

TOPSIS与灰色关联分析在不同产地炒茺蔚子 质量评价中的应用

周苏娟¹, 麦小梅¹, 赵斌², 孟江^{1*}, 贾天柱³, 梁生旺¹

(1. 广东药学院, 广州 510006; 2. 中山火炬职业技术学院, 广东 中山 528436;
3. 辽宁中医药大学, 辽宁 大连 116600)

[摘要] 目的:应用逼近理想排序法(TOPSIS)与灰色关联法评价不同批次炒茺蔚子的质量并进行比较。方法:测定不同批次炒茺蔚子中总灰分、酸不溶性灰分、浸出物、盐酸水苏碱的百分含量,通过层次分析法进行指标权重的确定,得到4个指标的权重为0.077,0.077,0.385,0.461;采用MATLAB编程构建不同产地炒茺蔚子的灰色关联度质量评价模型并与TOPSIS分析结果比较。结果:对不同批次炒茺蔚子中的各成分进行灰色关联分析,得出“广东20121117”的药材与最优参考序列的相对关联度最高(0.561 685 996)质量最优,“河南20130401”的药材与最优参考序列的相对关联度最低(0.402 108 175)质量最差,TOPSIS与灰色关联法的分析结果基本一致,说明结果的可重复性较好,较为可靠。结论:灰色模式识别模型,适宜对多组分多指标的中药材样品质量进行综合评价,具有推广应用前景。

[关键词] 炒茺蔚子; 灰色关联分析; 逼近理想解排序法; 质量评价

[中图分类号] R284.1 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2015)15-0040-04

[doi] 10.13422/j.cnki.syfjx.2015150040

TOPSIS and Grey Correlation Analysis on Quality of Stir-baked Leonuri Fructus from Different Producing Areas ZHOU Su-juan¹, MAI Xiao-mei¹, ZHAO Bin², MENG Jiang^{1*}, JIA Tian-zhu³, LIANG Sheng-wang¹
(1. Guangdong Pharmaceutical University, Guangzhou 510006, China; 2. Zhongshan Torch Polytechnic, Zhongshan 528436, China; 3. Liaoning University of Traditional Chinese Medicine, Dalian 116600, China)

[Abstract] **Objective:** To evaluate the quality of different batches of stir-baked Leonuri Fructus and make a comparison by using TOPSIS and grey correlation analysis. **Method:** The percentage composition of total ash, acid-insoluble ash, extractum and stachydrine hydrochloride in different batches of stir-baked Leonuri Fructus were determined. The analytic hierarchy process was used to determined the four index weights 0.077, 0.077, 0.385, 0.461. MATLAB programming was adopted to build the grey correlation quality evaluation model for stir-baked Leonuri Fructus from different producing areas and compare the TOPSIS results. **Result:** According to the grey correlation analysis on components in the different batches of stir-baked Leonuri Fructus, Leonuri Fructus with the batch of “Guangdong 20121117” was the most highly correlated with the optimal reference sequence (0.561 685 996) and so the best in quality; Leonuri Fructus with the batch of “Henan 20130401” was the most lowly correlated with the optimal reference sequence (0.402 108 175) and so the worst in quality. The results are basically identical with that of TOPSIS, indicating a good repeatability and stability. **Conclusion:** The grey recognition model is applicable for the comprehensive quality evaluation of multiple-component and multi-target samples of traditional Chinese medicines, with a good promotion and application prospect.

