

基于 AHP-CRITIC 复合加权法结合 Box-Behnken 设计-响应面法优选麸炒白术的炮制工艺

赵若含¹, 单国顺^{1*}, 赵启苗², 吴昊¹, 张可¹, 刘思奇¹, 刘秋文¹, 邵艳奇¹, 肖欲言¹, 于佳序¹, 高清铄¹, 陈秀琰^{2*}

1. 辽宁中医药大学, 辽宁 大连 116600

2. 辽宁医药职业学院, 辽宁 沈阳 110101

摘要: 目的 优化麸炒白术 *Atractylodis Macrocephalae Rhizoma* 的炮制工艺, 确定最佳炮制工艺参数。方法 采用 pH 计、电导率仪、黏度计、分光色差仪测定麸炒白术水煎液的理化参数 (pH 值、电导率、黏度、色度值); 采用紫外-可见分光光度法和超高效液相色谱-三重四极杆串联质谱 (ultra-high performance liquid chromatography-triple quadrupole tandem mass spectrometry, UPLC-QqQ-MS/MS) 技术对麸炒白术中多糖含量以及白术内酯 I、II、III、绿原酸等活性成分的含量进行测定; 采用紫外-可见分光光度法测定麸炒白术水煎液对 1,1-二苯基-2-苦基肼 (DPPH)、2,2'-联氮-双(3-乙基苯并噻唑啉-6-磺酸)二铵盐 (ABTS) 自由基清除效果; 选择上述理化参数、各化学成分的含量以及抗氧化活性作为评价指标, 通过层次分析-赋值 (AHP-CRITIC) 混合加权法确定各评价指标的权重系数; 选择麦麸用量、炒制时间、炒制温度作为考察因素, 联合单因素实验与 Box-Behnken 设计-响应面法 (Box-Behnken design-response surface method, BBD-RSM) 进行麸炒白术炮制工艺的优化研究。结果 优化得到麸炒白术的最佳炮制工艺参数为 100 g 白术用 10.0 g 麦麸, 在 240 °C 下炒制 6 min, 筛去麦麸, 即得。结论 所确定的麸炒白术炮制工艺切实可行, 能够为饮片的工业化生产提供科学的数据支持, 也可为保障麸炒白术饮片的质量及临床应用提供一定的理论依据。

关键词: 白术; 麸炒; AHP-CRITIC 复合加权法; Box-Behnken 设计-响应面法; 炮制工艺; 电导率; 黏度; 色度; 多糖; 白术内酯; 新绿原酸; 绿原酸; 隐绿原酸; 异绿原酸; 1,3-二咖啡酰奎宁酸; 苍术苷 A

中图分类号: R283.6 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2025)23-8511-13

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2025.23.005

Optimization of processing technology of bran-fried *Atractylodis Macrocephalae Rhizoma* based on AHP-CRITIC combined weighting method combined with Box-Behnken design-response surface method

ZHAO Ruohan¹, SHAN Guoshun¹, ZHAO Qimiao², WU Hao¹, ZHANG Ke¹, LIU Siqu¹, LIU Qiuwen¹, SHAO Yanqi¹, XIAO Yuyan¹, YU Jiaxu¹, GAO Qingshuo¹, CHEN Xiulai²

1. Liaoning University of Traditional Chinese Medicine, Dalian 116600, China

2. Liaoning Vocational College of Medicine, Shenyang 110101, China

Abstract: Objective To optimize the processing techniques for bran-fried Baizhu (*Atractylodis Macrocephalae Rhizoma*, AMR) and determine the optimal processing parameters. **Methods** The physical parameters of the bran-fried AMR decoction, including pH value, conductivity, viscosity, and chromaticity, were determined using pH value, conductivity, viscosity, and chromaticity. Ultraviolet-visible spectrophotometry and ultra-high performance liquid chromatography-triple quadrupole tandem mass spectrometry (UPLC-QqQ-MS/MS) were used to determine the content of polysaccharides, atractylenolide I, II, III, chlorogenic acid and other active ingredients in bran-fried AMR. Ultraviolet-visible spectrophotometry was utilized to ascertain the scavenging rates of DPPH and ABTS

收稿日期: 2025-07-21

基金项目: 国家自然科学基金青年基金项目 (81803726); 辽宁省科技计划联合计划面上项目 (2024-MSLH-286); 辽宁中医药大学青创团队项目 (2024-JYTCB-075); 辽宁省教育厅面上项目 (LJKMZ20222205); 辽宁省教育厅面上项目 (LJKMZ20221308); 辽宁省教育厅面上项目 (LJ212414289001); 辽宁中医药大学校级课题重点项目 (2021LZY054)

作者简介: 赵若含, 硕士研究生, 研究方向为中药炮制原理研究。E-mail: zhaoruohan0000@163.com

***通信作者:** 单国顺, 男, 博士, 副教授, 从事中药炮制原理解析及质量标准提升研究。Tel: (0411)85890151 E-mail: shanguoshun@126.com

free radicals in the bran-fried AMR decoction. The a fore mentioned physical parameters, the content of chemical constituents, and the antioxidant activity served as evaluation indices. The weight coefficients for each evaluation index were determined using the AHP-CRITIC combined weighting method. Wheat bran, stir-frying duration, and stir-frying temperature were chosen as the factors for investigation. The single-factor approach and the Box-Behnken design-response surface method (BBD-RSM) were employed to optimize the processing technology for bran-fried AMR. **Results** The optimum processing technology for bran-fried AMR involves using 10.0 g of wheat bran per 100 g of herbal decoction pieces, which are then fried for 6.0 min at 240 °C. **Conclusion** The optimized bran-frying process for AMR was confirmed to be practicable, providing both scientific data to support its industrial production and a theoretical basis for ensuring the quality and clinical application of the bran-fried AMR decoction pieces.

Key words: *Attractylodes Macrocephalae Rhizoma*; processed by stir-frying with wheat bran; AHP-CRITIC combined weighting method; Box-Behnken design-response surface method; processing technology; conductivity; viscosity; chromaticity; polysaccharides; atractylenolide; neochlorogenic acid; chlorogenic acid; cryptchlorogenic acid; isochlorogenic acid; 1,3-dicaffeoyl quinic acid; atractyloside A

白术为菊科苍术属多年生草本植物白术 *Attractylodes macrocephala* Koidz. 的干燥根茎, 始载于《神农本草经》, 被列为上品, 其味甘、苦, 性温, 归脾、胃经^[1]。《本草通玄》有言“补脾胃之药, 更无出其右者。”然而, 白术味苦、性偏温燥, 为了满足临床多样性的使用需求, 历代医家多对白术进行炮制, 以缓和燥性, 增强益气健脾的作用^[2-3]。白术历代也有炒黄、炒焦、炒炭、土煮、土蒸、醋浸、煨、焙等大量的炮制方法^[4]。目前, 仅有麸炒法被《中国药典》2025 年版所收载^[5]。白术经麸炒后, 苦味和温燥之性皆有所缓和。同时, 麦麸也具有补中益气的作用, 二者同炒可协同增效, 以实现增强健脾消食、强胃的作用^[6]。但是, 目前有关麸炒白术的炮制工艺仍以传统经验为主, 缺少数字化的工艺参数和标准化的操作规程, 致使麸炒饮片的质量和临床疗效受到影响。因此, 本研究选择白术饮片中主要活性成分的含量以及水煎液的理化参数和抗氧化活性作为评价指标, 以辅料用量、炒制时间以及炒制温度为考察因素, 联合单因素实验与 Box-Behnken 设计-响应面法 (Box-Behnken design-response surface method, BBD-RSM) 进行土炒白术炮制工艺的优化, 以期规范麸炒白术的工业化生产提供一定的数据支持。

1 仪器与材料

1.1 仪器

Acquity UPLC H-CLASS 型超高效液相色谱仪串联 Xevo TQD 型质谱仪, 美国 Waters 公司; pH5-3G 型 pH 计, 上海仪电科学仪器股份有限公司; T6 型紫外分光光度计, 北京普析通用仪器有限责任公司; DDS-11A 型电导率仪, 上海佑科仪器仪表有限公司; NR10QC 型色差仪, 深圳三恩时科技有限公司; Milli-Q Integral 型纯水/超纯水一体化系统, 美

国 Millipore 公司; MS105DU 型十万分之一分析天平, 瑞士 Mettler Toledo 公司, 称量精度 0.01 mg。

1.2 试剂

对照品新绿原酸 (1, 批号 PS021094)、绿原酸 (3, 批号 PS013006)、隐绿原酸 (4, 批号 PS021143)、1,3-二咖啡酰奎宁酸 (5, 批号 PS011115)、异绿原酸 B (6, 批号 PS001054)、异绿原酸 C (8, 批号 PS001057)、白术内酯 III (9, 批号 PS013255)、白术内酯 II (10, 批号 PS013629)、白术内酯 I (11, 批号 PS020528)、D-无水葡萄糖 (批号 PS020418), 经 HPLC 测定质量分数均 $\geq 98.0\%$, 成都普思生物科技股份有限公司; 对照品苍术苷 A (2), 批号 CX0006, 经 HPLC 测定质量分数 $\geq 98\%$, 江苏永健医药科技有限公司; 对照品异绿原酸 A (7), 批号 PSC0531, 经 HPLC 测定质量分数 $\geq 98.0\%$, 成都植标化纯生物技术有限公司; 1,1-二苯基-2-苦基肼 (DPPH), 批号 S224966, 上海源叶生物科技有限公司; 2,2'-联氮-双(3-乙基苯并噻唑啉-6-磺酸)二铵盐 (ABTS), 批号 C17280753, 上海麦克林生化科技股份有限公司; 维生素 C, 批号 G1489019, 德国 Dr. Ehrenstorfer GmbH 公司; 质谱级甲酸、甲醇和乙腈, 德国 Merck 公司。

