·实验研究·

基于“外观性状-化学成分”关联模型的山楂饮片质量控制关键指标辨识研究

吕　芳[1],孙梦豫[1],刘　薇[1],马嘉慕[1],翟昌琪[2,3,4],齐晓丹[2,3,4],张　凤[1],黎明霞[1],应乐天[1],折改梅[1*]
(1 北京中医药大学中药学院,北京 100029; 2 东阿阿胶股份有限公司,聊城 252200; 3 山东省胶类中药技术创新中心,聊城 252200; 4 东阿阿胶股份有限公司山东省胶类中药研究与开发重点实验室 国家胶类中药工程技术研究中心,聊城 252200)

[摘要] **目的**:基于19批山楂样品(SZ1～SZ19),通过整合外观性状(直径、厚度、总质量)与内在质量指标(水分、浸出物、总灰分、HPLC特征图谱),构建“外观性状-化学成分”关联模型,辨识山楂质量控制关键指标。**方法**:测定各项指标后,采用主成分分析(PCA)、正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)、因子分析(FA)和IQR变异性分析进行数据挖掘,通过多方法结果交叉验证确定关键指标。**结果**:PCA分析和OPLS-DA分析筛选出水分、绿原酸、隐绿原酸等7个指标;FA提取出隐绿原酸、金丝桃苷和异槲皮苷;IQR分析获得11个变异性指标。综合发现隐绿原酸和金丝桃苷在3种分析方法中均被识别为核心指标。**结论**:建立山楂“外观性状-化学成分”关联模型,确定隐绿原酸和金丝桃苷为关键质量控制指标,为中药饮片质量标准化提供了新的研究方法。

[关键词] 山楂;关键指标;质量评价
[中图分类号] R917　　[文献标志码] A　　[文章编号] 1003－3734(2026)10－1046－11

Study on identification of key quality control indicators of *Crataegi Fructus* slices based on “appearance characteristics-chemical composition” correlation model

LÜ Fang[1], SUN Meng-yu[1], LIU Wei[1], MA Jia-mu[1], ZHAI Chang-qi[2,3,4], QI Xiao-dan[2,3,4], ZHANG Feng[1], LI Ming-xia[1], YING Le-tian[1], SHE Gai-mei[1*]
(1 *School of Chinese Materia Medica, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing* 100029, *China*; 2 *Dong'e Ejiao Co., Ltd., Liaocheng* 252200, *China*; 3 *Shandong Technology Innovation Center of Gelatin-based Traditional Chinese Medicine, Liaocheng* 252200, *China*; 4 *National Engineering Technology Research Center for Gelatin-based Traditional Chinese Medicine, Shandong Key Laboratory of Gelatine TCM Research and Development, Dong'e Ejiao Co., Ltd., Liaocheng* 252200, *China*)

[**Abstract**] **Objective**: To construct the correlation model of “appearance characteristics-chemical components” of *Crataegi Fructus* by integrating appearance characteristics (diameter, thickness and total mass) and internal quality indicators (water content, extract, total ash and HPLC characteristic spectrum) to identify the key quality control indicators of *Crataegi Fructus*. **Methods**: After measuring the indicators, principal component analysis

[基金项目] 中央引导地方科技发展资金资助项目(YDZX2023090)
[作者简介] 吕芳,女,硕士,主要从事中药化学成分研究。E-mail: lf17837179502@163.com。孙梦豫,女,硕士,主要从事中药化学成分研究。E-mail: sunmengyuwsry@163.com。
[通讯作者] *折改梅,女,博士,研究员,主要从事中(民族)药药效物质和新药创制研究。E-mail: shegaimei@126.com。
[DOI]10.20251/j.cnki.1003-3734.2026.10.006

(PCA), orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA), factor analysis (FA) and IQR variability analysis were used for data mining, and key indicators were determined by cross-validation of multiple methods. **Results**: PCA and OPLS-DA identified seven indicators, including water content, chlorogenic acid, cryptochlorogenic acid, *et al*. FA extracted cryptochlorogenic acid, hyperoside, and isoquercitrin. IQR analysis yielded 11 variability indicators. Overall, cryptochlorogenic acid and hyperoside were identified as core indicators across all three analytical methods. **Conclusion**: The correlation model of "appearance characteristics-chemical composition" of *Crataegi Fructus* was established, and the key quality control indexes were determined as cryptochlorogenic acid and hyperoside, which provided a new research method for the standardization of quality of Chinese herbal slices.

[**Key words**] *Crataegi Fructus*; key indicators; quality evaluation

山楂(*Crataegi Fructus*)为蔷薇科植物山里红(*Crataegus pinnatifida* Bge. var. major N. E. Br.)或山楂(*C. pinnatifida* Bge.)的干燥成熟果实,味酸、甘,有消食健脾、行气散郁、化浊降脂的功效。作为药食同源的代表性药材,山楂在心血管疾病辅助治疗、保健食品开发等领域得到广泛应用[1-8]。随着市场需求持续增长,山楂饮片的生产和销售规模不断扩大,其质量控制成为保障产品安全有效的关键环节。目前,山楂的质量控制主要依据《中华人民共和国药典》2020 年版,采用性状鉴别、显微鉴别、理化鉴别及含量测定等方法。然而,传统的方法难以揭示外观特征(如直径、厚度、总质量等)与内在化学成分的关联。中药的药效与其所含的化学成分密切相关,辨识和控制这些关键成分是确保中药质量、安全性和有效性的核心环节。近年来,多成分质量控制和指纹图谱方法逐渐应用于中药材的质量评价[9-10]。在此背景下,构建基于"外观性状-化学成分"关联模型的新型质量评价体系,是当前质量控制研究的热点。"外观性状-化学成分"关联模型,即通过数据分析和建模方法,建立中药材传统外观特征与其内在化学成分之间的关联,从而为中药材质量评价提供更科学、更全面的依据。

