

不同产地大青叶质量的灰色模式识别研究

孙海霞, 周莲, 吴启勋 (1. 青海大学化工学院, 青海西宁810016; 2. 青海民族学院化学系, 青海西宁810007)

摘要 在灰色关联分析的基础上, 建立了大青叶药材质量评价的灰色模式识别模型。按质量等级, 10个不同产地的样品被划分为5类。综合评价结果与实际情况基本相符。与统计模式识别模型比较, 灰色模式识别模型具有计算简便、适用范围广等特点。

关键词 大青叶; 灰色系统; 灰色关联分析; 模式识别; 质量评价

中图分类号 S567.23*9 文献标识码 A 文章编号 0517-6611(2009)12-05484-01

Study on Foliomisatidis Quality from Different Habitats with Grey Pattern Recognition

SUN Hai-xia et al (College of Chemical Engineering, Qinghai University, Xining, Qinghai 810016)

Abstract Based on grey relational analysis, the grey pattern recognition model on Foliomisatidis quality was established. According to quality grade, the F. isatidis samples from 10 different habitats were classified to 5 grades. The comprehensive evaluation result was basically same to the actual situation. Compared with the statistical pattern recognition model, the grey pattern recognition model had widely application scope and simple calculation.

Key words Foliomisatidis; Grey system; Grey relation analysis; Pattern recognition; Quality evaluation

大青叶 Foliomisatidis 系十字花科植物菘蓝 *Isatis indigotica* Fort. 的干燥叶, 具有清热解毒、凉血消斑之功效。《中国药典》2005年版收载了其定量测定方法^[1]。据文献报道, 大青叶中含有吲哚类生物碱靛蓝(indigotin)、靛玉红(indirubin)和喹啉类生物碱、有机酸类、苷类等多种成分^[2]。由于我国大青叶资源分布广泛, 产地自然环境差异较大, 导致全国各地大青叶的品质参差不齐。因此科学地综合评价大青叶的质量具有十分重要的意义。笔者采用灰色模式识别方法, 构建了灰色模式识别模型, 综合评价了不同产地大青叶的质量。为中药质量评价提供了一种全新的方法, 具有十分重要的理论意义和实用价值。

1 灰色模式识别方法步骤

参考吴启勋等^[3]的方法。

1.1 选择参考序列 设有 n 个中药材样品, 每样品有 p 项评价指标, 这样组成了评价单元序列: $\{X_{ik}\}, (i=1, 2, \dots, n; k=1, 2, \dots, p)$ 。用灰色关联度作为评价测度, 首先必须选择参考序列。由于成分数据的极性可能不同, 在应用灰色系统理论制高点原理确定参考序列指标时, 对于数值越大越优的指标, 应选其中对应指标的最大值。设参考序列中的某个指标为 $\{X_{sk}\}, (k$ 为 $1, 2, \dots, p$ 中的某个指标), 则其为 n 个样品对应指标的最大值, 即:

$$\{X_{sk}\} = \max_i \{X_{ik}\}$$

对于数值越小越优的指标, 应选其中对应指标的最小值。

1.2 原始数据均值化处理 原始数据由于量纲、范围不同, 通常存在测度不统一的问题, 因此需要对其进行处理。一般可采用均值化处理, 即:

$$Y_{ik} = X_{ik} / \bar{X}_k$$

式中, Y_{ik} 为均值化处理后的数据; X_{ik} 为原始数据; \bar{X}_k 为 n 个样品第 k 个指标的均值。

1.3 计算关联系数 评价序列 $\{X_{ik}\}$ 相对于参考序列 $\{X_{sk}\}$ 的关联系数 $r(X_{sk}, X_{ik})$ 按下式计算:

$$r(X_{sk}, X_{ik}) = \frac{\min_i + \max_k}{|Y_{ik} - Y_{sk}| + \max_k}$$

式中, $\min_i = \min_k |Y_{ik} - Y_{sk}|$; $\max_k = \max_i |Y_{ik} - Y_{sk}| (i=1, 2, \dots, p)$; 为分辨系数, 取值为 0.5。

