

中药葛根及同属植物的模式识别研究(II)

张汉明,曾明,郑水庆,毛士龙,苏中武*

(第二军医大学药学院,上海 200433)

摘要:目的 探索葛根类药材质量评价的方法。方法 应用逐步回归分析及 Bayers判别分析法对来自全国不同产地的葛根及同属的其它植物进行了模式识别研究。结果 由异黄酮类成分和多糖含量 6因素以及多糖含量单因素结合药理抗内毒素活性建立的 Bayers判别函数方程,判别正确率分别达到 94.12%和 88.24%。结论 本研究为葛根类药材品质评价又提供了一个新的依据。

关键词: 葛根;葛属;模式识别;逐步回归;Bayers判别分析

中图分类号: S567 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-2670(2001)03-0253-02

Studies on root of *Pueraria* DC. to differentiate it from other species of same genus by pattern recognition II

ZHANG Han-ming, ZENG Ming, ZHENG Shui-qing, MAO Shi-long, SU Zhong-wu

(College of Pharmacy, Second Military Medical University, Shanghai 200433, China)

Abstract **Object** To explore methods for the quality evaluation of plants of *Pueraria* DC. (Leguminosae) for medical use. **Methods** Pattern recognition of the root of *Pueraria* DC. and other species of the same genus from different localities in China were carried out by stepwise regression and discriminant analysis. **Results** A Bayer discriminant functional equation was established by 6 factors of isoflavone and polyose constituents and another single factor of polyose in combination with pharmacological anti-endotoxin activity. The discriminant validities were found to be 94.12% and 88.24%, respectively. **Conclusion** This study provided further a scientific basis for evaluation of the quality of the medicinal plant *Pueraria* DC.

Key words root of *Pueraria* DC.; *Pueraria* DC.; pattern recognition; stepwise regression analysis; Bayers discriminant analysis

模式识别(pattern recognition)是一门用计算机代替人对模式即所研究的系统进行描述、分类、决策的新兴学科。近年来,它逐步深入地应用于生药学的分类、鉴定、质量评价,已成为该领域富有成效的方法之一。葛根为豆科植物野葛 *Pueraria lobata* (Willd.) Ohwi或粉葛 *P. thomsonii* Benth. 的根,是一味常用中药。我们的实验研究^[1,2]表明全国不同产地的葛根药材品质差异明显,我国葛属植物约有 11种,过去在部分地区使用同属的植物作为葛根入药,我们曾从整体化学成分的角度,利用主成分分析法成功地对其进行了质量评价^[3]。为了考察化学成分与药理活性之间的内在联系,建立合理的化学模式识别方程,我们选择了葛根的有效成分总黄酮、葛根素、大豆苷元、大豆苷、3'-甲氧基葛根素及多糖的含量和葛根清热解表功效有关的抗内毒素活性强度为化学与药理指标,运用逐步回归(stepwise regres-

sion analysis)法建立回归方程;同时,试采用 Bayers判别分析(Bayers discriminant analysis)建立判别线性方程,对不同种及居群的葛属植物进行了模式识别研究。

1 材料与方法

1.1 材料 样品的来源见表 1

1.2 方法

1.2.1 数据的收集:UV法测定 17种葛根中总黄酮^[1]及多糖)的含量(另文发表,HPLC法测定葛根素及其他 3种异黄酮类成分的含量^[1]。药材体外抗内毒素活性强度测定采用鲎试剂法^[2](表 1)。

1.2.2 样品数据库的建立:设 6种化学成分的含量自变量: X_1 -总黄酮, X_2 -葛根素, X_3 -大豆苷, X_4 -大豆苷元, X_5 -3'-甲氧基葛根素, X_6 -多糖,抗内毒素活性强度值为应变变量: Y (表 1)。