1.3 饮片

白术饮片, 批号 20241011, 购自盛实百草药业有限公司; 辅料麦麸, 批号 20240912, 购自凤台县日福面粉工贸有限公司; 经辽宁中医药大学李峰教授鉴定, 白术基原为菊科苍术属植物白术 *A. macrocephala* Koidz. 的干燥根茎, 麦麸为禾本科小麦属植物小麦 *Triticum aestivum* L. 麦粒的外种皮。

2 方法和结果

2.1 白术炮制全过程样品的制备

将收集到的白术生品饮片, 基于《中国药典》

2025 年版处理。具体操作如下：先将炒药锅预热，将麦麸撒入热锅内，待冒烟时加入白术片，炒至黄棕色、逸出焦香气，取出，筛去麦麸。

2.2 麸炒白术饮片中分子活性成分的定量测定

2.2.1 对照品溶液的制备 取 **1~11** 对照品适量，精密称定，分别加入甲醇溶解并配制质量浓度分别为 51.2、40.6、46.2、75.2、71.2、47.2、49.2、64.1、55.5、64.2、66.1 $\mu\text{g/mL}$ 的对照品储备液。

2.2.2 供试品溶液的制备 麸炒白术饮片粉碎，取过 3 号筛粉末约 0.5 g，精密称定，置于具塞锥形瓶中，精密加入甲醇 10 mL，称定质量，超声提取 30 min 后放冷，再称定质量，用甲醇补足减失的质量，摇匀，滤过，取续滤液，过 0.22 μm 滤膜，即得供试品溶液。

2.2.3 色谱条件 色谱柱为 Waters Acquity UPLC[®] HSS T3 柱 (100 mm $\times$ 2.1 mm, 1.8 μm)；柱温 30 $^{\circ}\text{C}$ ；流动相为 0.1%甲酸水溶液 (A)-0.1%甲酸乙腈溶液 (B)；梯度洗脱，洗脱程序：0~3.00 min, 17.0%~20.3% B；3.00~3.50 min, 20.3%~70.5% B；3.50~6.00 min, 70.5%~82.5% B；6.00~8.00 min, 82.5%~85.2% B；8.00~8.50 min, 85.2%~100.0% B；8.50~10.00 min, 100.0% B；10.00~10.01 min, 100.0%~17.0% B；10.01~14.00 min, 17.0% B；体积流量 0.30 mL/min；进样量 2 μL 。

2.2.4 质谱条件 ESI 电喷雾离子源，正、负离子模式，毛细管电压为 2.50 kV，离子源温度 150 $^{\circ}\text{C}$ ，锥孔电压为 40 V，脱溶剂气温度为 350 $^{\circ}\text{C}$ ，脱溶剂气体积流量 650 L/h，扫描方式为多反应监测 (MRM)，各化合物详细质谱参数详见表 1。

2.2.5 专属性考察 取“2.2.1”项下对照品储备液和“2.2.2”项下供试品溶液，在“2.2.3”项色谱条件和“2.2.4”项质谱条件下进样测定，记录色谱图，对照品溶液及供试品溶液典型色谱图见图 1。

2.2.6 线性关系考察 精密吸取“2.2.1”项下 11 个对照品溶液适量，用甲醇稀释制成系列质量浓度对照品溶液，按照“2.2.3”和“2.2.4”项下色谱及质谱条件进样检测，以各对照品的质量浓度为横坐标 (X)，峰面积为纵坐标 (Y)，绘制标准曲线，进行线性回归，得回归方程：**1** $Y=1\,642.90X+209.61$, $r=0.999\,9$, 线性范围 0.20~25.60 $\mu\text{g/mL}$ ；**2** $Y=280.51X+116.51$, $r=0.999\,2$, 线性范围 0.24~30.67 $\mu\text{g/mL}$ ；**3** $Y=4\,582.20X+1\,763.50$, $r=0.999\,0$, 线性范围 0.36~46.00 $\mu\text{g/mL}$ ；**4** $Y=3\,675.50X-1\,750.10$, $r=$

表 1 质谱参数

Table 1 Mass spectrometry parameter

成分	t_R/min	m/z		裂解电压/V	碰撞能量/eV
		母离子	子离子		
1	1.17	352.97	178.96	35	15
2	1.22	447.10	88.98	54	20
3	1.63	352.97	190.99	30	10
4	1.65	352.99	172.99	38	14
5	4.82	515.01	352.97	36	16
6	4.98	515.01	352.97	36	16
7	5.08	515.01	352.97	36	16
8	5.19	515.01	352.97	36	16
9	6.09	249.17	231.21	44	16
10	6.79	233.18	105.12	35	29
11	7.32	231.16	91.07	52	29

0.999 4, 线性范围 0.29~37.50 $\mu\text{g/mL}$ ；**5** $Y=2\,656.70X-22\,739.00$, $r=0.999\,0$, 线性范围 2.91~372.00 $\mu\text{g/mL}$ ；**6** $Y=1\,538.60X-8\,111.10$, $r=0.999\,2$, 线性范围 1.48~190.00 $\mu\text{g/mL}$ ；**7** $Y=5\,874.20X-3\,483.50$, $r=0.999\,7$, 线性范围 0.32~41.30 $\mu\text{g/mL}$ ；**8** $Y=3\,440.00X+915.80$, $r=0.999\,6$, 线性范围 0.24~31.00 $\mu\text{g/mL}$ ；**9** $Y=3\,915.30X+1\,816.50$, $r=0.999\,2$, 线性范围 0.43~55.50 $\mu\text{g/mL}$ ；**10** $Y=144\,596.00X+99\,794.00$, $r=0.999\,6$, 线性范围 0.24~31.00 $\mu\text{g/mL}$ ；**11** $Y=27\,558.00X+17\,355.00$, $r=0.999\,2$, 线性范围 0.26~33.00 $\mu\text{g/mL}$ 。

2.2.7 精密度考察 精密吸取“2.2.1”项下对照品溶液适量，按照“2.2.3”和“2.2.4”项下色谱及质谱条件进样检测 6 次，记录各成分峰面积，并计算各化合物峰面积的 RSD 值。结果 **1~11** 峰面积的 RSD 值依次为 2.33%、2.34%、2.46%、2.55%、2.54%、2.73%、2.85%、2.74%、2.71%、2.27%、2.63%，结果表明该仪器精密度良好。

2.2.8 稳定性考察 取麸炒白术样品粉末，按照“2.2.2”项下方法制备供试品溶液，室温放置，并分别于制备后 0、2、4、8、12、24 h 进样分析，按照“2.2.3”和“2.2.4”项下色谱及质谱条件进行检测，记录各化合物的峰面积，并计算各化合物峰面积的 RSD 值。结果 **1~11** 峰面积的 RSD 值依次为 2.45%、2.55%、2.09%、0.97%、2.24%、1.77%、2.18%、2.64%、2.44%、2.57%、2.44%，结果表明供试品溶液在 24 h 内稳定性良好。

2.2.9 重复性考察 取麸炒白术 6 份，按照“2.2.2”项下方法制备供试品溶液，按照“2.2.3”和“2.2.4”

