

基于灰色关联-TOPSIS 法的干姜质量评价

于江泳¹, 黄绮韵¹, 周苏娟², 陈求芳²

(1. 国家药典委员会, 北京 100061; 2. 广东药科大学, 广州 510006)

[摘要] 目的:应用灰色关联-TOPSIS 法评价不同批次和不同产地干姜的质量,并进行质量比较。方法:以不同产地和批次干姜中 6-姜辣素,8-姜辣素,10-姜辣素,6-姜烯酚,二乙酰基-6-姜辣二醇的含量为评价依据,采用 MATLAB 编程法构建干姜的灰色关联-TOPSIS 法的综合评判模型,并对不同批次和不同产地干姜质量进行评价排序。结果:综合评判模型评价的结果表明四川犍为 20131205,广东阳江 20140221,广东湛江 20140125,安徽亳州 20131226 的质量较好,与干姜的传统评价结果及道地性相一致,可重复性好。结论:灰色关联-TOPSIS 综合评判方法,适宜对多组分多指标的中药材质量进行综合评价,具有推广应用前景。

[关键词] 干姜; 灰色关联-TOPSIS; 质量评价

[中图分类号] R282.5 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2016)18-0056-04

[doi] 10.13422/j.cnki.syfjx.2016180056

Application of Grey Correlation-TOPSIS Method in Quality Evaluation of Zingiberis Rhizoma

YU Jiang-yong¹, HUANG Qi-yun², ZHOU Su-juan², CHEN Qiu-fang²

(1. Chinese Pharmacopoeia Committee, Beijing 100061, China;

2. Guangdong Pharmaceutical University, Guangzhou 510006, China)

[Abstract] **Objective:** To evaluate and compare the quality of Zingiberis Rhizoma from different batches and different origins by the grey correlation-TOPSIS method. **Method:** With the contents of 6-gingerol, 8-gingerol, 6-shogaol, diacetoxy-6-gingerdiol and 10-gingerol in Zingiberis Rhizoma of different batches and different origins as the evaluation basis, grey correlation-TOPSIS comprehensive evaluation model was established by using MATLAB programming method, and the quality evaluation of Zingiberis Rhizoma from different batches and different origins was ranked. **Result:** The grey correlation-TOPSIS model evaluation results indicated that the quality of Sichuan Jianwei 20131205, Guangdong Yangjiang 20140221, Guangdong Zhanjiang 20140125, Anhui Bozhou 20131226 was better than that of other batches, consistent with the traditional evaluation results and genuineness, indicating a good repeatability and stability. **Conclusion:** Grey correlation-TOPSIS comprehensive evaluation method can be well applied to the quality evaluation of traditional Chinese medicine with multiple components, and have the broad prospect in application.

[Key words] Zingiberis Rhizoma; grey correlation-TOPSIS; quality evaluation

干姜主产于四川、贵州、广东、山东、云南、陕西等地,具有温中散寒、回阳通脉、燥湿消痰的功效^[1]。由于各地在生态环境、种植方式等方面存在差异,各地干姜的质量参差不齐。2015 年版《中国药

典》一部仅以挥发油总量和 6-姜辣素作为质量控制指标,难以全面反映干姜药材及饮片的内在品质。如何全面系统地评价干姜药材质量,需要综合考虑多影响因素来评价,干姜的活性成分主要是姜辣素类,包括

[收稿日期] 20151105(014)

[基金项目] 国家自然科学基金项目(81102809);国家中医药管理局行业科研专项(201207004)

[第一作者] 于江泳,博士,副主任药师,从事中药质量控制及标准研究,Tel:010-67079539,E-mail:yujiangyong@chp.org.cn

6-姜辣素,8-姜辣素,10-姜辣素,姜烯酚等 10 余种成分。药理学研究发现姜辣素类成分具有强心、调节心血管舒缩功能、抗血小板、降血脂、抗动脉粥样硬化、抗氧化及保护心肌等作用^[2-3]。故本研究选取干姜中 6-姜辣素,8-姜辣素,10-姜辣素,6-姜烯酚,二乙酰基-6-姜辣二醇多成分含量作为评价指标。

