

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫 ☒ 成果報告
☐ 期中進度報告

近紅外光技術應用於穿山甲中藥成份之檢測

Identification and Quantitation Assays for Chinese Medicines
Containing Pangolin Scales Using Near Infrared Spectroscopy

計畫類別：☒ 個別型計畫 ☐ 整合型計畫

計畫編號：NSC 91-2313-B-002-345

執行期間：91 年 08 月 01 日 至 92 年 07 月 31 日

計畫主持人：陳世銘

共同主持人：

計畫參與人員：黃竣吉、楊翕雯、陳加增

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)：☒ 精簡報告 ☐ 完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

- ☐ 赴國外出差或研習心得報告一份
- ☐ 赴大陸地區出差或研習心得報告一份
- ☐ 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
- ☐ 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、
列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

☐ 涉及專利或其他智慧財產權，☐ 一年 ☐ 二年後可公開查詢

執行單位：國立臺灣大學生物產業機電工程學系

中 華 民 國 92 年 10 月 22 日

近紅外光技術應用於穿山甲中藥成份之檢測

陳世銘、黃竣吉、楊翕雯、陳加增

國立臺灣大學生物產業機電工程學系

摘 要

本研究利用近紅外光檢測技術，針對以穿山甲鱗片粉為主方之四種中藥處方進行光譜掃描，建立中藥成份檢測之近紅外光定性及定量分析模式，並建立光譜資料庫以進行成份鑑定比對。以波長空間之相關性、波長空間之最大距離、主成份空間之馬氏距離與主成份空間之殘差變異等四種定性模式搭配馬氏距離、最大距離及隨機分組之三種分組方式進行分析。定量分析之研究以多重線性迴歸及部份最小平方迴歸等兩種模式來進行探討。結果顯示，在定性分析方面，同一處方之不定比例背景成份分析中，以主成份空間之殘差變異定性模式搭配最大距離分組方式，所得之最佳辨識成功率為 100%，其辨識最高精度為 1%。四種處方之不同背景混合處方分析中，以主成份空間之殘差變異定性模式搭配隨機分組方式，可達到 86%~96%之辨識成功率，並具有 2%之微量檢測精度。在定量分析方面，以部份最小平方迴歸之定量模式進行分析，最佳分析結果顯示， r_c^2 可達 0.999，其校正標準誤差 SEC 為 0.082。

【關鍵詞】：近紅外光、檢測模式、中藥、穿山甲

Identification and Quantitation Assays for Chinese Medicines Containing Pangolin Scales Using Near Infrared Spectroscopy

Suming Chen, Chun-Chi Huang, Ci-Wen Yang, Chia-Tseng Chen

Dept. of Bio-industrial Mechartronics Engineering
National Taiwan University.

ABSTRACT

Near Infrared (NIR) Spectroscopy was used to scan Chinese medicines containing pangolin scales; identification and quantitation models were developed, and a library of NIR spectra was constructed. Four prescriptions of Chinese medicines taking pangolin scales as the principal constituent were examined in this study. Identification analyses were conducted by using correlation in wavelength space (CWS), maximum distance in wavelength space (MDWS), Mahalanobis distance in principal components space (MDPCS) and residual variance in principal components space (RVPCS); and three grouping schemes were investigated: Mahalanobis Distance (MhD), Maximum Distance (MD) and Random Selection (RS). Two models including multiple linear regression (MLR) and partial least square regression (PLSR) were used in quantitation analyses. The best qualitative results indicated that RVPCS model with MD grouping scheme reached a discrimination rate of 100% with 1% accuracy in the randomly assigned background constituents of the same prescription, and RVPCS model with RS grouping scheme gave a discrimination rate of 86% ~ 96% with 2% accuracy in the randomly assigned background constituents of 4 mixed prescriptions. The best quantitative result indicated that PLSR model reached a determination coefficient of 0.999 with standard error of calibration (SEC) of 0.082.

Keywords : Near infrared, Inspection models, Chinese medicine, Pangolin

一、前言

中藥的療效近年來已被越來越多的國家和人們所認同與接受，因此對於中藥成份的分析與品質的檢測之重要性，也更受到重視。近年來近紅外光檢測技術在配藥學、食品工業、農產加工上，無論是定性或定量上都有不錯的應用成果，其主要原因在於近紅外光檢測技術屬於非破壞性檢測，且光譜包含被測物成份之全部吸收光譜資訊。近紅外光和傳統之化學分析方法相比，除了屬於非破壞性檢測技術外，亦具有分析速度快之顯著優越性。

近紅外光檢測技術在農業、食品之應用方面，區與陳(1992)研究以近紅外光技術分析茶之品質；Yano et al. (1997)以近紅外光技術預測米醋發酵過程中乙醇與醋酸的濃度；張與陳(1999)則以近紅外光技術分析奶粉中乳脂肪之含量。Chang et al. (1998)、陳等人(1998)、邱(1999) 以及陳(2001) 則利用近紅外光技術檢測水果之糖酸度。王等人(2001)應用近紅外光技術進行水產飼料之品管。近紅外光檢測技術在醫療、藥品之應用方面，Valyi-Nagy et al. (1997)應用近紅外光技術測定血液中血紅蛋白之含量。Blanco et al. (1999)以及 Kramer and Ebel (2000)以近紅外光方式分析藥品之組成；Plugge and Vlies(1996)利用近紅外光技術改善藥品之製造品質；Candolfi et al. (1999)則探討利用近紅外光光譜及使用不同的光譜處理於辨識藥品成份之分析。

中藥處方之成份包含有動物、植物、礦物等，由於生態之變化以及人類對自然之超限利用，部份中藥處方的成份已屬於保育類野生動物。以穿山甲為例，已被指定為「保育類野生動物」，屬於珍貴稀有野生動物(臺北市政府建設局，2000)，保育類野生動物之活體及產製品都有其保護之相關規定。然而，穿山甲在中藥處方中具有搜風、通絡、活血、消腫、潰癰、下乳汁等藥效，並主治風寒濕痺、癰腫瘡毒、乳汁不通等症(許，1977；謝，1987)。穿山甲並可以搭配其他藥材，成為有醫療效果的處方，歐與張(1997)提到有四種處方，分別為仙方活命飲、托裏定痛湯、復元活血湯及透膿散，具有清熱解毒、祛瘀定痛、疏肝通絡、補氣補血等。因此，穿山甲之獵捕及非法進口仍然時有所聞。而目前在中藥檢測技術方面，多半利用高效液相層析儀，進行藥材或處方上之鑑別及含量測定(劉，1996)。另外，謝王(1992)提到利用薄層層析法，對藥材抽出物進行分離，所得之斑點圖譜可作為藥材成份之定性分析，並藉由斑點濃淡之檢視，略估含量之多寡。上述方法，樣品準備及分析時效都無法和近紅外光技術相比，而且最近幾年近紅外光技術已開始應用於西藥成份檢測及配藥之領域，本研究將採用近紅外光技術應用於中藥成份之檢測，先以穿山甲中藥為首要對象，一方面藉以建立中藥成份之定性與定量檢測模式，另一方面期能達到保護野生動物的目的。因此

本研究目的為：(1) 利用近紅外光技術，藉由吸收光譜上之特徵，應用光譜分析之統計方法與模式，建立中藥檢測之近紅外光定性與定量模式。(2) 利用上述建立之定性與定量模式，針對中藥成份中之台灣穿山甲鱗片粉，建立光譜資料庫以進行成份鑑定比對，期能達到保護野生動物的目的。

二、實驗材料與方法

一般中藥方劑都為複方，亦即除了主成份外，尚有藥引等搭配之背景成份，本研究針對含有穿山甲成份（一般為其鱗片粉，圖 1）之四種中藥處方進行研究，穿山甲樣本將由台北市動物園提供。由於成份鑑定之應用，須針對未知樣本進行檢測，所建立的定性與定量檢測模式必須有能力區分在各種背景成份情況下之穿山甲鱗片粉含量。因此背景成份之實驗設計分為定比例背景成份（相同背景成份）、不定比例背景成份（相同背景成份）及不同背景成份等三種組合（三個階段）情況，而檢測模式則針對定性模式（分成三個階段）與定量模式（綜合樣本，不分階段）分別建立。

