

· 专论 ·

对应分析法在中药微量元素研究中的应用

李吉锋, 高锦红

(渭南师范学院 化学化工系, 陕西 渭南 714000)

摘要:介绍了对应分析的基本原理, 针对11种中药中微量元素量的数据, 以该方法就中药与微量元素之间量的相关性进行分析研究。结果表明, 对应分析能揭示出中药和微量元素之间量的内在联系。并用该分析结果进行中药功效归类, 结果表明对应分析法是一种较好的中药功效分析研究方法。

关键词:对应分析; 微量元素; 因子载荷

中图分类号:R282.7 **文献标识码:**A **文章编号:**0253-2670(2008)12-1761-04

Application of corresponding analysis in study on trace elements of Chinese materia medica

LI Ji-feng, GAO Jin-hong

(1. Department of Chemistry and Chemical Engineering, Weinan Teacher's College, Weinan 714000, China)

Abstract: The principle of corresponding analysis was introduced. The relationship between the content of trace elements and the efficacy of eleven kinds of Chinese materia medica (CMM) was analyzed by the corresponding analysis. The result showed that the corresponding analysis could reveal the relationship between the efficacy of eleven kinds of CMM and the trace elements content that they contain. According to the analysis, the efficacy of CMM was classified. The result shows that the corresponding analysis is a good method for the efficacy analysis of CMM.

Key words: corresponding analysis; trace elements; factor loading

对应分析是在因子分析^[1~3]基础上发展得来的一种多元统计分析方法, 1970年由Beozecri首先提出。该方法综合了R型(对指标变量的)因子分析和Q型(对样点)因子分析的优点, 并将二者统一起来, 使得对指标变量的分析结果很容易得出对样点的分析结果, 更重要的是它可将变量和样点的载荷反映在相同的公因子轴上, 以达到把变量和样点联系起来加以分析、解释和推断的目的。目前, 该方法已较成功地应用于气象学领域和水质评价, 且效果很好。

1 对应分析方法

1.1 分析方法原理: 对应分析的基本思想首先由Richardson和Kuder在1933年提出, 后来法国统计学家Jean-Paul和日本统计学家Chikio对该方法进行了发展。对应分析方法主要用于分析二维列联表中行因素和列因素间的关系, 是一种寻求列联表行列变量关系的低维图示法, 是R型因子分析(研究变量间的相关关系)与Q型因子分析(研究样品

间的相关关系)的结合, 它利用降维的思想可以在一张二维图上同时画出属性变量不同取值的情况。列联表的每一行及每一列在二维图上用一个点来表示, 以直观的形式描述属性变量各种状态间的关系。而因子分析只能对数据阵单独进行R型或Q型的因子分析, 不能同时对行因素和列因素进行分析。这样会将行因素和列因素隔离开来, 从而遗漏了很多有用的信息。目前对应分析已被广泛地应用于地质、海洋、气象、医药等各方面的科学研究领域^[4]。

设有 $R \times C$ 列联表, 行列分别表示两个不同因素的 R 个水平和 C 个水平, 表中的频数记为 $X = (x_{ij})$, 首先对列联表中的数据用下式进行变换。

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - x_i \cdot x_j / x_{\cdot\cdot}}{\sqrt{x_i \cdot x_j / x_{\cdot\cdot}}}$$

式中, x_i 表示第 i 行的合计, x_j 表示第 j 列的合计, $x_{\cdot\cdot}$ 表示总计

令 $Z = (Z_{ij})$, $A = (a_{ij})$ 表示变量的协差阵, 则

收稿日期: 2008-06-06

基金项目: 渭南师范学院专项科研资助项目(08YKZ003)

作者简介: 李吉锋(1977-), 男, 山东青岛人, 讲师, 硕士, 主要从事光谱分析。 E-mail: ustcl@163.com

$A=Z'Z$, 样品的协差阵为 $B=ZZ'$, 经证明 A 和 B 有相同的非零特征根。对 A 做因子分析, 得到行因素各类别的因子载荷, 利用前两个公因子的因子载荷作二维因子载荷平面图, 对 B 做因子分析, 得到列因素各类别的因子载荷, 同样在同一张因子载荷平面图上分别以第一因子和第二因子为横轴与纵轴, 以因子载荷为坐标值绘制因子载荷图。可以看到因子载荷图直观地反映行因素与列因素类别之间的对应关系。

