

·学术探讨·

# 基于中医传承辅助系统的治疗肺痈方剂组方规律分析

李健<sup>1</sup>, 卢朋<sup>1,2</sup>, 唐仕欢<sup>1</sup>, 申丹<sup>1</sup>, 陈建新<sup>3</sup>, 杨洪军<sup>1\*</sup>

(1. 中国中医科学院中药研究所, 北京 100700; 2. 中国科学院自动化研究所, 北京 100190;  
3. 北京中医药大学 100029)

**[摘要]** 基于中医传承辅助系统软件, 挖掘《中医方剂大辞典》中收录的治疗肺痈方剂组方规律。收集《中医方剂大辞典》中主治肺痈的方剂, 录入中医传承辅助系统, 采用软件集成的改进互信息法、复杂系统熵聚类、无监督的熵层次聚类 etc 无监督数据挖掘方法, 分析肺痈方剂的组方规律。结果对筛选出的 132 个肺痈处方的分析, 确定处方中药物出现的频次, 演化得到核心组合 46 个、新处方 8 个。表明中医传承辅助系统可实现对方剂数据录入、管理、查询和分析, 是一个有价值的中医药研究辅助工具。

**[关键词]** 中医方剂大辞典肺痈; 中医传承辅助系统; 组方规律

**[中图分类号]** R287 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1005-9903(2012)02-0254-04

## Analysis on Composition Principles of Prescriptions for Lung Abscess by Using Traditional Chinese Medicine Inheritance System

LI Jian<sup>1</sup>, LU Peng<sup>1,2</sup>, TANG Shi-huan<sup>1</sup>, SHEN Dan<sup>1</sup>, CHEN Jian-xin<sup>3</sup>, YANG Hong-jun<sup>1\*</sup>

(1. Institute of Chinese Materia Medica, Academy of Chinese Medical Sciences, Beijing 100700 China;  
2. Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100290 China;  
3. Beijing University of Traditional Chinese Medicine (TCM), Beijing 100029 China)

**[Abstract]** **Objective:** To analyze the composing principles of the prescriptions for lung abscess collected in the book of 'The Prescription of Traditional Chinese Medicine Dictionary' using TCM inheritance system. **Method:** The prescriptions used for lung abscess in the 'book of The Prescription of Traditional Chinese Medicine Dictionary' were collected, the composing principles were analyzed using revised mutual information, complex system entropy cluster and unsupervised hierarchical clustering in the TCM inheritance system after data entry. **Result:** Based on the analysis on 132 cases of prescriptions, the frequency of each herb included in the database was computed, 46 core combinations and 8 new prescriptions were mined from the database. **Conclusion:** TCM inheritance system can be used for entry, administration, search and analysis of the prescriptions and is a helpful tool for the research of traditional Chinese medicine.

**[Key words]** The Prescription of Traditional Chinese Medicine Dictionary; lung abscess; TCM inheritance system; composition principle

方剂是中医临床治疗经验的有效载体, 通过古代方剂的用药规律分析, 对中医药学术继承与创新具有重要意义。本课题组既往采用改进的互信息法<sup>[1]</sup>、复杂系统熵聚类<sup>[2-3]</sup>、

无监督的熵层次聚类<sup>[4]</sup>等无监督数据挖掘方法, 应用于中药组方规律和处方发现。为了便于应用, 集成以上算法, 本课题组开发了中医传承辅助系统软件。该软件具体“数据

**[收稿日期]** 2011-12-13

**[基金项目]** 中医药行业科研专项(200907001-5); 中国中医科学院中药研究所基本科研业务费自主选题课题(ZZ20090205)

**[第一作者]** 李健, 硕士, 实习研究员, 从事本草文献研究, Tel: 010-64014411-2985, E-mail: li10jian@yahoo.com.cn

**[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研究, Tel: 010-84035184, E-mail: hongjun0420@vip.sina.com

录入-数据管理-数据查询-数据分析-网络可视化展示”等功能。该系统实现了临床病案信息、疾病信息、证候信息、中药信息、方剂信息等数据的管理、检索、分析等功能,可用于名老中医经验继承、临床医师个体经验总结、方剂组方规律分析及新药处方发现等领域。本文基于中医传承辅助系统对《中医方剂大辞典》中治疗肺病的方剂用药规律进行系统分析。