灰色关联分析(Grey Relational Analysis, GRA)多应用于系统模型及运行机制不明确情况下的系统建模、预测与控制等领域,可以较好地反应序列间的非线性关系,其“灰色思维”的思想与中医药的理论特点相契合。TOPSIS (Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution,逼近理想解排序法)是一种多指标决策法,具有易理解、易计算、评估结果合理、应用灵活等优点。但因其方案属性与效用之间呈线性变化关系,因而具有一定的局限性。而灰色关联分析方法可以较好地反应序列间的非线性变化关系,能够弥补传统 TOPSIS 法的不足^[4-5]。以往文献报道的灰色关联-TOPSIS 法,是单用灰色关联法或分别用灰色关联分析和 TOPSIS 法进行分析,并对结果进行比较相互验证,来进行中药材的质量评价^[6-8]。本文采用灰色关联分析和 TOPSIS 分析方法相结合构建干姜质量评价的综合模型,先利用灰色关联分析法获得各指标与参考指

标的关联系数,再采用 TOPSIS 法依据灰色关联系数矩阵得到最优及最差的值向量,然后计算各评价单元指标值与最优最劣值的欧氏距离,衡量相对接近程度从而综合评价干姜质量的优劣,以期建立一种新型的干姜质量综合评价方法。

1 材料

1120 系列高效液相色谱仪(G1314A UV 检测器,G1313A 自动进样器,G1316 柱温箱,Chemstation 色谱工作站,美国 Agilent),Ultimate™ XB-C₁₈ 色谱柱(4.6 mm × 250 mm,5 μm),DS-8510 型超声波清洗机(上海生析超声仪器有限公司),DFY-400 型粉碎机(上海江仪仪器有限公司),AY120 型电子分析天平(日本岛津公司)。

对照品 6-姜烯酚(成都瑞芬生物科技有限公司,批号 131010),6-姜酚,8-姜酚,10-姜酚(南通飞宇生物科技有限公司,批号分别为 FY13420605, FY13430701, FY13440510)。二乙酰基-6-姜酚为实验室分离纯化得到。以上对照品纯度均 >98%。

18 批干姜药材于 2012 年分别采集于四川、贵州、广东、云南等地,经广东药科大学中药学院刘基柱副教授鉴定为姜科植物姜 *Zingiber officinale* 的干燥根茎,来源见表 1。5 个姜辣素成分采用 HPLC 同时测定其含量的方法^[9],实验结果见表 1。

表 1 干姜中 5 个成分的含量测定(n=3)

Table 1 Results of five components content in *Zingiberis Rhizoma*(n=3)

mg·g⁻¹

| No. | 产地 | 批次 | 6-姜辣素 | 8-姜辣素 | 6-姜烯酚 | 二乙酰基-6-姜辣二醇 | 10-姜辣素 |
|-----|-------|----------|-------|-------|-------|-------------|--------|
| 1 | 四川,德阳 | 20131212 | 3.41 | 0.92 | 1.91 | 2.14 | 1.71 |
| 2 | 四川,成都 | 20131225 | 5.86 | 1.34 | 1.74 | 2.23 | 2.68 |
| 3 | 四川,南充 | 20140623 | 5.50 | 1.06 | 2.48 | 1.92 | 2.01 |
| 4 | 四川,眉山 | 20131128 | 7.57 | 1.45 | 1.82 | 2.21 | 2.83 |
| 5 | 四川,犍为 | 20131205 | 3.96 | 0.96 | 2.53 | 2.17 | 1.92 |
| 6 | 广东,茂名 | 20131013 | 5.28 | 1.14 | 1.91 | 2.18 | 2.07 |
| 7 | 广东,湛江 | 20140125 | 4.20 | 1.04 | 3.30 | 2.85 | 2.04 |
| 8 | 广东,湛江 | 20140215 | 3.67 | 0.94 | 1.89 | 1.70 | 1.85 |
| 9 | 广东,阳江 | 20140221 | 7.10 | 1.45 | 2.19 | 2.30 | 2.58 |
| 10 | 云南,曲靖 | 20140113 | 4.13 | 0.93 | 1.23 | 1.66 | 1.75 |
| 11 | 云南,文山 | 20140116 | 4.27 | 0.80 | 1.81 | 1.58 | 1.24 |
| 12 | 云南,保山 | 20130219 | 5.37 | 1.07 | 1.18 | 1.66 | 1.88 |
| 13 | 广西,南宁 | 20140118 | 6.71 | 1.37 | 1.93 | 1.95 | 2.23 |
| 14 | 广西,钦州 | 20140117 | 6.46 | 1.42 | 1.67 | 2.22 | 2.48 |
| 15 | 广西,贵港 | 20140227 | 6.43 | 1.38 | 1.68 | 2.22 | 2.46 |
| 16 | 贵州,遵义 | 20131021 | 5.55 | 1.05 | 1.72 | 1.66 | 1.88 |
| 17 | 贵州,安顺 | 20131209 | 4.42 | 0.79 | 1.85 | 1.64 | 1.55 |
| 18 | 安徽,亳州 | 20131226 | 4.52 | 1.07 | 3.03 | 2.86 | 2.13 |