化学计量学作为一种常用的数学方法,为辨识关键指标提供了科学且高效的路径,其中主成分分析(PCA)与正交偏最小二乘判别分析(OPLS-DA)是主要的分析方法之一。PCA 分析是一种数据降维技术,通过正交变换将一组可能存在相关性的变量转换为一组线性不相关的变量,能够在减少数据集维度的同时保留最重要的信息[11]。OPLS-DA 分析是一种结合了偏最小二乘回归和正交信号校正的多变量统计分析方法,可以有效滤除与分类信息无关的噪音,提高模型的解析能力和有效性[12-13]。二者结合可以更有效地进行特征选择,识别具有最大贡献的关键变量,得到关键指标。因子分析(FA)是一种多变量统计方法,旨在通过寻找共同变异性并将其解释为潜在因子[14],从而降低数据维度、减少冗余信息,并洞察变量之间的关系[15],能够通过因子载荷矩阵表现每个观测变量与潜在因子之间的关系,进而识别对潜在因子贡献最大的变量,得到关键指标。通过结合 PCA 分析和 OPLS-DA 分析方法得到的结果与 FA 分析的结果能够有效辨识具有整体代表性的指标,然而理想的指标还需具有变异性大且稳定的性质。四分位距(IQR)变异性分析[16]基于统计学中数据分布的四分位数概念,可有效规避极端值干扰,精准度量数据离散程度,以此精准甄别出变异性大且稳定的指标。

基于此,本研究通过结合 PCA 分析和 OPLS-DA 分析方法得到的结果与 FA 分析的结果相互印证并赋予 IQR 变异性分析,构建"外观性状-化学成分"关联的质量评价体系,从而辨识山楂质量控制的关键指标。以期建立更为科学、有效的山楂质量控制体系,为中药饮片的现代化质量控制提供新的研究思路和技术手段。

材料与方法

1 仪器

Acchorm S6000 型高效液相色谱仪(华谱科仪科技有限公司,四元泵,DAD 检测器);Waters tnature C_{18}色谱柱(250 mm × 4.6 mm,5 μm);CP224C 型万分之一天平(奥豪斯仪器有限公司);BJ-400T 型多功能粉碎机(德清拜杰电器有限公司,功率 1 200 W,频率 50 Hz,粉碎程度 50 ~ 300 目);娃哈哈纯净水

(杭州娃哈哈集团有限公司);甲酸(天津市福晨化学试剂厂);MNT－150 型游标卡尺[上海美耐特实业(集团)有限公司]。

2 药材与试剂

山楂对照药材(中国食品药品检定研究院,批号:121138-201206);金丝桃苷(中国食品药品检定研究院,批号:111521-201708);绿原酸(中国食品药品检定研究院,批号:110753-200413);异槲皮苷(成都埃法生物科技有限公司,批号:AF9102022);新绿原酸(上海源叶生物科技有限公司,批号:D23GB172337);隐绿原酸(成都德思特生物公司,批号:DST221220-035);甲醇、乙醇均购自北京化工厂有限责任公司;甲酸购自福晨(天津)化学试剂有限公司。

19 批山楂饮片经北京中医药大学中药资源与鉴定系王晶娟教授鉴定为蔷薇科植物山里红(*Crataegus pinnatifida* Bge. var. major N. E. Br.)的干燥成熟果实,具体信息见表 1。

表 1 19 批山楂饮片信息

编号	批号	供货商	产地
SZ1	201101	山东百味堂中药饮片有限公司	山东省
SZ2	202203-002	平邑多尔药业有限公司	山东省临沂市平邑县
SZ3	202111-002	衡州南孔中药有限公司	山东省
SZ4	202112-001	衡州南孔中药有限公司	山东省
SZ5	202203-001	安徽徽草堂药业饮片股份有限公司	山东省
SZ6	202204-001	安徽徽草堂药业饮片股份有限公司	山东省
SZ7	202205-001	平邑多尔药业有限公司	山东省临沂市平邑县
SZ8	202206-001	安徽徽草堂药业饮片股份有限公司	山东省
SZ9	202207-001	安徽徽草堂药业饮片股份有限公司	山东省
SZ10	202207-002	平邑多尔药业有限公司	山东省临沂市平邑县
SZ11	2111062	衢州南孔中药有限公司饮片厂	山东省
SZ12	202209-002	安徽徽草堂药业饮片股份有限公司	山东省
SZ13	20221016	浙江英特集团股份有限公司	山东省临沂市
SZ14	20221017	浙江英特集团股份有限公司	山东省临沂市
SZ15	20221018	浙江英特集团股份有限公司	山东省临沂市
SZ16	20221019	浙江英特集团股份有限公司	山东省临沂市
SZ17	20221020	浙江英特集团股份有限公司	山东省临沂市
SZ18	20221021	浙江英特集团股份有限公司	山东省临沂市
SZ19	20221022	浙江英特集团股份有限公司	山东省临沂市

3 外观性状指标测定方法

19 批山楂饮片均为类圆形,因此形态参数指标选取饮片的厚度、直径与质量。每批样品随机选取 3 组,每组 100 个饮片作为测量对象,记录厚度、直径和质量并求出每组平均厚度(h)、平均直径(d)、平均质量(m)。

4 水分、总灰分及浸出物的含量测定方法

按《中华人民共和国药典》2020 年版中“山楂”项下方法进行水分、总灰分及浸出物测定[8]。

5 特征图谱测定方法

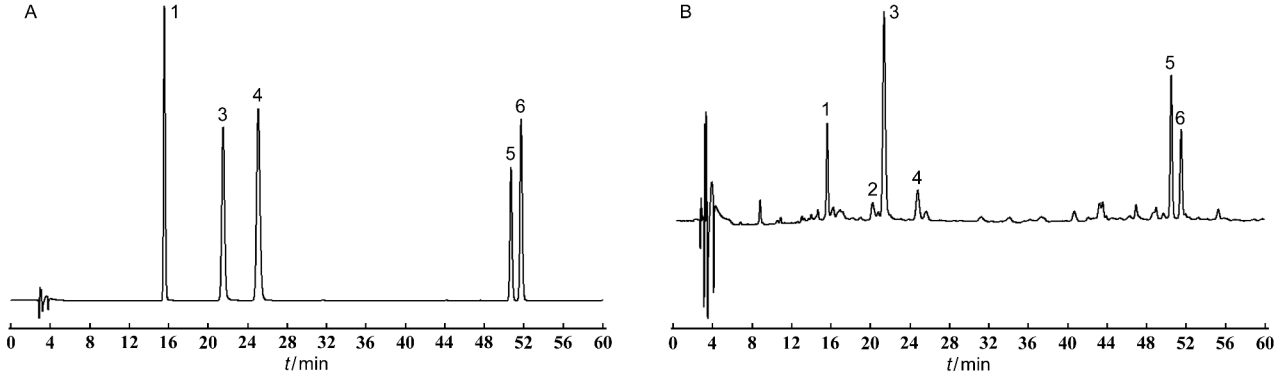
5.1 对照品溶液的制备 精密称取绿原酸、隐绿原酸、新绿原酸、金丝桃苷、异槲皮苷对照品,加甲醇制成每 1 mL 各含 0.1 mg 的混合溶液,摇匀,即得。