1.4 计算关联度 评价序列 $\{X_{ik}\}$ 相对于参考序列 $\{X_{sk}\}$ 的关联度 $r(X_s, X_i)$ 按下式计算:

$$r(X_s, X_i) = \frac{1}{p} \sum_{k=1}^p r(X_{sk}, X_{ik})$$

根据评价序列相对于参考序列的关联度大小, 可给出各评价单元的优劣排序。某待评序列与参考序列的关联度较大时, 说明该序列与参考序列即质量最优序列最相似, 亦即质量最优。这样, 最终可得到中药材质量优劣的综合评价结果。

2 结果与分析

2.1 不同产地大青叶 4 种成分的测定 参考王文清等^[4]的方法, 测定不同产地大青叶中 4 种指标性成分的含量, 结果见表 1。

2.2 不同产地大青叶质量综合评价 按上述灰色模式识别方法, 对 4 种指标性成分含量与药材质量进行关联分析, 计算关联系数和关联度。由表 2 可知, 安徽阜阳、安徽亳州、河北安国等(关联度依次为 0.996 4、0.775 0、0.747 0) 地出产的大青叶质量较好。该评价结果与王文清等^[4]的评价结果基本相符。该研究以大青叶药材中主要有效成分含量为药材质量评价指标, 较单纯以靛玉红含量评价药材质量更为科学。

表 1 不同产地大青叶中 4 种指标性成分的含量 ($n=3$)

Table 1 Content of 4 index constituents in Foliomisatidis from various habitats ($n=3$) %

序号 Sequence	产地 Habitats	邻氨基苯甲酸 Arthrailic acid	丁香酸 Syringic acid	腺苷 Adenosine	靛玉红 Indirubin
1	陕西宝鸡	0.093 4	0.008 93	0.123	0.019 2
2	安徽宣城	0.058 1	0.009 07	0.083	0.014 8
3	陕西安定	0.106 0	0.008 18	0.104	0.022 5
4	安徽亳州	0.109 4	0.008 67	0.159	0.023 8
5	安徽阜阳	0.140 6	0.008 39	0.176	0.037 1
6	山东临沂	0.104 5	0.007 23	0.128	0.019 6
7	河北安国	0.099 8	0.006 50	0.155	0.026 8
8	江苏泰兴	0.083 7	0.005 09	0.117	0.018 3
9	陕西咸阳	0.126 8	0.006 45	0.134	0.026 9
10	甘肃陇南	0.113 2	0.008 18	0.109	0.025 0
	参考序列	0.140 6	0.009 07	0.176	0.037 1

作者简介 孙海霞(1968-), 女, 江苏阜宁人, 副教授, 从事化学计量学的教学工作。

收稿日期 2009-01-12

(下转第 5487 页)

