

基于中医传承辅助系统的口疮外用方剂用药规律分析

蔡琳¹, 唐仕欢², 杨洪军^{2*}

(1. 首都医科大学中医药学院, 北京 100069; 2. 中国中医科学院中药研究所, 北京 100700)

[摘要] 目的:应用中医传承辅助系统软件分析治疗口疮外用方剂的组方规律。方法:收集中国中医药数据库检索系统中主治口疮的外用方剂,录入中医传承辅助系统,采用软件集成的数据挖掘方法,分析治疗口疮的外用方剂的组方规律。结果:对筛选出的213首口疮外用方剂进行分析,确定方剂中药物出现的频次,演化得到核心组合27个、新处方7个。结论:中医传承辅助系统软件能很好的应用于方剂用药规律的分析。

[关键词] 口疮; 中医传承辅助系统; 外用; 组方规律

[中图分类号] R287.6 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2012)14-0010-03

Analysis on Composition Principles of External Prescriptions for Canker Sores by Using Traditional Chinese Medicine Inheritance System

CAI Lin¹, TANG Shi-huan², YANG Hong-jun^{2*}

(1. College of Traditional Chinese Medicine, Capital Medical University, Beijing 100069, China;
2. Institute of Chinese Materia Medica, China Academy of Chinese Material Science, Beijing 100700, China)

[Abstract] **Objective:** Using Traditional Chinese Medicine Inheritance Support System (TCMISS) to analyze the composing principles of the external prescriptions for canker sores. **Method:** The external prescriptions used for canker sores in the system of < Chinese traditional medicine database retrieval system > were collected. Then entering into the TCMISS, by using the software integration of the data mining, composing principles of external prescriptions for canker sores were analyzed. **Result:** Based on the analysis of 213 cases of prescriptions, the frequency of each herb included in the database is computed, twenty-seven core combinations and 7 new prescriptions are mined from the database. **Conclusion:** TCM inheritance system is a helpful tool to analyze the composing principles of prescriptions.

[Key words] canker sores; traditional Chinese medicine inheritance support system; external use; composing principles of prescriptions

口疮为临床常见病、多发病,以口唇、齿龈、两颊、上腭等黏膜多处出现孤立的、圆形或椭圆形的浅表性溃疡,局部灼热疼痛为主要特征,常连续发作而无间歇期,妨碍饮食及说话。由于病因错综复杂,成为临床顽症。《素问·气交变大论》中:“岁金不及,

炎火上行……民病口疮,甚则心痛”即是古代医家对口疮的最早描述^[1-2]。中医治疗口疮具有丰富的经验,其中外用方剂的应用是该疾病的用药特色。为总结中药外用治疗口疮的用药规律,进一步指导临床应用,为研发新药提供参考资料。本文基于中国中医科学院中药研究所新药设计课题组开发的中医传承辅助系统(V1.1)^[3],对中国中医药数据库检索系统的方剂数据库收录的外治口疮方剂,进行系统分析。

1 资料与方法

1.1 处方来源 中国中医药数据库检索系统(中国中医科学院中医药信息研究所开发)中收录的主

[收稿日期] 20120314(238)

[基金项目] 中医药行业科研专项(200907001-5)

[第一作者] 蔡琳,本科, Tel: 010-84035184, E-mail: cailin0111@sina.com

[通讯作者] * 杨洪军,博士,研究员,从事中药新药设计的方法与技术的研究, Tel: 010-84035184, E-mail: hongjun0420@vip.sina.com

治病症中含“口疮”的外用方剂。

1.2 处方筛选 在中国中医药数据库检索系统中筛选“主治”中明确含有“口疮”的外用方剂,共筛选出方剂 213 首。

1.3 方剂的录入与核对 将上述筛选的方剂由专人录入中医传承辅助系统。考虑录入过程中可能出现的纰漏,在完成录入后,再由双人负责录入数据源的审核,以确保数据源的准确,而为数据挖掘结果的可靠性提供保障。

1.4 数据分析 通过“中医传承辅助系统”中“数据分析”模块中“方剂分析”功能,进行组方规律分析。利用系统“数据查询”功能,按中医疾病名称“口疮”提取出录入系统的方剂 213 首。然后点击相应功能按钮进行数据分析,包括:药物频次统计、组方分析、新方分析(包括聚类分析、提取组合、网络化展示等,挖掘方剂中的新组合和新处方)。

2 结果

2.1 用药频次 系统提取出 213 首治疗口疮的外用方剂,涉及药物 150 种,通过“频次统计”,得到治疗口疮的外用方剂中使用频率在 5 以上的药物 38 味,见表 1。