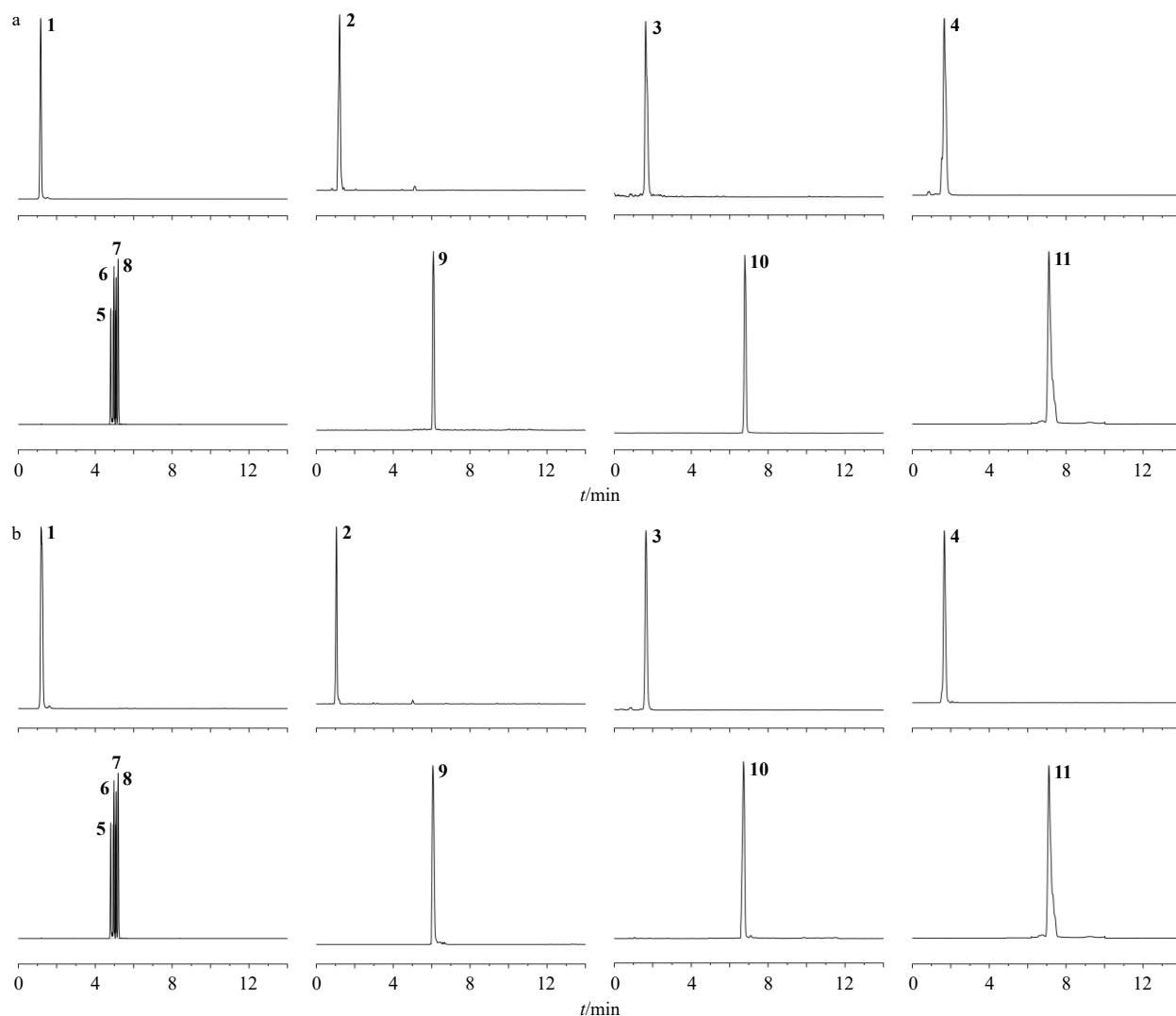


图 1 各对照品溶液 (a) 和麸炒白术供试品溶液 (b) 的 HPLC 图

Fig. 1 HPLC of each reference substance solution (a) and bran-fried AMR test solution (b)

项下色谱及质谱条件进行检测, 并计算各化合物的含量以及 RSD 值。结果 1~11 质量分数的 RSD 值依次为 2.40%、2.45%、2.74%、2.15%、1.08%、2.50%、2.47%、2.89%、1.23%、2.04%、2.78%, 结果表明该方法重复性良好。

2.2.10 加样回收率考察 取已测知各成分含量的供试品粉末约 0.25 g, 精密称定, 平行 6 份, 分别加入与饮片粉末中各对照品含量相当的对照品溶液, 并按照“2.2.2”项下方法制备供试品溶液, 按照“2.2.3”和“2.2.4”项下色谱及质谱条件进行分析, 计算各化合物的回收率及 RSD 值。结果 1~11 的平均加样回收率分别为 99.73%、102.76%、100.87%、97.14%、99.80%、101.28%、100.13%、99.92%、100.21%、98.54%、99.30%, RSD 值依次为 2.45%、2.55%、2.09%、0.97%、2.24%、2.77%、

1.18%、2.64%、2.44%、2.57%、2.44%, 结果表明该方法的准确度良好。

2.3 白术饮片中多糖的定量测定

2.3.1 对照品溶液的制备 取在 105 °C 条件下干燥至恒定质量的无水葡萄糖对照品适量, 精密称定, 并加蒸馏水定容, 制成质量浓度为 103.1 μg/mL 的对照品溶液。

2.3.2 供试品溶液的制备 取经粉碎的麸炒白术粉末约 0.5 g, 精密称定, 并加入 200 mL 纯净水进行回流提取 1 h, 滤过, 取滤液, 用纯净水定容于 250 mL 量瓶中, 混匀, 并精密量取 5.0 mL 提取液于 EP 管中, 加入 5 倍体积的无水乙醇, 混合均匀, 静置过夜。4 000 r/min (离心半径 5 cm) 离心 15 min, 取沉淀, 用纯净水溶解并定容于 50 mL 量瓶中作为供试品溶液。

2.3.3 线性关系考察 分别精密吸取“2.3.1”项下对照品溶液 0、0.1、0.2、0.3、0.4、0.5、0.6 mL 至具塞试管中，并加蒸馏水稀释至 1 mL，再分别加入 1.0 mL 5% 苯酚和 5.0 mL 硫酸，摇匀，静置 5 min 后，置于 70 °C 水浴加热 20 min，冷却至室温后，在 489 nm 波长处测定吸光度 (A) 值。以葡萄糖对照品的质量浓度为横坐标 (X)， A 值为纵坐标 (Y)，绘制标准曲线，进行线性回归，得回归方程为 $Y=9.2168X+0.014$ ， $R^2=0.9995$ 。结果表明，葡萄糖在 10.31~51.55 $\mu\text{g/mL}$ 与 A 值呈良好的线性关系。

2.3.4 精密度考察 精密称取“2.3.1”项下对照品溶液 0.5 mL，按照“2.3.3”项下方法操作，自“加蒸馏水稀释至 1 mL”进行显色，连续测定 6 次 A 值，结果 A 值的 RSD 值为 0.91%，结果表明该仪器精密度良好。

2.3.5 稳定性考察 精密称取麸炒白术粉末，按照“2.3.2”项下方法制备供试品溶液，按照“2.3.3”项下方法操作，自“加蒸馏水稀释至体积为 1 mL”进行显色，并每隔 20 min 测定 1 次 A 值，连续测定 2 h。结果 A 值的 RSD 值为 2.960%，结果表明供试品溶液在 2 h 内具有良好的稳定性。

2.3.6 重复性考察 取麸炒白术粉末 6 份，精密称定，按照“2.3.2”项下方法制备供试品溶液，按照“2.3.3”项下方法操作，自“加蒸馏水稀释至体积为 1 mL”进行显色，测定 A 值，并根据标准曲线计算多糖的质量分数。结果多糖质量分数的 RSD 为 1.85%，表明该方法重复性良好。

2.3.7 加样回收率考察 取已测知多糖含量的麸炒白术粉末 0.25 g，精密称定，平行 6 份，分别加入与饮片中多糖等量的葡萄糖对照品，并按照“2.3.2”项下方法制备供试品溶液，按照“2.3.3”项下方法，自“加蒸馏水稀释至体积为 1 mL”进行显色，并测定 A 值，计算葡萄糖的加样回收率，结果葡萄糖的平均加样回收率为 98.9%，RSD 为 2.12%，结果表明该方法准确度良好。

2.4 麸炒白术饮片水煎液理化参数的测定

2.4.1 麸炒白术水煎液的制备 取不同批次的麸炒白术饮片，粉碎过筛，加 10 倍量纯净水，回流提取 1 h，放凉后 6 000 r/min（离心半径 5 cm）离心 10 min，取上清液，即得麸炒白术水煎液。

2.4.2 电导率的测定 取麸炒白术水煎液适量，室温下，以电导率仪测定各样品的电导率，各样品平行测定 3 次，计算其平均值。

2.4.3 黏度的测定 取麸炒白术水煎液适量，室温下，以品式黏度计测定各样品的黏度，各样品平行测定 3 次，计算其平均值。

2.4.4 pH 值的测定 取麸炒白术水煎液适量，室温下，以 pH 计测定各样品的 pH 值，各样品平行测定 3 次，计算其平均值。

2.4.5 色度的测定 取麸炒白术水煎液适量，室温下，以色度计测定各样品的色度值，设置参数如下：光源为 D65；视场选择 10°视角；测定孔径为 8 mm；仪器误差为 $\Delta E_{ab}^* \leq 0.4$ 。各样品平行测定 3 次，计算其平均值^[7]。数据使用 L^* 、 a^* 、 b^* 色空间法表示，其中， L^* 为亮度值，表示从纯黑 (0) 到纯白 (100) 的亮度层次，数值越大亮度越高； a^* 为红-绿色轴，正数值为红色，负数值为绿色； b^* 为黄-蓝色轴，正数值为黄色，负数值为蓝色。

