

- [3] 高南南, 陈慧珍, 田泽, 等. 肾茶药理作用的研究 [J]. 中草药, 1996, 27(10): 615.
- [4] 陈建白, 白旭华, 蒋桂芝. 肾茶开发利用的初步研究 [J]. 云南热带科技, 1998, 21(3): 6-8.
- [5] 蔡华芳, 寿燕, 汪菁菁, 等. 肾茶的药理作用初探 [J]. 中药材, 1997, 20(1): 38-39.
- [6] 李月婷, 黄荣桂, 郑兴中. 肾茶的研究进展 [J]. 中国中西医结合杂志, 2002, 22(6): 470-472.
- [7] 颜文祝, 吕于谋, 沈文通. 猫须草主要化学成分初步试验 [J]. 海峡药学, 1995, 7(3): 3-4.
- [8] Flavonoids from *Orthosiphon spicatus* [J]. *Planta Med*, 1989, 55(6): 569.
- [9] 钟纪育, 郭宗实. 肾茶的化学成分 [J]. 云南植物研究, 1984, 6(3): 344-345.
- [10] Bombardelli E, Bonati A, Gabetta B, et al. Flavonoid constituents of *Orthosiphon spicatus* [J]. *Fitoterapia*, 1992, 43(2): 35-40.
- [11] Sumayono W, Wahono P, Proksch P, et al. Quantitative and qualitative analysis of the phenolic constituents from *Orthosiphon aristatus* [J]. *Planta Med*, 1991, 57(2): 176-180.
- [12] Tezuka Y, Stampoulis P, Banskota A H, et al. Constituents of the vietnamese medicinal plant *Orthosiphon stamineus* [J]. *Chem Pharm Bull*, 2000, 48(11): 1711-1719.
- [13] 陈伊蕾, 谭俊杰, 陆露璐, 等. 肾茶水溶性成分的研究 [J]. 中草药, 2009, 40(5): 689-693.
- [14] Lawrence B M, Clarence P. Coordination in solutions. I. Acid strengths of phenol derivatives in water [J]. *J Am Chem Soc*, 1963, 85(11): 1711-1715.
- [15] Katherine N S. Carbon-13 nuclear magnetic resonance of biologically important aromatic acids. I. Chemical shifts of benzoic acid and derivatives [J]. *J Am Chem Soc*, 1972, 94(24): 8564-8568.
- [16] Peter M G, Donald L N, Pam J R, et al. The capsaicinoid: their separation, synthesis and mutagenicity [J]. *J Org Chem*, 1988, 53(5): 1064-1071.
- [17] Charles J, Richard C H, Marvin C. The Polyphenolic acid of *Lithospermum ruderale*. Carbon-13 nuclear magnetic resonance of lithospermic and rosmarinic acids [J]. *J Org Chem*, 1976, 41(3): 449-454.
- [18] 王敏, 梁敬钰, 陈雪英. 肾茶的水溶性成分 [J]. 中国天然药物, 2007, 5(1): 27-30.
- [19] Awale S, Tezuka Y, Banskota A H, et al. Inhibition of NO production by highly-oxygenated diterpenes of *Orthosiphon stamineus* and their structure-activity relationship [J]. *Biol Pharm Bull*, 2003, 26(4): 468-473.
- [20] Thi NMT, Suresh A, Yasuhiro T, et al. Staminane- and isopimarane-type diterpenes from *Orthosiphon stamineus* of Taiwan and their nitricoxide inhibitory activity [J]. *J Nat Prod*, 2004, 67(4): 654-658.
- [21] 谭俊杰, 谭昌匣, 陈伊蕾, 等. 肾茶化学成分的研究 [J]. 天然产物研究与开发, 2009, 21: 608-611.
- [22] Hirota S, Takako B, Toshiyuki M, et al. Indonesian medicinal plants. XX. Chemical structures of two new isopimarane-type diterpenes, orthosiphonones A and B, and a new benzochromene, orthochromene A from the leaves of *Orthosiphon aristatus* (Lamiaceae) [J]. *Chem Pharm Bull*, 1999, 47(5): 695-698.
- [23] Jian Z, Ying D Z, Wei M Z. Two new alkyl glycosides from *Clerodendranthus spicatus* [J]. *J Asian Natl Prod Res*, 2008, 10(7): 602-606.
- [24] 斯建勇, 李国青, 郭剑. 肾茶化学成分研究进展 [J]. 国外医药:植物药分册, 1995, 10(1): 11-12.
- [25] Fjimoto T, Tsuda Y. Isolation of myo-inositol from kumis [J]. *Kutjing Yakugaku Zasshi*, 1972, 92(8): 1060-1061.
- [26] 黄荣桂, 沈文通, 郑兴中, 等. 肾茶对尿路结石的治疗作用 [J]. 福建医科大学学报, 1999, 33(4): 402-405.
- [27] 高南南, 田泽, 李玲玲, 等. 肾茶对 Adenine 所致慢性肾功能衰竭大鼠的改善作用 [J]. 西北药学杂志, 1996, 11(3): 114-117.
- [28] 高南南, 田泽, 李玲玲, 等. 肾茶对慢性肾功能衰竭大鼠体内毒性代谢产物的排出及肾脏组织形态学的影响 [J]. 中草药, 1996, 27(8): 472-475.
- [29] 岑小波, 王瑞淑. 肾茶对小鼠免疫功能的影响 [J]. 现代预防医学, 1997, 24(1): 73-74.
- [30] 李家洲, 卢海嘯, 韦清海. 肾茶提取物对蛙肠系膜微循环的影响 [J]. 玉林师范学院学报:自然科学版, 2007, 28(5): 67-71.
- [31] 周红杰, 秘鸣, 冯德强. 肾茶研究进展概况 [J]. 云南中医中药杂志, 1996, 17(3): 75-76.

