

五味子优良品种优选的模式识别方法

于晓礼^{a,b} 张 静^{a,b} 胡秀丽^b 宋凤瑞^{a*} 刘志强^a

(^a中国科学院长春应用化学研究所长春质谱中心 长春 130022; ^b吉林大学药学院 长春 130021)

摘 要 通过超高效液相色谱法,对不同生长特征的五味子样品中5种主要的木脂素成分:五味子醇甲、五味子醇乙、五味子酯甲、五味子甲素和五味子乙素进行测定,同时考察其抗氧化活性。对所得到的5种木脂素成分的含量及抗氧化数据进行聚类分析和主成分分析,并且通过逐步判别分析建立判别函数,从而筛选五味子优良品种。主成分分析和聚类结果基本一致,均将样品分为3大类,逐步判别分析的正确率高达90%。

关键词 五味子,超高效液相色谱,木脂素,模式识别

中图分类号:O657.7

文献标识码:A

文章编号:1000-0518(2013)06-0723-07

DOI:10.3724/SP.J.1095.2013.20357

五味子 *Schisandra*, 习惯称“北五味子”^[1]。主要分布于东北、华北等地。其入药部位为果实,因其果实具甘、酸、辛、苦和咸五味而得名。由于五味子具有多种有效成分和多项药理作用^[2-3],因而具有广阔的医药市场前景。而且除药用外,五味子饮料、食品的问世^[4],更加大了五味子资源的需求量。木脂素类成分是五味子的主要药用成分^[5-7],具有抗肿瘤、抗病毒、保肝和抗衰老等作用^[8-11]。中药材的质量与其所含的化学成分密切相关。因此,通过化学成分信息进行模式识别可以客观的反应中药材的质量。化学模式识别主要分为无监督学习系统和有监督学习系统两类。无监督学习系统是指将模式划分到未知的类别中进行模式识别,其中常见的方法有系统聚类分析、主成分分析法等;有监督学习系统是运用一组已知其类别的样本进行学习,获得分类准则后,利用准则来判别未知模式所属的类别,常见的方法有逐步判别分析方法、人工神经网络法(ANN)和简单分类法(SMCA)等。

本文以五味子木脂素含量及抗氧化活性为指标,对来自吉林省通化地区的不同生长特征的北五味子样品进行分析,利用模式识别方法对实验数据进行处理,从中筛选出木脂素含量及抗氧化活性均较高的优良品种,为五味子药材的优选优育奠定了基础。模式识别方法不仅可以用于五味子优良品种的优选,同样可以用于五味子药材的质量控制及评价^[12]。

1 实验部分

1.1 仪器、材料和试剂

ACQUITY UPLC H-class 型超高效液相色谱仪(美国 Waters 公司);Pro 型多功能酶标仪(瑞士 Tecan GENios 公司);EQ-500DE 型医用数控超声波清洗器(昆山市超声仪器有限公司);BP211D 型天平(德国赛多利斯 $d=0.01\text{ mg}$)。

木脂素对照品:五味子醇甲(schisandrin)、五味子醇乙(schisandrol B)、五味子酯甲(schisantherin A)、五味子甲素(deoxyschizandrin)和五味子乙素(schisandrin B)均购自中国药品生物制品检定所(北京);1-二苯基-2-苦基肼基(DPPH)、三吡啶三嗪(2,4,6-tripyridyl-s-triazine, TPTZ)、抗坏血酸(L-ascorbic acid, Vc)均购于美国 Sigma 公司;甲醇为色谱纯(美国 Fisher 公司),水为超纯水($18.2\text{ M}\Omega\cdot\text{cm}$),其它试剂和试药均为分析纯。五味子药材由中国农业科学院特产研究所艾军研究员提供。

