

中药药性组合的配伍理论模型初探

孙婧, 张燕玲, 顾浩, 王耘*

(北京中医药大学 中药信息工程研究中心, 北京 100102)

[摘要] 药性是中药的特定属性,药性理论是中药配伍的重要原则,该文以性味归经共同组成的药性组合表征中药药性,多个药性组合再构成药性组合模式,把中药及药性组合模式按功效划分,将各功效作为概念进行归纳逻辑编程,得出针对不同功效的药性组合配伍规律,通过实体语法系统构建药性组合配伍理论模型,实现由药性组合配伍向功效的自动推理过程,并对推理结果进行验证,分析其合理性及局限性,为揭示中药配伍规律及药性与功效间关系的研究提供新的思路。

[关键词] 中药; 药性组合; 配伍理论

Theoretical model for compatibility of medicinal property combination of traditional Chinese medicines

SUN Jing, ZHANG Yan-ling, GU Hao, WANG Yun*

(Information Engineering Research Center for Traditional Chinese Medicines, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 100102, China)

[Abstract] Medicinal properties are specific attributes of traditional Chinese medicines (TCM). The medicinal property theory is an important principle for the compatibility of traditional Chinese medicines. In this paper, medicinal properties, flavors and meridian tropism were combined to represent TCM medicinal properties; and multiple medicinal properties were further combined into medicinal property combination modes. TCMs and medicinal property combination modes were divided according to their efficacies, which were regarded as the concept of inductive logic programming and finally got medicinal property combination and compatibility rules with different efficacies. These medicinal property combination and compatibility rules were used to form the theoretical model through the entity grammar system, realize the automatic reasoning process from the medicinal property combination and compatibility to the efficacies, verify the reasoning result and analyze their rationality and limitations, in order to provide new ideas for revealing the relations between the TCM compatibility rules and efficacies.

[Key words] traditional Chinese medicine; medicinal property combination; compatibility theory

doi: 10.4268/cjcm20151638

药性组合,是指由2个或2个以上药性要素所表达的中药功效^[1]。药性组合模式,是指反复出现的具有相同或相近功效的多个药性组合所形成的药性配伍关系^[2]。中药的各类性能均是从不同角度、不同层次对中药性质的总结,故有文献提出应将性味归经作为一个整体进行研究^[3],本文所用药性组合为已有药典记录的中药性味归经数据。将药性组合作为中药药性的特定表述形式,本课题组已从多方面展开研究,如将单味药作为中间载体,研究功效与药性组合之间

的关联规律^[4];基于药对的药性组合模式,对中药配伍规律进行研究^[5];对方剂整体药性组合模式进行数据挖掘及分析,得出针对不同功效的多类方剂的配伍规律^[6-7]。可见,药性组合是研究中药配伍规律的有效切入点,相关研究也已取得一定成果,已得出在药味、药对、方剂多层次的知识及规律,而其中关于药性组合之间的配伍关系尚缺乏理论总结,本文尝试构建药性组合配伍理论模型。

哲学名词理论的概念为对自然、社会现象,按照已知的

[收稿日期] 2014-10-30

[基金项目] 国家自然科学基金项目(81373985,81173568);教育部新世纪优秀人才支持项目(NECT-11-0605)

[通信作者] * 王耘,教授,博士生导师,Tel: (010) 84738620, E-mail: wangyun@bucm.edu.cn

知识或者认知,经由一般化与演绎推理等方法,进行合乎逻辑的推论性总结,包括4个要素:概念、变量、陈述和形式,以抽象的概念和变量代表各种事实,其间的关联构成理论的陈述,说明事件之间的联系或因果顺序。理论的主要作用是解释和预测,而由于其抽象性,在应用过程中常常受到阻碍,这就需要一种较为直观的表征,实体语法系统正具备这一功能,它是一种形式语法系统,包含基本元素、关系、规则和初始条件,可将其对应构成理论的概念、变量和陈述。

本文应用实体语法系统构建药性组合配伍理论模型,通过归纳逻辑编程获得所需规则。归纳逻辑编程能够得出功效与药性组合之间最直接的决定关系,即以药性组合的组成配伍方式来定义功效概念,在中药、功效、药性组合的背景数据中,通过机器学习,得出由不同药性组合配伍模式推断相应功效的多组规则,用以构建理论模型。在这一理论中,药性组合为中药的给定属性,由药性组合之间的不同组成配伍形成各功效,对药性配伍规律的阐释和中药功效的推断都具有一定意义。

