

· 中药与天然药 ·

主成分分析法评价中药材黄芩的质量

广东医药学院药学系 苏薇薇

提要 本文以中药材黄芩为研究对象,对5种黄芩共10个样品进行了紫外光谱分析,所得数量化特征用主成分分析的数学方法进行压缩,概括出不同样品化学成分的异同,实现了对黄芩质量的综合评价。

关键词 主成分分析 质量评价 黄芩

黄芩为常用中药,具有清热燥湿、泻火解毒、止血安胎等功能。目前临床上使用的除药典规定的正品黄芩外,尚有多种代用品和伪品。因此,对其进行质量评价具有实际意义。

本文对5种黄芩共10个样品的乙醇、乙醚、乙酸乙酯提取液进行了紫外光谱分析,并从紫外光谱中提取出反映各样品之间差异的数量化特征,输入计算机,用主成分分析的数学方法进行特征压缩,客观地反映了黄芩样品的内在质量,实现了对5种黄芩的质量评价。

本文为中药的质量评价提供了一条不同于传统植物分类学方法的新途径。传统植物分类学采用的是性状鉴别、显微鉴别等手段,未能反映不同样品之间在化学成分整体上的差异。本文正是从各样品化学成分的整体差异入手,弥补了形态鉴别的不足,且手续简便,具有理论意义和实用价值,可作为中药质量评价的一个有效方法,值得推广应用。

主成分分析的原理

中药材内部所含的化学成分极为复杂,不同的中药材在化学成分的种类和含量上必存在差异,这种差异在紫外光谱上可以用峰形、峰位、峰高等特征表现出来。我们可以

采用图谱解析的方法,将紫外光谱中反映各样品之间差异的特征解析成数量化矩阵,这个矩阵可表示如下:

$$x = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix}$$

矩阵中1, 2, ..., n表示样品, 1, 2, ..., m表示特征, x_{ij} 表示图谱解析后得到的第i个样品第j个特征的数值。对于该矩阵,可以这样理解:在m维特征空间中分布着n个样品,属于同一类别的样品在一定程度上聚集在一起,属于不同类别的样品则相互分离。这样就把中药材质量评价这一复杂问题简化为数学分类的问题。

如果反映样品间差异的特征数较多,我们得到的样品空间矩阵的维数就较高,不能直观地了解样品的分类情况,因而有必要将多维空间压缩成二维平面,以便直观地进行分类。主成分分析就是实现这种压缩的数学方法^[1,2,3],其步骤如下:

1. 对原始数据矩阵进行标准化处理:

$$x_{ij}' = (x_{ij} - \bar{x}_j) / s_j$$

式中, x_{ij}' 为标准化值, $\bar{x}_j$ 为所有样品第j特征的均值, s_j 为对应的标准差。

2. 计算相关系数矩阵R的特征值 λ_1 及特征向量 v_1 , 并将它们按由大到小的顺序排列, 选择最大的两个特征值 λ_1 和 λ_2 , 由对应的特征向量 v_1 和 v_2 与样品矩阵相应分量进行线性组合, 得二维平面, 至此完成了维数的压缩。

3. 计算累积贡献率

数量化矩阵在由多维向二维压缩的过程中, 样品在空间的结构也随之发生了变化, 这种变化可用累积贡献率 α 表示:

$$\alpha = (\lambda_1 + \lambda_2) / (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_m)$$

α 越大, 表明降维后引起的数据结构变化就越小, 一般要求 α 大于0.85。

方法与结果

1. 实验部分

药材编号如下: ①河北承德产正品黄芩 *Scutellaria baicalensis* Georgi, ②山西晋城产正品黄芩; ③内蒙古赤峰产粘毛黄芩 *Scutellaria viscidula* Bge., ④四川西昌产滇黄芩 *Scutellaria amoena* C. H. Wright, ⑤云南丽江产丽江黄芩 *Scutellaria likiangensis* Diels, ⑥山西省药品检验所提供正品黄芩; ⑦甘肃平凉产甘肃黄芩 *Scutellaria rehderiana* Diels, ⑧内蒙古敖汉旗产正品黄芩; ⑨黑龙江省药品检验所提供正品黄芩; ⑩吉林省药品检验所提供粘毛黄芩。所有样品经沈阳药学院许春泉高级工程师鉴定。

药材粉碎后过40目筛, 在105℃烘箱内干燥2小时后置保干器内备用。精取药材粉末2g置于150 ml锥形瓶内, 分别用乙醇、乙醚、乙酸乙酯100 ml超声提取两次, 每次30分钟。过滤, 合并相同溶媒的提取液, 浓缩至10 ml备用。提取用仪器为CS-250超声波清洗器。