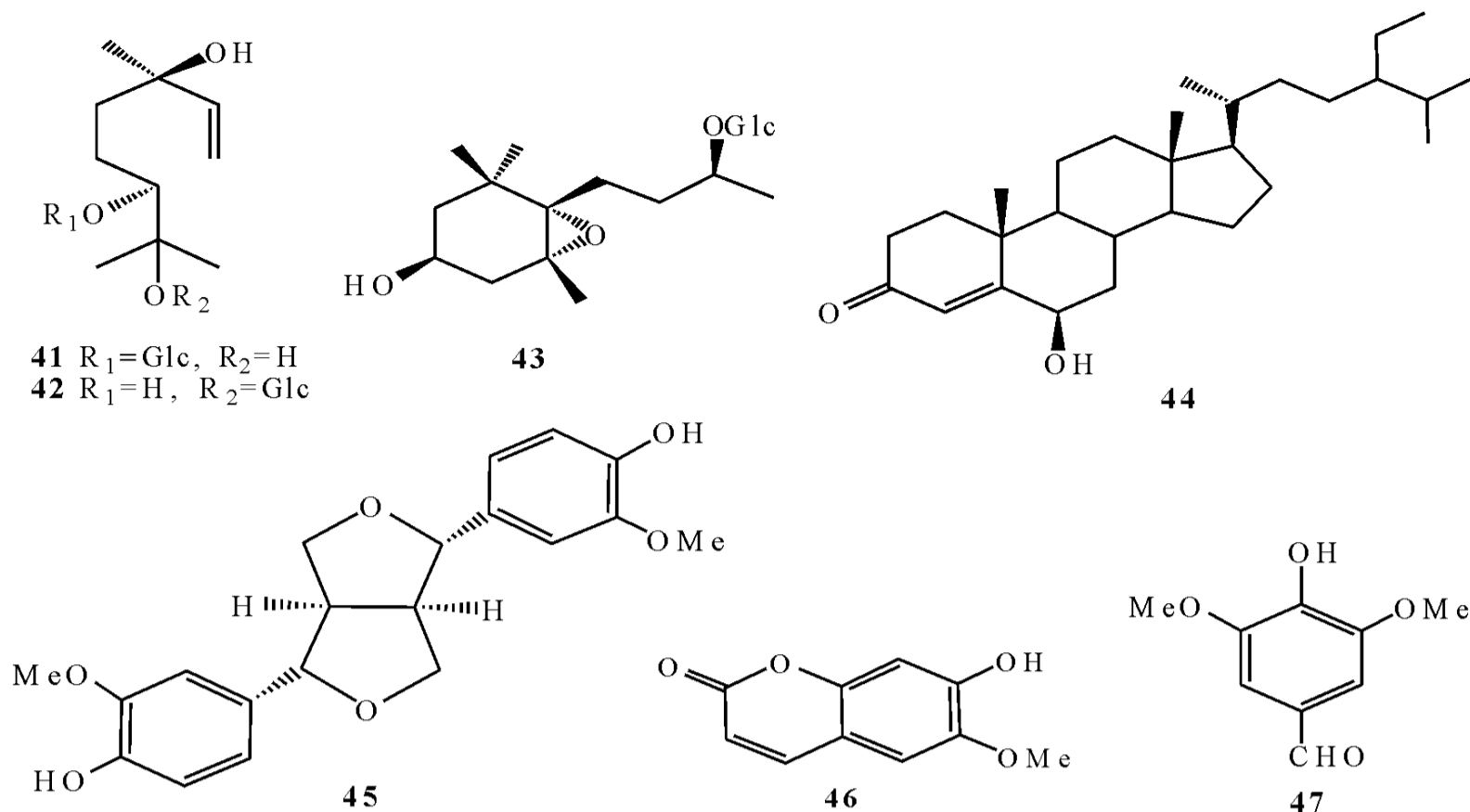


图3 狗骨柴中的其他化合物

Fig. 3 Other compounds in the *D. dubia*

参考文献

- [1] 中国科学院中国植物志编辑委员会. 中国植物志 第七十一卷第二分册 [M]. 北京: 科学出版社, 1999: 364.
- [2] 吴征镒. 新华本草纲要(第二卷) [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1991: 458.
- [3] HE D H, OISUKA H, HRATA E, et al. Ticalysiosides A-G: rearranged ent-kauranid glycosides from the leaves of *Ticalysia dubia* [J]. *J Nat Prod*, 2002, 65(5): 685-688.
- [4] NISHIMURA K, HTOISUYANAGI Y, SUGETA N, et al. Ticalysiolides A-F, new rearranged ent-kaurane diterpenes from *Ticalysia dubia* [J]. *Tetrahedron*, 2006, 62(7): 1512-1519.
- [5] TAMAKI N, MAISUNAMI K, OISUKA H, et al. Rearranged ent-kauranes from the stems of *Ticalysia dubia* and their biological activities [J]. *J Nat Med*, 2008, 62(3): 314-320.
- [6] TAKEYA K, NISHIMURA K, HTOISUYANAGI Y, et al. New diterpenoids from *Ticalysia dubia* [J]. *Harta Med*, 2007, 73(9): 927-928.
- [7] HE D H, MAISUNAMI K, OISUKA H, et al. Ticalyside G and ticalysids A and B: rearranged ent-kaurane-type and ent-kaurane-type diterpenoids from the leaves of *Ticalysia dubia* (Lindl.) Chw [J]. *J Nat Med*, 2007, 61(1): 46-50.
- [8] HE D H, MAISUNAMI K, OISUKA H, et al. Ticalysiosides H-O: ent-kaurane glycosides from the leaves of *Ticalysia dubia* [J]. *Phytochemistry*, 2005, 66(24): 2857-2864.
- [9] OISUKA H, SHITAMOTO J, HE D H, et al. Ticalysiosides P-U: ent-kaurane glycosides and a labdane glycoside from leaves of *Ticalysia dubia* Chw [J]. *Chem Pharm Bull*, 2007, 55(11): 1600-1605.
- [10] NISHIMURA K, HTOISUYANAGI Y, SAKAKURA KI, et al. Three new diterpenoids, ticalyside H and ticalysiosides A and B from *Ticalysia dubia* [J]. *Tetrahedron*, 2007, 63(21): 4558-4562.