[Key words] stir-baked Leonuri Fructus; grey correlation analysis; TOPSIS; quality evaluation

炒茺蔚子具有活血调经的功效,用于经闭、月经不调、痛经等^[1]。但其质量控制历版药典都是附在

茺蔚子药材项下,没有专门的质量标准,不能保证临床的安全有效使用,也不利于药材的进一步开发研

[收稿日期] 20150207(001)

[基金项目] 2015年版《中国药典》项目;国家中医药管理局中医药行业科研专项(2012070047)

[第一作者] 周苏娟,硕士,讲师,从事模式识别及中医药信息化研究,Tel:020-39352207,E-mail:susona2002@163.com

[通讯作者] *孟江,博士,教授,从事中药炮制及饮片质量标准化研究,Tel:020-39352169,E-mail:jiangmeng666@126.com

究利用。水苏碱为茺蔚子及炒茺蔚子的主要药效活性成分,具有活血调经、利尿消肿、收缩子宫等作用^[2],灰分、浸出物在一定程度上也反映炮制程度及炮制品的质量,故实验通过测定 8 个不同产地共 10 批炒茺蔚子中水苏碱含量、总灰分、酸不溶性灰分以及浸出物的量,构建炒茺蔚子质量评价的灰色关联度模型,并将模型评价的结果与逼近理想解排序法(technique for order preference by similarity to ideal solution, TOPSIS)分析结果进行比较验证,为中药炒茺蔚子质量评价提供科学依据和新的研究思路。

1 材料

1.1 仪器与试剂 SIL-20A 型液相色谱仪(日本岛津公司), Alltech ELSD 3300 型蒸发光散射检测器(美国 Grace), AY120 型电子分析天平(日本岛津公司)。盐酸水苏碱对照品(批号 110712-201111),购自中国食品药品检定研究院,乙腈、甲醇(Oceanpak 公司,色谱纯),水为屈臣氏蒸馏水,其余试剂均为分析纯。

1.2 饮片 10 批茺蔚子药材于 2012 年分别采集于海南、辽宁、广东等地,经广东药学院中药学院刘基柱副教授鉴定为唇形科植物益母草 *Leonurus japonicus* 的干燥成熟果实。炒茺蔚子按照 2010 年版《中国药典》附录 II D 炒黄法炮制。

1.3 数据来源 本研究中,炒茺蔚子的总灰分、酸不溶性灰分测定按照 2010 年版《中国药典》一部附录灰分测定法(附录 IX K),浸出物测定按照 2010 年版《中国药典》一部附录水溶性浸出物测定法(附录 X A)项下的热浸法。盐酸水苏碱含量测定按照 2010 年版《中国药典》益母草药材项下盐酸水苏碱的含量测定方法。见表 1。

2 方法与结果

2.1 权重的确定 综合评价是对多个指标进行总评价的科学方法,不考虑指标权重的大小等同于认为所有的参评指标的重要性相同,这在大多数情况下是不符合实际的。如果能在应用灰色关联和 TOPSIS 分析时结合指标的重要性,则评价结果会更加合理、可信^[3]。权重确定的方法有很多,如德尔菲专家法^[4]、层次分析法(AHP)^[5]、熵值法^[6]等等,目前应用比较广泛的是 AHP 方法。通过对指标的重要性进行两两比较,确定指标重要性评价矩阵。针对炒茺蔚子质量评价指标的重要性不同,总灰分、酸不溶性灰分 < 浸出物 < 盐酸水苏碱含量。由层次分析法进行定量定性分析,得到总灰分、酸不溶性灰

表 1 不同产地炒茺蔚子灰分、浸出物、盐酸水苏碱的含量(n=3)
Table 1 Content ash, extract and stachydrine hydrochloride in stir-baked Leonuri Fructus (n=3) %

No.	产地	总灰分	酸不溶性灰分	浸出物量	盐酸水苏碱
1	海南 YPA3I0001	5.64	0.33	10.33	0.33
2	辽宁 131101CP473	8.52	1.54	11.75	0.39
3	河南 20130401	7.61	1.29	9.26	0.23
4	安徽 140101	7.99	1.86	11.30	0.28
5	广东 20121117	7.58	1.36	11.42	0.56
6	安徽 131016	9.86	4.78	13.20	0.31
7	内蒙 130827	6.42	0.82	10.18	0.49
8	广东 130701	7.09	0.45	9.30	0.23
9	山西 140300851	6.69	0.61	9.16	0.21
10	湖北 20120501	7.72	1.44	10.72	0.33