1.2 对照品的制备

取各对照品约 5.00 mg,精密称定,置于 5 mL 容量瓶中,用少量甲醇加热溶解,冷却,定容制得标准

储备液,备用。

1.3 供试品的制备

取北五味子药材粉末(过 250 μm 筛)约 125.00 mg,精密称定,置锥形瓶中,加入甲醇 10 mL,浸泡 30 min,超声提取 30 min,冷却至室温,过滤,将滤液至 10 mL 容量瓶中,定容至刻度。摇匀,0.45 μm 滤膜过滤,待测。

1.4 五味子中木脂素成分含量测定

色谱条件:ACQUITY UPLC BEH C18(2.1 mm \times 50 mm,1.7 μm);柱温:35 $^{\circ}\text{C}$;流动相:(A) H_2O ; (B) CH_3OH 。流动相梯度组成:流动相 B,0 ~ 1 min,30%;1 ~ 2 min,30% ~ 60%;2 ~ 9 min 60% ~ 80%; 9 ~ 12 min 80% ~ 100%。流速 0.3 mL/min;检测波长:254 nm;样品进样量 1 μL 。

1.5 抗氧化活性测定

1.5.1 对·DPPH 自由基的清除作用 配制浓度为 6.5×10^{-5} mol/L DPPH-乙醇溶液,将每种供试品溶液分别取 40 μL 加样在 96 孔板中,再在每个孔中平行加入 200 μL DPPH 溶液。同时设立对照组(等量甲醇代替供试液),同空白组(40 μL 供试液加入 200 μL 乙醇)。轻轻振荡,于 37 $^{\circ}\text{C}$ 在酶标仪中避光静置 30 min,在 515 nm 处测定吸光度。每个样品平行测定 3 次。则样品对·DPPH 的清除率表示为:

$$\text{清除率} = \frac{1 - (A_{\text{样品组}} - A_{\text{空白}})}{A_{\text{对照组}}} \times 100\% \quad (1)$$

式中, $A_{\text{样品组}}$ 为加入测定样品反应后的吸光度, $A_{\text{对照组}}$ 为对照组未加药的吸光度, $A_{\text{空白}}$ 为空白组的吸光度。

1.5.2 铁离子还原/抗氧化力测定法(FRAP)测定五味子抗氧化活性 将醋酸钠缓冲液(300 mmol/L, pH=3.6)、10 mmol/L TPTZ(溶解在 40 mmol/L HCl 中)和 20 mmol/L FeCl_3 以体积比 10:1:1 比例混合。配置成 FRAP 试剂,FRAP 试剂一定要临用前新鲜配制。将 Vc 标准品和样品都用甲醇配制成一定浓度的溶液,取 5 μL Vc 标准品或样品溶液加入 96 孔板中,之后迅速加入 FRAP 试剂 150 μL 。测定 0 和 4 min 标准品和样品溶液在 593 nm 处的吸光度值,每个标准品或样品平行测定 3 个。

FRAP 测定值以 500 $\mu\text{mol/L}$ Vc 为标准来计算。计算公式如下:

$$\text{FRAP value} = \frac{\Delta A_{593 \text{ nm test sample}}(0 \sim 4 \text{ min})}{\Delta A_{593 \text{ nm standard}}(0 \sim 4 \text{ min})} \times 500 (\mu\text{mol/L}) \quad (2)$$

2 结果与讨论

2.1 五味子中木脂素含量的测定

2.1.1 标准曲线的绘制 5 种对照品及样品的超高效液相色谱图如图 1 所示。分别精密吸取稀释过的标准储备液 1、2、3、4、5 和 6 μL ,注入液相色谱仪测定,以相应组分的色谱峰的峰面积(y)对其含量(x),

