] Ranaware, A., Banik, K., Deshpande, V., Padmavathi, G., Roy, N., Sethi, G., *et al.* (2018) Magnolol: A Neolignan from the Magnolia Family for the Prevention and Treatment of Cancer. *International Journal of Molecular Sciences*, **19**, Article 2362. <https://doi.org/10.3390/ijms19082362>
- [22] Tang, C., Lai, C., Huang, P., Yang, A., Chiang, S., Huang, P., *et al.* (2022) Magnolol Reduces Myocardial Injury Induced by Renal Ischemia and Reperfusion. *Journal of the Chinese Medical Association*, **85**, 584-596. <https://doi.org/10.1097/jcma.0000000000000727>
- [23] Zhou, F., Jiang, Z., Yang, B. and Hu, Z. (2019) Magnolol Exhibits Anti-Inflammatory and Neuroprotective Effects in a Rat Model of Intracerebral Haemorrhage. *Brain, Behavior, and Immunity*, **77**, 161-167. <https://doi.org/10.1016/j.bbi.2018.12.018>
- [24] Huang, S., Tai, S., Chang, C., Tu, Y., Chang, C. and Lee, E. (2018) Magnolol Protects against Ischemic-Reperfusion Brain Damage Following Oxygen-Glucose Deprivation and Transient Focal Cerebral Ischemia. *International Journal of Molecular Medicine*, **41**, 2252-2262. <https://doi.org/10.3892/ijmm.2018.3387>
- [25] Yang, J., Wei, Y., Zhao, T., Li, X., Zhao, X., Ouyang, X., *et al.* (2022) Magnolol Effectively Ameliorates Diabetic Peripheral Neuropathy in Mice. *Phytomedicine*, **107**, Article ID: 154434. <https://doi.org/10.1016/j.phymed.2022.154434>
- [26] 蓝希华, 王志国, 栾小丽, 等. 基于近红外光谱技术的木糖含量快速检测[J]. 光谱学与光谱分析, 2025, 45(7): 1916-1923.
- [27] 王海燕, 李江. 近红外光谱技术在现代石油化工行业中的应用[J]. 山西化工, 2025, 45(1): 198-199.
- [28] 康玉民, 杨振, 顾丛丛. 近红外光谱技术在食品检测中的应用研究[J]. 食品安全导刊, 2025(16): 155-157.
- [29] 蒋智威. 基于近红外光谱技术的苍术鉴别与质量评价研究[D]: [硕士学位论文]. 杭州: 浙江农林大学, 2024.
- [30] 彭彬倩, 沈福苗. 近红外光谱技术在食品检测中的应用研究进展[J]. 食品安全导刊, 2025(5): 181-184, 189.