分、浸出物、盐酸水苏碱含量 4 个指标的权重值 w 分别为 0.077, 0.077, 0.385, 0.461。

2.2 灰色模式识别 灰色模式识别是一种分析因素之间相互关系的方法,是各个方案与最佳指标组成的理想方案间关联系数,由关联系数得到关联度,再按照关联度的大小进行排序、分析,最后得出结论^[7]。灰色关联分析主要研究系统模型不明确、运行机制不清楚以及行为信息不完全系统的建模、预测及控制等问题,其“灰色思维”适于含有复杂化学成分中药的安全性评价和质量控制^[8]。

2.2.1 选择参考序列 设有 n 个中药样品,每个样品有 m 个评价指标,则组成一个评价单元序列,记为 {X_{ik}} (i=1, 2, 3, …, n; k=1, 2, 3, …, m); 本研究中 n=10, m=4。从质量评价的角度,总灰分、酸不溶性灰分两个指标是越低越好,浸出物和盐酸水苏碱含量两个指标是越高越好,为了统一评价标准,采用将低优指标高优化的方法。这里将总灰分和酸不溶性灰分两个指标进行取倒数转换。评价指标统一后,最优参考序列的各项指标对应 n 个样品对应指标的最大值,记为 {X_{sk}} = max(1 ≤ i ≤ n) {X_{ik}}, 最差参考序列的各项指标对应 n 个样品对应指标的最小值,记为 {X_{ik}} = min(1 ≤ i ≤ n) {X_{ik}}。

2.2.2 原始数据的规格化处理 若原始数据纲量不统一,则需进行变换处理。以均值化变换最常用,见公式[1]。

$$Y_{ik} = X_{ik} / X_k \quad [1]$$

式中 Y_{ik} 为规格化数据, X_{ik} 为原数据, X_k 为第 n

个样品的第 k 个指标的均值。

2.2.3 计算关联系数 相对于最优参考序列和最差参考序列的关联系数分别按公式 [2] 和公式 [3] 计算。

$$\xi_{k(s)}^i = \frac{\Delta_{\min} + \rho\Delta_{\max}}{|Y_{ik} - Y_{sk}| + \rho\Delta_{\max}} \quad [2]$$

式中, $\Delta_{\min} = \min |Y_{ik} - Y_{sk}|$, $\Delta_{\max} = \max |Y_{ik} - Y_{sk}|$ ($i = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots, m$)。

$$\xi_{k(t)}^i = \frac{\Delta'_{\min} + \rho\Delta'_{\max}}{|Y_{ik} - Y_{tk}| + \rho\Delta'_{\max}} \quad [3]$$

式中 $\Delta'_{\min} = \min |Y_{ik} - Y_{tk}|$, $\Delta'_{\max} = \max |Y_{ik} - Y_{tk}|$ ($i = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots, m$), ρ ($0 < \rho < 1$) 称为分辨系数, 其值越大分辨能力越强, 一般取 $\rho = 0.5$ 即可满足分辨率要求。

2.2.4 计算关联度 运用 AHP 法计算各指标权重 w_j , 相对于最优参考序列和最差参考序列的关联度分别按公式 [4] 和公式 [5] 计算。

$$r_{i(s)} = \sum_{k=1}^m w_j \xi_{k(s)}^i \quad [4]$$

$$r_{i(t)} = \sum_{k=1}^m w_j \xi_{k(t)}^i \quad [5]$$

2.2.5 计算相对关联度 最佳评价单元是该评价单元与最优参考序列关联程度最大而同时与最差参考序列的关联程度最小者, 由此将评价单元序列同时相对于最优参考序列和最差参考序列的相对关联度 r_i 定义为公式 [6]:

$$r_i = \frac{r_{i(s)}}{r_{i(s)} + r_{i(t)}} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad [6]$$