5.2 供试品溶液的制备 取本品粉末(过四号筛)1 g,精密称定,置具塞锥形瓶中,精密加入甲醇 20 mL,称定重量,超声处理 30 min,放冷,再称定重量,加甲醇补足减失的重量,摇匀,滤过,取续滤液,过 0.22 μm 滤膜即得。

5.3 色谱条件 Waters tnature C_{18}色谱柱(250 mm × 4.6 mm,5 μm);流动相为乙腈(A)-0.1% 甲酸水(B);梯度洗脱(0 ~ 9 min,2% →10% A;9 ~ 28 min,10% A;28 ~ 45 min,10% →18% A;45 ~ 60 min,18% A);进样体积:10 μL;检测波长:325 nm;体积流量:1 mL·min^{-1};柱温 30 ℃。

分别精密吸取对照品溶液和供试品溶液 10 μL,注入液相色谱仪,测定,即得。

5.4 系统适用性考察 精密吸取对照品溶液和供试品溶液,按“**5.3**”项下色谱条件进样,结果显示供试品中含有新绿原酸、绿原酸、隐绿原酸、金丝桃苷、异槲皮苷。在此条件下,各峰理论塔板数不低于10 000,表明系统适应性良好,其中绿原酸峰面积较大,保留时间适中,分离度较好,因此确定绿原酸为内参比峰,见图1。



1:新绿原酸;3:绿原酸;4:隐绿原酸;5:金丝桃苷;6:异槲皮苷

图1 混合对照品(A)及供试品(B)的HPLC谱图

5.5 精密度考察 取编号为SZ1的山楂样品粉末(批号:201101),按“**5.2**”项下制得供试品,按“**5.3**”项下色谱条件,连续进样6次,记录峰面积。以绿原酸为参照峰,各共有峰的相对峰面积及相对保留时间RSD均小于3%,表明仪器精密度良好。

5.6 稳定性考察 取编号为SZ1的山楂样品粉末(批号:201101),按“**5.2**”项下制得供试品,按“**5.3**”项下色谱条件,分别在0、2、4、6、8、10、12 h进样,记录峰面积。以绿原酸为参照峰,各共有峰的相对峰面积及相对保留时间RSD均小于3%,表明供试品溶液在12 h内稳定性良好。

5.7 重复性考察 取编号为SZ1的山楂样品粉末(批号:201101)6份,按“**5.2**”项下制得供试品,按“**5.3**”项下色谱条件分别进样,记录峰面积。以绿原酸为参照峰,各共有峰的相对峰面积及相对保留时间RSD均小于2%,表明方法重复性良好。

6 化学计量学方法

将外观性状指标、内在化学成分及特征图谱共有峰峰面积进行Z-score标准化,通过线箱图(line-box plot)展示数据分布,消除量纲差异并评估数据的变异性和稳定性。采用Spearman相关系数评估外观性状与化学成分间的相关性,筛选重要关联变量用于后续分析。然后将PCA分析和OPLS-DA分析相结合,同时采用FA(最大似然法+Varimax旋转)提取和解释潜在因子,获得关键指标。

7 数据处理

实验数据采用Excel 2019、SPSS 22.0、SIMCA 14.1及R studio 4.4.1进行处理和统计分析。

结 果

1 外观性状指标测定结果

本品多皱缩不平,呈圆形片,按“**3**”项下测定方法对19批山楂饮片外观性状指标进行测定。结果见表2。

表2 山楂外观性状指标及内在成分含量

编号	直径/mm	厚度/mm	总质量/g·片$^{-1}$	水分/%	总灰分/%	浸出物/%
SZ1	18.98	6.38	1.13	8.06	2.17	45.99
SZ2	27.97	7.28	1.21	7.98	2.10	50.41
SZ3	20.24	6.75	1.05	8.27	2.45	50.20
SZ4	26.33	7.03	1.04	8.27	2.23	47.03
SZ5	21.01	7.20	1.03	7.83	2.32	42.69
SZ6	26.87	7.32	1.16	8.56	1.97	46.32
SZ7	20.96	5.22	1.19	8.64	2.25	50.01

续表 2

编号	直径/mm	厚度/mm	总质量/g·片$^{-1}$	水分/%	总灰分/%	浸出物/%
SZ8	28.26	7.19	1.10	8.40	2.05	44.53
SZ9	20.41	9.43	1.17	8.30	2.26	46.86
SZ10	21.16	7.26	1.18	7.88	2.49	49.15
SZ11	21.20	7.14	1.18	8.00	2.37	46.29
SZ12	20.40	7.18	1.02	8.24	2.33	51.53
SZ13	21.30	7.12	1.24	10.77	2.44	45.23
SZ14	21.34	7.50	1.40	10.22	2.07	51.39
SZ15	21.67	7.18	1.24	10.00	2.38	51.99
SZ16	29.24	7.33	1.28	10.27	2.12	49.03
SZ17	29.38	7.13	1.25	10.72	2.36	48.35
SZ18	20.76	7.14	1.21	10.28	2.32	48.13
SZ19	21.16	7.75	1.35	10.07	2.26	53.80