2.5 麸炒白术饮片水煎液抗氧化活性的测定

2.5.1 DPPH 自由基清除能力的测定 参照文献方法^[8]并稍作改动，用于测定麸炒白术水提液对 DPPH 自由基的清除能力。精密吸取麸炒白术水煎液 1.0 mL，加入 0.05 mg/mL DPPH 溶液 3.0 mL，振荡混匀后，置室温下避光反应 30 min，测定 517 nm 处的 A 值 (A_1)；同时，测定 1.0 mL 麸炒白术水煎液和 3.0 mL 50% 乙醇溶液混匀 30 min 后的 A 值 (A_2) 以及 1.0 mL 50% 乙醇溶液和 0.05 mg/mL DPPH 溶液 3.0 mL 混匀 30 min 后的 A 值 (A_3)，并根据下面公式计算 DPPH 自由基的清除率。

$$\text{清除率} = 1 - (A_1 - A_2) / A_3$$

2.5.2 ABTS 自由基清除能力的测定 参照文献方法^[9]并稍作改动，用于测定麸炒白术水提液对 ABTS 自由基的清除能力。精密吸取麸炒白术水煎液 200 μL ，加入 ABTS 工作液 4.0 mL，振荡混匀后，室温条件下避光反应 25 min，测定 734 nm 处的 A 值 (A_1)；同时，测定 200 μL 麸炒白术水煎液和 4.0 mL 50% 乙醇溶液混匀 25 min 后的 A 值 (A_2)，以及 200 μL 50% 乙醇溶液和 ABTS 工作液 4.0 mL 混匀 25 min 后的 A 值 (A_3)，并根据“2.5.1”项下公式计算 ABTS 自由基的清除率。

2.6 确立指标权重系数

2.6.1 AHP 法计算主观权重系数 (ω_{AHP}) AHP 法又名层次分析法，它将复杂的决策问题分成多个层次，并通过两两比较的方式决定各个因素的相对重要性，最终得出综合评价结果。

本研究根据麸炒白术炮制过程中各指标的增

减变化,通过 SPSSAU 平台,将麸炒白术饮片中化学成分的含量以及水煎液的理化参数和抗氧化活性的优先顺序作为权重指标予以量化,再主观设定这 3 个权重指标的优先顺序:化学成分含量>抗氧化活性>理化参数,并构建优先判断矩阵(表 2),计算这 3 项指标的 ω_{AHP} 分别为 0.131 1、0.660 8、0.280 1,对所得 ω_{AHP} 进行一致性检验,得到随机一致性指标(random index, RI)为 0.58,一致性比率(consistency ratio, CR)<0.1,表明矩阵符合一致性检验,权重系数合理有效。

表 2 指标成对比较的判断优先矩阵

Table 2 Priority matrix for pairwise comparison of indicators

评价指标	理化参数	化学成分含量	抗氧化活性	ω_{AHP}
理化参数	1	0.25	0.5	0.131 1
化学成分含量	4	1	4	0.660 8
抗氧化活性	2	0.25	1	0.280 1

2.6.2 CRITIC 法计算客观权重系数 (ω_{CRITIC}) CRITIC 方法作为一种客观权重赋权法,是基于评价指标的对比强度和指标之间的冲突性,来衡量综合指标的客观权重,能够在考虑指标变异性大小的同时兼顾指标之间的相关性。

本实验先分别对麸炒白术饮片中化学成分的含量以及水煎液的理化参数和抗氧化活性的实验数据进行归一化处理,消除单位量纲,公式为指标成分值=(实测值-最小值)/(最大值-最小值),采用 SPSSAU 在线系统进行 CRITIC 权重分析,计算

出每个因素的权重系数分别为 0.334 4、0.429 9、0.235 7。

2.6.3 AHP-CRITIC 复合加权法确定综合权重系数 ($\omega_{\text{AHP-CRITIC}}$) AHP 法在计算权重系数时主观性较强,而 CRITIC 法则能够更为客观地评估各指标的权重,将这 2 种方法相结合,能够更科学、合理地评估 BBD-RSM 实验中各指标成分的综合权重。计算公式参照刘绍姜等^[10]的方法。

$$\omega_{\text{AHP-CRITIC}} = \omega_{\text{AHP}} \omega_{\text{CRITIC}} / \sum \omega_{\text{AHP}} \omega_{\text{CRITIC}}$$

2.6.4 综合评分的计算 采用 AHP-CRITIC 复合加权法得到的 $\omega_{\text{AHP-CRITIC}}$ 对实验结果进行综合评分。

综合评分=理化参数值/理化参数最大值×理化参数综合权重系数+化学成分含量/化学成分含量最大值×化学成分含量综合权重系数+抗氧化活性值/抗氧化活性值最大值×抗氧化活性综合权重系数

2.7 单因素考察麸炒白术工艺

根据麸炒白术的炮制工艺要点,选取麦麸用量、炒制温度和炒制时间 3 个因素,在其他条件相同的情况下,以综合评分值作为考察指标进行单因素考察,评价各因素对综合评分的影响,并将各因素的最优值作为后续单因素实验的固定条件。

2.7.1 麦麸用量对综合评分的影响 固定炒制时间 7 min 和炒制温度 260 ℃ 2 个因素,考察麦麸用量对麸炒白术饮片的理化参数、化学成分含量和抗氧化活性的影响,确定最优麦麸用量,结果见表 3。结果显示,麦麸用量为 10 g 时综合评分增幅最高,即最佳辅料用量为 10 g。

表 3 麦麸用量考察结果

Table 3 Investigation results of wheat bran dosage investigation

麦麸用量/g	pH 值	电导率/(mS·cm ⁻¹)	黏度/(mPa·s ⁻¹)	色度值			小分子成分质量分数/(μg·g ⁻¹)											多糖/%	清除率/%		AHP-CRITIC 综合评分
				L*	a*	b*	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		DPPH	ABTS	
5	5.48	0.29	23.41	9.00	0.47	5.96	0.82	1.34	1.92	1.21	13.21	13.31	2.69	3.32	3.53	1.43	3.57	44.80	40.70	23.19	0.340
10	5.51	0.28	22.11	9.43	0.75	5.77	1.52	1.71	3.05	1.87	11.70	10.69	2.01	2.15	2.18	0.81	2.71	76.86	43.03	31.12	0.726
15	5.51	0.32	22.76	9.51	0.52	7.15	1.57	0.99	3.04	1.88	12.28	11.69	2.27	2.60	2.09	0.85	1.68	36.88	45.16	30.21	0.513
20	5.25	0.27	22.76	9.19	1.66	10.85	0.79	1.24	1.83	1.23	12.40	11.91	2.33	2.70	1.34	0.73	1.99	37.72	48.07	46.99	0.221
25	5.33	0.29	22.54	8.85	1.53	12.23	1.22	0.87	2.55	1.63	10.34	8.35	1.40	1.11	1.78	1.10	2.28	32.62	54.98	41.62	0.295

2.7.2 炒制温度对综合评分的影响 固定麦麸用量 10 g 和炒制时间 7 min 2 个因素,考察炒制温度对麸炒白术饮片的理化参数、化学成分含量和抗氧化活性的影响,确定最优炒制温度,结果见表 4。结果显示,炒制温度为 240 ℃时综合评分增幅最高,即最佳炒制温度为 240 ℃。

2.7.3 炒制时间对综合评分的影响 固定麦麸用量

10 g 和炒制温度 240 ℃ 2 个因素,考察炒制时间对麸炒白术饮片的理化参数、化学成分含量和抗氧化活性的影响,确定最优炒制时间,结果见表 5。结果显示,炒制时间为 6 min 时综合评分增幅最高,即最佳炒制时间为 6 min。

2.8 BBD-RSM 实验优化麸炒白术工艺

2.8.1 实验设计 根据单因素实验考察结果,确定

表 4 炒制温度考察结果

Table 4 Investigation results of stir-frying temperature investigation

炒制温度/℃	pH 值	电导率/(mS·cm ⁻¹)	黏度/(mPa·s ⁻¹)	色度值			小分子成分质量分数/(μg·g ⁻¹)											多糖/%	清除率/%			AHP-CRITIC 综合评分
				L*	a*	b*	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		DPPH	ABTS		
220	5.92	0.30	25.14	5.83	0.12	1.13	0.70	0.42	1.34	1.09	12.23	11.62	2.26	2.58	1.82	0.79	2.16	47.00	17.19	26.75	0.601	
240	5.88	0.29	24.06	6.00	0.40	1.47	1.17	0.80	2.50	1.49	11.90	11.05	2.11	2.32	0.85	0.23	1.98	48.56	26.73	28.42	0.677	
260	4.94	0.33	23.48	4.90	0.44	2.70	0.59	1.23	1.18	0.97	10.39	8.45	1.43	1.16	1.75	0.67	2.18	45.89	40.74	33.84	0.338	
280	5.24	0.32	23.69	4.03	2.48	3.85	0.99	0.49	2.39	1.31	13.08	13.07	2.64	3.22	1.25	0.77	1.57	27.48	56.49	35.02	0.664	
300	4.86	0.33	23.91	2.82	2.28	4.01	0.94	1.21	1.56	1.19	9.51	6.92	1.02	0.47	1.44	1.26	1.89	9.96	74.93	67.74	0.278	

