

# 中药禹粮石质量的模糊识别

朱育凤<sup>1</sup> 丰国炳 (江苏省中医院, 南京 210029)

**摘要** 探讨了用模糊数学中的多元隶属函数分类法并借助线性回归模型解决矿物药禹粮石的质量控制及分类。结果表明本法科学、准确。

**关键词** 禹粮石 模糊识别

矿物类中药禹粮石,在我国已有两千多年的应用历史,别名为禹余粮,首载于《神农本草经》<sup>[1]</sup>,列为上品,性微寒,味甘涩,入脾胃、大肠经,具有涩肠、止血、止带之效,用于久泻久痢、便血崩漏、赤白带下等症,1990年版收载禹粮石的矿物来

源为褐铁矿(Limonite)<sup>[2]</sup>,但对其内在质量尚无控制标准。近年来,任仁安、朱育凤等对禹粮石进行了比较系统的研究<sup>[3,4]</sup>。本文试图用模糊数学理论,解决禹粮石的质量控制及分类问题,并可用于其他药物的质量控制与分类。

朱育凤,女,29岁,1989年南京中医学院中药学专业硕士,研究生毕业,主管药师。

# 1 模糊数学理论

多元隶属函数分类法也称m分类法,是用随机抽样的方法来构造m相模糊统计试验的模型,设  $\underline{A}_1, \underline{A}_2, \dots, \underline{A}_m$  是论域U上的模糊集  $P_m = \{\underline{A}_1, \underline{A}_2, \dots, \underline{A}_m\}$ , 在论域U中抽取容量为n的一组样品,其中  $\underline{A}_1, \underline{A}_2, \dots, \underline{A}_m$  的样品数分别为  $n_1, n_2, \dots, n_m$ , 对于每一个样品,均选取能表征各个模糊集  $A_j (j=1, 2, \dots, m)$  特性的P个指标(或参数),对第i个样品的特性指标,记为P维向量  $U_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})$ ;

$$\text{式中 } i=1, 2, \dots, n \quad n = \sum_{j=1}^m n_j$$

因此论域可表示成  $U = \{u | u = (x_1, x_2, \dots, x_p), x_i \text{ 为第 } i \text{ 项特性指标值}\}$

作论域U到集合  $P_m$  的映射

$$f(u) = \begin{cases} 1, & \text{当 } u \text{ 被划归为 } \underline{A}_1 \text{ 时} \\ 1/2, & \text{当 } u \text{ 被划归为 } \underline{A}_2 \text{ 时} \\ \dots, & \dots \\ 1/m, & \text{当 } u \text{ 被划归为 } \underline{A}_m \text{ 时} \end{cases}$$

令

$$Y_{n \times 1} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1/2 \\ \vdots \\ 1/2 \\ \vdots \\ 1/m \\ \vdots \\ 1/m \end{pmatrix} \begin{matrix} \left. \begin{matrix} \vdots \\ \vdots \end{matrix} \right\} n_1 \\ \left. \begin{matrix} \vdots \\ \vdots \end{matrix} \right\} n_2 \\ \left. \begin{matrix} \vdots \\ \vdots \end{matrix} \right\} n_m \end{matrix}$$

$$\beta_{(P+1) \times 1} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}$$

$$X_{n \times (P+1)} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{pmatrix}$$

$$e_{n \times 1} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix}$$

要求出映射 f 的表达式,考虑下面的线性模型  $y_i =$

$\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_p x_{ip} + e_i \quad i=1, 2, \dots, n$ , 也可写成  $Y = XB + e$ , 式中 e 为正态随机变量矩阵。而且它的数学期望和方差分别为:  $E(e_i) = 0, D(e_i) = \sigma^2 (i=1, 2, \dots, n)$  式中  $\sigma$  是常数,精度  $S(x_1, x_2, \dots, x_p)$ 。在上述线性模型的假定下,当  $\text{rank}(x'x) = p+1$  时,可求得  $\beta$  的最小二乘估计为:

$$\hat{\beta} = (x'x)^{-1} X'Y = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p)^T$$

当  $\text{rank}(x'x) < P+1$  时,可将  $(x'x)^{-1}$  改为  $\Gamma^+$  广义逆  $(x'x)^+$ , 取  $\hat{\beta} = (x'x)^+ X'Y = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p)^T$ , 求出  $\hat{\beta}$  后,可按标准正态概率分布函数形状构造多元隶属函数,即  $U_{\underline{A}(n)} = U_{\underline{A}}(x_1, x_2, \dots, x_p)$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\beta_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i} \exp(-t^2/2) dt$$

式中  $\alpha$  为常数,可根据专业知识来确定(也可按经验确定), $\alpha$  一旦确定,模型即建立。按 Logistic 函数形状构造多元隶属函数,则

$$U_{\underline{A}(n)} = U_{\underline{A}}(x_1, x_2, \dots, x_p) = \frac{1}{1 + \exp[\alpha(\hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i)]}$$