1.2 变量与样本主成分的确定: R 型和 Q 型主成分分析利用 SPSS 软件分别求出它们的协方差矩阵、特征值、特征向量、R 型因子载荷矩阵、Q 型因子载荷矩阵。

在 G1-G2 上作样本图 (G1 是 Q 型主成分分析的第一主成分, 代表横坐标, G2 是 Q 型主成分分析的第二主成分, 代表纵坐标), 并将在 F1-F2 (F1 是 R 型主成分分析的第一主成分, 代表横坐标, F2 是 R 型主成分分析的第二主成分, 代表纵坐标) 平面上做变量点图 (图中三角形点表示样本点, 四方形点表示变量点), 对应分析将在同一平面上给出了样本群和变量群, 从而可以直观地研究样本群和变量群之间的关系。从聚类图中能更好地分析中药与微量元素的关系, 也能更直观地表达这种关系。

2 对应分析法用于中药微量元素的研究

选择抗缺氧类中成药和芸香科药用植物, 对其微量元素进行对应分析。而选择这两类中药, 将其微量元素测定结果合并起来进行对应分析可以增加样本数, 且并不影响分析结果。所选芸香科植物都属理气类中药和抗缺氧类中药放在一起分析时, 能从分析结果中很明显看出不同中药与微量元素间的相关性。

2.1 药物来源: 芸香科药材购于陕西省老百姓连锁大药房, 抗缺氧类药物购于西藏本地药材公司。

2.2 分析方法

2.2.1 微量元素的测定: 采用原子吸收法测定, 11 种中药中微量元素 Fe、Mn、Cu、Zn 的量, 结果见表 1。

2.2.2 对应分析中的数据变换: 对应分析的关键是使 R 型和 Q 型分析中的变量和样点的载荷反映在相同的公因子轴上, 这要求从 R 型分析的相关系数阵与从 Q 型分析的相似阵出发, 导出的非零特征根应相同, 其详细的计算步骤如下。

(1) 将对对应分析原始数据阵 X 进行变换: 假定有 n 个样品, 每个样品有 m 个变量, 其原始数据阵为 X_{max} , 为使变换后的数据阵对变量和样品具有对称性, 可先按行、列求和, 再求出总和。

表 1 样品测定结果

Table 1 Determination of samples

分类	样本	质量分数/($\mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$)			
		Cu	Zn	Fe	Mn
抗缺氧类	地奥心血康胶囊(1)	1.08	77.25	5.22	2.71
	诺迪康胶囊(2)	1.76	107.87	32.38	21.04
	心脑舒胶囊(3)	15.78	240.63	109.80	8.91
	三普红景天胶囊(4)	4.58	522.38	234.24	18.48
	利舒康胶囊(5)	3.62	266.12	76.97	30.66
	抗栓胶囊(6)	17.26	605.41	556.07	39.16
芸香科属类	陈皮(7)	3.28	7.99	46.95	11.56
	佛手(8)	4.30	7.78	100.08	6.70
	川楝子(9)	1.97	5.15	21.85	3.15
	木香(10)	13.47	36.52	471.00	39.85
	香附(11)	5.32	31.32	500.00	42.59

$x_i = \sum_{j=1}^m x_{ij} (i=1, 2, \dots, n)$ 为行和; $x_j = \sum_{i=1}^n x_{ij} (j=1, 2, \dots, m)$ 为列和; $T = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m x_{ij}$ 为总和; 令 $z_{ij} = (x_{ij} - x_i \cdot x_j / T) / \sqrt{x_i \cdot x_j}$, 则 $Z = (Z_{ij})$ 为变换后的数据矩阵, 此新数据矩阵对变量和样品具有对称性。