2 方法与结果

2.1 建立灰色关联系数矩阵 灰色关联分析是一种分析各因素之间相互关系的方法,通过求得待考察方案与最优指标理想方案的关联系数,进而计算出关联度,然后根据关联度的大小进行排序、分析,最后得到对考察方案的评价^[10-11]。

2.1.1 最优及最差指标的确定 设有 n 个中药材样品,每个样品有 m 个评价指标,组成一个评价单元序列,记为: $\{X_{ij}\} (i=1,2,3,\dots,n; j=1,2,3,\dots,m)$; 本研究中 $n=18, m=5$ 。从传统中药材质量评价的角度,干姜的 5 个成分指标含量越高越好,因此最优参考序列的各项指标对应 n 个干姜样品评价指标的最大值,记为 $\{X\}_{sj} = \max(1 \leq i \leq n) \{X\}_{ij}$, 最差参考序列的各项指标对应 n 个干姜样品对应指标的最小值,记为 $\{X\}_{ij} = \min(1 \leq i \leq n) \{X\}_{ij}$ 。

2.1.2 原始数据标准化处理 为了消除变量单位量纲不同的影响,需要对指标数据进行标准化处理。这里通过对原始数据进行均值化处理达到量纲的统一,具体方法见公式(1)。

$$Y_{ij} = X_{ij} / X_j \quad (1)$$

式中, Y_{ij} 为规格化数据, X_{ij} 为原始数据, X_j 为第 n 个样品的第 j 个指标的均值。

2.1.3 关联系数的计算 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。

$$\xi_{j(s)}^i = \frac{\Delta_{\min} + \rho \Delta_{\max}}{|Y_{ij} - Y_{sj}| + \rho \Delta_{\max}} \quad (2)$$

式中, $\Delta_{\min} = \min |Y_{ij} - Y_{sj}|, \Delta_{\max} = \max |Y_{ij} - Y_{sj}| (i=1,2,\dots,n; j=1,2,\dots,m)$ 。

$$\xi_{j(t)}^i = \frac{\Delta'_{\min} + \rho \Delta'_{\max}}{|Y_{ij} - Y_{tj}| + \rho \Delta'_{\max}} \quad (3)$$

式中, $\Delta'_{\min} = \min |Y_{ij} - Y_{tj}|, \Delta'_{\max} = \max |Y_{ij} - Y_{tj}| (i=1,2,\dots,n; j=1,2,\dots,m)$, 分辨系数 ρ 的大小代表分辨能力的大小,其值在 0 到 1 之间,通常情况下取 $\rho=0.5$ 即可满足分辨率要求。

2.2 基于灰色关联 TOPSIS 原理 TOPSIS 法是一种有效的多指标评价方法,基本原理是通过检测多目标决策问题中评判对象与正、负理想解之间的距离进行排序^[12]。通过引入灰色关联分析将原始矩阵转换为灰色关联系数矩阵,计算各方案与正理想解的贴近度,以贴近度作为评价依据,构建灰色关联 TOPSIS 综合评判模型。TOPSIS 法计算步骤包括以下步骤。

2.2.1 正理想解和负理想解的确定 根据前面灰

色关联分析计算出来的关联系数矩阵 ξ , 确立最优值向量 ξ^+ 和最劣值向量 ξ^- , 其中 $\xi^+ = \{[\max_{1 \leq i \leq n} \xi_i(j), j=1,2,\dots,n]\}$, $\xi^- = \{[\min_{1 \leq i \leq n} \xi_i(j), j=1,2,\dots,n]\}$, 即 ξ^+ 对应 ξ 每一列的最大值, ξ^- 对应 ξ 每一列的最小值;

