

饮片药性与组分药性自相似性关系研究

何文静^{1,2}, 胡亚楠¹, 张燕玲¹, 张培¹, 王梅¹, 王耘^{1*}, 乔延江^{1*}

(1. 北京中医药大学 中药信息工程研究中心, 北京 100102;

2. 新疆医科大学 中医学院, 新疆 乌鲁木齐 830011)

[摘要] 目的:利用中药药性数据预测平台对部分中药组分和中药饮片药性进行预测,建立中药饮片与中药组分药性的关系。方法:在组分药理作用的基础上,运用药性数据预测平台,对中药组分的药性进行预测。结果:中药饮片与中药组分药性预测相同与相近的结果总和达到了 75% 以上。结论:饮片药性与中药组分药性之间存在自相似关系,体现了不同层次间的药性具有继承性、加和性和涌现性。

[关键词] 中药饮片药性;组分药性;药性自相似性

药性是中医从宏观角度对中药饮片的临床效应的归纳总结,是中医遣药组方的理论依据。因此,中药药性理论是中药区别于天然药物的重要标志,在指导中医临床用药方面具有重要的参考价值。

中药组分是由一类理化性质和药理活性相似的成分,按照一定比例形态存在的具有完整结构和药理活性的集合。越来越多的中药组分成为了中药的新成员,然而组分有没有药性,组分药性如何确定,就成为中药组分药性理论应用的关键问题。无论中药饮片、组分、成分还是方剂,就其由功能概括药性的过程而言,不同层次上的药物实体并没有区别,也就是说,饮片有药性,而同样在临床上具有特定功能的成分、组分也具有其药性。

中药组分的研究主要集中于中药组分的物质基础研究、药理作用研究等,而中药组分药性方面的研究报道很少。相同药性的中药中含有同类化学成分,例如辛温药大多包含的挥发油类成分,苦寒药大多含生物碱和苷类成分,甘平药大多含蛋白质和氨基酸类成分。周正礼等^[1]分析了 20 种典型寒性中药和热性中药的总糖含量,探讨了总糖含量与寒热药性的关系。研究发现:中药的寒热药性与总糖含量有明显相关性,热性中药的总糖含量总体高于寒性中药的总糖含量。匡海学提出中药的性味与其化学成分密切相关,而且呈现一

定规律性,特定骨架的分子或分子群应该有一定的生理活性,即性味,中药的性味具有可拆分性和可组合性^[2]。这些研究虽然对中药药性的物质基础和组分的药性做了大量的工作,但并没有明确饮片药性与组分药性之间的关系。

本课题组在对大量药理研究文献进行整理的基础上,运用贝叶斯网络学习算法构建了药性的分类模型。所建药性贝叶斯网络分类模型可用于预测中药有效组份的药性,并探讨饮片药性与组分药性的关系,提出了饮片药性与组分药性间具有继承性、加和性和涌现性^[3]。

根据系统科学的观点,中药是一个复杂系统,系统的整体与局部在性质或结构方面具有相似的特征,在药性层面体现为自相似性,所以笔者提出中药组分、饮片在药性层面存在自相似性,可通过饮片的药性来分析、预测组分、饮片的药性。据此,对中药部分组分的药性进行了预测,并根据预测结果建立了饮片药性和组分药性之间关系。

1 数据

本课题组前期已经通过中药饮片的药性和药理作用数据记载,利用数据挖掘方法建立了基于药理作用预测中药组分的药性模型^[4]。

1.1 数据来源与采集 数据集中所收录的中药全部选自《中国药典(2005 年版)》^[5]。利用中国期刊全文数据库(CNKI)检索自 1980 年以来有关这些药物的药理研究的全部文献,并参考《中药学》^[6]、《临床中药学》^[7],对中药的药理作用进行标引;依据药典对其药性信息进行标引。