（一）實驗材料

本研究所採用之中藥樣本分成兩部分，第一部份為相同背景成份與穿山甲鱗片粉。第二部份為不同背景成份與穿山甲鱗片粉。第一部份中，所採用之中藥處方為透膿散（Powder for Letting-Out-Pus, PLOP），背景成份由黃耆、當歸、川芎、穿山甲、皂角刺等所組成。第二部分，所採用之中藥處方為透膿散、復元活血湯（Decoction for Restoration, DR）、仙方活命飲（Miraculous Decoction for Local Infection, MDLI）與托裏透膿湯（Decoction for Pus Drainage, DPD）。復元活血湯之組成包含柴胡、花粉、當歸、穿山甲（炮）、大黃（酒浸）、桃仁（去皮尖）、紅花、甘草、米酒（適）。仙方活命飲，由銀花、橘皮，白芷、浙貝、防風、赤芍、當歸尾、甘草、穿山甲（炙）、花粉、皂角刺、乳香、沒藥所組成。而托裏透膿湯由當歸、黨參、生黃耆、白朮（土炒）、穿山甲（炒）、白芷、升麻、甘草節、皂角刺、青皮、米酒等組成（歐與張，1997）。以上各處方則由中藥房協助配製。

（二）光譜實驗設備

實驗設備使用 FOSS NIRS 6500 型分光光度計，主要光譜範圍從 400 nm 至 2500 nm，其量測所得光譜間距為 2 nm，故量測一個樣本即可得到 1050 個資料值。使用 NIRS 6500 時，搭配樣本自動傳送配件以量測粉末樣本，其光譜量測方

式為入射光自出口細縫直接照射至圓形樣本容器，入射光的部份頻譜能量會被容器內之待測物吸收，並反射至光感測器。實驗所得之光譜採用二次微分（Gap：10nm，Segment：0nm），並以去勢法（degree 0）進行光譜前處理（黃，2001）。處理後之光譜採用光譜軟體 Vision 進行定性分析，並利用光譜軟體 WinISI 進行定量分析。

（三）量測方法

所配製之中藥樣本皆需進行重複量測，以下為量測中藥樣本之近紅外光光譜之詳細步驟：

- （1）將粉末狀中藥材（須先將中藥材乾燥後進行研磨）利用精密天秤進行配置，得到混合粉末樣本。
- （2）將混合粉末用玻璃樣本罐承裝，並使之均勻混合。
- （3）開始進行反射光譜量測前，必須先確定儀器本身之效能測試，共分為感測器之訊號測試、光譜準確性之測試和光譜再線性測試，熱機時間約需 30 分鐘，待機器穩定後通過全部之測試才可開始準備量測樣本之反射光譜。
- （4）開始量取各別樣本之反測光譜，把樣本放入 Standard Sample Cup 內，並將粉末壓實於石英片上，利用 NIR 6500 樣本自動傳送配件測量 400 nm～2500 nm 之吸收光譜。
- （5）當完成一次樣本反射光譜擷取後，必須將 Standard Sample Cup 內之粉末完全移置樣本罐內，保持 Standard Sample Cup 內之清潔，使下次量測時不受到影響。
- （6）若量測相同中藥樣本時，將樣本罐內之粉末均勻混合，以得到隨機樣本，使所取得之光譜可完全代表樣本資訊。
- （7）換上不同之樣本，重覆以上 4、5、6 步驟。

三、模式分析

先針對中藥樣本進行定性分析，判定中藥樣本是否含有穿山甲鱗片粉，接著再以定量分析測定中藥樣本之穿山甲鱗片粉重量百分比含量。

（一）定性分析

第一階段針對同一處方（透膿散）的定比例背景成份之情況，配置不含穿山甲鱗片粉之樣本與含各種濃度比例之穿山甲鱗片粉樣本（表 1），由表 1 顯示，共 10 個樣本（10 種比例），0%之樣本進行 20 次重複光譜量測，取得 20 條光譜，

其餘樣本進行 10 次重複量測，共得 90 條光譜，研究利用定性分析可達到之辨識成功率，並探討其檢測精度。

第二階段針對同一處方（透膿散）的不定比例背景成份之情況，配置不含穿山甲鱗片粉之樣本與含各種濃度比例之穿山甲鱗片粉樣本（表 2），由表 2 顯示，共 11 個樣本（11 種比例），0%之樣本進行 20 次重複光譜量測，取得 20 條光譜，其餘樣本進行 10 次重複量測，共得 100 條光譜，研究利用定性分析可達到之辨識成功率，並探討其檢測精度。

第三階段針對四種處方（透膿散、復元活血湯、仙方活命飲與托裏透膿湯）之不同背景成份之情況，配置不含穿山甲鱗片粉之樣本與含各種濃度比例之穿山甲鱗片粉樣本（表 3），由表 3 顯示，共 4 種處方，每種處方各具有 3 種比例，共 12 個樣本，皆進行 10 次光譜量測，共取得 120 條光譜，研究利用定性分析可達到之辨識成功率，並探討其檢測精度。

在定性分析研究中，採用的數學模式包括波長空間之相關性（Correlation in Wavelength Space, CWS）、波長空間之最大距離（Maximum Distance in Wavelength Space, MDWS）、主成分空間之馬氏距離（Mahalanobis Distance in Principal Components Space, MDPCS）與主成分空間殘差變異（Residual Variance in Principal Components Space, RVPCS）等四種定性模式，並搭配三種分組方式：馬氏距離（Mahalanobis Distance, MhD）、最大距離（Maximum Distance, MD）及隨機方式（Random Selection, RS）三種分組方式，其原理分述如下（Vision User's Manual, FOSS NIRSystems, 2000）。

1. 原始光譜分析

（1）波長空間之最大距離（MDWS）

計算光譜之最大波長距離，先根據式（1）求出擴大標準差光譜 S_i^d （inflated standard deviation），再由式（2）計算出最大距離 D_x 。

$$S_i^d = \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2(n-1)}} \right) \left(\frac{\sum_j (x_j - \bar{x}_j)^2}{n-1} \right)^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (1)$$

$$D_x = \max \left[\text{abs} \left(\frac{y_i - \bar{x}_i}{S_i^d} \right) \right]_{\text{overall } i} \dots\dots\dots (2)$$

其中 S_i^d 為擴大標準差， n 為樣本個數， x_j 為樣本在特定波長的光譜值， $\bar{x}_j$ 為特定波長之平均光譜值， y_i 為各別樣本之光譜值， D_x 為最大距離。

(2) 波長空間之相關性 (CWS)

計算光譜間之相關性 D_c ，藉此一指標去鑑別光譜類別。

$$D_c = \frac{\sum_i x_i y_i}{\sqrt{\sum_i x_i^2 \sum_i y_i^2}} \dots\dots\dots (3)$$

其中 x_i 為樣本群組之光譜值， y_i 為另一樣本群組之光譜值。

2. 主成份光譜分析

此數學模式將原來光譜應用主成份分析 (Principal Component Analysis)，可將光譜中多餘資訊 (Redundancy) 去除，例如雜訊；並將光譜之獨特資訊突顯出來。在數學上，主成份分析為利用計算訓練組光譜之對角協方差矩陣 (Covariance Matrix) 的特徵向量式 (4)。

$$C = EDE^{-1} \dots\dots\dots (4)$$

其中， C 為協方差矩陣， E 為特徵向量矩陣， D 為平方對角特徵值矩陣，此特徵向量和訓練組光譜有一樣的長度，並且有直角正交，從此性質可得到式 (5)。

$$E^{-1} = E^T \dots\dots\dots (5)$$

有很多的演算法能使用在矩陣特徵值的分解，這些演算法應用在訓練組光譜之中間平均值，計算出含有結合特徵值之特徵向量，且特徵向量以遞減方式排列特徵值。

如果所有的特徵向量都包含在主成份模式 (PC model) 內，訓練組的變異性累加比例為 100%。在一般情況下，只累加主要成份的變異性，及僅含有少數的 PCs，而未累加之主成份，稱為次要成份，為光譜中之雜訊。一個累積變異性可由式 (6) 表示。

$$V_c = \frac{\sum_{i=1}^m \lambda_i^2}{\sum_{i=1}^{N-1} \lambda_i^2} \dots\dots\dots (6)$$