(2) 计算变量的“协方差阵”R: $R = Z'Z = (r_{ij})$,

其中 $r_{ij} = \sum_{i=1}^n z_{ii} z_{ij} (j, i=1, 2 \dots m)$ 。

(3) 从 R 阵出发进行 R 型因子分析: 首先用 Jacobi 方法求 R 的特征值 ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \dots \geq \lambda_m \geq 0$) 及相应的特征向量 ($\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m$), 然后由临界概率确定主因子的个数 k, 再计算 R 型因子载荷阵 $F = (f_{ij})$, 其中 $f_{ij} = \mu_{ij} \lambda_j (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, k)$, 并在两两因子轴平面上做指标变量的点图。

(4) 从 $Q = ZZ'$ 出发进行 Q 型因子分析: 由线性代数可知, $Z'Z$ 与 ZZ' 具有相同的非零特征值, 即 Q 与 R 的非零特征值相同, 故 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \dots \geq \lambda_m \geq 0$ 也是 Q 的特征值, 又因 μ_i 是 R 的特征向量, 故 $V_i = Z \mu_i (i=1, 2, \dots, m)$ 是 Q 的特征向量, 从而 Q 型因子载荷阵为 $G = (g_{ij})$, 其中 $g_{ij} = V_{ij} \lambda_j (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, k)$, 并在与 R 型因子分析相应的两因子轴平面上做样点图。

(5) 根据以上作微量元素变量和样本点的主因子平面点聚图, 对不同类中药中微量元素的量与中药功效间相关性进行综合评价。

2.3 研究结果: 本研究应用 SPSS 11.50 软件进行对应分析。由于 R 型因子分析结果 (表 2) 中第一主因子 (F1) 和第二主因子 (F2) 累计贡献已超过 85% (两主因子的累计贡献为 89.029%), 则取 2 个主因子。Q 型因子分析计算结果见表 3。

从表 2 可见, F1 方差贡献率近 50%, 则其是微量

表 2 R 型因子分析结果
Table 2 Analysis of R-factor

主因子	Cu	Zn	Fe	Mn	特征值	贡献率%	累计贡献率%
第一主因子 F1 载荷	0.166	-0.123	0.510	0.492	1.853	46.316	
第二主因子 F2 载荷	0.555	0.520	-0.040	0.104	1.709	42.713	89.029

表 3 Q 型因子分析计算结果
Table 3 Analysis of Q-factor

样本 序号	第一主因子 G1 载荷	第二主因子 G2 载荷	样本 序号	第一主因子 G1 载荷	第二主因子 G2 载荷
1	-0.039	0.125	7	0.195	0.088
2	-0.005	0.164	8	0.212	0.110
3	0.045	0.224	9	0.223	0.128
4	0.048	0.228	10	0.211	0.110
5	-0.001	0.170	11	0.211	0.109
6	0.261	0.439			

元素的量所提供的信息中占主导地位的一个因子,也是影响中药药效的主要表现。其载荷中比重最大的是 Fe,其次为 Mn,Cu 和 Zn 较低。其中 Zn 表现为负向效应,Fe、Mn、Cu 表现正向效应,说明除了 Fe、Mn 是影响上面两类中药药效的主要微量元素外,Cu 也是影响两类中药药效的主要元素。F2 中载荷最大的是 Cu,其次为 Zn,Mn 和 Fe 较低。此外,Cu 在 F1、F2 主因子中都具有较大的载荷,表明 Cu 同时受控于两个主要因子,是影响两类中药功效的主要微量元素。

根据表 2、3 结果,取第一主因子载荷(F1、G1)为横坐标,第二主因子载荷(F2、G2)为纵坐标,将 11 个样本点和 4 个变量点的 F1、F2 载荷在同一因子平面上做点聚图(图 1)。对应分析在同一平面上给出样本群和变量群,从点聚图能研究样本群和变量群之间的关系,能更好地分析中药与微量元素的关系,也能更直观地表达这种关系。

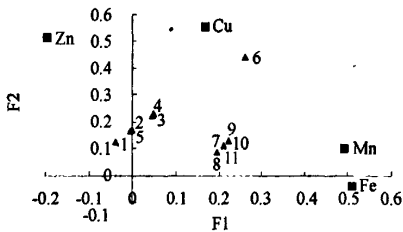


图 1 对应分析因子和因子二载荷平面点聚图

Fig. 1 Points clustering plane figure of correspondence analysis factor and two factor loading