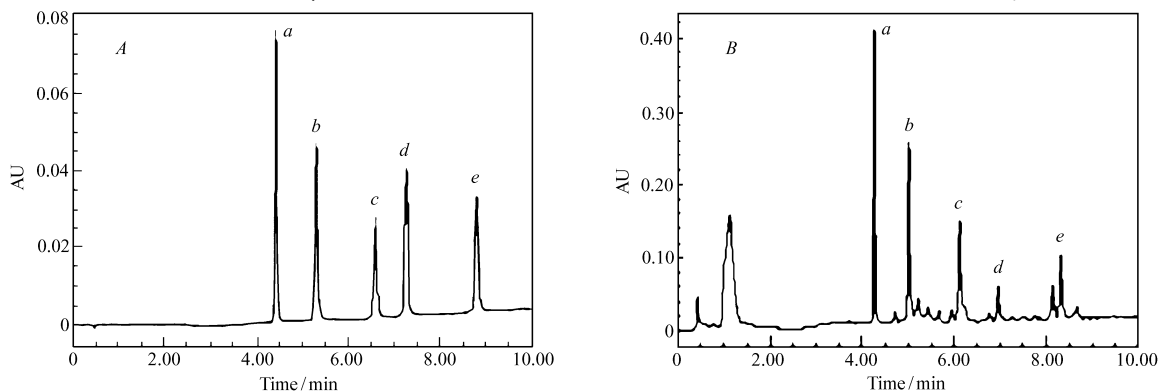


图1 五味子中木脂素含量测定的 UPLC-UV 图

Fig. 1 UPLC-UV chromatogram of lignans in Schisandra

A. standard; B. sample. a. schisandrin; b. schisandrol B; c. schisantherin A; d. deoxyschizandrin; e. schisandrin B

μg)绘制标准曲线,计算回归方程。结果见表1。

表1 5种木脂素对照品的线性方程、线性范围及相关系数
Table 1 Five lignans reference standard equations

Name	Linear equations	LOQ/μg	Linear range/μg	Correlation coefficient(<i>r</i>)
schisandrin	$y = 2.27 \times 10^7 x - 14915$	0.011	0.022 ~ 0.13	0.999 9
schisandrol B	$y = 1.42 \times 10^7 x - 7437.4$	0.010	0.020 ~ 0.10	0.999 7
schisantherin A	$y = 1.41 \times 10^7 x + 1334.3$	0.020	0.020 ~ 0.10	0.999 7
deoxyschizandrin	$y = 2.32 \times 10^7 x - 8253.1$	0.006	0.012 ~ 0.11	0.999 9
schisandrin B	$y = 1.78 \times 10^7 x - 11190.4$	0.010	0.020 ~ 0.10	0.999 9

结果表明,对照品峰面积与质量呈良好的线性关系,符合外标法定量测定的要求。

2.1.2 五味子样品中木脂素含量及抗氧化测定结果 本文采用超高效液相色谱法测定了30个不同生长特征的五味子中5种木脂素含量,并对其方法学进行考察,同时采用DPPH法及FRAP法对样品抗氧化活性进行研究。其中木脂素含量及抗氧化测定结果如表2所示。