其中， V_c 為累積變異性 (%)， m 為主成份數目， λ_i 特徵向量所對應的第 i 個特徵值， N 為訓練組光譜數。

主成份可利用新的直角座標軸解釋，將光譜中特徵向量值域的值做乘法運算，如式 (7)，其中 s 為其得分值 (Score)， A 為原光譜值。

$$s = AE \quad \dots\dots\dots (7)$$

利用式 (8) 可將分析後的主成份重建為簡化光譜。

$$A_r = sE^T \quad \dots\dots\dots (8)$$

(1) 主成份空間之殘差變異 (RVPCS)

將光譜進行主成份分析後，得到了重建光譜 A_r ，與原光譜 A 相減，得到殘差光譜 R ，並可利用式 (9) 求出殘差光譜之變異數 V_R ，此變異數即為一種定性的指標。

$$V_R = R^T R \quad \dots\dots\dots (9)$$

(2) 主成份空間之馬氏距離 (MDPCS)

將光譜進行主成份分析，並計算其馬氏距離，如式 (10)，亦為一種定性分析的指標。

$$D_M = (A - \mu)^T C^{-1} (A - \mu) \quad \dots\dots\dots (10)$$

其中 D_M 為馬氏距離， A 為原光譜， μ 為平均光譜， C 為協方差光譜。

定性分析方法分成兩步驟，第一步驟為分組，第二步驟為分析。以定比例背景成份分析為例，如圖 2 所示，在分組階段中，定比例背景成份包括含穿山甲鱗片粉 (Y) 與不含穿山甲鱗片粉 (N) 之樣本光譜，分別對含穿山甲鱗片粉與不含穿山甲鱗片粉之樣本光譜進行分組，分成有效樣本與拒絕組樣本 (差異過大之樣本，而以 MhD 與 MD 分組方式才會產生拒絕組，以 RS 分組方式不會產生)，接著將有效樣本再分為訓練組與接受組，其中接受組為一般所謂的預測組。

在分析階段中，如圖 3 所示，將分組階段所得到的訓練組 yes (含穿山甲鱗片粉) 與訓練組 no (不含穿山甲鱗片粉) 作為定性模式的資料庫，藉由定性模式計算 Match Value 1 (Probability Level 1) 與 Match Value 2 (Probability Level 2)，其中 Match Value 為 MDWS 模式所採用之指標，而 Probability Level 為 CWS、MDPCS 及 RVPCS 模式採用之指標，找出適當的辨識門檻值 (Match Value 或 Probability Level)，此辨識門檻值的設定依據定性模式所計算出來之指標 (Match Value 與 Probability Level) 來設定，當進行定性模式計算時，會有分離分佈及混淆分佈兩種情況產生，以圖 4 (分離分佈) 及圖 5 (混淆分佈) 進行說明。圖 4 為兩類別 (含穿山甲鱗片粉及不含穿山甲鱗片粉) A、B 之比較，Match Value 1 為兩類別 A、B 與自己本身類別之指標 (A 對 A 計算指標，B 對 B 計算指標)，Match Value 2 為與另一組別之指標 (A 對 B 計算指標，B 對 A 計算指標)；計算結果屬於分離分佈時，將辨識門檻值設定於兩個 Match Value 1 的最大值 (或最

小值)與兩個 Match Value 2 的最小值(或最大值)之間,便可區別此兩類別,得到完全辨識,其中 Match Value 1 為類別 A 光譜與類別 A 平均光譜訓練組之指標和類別 B 光譜與類別 B 平均光譜訓練組之指標, Match Value 2 為類別 A 光譜與類別 B 平均光譜訓練組之指標和類別 B 光譜與類別 A 平均光譜訓練組之指標。當出現圖 5 之情況時,其 Match value 1 與 Match value 2 之分佈有重疊時,無法取得完全辨識之辨識門檻值,會出現無法 100%完全辨識。最後利用此定性模式搭配尋找出來的辨識門檻值針對接受組進行預測。

(二) 定量分析

定量分析之研究應用多重線性迴歸(Multiple Linear Regression, MLR)及部份最小平方迴歸(Partial Least Square Regression, PLSR)等兩種模式來探討並分析穿山甲中藥成份之檢測,建立檢量線及資料庫,分述如下(陳等人,1998)。

(1) 多重線性迴歸模式(MLR)

MLR 模式,即是利用一至數個波長的光譜吸收值以多重線性迴歸的方式來預測其待測成份(穿山甲含量),其校正方程式如式(11)所示,其中 C 為穿山甲含量之預測值(單位: %); k_0 、 k_i 為迴歸係數; X_{λ} 則是在波長 λ 時的光譜值,可以是 $\log(1/R)$ (原始吸收光譜)或 $D\log(1/R)$ (一次微分光譜)或 $D^2\log(1/R)$ (二次微分光譜)。MLR 乃是所有文獻中最常使用的檢測模式之一,最主要的原因是簡單、明確。

$$C = k_0 + \sum_{i=1}^n k_i X_{\lambda} \quad \dots\dots\dots (11)$$

(2) 部份最小平方差迴歸(PLSR)

PLSR 模式也是一種線性迴歸的方法,與 MLR 模式最大的不同點在於,MLR 所使用的資訊只是少數被選用的波長而已,而 PLSR 則是整段波長範圍內每一個波長的資訊均被使用。圖 6 中可以知道 PLSR 的運算過程,"光譜"(A)可以分解為評分矩陣(S, Score)及光譜因子矩陣(Fa, Spectral Factor)的乘積,而"待測成份"(C)亦分解成評分矩陣(U, Score)及成份濃度因子矩陣(Fc, Concentration Factor)兩部分,PLSR 運用了光譜與待測成份間既有的關係,因此在運算過程中,每當有新的因子(factor)加進來時,便將由光譜分解出來的評分矩陣(S)與由待測成份分解出來的評分矩陣(U)互換,再進行下一次運算,這一部分乃是 PLSR 較為複雜的運算過程。應用 PLSR 模式的時候,最重要的因素在於因子數(number of factor)的決定,當然愈多的因子數可以提供整個系統愈多的資訊,可是太多的因子數也會造成系統過度的訓練(overfit),因為最先加入系統的因子數乃是對系統影響最

大的參數，愈到後來才加入的因子極有可能只是系統的雜訊干擾。

四、結果與討論

(一) 定性分析

1. 定比例背景成份分析

在此先尋找最高檢測精度。將含穿山甲鱗片粉之光譜(10%)與不含穿山甲鱗片粉之光譜(0%)利用定性模式進行分析，觀察是否能得到分離分佈，若可以達到，接著進行8%與0%之光譜定性模式分析，若可一直分析為分離分佈，變可將含穿山甲鱗片粉之含量降低，以此類推。實際進行分析結果顯示，將1%與0%之光譜進行定性模式分析，可得到分離分佈，代表定性模式可區分1%與0%之光譜，故最高檢測精度為1%。

定比例背景成份分析結果由表4顯示，將定比例背景成份類別no(不含穿山甲鱗片粉)與類別yes(含穿山甲鱗片粉)以MhD、MD及RS分組方式分組，並利用CWS、MDWS、MDPCS與RVPCS四種定性模式進行分析。在此先定義辨識成功率(Pass%，P%)之計算方式，如式(12)所示，其中，Pass個數為辨識成功之個數，Fail個數為辨識失敗之個數。

$$P\% = \frac{\text{Pass 個數}}{\text{Pass 個數} + \text{Fail 個數}} \dots\dots\dots (12)$$

在三種分組方式(MhD、MD及RS)下，CWS定性模式皆無法取得分離分佈，由此可推測CWS模式不適合應用在定比例背景成份分析，雖MDWS及MDPCS模式可得到較CWS模式好的辨識成功率，但分析結果依然為混淆分佈。當以RVPCS模式進行分析搭配MhD、MD及RS三種分組方式時，結果皆顯示為混淆分佈，但皆為較好之結果(相對於CWS、MDWS及MDPCS模式)，而以RVPCS模式搭配MhD分組方式，並辨識門檻值(Probability Level)設為0.8751時，混淆樣本光譜數目為最少，可得到定比例背景成份分析之最佳辨識結果：類別no之訓練組辨識成功率為100%，接受組辨識成功率為100%，類別yes之訓練組辨識成功率為98%，接受組辨識成功率為92%。