最后,取  $m-1$  个阈值  $\lambda_i \in [0, 1], \lambda_i > \lambda_{i+1} (i=1, 2, \dots, m-1)$ , 把模糊子集  $\underline{A}$  截成  $m$  个普通集合:

$$A_1^* = \{U | U_{\underline{A}(n)} \geq \lambda_1\}$$

$$A_2^* = \{U | \lambda_2 \leq U_{\underline{A}(n)} < \lambda_1\}$$

$$\dots$$

$$A_m^* = \{U | U_{\underline{A}(n)} < \lambda_{m-1}\}$$

于是,根据多元隶属函数值  $U_{\underline{A}(n)}$  把论域U划分成  $m$  类,  $A_1^*, A_2^*, \dots, A_m^*$ , 从而达到将论域按需求或属性予以分类的目的。所以,  $m$  分类法的应用步骤如下:

- (1) 确定论域U和集合  $P_m = \{\underline{A}_1, \underline{A}_2, \dots, \underline{A}_m\}$ ;
- (2) 选定特性指标向量和抽取容量为n的一组样品;
- (3) 计算  $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p)^T$ ;
- (4) 构造多元隶属函数  $U_{\underline{A}}(x_1, x_2, \dots, x_p)$ ;
- (5) 选取阈值  $\lambda_i$ , 把论域U划分成  $m$  类。

## 2 实验数据及计算分类

在对禹粮石的品质鉴别和质量控制中,按禹粮

石的品质优劣进行分类非常重要，可以有效地防止假药和劣药流入市场，以保证药材的质量。根据禹粮石的特性<sup>[3]</sup>，将其分为三类：佳品  $\underline{A}_1$ ，代用品  $\underline{A}_2$ ，混淆品  $\underline{A}_3$ 。将这三类看成禹粮石质量这一论域  $U$  的模糊子集。判断某一未知质量的禹粮石所属的类别，就是根据禹粮石质量的多个特性指标，判别它对模糊集  $\underline{A}_1$ 、 $\underline{A}_2$ 、 $\underline{A}_3$  的隶属程度。

对于某一具体的禹粮石  $u$ ，选择以下 4 个代表其质量的特性指标<sup>[3]</sup>：

$x_1$ ——禹粮石样品中的全铁量(即全铁量占样品的百分比%)

$x_2$ ——人体必需的微量元素 Zn(从多个微量元素中选出具有代表意义的,单位为 ppm)

$x_3$ ——人体必需的微量元素 Mn(从多个微量元素中选出具有代表意义的,单位为 ppm)

$x_4$ ——对人体有害的元素 As(ppm)

其中样品禹粮石的全铁量测定采用盐酸——氟化钾——氯化亚锡分解禹粮石，然后用氯化亚锡——三氯化钛——重铬酸钾法测定。

微量元素测定采用美国 Jarrall-Ash 公司制造的电感耦合等离子发射光谱仪(ICP)，型号为 Mark II—1100 真空型 63 通道，配接 PDP 11/23 型计算机。

因此，对第  $i$  个禹粮石样品的特性指标，可用四维向量表示成： $u_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, x_{i4})$ 。作者收集了江苏、北京、江西、四川、山东、宁夏、河南、湖北等省市的禹粮石商品的样品 22 份，根据药材性状、样品主成分的光学特征以及一般理化鉴别试验，对样品的质量进行了分类，其中划归为“佳品  $\underline{A}_1$ ”类别、“代用品  $\underline{A}_2$ ”类别和“混淆品”类别的样本数分别为 9, 3, 10。(注：佳品禹粮石应与古代本草记载的佳品相符合)。此种分类主要是依据商品禹粮石在外观上的一些特性和其含有的主成分的多少来判别，如古代本草记载的禹粮石佳品具有多环性同心圆结构以及具有黄、白、青、赤、紫多色性；主成分为商品标粮石含有的全铁量多少，佳品禹粮石含有的全铁量较多，但全铁量较多的样品并不一定属于佳品，所以给判别禹粮石的质量带来一定的模糊性，在传统的鉴别中主观因素占了很大比例，也给中药鉴定工作带来一定困难。我们筛选出

中药禹粮石的四个特性指标，综合起来反映禹粮石商品质量，为鉴别禹粮石带来一定的客观性。下面的计算过程及结果用来和传统的鉴别结果进行比较，看是否和传统的分类结果一致，若一致甚至比传统的分类好，则验证提出的新的分法法包括线性模型具有科学性和合理性。