2.3 TOPSIS TOPSIS 法是一种有效的多指标评价方法, 已广泛应用于农业、环境科学、经济学等方面 [9]。它是从归一化的原始数据矩阵中找出有限

方案中最优方案和最劣方案, 然后计算出评价对象与最优方案和最劣方案之间的相对接近程度, 以作为综合评价的依据 [10]。

建立原始数据矩阵 X 并按照公式 [7] 进行归一化处理, 消除指标量纲的影响。

$$Z_{ij} = \frac{X_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n X_{ij}^2}} \quad (i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, m) \quad [7]$$

运用 AHP 法计算各指标权重 w_j 。对 Z_{ij} 按公式 $Z = Z_{ij} \times w_j$ 加权得到加权矩阵 Z 。

根据矩阵 Z , 确立最优值向量 Z^+ 和最劣值向量 Z^- , 其中 $Z^+ = (X_{i1 \max}, X_{i2 \max}, \dots, X_{ij \max})$, $Z^- = (X_{i1 \min}, X_{i2 \min}, \dots, X_{ij \min})$

计算各评价对象各指标与最优值、最劣值的欧氏距离 D_i^+ 和 D_i^- 。

$$D_i^+ = \sqrt{\sum_{j=1}^m (Z_{ij} - Z_j^+)^2}$$

$$D_i^- = \sqrt{\sum_{j=1}^m (Z_{ij} - Z_j^-)^2}$$

根据公式 [8], 计算各评价单元指标值与最优值的相对接近程度 C_i , C_i 越接近 1, 表示该评价对象越接近最优水平; 反之, 越接近 0, 表示该评价对象越接近最劣水平。

$$C_i = \frac{D_i^-}{D_i^- + D_i^+} \quad [8]$$

2.4 结果

2.4.1 灰色关联分析结果 不同炒茺蔚子中的各成分按 2.1 灰色模式识别步骤进行灰色关联分析, 采用 MATLAB R2010a 编程, 计算出的关联系数, 关联度及相对关联度的结果分别见表 2, 3。

表 2 不同产地炒茺蔚子相对于最优参考序列的关联系数与关联度

Table 2 Correlation coefficient and correlation degree of stir-baked Leonuri Fructus compared with the best reference sequence

No.	产地	关联系数/%				关联度
		灰分	酸不溶性灰分	浸出物	盐酸水苏碱	
1	海南 YPA3I0001	1.000	1.000	0.817	0.631	0.759
2	辽宁 131101CP473	0.732	0.372	0.899	0.695	0.751
3	河南 20130401	0.781	0.385	0.765	0.544	0.635
4	安徽 140101	0.759	0.361	0.871	0.588	0.692
5	广东 20121117	0.783	0.381	0.878	1.000	0.889
6	安徽 131016	0.683	0.333	1.000	0.611	0.745
7	内蒙 130827	0.884	0.438	0.810	0.841	0.801
8	广东 130701	0.819	0.636	0.767	0.548	0.660
9	山西 140300851	0.855	0.503	0.761	0.532	0.643
10	湖北 20120501	0.774	0.377	0.838	0.639	0.706

表 3 不同产地炒茺蔚子质量评价的相对关联度及排序

Table 3 Relative correlation degree and rank of stir-baked Fructus Leonuri

No.	产地	相对关联度	排序
1	海南 YPA310001	0.491 068 572	4
2	辽宁 131101CP473	0.494 171 137	3
3	河南 20130401	0.402 108 175	10
4	安徽 140101	0.448 689 492	7
5	广东 20121117	0.561 685 996	1
6	安徽 131016	0.476 678 594	5
7	内蒙 130827	0.522 674 720	2
8	广东 130701	0.420 243 442	8
9	山西 140300851	0.405 075 837	9
10	湖北 20120501	0.463 511 902	6

