

# 中药葛根及同属植物的化学模式识别

第二军医大学药学院(上海 200433) 曾明\* 张汉明 郑水庆 许景峰\*\* 苏中武

**摘要** 应用主成分分析法(PCA)对来源于全国不同产地的野葛及葛属的其它8种植物进行了化学模式识别研究,为葛属植物的药材质量评价及分类提供了依据。

**关键词** 主成分分析 Shannon 信息理论 葛根 葛属

葛根为常用中药,具有解表退热,生津止渴和止泻之功效。中国药典(1995版)记载的原植物有野葛 *Pueraria lobata* (Willd.) O-hwi 及粉葛 *P. thomsonii* Benth. 我国葛属植物资源丰富,有9种2变种,为使其得到合理开发利用,我们从化学角度对葛根的质量进行了评价,同时为葛属植物的分类提供参考依据。

葛根化学成分复杂,含有多种黄酮及三萜类等成分,而这些成分间往往是发挥协同作用的,单一成分难以评价其质量,故将葛根甲醇浸出液的紫外光谱(UV)作为一整体来进行综合分析,以1 nm 间隔测吸收值,每波长与特定波长的吸收度比值作为指标,采用Shannon 信息理论,对所有样本计算每一波长通道的信息量,取富含信息量的通道作为分类指标。最后,运用主成分分析法(PCA)进行综合分析,取得的结果较为满意。

## 1 样品、仪器与试剂

UV-265 型紫外分光光度计(岛津、日本)。葛根原药材系作者采集,详见表1。化学试剂均为分析纯。

## 2 数据收集与处理

取药材粉末0.5 g,加甲醇5 mL 室温浸24 h,浸出液用甲醇适量稀释,在UV-265型紫外分光光度计上,于220 nm~340 nm 区间,每间隔1 nm 测定一个吸收值,得样本原始数据。

样本原始数据是一定浓度样品在测定波

长的吸收值,它随样品浓度大小而变化,不同样本间缺少可比性。因此需要进行数据转换,根据比尔定律  $A = ECL$ ,对每一浸出物样本两测定波长下吸收度比值为一定常数。将每一波长下的吸收值与特定波长的吸收值比值作为分类指标。

表1 PCA 分析中使用的样品

编号	学名	采集地点
1	<i>Pueraria lobata</i>	辽宁旅顺
2	<i>P. lobata</i>	陕西西安
3	<i>P. lobata</i>	河北井陘
4	<i>P. lobata</i>	山东泰安
5	<i>P. lobata</i>	江西南昌
6	<i>P. lobata</i>	安徽金寨
7	<i>P. thomsonii</i>	江西奉新
8	<i>P. thomsonii</i>	云南大理
9	<i>P. thomsonii</i>	云南丽江
10	<i>P. thomsonii</i>	贵州岑巩
11	<i>P. thomsonii</i>	云南景洪
12	<i>P. omeiensis</i>	四川峨嵋
13	<i>P. alopecuroides</i>	云南景洪
14	<i>P. calycina</i>	云南永胜
15	<i>P. edulis</i>	云南巍山
16	<i>P. edulis</i>	云南丽江
17	<i>P. montana</i>	广东博罗
18	<i>P. peduncularis</i>	云南巍山
19	<i>P. peduncularis</i>	四川峨嵋
20	<i>P. phaeoloides</i>	广东广州

## 3 特征选择

经处理,每一样本均可得122个特征变量(整数),对于PCA法需满足样本数大于变量数这一条件,因此,首先须对样本进行降维处理,但是,维数(特征数)及其对谱图的分辨率是相互矛盾的两个方面,试用Shannon 信息理论进行特征选取。

Shannon 信息理论是研究从数量上定量

\* Address: Zeng Ming, College of Pharmacy, Second Military Medical University, Shanghai