1.2.3 逐步回归:自变量 X_1 、 X_3 、 X_4 、 X_5 均被

表 1 17个药材样品的化学与药理模式数据库

学 名	采集地点	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	Y	分类
野葛 <i>Pueraria lobata</i>	山东泰安	8. 5125	4. 5563	0. 0889	0. 0219	1. 1291	4. 4671	4. 5	2
	辽宁旅顺	21. 675 1	11. 504 5	3. 954 6	0. 086 7	2. 322 8	3. 591 9	3. 5	2
	陕西西安	10. 798 3	4. 038 8	1. 902 4	0. 180 5	1. 197 7	8. 985 9	3. 5	2
	河北井陉	12. 817 3	4. 538 2	0. 886 3	0. 141 0	1. 124 6	2. 493 2	4. 5	2
	江西南昌	9. 735 3	2. 185 6	1. 589 6	0. 090 8	0. 364 3	10. 262 9	3. 5	2
	浙江临安	6. 750 2	3. 227 8	0. 533 4	0. 128 0	0	7. 409 7	4. 5	2
	安徽金寨	5. 442 2	2. 502 5	0. 408 8	0. 051 4	0. 165 1	13. 091 0	2. 5	1
	四川峨嵋	20. 175 8	7. 275 2	4. 048 5	0. 117 6	0. 287 2	6. 303 8	4. 5	2
粉葛 <i>P. thomsonii</i>	贵州岑巩	10. 210 9	4. 381 9	0. 710 4	0. 130 2	0	11. 866 2	2. 5	1
	云南景洪	4. 107 3	2. 772 2	0. 274 7	0. 022 0	0	10. 753 7	2. 5	1
峨嵋葛 <i>P. omeiensis</i>	云南丽江	2. 538 8	0. 842 0	0. 208 9	0. 029 5	0	20. 192 8	3. 5	2
	四川峨嵋	2. 443 3	0. 974 7	0. 248 2	0. 040 3	0	4. 6556	4. 5	2
密花葛 <i>P. alopercuroides</i>	云南景洪	0. 930 8	0. 024 7	0. 025 3	0. 001 0	0	17. 831 4	1. 0	1
食用葛 <i>P. edulis</i>	云南巍山	1. 882 4	0. 004 3	0. 223 7	0. 032 3	0	18. 501 6	3. 0	1
苦葛 <i>P. peduncularis</i>	云南巍山	1. 402 4	0	0. 103 6	0. 016 8	0. 002 1	5. 182 3	6. 0	2
三裂叶葛 <i>P. phaseoloides</i>	广东广州	1. 394 4	0. 026 2	0. 030 5	0. 021 7	0. 025 3	6. 347 7	3. 5	2
山葛 <i>P. montana</i>	广东博罗	1. 093 6	0	0. 007 3	0. 020 9	0	8. 481 2	3. 5	2

剔出, X_6 进方程, $F=12.2$, 标准回归方程: $Y_1(Y) = -0.669X_6$ 一般回归方程: $Y_2(Y) = -0.141X_6 + 4.922$, 复相关系数 $r = 0.6697 (P = 0.0033 < 0.01)$

1.2.4 Bayers判别分析: 训练集的建立 (表 1) 将抗内毒素活性强度值 (Y), 人为地分为 2类: 若 $Y < 3$, 则强度较弱, 记为 1; 若 $Y > 3$, 则强度较强, 记为 2

由 SPSS软件计算得到的判别函数:

$$Y(1) = 0.997X_1 + 1.417X_2 - 5.523X_3 - 3.015X_4 - 2.964X_5 + 1.2619X_6 - 11.689$$

$$Y(2) = 1.032X_1 - 0.073X_2 - 3.431X_3 + 2.225X_4 - 0.054X_5 + 359.0683X_6 - 4.988$$

由 SAS软件计算得到的单因素判别函数

$$Y(1) = 0.752X_6 - 5.416$$

$$Y(2) = 0.384X_6 - 1.415$$

上式中 Y 表示样品属于某一类的概率 (后验概率)。

2 判别结果及检测

对于判别分析结果来讲, 不论如何划分, 总会发生错分现象 Bayers法就是寻找错误损失尽可能小的划分法 假定由任一类误判为另一类的损失相同, 这种划分法相当于求得某一类的概率 (后验概率), 那个具有最大后验概率的判别就是所判定的类别, 因为此时错分的可能性最小。

2.1 6因素判别函数与原分类的结果比较: 将样品数数据库中的数据 (表 1) 回代到判别函数式计算后与原分类的结果比较, 得出此种判别分析的正确率 (表 2)。

2.2 单因素判别函数分类与原分类的结果比较 (表 3)。

3 讨论

表 2 判别函数分类与原分类的结果比较

判别分类	原始分类		小计
	1	2	
1	5	1	6
2	0	11	11
小计	5	12	17

17个样品中仅有 1例错判, 总的正确率为: 94.12%。

表 3 判别函数分类与原分类的结果比较

判别分类	原始分类		小计
	1	2	
1	4	1	5
2	1	11	12
小计	5	12	17

17个样品中有 2例错判, 总的正确率为: 88.24%。

3.1 从逐步回归结果可知, 黄酮类成分没有达到相关水平, 未进入方程; 而多糖则与抗内毒素活性呈显著的负相关 葛根抗内毒素的活性成分尚待进一步的研究发现

3.2 判别分析的实验结果较为理想, 由 SPSS软件计算得到的 6因素判别函数, 回代后判别正确率高达 94.12%; 由 SAS软件计算得到的单因素判别函数, 回代后判别正确率也达到了 88.24%。

3.3 由黄酮类成分和多糖含量 6因素以及多糖含量单因素建立的 Bayers判别函数方程, 又为葛根类药材的品质评价提供了一个新的合理依据

参考文献:

[1] 曾 明, 张汉明, 郑水庆, 等. 葛属植物根的异黄酮类成分分析 [J]. 第二军医大学学报, 1998, 19(2): 189-190.
[2] 曾 明, 张汉明, 郑水庆, 等. 葛根及同属植物根的抗内毒素作用比较 [J]. 中国中药杂志, 1997, 增刊: 178-179.
[3] 曾 明, 张汉明, 郑水庆, 等. 葛根及同属植物的化学模式识别 [J]. 中草药, 1998, 29(10): 652-654.