2 水分、总灰分及浸出物含量测定结果

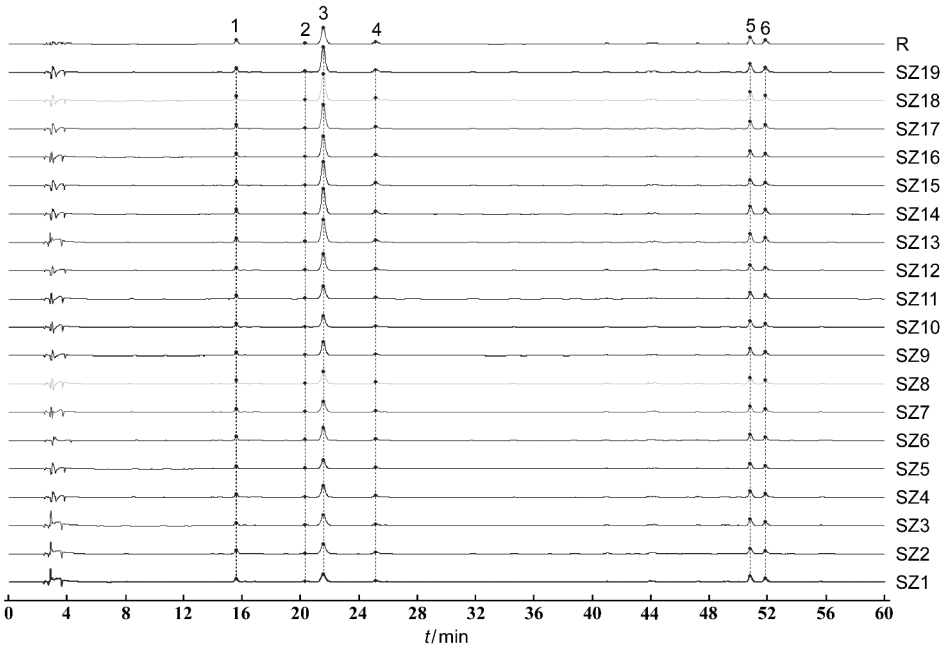
按“**4**”项下测定方法对 19 批山楂饮片水分、总灰分及浸出物进行测定，水分、总灰分、浸出物测定结果均满足《中华人民共和国药典》2020 年版要求，即水分不得超过 12.0%，总灰分不得超过 3.0%，浸出物不得少于 21.0%。结果见表 2。

3 特征图谱的建立

取 19 批山楂粉末，按“**5**”项下方法测定，记录各个样品的色谱图。19 批山楂饮片特征峰峰面积见表 3。采用《中药指纹图谱相似度评价系统(2012A 版)》对所记录图谱的 AIA 文件进行分析。以 SZ1 为参照图谱，时间窗宽度设为 0.5 min，对色谱峰进行多点校正和 Mark 匹配，生成 19 批山楂的特征图谱匹配图以及对照特征图谱，结果见图 2。

表 3 19 批山楂饮片特征峰峰面积统计表

编号	峰 1	峰 2	峰 3	峰 4	峰 5	峰 6
SZ1	86 331.867	22 438.750	298 515.625	43 741.223	164 061.516	103 337.063
SZ2	87 880.258	17 587.869	395 498.688	53 731.879	143 751.703	78 787.656
SZ3	74 953.602	19 268.260	420 661.594	54 555.629	169 847.438	93 853.344
SZ4	74 491.148	20 497.404	412 682.813	54 247.371	154 518.891	88 120.445
SZ5	66 863.891	15 792.029	319 112.500	40 632.617	140 608.453	81 195.445
SZ6	91 903.266	22 815.348	446 590.656	58 335.668	162 192.797	94 338.633
SZ7	80 261.609	22 211.469	385 191.969	51 536.215	144 320.672	80 226.500
SZ8	88 657.344	21 959.840	458 923.938	47 442.441	161 970.656	92 608.430
SZ9	75 949.672	25 821.090	481 774.375	51 767.938	176 529.391	104 361.984
SZ10	79 410.414	22 563.424	394 010.063	39 741.059	162 165.219	95 195.852
SZ11	82 683.273	23 436.309	454 992.813	54 279.230	172 362.984	97 919.688
SZ12	72 786.594	24 602.709	592 006.250	72 309.258	145 498.250	81 915.367
SZ13	104 889.039	22 841.213	868 681.938	83 022.805	225 843.672	133 904.422
SZ14	101 343.656	22 929.578	889 288.875	92 325.172	198 848.813	117 264.602
SZ15	106 453.078	20 232.363	861 291.750	115 262.281	147 320.969	83 308.063
SZ16	87 967.969	20 575.479	774 717.000	89 234.805	173 553.203	100 914.484
SZ17	96 973.930	23 090.588	846 885.813	89 990.617	198 351.000	114 408.266
SZ18	97 982.008	23 483.309	918 326.000	97 881.109	229 044.359	134 861.922
SZ19	96 472.344	22 952.709	857 764.875	98 219.344	215 087.094	127 401.477



1:新绿原酸;3:绿原酸;4:隐绿原酸;5:金丝桃苷;6:异槲皮苷

图 2 19 批山楂 HPLC 特征图谱及对照图谱 R 的 HPLC 图

19 批山楂饮片 HPLC 特征图谱与相似度评价系统生成的对照图谱的相似度在 0.966 ~ 0.999 之间,说明 19 批山楂饮片差异较小,结果见表 4。

表 4 19 批山楂特征图谱的相似度评价结果

编号	相似度	编号	相似度
SZ1	0.966	SZ11	0.996
SZ2	0.996	SZ12	0.998
SZ3	0.995	SZ13	0.999
SZ4	0.997	SZ14	0.997
SZ5	0.990	SZ15	0.991
SZ6	0.997	SZ16	0.997
SZ7	0.996	SZ17	0.997
SZ8	0.998	SZ18	0.998
SZ9	0.997	SZ19	0.998
SZ10	0.993		

4 化学计量学分析

4.1 IQR 变异性分析 对外观性状、内在成分及特征图谱共有峰峰面积 12 个指标进行数据变异性分析,结果见图 3。其中,厚度箱体较短,变异性较小;直径、水分、浸出物、总灰分、总质量、新绿原酸、共有峰 2、绿原酸、隐绿原酸、金丝桃苷、异槲皮苷的箱体较高,变异性大。厚度、共有峰 2 存在多个离群值,表明可能存在极端数据点,不稳定。选择评价指标时,一般以变异性大且稳定的指标作为评价指标[17-18],基于此,将直径、水分、浸出物、总灰分、总质量、新绿原酸、共有峰 2、绿原酸、隐绿原酸、金丝桃苷和异槲皮苷作为参考指标。