数据挖掘技术在中药研究中的应用

李凌艳¹, 李认书², 孙鹤^{1,2*}

(1. 天津大学药物科学与技术学院 药事管理系, 天津 300072; 2. 天津天士力集团, 天津 300410)

摘要: 数据挖掘是从大量的、不完全的、有噪声的、模糊的、随机的数据集中识别有效的、新颖的、潜在有用的以及最终可被理解的模式的非平凡过程。阐述了数据挖掘技术一些基本概念以及中医药信息的特点, 并探讨了数据挖掘技术在中医药文献研究、药对配伍规律研究、中药谱效关系、药品不良反应评价以及新药开发等领域的应用。采用数据挖掘等信息处理技术进行知识的获取研究, 从而带动中医药学术水平的提高, 是加速推进中医药现代化的有效途径。

关键词: 中医药; 数据挖掘; 知识发现

中图分类号: R284.1

文献标识码: A

文章编号: 0253-2670(2010)05-附 16-03

我国传统中医药是祖国光辉灿烂文化宝库中的瑰宝之一, 中药复方是中医用药的主要形式, 虽然中医药已有数千年的临床实践, 但由于人类认识水平和科学技术条件的限制, 中药研究水平相对于西药来说, 还有非常大的差距。

中医药经过数千年的发展积累了大量的各种类型的数

据, 这些庞杂的数据在提供丰富信息的同时, 也体现出明显的海量信息特征。如何对众多的中药药资源进行去伪存真、去粗取精, 以促进中医药事业的发展是摆在研究者面前的一个重要的课题。数据挖掘技术正是为解决“数据丰富但知识贫乏”的状况而兴起的边缘学科之一, 在中医药研究领域日

收稿日期: 2009-08-21

作者简介: 李凌艳, 博士在读, 天津大学药物科学与技术学院药事管理系。E-mail: tianjinlingyan@sina.com

*通讯作者 孙鹤 Tel: (022) 26735089 E-mail: henrysunusa@gmail.com

益受到重视。

1 数据挖掘技术

数据挖掘是指从数据集中自动抽取隐藏在数据中的那些有用信息非平凡过程,它可帮助决策者分析历史数据及当前数据,并从中发现隐藏的关系和模式,进而预测未来可能发生的行为。数据挖掘的过程也叫知识发现(knowledge discovery in database, KDD)的过程^[1]。