1 资料与方法

1.1 处方来源 《中医方剂大辞典》中收录的方剂。

1.2 处方筛选 肺病是肺叶生疮,形成脓疡的一种病证。临床以咳嗽,胸痛,发热,咳吐腥臭浊痰,甚则脓血相兼为主要特征。考虑中医其他疾病可能兼见肺病疾病的临床症状。因此,本次在上述来源方剂中筛选“主治”或“功用”项中明确记载“肺病”的方剂,并剔除其中组成重复的方剂。例如:《中医方剂大辞典》九册所载:“清肺饮【方源】《玉案》卷六。【组成】银柴胡 玄参 陈皮 桔梗各一钱 白茯苓 地骨皮 麦门冬 薏苡仁 人参 甘草 瓜蒌仁各八分。【主治】肺病。咳吐脓痰,胸膈胀痛,上气喘急,发热。”其中“主治”项中明确记载“肺病”,故收录。通过筛选,收集明确治疗肺病方剂共 132 首。

1.3 处方的录入与核对 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。

第一步在中医疾病查询项中查询“肺病”,将治疗肺病的方剂提取出来,如图 1 所示。



图 1 方剂分析数据查询界面

第二步药物频次统计,将方剂中每味药物的出现频次按照由大到小排序,并可以导出 Excel 文件。

第三步组方分析,首先进行聚类分析(核心算法包括改进的互信息法、复杂系统熵聚类),在聚类分析前,选择合适的相关系数和惩罚系数;然后点击提取组合按钮,发现新方(核心算法是无监督的熵层次聚类)并可以实现网络可视化展示,如图 2 所示。

2 结果

2.1 用药频次 《中医方剂大辞典》中治疗肺病的 132 个方剂包含的 226 种药物,进行“频次统计”,可得到治疗肺病药



图 2 组方分析界面

物频次从高到低的排序。使用频次在 5 以上的药物有 50 味,见表 1。

表 1 肺病方剂中出现频次 5 以上的药物

序号	药物	频次	序号	药物	频次	序号	药物	频次
1	甘草	68	18	枳壳	15	35	阿胶	6
2	桔梗	59	19	地骨皮	14	36	蒲公英	6
3	薏苡仁	39	20	茯苓	14	37	熟地黄	6
4	贝母	32	21	五味子	14	38	赤芍	6
5	苦杏仁	30	22	地黄	13	39	款冬花	6
6	麦冬	28	23	川贝母	13	40	黄连	6
7	桑白皮	26	24	甜葶苈	12	41	乌梅	6
8	黄芪	24	25	天冬	12	42	白芍	5
9	金银花	23	26	瓜蒌子	11	43	赤茯苓	5
10	当归	23	27	牡丹皮	9	44	大枣	5
11	人参	22	28	防己	9	45	石膏	5
12	生姜	21	29	紫菀	8	46	橘红	5
13	玄参	19	30	葶苈子	8	47	大黄	5
14	知母	18	31	白术	7	48	麝香	5
15	黄芩	18	32	升麻	7	49	紫苏叶	5
16	百合	17	33	天花粉	7	50	桃仁	5
17	陈皮	16	34	白及	7			

2.2 基于改进的互信息法的药物间关联度分析 根据本次治疗肺病方剂数量,结合经验判断和不同参数提取出数据的预读,选择相关系数(correlation)为 10,惩罚系数(penalty)为 5,进行聚类分析,得到治疗肺病方剂中 226 味中药之间两两之间的关联度,其中,将关联系数<sup>[1-3]</sup>在 0.02 以上 42 药对进行列表,见表 2。

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 3~5 味药的核心组合,共计 46 个,见表 3。

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,点击系统中“提取组合”按钮,通过无监督的熵层次聚类算法,有 16 个核心组合,见表 4;可以进一步聚类,得到 8 个新处方,见表 5。

表 2 基于改进的互信息法的药物间关联度分析

药对	关联系数	药对	关联系数	药对	关联系数
苦杏仁 石膏	0.029323	麝香 黄连	0.024809	当归 茯苓	0.021567
苦杏仁 生姜	0.029238	黄芪 地黄	0.023122	地骨皮 胡黄连	0.021289
当归 天冬	0.028648	苦杏仁 白果	0.022850	茯苓 胡黄连	0.021289
地骨皮 茯苓	0.028097	苦杏仁 竹茹	0.022850	当归 知母	0.021134
枳壳 紫苏叶	0.027606	苦杏仁 海浮石	0.022850	苦杏仁 款冬花	0.021088
白茅根 红花	0.027497	苦杏仁 诃子	0.022850	升麻 薏苡仁	0.021035
当归 川芎	0.027038	当归 白术	0.022772	麦冬 前胡	0.020843
当归 制附子	0.027038	枳壳 生姜	0.022239	麦冬 百部	0.020843
当归 白豆	0.027038	苦杏仁 瓜蒌子	0.021949	麦冬 天冬	0.020640
当归 白鸡	0.027038	葶苈子 细辛	0.021703	苦杏仁 黄芪	0.020426
麝香 千金子	0.025583	乌梅 阿胶	0.021613	金银花 桑白皮	0.020341
麝香 阿胶珠	0.025583	金银花 茯苓	0.021594	枳壳 藜藜	0.020229
麝香 山慈菇	0.025583	薏苡仁 桃仁	0.021569	枳壳 瓜蒌	0.020229
枳壳 贝母	0.025577	当归 五味子	0.021567	葶苈子 大枣	0.020029