2.2.2 欧氏距离的计算 欧式距离是一个常用的距离定义,指在 n 维空间中 2 个点之间的真实距离。这里通过欧氏距离 D_i^+ 和 D_i^- 计算各评价对象各指标与最优值、最劣值的距离。

$$D_i^+ = \sqrt{\sum_{j=1}^n [\xi_i(j) - \xi_0^+(j)]^2} \quad (4)$$

$$D_i^- = \sqrt{\sum_{j=1}^n [\xi_i(j) - \xi_0^-(j)]^2}$$

2.2.3 相对接近度的计算 根据公式(5), 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 的值越大表明该评价对象越接近最优水平; C_i 的值越小表示该评价对象越接近最差水平。

$$C_i = \frac{D_i^-}{D_i^- + D_i^+} \quad (5)$$

2.3 结果

2.3.1 灰色关联系数分析 不同批次产地干姜中的各成分的含量,见表 1,按 2.1 项下灰色模式识别步骤进行灰色关联分析,采用 MATLAB R2010a 编程,计算出的关联系数结果见表 2。

表 2 不同产地批次干姜灰色关联系数分析(相对最优参考序列)
Table 2 Grey correlation coefficient of Zingiberis Rhizoma from different producing areas compared with the best reference sequence

| 批次 | 6-姜辣素 | 8-姜辣素 | 6-姜烯酚 | 二乙酰基-6-姜辣二醇 | 10-姜辣素 |
|----------|-------|-------|-------|-------------|--------|
| 20131212 | 0.333 | 0.384 | 0.433 | 0.471 | 0.415 |
| 20131225 | 0.549 | 0.750 | 0.405 | 0.504 | 0.841 |
| 20140623 | 0.507 | 0.458 | 0.564 | 0.405 | 0.492 |
| 20131128 | 1.000 | 1.000 | 0.417 | 0.496 | 1.000 |
| 20131205 | 0.366 | 0.402 | 0.579 | 0.481 | 0.466 |
| 20131013 | 0.476 | 0.516 | 0.433 | 0.485 | 0.511 |
| 20140125 | 0.382 | 0.446 | 1.000 | 0.985 | 0.502 |
| 20140215 | 0.348 | 0.393 | 0.429 | 0.356 | 0.448 |
| 20140221 | 0.816 | 1.000 | 0.488 | 0.533 | 0.761 |
| 20140113 | 0.377 | 0.388 | 0.339 | 0.348 | 0.424 |
| 20140116 | 0.387 | 0.337 | 0.416 | 0.333 | 0.333 |
| 20130219 | 0.486 | 0.465 | 0.333 | 0.348 | 0.456 |
| 20140118 | 0.707 | 0.805 | 0.436 | 0.413 | 0.570 |
| 20140117 | 0.652 | 0.917 | 0.394 | 0.500 | 0.694 |
| 20140227 | 0.646 | 0.825 | 0.396 | 0.500 | 0.682 |
| 20131021 | 0.507 | 0.452 | 0.402 | 0.348 | 0.456 |
| 20131209 | 0.398 | 0.333 | 0.422 | 0.344 | 0.383 |
| 20131226 | 0.405 | 0.465 | 0.797 | 1.000 | 0.532 |

2.3.2 灰色关联-TOPSIS 评价 根据表 2 得到的关联系数矩阵,按照 2.2 项下 TOPSIS 分析法的步骤求得不同批次干姜灰色关联 TOPSIS 评价及排序结果,见表 3。模型评价的结果显示四川犍为、广东阳江、广东湛江、安徽亳州的质量较好。

表 3 不同批次产地干姜灰色关联 TOPSIS 评价及排序
Table 3 Quality evaluation and rank result of Zingiberis Rhizoma by TOPSIS