表 5 炒制时间考察结果

Table 5 Investigation results of stir-frying time

炒制时 间/min	pH 值	电导率/ (mS·cm ⁻¹)	黏度/ (mPa·s ⁻¹)	色度值			小分子成分质量分数/(μg·g ⁻¹)											多糖/ %	清除率/%			AHP-CRITIC 综合评分
				L*	a*	b*	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		DPPH	ABTS		
5.5	4.86	0.33	1.013	6.00	0.40	1.47	0.80	8.67	2.59	1.24	13.99	14.65	3.05	3.93	2.32	0.91	2.38	44.40	29.52	15.82	0.294	
6.0	5.92	0.30	1.040	5.83	0.12	1.13	0.53	8.66	1.59	0.99	11.67	10.65	2.00	2.14	2.19	1.21	2.47	45.72	48.36	18.90	0.965	
6.5	5.88	0.29	1.016	4.90	0.44	2.70	1.06	8.67	2.45	1.36	12.95	12.85	2.58	3.13	0.87	0.22	1.57	41.22	34.75	18.98	0.566	
7.0	4.94	0.33	1.003	4.03	2.48	3.85	1.14	8.66	1.84	1.39	10.95	9.40	1.67	1.58	1.48	0.74	2.60	44.08	84.94	18.88	0.658	
7.5	5.24	0.32	1.008	2.82	2.28	4.01	0.57	8.64	1.10	0.96	10.92	9.34	1.66	1.55	0.85	0.30	2.27	39.19	40.35	20.70	0.228	

麦麸用量 (X₁)、炒制温度 (X₂) 和炒制时间 (X₃) 这 3 个因素对响应值影响较大。采用 Design-Expert 13 软件, 以理化参数 (pH 值、电导率、黏度、色度值)、化学成分 (小分子成分和多糖) 含量、抗氧化活性 (DPPH、ABTS 自由基清除能力) 这几个指标的综合评分为响应值, 建立 3 因素 3 水平 BBD-

RSM 实验设计。因素水平及实验设计与结果见表 6。
2.8.2 理化参数 CRITIC 权重分析 采用 CRITIC 法对 17 组样品水煎液的电导率、黏度、pH 值、色度值进行权重分析, CRITIC 权重分析系数如表 7 所示。通过权重系数计算各组样品水煎液理化参数的综合评分, 结果如表 8 所示。

表 6 BBD-RSM 麸炒白术工艺实验设计与结果

Table 6 Experimental design and results of bran-fried AMR process

序号	X ₁ /g	X ₂ /℃	X ₃ /min	pH 值	电导率/	黏度/	色度值			小分子成分质量分数/(μg·g ⁻¹)											多糖/	清除率/%	
					(mS·cm ⁻¹)	(mPa·s ⁻¹)	L*	a*	b*	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	%	DPPH	ABTS
1	10 (0)	240 (0)	6.0 (0)	5.74	0.26	23.79	5.43	0.12	1.84	3.44	1.62	2.25	1.45	16.17	18.41	4.03	5.61	4.19	1.79	2.62	47.70	69.00	40.00
2	10	260 (+1)	6.5 (+1)	5.52	0.26	23.79	5.17	0.03	2.18	1.35	1.11	2.38	1.57	11.86	10.97	2.08	2.28	1.51	0.37	1.35	15.30	54.00	30.00
3	10	240	6.0	5.61	0.25	24.69	5.22	0.08	1.07	0.49	0.27	1.30	0.91	11.48	10.31	1.91	1.98	0.86	0.09	1.60	34.80	66.00	24.00
4	10	260	5.5 (-1)	5.65	0.24	23.79	5.34	0.13	1.38	3.47	1.77	2.64	1.39	16.27	18.58	4.07	5.68	4.26	1.83	2.74	47.70	47.00	50.00
5	5 (-1)	240	6.5	5.73	0.27	24.68	5.03	0.07	1.67	1.00	0.28	2.13	1.33	16.31	18.65	4.09	5.71	3.57	1.47	2.63	23.10	54.00	20.00
6	10	240	6.0	5.63	0.24	23.79	5.21	0.24	1.76	2.97	1.74	2.79	1.45	16.62	19.19	4.24	5.96	4.08	1.87	2.73	42.90	47.00	44.00
7	5	220	6.0	5.73	0.22	25.14	6.29	0.28	0.61	0.61	0.61	1.37	0.98	12.94	12.84	2.57	3.12	1.68	0.33	2.37	20.40	65.00	38.00
8	15 (+1)	240	6.5	5.69	0.25	24.24	6.20	0.22	1.96	0.51	0.21	1.25	0.94	12.73	12.48	2.48	2.95	0.76	0.01	1.31	32.10	33.00	38.00
9	10	220 (-1)	5.5	5.62	0.24	24.24	4.79	0.08	1.64	3.49	1.89	2.81	1.44	16.72	19.36	4.28	6.03	4.21	1.74	2.72	39.00	36.00	48.00
10	10	240	6.0	5.77	0.24	23.35	5.55	0.21	0.97	1.10	0.47	2.62	1.27	13.46	13.74	2.81	3.52	1.14	0.05	1.80	32.40	44.00	22.00
11	10	240	6.0	5.68	0.24	23.79	5.48	0.38	1.40	3.35	1.56	2.77	1.56	16.00	18.12	3.95	5.47	3.99	1.84	2.69	45.00	61.00	62.00
12	15	240	5.5	5.61	0.25	25.14	5.43	0.13	2.01	0.54	0.93	0.86	0.95	12.03	11.26	2.16	2.41	2.49	1.00	2.22	31.20	59.00	47.00
13	5	260	6.0	5.52	0.22	25.14	4.80	0.10	1.67	0.52	0.67	1.11	0.92	11.98	11.19	2.14	2.37	2.48	1.03	2.38	24.90	71.00	34.00
14	15	260	6.0	5.55	0.23	24.69	6.49	0.07	4.10	0.84	0.54	1.97	1.21	12.68	12.38	2.45	2.91	0.97	0.29	1.78	22.50	66.00	8.00
15	10	220	6.5	5.69	0.24	24.69	5.05	0.14	1.11	0.47	0.54	1.35	0.94	12.93	12.82	2.56	3.10	1.11	0.24	1.83	37.80	64.00	22.00
16	15	220	6.0	5.72	0.24	24.69	4.93	0.16	0.77	0.67	0.55	1.36	1.00	12.52	12.12	2.38	2.79	0.43	0.01	1.63	21.60	82.00	48.00
17	5	240	5.5	5.62	0.23	24.69	5.21	0.06	1.00	0.45	0.68	0.91	0.85	12.17	11.51	2.22	2.52	1.91	0.74	2.75	31.50	86.00	17.00

表 7 理化参数 CRITIC 权重分析结果
Table 7 Results of CRITIC weight analysis of physical properties

理化参数	指标变异性	指标冲突性	信息量	权重系数
pH 值	0.304	2.881	0.876	0.217 4
电导率	0.286	3.360	0.961	0.238 6
黏度	0.303	3.700	1.121	0.278 2
色度值	0.331	3.238	1.072	0.265 9

表 8 理化参数与化学成分综合评分
Table 8 Comprehensive score of physical properties and chemical composition

序号	综合评分		序号	综合评分	
	理化参数	化学成分		理化参数	化学成分
1	0.568	0.205	10	0.438	0.272
2	0.318	0.140	11	0.511	0.395
3	0.430	0.256	12	0.588	0.169
4	0.326	0.231	13	0.264	0.974
5	0.654	0.344	14	0.523	0.877
6	0.416	0.335	15	0.467	0.947
7	0.663	0.480	16	0.478	0.919
8	0.633	0.251	17	0.351	0.934
9	0.307	0.421			

2.8.3 化学成分含量 CRITIC 权重分析 将 17 组样品中小分子活性成分和多糖的含量测定结果进行数据归一化处理, 并采用 CRITIC 法对该结果进行权重分析, 权重分析结果如表 9 所示。通过权重系数计算各样品化学成分的综评分, 结果如表 8 所示。

2.8.4 AHP-CRITIC 复合加权法分析 采用 AHP-CRITIC 复合加权法对麸炒白术饮片的化学成分含

表 9 小分子成分 CRITIC 权重分析结果
Table 9 Results of CRITIC weight analysis of small molecular components

小分子成分	指标变异性	指标冲突性	信息量	权重系数
1	0.416	1.996	0.830	0.688 7
2	0.346	2.995	1.035	0.858 7
3	0.366	3.567	1.307	0.108 4
4	0.361	3.745	1.352	0.112 2
5	0.379	1.890	0.717	0.594 4
6	0.379	1.890	0.717	0.594 4
7	0.379	1.890	0.717	0.594 4
8	0.379	1.890	0.717	0.594 4
9	0.372	2.152	0.800	0.663 1
10	0.400	2.328	0.930	0.771 6
11	0.367	4.131	1.516	0.125 7
多糖	0.310	4.585	1.421	0.117 8

量以及水煎液的理化参数和抗氧化活性 3 个因素进行综合权重分析, 权重分析结果如表 10 所示, 对各组样品的综合评分见表 11。

表 10 CRITIC 综合权重分析结果
Table 10 Results of comprehensive CRITIC weight analysis

指标	指标变异性	指标冲突性	信息量	权重系数
理化参数	0.319	2.196	0.700	0.429 9
化学成分含量	0.375	1.452	0.544	0.334 4
抗氧化活性	0.287	1.336	0.384	0.235 7

表 11 AHP-CRITIC 复合加权分析综合评分结果
Table 11 AHP-CRITIC composite weighted analysis of comprehensive scoring results