2.4 讨论

2.4.1 中药类型与微量元素的关系:近年来,中药中微量元素的研究越来越受到人们重视。中药药用价值与其富含的微量元素有直接的关系,微量元素之间的相互作用既复杂又相当重要,在研究微量元

素缺乏症和中毒症的治疗和预防上必须充分考虑微量元素之间的相互作用与相互平衡,不能顾此失彼^[5]。从图 1 可以看出,两类不同类别的 11 种中药样品中微量元素的量差异不同。微量元素点相距越近,则中药彼此间的相关性越强,如 Cu 和 Zn 点相距较近,则说明它们之间的相关性较 Fe 和 Mn 的相关性强。从图 1 也可看出离这 Zn 和 Cu 两种元素相近的抗缺氧类(1~6 号样)聚在一起。

从表 2 中也可以看到,前两个因子的累计贡献率是 89.029%,即对原始数据的解释程度达 89%,应该还是比较满意的。从图 1 中可以看到,从 4 个变量来看,距离较近的变量 Cu、Zn 之间相互关联程度较为密切,而 Mn 和 Fe 之间较为密切。全部变量(微量元素)可分为 2 类,即(1)Cu、Zn,(2)Fe、Mn;每一类聚合了一部分样本,如第(1)类包含了 6 个样本,第(2)类包含 5 个样本,表明这 5 种植物在同一科属植物中较为接近。从图 1 中看到 11 个样本明显分为 2 类。1~6 号样本聚在一起,说明抗缺氧类中药中 Cu 和 Zn 的量较大;同时 7~11 号样本聚在一起,说明芸香科植物类中药中 Mn 和 Fe 的量较大,这类中药与 Mn 和 Fe 元素有较大的关联。

2.4.2 微量元素与中药功效的相关性:本实验结果表明,不同类型中药中微量元素存在明显差异,这种差异借助于对应分析方法,将 4 种微量元素分成受两个独立因子制约的元素群,用因子载荷来描述微量元素间的相关程度与方向,以及在同一坐标系来标注样本点和微量元素点,可明显地反映出微量元素的量及其在中药的分布规律,根据点的距离远近来表征微量元素间、样本点间以及微量元素与样本点间的关系。

从测定结果可以看出两类中药中 Zn、Cu、Mn 和 Fe 4 种微量元素的量都非常丰富,从图 1 可以看出,Zn 和 Cu 变量聚合了第 1 类样本,说明抗缺氧类中药中 Zn 和 Cu 的量高于芸香科植物,这一结果显示抗缺氧类中药的某些功用功能可能与其所含的 Cu 和 Zn 有关。Zn 是构成体内 80 多种酶的成分,对体内蛋白质和抗酸的合成及机体造血过程有密切关系,能减轻炎症、缓解症状,适当增加锌对缺氧有一定的防治作用^[6]。Cu 参与造血过程和形成含 Cu 蛋

白质,是细胞色素氧化酶、血浆 Cu 蓝蛋白、超氧化物歧化酶等许多酶的组成成分。血浆 Cu 蓝蛋白参与 Fe 的运输和代谢,从而有利于人体内 Fe 的吸收。Cu 在能量代谢中起重要作用,Cu 的缺乏可使脑组织中 Cu 的量减少,即而发生脑缺氧缺血,含 Cu 量丰富可以提高患者体内铜/锌比值,缓解缺氧患者发病的危险。结合表 3 可看出,两类中药中 Fe 的量都比较高,Fe 是构成体内携氧物质血红蛋白的重要成分,同时也是体内能量和物质代谢呼吸过程中呼吸链酶的重要组成成分,也是人体合成各种含 Fe 蛋白质和多种酶的原料^[7]。Fe 缺乏时可导致血红蛋白合成减少。Fe 对 Cu 具有协同作用,同时 Cu 能促进 Fe 的吸收和利用。本实验所测定的 11 种中药中大部分 Fe 的量很高,这与其补血和促进造血功能相吻合。而在某些中药中 Zn 和 Fe 的量都较高,因而具有抗缺氧和补血的双重功效。Mn 参与体内氧化还原过程、组织呼吸、骨的形成,影响生长发育、血液的形成和内分泌功能。Mn 主要存在于人的脑垂体中,缺 Mn 使体内的 SOD 活性减弱而降低其抗氧化作用^[8]。