2.4.2 TOPSIS 分析结果 按照 2.2 项下 TOPSIS 分析法的步骤求得不同产地炒茺蔚子 TOPSIS 评价及排序结果,见表 4。从表 4 TOPSIS 和表 3 灰色关联两种分析方法的结果来看,对不同产地炒茺蔚子质量的评价结果基本一致,表明结果是可靠并有参考价值的。

表 4 不同产地炒茺蔚子 TOPSIS 评价及排序

Table 4 Quality evaluation and rank result of stir-baked Leonuri Fructus by TOPSIS

No.	产地	D_i^+	D_i^-	C_i	排序
1	海南 YPA310001	0.102 9	0.071 2	0.408 7	4
2	辽宁 131101CP473	0.085 9	0.079 7	0.481 4	3
3	河南 20130401	0.151 9	0.013 1	0.079 2	10
4	安徽 140101	0.126 7	0.039 1	0.235 7	7
5	广东 20121117	0.044 5	0.149 5	0.770 5	1
6	安徽 131016	0.117 3	0.061 2	0.342 7	6
7	内蒙 130827	0.055 8	0.117 7	0.678 2	2
8	广东 130701	0.145 1	0.036 1	0.199 3	8
9	山西 140300851	0.155 7	0.025 7	0.141 5	9
10	湖北 20120501	0.106 4	0.056 3	0.345 9	5

3 讨论

灰色系统是既包含已知信息,又包含未知信息的系统。灰色关联度模型对数据容量和概率分布没有严格要求,它只要求较少的原始数据,便可充分利用这些已知数据寻找体系中的规律性。灰色系统作

为对模糊系统研究的有效手段已被广泛应用,但应用于对中药材的质量评价还较少见。而炒茺蔚子作为临床常用的炮制品种,关于其质量分析的研究也很少见,本研究以盐酸水苏碱的含量、总灰分、酸不溶性灰分、浸出物含量等多种指标,同时采用 TOPSIS 与灰色关联分析对炒茺蔚子质量进行评价,建立灰色模式识别模型,以关联度为测度来综合评价不同产地炒茺蔚子的质量,并与 TOPSIS 法分析结果比较基本一致,为炒茺蔚子质量控制及临床安全应用提供科学依据。此方法适宜对多组分多指标的样品质量进行综合评价,具有重要的理论意义和应用价值。

[参考文献]

[1] 张莲珠,王会弟. 茺蔚子研究进展[J]. 长春中医药大学学报,2012,28(5):920-921.

[2] 李林. 水苏碱的研究概况[J]. 安徽农业科学,2009,37(3):930-931.

[3] 刘继斌,曲成毅,王瑞花. 基于属性 AHM 的 Topsis 综合评价及其应用[J]. 现代预防医学,2006,33(10):1862-1863.

[4] 邹伟,阴江宁,陈兴华,等. 德尔菲法在全国铁铝资源潜力评价中的应用[J]. 地质通报,2010,29(10):1539-1546.

[5] Xu Z S. On consistency of the weighted geometric mean complex judgment matrix in AHP[J]. Euro J Oper Res, 2000, 126(3):683-687.

[6] Deng H P, Yeh C H, Willis R J. Intel-company comparison using modified TOPSIS with objective weights [J]. Comput Oper Res, 2000, 127(10):963-973.

[7] 周利兵. 不同产地葛根质量的灰色模式识别和灰色系统聚类分析[J]. 黑龙江畜牧兽医:科技版,2014,6(11):159-161.

[8] 魏航,林励,张元,等. 灰色系统理论在中药色谱指纹图谱模式识别中的应用研究 [J]. 色谱,2013,31(2):127-132.

[9] 朱卫东,杜承勇,吴勇. 一种基于相关系数矩阵的 TOPSIS 决策方法 [J]. 数学的实践与认识,2014,44(4):33-37.

[10] 郑娟,许建强,王健. TOPSIS 与灰色关联法在口腔医院感染管理质量评价中的应用[J]. 中国卫生统计,2014,31(5):843-845.

[责任编辑 顾雪竹]