



## 漢方薬の有効成分の検量モデル作成 ～漢方薬の品質と生産性の向上への寄与～

### 1. 背景

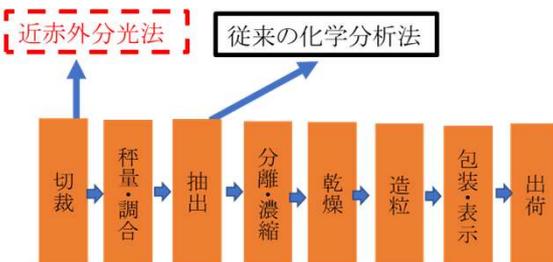
近赤外分光法は、漢方薬の成分分析に広く使用されている非破壊的な分析技術です。

ショウガは、漢方薬の原材料の一つとしてよく知られています。古くから滋養強壮、疲労回復、ひざや腰の関節痛などに効果があるとされるハーブの一つです。ショウガには、独自の有効成分であるフラボノイドが含まれており、脂肪の代謝を助け消費しやすくする機能があることが報告されています。

今回、以下の手順でフラボノイド含有率の検量モデルを作成しました。

1. あらかじめ抽出されたショウガの成分に含まれるフラボノイドの化学分析値からサンプルを2種類に分類しました。
2. サンプルを拡散反射型近赤外分光装置により吸収スペクトルを測定しました。
3. 得られた吸収スペクトルデータをPLS回帰を使って分析を行い、既に得られた化学分析値を参照し検量モデルを求めました。
4. 近赤外分光法により成分の含有率を非破壊で測定し、化学的分析値と同等以上の精度があることを検証しました。

ショウガの原産地において、切裁工程などの早期段階に本手法を導入することで品質向上や効率の良い生産などに寄与すると期待されます。



<漢方薬の製造工程>

### 2. 測定装置と方法

サンプルは、粉体に処理され、化学分析値にのっとりAサンプルとBサンプルに分類されています。測定装置は、(株)オプトメカトロ社製のM022反射型ポータブル分析器を使用しました。(Fig.1)



Fig.1 測定装置外観

粉体サンプル用のセルを回転させながら測定する操作をやりやすくするためガイドアタッチメントを作成しました。(Fig.2)



Fig.2 粉体サンプル用ガイドアタッチメント

サンプルの計測が時間経過の影響を受けないように、測定順番およびグループAとBが交互になるようにサンプルを並び替えるなどの工夫を行いました。

### 3. 化学的成分抽出



原料より抽出したフラボノイドの含有量が一定以上のものをBサンプル、それ未満のものをAサンプルと定義しました。

原料から抽出したフラボノイドを原料重量比に表した化学分析実測値はFig.3になりました。フラボノイドの含有率が1-4%と小さいことが分ります。

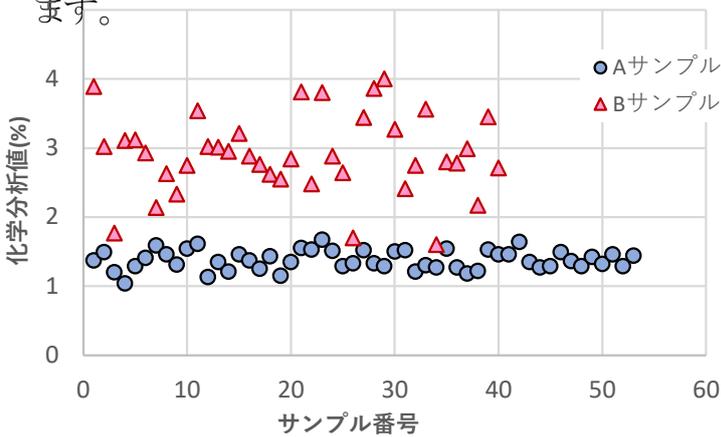


Fig.3 フラボノイドの含有量(化学分析値)

### 4. 光学的定量分析の結果

AサンプルとBサンプルのすべての吸光度を示します。(Fig.4)