数据挖掘的分析方法可以分为两类:直接数据挖掘和间接数据挖掘。直接数据挖掘的目标是利用可用的数据建立一个模型,再用这个模型对剩余的数据进行描述。间接数据挖掘的目标中还没有选出某一具体的变量,用模型进行描述;而是在所有的变量中建立起某种关系。

数据挖掘处理过程共分为9个处理阶段,这9个处理阶段分别是数据准备、数据选择、数据预处理、数据缩减、KDD目标确定、挖掘算法确定、数据挖掘、模式解释及知识评价。数据挖掘常用的方法有统计方法、关联规则、聚类分析、决策树方法、神经网络、遗传算法和粗糙集等^[2]。

数据挖掘技术在中医药领域的应用必将促进中医药的现代化进程,使古老的中医药事业焕发出新的生机与活力。

2 中医药信息的特点

2.1 数量庞杂,形式多样:由于历史久远,中医药著作资源数量足以用“海量”来形容。仅古代中医药文献(泛指辛亥革命前)我国曾发行过近2万册中医学文献,同时民间还流传着大量的验方、秘方和中医药诊疗技术等宝贵的医药资源。新中国成立后,我国中医药业迅速发展,出版的中医药图书品种相当于建国以前刊出的总量^[3]。

在文献的形式上也由过去线装书、口头传授等发展到了各类纸质书籍、期刊、电子文件、音频视频文件等多种形式。在文字上,不同时代的语言文字在表达和术语使用上也存在着很大的差别,再加上古体字、通假字和避讳字的出现,这些都给信息的表达和处理带来了很大困难。

2.2 信息模糊,术语不规范:在中医药研究中,无论是药物、诊疗过程,还是疾病症状的描述都存在着大量的定性描述和相当多的模糊概念。

在药物的描述上,一药多名与异药同名的现象也很普遍^[4]。如仙鹤草,贵州称刀口药,湖南称路边鸡,江西又称子不离母,而山东则称群兰败毒草,辽宁称狼牙草,福建称其为泻痢草等。

中医学对疾病的诊断是通过望、闻、问、切的四诊合参,获取有用信息,再结合医生的经验,对疾病做出诊断。症状的模糊性不仅表现在获得信息的形式多样,还表现在中医症状存在着“一症多名和多症一名”的现象。这种模糊性模式加大了中医药数据挖掘的难度。

2.3 中药成分复杂,物质基础不明确:中药是一个高度复杂的化学物质体系,其复杂性不仅表现在组成方剂的化学成分的复杂性,也体现在方剂与人体相互关系的复杂性。中药是在中医理论指导下应用的复杂系统。中药的复杂性^[5]主要表现在3个方面:(1)中药方剂的多样性;(2)中药质量的差

异性;(3)临床用药的灵活性。

尽管几千年的临床实践证实了中药临床有效,但中药发挥作用的物质基础是什么以及作用的机制是什么并不明确。

3 数据挖掘在中医药研究中的应用

现代中医药信息资源数量激增,但其庞杂而又无序的状况与专业技术人员对信息需求的专指性之间形成了严重的矛盾。解决这一矛盾的一个重要途径就是将各种信息进行加工处理,建立中医药信息资源数据库。而将数据挖掘技术引入中医药现代化研究,正是计算机技术运用于中医药现代化研究的又一新尝试。近年来,中药复方研究是国内外学者研究的一个热点问题,关于这方面的论著也颇多,也取得了一定成绩。

3.1 中医药信息化和中医药文献研究:对中医药理论和实践进行信息化、数字化、知识化能够克服中医名词术语过于繁杂造成的中医发展障碍,对于中医药信息进行文本数据挖掘是促进中医药信息结构化的途径之一。该问题的解决,将会克服中医发展的最大障碍,极大地促进中医药现代化发展的进程^[6]。

3.2 药对配伍规律研究:数据挖掘技术在方剂配伍规律上的研究大概有3种模式^[7]:以分类为主的数据挖掘研究、以聚类为主的数据挖掘研究和以关联为主的数据挖掘研究。

在以分类为主的研究模式中,其常用的分类方法主要有:回归、决策树、神经网络等。分类器的构造方法有统计方法、机器学习方法、神经网络方法等。这种研究模式是通过参考现行已知的方剂分类标准,将研究对象中的方剂按照组方药物的功效、性味或归经等分成若干类^[8]。