表2 五味子样品木脂素含量及抗氧化活性测定
Table 2 Lignans of samples and antioxidant activity data

Samples	Schisandrin/%	Schisandrol B/%	Schisantherin A/%	Deoxyschizandrin/%	Schisandrin B/%	DPPH/%	FRAP
Y1	0.54	0.41	0.12	0.08	0.20	58.93	204.54
Y2	0.41	0.56	0.44	0.09	0.19	57.75	230.27
Y3	0.29	0.64	0.30	0.05	0.29	55.66	253.15
Y4	0.31	0.36	0.19	0.04	0.15	51.53	152.48
Y5	0.56	0.40	0.13	0.09	0.30	51.38	169.29
Y6	0.70	0.38	0.37	0.07	0.19	49.73	273.57
Y7	0.47	0.58	0.17	0.07	0.39	48.18	262.58
Y8	0.42	0.42	0.18	0.07	0.17	48.13	212.23
Y9	0.28	0.25	0.15	0.04	0.17	47.14	166.78
Y10	0.34	0.29	0.01	0.04	0.31	47.10	223.10
Y11	0.29	0.39	0.13	0.09	0.22	46.97	251.69
Y12	0.45	0.45	0.19	0.05	0.42	46.90	236.40
Y13	0.61	0.44	0.34	0.14	0.18	45.92	148.04
Y14	0.35	0.51	0.21	0.06	0.16	45.60	230.51
Y15	0.27	0.35	0.04	0.04	0.13	44.54	149.47
Y16	0.62	0.69	0.22	0.16	0.42	43.81	281.21
Y17	0.66	0.39	0.32	0.08	0.33	42.81	239.46
Y18	0.34	0.25	0.07	0.07	0.11	42.04	184.81
Y19	0.43	0.28	0.16	0.12	0.31	41.14	189.60
Y20	0.35	0.28	0.17	0.05	0.15	40.91	172.93
Y21	0.45	0.23	0.32	0.23	0.22	40.04	239.96
Y22	0.80	0.43	0.44	0.09	0.55	38.48	296.53
Y23	0.80	0.41	0.42	0.14	0.26	38.48	268.01
Y24	0.35	0.20	0.13	0.09	0.25	37.27	159.87
Y25	0.31	0.23	0.09	0.09	0.41	36.32	175.23
Y26	0.43	0.35	0.17	0.05	0.55	34.72	141.77
Y27	0.37	0.27	0.11	0.09	0.22	34.68	177.64
Y28	0.59	0.44	0.36	0.09	0.17	34.27	286.85
Y29	0.18	0.20	0.12	0.04	0.12	33.30	81.04
Y30	0.76	0.30	0.31	0.09	0.49	32.62	145.92

由表2得到样品的5种木脂素含量与抗氧化值,取代表性的样品根据五味子醇甲含量及FRAP值作图(见图2)。由图2可看出,样品的五味子醇甲含量低,其FRAP值也较低,FRAP法主要是考察样品

的总还原能力,其值越高说明抗氧化活性越强。其抗氧化活性与五味子醇甲含量有一定相关性,五味子醇甲的含量高,其抗氧化活性也较强。

2.2 五味子化学模式识别

模式识别是一门用机器代替人对模式即所研究的事物进行分析、描述、判断和识别的技术。识别出某个样本与哪一种样本相近或相似是它的中心任务,也就是说在一定的度量和观测的基础上把待识别的模式划分到各自模式类中。

本文对五味子含量及抗氧化数据进行主成分分析和系统聚类分析,再利用逐步判别分析法进行验证,从而建立起通过 UPLC 手段,对五味子质量进行评价和质量控制的方法。

2.2.1 主成分分析 主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)通过线性投影方式对多变量数据进行统计处理的一种判别方法,是在不明显减少有用信息的前提下,寻找一种最佳方法,浓缩数据信息,简化数据矩阵,降低空间维数,寻找几个由原始变量线性组合的主要成分,从而揭示数据基本信息和结构特征的模式分类方法^[13]。

以五味子中 5 种木脂素相对含量及抗氧化测定值为原始数据,算出所有的主成分及相应的本征值,由其结果可见,主成分 1 的特征根为 3.391,解释了总变异的 55.60%;主成分 2 特征根为 1.576,解释了总变异的 25.84%。前 2 个特征根的累积贡献率达到 81.44%,也就是解释了原始数据信息的 81.44%,故可以认为,提取前 2 个主成分,就能代表原始数据。PCA 载荷图可以反映主成分主要由哪些指标变量来解释(见图 3)。