所采集的药理指标包括抗菌、抗真菌、抗病毒等共计 66 个属性。整理之后,药理指标(属性)为 39 项,包括:抗菌、抗真菌、抗病毒、免疫促进、免疫抑制、镇静、催眠、抗惊厥、镇痛、解热、抗炎、强心、降血压、抗心肌缺血、抗心律失常、抗动脉粥样硬化、降血糖、抗凝血、改善微循环、止血、抑制血小板聚集、降血脂、抗缺氧、抗疲劳、保肝、利胆、抗溃疡、泻下、止泻、延缓衰老、抗氧化、益智、抗生育、杀虫、利尿、镇咳、祛痰、

[收稿日期] 2013-11-27

[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);国家科技支撑计划项目(2008BAI51B01);北京中医药大学科研创新团队支持项目(2011-CXTD-41)

[通信作者] * 王耘,教授,博士生导师, Tel: (010)84738620, E-mail: wangyun@bucm.edu.cn; * 乔延江,教授,博士生导师, Tel: (010)84738620, E-mail: yjqiao@263.net

[作者简介] 何文静,博士研究生, E-mail: wenjhe@163.com

平喘、抗肿瘤。

四性包括寒、热、温、凉、平,将大寒、寒、微寒都归为寒,将大热、热都归为热;五味包括酸、苦、甘、辛、咸,对涩和淡未作研究;归经包括肝、心、脾、肺、肾、胆、胃、小肠、大肠、膀胱、心包、三焦。

1.2 数据结果的界定 根据预测模型,与所引文献进行对比,分别判定为饮片药性与组分药性相同、相似和不同。如金银花药性为寒,而绿原酸药性预测为凉,就判断药性相似;水蛭药性为热,水蛭素药性为平,则判断为不同,苦杏仁药性为温,苦杏仁苷药性为温,则判断为相同。对于归经和五味的界定分为相同、部分相同和不同。例如酸枣仁归为心、肝、

胆经,酸枣仁苷预测也归为心、肝、胆经,则判断为相同,苦杏仁归为心、肺经,苦杏仁苷预测归为肺、大肠经,则判断为部分相同,天花粉归为肺、胃经,天花粉蛋白预测归为肝、心、肾经,则判断为不同。天麻为甘味,天麻素预测也为甘味,则判断为相同,苦参为苦味,苦参碱预测为苦、甘、涩味,则判断为部分相同,桂皮为辛、甘味,桂皮醛预测为苦味,则判断为不同。

2 结果与讨论

使用药性预测平台,通过输入药理作用,平台界面输出相应的中药组分药性预测,现已预测了 100 味中药中的 140 个有效组分的性、味、归经,并将其与原饮片的性味进行了比较。部分中药组分药性预测结果与原饮片对照后结果见表 1。

表 1 中药组分药性预测结果

Table 1 Predictive nature properties of traditional Chinese medicine components

中药组分	药性预测结果	中药饮片	饮片药性
麻黄碱	平;苦;肺	麻黄	温;辛;苦;肺、膀胱
白芷香豆素	温;辛;苦;肺、心、心包	桂枝	温;辛;心、肺、胃、大肠
苦参碱	寒;苦;甘;心、肝、胃、膀胱、脾、肺、胆	苦参	寒;苦;心、肝、胃、大肠、膀胱
绿原酸	凉;甘;苦;心、胃	金银花	寒;甘;肺、心、胃
苦杏仁苷	温;苦;甘;辛;心、肺	苦杏仁	温;苦;肺、大肠
水蛭素	热;酸;苦;咸;肝	水蛭	平;苦;咸;肝
昆布多糖	凉;咸;肝、肾	昆布	寒;咸;肝、肾
酸枣仁苷	温;酸;甘;心、肝、胆	酸枣仁	平;酸;甘;心、肝、胆
天麻素	甘;肝;心	天麻	平;甘;肝
枸杞多糖	平;酸;甘;咸;肝、心、肾	枸杞	平;甘;肝、肾
黄芩苷	寒;苦;甘;肺、胆、肝、心、膀胱	黄芩	寒;苦;肺、胆、胃、大肠
丹参素	凉;苦;甘;咸;心、肝、肾	丹参	寒;苦;心、肝
丹参酮	寒;甘;咸;心、肝、胆	丹参	寒;苦;心、肝
丹酚酸	平;苦;甘;肝、心、胆	丹参	寒;苦;心、肝
艾叶油	热;辛;心、肺、胆、膀胱	艾叶	温;辛;苦;脾、肝、肾
薄荷油	凉;辛;苦;肺、肝、脾、心包、胃	薄荷	寒;辛;肺、肝
天花粉蛋白	寒;甘;肝、心、肾	天花粉	寒;甘;苦;肺、胃
川芎嗪	热;甘;辛;心、肝、胆	川芎	温;辛;肝、胆、心包