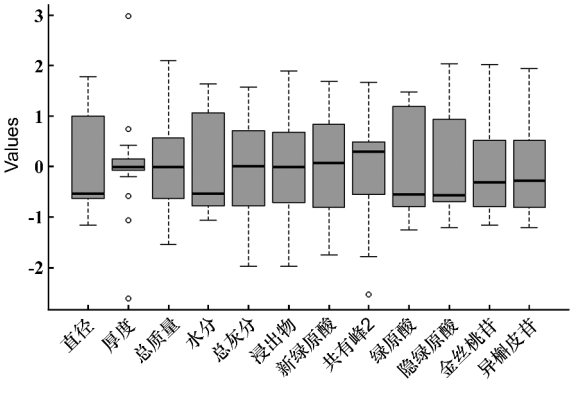


图 3 数据变异性分析线箱图

4.2 Spearman 相关性分析 采用 Spearman 系数对外观性状、内在成分及特征图谱共有峰峰面积 12 个指标进行相关性分析,得到相关矩阵,结果见图 4。相关性分析结果表明,12 个指标之间均存在相关关系。其中,相关性较强的有:异槲皮苷-金丝桃苷(0.971)、绿原酸-隐绿原酸(0.862)、绿原酸-水分(0.789)。详见表 5。

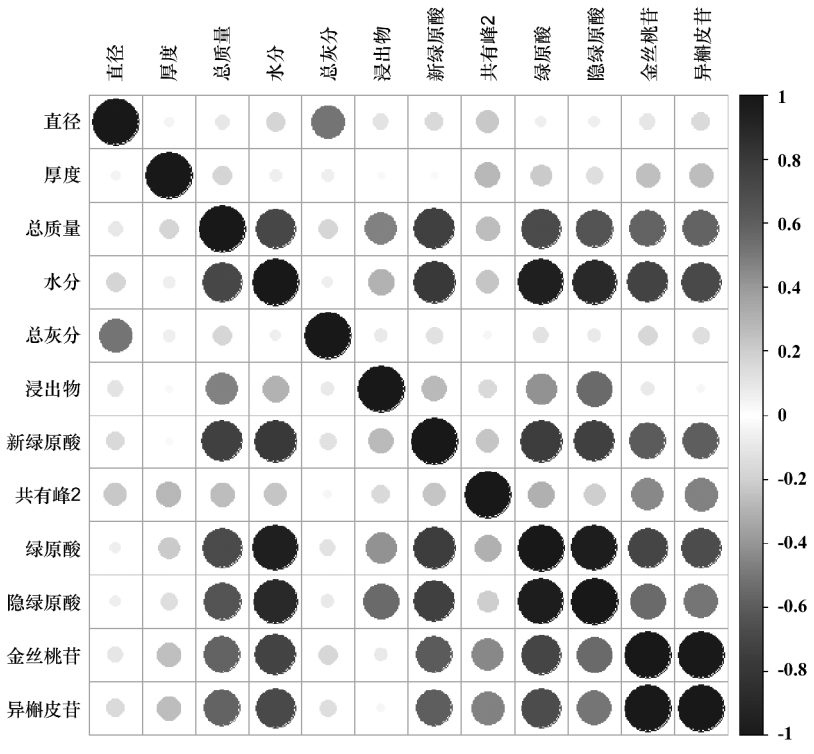


图 4 相关性分析

表 5 山楂各指标相关性分析结果

	直径	厚度	总质量	水分	总灰分	浸出物	新绿原酸	共有峰 2	绿原酸	隐绿原酸	金丝桃苷	异槲皮苷
直径	1											
厚度	0.266	1										
总质量	0.421	0.328	1									
水分	0.350	0.034	0.689[b]	1								
总灰分	−0.359	−0.325	−0.038	−0.065	1							
浸出物	−0.012	0.259	0.409	0.156	0.13	1						
新绿原酸	0.448	0.164	0.783[b]	0.747[b]	−0.103	0.161	1					
共有峰 2	−0.234	0.223	0.189	0.315	0.106	0.040	0.176	1				
绿原酸	0.245	0.323	0.622[b]	0.789[b]	0.108	0.305	0.713[b]	0.497[a]	1			
隐绿原酸	0.263	0.197	0.642[b]	0.752[b]	0.070	0.544[a]	0.690[b]	0.275	0.862[b]	1		
金丝桃苷	−0.002	0.161	0.575[b]	0.670[b]	0.126	−0.025	0.551[a]	0.590[b]	0.703[b]	0.520[a]	1	
异槲皮苷	−0.049	0.169	0.539[a]	0.614[b]	0.115	−0.104	0.536[a]	0.616[b]	0.633[b]	0.440	0.971[b]	1

a:$P<0.05$;b:$P<0.01$

4.3 PCA 分析和 OPLS-DA 分析 采用 SPSS 22.0 对所测的山楂饮片外观性状指标与内在成分、特征图谱共有峰进行 PCA 分析,结果见表 6~7。PCA 分析结果表明,前 4 个成分的特征值均大于 1,其累计贡献率达 82.823%,可解释大部分原始变量的信息,因此选择前 4 个主成分进行分析。在第 1 主成分中,总质量、水分、新绿原酸、绿原酸、隐绿原酸、金丝桃苷、异槲皮苷的特征向量较大(>0.7),可反映所有山楂样品的大部分信息;在第 2 主成分中,总灰分的特征向量较大(>0.7);在第 3 和第 4 主成分中,所有指标的特征向量均较低(<0.7)。上述结果表明,总质量、水分、新绿原酸、绿原酸、隐绿原酸、金丝桃苷、异槲皮苷、总灰分等指标可以反映山楂的大部分信息。

表 6 山楂各成分的特征根及贡献率

主成分	初始特征值	贡献率/%	累计贡献率/%
1	5.738	47.814	47.814
2	1.764	14.697	62.512
3	1.416	11.796	74.308
4	1.022	8.516	82.823
5	0.770	6.415	89.238
6	0.508	4.229	93.467
7	0.328	2.732	96.199
8	0.272	2.265	98.465
9	0.140	1.168	99.632
10	0.025	0.204	99.837
11	0.015	0.123	99.960
12	0.005	0.040	100.000

表 7 山楂主成分的特征向量

主成分/载荷	1	2	3	4
d/mm	0.020	−0.810	0.312	−0.087
h/mm	0.228	0.161	0.564	0.529
总质量/g·片$^{-1}$	0.819	−0.228	−0.031	0.154
水分	0.933	−0.147	−0.073	−0.211
总灰分	0.057	0.705	−0.449	−0.226
浸出物	0.414	−0.094	−0.637	0.573
新绿原酸	0.853	−0.261	−0.032	−0.138
共有峰 2	0.423	0.444	0.324	0.403
绿原酸	0.954	−0.053	−0.111	−0.013
隐绿原酸	0.879	−0.165	−0.292	0.067
金丝桃苷	0.841	0.310	0.277	−0.226
异槲皮苷	0.821	0.332	0.325	−0.222