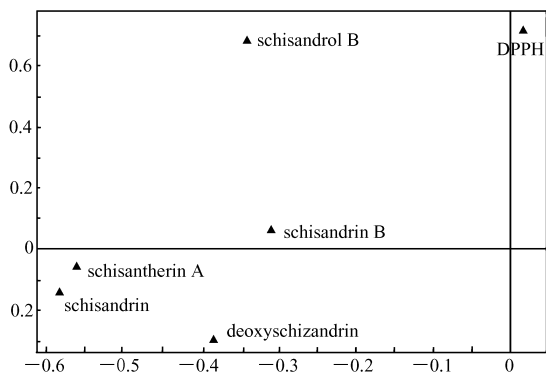


图 3 五味子样品 PCA 载荷图

Fig. 3 PCA load diagram of samples

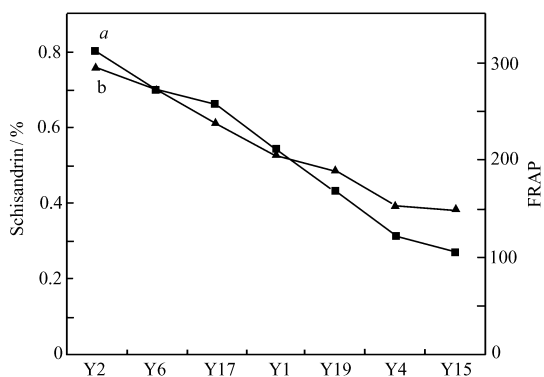


图 2 五味子醇甲含量及 FRAP 值

Fig. 2 Schisandrin contents(a) and FRAP(b) values

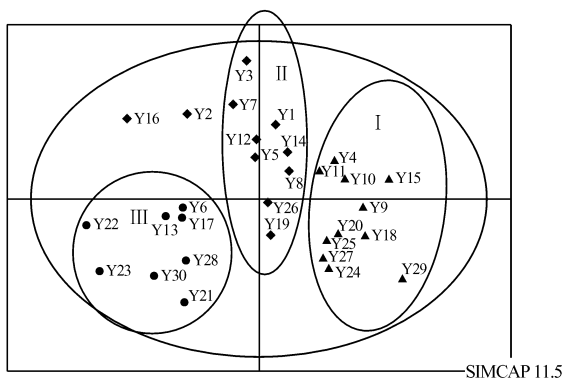


图 4 五味子样品 PCA 得分图

Fig. 4 PCA score plot of samples

由图 3 可知,主成分 1 主要由五味子醇甲及五味子酯甲这 2 个变量来解释,这 2 个变量与五味子木脂素含量相关,其中五味子醇甲是北五味子木脂素的代表成分,药典规定不得低于 0.40%,而五味子酯甲是南五味子木脂素的代表成分,药典规定不得低于 0.12%,故选这 2 个变量解释主成分 1 比较合理;主成分 2 主要由抗氧化活性指标 DPPH 值来解释,这一主成分反映了五味子药材抗氧化的药理作用也较为合理。具体分类结果见图 4。

图 4 为所有样品主成分分析中第一主成分和第二主成分得分的散点图。结果显示,在 0.05 的显著性水平下区间内没有特异值。样品明显分为三大类,其中样品 Y4、Y9、Y10、Y11、Y15、Y18、Y20、Y24、Y25、Y27 和 Y29 聚为一类,该类样品的五味子木脂素成分含量低于平均水平,且抗氧化活性较差;第二类样品为 Y1、Y3、Y5、Y7、Y8、Y12、Y14、Y19 和 Y26,该类样品醇甲含量均在 0.4% 左右,符合药典对五味子醇甲含量不得低于 0.4% 要求,属于正常样品;而样品 Y6(紫黑)、Y13(紫红大粒)、Y17(深红)、

Y21、Y22(紫黑)、Y23(黄色)、Y28(黄色)和Y30(红色)为一类,该类样品五味子醇甲及五味子酯甲含量较高,且抗氧化活性较好,属于优良品种。

2.2.2 系统聚类分析 作为一种属于无监督学习系统的化学模式识别方法,“物以类聚”是聚类分析的原则。其核心是根据相似程度的大小逐步将样品进行分类,它通过从特征空间中找到某个客观存在的点或者类别,进行样品的归类。