计算：

$$Y_{22 \times 1} = (\underbrace{1, \dots, 1}_9, \underbrace{\frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}}_3, \underbrace{\frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{3}}_{10})^T$$

$$X_{22 \times 5} = \begin{Bmatrix} 1 & 22.5 & 174.9 & 5374.4 & 37.04 \\ 1 & 8.9 & 99.1 & 4105.7 & 53.77 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 8.7 & 61.8 & 100.5 & 151.8 \end{Bmatrix}$$

$$\beta_0 x_1 = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4)^T$$

$$e_{22 \times 1} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_{22})^T$$

按公式  $\hat{\beta}_{0, x_1} = (X'X)^{-1}X'Y$

经过计算得到：

$$\hat{\beta}_{0, x_1} = (-5.38, 2.48, 3.56, 1.78, 3.56)$$

按照 Logistic 函数形状构造多元隶属函数，取  $\alpha = -3$  (此值是模型中试验数值，而不是由 22 份样品中得出的)

$$\text{即 } \underline{U}_{\underline{A}(n)} = \underline{U}_{\underline{A}}(x_1, x_2, x_3, x_4)$$

$$= \frac{1}{1 + \exp[\alpha(\hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^4 \hat{\beta}_i x_i)]}$$

$$= \frac{1}{1 + \exp[-3 \times (-5.38 + \sum_{i=1}^4 \hat{\beta}_i x_i)]}$$

(1)

式中  $\sum_{i=1}^4 \hat{\beta}_i x_i = 2.48x_1 + 3.56x_2 + 1.78x_3 + 3.56x_4$

将表 1 中各样品的 4 个特性指标值分别代入(1)式计算结果见表 2，即各样品对禹粮石质量优劣的隶属度，可见模型精度为

$$S_{(x_1, x_2, x_3, x_4)} \approx 0.967$$

根据表 2 选取阈值  $\lambda_1 = 0.94$ ,  $\lambda_2 = 0.80$ ，把表示禹粮石质量优劣程度的模糊子集  $\underline{A}$  截成了 3 个普通集合，即

$$A_1^* = \{U | \underline{U}_{\underline{A}(n)} \geq 0.94\}$$

$$A_2^* = \{U | 0.80 \leq \underline{U}_{\underline{A}(n)} < 0.94\} \quad (2)$$

$$A_3^* = \{U | \underline{U}_{\underline{A}(n)} < 0.80\}$$

表1 样品特性指标的实验测定结果

| 类别                             | 样品序号 | 全铁量       | 微量元素Zn            | 微量元素Mn            | 有害元素As            | 样品来源         |
|--------------------------------|------|-----------|-------------------|-------------------|-------------------|--------------|
|                                |      | $x_1(\%)$ | $x_2(\text{ppm})$ | $x_3(\text{ppm})$ | $x_4(\text{ppm})$ |              |
| 佳品 $A_1$<br>(胶态结构<br>禹粮石)      | 1    | 22.5      | 174.9             | 5374.4            | 37.0              | 江西吉安         |
|                                | 2    | 8.9       | 99.1              | 4105.7            | 53.8              | 四川重庆         |
|                                | 3    | 26.0      | 187.3             | 2130.8            | 25.7              | 宁夏           |
|                                | 4    | 31.3      | 189.4             | 5971.6            | 38.1              | 山东章丘         |
|                                | 5    | 12.3      | 85.0              | 1847.8            | 70.7              | 江苏兴化         |
|                                | 6    | 18.4      | 170.0             | 3414.8            | 20.7              | 江苏宿迁         |
|                                | 7    | 25.3      | 145.6             | 6589.1            | 24.9              | 江苏泗洪         |
|                                | 8    | 13.9      | 114.3             | 1486.8            | 42.6              | 江苏泰州         |
|                                | 9    | 18.2      | 310.9             | 4229.3            | 79.3              | 江苏金湖         |
| 代用品 $A_2$<br>(风化结构<br>禹粮石)     | 10   | 31.6      | 455.1             | 3149.4            | 54.8              | 江苏建湖         |
|                                | 11   | 8.6       | 166.3             | 1111.9            | 71.3              | 江苏淮阴         |
|                                | 12   | 52.2      | 5395.5            | 1130.9            | 15286.6           | 江苏南京(栖霞山)    |
| 混用品 $A_3$<br>(粘土岩及褐铁<br>矿化蚀变岩) | 13   | 3.3       | 57.9              | 55.6              | 78.0              | 江西萍乡         |
|                                | 14   | 4.4       | 83.3              | 122.4             | 67.3              | 江西南丰         |
|                                | 15   | 4.1       | 112.5             | 1213.5            | 81.6              | 江西南昌         |
|                                | 16   | 4.2       | 211.1             | 83.2              | 93.7              | 河南密县         |
|                                | 17   | 4.0       | 215.2             | 908.7             | 76.1              | 河南郑州         |
|                                | 18   | 4.7       | 75.5              | 141.8             | 99.1              | 河南卢氏         |
|                                | 19   | 4.2       | 65.5              | 121.3             | 82.1              | 湖北仙桃         |
|                                | 20   | 4.1       | 52.3              | 180.2             | 142.3             | 江苏扬州         |
|                                | 21   | 8.8       | 138.5             | 1081.9            | 36.30             | 湖北           |
|                                | 22   | 8.7       | 61.8              | 100.5             | 151.8             | 江苏南京(市药材公司供) |