1 药性组合配伍理论模型构建原理与方法

1.1 数据来源

本文药性与功效数据均来自于2010年版《中国药典》一部中记载的相关单味中药的性效,药性应用记录较为明确的性、味、归经,功效依据《中医基础理论》拆分为动名词短语。

1.2 基本思路

构建理论模型需要概念、结构、关系,概念用以表示理论中涉及的基本元素,这些元素以特定结构存在,并通过关系相互联结,产生影响。药性组合配伍理论模型旨在应用该理论阐述药性组合之间的配伍关系,进而推断可产生的功效,故确定其包括的基本概念为药性和功效,药性为药典记录详细的中药药性元素性、味、归经,功效为根据中医理论指导拆分而成的功效短语,规定各药性概念构成的基本结构为药性组合,不同药性组合可进一步构成药性组合模式,概念间的关系为药性要素、药性组合、药性组合模式、功效间的关系,药性组合模式与功效之间的关联关系为阐述药性组合配伍及功效推理的基础。

1.3 实体语法系统简介

实体语法系统包含的基本元素及基本结构均为实体,类似于理论模型构建中的概念与结构,如基本元素为汉字,则词组、句子均为其能组成的基本结构,实体内和实体之间的关系对应理论中的各关系,此外,实体语法系统还可定义规则,规则也表达了各元素、实体间的关系,并可用于演绎推理。给定初始条件,实体语法系统即可根据关系与规则进行自动推理,得出相关结果。利用实体语法系统表征理论,能够使其自动执行,并建立基于理论的软件系统。

1.4 理论模型构建方法

1.4.1 功效与药性数据整理方法

根据药典一部中记载的

药性与功效数据,将性、味、归经整理为药性组合的形式,如红花,性温,味辛,归心、肝经,其药性组合为温辛心、温辛肝。将功效根据中医理论拆分为动名词短语,即功效单元,如对功效进行拆分后,与红花相对应的功效单元为活血、散瘀、通经、止痛。将整理后的中药及药性组合根据不同功效单元进行划分。

1.4.2 归纳逻辑编程得出针对不同功效的药性组合配伍规律 归纳逻辑编程(inductive logic programming, ILP)旨在通过示例以及背景知识产生满足约束的归纳假设。ILP能够利用已有知识进行学习,从例子和背景知识中进行归纳推理^[8]。归纳逻辑编程需要给定概念、概念构成元素及元素之间的关联关系,通过输入的多个实例进行归纳学习,得出理论。可用于对已有的理论进行精制,或是得出从前未有的、全新的理论,且可用于多概念同时学习。

本文将整理后的中药及药性组合根据功效短语进行划分,得出每种功效对应的一种或多种中药及其药性组合。将各个功效单元作为多个不同概念,具有该种功效的各个中药作为进行概念归纳学习的多个实例,中药的性味归经共24个药性要素作为构成概念的元素,各味药所含的不同药性组合组成作为定义不同药性要素相互作用的关系,从所给出的实例中学习得出定义该概念的方法,明确不同药性组合搭配产生不同功效的规律,用以构建药性组合配伍理论模型。

1.4.3 构建中药药性组合配伍理论模型 实体语法系统(entity grammar systems, EGS)是针对生物复杂系统研究而提出的一种形式语法系统,用五元组 (V_N, V_T, F, P, S) 表示,其中各项分别为非末端字符集、末端字符集、操作子集、规则集和初始字符^[9]。在体系中, V 表示基本对象, F 表示基本结构,是基本对象的一种组织形式,也代表了其中的相互作用关系, P 表示规则,体系按照给定规则进行推理, S 表示初始约束条件,是体系的出发点和初始状态。

本文中,为表征药性组合配伍理论,构建理论模型,实现自动执行功能,需明确中药药性组合与功效的关系,即由中药所含药性组合推断相应功效,并将所建模型与实体语法系统中的各项结构相对应。药性组合要素、功效单元对应 V ,作为构成体系的基本元素,元素之间的关系对应 F ,如药性要素与药性组合、药性组合与药性组合模式之间的构成关系,规则 P 对应归纳逻辑编程得出的多条规律,即中药药性组合模式与功效间的各推导关系,可据此得出不同组合模式下的相应功效, S 为初始条件,对应给定各中药对应的药性组合模式。多项结构共同构成药性组合配伍理论模型,模型中各项元素、关联及其所包含的推演过程共同表征药性组合配伍理论,如将中药作为输入值,通过实体语法系统构建的理论模型进行推理,可自动生成输入值包含的药性组合模式,将其作为初始条件,由药性组合配伍规则得出功效,最终输出对应中药的功效单元。