\*\* 北京军区总医院药剂科

描述信息的方法<sup>[1]</sup>,信息量的大小主要取决于事件发生的几率和事件间的相互关系,可用下式表示

$$I(j) = - \sum_{i=1}^{m_j} P_j(i) \text{LOG}_2 \times P_j(i)$$

式中  $m_j$  为第  $j$  波长下对所有样本的不

连续的最大特征变量值,  $P_j(i)$  为第  $j$  波长下特征变量值为  $i$  的样本对所有数据集样本发生的几率,  $I(j)$  为第  $j$  波长通道对所有样本的信息量之和。各波长通道的信息量计算结果见表 2, 选择  $I$  值最大的 10 个波长通道的吸收比值作为分类特征, 见表 3。

表 2 数据样本波长通道的信息量

波长 (nm)	信息量								
220	3.70	245	7.92	270	4.92	295	6.41	320	4.70
221	3.83	246	8.57	271	5.67	296	5.84	321	4.84
222	3.57	247	9.22	272	5.10	297	5.89	322	5.26
223	3.57	248	9.99	273	6.09	298	5.48	323	5.13
224	3.57	249	0.00	274	5.26	299	5.88	324	4.70
225	3.57	250	9.52	275	5.26	300	6.13	325	4.57
226	4.09	251	9.75	276	5.26	301	6.36	326	4.92
227	4.31	252	9.08	277	5.53	302	6.23	327	4.79
228	4.09	253	8.25	278	4.84	303	6.01	328	4.92
229	4.04	254	7.22	279	5.05	304	5.82	329	4.84
230	4.22	255	5.96	280	5.26	305	5.74	330	5.26
231	4.09	256	5.54	281	5.75	306	5.82	331	5.40
232	4.44	257	6.19	282	5.18	307	5.88	332	5.27
233	4.70	258	5.49	283	5.19	308	6.01	333	4.98
234	4.44	259	5.67	284	5.53	309	5.48	334	4.92
235	5.23	260	4.92	285	5.05	310	5.74	335	5.14
236	4.84	261	5.13	286	5.75	311	5.69	336	5.13
237	5.00	262	5.04	287	5.21	312	5.75	337	4.92
238	4.31	263	4.92	288	5.93	313	5.93	338	5.26
239	4.79	264	5.57	289	5.54	314	5.83	339	5.32
240	5.40	265	5.14	290	6.40	315	5.40	340	5.62
241	5.36	266	4.79	291	6.25	316	5.90		
242	6.10	267	4.79	292	5.80	317	5.53		
243	6.32	268	5.05	293	5.92	318	5.05		
244	7.44	269	5.13	294	5.95	319	5.18		

表 3 最富含信息量的波长通道

波长 (nm)	信息量	波长 (nm)	信息量
248	9.99	246	8.57
251	9.75	253	8.25
250	9.52	245	7.92
247	9.22	244	7.44
252	9.08	254	7.22

#### 4 主成分分析结果

主成分分析结果是通过适当的数学变换,最大限度地保留原样本集所含原始信息,使新变量成为原变量的线性组合,并寻求主成分未研究样本的一种方法,运算结果如下:第一主成分的特征值  $\lambda_1 = 9.5102$ , 方差贡献率为 95.10, 第二主成分的特征值  $\lambda_2 = 0.3252$ , 方差贡献率为 3.25, 二个主成分的累计方差贡献率为 98.35。图 1 为样本在两

个主因子空间的图形分布,其中横坐标代表第一主成分,纵坐标代表第二主成分。

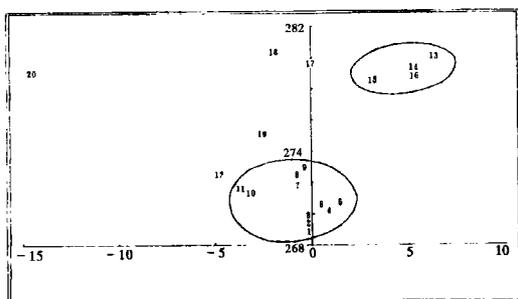


图 1 所有样本的主成分分析图

从 PCA 图可见:商品流通中的主流样本野葛和粉葛,二者相近,与其它样本的分离明显,它们的共同特征是总黄酮及葛根素、大豆

苷元和大豆苷等异黄酮活性成分含量较高,植物特征为托叶背着,不裂。野葛产于黄河以北,1、2、3号聚在一起;产于黄河以南的4、5、6号聚在一处,它们的活性成分含量低于1、2、3号北方产的野葛。7、8、9、10、11号为粉葛聚在一处,它们黄酮类活性成分含量低于野葛,而淀粉含量较高。