序号	综合评分		
	AHP 法	CRITIC 法	AHP-CRITIC 综合加权法
1	0.871	0.800	0.882
2	0.142	0.184	0.120
3	0.845	0.587	0.822
4	0.200	0.278	0.209
5	0.491	0.662	0.512
6	0.847	0.679	0.828
7	0.320	0.612	0.325
8	0.253	0.492	0.281
9	0.287	0.308	0.309
10	0.733	0.494	0.714
11	0.918	0.820	0.901
12	0.355	0.534	0.366
13	0.179	0.144	0.157
14	0.157	0.315	0.186
15	0.332	0.393	0.341
16	0.155	0.327	0.154
17	0.221	0.211	0.226

2.8.5 BBD-RSM 优化炮制工艺结果与分析 采用 Design-Expert 13 对综评分的结果进行分析, 并优化麸炒白术的炮制工艺, 得到 2 次多元式回归方程: $Y=0.829\ 6-0.029\ 1\ X_1-0.057\ 1\ X_2+0.018\ 2\ X_3+0.049\ 9\ X_1X_2-0.092\ 9\ X_1X_3-0.030\ 2\ X_2X_3-0.261\ 1\ X_1^2-0.363\ 1\ X_2^2-0.222\ 0\ X_3^2$ 。由表 12 方差分析结果可知, 模型 P 值 <0.05 , 表明因素与响应值有显著的相关性, 失拟项 $P>0.05$, 说明其他因素对实验结果影响较小, 该模型拟合合格, 可靠性较高。 R_{adj}^2 为 0.939 0, 表明麸炒白术工艺综评分有 93.90% 受到麦麸用量(X_1)、炒制温度(X_2)和炒制时间(X_3) 3 个因素的影响。其中, 因素 X_1 、 X_3 的差异具有显著性 ($P<0.05$), 因素 X_2 的差异不显著 ($P>0.05$),

表 12 麸炒白术方差分析
Table 12 Bran-fried AMR analysis of variance

差异来源	平方和	自由度	均方	F 值	P 值
模型	1.250 0	9	0.138 8	28.360 0	0.000 1
X_1	0.006 8	1	0.006 8	1.380 0	0.278 5
X_2	0.026 1	1	0.026 1	5.330 0	0.054 3
X_3	0.002 6	1	0.002 6	0.539 9	0.486 4
X_1X_2	0.010 0	1	0.010 0	2.040 0	0.196 4
X_1X_3	0.034 5	1	0.034 5	7.050 0	0.032 7
X_2X_3	0.003 7	1	0.003 7	0.746 4	0.416 2
X_1^2	0.287 1	1	0.287 1	58.670 0	0.000 1
X_2^2	0.555 0	1	0.555 0	113.400 0	<0.000 1
X_3^2	0.207 4	1	0.207 4	42.390 0	0.000 3
残差	0.034 3	7	0.004 9		
失拟项	0.012 9	3	0.004 3	0.809 2	0.551 2
纯误差	0.021 3	4	0.005 3		
总差	1.280 0	16			
R^2	0.973 3				
R_{adj}^2	0.939 0				

说明麦麸用量 (X_1) 和炒制时间 (X_3) 与炒制温度 (X_2) 相比对麸炒白术工艺综合评分影响较大。交互 X_1X_3 差异显著 ($P<0.05$); X_1^2 、 X_2^2 、 X_3^2 差异极其显著 ($P<0.01$), 说明各因素与响应值间为非单一线性关系。

2.8.6 最佳工艺验证 采用 Design-Expert 13 软件绘制因素与响应值关系的三维效应面图, 详见图 2。根据响应面软件优化后预测得到麸炒白术的最佳炮制工艺条件为 100 g 药材用 9.625 g 麦麸, 在 238.28 °C 下炒制 6.031 min, 综合评分的 OD 值为 0.913 0。结合实际生产条件进行调整: 100 g 白术药材用 10.0 g 麦麸, 在 240 °C 下炒制 6 min, 筛去麦麸, 即得。将所得样品重复实验 3 次以进行验证, 详细结果见表 13。结果验证试验样品的综合评分 OD 值分别为 0.909、0.914、0.908, 接近预测值, 说明该制备工艺稳定、可行。

2.9 抗氧化活性测定实验

选取 17 组不同批次的麸炒白术水煎液进行抗氧

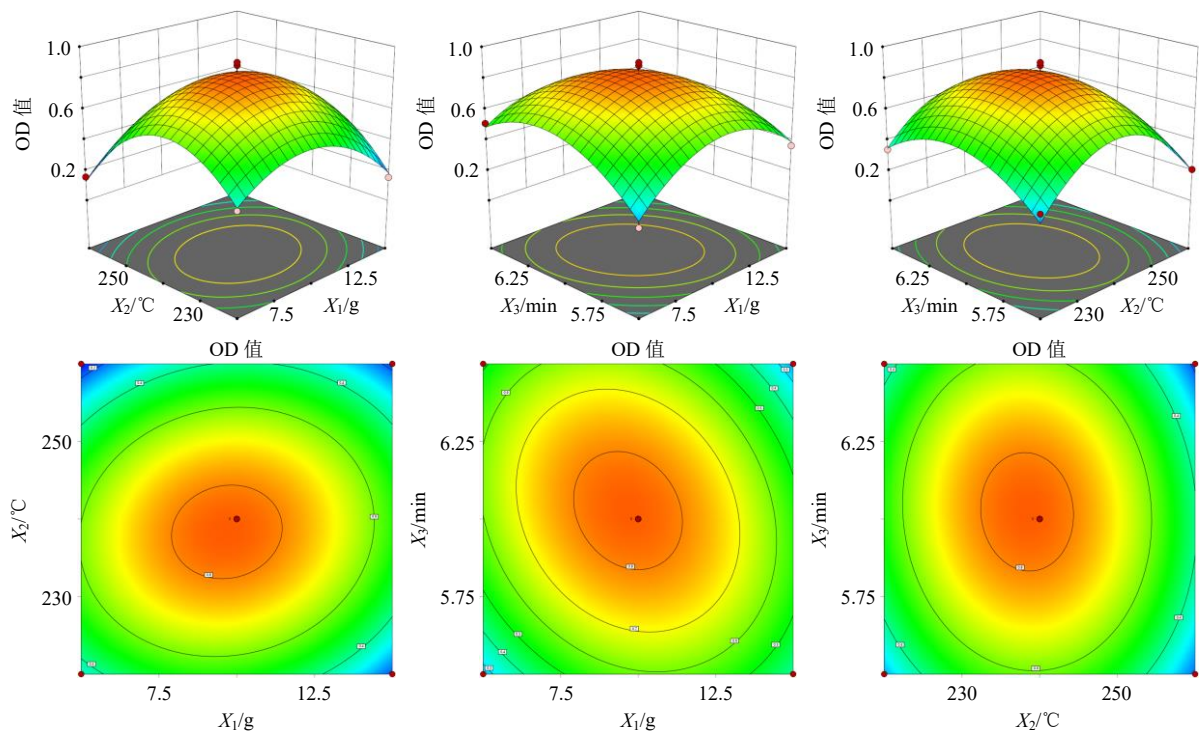


图 2 响应面交互图

Fig. 2 Response surface interaction diagram

化活性测定实验, 各组麦麸的炮制条件遵循表 6。由表 14 可知, 质量浓度的变化对 DPPH、ABTS 自由基清除率的影响较大。当质量浓度为 0.8 mg/mL 时, 麸炒白术水煎液对 DPPH 自由基的最大清除率为 69.0%, 对 ABTS 自由基的清除率为 72.1%, 说

明麸炒白术水煎液具有较强的抗氧化能力。

2.10 药效成分与色度关联分析

鉴于中药饮片水煎液实际应用中缺乏快速的测定成分含量方法, 将考察饮片水煎液表观色度与内在关键成分的相关性, 为饮片水煎液质量快速评估

表 13 麸炒白术炮制工艺优化验证实验

Table 13 Verification experiment on optimization of processing technology of bran-fried AMR																						
序号	pH 值	电导率/ (mS·cm ⁻¹)	黏度/ (mPa·s ⁻¹)	色度值			小分子成分质量分数/(μg·g ⁻¹)											多糖/ %	清除率/%		AHP-CRITIC 法综合评分	
				L*	a*	b*	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11		DPPH	ABTS		
1	5.68	0.33	23.79	5.48	0.38	1.43	3.85	1.87	2.25	1.46	18.18	18.52	4.11	5.61	4.07	1.79	2.62	45.00	61.00	62.00	0.909	
2	5.73	0.26	23.79	5.43	0.12	1.84	3.45	1.57	2.23	1.45	16.00	19.01	4.03	5.61	4.19	1.79	2.65	47.70	69.00	48.00	0.914	
3	5.64	0.32	23.82	5.21	0.24	1.76	3.42	1.66	2.61	1.45	16.72	19.19	4.24	5.96	4.19	1.87	2.71	42.90	58.00	44.00	0.908	