由定比例背景成份分析結果可得知，當背景成份不改變，僅改變主要成份(穿山甲鱗片粉)時，可分辨有無含有穿山甲鱗片粉的辨識成功率達到九成以上(不含穿山甲鱗片粉之訓練組辨識成功率為100%，接受組辨識成功率為100%，含穿山甲鱗片粉之訓練組辨識成功率為98%，接受組辨識成功率為92%)，而辨識之最高精度達1%，代表當中藥為已知背景成份時，且為定比例之配方，含有1%

的穿山甲鱗片粉時，就可以檢測出中藥含有穿山甲鱗片粉（RVPCS 模式之定性模式搭配 MhD 分組方式），但有時會有誤判的情況（因含穿山甲鱗片粉之訓練組與接受組辨識成功率未達 100%，僅為 98%與 92%）。

2. 不定比例背景成份分析

利用與定比例背景成份分析尋找最高精度之相同方式進行分析，結果顯示最高檢測精度為 1%。由表 5 得知，CWS 模式搭配三種分組方式，皆得到混淆分佈，故 CWS 模式亦無法應用於不定比例背景成份分析。而 MDWS、MDPCS 及 RVPCS 模式搭配三種分組方式進行分析，皆可得到較定比例背景成份分析好的結果，其中，以 RVPCS 模式搭配 MD 分組方式，並設定辨識門檻值為 0.9，所得到之結果最佳，在含穿山甲鱗片粉光譜與不含穿山甲鱗片粉光譜之訓練組與接受組分析中，皆達 100%之辨識成功率；另一種組合，以 MD 分組方式，利用 MDPCS 模式搭配辨識門檻值 0.947，也得到不錯的結果，在不含穿山甲鱗片粉光譜中，訓練組辨識成功率為 100%，接受組辨識成功率為 88%，含穿山甲鱗片粉光譜中，訓練組辨識成功率為 100%，接受組辨識成功率為 100%。

在此階段探討不定比例之背景成份對於辨識中藥中是否含有穿山甲鱗片粉的影響，經由分析結果顯示，在定比例背景成份分析雖具有高的辨識成功率，但還不能達到完全 100%之辨識成功率。而在不定比例背景成份中，可達到 100%之辨識成功率，可能原因在於不定比例背景成份加強了穿山甲鱗片粉含量變化所造成在光譜上的差異性，使得不定比例背景成份之中藥光譜間變異性增加，分組出來之訓練組能包含所有樣本光譜之變異，故能得到 100%之辨識成功率。

另外，在不定比例背景成份階段中，由結果顯示，雖然背景成份為不成比例，以亂數配置，但對於主成份（穿山甲鱗片粉）濃度的改變時，可達到 100%的辨識成功率，且有 1%微量之辨識精度，換句話說，中藥配方中，已知背景成份，但不知其配置比例，當含有 1%之穿山甲鱗片粉時，可精準地辨識出來，不會有誤判，有 100%的辨識成功率。

3. 不同背景成份分析

（1）個別處方分析

將不同背景成份之個別處方以 MDWS 模式搭配 MhD、MD 及 RS 分組方式進行定性分析，結果如表 6 所示（在此僅列出 MDWS 模式分析結果，因 CWS、MDPCS 及 RVPCS 模式無法得到 100%之辨識成功率（黃，2001）），可發現在 MD 分組方式下，處方一（透膿散，1no）、處方二（復元活血湯，2no）及處方三（仙方活命飲，3no）沒有接受組，因為此三種處方所配製之中藥樣本光譜變

異太小，且各種處方之光譜分佈分散，無法與其他類別（4no、1yes、2yes、3yes、4yes）使用一樣的門檻值（Match Value）分訓練組及接受組。

針對不同背景個別處方分析，得到結果顯示，以 MDWS 模式搭配 MhD（辨識門檻值設定為 10.5）、MD（辨識門檻值設定為 5.23）及 RS（辨識門檻值設定為 11.825）分組方式，可尋找出完全辨識（辨識成功率皆為 100%）之定性模式。雖然在定比例與不定比例背景成份階段所得到結果為當含有 1%之微量穿山甲鱗片粉時，就可以檢測出來，而在本階段，對於不同背景成份之樣本光譜，對於尋找最高檢測精度之分析，經由實驗結果顯示，最高檢測精度為 2%，而對於不同背景成份之個別處方分析，可達到 100%的辨識成功率，換句話說，對於中藥檢測之對象物，雖然不知道其背景成份，如果對象物含有 2%的穿山甲鱗片粉，藉由四種處方資料庫個別針對中藥對象物進行檢測，可檢測出此中藥是否含有穿山甲鱗片粉，其辨識成功率為 100%，且對於不含穿山甲鱗片粉時也不會誤判為含有穿山甲鱗片粉。

（2）混合處方分析

由表 7 顯示，此階段在四種定性模式搭配三種方組方式分析時，皆無法達到分離分佈。其中，當以 RS 分組方式、RVPCS 模式進行分析，搭配預設辨識門檻值（Probability Level）為 0.84 所得分析結果為最好，在不含穿山甲鱗片粉中，訓練組辨識成功率為 88%，接受組辨識成功率為 86%，含穿山甲鱗片粉樣本中，訓練組辨識成功率為 96%，接受組辨識成功率為 93%，其最高檢測精度為 2%（與個別處方分析相同）。

在不同背景成分混合處方分析，探討不同背景成分對於定性模式的影響，當將個別處方之不含穿山甲鱗片粉之樣本光譜歸為同一類別 no，會使得此類別之內部差異性增加，另一類別 yes 亦是同樣的結果，當兩個類別之範圍過大時，會有互相重疊的情況產生（混淆分佈），此為會造成誤判的原因。

（二）定量分析

定量分析主要在於檢測中藥樣本之穿山甲鱗片粉含量（重量百分比），故僅針對含有穿山甲鱗片粉之中藥樣本進行定量分析。

利用 WinISI 分析軟體，藉由進行最佳光譜前處理、最佳光譜波段選取，所有中藥樣本之穿山甲鱗片粉含量最大值為 14%，最小值為 1%，平均值為 5.34%，標準差為 3.34%，共 26 個樣本（260 條光譜），並設定校正樣本與預測樣本個數比例為 1：1。

1. MLR 模式分析

利用 MLR 模式進行定量分析，其分析結果如表 8 所示，若以原始光譜進行分析，當採用 1892、1974、1998、2138、2158 及 2376nm 等六組近紅外光波長時，可達到不錯的結果 ($r_c^2 = 0.996$, $SEC = 0.214$, $RSEC\% = 8.12\%$, $r_p^2 = 0.995$, $SEP = 0.226$, $RSEP\% = 8.09\%$, $RPD = 14.8$)，若以一次微分光譜進行分析，當採用 1684、1726、1800、1846、2140 及 2150nm 時，可得到 $r_c^2 = 0.996$, $SEC = 0.207$, $RSEC\% = 7.35\%$, $r_p^2 = 0.996$, $SEP = 0.224$, $RSEP\% = 7.73\%$, $RPD = 15.0$ 之結果，顯示一次微分有助於穿山甲鱗片粉之定量分析。

在二次微分光譜分析中，若只選用 2164nm 時，可得到不錯的結果 ($r_c^2 = 0.960$, $SEC = 0.671$, $r_p^2 = 0.957$, $SEP = 0.691$, $RPD = 4.85$)，具有實用價值，而此結果也說明了 2164nm 為穿山甲鱗片的特徵吸收波長。

而在 MLR 模式分析中，以二次微分光譜搭配選擇 1348、1366、1716、1956、2164 及 2186nm 等六組近紅外光波長時，所得到之結果最佳， $r_c^2 = 0.997$, $SEC = 0.186$, $RSEC\% = 5.20\%$, $r_p^2 = 0.997$, $SEP = 0.196$, $RSEP\% = 6.44\%$, $RPD = 17.1$ 。