以聚类为主的数据挖掘研究是根据药物本身潜在的特性,通过聚类把一个数据集中的个体按照相似性归成若干类别,使其“物以类聚”,将数据库中的记录划分为一系列有意义的子集,然后结合领域知识对方剂的制方要素进行分析^[9]。

以关联为主的研究模式是数据挖掘的一种常用方式,也是分析中医药复方中隐含的关联规则的一项必要的研究工作^[10]。由于专家对病、证在认识上的差异、用药习惯的不同,以及辨证论治的特点,使得在治疗药物的选择及配伍方面呈现出百花齐放的局面。关联规则用于方剂配伍研究主要功能是探寻核心药群,寻找药物之间的相互联系^[11]和整体用药规律。这样能够在宏观层次上认识中药复方配伍的特点。

3.3 中药指纹图谱及中药谱效关系的研究:中药指纹图谱技术根据其采集手段的不同,可分为物理图谱、化学图谱及物理化学和分子生物学图谱等多维多息图谱。由于中药指纹图谱具有专属性、可量化性、稳定性、重现性和再现性、有效性、完整性和细节处理的模糊性等特点,中药指纹图谱分析在中药材真伪鉴别、质量评价等方面已取得了大量成果,也为谱效关系的数据挖掘打下了基础。

数据挖掘技术是发现和解析中药指纹图谱潜在信息的有力工具,通过对中药指纹图谱进行数据挖掘可以从中提取隐含的及具有潜在应用价值、最终可理解的信息的过程^[12]。其中比较典型的解析方法有模式识别、人工神经网络等^[13]。

中药谱效关系是 2001 年由中医药界研究者提出的全新的,处于学术前沿的中药现代化研究思路。谱效关系研究是以中药指纹图谱研究为基础,同时又比指纹图谱更深入一层的科学研究方向^[14]。中药指纹图谱中变量参数包括顺序变量、数值变量和名义变量。谱效关系研究将标示物质群特征峰的中药指纹图谱与药效结果相对应起来,将中药指纹图谱中各种变量的变化与中药药效指标变量结果联系起来,并进行变量之间的模式聚类,从而全面、系统地揭示中药已知和未知药理作用的物质成分,为中药质控、分类和成药处方解析与优化、寻找新的药源植物与药物设计等提供借鉴^[15,16]。

3.4 药品不良反应评价:目前,我国药品不良反应报告数量逐年递增,但缺少对其科学、深入的分析与评价。药品不良反应是指药品在预防、诊断、治病或调节生理功能的正常用法、用量下,出现的有害的和意料之外的反应。药品不良反应评价是药品上市后再评价的最重要内容,是正确、全面认识药品安全性的重要手段。数据挖掘技术在不良反应研究领域的应用具有广阔的空间,数据挖掘技术使不良反应信息分析与筛选的自动化程度大大提高。许多方法如贝叶斯网络、决策树算法和 Apriori 算法等均可作为深入研究药品不良反应数据库信息的有力工具。

但目前,数据挖掘方法主要应用于不良反应信号的发现与筛选,其在不良反应发生规律方面的应用研究尚报道不多^[17]。

3.5 开发新药:中药经过中国历代医药学家的医疗实践,具有明确的性味归经、功效主治,从中寻找新的活性成分或先导化合物是开发创新天然药物的有效途径。数据挖掘技术有助于增加在寻找新药过程中的主动性、避免盲目性,真正做到有的放矢^[18]。利用数据挖掘技术从数百种、数千种药用植物中进行挖掘,可能对新药开发具有指导、启发作用。

4 结语

采用合理的数据挖掘模型及算法,可以有效地推动中医

药信息化进程,具有深远意义。无论是在学术研究上,还是在实际应用领域中,该领域研究都有着十分重要的研究意义,有着广阔的研究与应用前景。当然,同其他任何一种研究方法一样,数据挖掘不是万能的。数据挖掘研究结果的准确性受数据库质量等多种因素影响,其研究结果也要在相关领域专家的指导下进行解释与评估,并需要在实践中予以验证。

参考文献:

- [1] 苏新宁,杨建林,邓三坞,等.数据挖掘理论与技术[M].北京:科学技术文献出版社,2003.
- [2] 秦剑波,李兆延.数据挖掘技术研究[J].商场现代化,2008(552):28.
- [3] 莫楠,谢梦洲.浅谈中医住处资源特点和数据库建立[J].湖南中医学院学报,2005,25(6):52-53.
- [4] 赖新梅,林端宜,杨雪梅,等.中药原植物种数据规范化研究的思考[J].中草药,2009,40(7):1160-1162.
- [5] 王耘,史新元,乔延江.中药复杂性研究的内容与方法[J].中国天然药物,2005,3(5):262-265.
- [6] 姚美村,袁月梅,艾路,等.数据挖掘及其在中医现代化研究中的应用[J].北京中医药大学学报,2002,25(3):20-23.
- [7] 李文林,段金殿,赵国平,等.方剂配伍规律数据挖掘的研究现状及思考[J].中国中医药信息杂志,2008,15(10):92-94.
- [8] 刘齐宏,唐常杰,李川,等.基于属性归纳的中药方剂数据挖掘[J].计算机应用,2007,27(2):450-452.
- [9] 陈学进.数据控制中聚类分析的研究[J].计算机技术与发展,2006,16(9):44-49.
- [10] 李力恒,张承江,闫朝升.中药复方配伍规律挖掘初探[J].中医药信息,2006,23(4):4-5.
- [11] 叶亮,范欣生,王崇骏,等.方剂数据挖掘研究常用方法探讨[J].医学信息,2008,21(10):1734-1737.
- [12] 冯雪松,董鸿晔.中药指纹图谱的数据挖掘技术[J].药学进展,2002,26(4):198-201.
- [13] 邵建强.中药指纹图谱的研究进展[J].中草药,2009,40(6):994-998.
- [14] 李戎,闫智勇,李文军等.创建中药谱效关系学[J].中医教育,2002,21(2):62.
- [15] 李文林,赵国平.数据挖掘技术及其在中医药领域的应用[J].中华医学图书情报杂志,2004,13(6):4-6.
- [16] 何毓敏,张长城,袁丁.探讨基于谱效关系的中药质量评价的物元分析新方法[J].中草药,2009,40(8):1182-1185.
- [17] 吴嘉瑞,张冰.试论数据挖掘技术在药品不良反应评价领域的应用[J].中药新药与临床药理,2007,18(6):485-487.
- [18] 廖正根,杨光华.药物发现中的逻辑思维与非逻辑思维[J].医学与哲学,1997,18(8):438-439.

姜黄素的抗氧化和抗炎作用研究进展

狄建彬^{1,2},顾振纶^{1,2*},赵笑东³,钱培刚^{1,2},蒋小岗^{1,2},郭次仪⁴

(1. 苏州大学医学部 药理学系,江苏 苏州 215007; 2. 苏州中药研究所,江苏 苏州 215007

3. 苏州市中医医院,江苏 苏州 215003; 4. 香港保健协会,香港)

摘要:姜黄素(curcumin)是从姜科姜黄属植物姜黄、郁金、莪术的干燥根茎中提取的一种天然有效成分,药理作用广泛,毒性低,耐受性好,由于其经济价值,已成为开发热点。现代医学研究发现人体众多疾病的形成与自由基的形成、炎症反应的参与有关,姜黄素的多种药理活性与其抗氧化、抗炎作用有关。姜黄素的抗氧化活性和抗炎作用已引起国内外学者的广泛关注,就近年来姜黄素在抗氧化、抗炎两方面的有关研究予以综述。

关键词:姜黄素;抗氧化;抗炎

中图分类号:R282.71

文献标识码:A

文章编号:0253-2670(2010)05-附 18-04

收稿日期:2009-11-03

基金项目:香港保健协会心血管疾病研究资助项目(HK20070908-1);苏州市科技局应用基础研究计划(YJ S0939)

作者简介:狄建彬(1983—),男,江苏常州人,硕士研究生,研究方向:心血管药理学。

Tel: (0512) 65190599 E-mail: djianbin83@126.com

*通讯作者 顾振纶 Tel: (0512) 65190599 E-mail: zhenlungu.2003@163.com