12号是峨嵋葛,形态、成分与野葛和粉葛相似,靠近主流样本。

13号密花葛,14号黄毛葛,15、16号食用葛,这三种植物的共同形态特征是托叶基部二裂,呈箭头形,聚在一处。13号密花葛,其主根含大量水分,黄酮类成分低,有别于葛属其它植物。14号黄毛葛,15、16号食用葛,与野葛相比,总黄酮和葛根素的含量低,而大豆苷及大豆苷元的含量则无明显差异。

17号山葛,其植物形态与野葛相似,但其总黄酮和葛根素等活性成分含量很低。

位于PCA图左上方的18、19、20号植物的托叶为基部着生。18、19号苦葛,以其根苦麻、有毒、粉末具强刺激性而迥异于葛属其它植物,总黄酮及葛根素、大豆苷和大豆苷元的含量低,皂苷含量则明显高于其它种。20号三裂叶葛,其根细小,果实细长无毛,植物形态与本属植物有较大差异,黄酮类成分亦低。

## 5 小结

5.1 从PCA结果可知,主流样本野葛和粉葛相近,说明二者成分较为一致;与其它样本间有一定差距,说明葛属的其它种同野葛和粉葛的化学成分有所不同,不宜作为葛根入药。此结果与TLC及HPLC测定结果基本一致(另文发表)。

5.2 峨嵋葛的归属有争议,中科院华南植物所认为,其独立成种的理由不充分,应归属于山葛 *P. lobata* var. *montana*<sup>[2]</sup>。中国医科院药植所从化学成分的角度不同意此观点<sup>[3]</sup>,但作何归属未作明确表态。根据PCA分析,我们同意峨嵋葛独立成种不合适,但其化学成分与野葛和粉葛相似,归属于野葛或粉葛较为合理。

5.3 从PCA图上可知,山葛与主流样本野葛和粉葛相距较远,化学成分相差较大,特别是主要活性成分葛根素的含量甚微,从化学角度看,作为野葛的变种似乎不妥,还应独立成种。

5.4 中药以其化学成分的多样性和模糊性为特点,以药材浸出液的紫外光谱为基础进行质量分析,用量少,灵敏,具较强的实用性,采用主成分分析把紫外光谱作为一整体在以Shannon方程提取特征后进行综合评价,避免了单纯以某一指标或某个指标(如峰位,峰强度等)进行定性比较的不确定性;反映的是总化学特征,聚为一类的,暗示它们的总化学成分相似;是从化学成分角度研究中药质量的又一种具有前途的方法。当然,紫外光谱仅仅反映了部分具有紫外吸收化学成分的行为,若结合红外光谱、药效学实验等技术评价则更为全面。作者将另文报告该方面的工作。

### 参考文献

- 1 Scott D R, et al. Anal Chem, 1986; 58: 881
- 2 吴德邻,等. 热带亚热带植物学报, 1991; 2: 12
- 3 顾志平,等. 药学报, 1996; 31(5): 387

(1997-07-16 收稿)

## Studies on Radix Puerariae (*Pueraria lobata*) by Chemical Pattern Recognition

Zeng Ming, Zhang Hanming, Zheng Shuiqing, et al. (College of Pharmacy, Second Military Medical University, Shanghai 200433)

**Abstract** Chemical pattern recognition of *Pueraria lobata* (Willd). Ohwi and 8 kind of *Pueraria* plants from different parts of China were carried out by PCA method to provide a basis for the quality control and classification of plants *Pueraria* DC.

**Key words** PCA Shannon information theory radix puerariae *Pueraria* DC.