表 3 基于复杂系统熵聚类的治疗肺病的核心组合

序号	核心组合			序号	核心组合		
1	麦冬	甜葶苈	玄参	24	甘草	金银花	玄参
2	麦冬	玄参	锦地罗	25	甘草	金银花	桔梗
3	麦冬	玄参	银柴胡	26	金银花	玄参	蒲公英
4	麦冬	知母	海浮石	27	金银花	知母	五味子
5	麦冬	知母	地骨皮	28	金银花	桔梗	鱼腥草
6	麦冬	地骨皮	银柴胡	29	金银花	五味子	茯苓
7	苦杏仁	枳壳	紫苏叶	30	苦杏仁	生姜	桑白皮 防己
8	苦杏仁	知母	石膏	31	黄芪	生姜	桑白皮 防己
9	苦杏仁	生姜	紫苏叶	32	薏苡仁	甘草	桔梗 地榆
10	紫菀	款冬花	百药煎	33	薏苡仁	百合	桑白皮 防己
11	贝母	甘草	桔梗	34	薏苡仁	百合	桑白皮 瓜蒌子
12	当归	黄芪	地黄	35	陈皮	人参	茯苓 银柴胡
13	当归	天冬	地黄	36	苦杏仁	枳壳	贝母 百合 防己
14	薏苡仁	桔梗	瓜蒌子	37	苦杏仁	枳壳	当归 百合 防己
15	五味子	人参	胡黄连	38	苦杏仁	当归	百合 桑白皮 防己
16	地骨皮	茯苓	银柴胡	49	枳壳	当归	黄芪 百合 防己
17	五味子	白术	胡黄连	40	枳壳	当归	黄芪 百合 瓜蒌子
18	五味子	人参	茯苓	41	枳壳	当归	地骨皮 百合 防己
19	天冬	地黄	阿胶珠	42	枳壳	当归	地骨皮 百合 瓜蒌子
20	陈皮	白术	银柴胡	43	当归	黄芪	百合 桑白皮 防己
21	生姜	陈皮	赤茯苓	44	当归	黄芪	百合 桑白皮 瓜蒌子
22	生姜	陈皮	茯苓	45	当归	地骨皮	百合 桑白皮 防己
23	天冬	地黄	茯苓	46	当归	地骨皮	百合 桑白皮 瓜蒌子

表 4 用于新方聚类的核心组合

序号	核心组合 1	核心组合 2
1	麦冬 玄参 锦地罗	麦冬 玄参 银柴胡
2	麦冬 知母 海浮石	麦冬 知母 地骨皮
3	苦杏仁 枳壳 紫苏叶	苦杏仁 枳壳 贝母 百合 防己
4	苦杏仁 生姜 紫苏叶	苦杏仁 生姜 桑白皮 防己
5	当归 黄芪 地黄	枳壳 当归 黄芪 百合 瓜蒌子
6	薏苡仁 桔梗 瓜蒌子	薏苡仁 甘草 桔梗 地榆
7	生姜 陈皮 赤茯苓	生姜 陈皮 茯苓
8	天冬 地黄 茯苓	天冬 地黄 阿胶珠

表 5 基于熵层次聚类的治疗肺病新处方

序号	候选新处方
1	麦冬,玄参,锦地罗,银柴胡
2	麦冬,知母,海浮石,地骨皮
3	苦杏仁,枳壳,紫苏叶,贝母,百合,防己
4	苦杏仁,生姜,紫苏叶,桑白皮,防己
5	当归,黄芪,地黄,枳壳,百合,瓜蒌子
6	薏苡仁,桔梗,瓜蒌子,甘草,地榆
7	生姜,陈皮,赤茯苓,茯苓
8	天冬,地黄,茯苓,阿胶珠