2. PLSR 模式分析

利用 PLSR 模式進行定量分析，其結果如表 9 所示，無論在原始光譜、一次微分及二次微分之光譜搭配近紅外光波段 (1100nm ~ 2498 nm) 或全光譜波段 (400nm ~ 2498nm)，都可達到不錯之結果，其中以一次微分光譜搭配 1100nm ~ 2498nm 所得結果為最佳， $r_c^2 = 0.999$, $SEC = 0.082$, $RSEC\% = 3.31\%$, $r_p^2 = 0.997$, $SEP = 0.179$, $RSEP\% = 5.74\%$, $RPD = 18.7$ ，能準確檢測出中藥樣本之穿山甲鱗片粉含量 (重量百分比)。

五、結 論

本研究成功建立中藥檢測之近紅外光定性與定量檢測模式，具有判定中藥中是否含有穿山甲鱗片粉之能力，並可檢測穿山甲鱗片粉在中藥中之重量百分比含量。

在定性分析方面，在定比例背景成份中，以馬氏距離 (MhD) 分組方式，建立主成份空間之殘差變異定性模式 (RVPCS) 搭配辨識門檻值 (Probability Level) 0.8751 時，所得結果最佳，不含穿山甲鱗片粉類別之訓練組與接受組皆達到 100% 成功辨識，而含穿山甲鱗片粉類別之訓練組與接受組之辨識成功率分別為 98% 與 92%，辨識最高精度達 1%。

在不定比例背景成份中，以最大距離 (MD) 分組方式，採用主成份空間之殘差變異定性模式 (RVPCS) 搭配辨識門檻值 (Probability Level) 0.9 所得結果

最佳，不含穿山甲鱗片粉類別與含穿山甲鱗片粉類別之訓練組與接受組皆達到100%辨識成功率，其辨識最高精度達1%。

在不同背景成份之個別處方分析中，以馬氏距離 (MhD)、最大距離 (MD) 及隨機 (RS) 分組方式進行分組，建立在波長空間之最大距離定性模式 (MDWS) 搭配辨識門檻值 (Match Value) 分別為 10.5、5.23 及 11.825 皆能對八個類別 (1no、2no、3no、4no、1yes、2yes、3yes 及 4yes) 有 100% 的辨識成功率，辨識最高精度達 2%。

在不同背景成份之混合處方分析中，以隨機 (RS) 分組方式，建立在主成份空間之殘差變異定性模式 (RVPCS) 搭配辨識門檻值 (Probability Level) 0.84 可達到最佳結果，不含穿山甲鱗片粉類別之訓練組與接受組辨識成功率分別為 88% 與 86%，含穿山甲鱗片粉類別之訓練組與接受組辨識成功率分別為 96% 與 93%，辨識最高精度達 2%。

在定量分析方面，利用 MLR 模式進行定量分析，以二次微分光譜之分析結果最佳， $r_c^2 = 0.997$ ， $SEC = 0.186$ ， $RSEC\% = 5.20\%$ ， $r_p^2 = 0.997$ ， $SEP = 0.196$ ， $RSEP\% = 6.44\%$ ， $RPD = 17.1$ ，建立極準確之定量模式。

利用 PLSR 模式進行定量分析，以一次微分光譜搭配 1100nm ~ 2498nm 所得結果為最佳， $r_c^2 = 0.999$ ， $SEC = 0.082$ ， $RSEC\% = 3.31\%$ ， $r_p^2 = 0.997$ ， $SEP = 0.179$ ， $RSEP\% = 5.74\%$ ， $RPD = 18.7095$ ，能準確檢測出中藥樣本之穿山甲鱗片粉含量 (重量百分比)。

利用上述建立之定性與定量模式，針對中藥成份中之台灣穿山甲鱗片粉，可準確檢測中藥中是否含有穿山甲鱗片粉，期能達到保護野生動物的目的。

六、致 謝

本研究承蒙國科會計畫經費之補助 (計畫編號：NSC 91-2313-B-002-345) 與台北市立動物園提供之穿山甲鱗片粉，謹致謝忱。同時也感謝台灣大學生物產業機電工程學系 405 實驗室工作夥伴之協助與幫忙。

七、參考文獻

1. 王文政、藍惠玲、葉蕙玲。2001。近紅外光譜於水產飼料鑑別之應用。出自“近紅外光技術應用於農畜產品品質檢測訓練班及研討會論文集”，P. O1-8。台北：財團法人農業機械化研究發展中心。

2. 台北市政府建設局。2000。野生動物保育法及相關法令彙編。台北：行政院農業委員會。
3. 邱鶴園。1999。近紅外光應用於芒果內部品質分析之研究。碩士論文。台北：國立台灣大學農業機械工程學所。
4. 陳世銘、張文宏、謝廣文。1998。果汁糖度檢測模式之研究。農業機械學刊 7 (3)：41 - 60。
5. 陳加增。2001。近紅外光應用於水果糖酸度線上檢測之研究。碩士論文。台北：國立台灣大學農業機械工程學所。
6. 許鴻源。1977。動物性中藥之研究。臺北：國立中國醫藥研究所出版。
7. 區少梅、陳玉舜。1993。近紅外線分光技術鑑定茶品質之研究。中國農業化學會誌。31 (2)：183 - 199。
8. 張嘉麟、陳世銘。1999。近紅外光與核磁共振應用於乳粉脂肪含量之檢測。農業機械學刊 8(3):43-59。
9. 黃竣吉。2001。近紅外光技術應用於中藥成份之檢測。學士論文。台北：國立台灣大學生物產業機電工程學系。
10. 黃竣吉、陳世銘、陳加增、楊翕雯。2001。近紅外光技術應用於中藥成分之檢測。出自“九十年農業機械論文發表會論文摘要集”，226-227。台北：中華農業機械學會。
11. 歐明、張駿。1997。實用中醫處方手冊。臺北：旺文社股份有限公司。
12. 劉芳淑等。1996。中藥檢驗方法專輯(九) 中藥濃縮製劑指標成分定量方法。臺北：衛生署藥檢局。
13. 謝王昭昭等。1992。中藥檢驗方法專輯(五) 製劑薄層層析法。臺北：衛生署藥檢局。
14. 謝明村。1987。中國藥材學。臺北：國立編譯館出版。
15. _____. 1997. PLSplus/IQ User's Guide. Salem, NH, U.S.A. : Galactic Industries Corporation.
16. Blanco, M., A. Eustaquio, J. M. Gonzalez and D. Serrano. 1999. Identification and quantitation assays for intact tablets of two related pharmaceutical preparations by reflectance near-infrared spectroscopy : validation of the procedure. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 22 : 139-148.
17. Candolfi, R. De Maesschalck, D. Jouan-Rimbaud, P. A. Hailey, D. L. Massart. 1999. The influence of data pre-processing in the pattern recognition of excipients near-infrared spectra. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis 21 : 115-132.

18. Chang, W. H., S. Chen, and C. C. Tsai. 1998. Development of a universal algorithm for use of NIR in estimation of soluble solids in fruit juices. *Transactions of the ASAE* 41(6):1739-1745.
19. FOSS NIRSystems. 1999. WinISI User's Manual. Silver Spring, MD, USA : FOSS NIRSystems.
20. FOSS NIRSystems. 2000. Vision User's Manual. Silver Spring, MD, USA : FOSS NIRSystems.
21. Huang, C. C., S. Chen and C. W. Yang. 2002. Determination of constituents in Chinese medicine using near infrared spectroscopy. In "Proceedings of International Symposium on Automation and Mechatronics of Agricultural and Bioproduction Systems", 375-381. Chiayi, Taiwan : National Chiayi University.
22. Kramer, K. and S. Ebel. 2000. Application of NIR reflectance spectroscopy for the identification of pharmaceutical excipients. *Analytica Chimica Acta* 420 : 155-161.
23. Plugge, W. C. and van der Vlies. 1996. Near-infrared spectroscopy as a tool to improve quality. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis* 14 : 891-898.
24. Valyi-Nagy, I., K. J. Kaffka, J. M. Jako, E. Gonczol and G. Domjan. 1997. Application of near infrared spectroscopy to the determination of haemoglobin. *Clinica Chimica Acta* 264 : 117-125.
25. Williams, P. C. and K. H. Norris. 1987. *Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries*. St. Paul, Minn. U.S.A.: American Association of Cereal Chemists.
26. Yano, T., T. Aimi, Y. Nakano and M. Tamai. 1997. Prediction of the Concentrations of Ethanol and Acetic Acid in the Culture Broth of a Rice Vinegar Fermentation Using Near-Infrared Spectroscopy. *Journal of Fermentation and Bioengineering* 84(5) : 461-465.