中药中微量元素的量与其功效有密切关系,而且还与各种微量元素的比例有关系。中药是通过配伍来改变方剂中的微量元素量的比例,以达到更好的疗效^[9]。因此研究中药微量元素的量及其特点对进一步研究药物的功效,开发新药具有重要的意义。

3 结语

对应分析把 R 型和 Q 型因子分析统一起来,将

样本点和微量元素变量同时反映到相同的因子轴上,揭示了所研究的样本点和变量间的内在联系。对应分析已经被应用到医学的许多领域^[2~5],是探索性研究的有力工具。本研究通过对 11 种中药中 4 种微量元素量的数据测定分析,运用对应分析研究了中药与微量元素之间的关系,解释了 4 种微量元素在中药中的相关性,是一种极具优势的中药微量元素相关性及中药功效研究方法。

参考文献:

- [1] 柯庆明,梁康通,郑履端,等.福建省水稻镉米重金属污染的对应分析[J].应用生态学报,2005,16(10):1918-1923.
- [2] 邢海燕,沈毅,赵华娟,等.农村居民就医行为及其影响因素的对应分析[J].中国农村卫生事业管理,2002,22(5):12-15.
- [3] 钱津,戴石元,袁万清,等.贵阳地区药用植物在 ICD-10(国际疾病分类)中的对应分析[J].山地农业生物学报,2006,25(4):307-314.
- [4] 李丽霞,邹宇华,郜艳晖,等.对应分析在研究地区与疾病分布情况中的应用[J].数理医学杂志,2006,19(3):277-280.
- [5] 高晓凤,李健,刘国琴,等.对应分析在研究居民两周患病治疗方式中的应用[J].现代预防医学,2007,34(1):32-35.
- [6] 郑文娟,黄鸿雁.微量元素锌与健康[J].微量元素与健康研究,2003,20(2):61.
- [7] 贾镭,高梅,马洪波,等.低压缺氧小鼠脏器微量元素变化与免疫功能关系探讨[J].哈尔滨医科大学学报,2003,37(1):36-37.
- [8] 张忠诚,张忠玺,张荣广.锰与人体健康[J].微量元素与健康研究,2003,20(2):59-60.
- [9] 范文秀.补益中药微量元素的比较研究[J].光谱学与光谱分析,2007,27(7):26-28.

欢迎订阅 2009 年《药物分析杂志》

《药物分析杂志》是由中国科学技术协会主管,中国药学会主办,中国药品生物制品检定所药物分析杂志编辑部编辑出版的学术性期刊。主要栏目有研究论文、交流、综述等。报道化学药物、中药与天然药物、抗生素、蛋白质、多肽类药物、生物技术药物等的分析、质量标准研究、临床药物分析、药物分析基础理论与实践以及新方法、新技术的应用,并及时报道国家重大研究课题的最新成果。

本刊获 2006 年、2007 年、2008 年中国科协精品科技期刊工程项目 C 类资助。

本刊为我国自然科学核心期刊,被国内外主要检索系统收录。

本刊坚持质量第一、面向广大读者,以其独具的深度与广度展示我国药物分析的现状与发展。

本刊 2005 年开始由双月刊改为月刊,大 16 开本,每期 126 页,国内外公开发行。每期定价 20 元,全年定价 240 元,国内邮发代号:2-237,国外读者请同中国国际图书贸易总公司(中国国际书店,北京 399 信箱)联系。欢迎广大读者到当地邮局订阅,并欢迎有关专业人员集体订购,价格从优。

希望为本刊推广发行者,价格另议。

地址:北京市天坛西里 2 号(100050) 联系人:刘小帅

Tel:(010)67058427 Fax:(010)67012819

网址:www.nicbbp.org.cn E-mail:ywfx@nicbbp.org.cn