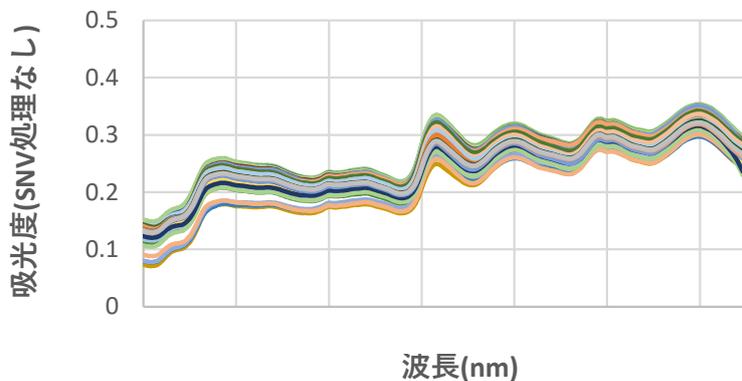


Fig.4 全サンプルの吸光スペクトル

### 5. 検量モデルの作成

計測されたデータをPLS(部分的最小二乗法)回帰を用いて分析を行いました。PLS回帰は、サンプル数が少ない、ノイズの影響を最小限にする有効な分析手法です。分析の結果、下記に示すような精度の高い相関が得られました。

波長幅:1500~2500nm

R=0.981

SEC=0.161%

SECV=0.185%

Bias=0.000%

得られた検証モデルをを利用してAおよびBサンプルのフラボノイド含有率の光学的推定値を算出しました。(Fig.5)

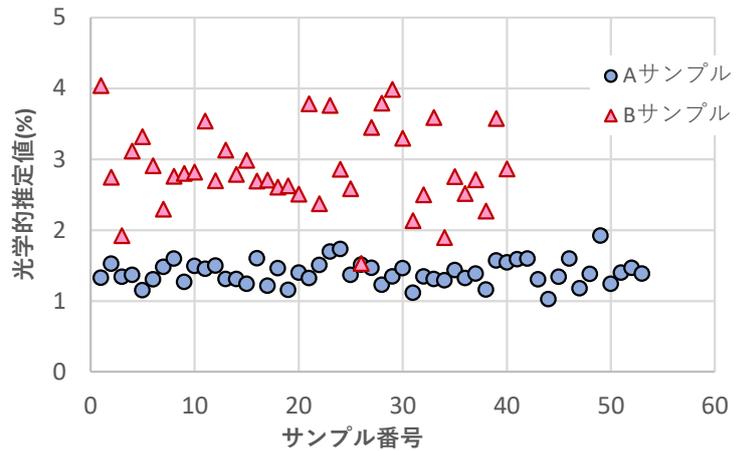


Fig.5 フラボノイドの含有量(光学推定値)

Fig.3とFig.5の結果からフラボノイド含有量の近赤外分光法による推定値と化学分析値の相関は高く、非破壊である光学的測定が十分な精度を実現していることが確認されました。

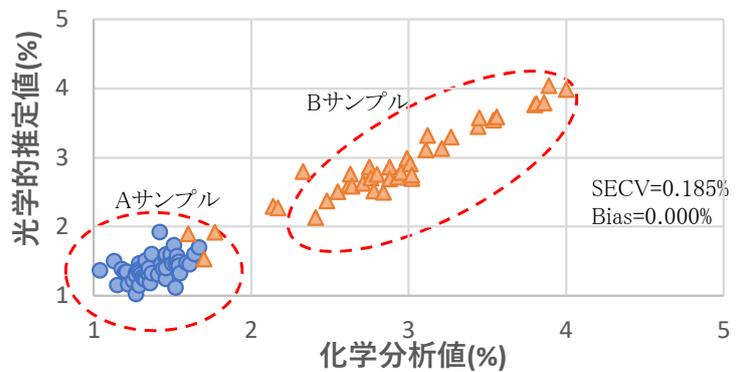


Fig.6 推定値の散布図

上記の散布図からAサンプルとBサンプルが高精度で識別できていることが分ります。(Fig.6)