对 140 个中药组分的药性预测结果进行统计分析:四气预测结果中,31 个组分的药性与来源饮片的药性相同,所占比例为 22.14%,71 个组分的药性与来源饮片的药性相近所占比例为 50.17%,38 个组分的药性与来源饮片的药性差异较大,占 27.14%;五味预测结果中,1 个组分的药味与来源饮片的药味相同,占 0.7%,104 个组分的药味与来源饮片的药味部分相同,占 74.28%,35 个组分的药味与来源饮片的药味完全不同,占 25%;归经预测结果中,4 个组分的归经与来源饮片的归经相同,占 2.86%,110 个组分的归经与来源饮片的归经部分相同,占 78.57%;26 个组分的归经与来源饮片的归经完全不同,占 18.57%的比例。无论是四气、五味还是归经,相同和相似的预测总和分别达到了 72.31%、74.98%和 81.43%。

以上结果可见,在临床上具有特定功能的成分、组分与饮片一样也有其药性,并且有效成分、有效组分和饮片的药性可能相同,也有可能并不一致。数据表明,饮片药性与中

药组分药性之间具有自相似性,主要表现为继承性、加和性和涌现性。

所谓继承性是指成分、组分的药性与饮片药性存在一定的联系。部分中药组分与来源饮片在四气药性上相同,见表 1,例如薄荷、金银花、天花粉的药性为寒,其组分薄荷油、绿原酸、天花粉蛋白的预测药性也是寒,这说明了药性具有继承性的特点。组分药性的继承性恰恰说明所研究组分为原饮片功效的主要物质基础,具有代表性,是药性自相似性的体现。

加和性是指饮片药性是成分、组分药性加和而成,成分相对比例、药性强弱、药性间协同与拮抗关系等都会影响饮片的性味。组分药性所有加和性主要体现在饮片药性与组分药性相近,体现了随着化学物质基础的细化,组分的功效更具有针对性,表现为或增加或减弱;涌现性是指成分、组分药性和饮片药性之间存在差异。例如丹参,其饮片本身为苦味,其主要药效成分丹参素、丹参酮、丹酚酸不仅具有苦味,

且同时出现了甘味和咸味,相同的药味“苦”即为组分与其对应饮片的药性继承性,差异的药味“甘”和“咸”则体现为药性涌现性。在组分药性的加和后体现饮片整体药性的过程中,由于苦味为其共同药性,且火(苦)生土、土(甘)生金、金生水(咸),苦味是根本味,加和为苦味,而且丹参具有养血安神的作用,在其饮片苦寒药性中未予体现养血的功效,在预测组分药性中,预测得到了甘味,甘味能够补益养血;在对中药组分绿原酸的预测中,其药性与原饮片金银花相比多了苦味,这与金银花清热解毒之功效相符;苦杏仁苷的药性较之苦杏仁出现了“甘”和“辛”味,苦杏仁具有止咳平喘、润肠通便之功效,治疗各种咳嗽,尤其擅长外感,这与预测之辛味发散功效相符,而且苦杏仁油脂多润也与甘味补益作用相符。涌现性说明两方面的问题,一是饮片所包含的功效,在临床上没有观察到或被忽视,而药理实验也不可能对所有功效进行验证所造成的;二是随着化学成分的纯化,药效物质基础的药效性质凸现的结果,是新的药理作用所致。涌现性表明中药随着物质基础和作用机制研究的发展,将会更加丰富与多样。