表 1 透膿散定比例背景成份之樣本配製表

樣本 \ 成份名稱	黃耆, g	當歸, g	川芎, g	皂角刺, g	穿山甲, g	穿山甲佔有比例	總重, g
1	5	5	5	5	2.22	10%	22.22
2	5	5	5	5	1.74	8%	21.74
3	5	5	5	5	1.51	7%	21.51
4	5	5	5	5	1.28	6%	21.28
5	5	5	5	5	1.05	5%	21.05
6	5	5	5	5	0.83	4%	20.83
7	5	5	5	5	0.62	3%	20.62
8	5	5	5	5	0.41	2%	20.41
9	5	5	5	5	0.20	1%	20.20
10	5	5	5	5	0.00	0%	20.00

表 2 透膿散不定比例背景成份之樣本配製表

樣本 \ 成份名稱	黃耆, g	當歸, g	川芎, g	皂角刺, g	穿山甲, g	穿山甲佔有比例	總重, g
1	6	5	4	3	2.00	10%	20
2	5	4	3	6	1.57	8%	19.57
3	4	3	6	5	1.35	7%	19.35
4	3	6	5	4	1.15	6%	19.15
5	3	4	5	6	0.95	5%	18.95
6	4	5	6	3	0.75	4%	18.75
7	5	6	3	4	0.56	3%	18.56
8	6	3	4	5	0.37	2%	18.37
9	5	4	3	2	0.14	1%	14.14
10	2	3	4	5	0	0%	14
11*	15	10	10	5	3	6.98%	43

註：*透膿散原處方之標準配方。

表 3 四種含穿山甲處方之不同背景成份樣本配製表

樣本	黃耆, g	當歸, g	川芎, g	皂角刺, g	穿山甲, g	比例	總重, g
1-1	7.5	5	5	2.5	1.5	6.98%	21.50
1-2	亂數配製, 共20g				0.41	2%	20.41
1-3	7.5	5	5	2.5	0	0%	20

樣本	柴胡, g	花粉, g	當歸, g	大黃, g	桃仁, g	紅花, g	甘草, g	穿山甲, g	比例	總重, g
2-1	5	5	5	5	5	3	1.5	5	14.49%	34.50
2-2	亂數配製, 共29.5g							0.60	0	30.10
2-3	5	5	5	5	5	3	1.5	0	0	29.50

樣本	銀花, g	橘皮, g	白芷, g	浙貝, g	防風, g	赤芍, g	當歸, g	甘草, g	花粉, g	皂角刺, g	乳香, g	沒藥, g	穿山甲, g	比例	總重, g
3-1	3.75	2.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	0.75	0.75	0.75	1.5	7.89%	20.50
3-2	亂數配製, 共19g												0.39	2%	19.39
3-3	3.75	2.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	0.75	0.75	0.75	0	0	19

樣本	當歸, g	黨參, g	黃耆, g	白朮, g	白芷, g	升麻, g	甘草, g	皂角刺, g	青皮, g	穿山甲, g	比例	總重, g
4-1	亂數配製, 共20g									2.22	10%	22.22
4-2	亂數配製, 共20g									0.41	2%	20.41
4-3	亂數配製, 共20g									0	0%	20

表 4 定比例背景成份之定性分析結果

MhD grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	12	0%	0	6	0%
	yes		0	54	0%	0	26	0%
MDWS	no	4+	8	4	67%	2	4	33%
	yes		53	1	98%	25	1	96%
MDPCS	no	0.84*	8	4	67%	4	2	67%
	yes		13	41	24%	4	22	15%
RVPCS	no	0.8751*	12	0	100%	6	0	100%
	yes		53	1	98%	24	2	92%
MD grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	12	0%	0	6	0%
	yes		0	45	0%	0	20	0%
MDWS	no	3.3+	11	1	92%	3	3	50%
	yes		45	0	100%	19	1	95%
MDPCS	no	0.84*	8	4	67%	3	3	50%
	yes		12	33	27%	7	13	35%
RVPCS	no	0.7865*	11	1	92%	6	0	100%
	yes		44	1	98%	18	1	90%
RS grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	13	0%	0	7	0%
	yes		0	60	0%	0	30	0%
MDWS	no	3.3+	13	0	100%	1	6	14%
	yes		52	8	87%	21	9	70%
MDPCS	no	0.84*	8	5	62%	4	3	57%
	yes		18	42	30%	9	21	30%
RVPCS	no	0.8*	13	0	100%	6	1	86%
	yes		59	1	98%	23	7	77%

註：*為 Probability Level，+為 Match Value。

表 5 不定比例背景成份之定性分析結果

MhD grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	15	0%	0	5	0%
	yes		0	55	0%	0	27	0%
MDWS	no	4+	7	8	47%	0	5	0%
	yes		55	0	100%	26	1	96%
MDPCS	no	0.84*	13	2	87%	5	0	100%
	yes		38	17	69%	16	11	59%
RVPCS	no	0.8776*	15	0	100%	3	2	60%
	yes		55	0	100%	26	1	96%
MD grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	13	0%	0	7	0%
	yes		0	52	0%	0	18	0%
MDWS	no	3.27+	13	0	100%	2	5	29%
	yes		51	1	98%	18	0	100%
MDPCS	no	0.947*	13	0	100%	7	0	100%
	yes		46	6	88%	18	0	100%
RVPCS	no	0.9*	13	0	100%	7	0	100%
	yes		52	0	100%	18	0	100%
RS grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	13	0%	0	7	0%
	yes		0	60	0%	0	30	0%
MDWS	no	3.24+	13	0	100%	1	6	14%
	yes		56	4	93%	27	3	90%
MDPCS	no	0.95*	13	0	100%	6	1	86%
	yes		50	10	83%	25	5	83%
RVPCS	no	0.924*	13	0	100%	3	4	43%
	yes		60	0	100%	28	2	93%

註：*為 Probability Level，+為 Match Value。

表 6 不同背景成份之個別處方定性分析結果

MDWS model								
Grouping Scheme	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
MhD	4yes	10.5+	13	0	100%	6	0	100%
	3yes		13	0	100%	7	0	100%
	2yes		13	0	100%	6	0	100%
	1yes		13	0	100%	6	0	100%
	4no		7	0	100%	3	0	100%
	3no		7	0	100%	3	0	100%
	2no		7	0	100%	3	0	100%
	1no		7	0	100%	3	0	100%
MD	4yes	5.23+	13	0	100%	7	0	100%
	3yes		13	0	100%	7	0	100%
	2yes		14	0	100%	5	0	100%
	1yes		15	0	100%	4	0	100%
	4no		8	0	100%	2	0	100%
	3no		10	0	100%	0	0	
	2no		10	0	100%	0	0	
	1no		10	0	100%	0	0	
RS	4yes	11.825+	13	0	100%	7	0	100%
	3yes		13	0	100%	7	0	100%
	2yes		13	0	100%	7	0	100%
	1yes		13	0	100%	7	0	100%
	4no		6	0	100%	4	0	100%
	3no		6	0	100%	4	0	100%
	2no		6	0	100%	4	0	100%
	1no		6	0	100%	4	0	100%

註：⁺為 Match Value。

表 7 不同背景成份之混合處方定性分析結果

MhD grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	25	0%	0	13	0%
	yes		0	53	0%	0	26	0%
MDWS	no	4+	7	18	28%	4	9	31%
	yes		53	0	100%	26	0	100%
MDPCS	no	0.84*	3	22	12%	1	12	8%
	yes		5	48	9%	3	23	12%
RVPCS	no	0.86*	22	3	88%	12	1	92%
	yes		52	1	98%	22	4	85%
MD grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	27	0%	0	12	0%
	yes		0	53	0%	0	27	0%
MDWS	no	4+	5	22	19%	5	7	42%
	yes		53	0	100%	27	0	100%
MDPCS	no	0.84*	5	22	19%	0	12	0%
	yes		6	47	11%	3	24	11%
RVPCS	no	0.85*	24	3	89%	9	3	75%
	yes		52	1	98%	21	6	78%
RS grouping scheme								
Model	Product	Threshold	Training			Acceptance		
			P	F	P%	P	F	P%
CWS	no	0.85*	0	26	0%	0	14	0%
	yes		0	53	0%	0	27	0%
MDWS	no	4+	8	18	31%	4	10	29%
	yes		53	0	100%	27	0	100%
MDPCS	no	0.84*	3	23	12%	2	12	14%
	yes		4	49	8%	1	26	4%
RVPCS	no	0.84*	23	3	88%	12	2	86%
	yes		51	2	96%	25	2	93%