2 分析与讨论

药性组合配伍理论模型以中药药性要素中的性、味、归经及功效单元为基本概念,以药性组合、药性组合模式为基本结构,逻辑归纳编程得出的功效与药性组合模式相关规则作为主要关系,旨在揭示药性组合配伍规律。其中,药性组合这一结构由基本概念性味归经组合而成,共同表征中药药性,不同药性组合进一步搭配形成具有一定功效特点的药性组合模式,各药性组合模式与不同功效之间具有的特定联结形成联系理论模型中各部分的主要关系,应用这种关系可揭示药性组合如何配伍产生相应功效单元,阐明功效与各药性组合模式之间存在的必然联系。

中药药性与功效基本概念整理见表1,按功效单元进行划分,每种功效对应一个或多个中药,每味中药又对应一个或多个药性组合,不同药性组合搭配形成不同结构——药性组合模式,不同功效对应的中药可能相同,即对应的药性组合与药性组合模式可能相同,整理共得到功效单元316个,涉及药性组合237个。将整理所得数据改写格式进行归纳逻辑编程以发现其普适性规律,得出针对不同功效单元的共854条药性组合配伍规则,作为药性组合配伍理论模型中的关系,整理后格式见表2,不同药性组合相互搭配形成药性组合模式,对应相关功效,表明当给定的药性组合能够覆盖与功效相关的药性组合模式时,则说明具有相应功效。应用实体语法系统表征药性组合配伍理论模型,使其自动执行,实现由中药到功效的自动推理过程,输入用于理论构建的525味中药进行推理,得到的部分中药功效见表3。

表1 部分中药功效及药性组合

Table 1 Part of TCM efficacies and combination of medicine properties

功效	中药	药性组合
消痞	豆蔻	温辛肺
	豆蔻	温辛胃
	豆蔻	温辛脾
	半夏	温辛肺
	半夏	温辛胃
	半夏	温辛脾
消食	稻芽	温甘胃
	稻芽	温甘脾
	豆蔻	温辛肺
	豆蔻	温辛胃
	豆蔻	温辛脾
	高良姜	热辛胃
	高良姜	热辛脾
	谷芽	温甘胃
谷芽	温甘脾	

表2 部分功效及药性组合模式

Table 2 Part of efficacies and combination of medicine properties mode

功效	药性组合模式
补火	热甘脾,热甘心,热甘肾,热甘肝,热辛脾,热辛心,热辛肾,热辛肝
补火	热甘脾,热甘心,热甘肾,热辛脾,热辛心,热辛肾
补精	温甘肺,温甘心,温甘肾,温咸肺,温咸心,温咸肾
补脾	平甘肺,平甘胃,平甘脾,平甘心
补脾	平苦肺,平苦脾,平苦心,平甘肺,平甘脾,平甘心
补脾	平甘脾,平甘心,平甘肾,平涩脾,平涩心,平涩肾

表3 实体语法系统推理得出的部分中药功效

Table 3 Part of TCM efficacies reasoned from entity grammar system

中药	功效
白矾	除风痰,祛风,止血
赤石脂	生肌,止泻,止血
附子	补火,救逆,祛风,祛湿,消痈,逐风,逐寒,逐湿
莲子	补脾,固精,固肾,养心,益脾,益肾,止带,止泻

2.1 药性组合配伍理论模型

以实体语法系统中各要素表征药性组合配伍理论,定义如下:

$$V = V_1 \cup V_2 \cup V_3 \cup V_4$$

$$F = \{f_1, f_2\}$$

$$f_1 = \{f_1(x, y, z), x \in V_1, y \in V_2, z \in V_3\}$$

$$f_2 = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n), x_i \in E(V_1 \cup V_2 \cup V_3, f_1)$$

P 为规则集,形式如 $\alpha \geq \beta$

$$\alpha \in E(V_1 \cup V_2 \cup V_3, f_1)$$

$$\beta \in V_4$$

定义初始条件 S

$$S \in (s_1, s_2, \dots, s_m), s_i \in E(V_1 \cup V_2 \cup V_3, f_1)$$

其中, V 为中药药性要素与功效单元的集合, V_1 为四气,包括寒、热、温、凉、平; V_2 为五味,包括酸、苦、甘、辛、咸、涩、淡; V_3 为归经,包括心、肝、脾、肺、肾、心包、小肠、胆、胃、大肠、膀胱、三焦; V_4 为共316个功效单元,它们共同构成理论模型中的基本对象。 F 表示基本结构,包括 f_1 与 f_2 , f_1 为药性组合,由四气元素 x 、五味元素 y 、归经元素 z 以特定顺序组成, f_2 为药性组合模式,每一模式都由 n 个元素 x 共同构成,其中任一元素 x_i 属于由药性要素 V_1, V_2, V_3 与药性组合 f_1 形成的实体集。 P 为推理所需规则,是药性组合配伍依据的主要关系,可表述为由 α 推出 β , α 为药性组合模式, β 来自功效单元的集,即由药性组合模式推理相应功效单元。定义模型初始条件 S ,由 m 个元素 s 组成, s 应与 α 同源,为输入值所对应的药性组合模式。通过实体语法系统表征药性组合配伍理论模型,给定输入值,自动对应其药性组合模式,即初