- [11] NISHIMURA K, HTOISUYANAGI Y, SUGETA N, et al. Ticalysiamides A-D, diterpenoid alkaloids from *Ticalysia dubia* [J]. *J Nat Prod*, 2007, 70(5): 758-762.
- [12] HANSON JR. Diterpenoids [J]. *Nat Prod Rep*, 2004, 21(2): 312-320.

(上接第5484页)

3 结论与讨论

该研究建立的灰色模式识别模型,是以关联度为测度来综合评价中药材质量的,结果客观、科学。与建立在多元统

计分析基础上的统计模式相比,灰色模式识别因所需样本少,且数据不要求服从经典统计分布,因而具有计算简便、适应面广等特点,适宜于对多组分多指标的中药材质量进行综合评价,具有推广应用前景。

表2 不同产地大青叶4种指标性成分相对于参考序列的关联系数与关联度

Table 2 Correlation coefficient and correlation degree between 4 index constituents in *Fdiomisatis* from various habitats and reference sequence

序号 Sequence	产地 Habitats	关联系数 % Correlation coefficient				关联度 Correlation degree	质量等级 Quality grade
		邻氨基苯甲酸 Arthranilic acid	丁香酸 Syringic acid	腺苷 Adenosine	靛玉红 Indrulin		
1	陕西宝鸡	0.496 3	0.997 0	0.467 3	0.722 0	0.670 7	中
2	安徽宣城	0.360 5	1.000 0	0.333 3	0.675 9	0.592 4	差
3	陕西安定	0.573 4	0.981 2	0.392 4	0.761 0	0.677 0	良
4	安徽亳州	0.598 5	0.991 5	0.732 3	0.777 6	0.775 0	优良
5	安徽阜阳	1.000 0	0.985 6	1.000 0	1.000 0	0.996 4	优
6	山东临沂	0.563 0	0.961 9	0.492 1	0.726 6	0.685 9	良
7	河北安国	0.532 6	0.947 6	0.688 9	0.818 7	0.747 0	优良
8	江苏泰兴	0.449 7	0.921 2	0.440 8	0.712 1	0.630 9	中
9	陕西咸阳	0.771 1	0.946 7	0.525 4	0.820 1	0.765 8	优良
10	甘肃陇南	0.629 2	0.981 2	0.409 7	0.793 5	0.703 4	良

参考文献

- [1] 国家药典委员会. 中国药典 一部 [S]. 北京: 化学工业出版社, 2005.
- [2] LI YY, FANG J G, WANG W Q, et al. The historical research and modern study progress of *Fdiomisatis* [J]. *Chin Tradit Herb Drugs*, 2005, 36(11): 1750-1753.
- [3] 吴启勋, 宇文萍, 卢永昌, 等. 灰色理论与均匀设计在化工过程优化中的应用 [J]. *计算机与应用化学*, 2002, 19(3): 270-273.
- [4] 王文清, 彭静, 万进, 等. 不同产地大青叶质量的化学模式识别研究 [J]. *中草药*, 2007, 38(6): 921-925.