表 1 口疮外用方剂中频次 > 5 的药物

序号	药物	频次	序号	药物	频次	序号	药物	频次
1	黄柏	48	14	雄黄	13	27	乳香	8
2	冰片	37	15	轻粉	13	28	蒲黄	7
3	青黛	35	16	铜绿	12	29	黄芩	7
4	黄连	31	17	枯矾	12	30	寒水石	7
5	硼砂	25	18	升麻	12	31	僵蚕	6
6	麝香	25	19	胆矾	11	32	没药	6
7	甘草	24	20	人中白	11	33	大青叶	6
8	白矾	20	21	白芷	10	34	猪脂	5
9	铅丹	17	22	薄荷	10	35	玄明粉	5
10	蜂蜜	15	23	铅粉	10	36	煅石膏	5
11	五倍子	15	24	密陀僧	10	37	牛黄	5
12	芒硝	14	25	苦杏仁	9	38	细辛	5
13	朱砂	14	26	蟾酥	8			

2.2 基于关联规则分析的口疮外用方剂组方规律 应用关联规则挖掘方法,将支持度设置为“8”,得到常用药对 6 个,见表 2。药物之间关联的“网络化展示”见图 1。

表 2 口疮外用方剂中常用药对

序号	药对	频次	序号	药对	频次
1	青黛,黄柏	17	4	黄连,黄柏	11
2	冰片,青黛	12	5	冰片,硼砂	12
3	甘草,青黛	8	6	朱砂,硼砂	8

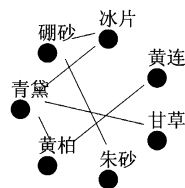


图 1 治疗口疮外用常用药物组合网络

2.3 基于复杂系统熵聚类的核心组合分析 以改进的互信息法的分析结果为基础,按照相关系数与惩罚系数的约束,基于复杂系统熵聚类,演化出 3 ~ 4 味药的核心组合,共计 27 个,见表 3。

表 3 基于复杂系统熵聚类的治疗口疮外用的核心组合

序号	核心组合	序号	核心组合
1	蒲黄,玄明粉,石膏	15	铅丹,黄连,朱砂
2	蒲黄,芒硝,炙甘草	16	铅丹,蜂蜜,硼砂
3	五倍子,白芷,盐绿	17	白芷,铜绿,麝香
4	珍珠,玄明粉,槐白皮	18	蜂蜜,白矾,冰片
5	升麻,龙胆,蔷薇根	19	蜂蜜,硼砂,冰片
6	升麻,龙胆,槐白皮	20	白矾,铜绿,枯矾
7	苦杏仁,黄柏,铅粉	21	硼砂,冰片,朱砂
8	苦杏仁,轻粉,铅粉	22	硼砂,薄荷,朱砂
9	青黛,黄柏,铅丹	23	升麻,黄连,龙胆,大青叶
10	青黛,玄明粉,石膏	24	雄黄,乳香,轻粉,没药
11	青黛,铅丹,蜂蜜	25	铅丹,硼砂,朱砂,甘草
12	青黛,蜂蜜,冰片	26	硼砂,冰片,石膏,明矾
13	青黛,冰片,石膏	27	硼砂,薄荷,石膏,明矾
14	牛黄,寒水石,僵蚕		

2.4 基于无监督的熵层次聚类的新处方分析 在以上核心组合提取的基础上,通过软件集成的熵层次聚类方法,挖掘得到可聚类成新处方的组合,这些组合中对应的两个组合可以聚合成治疗口疮的外用新方,其中,用于新方聚类的组合有 7 对,见表 4。7 对核心组合聚合成 7 个新方,见表 5,新方药物之间关联的“网络化展示”见图 2。

3 分析与讨论

中医认为,口疮的发生主要有以下几个病因:①饮食所伤,食积胃热;②外感邪热,上乘蒸灼;③阴阳俱虚,虚火上炎^[4]。“火热”是口疮共同的病理表现。通过对中国中医药数据库检索系统的方剂数据库中口疮外用方剂的分析发现,常用药物有黄柏、冰片、青黛、黄连、硼砂、麝香、甘草、白矾等,主要以清热敛疮止痛为主。如黄柏,有清热燥湿解毒之功,《神农本草经》载:“味苦寒。主治五脏肠胃中结气

表 4 用于新方聚类的药物组合

序号	药物组合 1	药物组合 2
1	蒲黄, 玄明粉, 石膏	蒲黄, 芒硝, 炙甘草
2	苦杏仁, 黄柏, 铅粉	苦杏仁, 轻粉, 铅粉
3	青黛, 铅丹, 蜂蜜	青黛, 蜂蜜, 冰片
4	青黛, 冰片, 石膏	硼砂, 冰片, 石膏, 明矾
5	铅丹, 黄连, 朱砂	升麻, 黄连, 龙胆, 大青叶
6	白芷, 铜绿, 麝香	白矾, 铜绿, 枯矾
7	硼砂, 薄荷, 朱砂	铅丹, 硼砂, 朱砂, 甘草

表 5 基于熵层次聚类的治疗口疮的外用新方

序号	新方
1	蒲黄, 玄明粉, 石膏, 芒硝, 炙甘草
2	苦杏仁, 黄柏, 铅粉, 轻粉
3	青黛, 铅丹, 蜂蜜, 冰片
4	青黛, 冰片, 石膏, 硼砂, 明矾
5	铅丹, 黄连, 朱砂, 升麻, 龙胆, 大青叶
6	白芷, 铜绿, 麝香, 白矾, 枯矾
7	硼砂, 薄荷, 朱砂, 铅丹, 甘草