以五味子中5种木脂素相对含量及抗氧化测定值为原始数据,运用SPSS18.0软件进行聚类分析,类间距离采用Ward法^[14],而试样间的距离采用欧氏距离。聚类分析结果图见5。

由图5可见,在组间距离为10时,30个五味子样品基本上可以分为三大类:第一类包括:Y4、Y9、Y10、Y11、Y15、Y18、Y19、Y20、Y21、Y24、Y25、Y27和Y29,该类样品木脂素含量较低;第二类包括:Y1、Y2、Y3、Y5、Y7、Y8、Y12、Y14、Y16和Y26,该类样品五味子醇甲含量在0.4%左右,符合药典规定,属于正常品种;第三类包括:Y6(紫黑)、Y13(紫红大粒)、Y17(深红)、Y22(紫黑)、Y23(黄色)、Y28(黄色)和Y30(红色),该类样品木脂素含量较高,属于较优品种。同时,通过聚类分析可以清楚的知道哪些五味子样品的品质最相近,比如从图4的树状图可知,样品Y13与Y28十分接近,Y6与Y17相差无几,从中可以看到,五味子样品的五味子醇甲含量、五味子酯甲含量及DPPH测定值越接近其样品品质相似度越高。

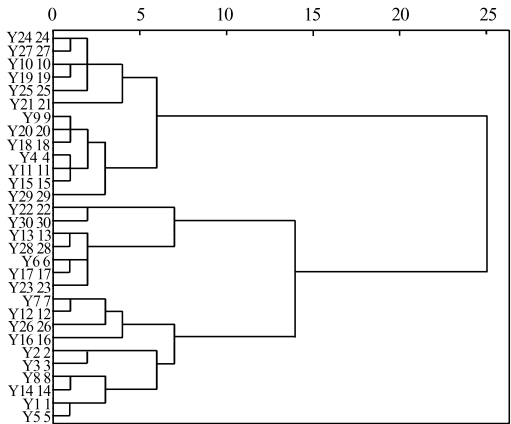


图5 五味子样品聚类分析树状图
Fig.5 Dendrogram of clustering analysis for samples

系统聚类分析与主成分分析结果基本一致,仅样品Y19及Y21结果不同,主要是由于这2个样品的五味子酯甲、五味子甲素及五味子乙素含量不同导致的。其中Y21样品的醇甲含量为0.45%,DPPH清除率为40.04%,木脂素含量及抗氧化活性均处于中等水平,故不能认为是优良品种。

2.2.3 逐步判别分析 本文将逐步判别分析法^[15]引入五味子样品分类的预测中,在保证判别准确率的情况下,选择判别能力显著的影响因子,建立稳定的判别函数,用最少的判别因子建立最可靠的判别函数^[16]。

利用SPSS软件的逐步判别法淘汰了不显著的五味子乙素含量及DPPH测定值,还剩下4个变量五味子醇甲、五味子醇乙、五味子酯甲及五味子甲素含量,得到3个典型判别函数:

$$Y(1) = 64.180x_{醇甲} + 48.633x_{醇乙} + 15.983x_{酯甲} - 48.751x_{甲素} - 17.524 \tag{3}$$

$$Y(2) = 102.037x_{醇甲} + 88.516x_{醇乙} + 27.895x_{酯甲} - 108.615x_{甲素} - 45.300 \tag{4}$$

$$Y(3) = 153.019x_{醇甲} + 68.780x_{醇乙} + 75.441x_{酯甲} - 179.258x_{甲素} - 73.502 \tag{5}$$

