

文章编号:1674-2869(2015)07-0030-04

四种补益药中微量元素含量的主成分分析

多本加^{1,2}

1.青海师范大学民族师范学院,青海 西宁 810008;2.北京中医药大学中药学院,北京 100102

摘 要:对常用补益药黄芪、当归、枸杞子、杜仲中微量元素含量进行了综合分析.用 SPSS13.0 统计软件,以四种补益药中铁、镁、钙、锌、铬、钴和铜等微量元素的含量为指标,对相关数据进行标准化处理,并求出无量纲后数据的相关系数矩阵及其特征值、特征向量和贡献率.由此建立了综合主成分评价模型,结果表明:方差贡献率为 67% 的第 1 主成分和方差贡献率为 29.2% 第 2 主成分的累计方差贡献率达到了 96.207%,最后根据主成分分析得分计算可得,上述药材微量元素含量趋势为黄芪>当归>杜仲>枸杞子.

关键词:主成分分析;补益药;微量元素

中图分类号:R284.1

文献标识码:A

doi:10.3969/j.issn.1674-2869.2015.07.007

0 引 言

中医认为,老年病与虚证之间关系密切,而虚证是指人体正气不足,所致脏腑功能衰退而出现的临床表现.即人体气血阴阳平衡失调、脏腑亏损的基础上发生的症状.因此,凡有补益人体气、血、阴、阳不足的作用,能治疗各种虚证的药物称为补虚药或补益药.补益药是中医的重要组成部分,广泛应用,疗效显著,深受历代医生所重视^[1].近年来,随着生活水平的提高,补益药的服用者越来越多.黄芪、当归、枸杞、杜仲等药材可以补充人体有用物质,有益身体,具有抗衰老作用等^[2].对补益药的报道很多,主要集中在化学成分测定和药理研究方面.相对于微量元素成分的研究明显不足,随着中药的发展,中药微量元素测定的研究日益活跃,成为中国传统医学研究的一部分.有些人说微量元素是动物和植物的信息联通的纽带^[3],即中药药效与微量元素及其含量有关.笔者用主成分分析方法,以黄芪等 4 种补益药中的微量元素 Fe、Mg、

Ca、Zn、Cr、Co、Mo 为指标,对其进行综合评价,不但对阐明补益药的作用原理,而且对合理用药、提高疗效,避免用补益药引起的不良反应等有着积极的意义.

1 主成分分析原理

主成分分析法(PCA)是多元统计分析方法的一种,是设计指标体系时尽可能多地选择指标,但指标过多,会增加分析难度,所以原始指标转化为具有代表性少数几个新的指标,假设有 n 个被评价的样本,每个样本检测 p 个指标数($p \leq n$).从 p 个指标中寻找一组尽可能多地反映原有指标的情况下,少数几个相互独立的指标^[4].

2 四种补益药中微量元素含量的主成分分析

2.1 四种补益药中微量元素含量

四种补益药中微量元素质量含量见表 1.

表 1 四种补益药中微量元素质量含量^[5]

Table 1 Four kinds of trace element content of tonics

/($\mu\text{g/g}$)

样品	Fe	Mg	Ca	Zn	Cr	Co	Mo
黄芪	4.49	5.54	72.05	8.40	5.105	1.105	16.25
当归	1.845	5.10	48.90	3.20	3.63	2.155	4.10
枸杞子	1.185	2.30	5.65	0.425	5.315	2.68	15.20
杜仲	1.00	8.355	2.68	0.52	3.105	2.365	13.05

收稿日期:2015-01-07

作者简介:多本加(1975-),男,藏族,青海黄南人,副教授,博士.研究方向:化学计量学.

2.2 原始数据的标准化处理

根据公式 $X_{ij}^*=(X_{ij}-X_i)/S_i$ (X_i 为均值, S_i 为标准差), 数据标准化可以解决各数值不具综合性的问题, 均转化为无量纲值进行综合评价分析。

2.3 计算相关系数矩阵

用 SPSS13.0 软件计算得表 2。从中可知, 变量 Fe 与 Ca 、 Zn 、 Co 、 Mo , 变量 Mg 与 Cr , 变量 Ca 与 Fe 、 Zn 、 Co 、 Mo , 变量 Zn 与 Fe 、 Ca 、 Co 、 Mo , 变量 Cr 与

Mg 、 Mo , 变量 Co 与 Fe 、 Ca 、 Zn 、 Mo , 变量 Mo 与 Fe 、 Ca 、 Zn 、 Cr 、 Co , 具有较大的相关性。

2.4 主成分的确定

计算的特征值、方差贡献率、累积方差贡献率见表 3。根据主成分分析原理可知, 第一、第二主成分的累积贡献率已高达 96.207%, 即这两个主成分代表了 4 种补益药中微量元素质量分数 96.207% 的信息量。