分别用各样品的乙醇、乙醚、乙酸乙酯提取液在日立200—20型双光束紫外分光光

度计上绘制紫外光谱, 共得紫外光谱30张。
2. 根据各样品紫外光谱中峰形、峰位、峰高的异同, 用图谱解析法^[4]将紫外光谱解析成数量化矩阵(表1)。

表1 样品的数量化矩阵

①	0	1	0	1	16	0	2	1.6	16	1
②	2	1	0	1	16	0	2	1.6	16	1
③	0	1	0	1	22	0	2	2.3	22	1
④	0	2	2	2	14	1	1	1.4	11	2
⑤	2	2	2	2	11	2	1	1.5	11	2
⑥	0	1	1	1	16	0	2	1.6	16	1
⑦	0	1	0	1	21	0	2	1.9	21	1
⑧	1	1	1	1	17	0	2	1.7	16	1
⑨	0	1	1	1	18	0	2	1.0	16	1
⑩	0	1	1	1	18	0	2	1.8	20	1

3. 对样品的数量化矩阵进行主成分分析, 通过线性组合, 使样品由多维空间的点变为二维平面的点, 整个计算过程是采用BASIC语言在IBM-PC计算机上实现的。表2列出了样品点的平面坐标。

表2 主成分分析后样品点的坐标

①	-1.08	0.65
②	-0.70	1.77
③	-2.77	-1.83
④	4.53	-1.17
⑤	5.74	0.03
⑥	-0.70	0.47
⑦	-2.30	-0.96
⑧	-0.68	0.75
⑨	-0.51	1.22
⑩	-1.43	-0.52

表2中的两列分别代表第一、第二主成分, 经计算第一主成分的贡献率 $\alpha_1 = 0.74$, 第二主成分的贡献率 $\alpha_2 = 0.12$, 累积贡献率 $\alpha = 0.86$, 说明由第一、第二主成分组成的平面可以代替原来的多维空间进行分类。

4. 用主成分分析结果绘制黄芩样品的平面分类图(图1), 图中的点代表黄芩样品, 点与点之间的距离表示样品的相似程度。距离越近, 表明样品的差异就越小, 样品也

就越接近。

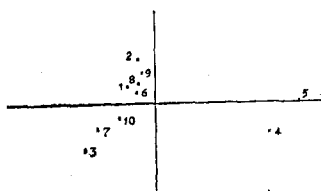


图1 黄芩样品的主成分分析图

讨 论

从主成分分析图中可以看出, 5个不同产地的正品黄芩均在第Ⅱ象限内, 可归为一类; 来源于内蒙古赤峰、吉林省药品检验所的粘毛黄芩及甘肃黄芩在第Ⅲ象限内; 丽江黄芩、滇黄芩分别处于Ⅰ、Ⅳ象限内。正品黄芩与非正品黄芩能准确分开, 说明本法可靠。

从样品点之间的距离可以看出, 粘毛黄芩、甘肃黄芩与正品黄芩的差异相对较小,

而滇黄芩、丽江黄芩与正品黄芩差异较大。这可作为临床用药的参考。

本文尝试从黄芩样品的紫外光谱中提取反映样品间差异的数量化特征, 采用主成分分析法评价中药材的质量, 是一种新颖的方法。本法具有准确可靠、简便实用等特点, 值得推广应用。

致谢 本文经中国药学会广东分会副理事长李宝玉教授审阅并提出修改意见, 谨致谢意!

参 考 文 献

- [1] 槐谷文彦: 主成分分析, 解说, 最新医学1978 (1):104
- [2] 罗积玉等: 微机用多元统计分析软件, 四川科技出版社, 1986
- [3] Musumarra G: J chromatogr sci 1984 12: 538
- [4] Duda R O: Pattern classification and scene analysis, New York: Wiley, 1973

Quality Evaluation of Traditional Chinese Drug Huangqin (Radix Scutellariae) by Principal Component Analysis

Su Weiwei

(Guangdong Medical and Pharmaceutical College)

Abstract

10 samples from five species of the traditional Chinese drug Huangqin(Radix Scutellariae) have been examined by means of ultraviolet spectrometry. All of the obtained characteristic features of quantization were treated with mathematic method of principal component analysis. The differences of chemical components of samples were summarized and the synthetical quality evaluation of the traditional Chinese drug Huangqin was realized.

Key words Principal component analysis, Quality evaluation, Huangqin (Radix Scutellariae)