表 14 麸炒白术水煎液对 DPPH 和 ABTS 清除能力

Table 14 DPPH scavenging ability and ABTS scavenging ability of bran-fried AMR decoction								
组别	DPPH 自由基清除率/%				ABTS 自由基清除率/%			
	0.1 mg·mL ⁻¹	0.2 mg·mL ⁻¹	0.4 mg·mL ⁻¹	0.8 mg·mL ⁻¹	0.1 mg·mL ⁻¹	0.2 mg·mL ⁻¹	0.4 mg·mL ⁻¹	0.8 mg·mL ⁻¹
1	28.08	30.89	32.97	60.48	14.31	14.67	30.06	60.06
2	18.90	27.33	44.69	52.21	10.35	13.74	27.69	40.14
3	6.34	12.79	23.66	49.19	8.28	15.96	17.31	29.61
4	26.10	28.52	48.20	63.65	19.80	31.14	36.09	63.63
5	23.48	28.13	43.03	56.63	9.60	12.06	17.58	21.36
6	31.82	39.26	50.49	70.67	22.11	24.18	29.97	54.90
7	19.08	39.26	50.49	52.73	23.70	23.94	28.83	38.34
8	9.78	11.78	20.90	23.87	11.91	15.36	21.96	64.74
9	24.73	29.72	29.87	58.16	14.31	22.89	34.65	72.09
10	4.13	7.62	12.25	36.01	3.69	11.97	19.35	32.25
11	27.25	43.50	52.21	69.00	25.32	36.18	53.46	71.64
12	20.28	21.68	28.29	28.39	16.11	17.82	46.20	62.19
13	8.03	14.43	37.75	65.08	7.77	16.83	25.89	50.94
14	7.38	12.97	18.12	41.42	1.41	3.93	7.02	11.97
15	15.47	23.30	27.01	50.70	9.38	15.3	16.68	24.45
16	9.39	15.50	27.25	44.04	9.30	22.5	50.28	63.15
17	9.85	15.73	19.37	46.96	7.89	8.28	11.85	23.88

提供依据。

2.10.1 相关性分析 采用 SPSS 26.0 对麸炒白术饮片水煎液随机选取 17 批的 11 种成分含量及色度值 L^* 、 a^* 、 b^* 作相关性系数表 (表 15)。结果显示, 随着小分子活性成分含量的增加, L^* 值均减小、 b^* 值均增大; 除 2 外的其他活性成分含量增高, a^* 均增大。其中 L^* 值与 10 相关性不显著, 与 5、2 呈显著负相关, 与 11、9、1、3、4、7、6、8 呈极显著负相关; a^* 值除与 11、9、3 呈极显著正相关, 与其他活性小分子成分相关性均不显著; b^* 值与 4、2 相关性不显著, 与 10、6、5 呈显著正相关, 与 10、9、1、3、7、8 呈极显著正相关。

2.10.2 回归分析 通过相关性分析可知, 除 10、4、6、5、2 外, 色度值 L^* 、 a^* 、 b^* 与小分子活性有效成分之间具有显著关联性, 为明确其关系, 进一步进行回归分析。以麸炒白术水煎液中 11、9、1、3、7、8 为因变量, 色度值 L^* 、 a^* 为自变量, 用 SPSS

26.0 软件分别进行逐步回归分析结果见表 16, 表明成分与色度值构建的模型均具有显著性, 线性关系良好, 可通过色度值 L^* 、 a^* 、 b^* 快速预测 11、9、1、3、7、8 含量。

3 讨论

白术始载于《神农本草经》, 被列为上品, 但直到唐代孙思邈《千金翼方》中才出现“熬令变色”及“熬黄”的记载, 这应该也是最早记载的白术炮炙方法。此后, 宋代出现了土煮、土蒸、醋浸、炮黄、剉碎炒黄、炒焦、煨、焙等大量的炮制方法^[11]。同时, 在这一时期也出现了最早关于麸炒法的记载, 《圣济总录》中首次记载了“锉、麸炒”。明清时期中药炮制技术得到了快速发展, 又出现了将蜜水、酒、枳实、香附、陈皮水煎液等液体辅料用于白术的炮制, 并出现了米上蒸、盐水炒、制炭等多种新的炮制方法^[12-13]。然而, 目前仅有麸炒、土炒、炒焦和米炒几种炮制方法仍流传至今。其中, 仅有

表 15 色度值与 11 种小分子活性成分相关性系数

Table 15 Correlation coefficient between chromaticity value and 11 kinds of small molecule active components															
指标	相关性系数														
	L^*	a^*	b^*	11	10	9	1	3	4	7	6	8	5	2	
L^*	1.000														
a^*	-0.597*	1.000													
b^*	-0.471	-0.076	1.000												
11	-0.913**	0.680**	0.609**	1.000											
10	-0.465	0.427	0.551*	0.659**	1.000										
9	-0.846**	0.618**	0.641**	0.938**	0.814**	1.000									
1	-0.719**	0.462	0.648**	0.795**	0.834**	0.933**	1.000								
3	-0.881**	0.640**	0.620**	0.967**	0.765**	0.979**	0.891**	1.000							
4	-0.626**	0.414	0.456	0.643**	0.670**	0.786**	0.754**	0.728**	1.000						
7	-0.667**	0.473	0.670**	0.813**	0.903**	0.942**	0.916**	0.884**	0.812**	1.000					
6	-0.633**	0.246	0.558*	0.602*	0.603*	0.768**	0.838**	0.684**	0.747**	0.752**	1.000				
8	-0.667**	0.474	0.671**	0.814**	0.902**	0.942**	0.915**	0.884**	0.812**	1.000**	0.750**	1.000			
5	-0.547*	0.170	0.548*	0.536*	0.606**	0.686**	0.813**	0.624**	0.725**	0.680**	0.929**	0.678**	1.000		
2	-0.527*	-0.023	0.362	0.343	0.265	0.491*	0.573*	0.445	0.526*	0.480	0.759**	0.479	0.621**	1.000	

* $P<0.05$ ** $P<0.01$ 。

表 16 回归模型及回归方差分析

Table 16 Regression model and regression analysis of variance

回归模型	R	R^2	调整后 R^2
$Y_{11}=7.368-0.916 X_{L^*}$	0.913	0.833	0.822
$Y_9=-0.900 X_{L^*}+0.767 X_{b^*}+8.046 X_{a^*}$	0.947	0.896	0.872
$Y_1=7.785-1.341 X_{L^*}+0.513 X_{b^*}$	0.800	0.640	0.588
$Y_3=8.663-1.259 X_{L^*}$	0.881	0.776	0.762
$Y_7=0.652 X_{b^*}+5.707 X_{a^*}$	0.852	0.725	0.686
$Y_8=1.115 X_{b^*}+9.770 X_{a^*}$	0.853	0.728	0.689

麸炒法被《中国药典》收载为白术的法定炮制方法。但是，《中国药典》2025 年版有关麸炒白术的炮制工艺表述相对含糊，缺乏具体操作细则及可量化的评价指标，故而麸炒白术的质量和临床疗效难以保证。因此，有必要对麸炒白术的炮制工艺进行系统、规范的研究。

实际上，中药饮片的质量优劣与其所含活性成分密切相关。白术主要活性成分有多糖类、倍半萜内酯类、挥发油类等。现代研究表明，白术多糖具有抗氧化应激和改善免疫功能的作用^[14]；白术内酯类成分具有抗肿瘤和抗炎等作用^[15-16]；白术挥发油类具有抗菌、抗氧化、调节胃肠道作用^[17-18]。这些成分协同构成麸炒白术“健脾益气，燥湿和胃”功效的现代药理学基础，为了全面评价麸炒白术的质量，本研究选取了白术多糖、11、10、9、1、3、4、

7、6、8、5、2 这些活性成分作为化学指标用于优化麸炒白术的炮制工艺。

同时，中药多以汤剂的形式给药。目前，汤剂的质量评价除了考察有效成分的含量，还会对汤剂的理化参数，如 pH 值、电导率、黏度和色度等进行分析。实际上，pH 值作为溶液酸碱度的量化表达，本身也与生物碱、苷类成分的离子化状态与稳定性密切相关；电导率是衡量溶液离子浓度的重要指标，也可影响饮片水煎液的稳定性和药效成分的释放；黏度可影响汤剂在黏膜的附着滞留时间，附着滞留时间越长，生物利用度越高；色度则通过 L^* 、 a^* 、 b^* 值直观反映活性成分的溶出浓度及氧化程度，同时可监测煎煮火候异常（如焦化导致的 ΔL^* 值显著降低）^[19]。因此，本研究选择了 pH 值、电导率、黏度以及色度作为评价指标^[20-22]，拟从不同维度来考察麸炒白术饮片水煎液的质量，从而进行麸炒白术炮制工艺的优化。

此外，现代研究已证实白术具有调节胃肠功能、抗炎、抗氧化和抗肿瘤等作用。鲁放^[23]发现白术经过炮制后可用于治疗胃溃疡，其机制可能为白术缓解氧化应激反应从而减轻胃黏膜攻击因子对于胃黏膜的侵袭损伤。翟春梅等^[24]发现白术可通过提高机体抗氧化功能而改善 D-半乳糖诱导的衰老模型小鼠的学习记忆等认知障碍，并且白术的抗氧化能力与其“健脾益气”经典功效息息相关。