表2 样品的隶属度值

| 类别       | 样品号 | 隶属度      | 类别        | 样品号 | 隶属度      | 类别        | 样品号  | 隶属度      |
|----------|-----|----------|-----------|-----|----------|-----------|------|----------|
|          |     | $u_A(u)$ |           |     | $u_A(u)$ |           |      | $u_A(u)$ |
| 佳品 $A_1$ | 1   | 0.98     | 代用品 $A_2$ | 10  | 5.91     | 混用品 $A_3$ | 13   | 0.58     |
|          | 2   | 0.94     |           | 11  | 0.86     |           | 14   | 0.60     |
|          | 3   | 0.99     |           | 12  | 0.65     |           | 15   | 0.59     |
|          | 4   | 0.98     |           |     | 16       |           | 0.61 |          |
|          | 5   | 0.95     |           |     | 17       |           | 0.58 |          |
|          | 6   | 0.98     |           |     | 18       |           | 0.62 |          |
|          | 7   | 0.94     |           |     | 19       |           | 0.62 |          |
|          | 8   | 0.96     |           |     | 20       |           | 0.59 |          |
|          | 9   | 0.96     |           |     | 21       |           | 0.65 |          |
|          |     |          |           | 22  | 0.68     |           |      |          |

这样就将禹粮石质量分成了 $A_1^*$ 、 $A_2^*$ 、 $A_3^*$ 三个类别。我们就可以根据未知质量的禹粮石 $U=(x_1, x_2, x_3, x_4)$ 对模糊集 $A$ 的隶属程度 $U_A(x_1, x_2, x_3, x_4)$ 按(2)式判别它的类别。

### 3 讨论

3.1 从表2样品隶属度值来看,隶属度值明显地被

分为三个区域,1~9号样品隶属度值在0.94以上,10~11号样品隶属度值在0.94~0.8之间,13~22号样品隶属度值在0.8以下。传统鉴别结果:1~9号样品为胶态结构禹粮石,具有多环性同心圆结构以及黄、白、青、赤、紫多色性,与古代本草一致<sup>[5]61</sup>,属于佳品;10~11号样品为风化结构禹粮石,可作

禹粮石入药,质量较次,为代用品;13~22号样品为粘土岩及褐铁矿化蚀变岩,均为混淆品,不宜药用。由上述分析结果可见,m分类法与传统分类法基本一致,我们用模糊识别方法通过定量计算达到定性分类的目的,此法科学、准确。

3.2 传统的鉴别(包括药材性状 样本主成分的光学特征以及一般理化鉴别试验)判断出的代用品中有一样品号为12的禹粮石样品,隶属度为0.65,不能划归为代用品,不能药用。经查表1,发现它含有对人体有害的砷(As),量为15286.6 ppm,远远超出《中国药典》规定的限量<sup>[7]</sup>,因而不能药用这说明新判别法具有较多的优越性。所以本法判断的正确率较高,而且能够解决一些传统的鉴别方法不能解决的问题。

## 参 考 文 献

- 1 孙星衍,孙冯翼同辑.神农本草经.池阳学海据孙氏问经堂刊本校刊.清光绪十七年辛卯(1891).
- 2 中华人民共和国卫生部药典委员会.中华人民共和国药典(一部)1990,232
- 3 任仁安、朱育凤.中药禹粮石的鉴定分析.药物分析杂志,1992,12(2):92
- 4 朱育凤,丰国炳.用模糊数学建立禹粮石的优选模型.中国药学杂志,1995,30(2):72—75
- 5 李时珍.本草纲目.北京:人民卫生出版社,1982,589.
- 6 李勣、苏敬等.新修本草.日本森氏旧藏影印.(上海古籍出版社据后书抄阁藏)1981,257
- 7 中华人民共和国卫生部药典委员会,中华人民共和国药典(一部附录)、1990,44.

收稿日期:1994—12—04

# Fuzzy Identification on the Yuliangshi

Zhu Yu-feng, Fen Guo-bin

(The Hospital of Traditional Chinese Medicine of Jiangsu Province, Nanjing, 210029)

**Abstract** In this paper, we classified the Chinese drug Yuliangshi qualitatively with fuzzy sets. Results showed that the method is scientific and can be used in uquality control for other drugs.

**Key words** Yuliangshi, fuzzy sets

(on page 2)