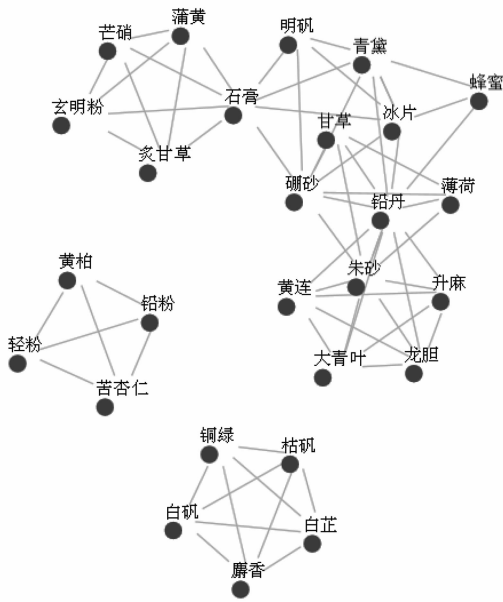


图 2 治疗口疮的外用新方药物网络

热, …… 阴阳蚀疮。”《名医别录》更明确指出: “主治惊气在皮间, …… 目热赤痛, 口疮。”《药类法象》更有: “治口疮如神”的记载: 由此可见, 黄柏治疗口疮尤为适宜, 我们的分析也表明黄柏为治疗口疮外用药物中的最常用药物。

通过关联规则对收集的处方进行挖掘分析, 所收集的外用处方中常用的核心药对有青黛-黄柏、冰片-青黛, 甘草-青黛, 冰片-硼砂, 朱砂-硼砂等, 从这些核心药对可以看出, 基本是常用药物的配伍应用, 多具有清热泻火、解毒敛疮的功效。如青黛-黄柏,

青黛, 能清热凉血解毒, 为治疗疮毒的常用药物, 《开宝本草》记载: “味咸, 寒, 无毒。主解诸药毒, 小儿诸热, …… 热疮恶肿, 金疮下血, 蛇犬等毒。”《景岳全书》也指出: “解诸热毒虫毒, 金疮热疮, 或干掺, 或以水调敷。”与治疗口疮的黄柏同用, 两药配伍, 清热解毒疗疮的作用效果增强, 起到相须相使的作用。再如冰片-硼砂, 两药配伍, 正是常用外用制剂冰硼散的组成, 能清热解暑, 消肿止痛, 广泛用于热毒蕴结所致的咽喉疼痛, 牙龈肿痛, 口舌生疮等病证。

通过复杂系统熵聚类的方法分析得到治疗口疮外用方剂中的 3 味药物或以上的核心组合, 如较常用的冰片-硼砂-朱砂, 青黛-黄柏-铅丹等, 也有不常用的核心组合, 如珍珠-玄明粉-槐白皮。前期的研究表明, 应用熵层次聚类方法, 可以进一步挖掘得到药物组成不同于所收集处方的新方^[5-8]。本研究根据收集得到的 213 首方剂的数据信息, 应用中医传承辅助系统软件集成的熵层次聚类方法, 进一步挖掘得到新方 7 个(表 5)。7 个新方多数是由频次较高的药物组成, 如黄柏、青黛、冰片等, 具有清热敛疮止痛的功效, 符合临床实际, 将为临床应用和新药研发等提供参考。

[参考文献]

[1] 梁媛琦. 中医药疗法治疗口疮[J]. 医学信息, 2010, 23(10): 3680.
 [2] 王立新, 谢泽出, 王娟. 口疮的临床辨治体会[J]. 河南中医, 2011, 31(10): 1138.
 [3] 李健, 卢朋, 唐仕欢, 等. 基于中医传承辅助系统的治疗肺痈方剂组方规律分析[J]. 中国实验方剂学杂志, 2012, 24(2): 254.
 [4] 马登云. 中医辨证治疗口疮[J]. 中外健康文摘, 2011, 8(12): 395.
 [5] 唐仕欢, 陈建新, 杨洪军, 等. 基于复杂系统熵聚类方法的中药新药处方发现研究思路[J]. 世界科学技术——中医药现代化, 2009, 11(2): 225.
 [6] 杨洪军, 雷燕, 唐仕欢, 等. 发现-辨识-优化——中药新药设计的核心与关键[J]. 世界科学技术——中医药现代化, 2011, 13(1): 154.
 [7] TANG Shi-huan, CHEN Jian-xin, LI Geng, et al. Research on component law of Chinese patent medicine for anti-influenza and development of new recipes for anti-influenza by unsupervised data mining methods[J]. J Traditional Chinese Medicine, 2010, 30(4): 288.
 [8] 唐仕欢, 陈建新, 杨洪军, 等. 基于复杂系统熵方法的抗肺痈方剂组方规律研究[J]. 中国中药杂志, 2010, 35(24): 3368.

[责任编辑 何伟]