註：*為 Probability Level，+為 Match Value。

表 8 MLR 模式之定量分析結果

log(1/R)								
Numbers of Wavelengths	Selected Wavelengths (nm)	Calibration Set (130)			Prediction Set (130)			
		r_c^2	SEC	RSEC, %	r_p^2	SEP	RSEP, %	RPD
1	2180	0.511	2.342	110.77	0.515	2.334	104.91	1.4
2	2194+2310	0.912	0.991	44.08	0.913	0.988	43.91	3.4
3	2160+2306+2140	0.987	0.381	17.22	0.986	0.391	17.85	8.6
4	2164+2302+2126+2290	0.991	0.312	11.89	0.991	0.318	11.31	10.5
5	2158+2302+2128+2296+2002	0.992	0.295	13.16	0.992	0.295	12.43	11.4
6	2158+2376+2138+1974+1998+1892	0.996	0.214	8.12	0.995	0.226	8.09	14.8
Dlog(1/R)								
Numbers of Wavelengths	Selected Wavelengths (nm)	Calibration Set (130)			Prediction Set (130)			
		r_c^2	SEC	RSEC, %	r_p^2	SEP	RSEP, %	RPD
1	2150	0.956	0.703	32.36	0.954	0.720	33.19	4.7
2	2150+1726	0.989	0.351	16.56	0.988	0.364	17.83	9.2
3	2150+1726+1550	0.992	0.301	10.64	0.992	0.307	13.23	10.9
4	2150+1726+1684+2140	0.994	0.256	8.41	0.994	0.255	8.61	13.1
5	2150+1726+1684+2140+1802	0.995	0.226	6.44	0.995	0.230	8.35	14.6
6	2150+1726+1684+2140+1800+1846	0.996	0.207	7.35	0.996	0.224	7.73	15.0
D2log(1/R)								
Numbers of Wavelengths	Selected Wavelengths (nm)	Calibration Set (130)			Prediction Set (130)			
		r_c^2	SEC	RSEC, %	r_p^2	SEP	RSEP, %	RPD
1	2164	0.960	0.671	25.36	0.957	0.691	26.00	4.8
2	2164+1716	0.993	0.276	8.40	0.994	0.257	9.33	13.0
3	2164+1716+1952	0.995	0.228	6.51	0.995	0.232	8.05	14.4
4	2164+1716+1952+2436	0.996	0.211	6.18	0.996	0.219	7.71	15.3
5	2164+1716+1954+2438+1510	0.996	0.199	6.77	0.996	0.215	8.04	15.6
6	2164+1716+1956+2186+1348+1366	0.997	0.186	5.20	0.997	0.196	6.44	17.1

表 9 PLSR 模式之定量分析結果

Spectrum	Wavelength Range (nm)	Factors	Calibration Set (130)			Prediction Set (130)			
			r_c^2	SEC	RSEC, %	r_p^2	SEP	RSEP, %	RPD
log(1/R)	1100 ~ 2498 nm	11	0.998	0.158	56.41	0.997	0.197	5.68	17.0
	400 ~ 2498 nm	7	0.991	0.313	12.00	0.991	0.318	13.82	10.5
Dlog(1/R)	1100~2498nm	14	0.999	0.082	3.31	0.997	0.179	5.74	18.7
	400~2498nm	7	0.996	0.216	5.51	0.995	0.241	7.39	13.9
D ² log(1/R)	1100~2498nm	7	0.997	0.177	5.36	0.997	0.195	5.22	17.2
	400~2498nm	7	0.998	0.162	5.76	0.997	0.179	5.34	18.7