将每个观测点带入3个函数,就可以得到分别代表三类的3个值,哪个值最大,该点就属于相应的那一类。

对30不同品种五味子进行逐步判别分析,结果见表3。

表3 样品的判别结果
Table 3 Discrimination results of the samples

Sample	Clustering result	Judgment result	Sample	Clustering result	Judgment result
Y1	2	2	Y16	2	2
Y2	2	2	Y17	3	3
Y3	2	2	Y18	1	1
Y4	1	1	Y19	1	1
Y5	2	2	Y20	1	1
Y6	3	3	Y21	1	2*

continued from previous page

Sample	Clustering result	Judgment result	Sample	Clustering result	Judgment result
Y7	2	2	Y22	3	3
Y8	2	2	Y23	3	3
Y9	1	1	Y24	1	1
Y10	1	1	Y25	1	1
Y11	1	1	Y26	2	1 *
Y12	2	2	Y27	1	1
Y13	3	3	Y28	3	3
Y14	2	1 *	Y29	1	1
Y15	1	1	Y30	3	3

* Indicate inconsistent results.

从表 3 可以看出,有 3 个判别结果与聚类结果不一致,分别为 Y14、Y21 和 Y26,其中 Y14 及 Y26 均处于第一类与第二类样品的交界处,这可能是逐步判别结果不一致的原因之一。判别结果与聚类分析结果符合率高达 90%,证明本研究建立的模型具有良好的可行性。

3 结 论

采用超高效液相色谱法测定五味子中木脂素含量,并对其抗氧化活性进行考察,对所得数据进行主成分分析及系统聚类分析,2 种分类结果大致相同,最后筛选出五味子优良品种为:Y6(紫黑)、Y13(紫红大粒)、Y17(深红)、Y22(紫黑)、Y23(黄色)、Y28(黄色)和 Y30(红色)。逐步判别分析筛选出对分类起重要作用的指标,从而建立判别函数,据此作为五味子样品分类的判别式,可以对五味子果实优劣进行初步判断。该方法简单、快速,且准确率较高,为五味子优良品种的选育提供较好的参考依据。

参 考 文 献

[1] China Pharmacopoeia Committee. Pharmacopoeia of the People's Republic of China: I [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2010: 61 (in Chinese).
国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 一部[M]. 北京: 化学工业出版社, 2010: 61.

[2] Agnieszka Szopa, Halina Ekiert. *In Vitro* Cultures of *Schisandra Chinensis* (Turcz.) Baill. (Chinese Magnolia Vine): A Potential Biotechnological Rich Source of Therapeutically Important Phenolic Acids[J]. *Appl Biochem Biotechnol*, 2012, **166**(8): 1941-1948.

[3] YING Guoqing, YU Zhiming, SHAN Jianfeng, et al. Progress in the Effective Components of *Schisandra Chinensis*[J]. *Henan Trad Chinese Med*, 2005, **25**(6): 84-87 (in Chinese).
应国清, 俞志明, 单剑峰, 等. 北五味子有效组分的研究进展[J]. 河南中医, 2005, **25**(6): 84-87.

[4] ZHU Xinpeng. *Schisandra Chinensis* Beverage Production Process[J]. *Spec Econ Anim Plant*, 2001, **4**(3): 40 (in Chinese).
朱新鹏. 五味子饮料的生产工艺[J]. 特种经济动植物, 2001, **4**(3): 40.

[5] LI Xiaoguang, GAO Qin, WENG Wen, et al. The *Schisandra* Effective Parts of Its Pharmacological Effects of Progress[J]. *Chinese Herb Med*, 2005, **28**(2): 156-159 (in Chinese).
李晓光, 高勤, 翁文, 等. 五味子有效部位及其药理作用研究进展[J]. 中药材, 2005, **28**(2): 156-159.

[6] Chen N, Chun P Y, Ko K M. Schisandrin B Enhances Cerebral Mitochondrial Antioxidant Status and Structural Integrity, and Protects Against Cerebral Ischemia/Reperfusion Injury in Rats[J]. *Biol Pharm Bull*, 2008, **31**(7): 1387-1391.

[7] Lee I S, Jung K Y, Oh S R, et al. Platelet-activating Factor Antagonistic Activity and ¹³C NMR Assignment of Pregomisin and Chamigrenal from *Schisandra Chinensis*[J]. *Arch Pharm Res*, 1997, **20**(6): 633-636.