表 2 相关系数矩阵

Table 2 The correlation coefficient matrix

	<i>Fe</i>	<i>Mg</i>	<i>Ca</i>	<i>Zn</i>	<i>Cr</i>	<i>Co</i>	<i>Mo</i>
<i>Fe</i>	1.000	0.001	0.900	0.990	0.471	-0.971	0.780
<i>Mg</i>	0.001	1.000	-0.017	0.050	-0.787	-0.232	-0.588
<i>Ca</i>	0.900	-0.017	1.000	0.948	0.264	-0.893	0.621
<i>Zn</i>	0.990	0.050	0.948	1.000	0.374	-0.980	0.715
<i>Cr</i>	0.471	-0.787	0.264	0.374	1.000	-0.254	0.915
<i>Co</i>	-0.971	-0.232	-0.893	-0.980	-0.254	1.000	-0.611
<i>Mo</i>	0.780	-0.588	0.621	0.715	0.915	-0.611	1.000

表 3 特征值和方差贡献率

Table 3 Characteristic value and the variance contribution rate

	特征值	方差贡献率%	方差总贡献率%
1	4.691	67.009	67.009
2	2.044	29.198	96.207
3	0.266	3.793	100.000

2.5 计算初始因子载荷矩阵

计算 2 个初始因子载荷矩阵和 2 个主向量矩阵见表 4。

表 4 初始载荷矩阵和主成分向量

Table 4 Initial load matrix and principal component vectors

变量	初始载荷矩阵		主成分向量	
	U_1	U_1	A_1	A_2
<i>Fe</i>	0.978	0.188	0.452	0.131
<i>Mg</i>	-0.204	0.940	-0.094	0.657
<i>Ca</i>	0.897	0.276	0.414	0.193
<i>Zn</i>	0.962	0.270	0.444	0.189
<i>Cr</i>	0.610	-0.765	0.282	-0.535
<i>Co</i>	-0.905	-0.415	-0.418	-0.290
<i>Mo</i>	0.878	-0.467	0.405	-0.327

即 2 个主成分与各个标准化变量(*)的线形组合分别如下:

$$F_1=0.452Fe^*-0.094Mg^*+0.414Ca^*+ 0.444Zn^*+ 0.282Cr^*-0.418Co^*+0.405Mo^*$$

$$F_2=0.131Fe^*+0.657Mg^*+0.193Ca^*+0.189Zn^*- 0.535Cr^*-0.290Co^*-0.327Mo^*$$

由 $F=0.670\ 09F_1+0.291\ 98F_2$ 计算综合得分 (见表 5), 并进行排序。

表 5 主成分得分、综合得分排序

Table 5 The principal component scores and comprehensive score sequence

样品	F_1	F_2	排序
黄芪	3.039	0.374	1
当归	-0.241	0.436	2
枸杞子	-0.741	-2.058	4
杜仲	-2.057	1.249	3

3 结 语

目的是使用主成分分析降维的思想, 该指数转化为少数几个综合性指标, 以排除原始数据共存中相互重叠的信息, 而获得最主要的信息。对于补益药黄芪、当归、枸杞子和杜仲中的微量元素 Fe 、 Mg 、 Ca 、 Zn 、 Cr 、 Co 和 Mo 的信息可以用两个主成分进行综合评价。

a. 由表 2 相关系数矩阵可知, 微量元素 Fe 与 Ca 、 Zn 、 Mo , Mo 与 Cr 和 Zn 与 Mo 、 Ca 呈现正相关性, 微量元素 Co 与 Fe 、 Ca 、 Zn 、 Mo , Mg 与 Cr , 具有负相关性。

b. 由表 4 的第一主成分可得, Fe 的载荷系数最大, 对其贡献最多, 其次 Zn 、 Ca 、 Mo 上具有较大的正系数, 第二主成分在 Mg 元素上有较大的正载荷系数, 主要反映了 Mg 的元素特征。微量元素在维持人体正常生理活动中起着重要的作用, Fe 除

以血红蛋白的形式存在外,还分布在肌肉和其他细胞中,是酶的构成成分之一,有助于氧的输送。一般来说含铁高的药材常用来预防贫血、调解组织呼吸和能量代谢、维持机体的免疫力和抗感染能力。Zn 参与核酸和蛋白质的合成以及细胞免疫和体液免疫过程,并能刺激淋巴细胞的分裂和加快创伤的愈合^[6],含 Zn 高的药材有清热活血的功效。Ca 是骨骼和牙齿发育最重要的营养物质,还参与生理功能的调解。对于神经肌肉兴奋、神经传输、维护细胞功能、酶的活性以及激素分泌起着重要的作用。Mo 组成氧化还原酶,维持动脉弹性,Mg 离子是多种酶的辅基和激活剂,Mg 不足会导致动脉粥样硬化和心律失常^[7-9],因此这 4 种中药的作用主要表现出补气补血、清热活血和通过对神经、体液系统功能的调节及对物质代谢等功效。这跟一般认为补气、补血、补阴、补阳的药物称之为补益药说法一致。