研究基于“**4.2**”项下相关性分析结果显示，总灰分与第 1 主成分提取的总质量、水分、新绿原酸、绿原酸、隐绿原酸、金丝桃苷、异槲皮苷等指标无显著相关性，因此总质量、水分及新绿原酸、绿原酸、隐绿原酸、金丝桃苷、异槲皮苷等共有峰面积可作为反映山楂大部分信息的关键指标。

将筛选得到的 7 个指标导入 SIMCA 14.1 进行 PCA 分析，模型结果见图 5A。利用 SIMCA 14.1 对 19 批山楂饮片进行有监督的 OPLS-DA 分析，结果可将样品分为 2 类，见图 5B。PCA 及 OPLS-DA 结果表明，19 批山楂可分为 2 类，SZ1 ~ SZ12 为一类，SZ13 ~ SZ19 为一类。为了分析变量对山楂等级划分的影响，进一步绘制变量投影重要性分析（VIP）得分图，见图 5C。从图中可以看出，VIP 的顺序为绿原酸 > 水分 > 隐绿原酸 > 金丝桃苷 > 新绿原酸 > 异槲皮苷 > 总质量。其中，绿原酸、水分、隐绿原酸这 3 个指标的 VIP 值 > 1，表明这 3 个指标在等级划分中起到关键作用，可以作为关键指标。此外，金丝桃苷、异槲皮苷、新绿原酸的 VIP 值均 > 0.9，表明这 3 个指标在等级划分中起到重要作用。

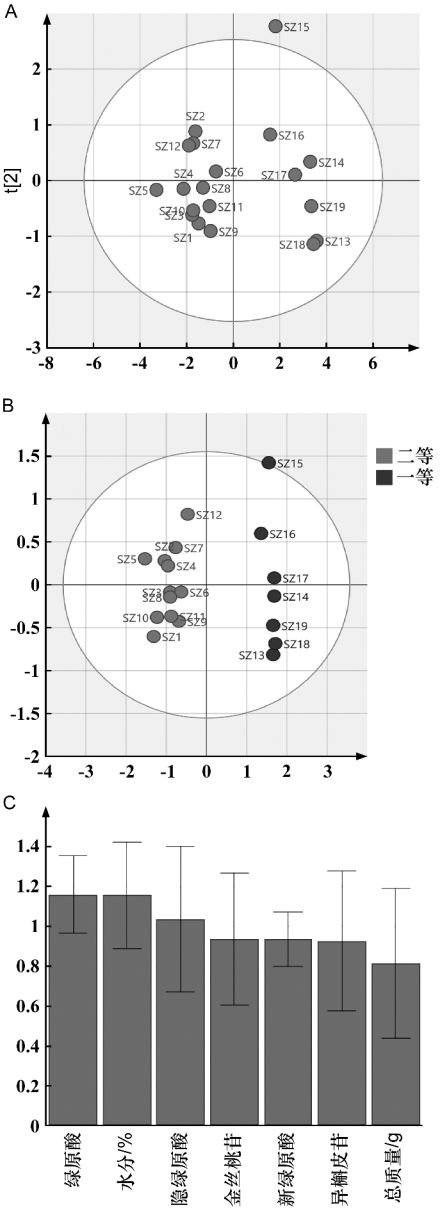


图 5 山楂综合指标 PCA 得分图（A）、OPLS-DA 得分图（B）和 VIP 得分图（C）

4.4 FA 分析 对归一化后的 12 个指标采用 KMO（Kaiser-Meyer-Olkin）检验和 Bartlett's 球形度检验确认因子分析的适用性，结果如表 8 所示。其中，KMO 总体统计量大于 0.6 且 $P < 0.05$，表明各指标间存在显著相关性，可进行 FA 分析。

表 8 KMO 检验和 Bartlett's 球形度检验结果

项目	结果
KMO 总体统计量	0.647 355
KMO 取样适切性量数	0.568 794
卡方	1 488.597
自由度	66
P 值	1.8×10^{-267}

在确认了 FA 的适用性后,使用 fa. parallel 函数进行平行分析,得到提取因子的个数,结果如图 6 所示,其中实际数据(FA actual data)表示实际数据的特征值。模拟数据(FA simulated data)表示模拟数据的特征值。重采样数据(FA resampled data)表示重采样数据的特征值。纵坐标表示因子的特征值,特征值越大,该因子解释的数据方差越多;横轴表示因子的数量。图中可以看出,实际数据的特征值在第 1 个因子时最高,然后迅速下降并趋于平稳,表明前 2 个因子足以解释大部分数据的方差[19],因此选择提取前 2 个因子。

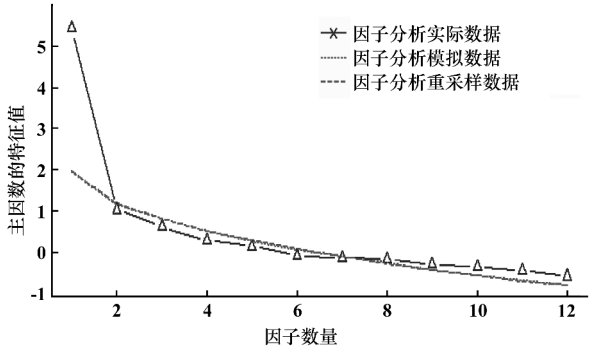


图 6 平行分析碎石图

采用最大似然法提取因子,经 Varimax 旋转解释因子,结果如图 7 和表 9 所示。图 7 中的每一条线表示不同指标与提取的因子之间的载荷关系,数字表示载荷值,越接近 1,表示指标与因子之间的关联越强[20-21]。其中,每个因子用一个圆圈表示,每个指标用一个方框表示,每个因子与多个指标之间的数字表示载荷值。载荷值越高,表示该指标与对应因子之间的关联越强。ML1 因子主要与异槲皮苷、金丝桃苷和共有峰 2 相关,表明 ML1 因子可能代表了山楂中的黄酮类化合物,可推测共有峰 2 为黄酮类化合物。ML2 因子主要与山楂中的有机酸类成分(如绿原酸、隐绿原酸、新绿原酸)、水分含量及浸出物有关,表明 ML2 因子可能反映了山楂的水溶性成分和品质相关特征。