[8] Song J X, Lin X, Wong R N, et al. Protective Effects of Dibenzocyclooctadiene Lignans from *Schisandra Chinensis* Against Beta-amyloid and Homocysteine Neurotoxicity in PC12 Cells[J]. *Phytother Res*, 2011, **25**(3): 435-443.

[9] Nishida H, Tatewaki N, Nakajima Y, et al. Inhibition of ATR Protein Kinase Activity by *Schisandrin B* in DNA Damage Response[J]. *Nucl Acids Res*, 2009, **37**(17): 5678-5689.

[10] Devanand P F, Ramesh K S. Comparison of Techniques for the Extraction of the Anti-cancer Drug Camptothecin from *Nothapodytes Foetida*[J]. *J Chromatogr A*, 2005, **1063**: 9-13.

[11] Lou Z Y, Zhang H, Gong C G, et al. Analysis of Lignans in *Schisandra Chinensis* and Rat Plasma by High-performance Liquid Chromatography Diode-array Detection, Time-of-flight Mass Spectrometry and Quadrupole Ion Trap Mass

Spectrometry[J]. *Rapid Commun Mass Spectrom*,2009,**23**:831-842.

[12] LI Xiankuan,ZHAO Yue,HAN Rongchun,*et al.* Quality Evaluation of the Cultivated Fructus *Schisandrae* in Liaoning Province[J]. *Chinese Trad Pat Med*,2011,**33**(1):82-86(in Chinese).

李先宽,赵玥,韩荣春,等. 辽宁省栽培五味子品质评价[J]. *中成药*,2011,**33**(1):82-86.

[13] YU Hedan. The Application of Multivariate Statistical Analysis in the Evaluation of Quality of Traditional Chinese Medicine [J]. *Math Med*,2006,**19**(1):885-887(in Chinese).

于鹤丹. 多元统计分析方法在中药质量评价中的应用[J]. *数理医药学杂志*,2006,**19**(1):885-887.

[14] Ward J H,Hook M E. Application of a Hierarchical Grouping Procedure to a Problem of Grouping Profiles [J]. *Educ Psychol Meas*,1993,(23):69-81.

[15] XU Airen,HU Xiaowei. Identification of Fructus *Schisandrae Chinensis* and Fructus *Schisandrae Sphenantherae* by RP-HPLC and Its Cluster Analysis and Discriminant Analysis[J]. *Chinese J Mod Appl Pharm*,2009,**26**(1):29-35(in Chinese).

徐爱仁,胡晓伟. 五味子与南五味子的化学模式识别与计算机辨识研究[J]. *中国现代应用药学杂志*,2009,**26**(1):29-35.

[16] XU Lu,SHAO Xueguang. Chemometrics Methods[M]. Beijing:Science Press,2006(in Chinese).

许禄,邵学广. 化学计量学方法[M]. 北京:科学出版社,2006.

Studies on Screening the Superior Kinds of *Schisandra* Fruits by Using Pattern Recognition Method

YU Xiaoli^{a,b}, ZHANG Jing^{a,b}, HU Xiuli^b, SONG Fengrui^{a*}, LIU Zhiqiang^a
(^a*Changchun Center of Mass Spectrometry, Changchun Institute of Applied Chemistry,*
Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022, China;
^b*School of Pharmacy, Jilin University, Changchun 130021, China*)

Abstract Ultra performance liquid chromatography(UPLC) was used to determine the content of lignans of *Schisandra* fruits with different growth characteristics. The antioxidant activity of these samples was also studied. In order to screen the superior kinds of these samples, principal component analysis, cluster analysis and stepwise discrimination analysis were used to analyze the above data. Principal component analysis and cluster analysis results divided the origin samples into three categories. The correct rate for screening the superior kinds of *Schisandra* fruits *via* stepwise discrimination analysis is 90%.

Keywords *Schisandra* fruits, ultra performance liquid chromatography, lignans, pattern recognition