c. 从表 5 的 4 种补益药的综合排序可知:中药黄芪的微量元素的含量排在了第一位主要是由于 Fe 和 Zn 的主成分值较大引起的,即黄芪的补虚扶正的功效最大,其次为当归、枸杞子、杜仲。本研究通过主成分分析法对不同补益药中微量元素含量进行综合评价,取得了较好的结果,有利于对常用补益药成分的研究和合理用药、提高疗效提供参考。

致 谢

感谢青海师大民族师范学院提供的试验平台,感谢本实验室其他同学的帮助!

参考文献:

- [1] 李景春. 浅谈补益药[J]. 中医药信息, 1985(3): 23.
LI Jing-chun. Discuss tonic information on Traditional Chinese Medicine [J]. 1985(3): 23. (in Chinese)
- [2] 沈映君, 李义奎, 陈奇. 中药药理学[M]. 上海: 上海科学技术出版社.
CHENG Yin-jun, LI Yi-kui, CHENG Qi. Pharmacology of traditional chinese medicine [M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Publishing House. (in Chinese)
- [3] 马威, 管竞环. 植物类中药辛、甘、苦味的定量判别研究[J]. 微量元素与健康研究, 2004, 21(1): 22-24.
MA Wei, GUAN Jing-huan. Quantitative discriminant plants symplectic bitter taste of traditional Chinese medicine research [J]. Studies of Trace Elements and Health. 2004, 21(1): 22-24. (in Chinese)
- [4] 许禄, 邵学广. 化学计量学方法[M]. 北京: 科学出版社, 2006: 130-133.
XU Lu, SHAO Xue-guang. Chemometrics methods [M]. Beijing: Science Press, 2006: 130-133. (in Chinese)
- [5] 赵超群, 吕坤, 梁开才, 等. 黄芪当归枸杞子杜仲中几种微量元素的测定[J]. 微量元素与健康研究, 2011, 28(4): 17-18.
ZHAO Chao-qun, LV Kun, LIANG Kai-cai, et al. Astragalus, Angelica, Medlar, Eucommia several in the determination of trace elements [J]. Studies of Trace Elements and Health, 2011, 28(4): 17-18. (in Chinese)
- [6] 扬克敌. 微量元素与健康 [M]. 北京: 科学出版社, 2003.
YANG Ke-di. Trace elements and health [M]. Beijing: Science Press, 2003. (in Chinese)
- [7] 孔祥瑞. 必需微量元素的营养、生理及临床意义 [M]. 合肥: 安徽科技出版社, 1982: 102-105.
KING Xiang-rui. Necessary trace elements nutrition, physiological and clinical implications [M]. Hefei: Anhui Science and Technology Press, 1982: 102-105. (in Chinese)
- [8] 何志谦. 人类营养学 [M]. 北京: 人民卫生出版社, 1988: 257, 320-330.
HE Zhi-qian. Human nutrition disciplines [M]. Beijing: People's Medical Publishing House 1988: 257, 320-330. (in Chinese)
- [9] 苗健, 高琦, 许思来. 微量元素与相关疾病 [M]. 郑州: 河南医科大学出版社, 1997: 106-120.
MIAO Jian, GAO Qi, XUI Si-lai. Trace elements and related diseases [M]. Zhengzhou: Henan Medical University Press, 1997: 106-120. (in Chinese)

Principal components analysis of trace element contents in astragali radix, angelicae sinensis radix, lycii fructus and eucommiae cortex

DUO Ben-jia^{1,2}

1. Minorities Teachers College, Qinghai Normal University, Xining 810008, China;

2. Beijing University of Traditional Chinese Medicine, Beijing 100102, China

Abstract: The trace element contents of ferrum, magnesium, calcium, zinc, chromium, cobalt and molybdenum in astragalus radix, Chinese angelica, barberry wolfberry fruit and eucommia ulmoides were analyzed by SPSS13.0 statistical software, and the correlation coefficient matrix, eigenvalue, feature vector and contribution rate of post-dimensionless data were determined, then the comprehensive principal component evaluation model was established. The results show that the accumulated variance contribution rates of the 1st and the 2nd principal components come to 96.207%. According to score analysis of the principal components, the trace element contents of aforesaid herbs are as follows: astragalus radix > Chinese angelica > barberry wolfberry fruit > eucommia ulmoides.

Keywords: principle component analysis; tonic; trace element

本文编辑:张 瑞