始条件 S , 而后依据规则 P 推断相应功效单元。

2.2 药性组合配伍理论验证与应用

表3中为基于药性组合配伍理论模型,通过实体语法系统自动推理得出的部分中药的相应功效。其中白矾对应功效药典均有记载;赤石脂生肌、止血为药典记载功效,止泻则在中药学教材中有所说明,《本草汇言》也称其能够“止泻痢肠滞”,而赤石脂归胃、大肠经,且同具酸、甘、涩味,其中酸、涩均具收敛作用,甘则起补益之功,是常用的涩肠止泻收敛药;附子除补火、救逆、逐风、逐寒、逐湿为药典记录功效外,祛风、祛湿均有文献验证,消痈则常见与薏苡仁、败酱草合用形成薏苡附子败酱散,主治由素体阳虚,寒湿瘀血互结,腐败成脓所致肠痈,方中薏苡仁利湿排脓,附子扶助阳气,以散寒湿,且辛散逐结行气,佐以败酱草祛毒排脓,配合成方,共行利湿排脓,破血消肿之效;莲子所对应功效中养心、补脾、益脾、益肾、止泻为药典记载功效,固肾则与养肾、益肾等效用密不可分,因其味甘、涩,归经中又含肾经,故能收敛兼具补益,能够固精、止带,在中药学教材和古籍中亦多有记录,而作为药食同源药材,莲子常作为补肾固精食物使用,治疗脾虚久泻,遗精带下,心悸失眠。应用药性组合配伍对中药功效进行解析,一方面说明了该方法的可靠性,所得结论符合中医理论,另一方面验证了药性组合配伍理论的实用性,可应用其对功效与药性组合之间的关系进行分析。

3 结论

本文将中药药性元素中的性味归经及中药功效作为基本概念,药性组合及药性组合模式作为结构以表征中药药性特征及功效特点,并将机器学习所得的药性组合模式与功效之间的关联作为主要关系,尝试构建药性组合配伍理论模型。进一步应用实体语法系统进行表征,实现中药功效的自动推理过程,给定输入值,系统自动对应得到药性组合模式,并根据规则进行推理演绎,确定相应功效,输出功效单元。

对药性组合配伍理论模型推理得出的功效进行分析,可覆盖药典记录的半数以上功效,说明此方法具有一定的准确性,而中药配伍影响因素复杂,除性味归经外仍有多种因素制约,因此方法具有局限性,更适用于药性组合规律较明晰的中药。本研究从药性组合方面探究中药配伍特征,并尝试建立相应配伍理论模型,从药性组合角度阐释了中药配伍规律,分析中药药性与功效之间的关联,实现由中药到功效的自动推理过程^[10]。

[参考文献]

- [1] 王耘,张燕玲,史新元,等. 基于药性组合的中药性效规律研究框架[J]. 世界科学技术——中医药现代化,2012(4): 1798.
- [2] 李萌,顾浩,翟华强,等. 基于药性组合模式的颜正华教授治疗胃胀痛用药规律初步分析[J]. 世界科学技术——中医药现代化,2012(3): 1648.
- [3] 陈素红,吕圭源. “性、味结合归经”层面研究中药药性[J]. 中药药理与临床,2008(4): 58.
- [4] 顾浩,王耘,肖斌,等. 中药功效-药性组合关联关系研究[J]. 时珍国医国药,2011(7): 1568.
- [5] 顾浩,王耘,肖斌,等. 基于药性组合的药对配伍规律研究[J]. 中国中医药信息杂志,2010(11): 99.
- [6] 李晓鹤,王耘,乔延江. 基于药性组合的“反药”同方应用特征研究[J]. 世界科学技术——中医药现代化,2013(3): 613.
- [7] 郭维嘉,王耘,罗计,等. 治疗阴虚阳亢型高血压方剂的药性组合模式研究[J]. 世界科学技术——中医药现代化,2012(4): 1803.
- [8] 赵丽丽,孙吉贵. 归纳逻辑程序设计综述[J]. 吉林大学学报: 信息科学版,2005(S2): 161.
- [9] 王耘,乔延江. 实体语法系统与中医药理论现代化[J]. 世界科学技术——中医药现代化,2004(5): 6.
- [10] 孙婧,张百霞,颜素容,等. 中药药性组合模式自相似关系研究[J]. 中国中药杂志,2014,39(13): 2378.

[责任编辑 张宁宁]