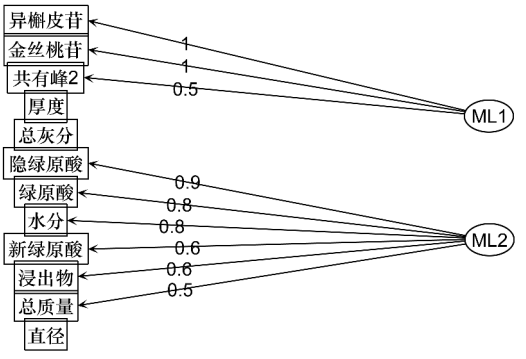
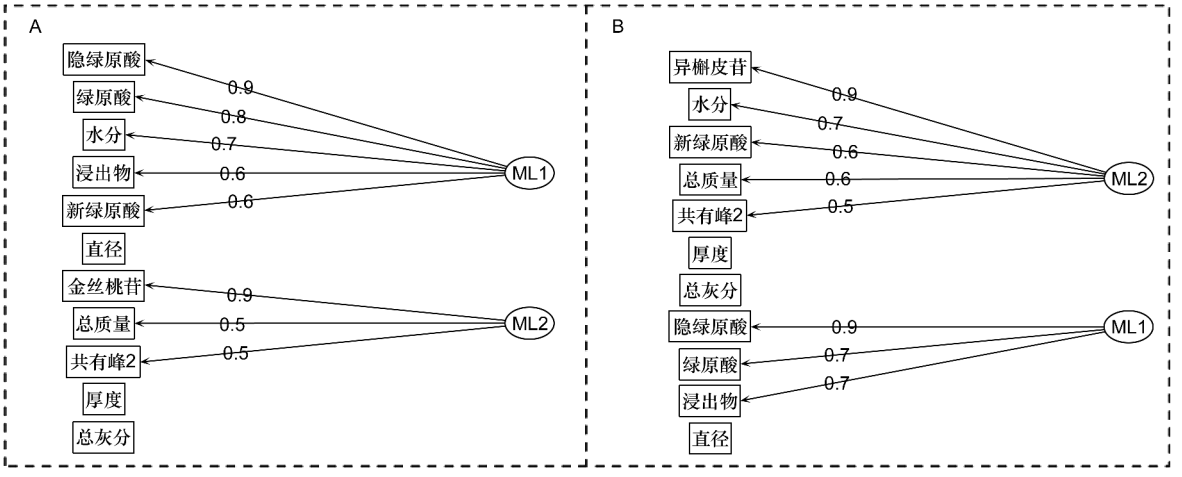


图 7 因子载荷图

表 9 因子分析结果

因子	ML1	ML2
因子载荷平方和	3.377	3.356
方差比例	0.281	0.280
累计方差贡献率	0.281	0.561

表 9 分别解释了 2 个因子的总方差和方差比例。其中,ML1 因子和 ML2 因子的方差比例分别为 28.1% 和 28.0%,累积方差贡献率达到 56.1%,表明这 2 个因子解释了大部分的数据变异性[22]。在因子载荷方面,异槲皮苷、金丝桃苷在 ML1 上的载荷量为 1。相关性分析中,金丝桃苷和异槲皮苷的相关系数为 0.98,表明这 2 个指标几乎呈现完全线性相关,减弱了模型的可靠性。为提高模型的稳健性和解释力,减少多重共线性对分析结果的影响,分别剔除金丝桃苷或异槲皮苷后重新进行因子分析[23]。结果如图 8A 和表 10 所示,在剔除异槲皮苷后重新进行因子分析时,ML1 因子和 ML2 因子的累积方差贡献率达到 51.0%,表明这 2 个因子解释了大部分的数据变异性。在因子载荷方面,ML2 因子中金丝桃苷载荷量最高(0.9)。ML1 因子中隐绿原酸载荷量最高(0.9)。如图 8B 和表 11 所示,在剔除金丝桃苷后重新进行因子分析时,ML1 因子和 ML2 因子的累积方差贡献率达到 51.1%,表明这 2 个因子解释了大部分的数据变异性。在因子载荷方面,ML2 中异槲皮苷载荷量最高(0.9),ML1 中隐绿原酸载荷量最高(0.9)。载荷的绝对值越大,表示变量与因子之间的关系越密切,可作为关键指标。



A：剔除异槲皮苷后重新进行因子分析的结果；B：剔除金丝桃苷后重新进行因子分析的结果

图 8　因子载荷图 2

表 10　除金丝桃苷后重新进行因子分析的结果

因子	ML2	ML1
因子载荷平方和	2.971	2.654
方差比例	0.270	0.241
累计方差贡献率	0.270	0.511

表 11　除异槲皮苷后重新进行因子分析的结果

因子	ML2	ML1
因子载荷平方和	2.976	2.635
方差比例	0.271	0.240
累计方差贡献率	0.271	0.510

讨　论

本研究通过测定山楂外观性状（直径、厚度、总质量）及内在质量（水分、浸出物、总灰分、特征图谱共有峰），结合数据变异性分析、相关性分析、PCA、OPLS-DA 和 FA 等化学计量学方法，系统构建了山楂“外观性状-化学成分”的关联，为筛选质量控制关键指标提供了科学依据。

研究通过 IQR 筛选出变异性大且稳定的指标，包括直径、水分、浸出物、总灰分、总质量及有机酸类成分（新绿原酸、绿原酸、隐绿原酸）和黄酮类成分（金丝桃苷、异槲皮苷）。相关性分析表明，隐绿原酸与其他有机酸类化合物如绿原酸、新绿原酸等相关；金丝桃苷和异槲皮苷相关，提示这些成分可能具有协同作用。PCA 分析和 OPLS-DA 分析显示，绿原酸、水分和隐绿原酸是影响山楂质量的主要指标，金丝桃苷、异槲皮苷和新绿原酸次之。在因子分析中，隐绿原酸在 3 次分析中均表现出高因子载荷（0.9），表明其对山楂整体化学特征的贡献较大，且该指标能够有效反映山楂的主要生物活性特征，如抗氧化和抗炎等功效[24]，因此被确定为有机酸类代表指标。对于黄酮类成分，虽然金丝桃苷和异槲皮苷均呈现高因子载荷（0.9），但基于金丝桃苷更丰富的生物活性证据[25]、更好的检测稳定性[26-27]且已被纳入某些中药材及相关产品的质量控制标准[28-29]，最终选择其作为黄酮类关键指标。本研究样本量存在一定局限，可能影响结论的外推性。然而，通过 PCA、OPLS-DA 和 FA 等多种统计方法交叉验证，均一致识别出隐绿原酸与金丝桃苷的核心指标地位，表明在现有样本范围内结果具有良好的稳健性。综合以上分析，隐绿原酸（有机酸类）和金丝桃苷（黄酮类）因其在统计分析中的核心地位、与其他成分的高度关联性，被确立为山楂饮片质量控制的关键指标。本研究通过整合外观性状与化学成分数据，不仅建立了“外观性状-化学成分”的关联，还为中药饮片的现代化质量控制提供了新的研究方法。