现代药理学研究表明,脾胃虚证常伴随氧化应激损伤,伴随着自由基过量累积,引发对肠道的特异性炎症^[25-26]。麸炒白术中的白术多糖可通过激活核转录因子 E₂ 相关因子 2 (nuclear factor E₂-related factor 2, Nrf2) 信号通路降低白细胞介素-1 β (interleukin-1 β , IL-1 β)、IL-6、肿瘤坏死因子- α (tumor necrosis factor- α , TNF- α) 水平,提高 IL-4 水平,抑制谷胱甘肽过氧化物酶 (glutathione peroxidase, GSH-Px) 和丙二醛水平,显著减轻肠道氧化损伤和改善肠道能量代谢,有“益气”之功^[27]。因此,本研究选择抗氧化活性作为生物活性评价指标,并系统考察麸炒白术饮片水煎液对 DPPH 和 ABTS 2 种自由基的清除率,将生物评价的方法应用于工艺优化的研究,以确保工艺优化的全面性与科学性。

然而,在中药炮制工艺的多指标综合评价体系中,指标权重分配策略的科学性直接影响炮制工艺的结果。目前,常用的权重分配方法包括熵值法、主成分分析法、AHP 法、CRITIC 权重法、TOPSIS 法等。其中,AHP 法(层次分析法)是一种定性与定量分析相结合的多目标决策分析方法,其广泛应用于不同学科领域,能够把复杂问题分解形成不同因素及指标的层次结构,可以更加全面、科学地反映指标层对实验结果的影响,但其依赖主观经验对指标进行两两比较赋权,这可能会导致得出的权重是相对的优先级排序,有时较小的权重差异可能导致等级反转。CRITIC 法是基于指标变异系数与冲突性进行客观赋权,优势在于客观性强且能捕捉指标间相关性,虽能规避人为偏好干扰,但是完全忽略决策者经验、高度依赖数据质量且无法有效处理定性指标或非线性冲突关系。正如本实验中 CRITIC 法处理后数据显示,9 因变异系数较低(CV=37.2%)仅分配 0.07 权重,难以体现中药“君臣佐使”理论下核心药效成分的优先级。简言之,AHP 法适用于有丰富专家经验但数据不足的情况,CRITIC 法适用于有大量客观数据但缺乏先验知识的场景。

本实验选择 AHP-CRITIC 混合加权法结合 BBD-RSM 优化麸炒白术炮制工艺。该方法整合 2 种赋权方法的特点,既有专家判断的层次分解,又兼顾纯数据驱动的统计计算,保留了 9 等有效成分的核心地位,客观反映麸炒白术饮片水煎液理化参数(权重 0.17)与抗氧化活性(权重 0.15)对工艺

的响应性,也平衡了麸炒白术工艺参数筛选的科学性与客观性。通过该方法确定了麸炒白术的最优工艺条件为 100 g 白术饮片用 10.0 g 麦麸,在 240 °C 下炒制 6 min。该工艺经验证实验发现模型的理论预测值与实测值基本一致,这也证明了麸炒白术工艺的科学性。总之,本研究采用 AHP-CRITIC 复合加权法结合 Box-Behnken 设计的方法,选择了化学成分-理化参数和药效作用多层次的评价指标来对麸炒白术的炮制工艺进行优化,所确定的工艺切实、可行,能够为提升麸炒白术饮片的质量和临床疗效提供保障。同时,该研究模式突破了单一化学指标做为质量控制标准,为其他中药炮制工艺的优化也具有参考价值。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 上官琨瑶,尹露莹,贾梦鑫,等. 生白术健脾有效部位及活性成分的分离鉴定 [J]. 中草药, 2025, 56(9): 3058-3072.
- [2] 陈忠新,刘石磊,康宇红,等. 基于 RNA-Seq 技术探讨生(麸炒)白术对大鼠基因表达的差异性分析 [J]. 中医药信息, 2025, 42(1): 25-34.
- [3] Zhu B, Zhang Q L, Hua J W, et al. The traditional uses, phytochemistry, and pharmacology of *Atractylodes macrocephala* Koidz.: A review [J]. *J Ethnopharmacol*, 2018, 226: 143-167.
- [4] 何荣杰,马莉,李玉美. 白术的历史沿革研究进展 [J]. 中国城乡企业卫生, 2024, 39(9): 31-34.
- [5] 王纬,宋宗华,马双成,等. 2025 年版《中国药典》凡例的变化与特点 [J]. 中国药品标准, 2025, 26(1): 11-16.
- [6] 王凡一. 基于“外观-成分-药效”相关性探究麸炒白术中辅料麦麸的作用机制 [D]. 沈阳: 辽宁中医药大学, 2024.
- [7] 拱健婷,徐媛媛,关佳莉,等. 基于分光测色计、GC-IMS 技术结合化学计量学的瑞香狼毒醋制前后颜色气味差异研究 [J]. 中草药, 2025, 56(11): 3854-3867.
- [8] 冯军,张颖,胡仁传,等. 方枝守宫木中黄酮类化学成分及其体外抗氧化活性研究 [J]. 中草药, 2025, 56(10): 3417-3425.
- [9] 迟雪洁,王娟. 不同产地半枝莲总黄酮含量测定及抗氧化活性比较研究 [J]. 山西中医药大学学报, 2025, 26(1): 35-40.
- [10] 刘绍姜,钟凌云,张弘弢,等. 基于 AHP-CRITIC 法结合 Box-Behnken 设计-响应面法优选盐麸泽泻炮制工艺及药效研究 [J]. 中草药, 2025, 56(8): 2773-2785.
- [11] 鲁放,翟昌明,屈会化,等. 白术古今炮制法小考 [J].

- 中华中医药杂志, 2022, 37(2): 963-967.
- [12] 陆跃, 陈仁寿. 经典名方白术散的古代文献分析和考证 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2023, 29(8): 150-160.
- [13] 李亚飞, 汤璐璐, 赵明方, 等. 基于 Heracles NEO 超快速气相电子鼻麸炒白术炮制全过程气味变化识别研究 [J]. 中草药, 2023, 54(15): 4812-4822.
- [14] 左晓利, 娄静, 闫悦. 基于“肝病实脾”理论探讨白术多糖对酒精性肝损伤大鼠的保护作用 [J]. 中药新药与临床药理, 2025, 36(4): 534-541.
- [15] 高琛, 孙峰山, 李娜. 白术内酯 III 调节 PERK-eIF2 α -ATF4 信号通路介导内质网应激对脑缺血-再灌注损伤大鼠神经细胞凋亡的影响 [J]. 中药材, 2024, 47(10): 2615-2619.
- [16] Hai C T, Luyen N T, Giang D H, *et al.* *Atractylodes macrocephala* rhizomes contain anti-inflammatory sesquiterpenes [J]. *Chem Pharm Bull*, 2023, 71(6): 451-453.
- [17] 李浩然, 彭煜伦, 詹浩群, 等. 不同产地白术挥发油的化学成分及抗氧化和抑菌活性探究 [J]. 农业与技术, 2025, 45(5): 30-35.
- [18] 李静, 何牟, 李玲, 等. 白术挥发油化学成分及药理作用研究进展 [J]. 中成药, 2024, 46(3): 881-889.
- [19] 单东杰, 罗秀明, 常艳丽, 等. 基于化学计量学研究莪术-三棱药对水煎液物理参数与化学成分的相关性 [J]. 中草药, 2022, 53(17): 5363-5378.
- [20] Bai Y, Gong J Y, Guo Y L, *et al.* Study on the correlation between chromaticity value and saponin content of red ginseng [J]. *J Chin Med Mater*, 2020, 43(10): 2465-2470.
- [21] 马聪, 余志晴, 田佩灵, 等. 黄连标准汤剂、配方颗粒与盐酸小檗碱对大肠埃希菌的抑菌作用机制研究 [J]. 中国抗生素杂志, 2023, 48(8): 930-936.
- [22] 宁黎丽, 李雪梅. 化学药物稳定性研究的试验方法和设计 [J]. 中国新药杂志, 2010, 19(12): 1013-1016.
- [23] 鲁放. 基于纳米技术的焦白术抗胃溃疡物质基础和作用机制研究 [D]. 北京: 北京中医药大学, 2020.
- [24] 翟春梅, 薛迎凤, 郭鹏飞, 等. 白术对 *D*-半乳糖致衰老小鼠学习记忆和抗氧化能力的影响 [J]. 中医药学报, 2021, 49(7): 26-31.
- [25] 张洋, 惠小苏. 柴胡疏肝散对肝郁脾虚型炎症性肠病患者氧化应激指标及 MAPKs 通路功能的影响 [J]. 中药材, 2025, 48(4): 1009-1013.
- [26] 尹强, 李丹阳, 段行武, 等. 疏肝健脾颗粒对轻中度特应性皮炎合并睡眠障碍患者的疗效与抗氧化机制研究 [J]. 中国中医基础医学杂志, 2025, 31(1): 94-98.
- [27] 陶铭, 尹苗苗, 王帅, 等. 白术多糖研究进展 [J]. 中医药学报, 2025, 53(6): 109-116.

[责任编辑 郑礼胜]