



# 類似した特徴を有する漢方製剤の判別性能向上に関する検討

*Improvement of discrimination performance for herbal medicines with similar characteristics*

森 芳和\*

*Yoshikazu Mori*

矢野 耕也\*\*

*Koya Yano*

及川 直毅\*\*\*

*Naoki Oikawa*

Due to its excellent stability and reproducibility, near infrared (NIR) spectroscopy is an effective way to determine the type and quality of kampo medicines, and it yields high identifiability. There have been cases, however, in which identification has been difficult because certain combinations of medicines have similar waveforms, making them hard to distinguish. The present study involved 1,127 NIR waveforms, which were classified into 37 types on the basis of absorbability. Their Mahalanobis distances were also used as characteristic values, and the unit space data were resampled by the bootstrap method. As a result, it became possible to distinguish all but one of eleven patterns that had been difficult to recognize before.

**Key words** : near infrared spectroscopy, KAMPO medicine, waveform, bootstrap, equivalence, Mahalanobis distance, quality engineering, Taguchi methods, S/N ratio

## 1. はじめに

漢方製剤（処方）は生薬の水抽出物である原薬と添加剤により構成されているが、その原薬中には多くの有機化合物が含まれている。近赤外分光分析（Near Infrared Spectroscopy, 以下NIR）により、各漢方処方含有する有機化合物の種類と量の違いにより固有の吸収波形（NIR波形）を示す。また、NIR波形は安定性があり、再現性も非常に高く、測定が短時間で簡便なことから注目が集まっている

測定法である。このことからNIR波形は処方ごとの相違を捉える選択性も低くはなく、前報<sup>1)</sup>では37処方全ての組合せについて判別性の検討を行ったところ、95%以上の判別が可能であった。しかし、一部の特定の処方同士の組合せについて誤判別が認められ、処方同士の判別が容易でない組合せがあることが明らかになったため、当該の組合せについての判別性の向上の検討を行うことが本研究での目的である。そこで判別性の改善策として、(1)処方判別するための項目（変数）の変更と、(2)処方判別に適した単位空間データの選定方法の変更を行った。以下、2章で判別性の改善策として実施した(1)と(2)の具体的な内容について述べ、3章で詳細な解析手順、4章で判別の結果を示した。なおマハ

\* (株)ツムラ、正会員

\*\* 日本大学、正会員

\*\*\* 日本大学