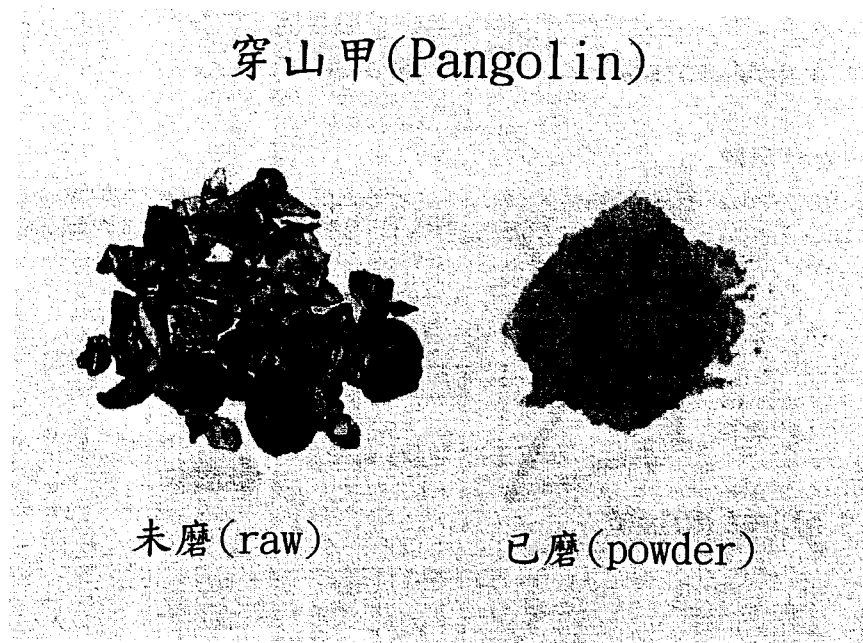


圖 1 穿山甲鱗片粉

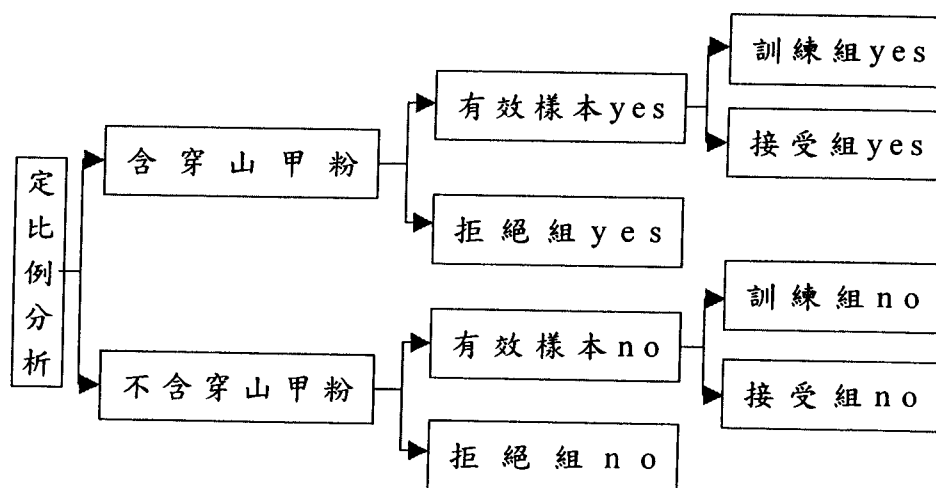


圖 2 定性分析之分組過程

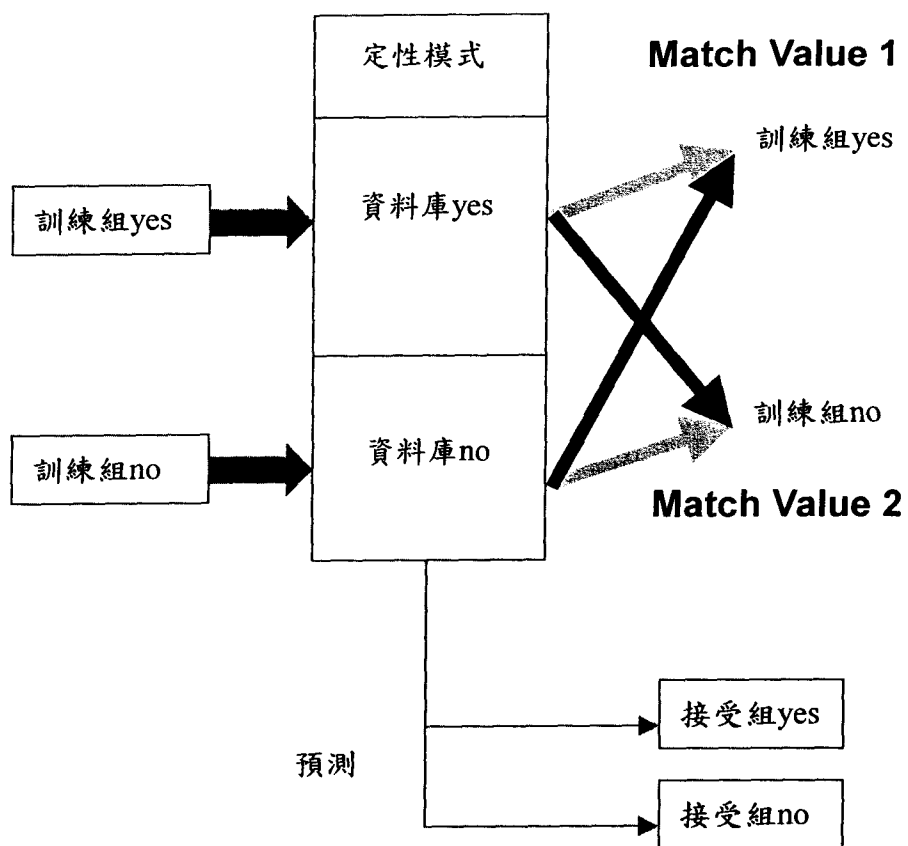


圖 3 定性分析之分析過程

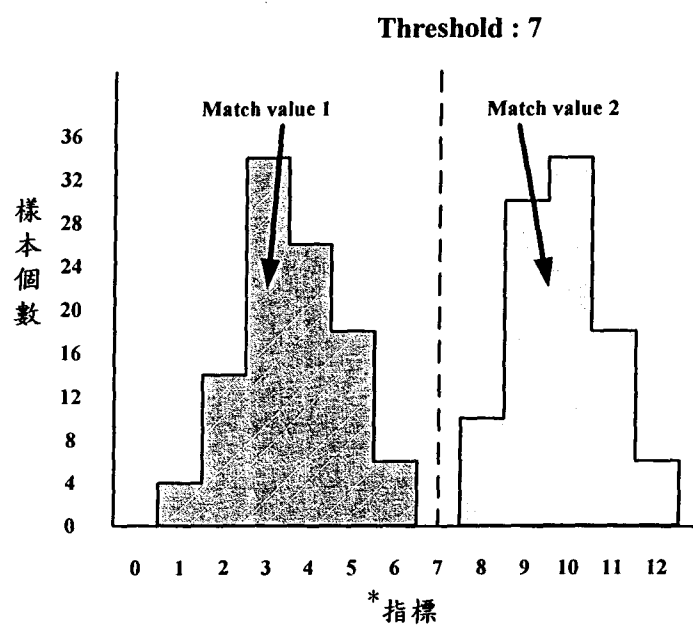


圖 4 分離分佈

註：*指標為 Match Value 及 Probability Level

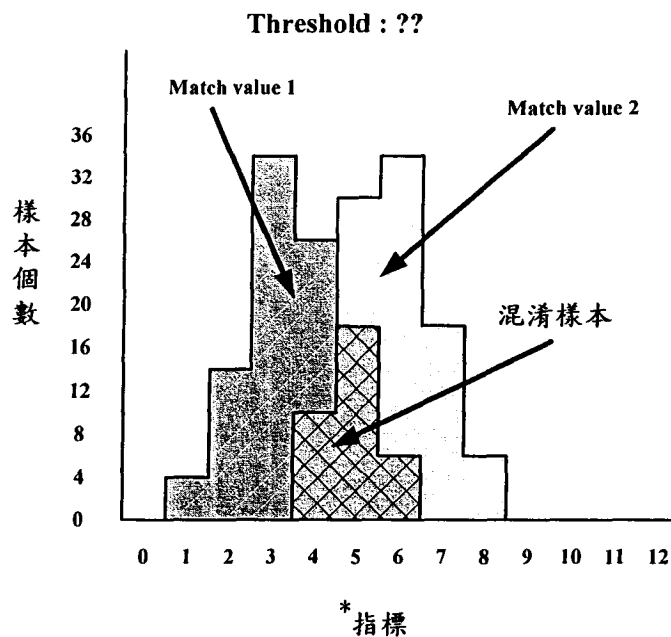


圖 5 混淆分佈

註：*指標為 Match Value 及 Probability Level

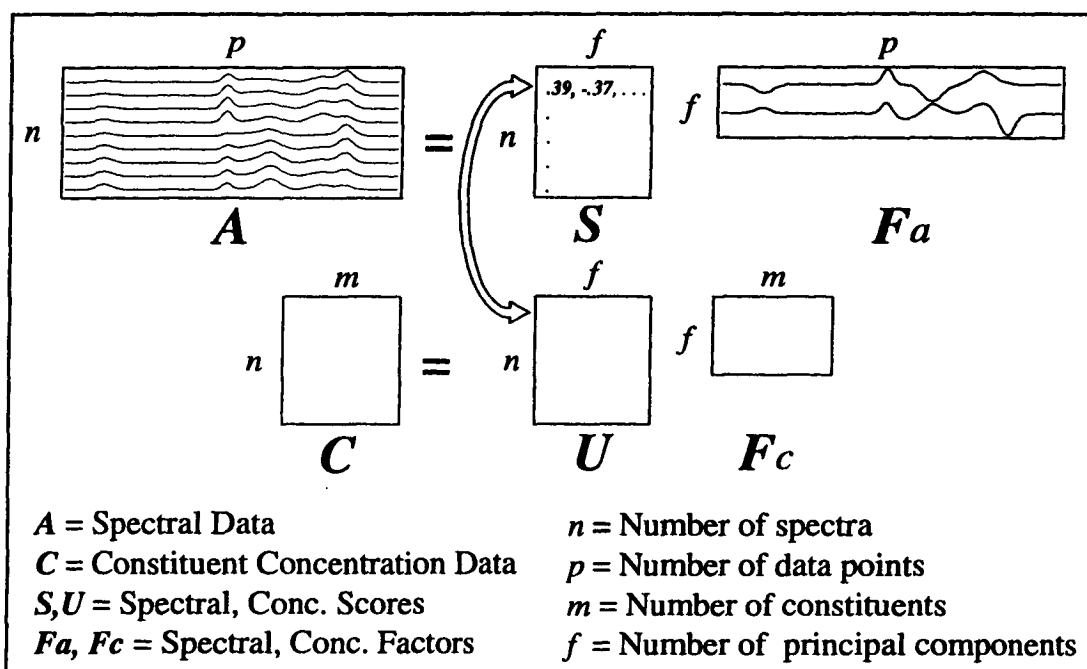


圖 6 PLSR 模式示意圖 (出處：PLSplus /IQ User's Guide, P.59)

計畫成果自評

本研究成果內容與原提計畫相符，達成預期目標：（1）完成中藥成份檢測之近紅外光定性及定量分析模式之建立；（2）針對中藥成份中之台灣穿山甲鱗片粉，建立光譜資料庫以進行成份鑑定比對。

所建立的中藥成份檢測之近紅外線定性及定量分析模式，可以有效地用於含保育動物穿山甲中藥之鑑定比對，可以快速地檢知結果，有助於達到保護野生動物的目的。所建立得模式可以進一步應用至其他保育類動物。本研究結果亦可以應用於一般中藥成份之檢測。研究成果適合於學術期刊發表，目前正在改寫投稿中，其中部份研究成果已於 2002 年 11 月在 International Symposium on Automation and Mechatronics of Agricultural and Bioproduction Systems 國際學術會議上發表：

Huang, C. C., S. Chen and C. W. Yang. 2002. Determination of constituents in Chinese medicine using near infrared spectroscopy. In "Proceedings of International Symposium on Automation and Mechatronics of Agricultural and Bioproduction Systems", 375-381. Chiayi, Taiwan : National Chiayi University.