作者认为,组分药性与饮片药性之间存在自相似关系,中药饮片的药性是对其所含有效组分药性的复杂整合,表现为组分药性与饮片药性相比,具有继承性、加和性和涌现性。如果将中药饮片和组分理解成一个系统的不同层次,对于这个系统来说,同一饮片与所含化学组分的药性具有自相似性。

可见,药性的继承性、加和性、涌现性实为指导中药临床合理应用和药物研发的基础,深入研究其继承、加和和涌现规律将是药性理论乃至中药基础理论研究的核心。中药药

性理论的应用范围将进一步扩大,能够用来描述中药组分,指导临床用药。能够对中药组分进行药性预测,可以发现组分在药性层面的规律,为组分配伍提供理论支持。对于药性涌现性的研究,将为发现组分新的功能和中药所具有的新的潜在疗效提供指导。

基于临床应用、物质基础和作用机制相互关联的组分药性的研究,立足于临床有效性和传统中医药理论的继承,充分应用了现代药理学、分子生物学研究成果,结合信息技术和数据库知识挖掘技术平台建设,体现了药性的系统性,解决了一药一性、一性多味研究的不足,为药性研究开拓了一条新的思路。

[参考文献]

- [1] 周正礼,李峰,李佳. 20 种中药总糖含量与寒热药性关系探讨[J]. 山东中医药大学学报, 2009, 33(1): 5.
- [2] 匡海学,程伟. 中药性味的可拆分性、可组合性研究-中药性味理论新假说与研究方法的探索[J]. 世界科学技术——中医药现代化, 2009, 11(6): 768.
- [3] 张培,李江,王耘,等. 贝叶斯网络在中药有效组分五味预测中的应用[J]. 世界科学技术——中医药现代化, 2008, 10(5): 114.
- [4] 王梅,张培,王耘,等. 基于药理作用的中药组分的功效预测研究[J]. 世界科学技术——中医药现代化, 2011, 13(1): 93.
- [5] 中国药典. 一部[S]. 2005.
- [6] 颜正华. 中药学[M]. 北京:人民卫生出版社, 2006.
- [7] 高学敏,钟赣生. 临床中药学[M]. 石家庄:河北科学技术出版社, 2006.

Study on self-similarity relationship between decoction pieces property and component property

HE Wen-jing^{1,2}, HU Ya-nan¹, ZHANG Yan-ling¹, ZHANG Pei¹, WANG Mei¹, WANG Yun^{1*}, QIAO Yan-jiang^{1*}

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

2. College of Traditional Chinese Medicine, Xinjiang Medical University, Urumqi 830011, China)

[Abstract] **Objective:** To predict part of medicinal properties of traditional Chinese medicine components and traditional Chinese medicine decoction pieces by using the traditional Chinese medicinal property data prediction platform, in order to establish the relationship between properties of traditional Chinese medicine components and traditional Chinese medicine decoction pieces. **Method:** The properties of traditional Chinese medicine components were predicted by using the medicinal property data prediction platform based on the pharmacological effects of the components. **Result:** The total sum of identical or similar results of the prediction for the properties of traditional Chinese medicine components and traditional Chinese medicine decoction pieces accounted for over 75%. **Conclusion:** The self-similarity exists between properties of traditional Chinese medicine components and traditional Chinese medicine decoction pieces, which reflects the inheritance, additivity and emergence among different properties of traditional Chinese medicines.

[Key words] property of traditional Chinese medicine decoction pieces; property of traditional Chinese medicine component; self-similarity of property of traditional Chinese medicine

doi:10.4268/cjcm20141302

[责任编辑 张宁宁]

• 2377 •