[参 考 文 献]

[1] 李时珍. 本草纲目[M]. 北京：中国中医药出版社，1998.
[2] 贾彬，麦子盈，陈启文，等. 山楂药用价值与上市药品研究进展[J]. 中草药，2023，54(20)：6878-6888.
[3] 石佳，章军，赵小亮，等. 质量常数方法应用于山楂饮片等级评价研究[J]. 中国现代中药，2022，24(1)：128-133.
[4] 李春峰，赵子璇，刘桂艳. 山楂主要成分提取分离及检测分析研究进展[J]. 中成药，2022，44(9)：2929-2934.
[5] MARTINELLI F，PERRONE A，YOUSEFI S，*et al*. Botanical，phytochemical，anti-microbial and pharmaceutical characteristics of hawthorn（*Crataegus monogyna* Jacq.），Rosaceae[J]. *Mole-*

cules, 2021, 26(23): 7266.
[6] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典中药[S]. 2020 年版. 一部. 北京: 中国医药科技出版社, 2020.
[7] 王文越, 吕琴, 李珩玉, 等. 山楂与野山楂的化学成分对比研究[J]. 山东中医药大学学报, 2021, 45(5): 672 - 679.
[8] YIN FZ, LI L, CHEN Y, *et al*. Quality control of processed *Crataegi Fructus* and its medicinal parts by ultra high performance liquid chromatography with electrospray ionization tandem mass spectrometry[J]. *J Sep Sci*, 2015, 38(15): 2630 - 2639.
[9] 熊皓舒, 田埂, 刘朋, 等. 中药生产过程质量控制关键技术研究进展[J]. 中草药, 2020, 51(16): 4331 - 4337.
[10] 付海燕. 化学模式识别和多维校正方法及其在复杂体系分析中的应用研究[D]. 长沙: 湖南大学, 2010.
[11] RINGNÉR M. What is principal component analysis? [J]. *Nat Biotechnol*, 2008, 26: 303 - 304.
[12] 韩蓉, 牛逍瞳, 王莹, 等. 多指标成分定量结合化学计量法综合评价新疆主要核桃仁品种品质及加工适宜性[J]. 食品与发酵工业, 2024: 1 - 17.
[13] 廖添洪, 张辰晏, 吉宏武, 等. 真空低温蒸煮技术对凤尾虾品质与风味成分的影响[J]. 食品工业科技, 2025, 46(14): 310 - 320.
[14] 曾萌薇, 潘东豪, 江铭倩, 等. 基于因子分析研究代谢综合征血糖组分异常的证素分布规律[J]. 中华中医药杂志, 2024, 39(8): 4002 - 4009.
[15] 杜晓芳, 李英滨, 白杨, 等. 基于探索性因子分析的土壤生物健康评价[J]. 应用生态学报, 2024, 35(12): 3497 - 3506.
[16] 卢楠, 董元锋, 郭世泰, 等. 露天矿山边坡变形监测的改进型 IQR 粗差探测方法[J]. 金属矿山, 2018, 5(8): 114 - 117.
[17] JOAN SAARY M. Radar plots: a useful way for presenting multivariate health care data[J]. *J Clin Epidemiol*, 2008, 61(4): 311 - 317.
[18] 田敏, 吴晓枫. 基于双层模糊控制与改进遗传算法的移动机器人路径规划算法[J]. 计算机应用研究, 2026, 43(1): 183 - 190.
[19] OKLUK M, KOAK D. Using Horn's Parallel Analysis Method in Exploratory Factor Analysis for Determining the Number of Factors. [J]. *Kuram Ve Uygulamada Egitim Bilimleri*, 2016, 16(2): 537 - 551.
[20] HOWARD MC. A systematic literature review of exploratory factor analyses in management[J]. *J Bus Res*, 2023, 164: 113969.
[21] MASKEY R, FEI JG, NGUYEN HO. Use of exploratory factor analysis in maritime research[J]. *Asian J Shipp Logist*, 2018, 34(2): 91 - 111.
[22] WANG S, WANG Q. Performance Study on China's ST Companies—Based on Factor Analysis Combined with Contribution Rate of Variance[J]. *Int J Bus Manag*, 2011, 6(1): 61.
[23] KYRIAZOS T, POGA M. Dealing with multicollinearity in factor analysis: the problem, detections, and solutions[J]. *Open J Stat*, 2023, 13(3): 404 - 424.
[24] 李振雨, 周湘媛, 马懿飞, 等. 基于 UPLC 指纹图谱和多指标成分定量的不同产地白茅根标准汤剂质量评价研究[J]. 天然产物研究与开发, 2022, 34(11): 1900 - 1910.
[25] 杨诗婷, 王晓倩, 廖广辉. 金丝桃苷的药理作用机制研究进展[J]. 中国现代应用药学, 2018, 35(6): 947 - 951.
[26] 赵明宇. HPLC-DAD 法同时测定罗布麻中 4 种黄酮类成分含量[J]. 亚太传统医药, 2017, 13(3): 35 - 37.
[27] 何民友, 段志文, 杨洁, 等. 基于 UPLC 指纹图谱及 2 种化学成分含量测定的月季花质量分析[J]. 天然产物研究与开发, 2022, 34(9): 1455 - 1464.
[28] 陈鲁宁, 胡扬, 辛国松, 等. 菟丝子化学成分、药理作用研究进展及其质量标志物(Q-Marker)预测[J]. 中草药, 2024, 55(15): 5298 - 5314.
[29] 方慧祥, 杨坤芬, 冯玉茹. RP-HPLC 法测定补肾强身片中金丝桃苷的含量[J]. 中国药房, 2015, 26(3): 413 - 415.

编辑:刘卓越/接受日期:2025 - 08 - 28