| No. | 产地 | 批次 | D_i^+ | D_i^- | C_i | 排序结果 |
|-----|-------|----------|---------|---------|-------|------|
| 1 | 四川,德阳 | 20131212 | 1.330 | 0.195 | 0.128 | 14 |
| 2 | 四川,成都 | 20131225 | 0.944 | 0.716 | 0.431 | 6 |
| 3 | 四川,南充 | 20140623 | 1.157 | 0.360 | 0.237 | 9 |
| 4 | 四川,犍为 | 20131128 | 0.770 | 1.169 | 0.603 | 1 |
| 5 | 四川,眉山 | 20131205 | 1.221 | 0.325 | 0.210 | 11 |
| 6 | 广东,茂名 | 20131013 | 1.156 | 0.344 | 0.229 | 10 |
| 7 | 广东,湛江 | 20140125 | 0.969 | 0.955 | 0.496 | 3 |
| 8 | 广东,湛江 | 20140215 | 1.356 | 0.163 | 0.107 | 15 |
| 9 | 广东,阳江 | 20140221 | 0.755 | 0.961 | 0.560 | 2 |
| 10 | 云南,曲靖 | 20140113 | 1.399 | 0.116 | 0.076 | 17 |
| 11 | 云南,文山 | 20140116 | 1.431 | 0.098 | 0.064 | 18 |
| 12 | 云南,保山 | 20130219 | 1.310 | 0.236 | 0.153 | 13 |
| 13 | 广西,南宁 | 20140118 | 0.985 | 0.660 | 0.401 | 8 |
| 14 | 广西,钦州 | 20140117 | 0.916 | 0.777 | 0.459 | 5 |
| 15 | 广西,贵港 | 20140227 | 0.934 | 0.702 | 0.429 | 7 |
| 16 | 贵州,遵义 | 20131021 | 1.274 | 0.253 | 0.166 | 12 |
| 17 | 贵州,安顺 | 20131209 | 1.397 | 0.121 | 0.080 | 16 |
| 18 | 安徽,亳州 | 20131226 | 0.949 | 0.849 | 0.472 | 4 |

3 讨论

本实验以干姜药材中姜辣素类成分为指标,在多成分含量测定基础上对干姜进行质量评价,姜辣素类成分采取 HPLC-DAD 方法同时进行测定,色谱条件为流动相乙腈-0.1% 乙酸水,梯度洗脱(0~10 min,10%~25% 乙腈;10~20 min,25%~35% 乙腈;20~45 min,35%~75% 乙腈;45~80 min,75%~100% 乙腈),流速 0.6 mL·min⁻¹,检测波长 280 nm,进样量 10 μL,柱温 30 °C。该色谱条件下各成分分离度良好,适合对干姜进行多成分含量测定。

灰色系统为包含某些明确的已知信息及不明确的未知信息的系统,即利用已知信息通过关联度去揭示未知信息,非常适合用于含有复杂化学成分的中药材质量评价。本研究建立的灰色关联-TOPSIS 综合评判模型,在传统的 TOPSIS 方法基础上引入灰色关联系数,弥补了传统 TOPSIS 法只计算相对距离

却忽视了曲线趋势、只反应序列间线性变化关系的不足^[13],使评判结果更加科学合理。模型评价的结果显示四川犍为 20131205,广东阳江 20140221,广东湛江 20140125,安徽亳州 20131226 的质量较好,结果与干姜的传统评价结果及道地性相符合。研究结果客观科学,表明此类方法适用于多组分多指标的中药样品质量的综合评价,有推广应用前景。

[参考文献]

[1] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典. 一部[S]. 北京:中国医药科技出版社,2010:13.

[2] 蒋苏贞,宓穗卿,王宁生. 姜酚心血管药理作用研究进展[J]. 时珍国医国药,2007,18(1):219-221.

[3] 周萍,彭咏波,李萍. 6-姜烯酚抗肿瘤机制研究进展[J]. 中南药学,2012,10(7):536-538.

[4] 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.

[5] 王正新,党耀国,曹明霞. 基于灰熵优化的加权灰色关联度[J]. 系统工程与电子技术,2010,32(4):774-776.

[6] 周莲,吴启勋,孙海霞. 不同产地北柴胡质量的灰色模式识别研究[J]. 安徽农业科学,2009,37(16):7519,7522.

[7] 顾志荣,陈辉,王亚丽,等. 当归药材安全性的灰色关联度评价[J]. 中国实验方剂学杂志,2014,20(17):60-64.

[8] 周苏娟,麦小梅,赵斌,等. 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[J]. 中国实验方剂学杂志,2015,21(15):40-43.

[9] Deng X M, Yu J Y, Zhao M, et al. Quality assessment of crude and processed ginger by high-performance liquid chromatography with diode array detection and mass spectrometry combined with chemometrics [J]. J Sep Sci, 2015, 38(17): 2945-2952.

[10] 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,2014,6(11):159-161.

[11] 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.

[12] 徐玖平,吴巍. 多属性决策的理论与方法[M]. 北京:清华大学出版社,2006:144.

[13] 张钦礼,程健,王新民,等. 基于灰色关联和加权 TOPSIS 法的采矿方法优选[J]. 科技导报,2013,31(31):38-42.

[责任编辑 顾雪竹]