

基于数据挖掘的养阴类中药多糖结构与生物效应的关联性分析¹

段嘉伦¹, 王 雪¹, 包纯洁^{1,2}, 谭佳怡², 宿树兰¹, 张 芳¹, 郭 盛¹, 段金廛^{1*}

1. 南京中医药大学/中药资源产业化与方剂创新药物国家地方联合工程中心, 江苏省中药资源产业化过程协同创新中心, 江苏省方剂高新技术研究重点实验室, 江苏 南京 210023
2. 南京中医药大学医学院, 江苏 南京 210023

摘要: **目的** 以养阴类中药及其多糖组分为研究对象, 通过数据挖掘和关联分析, 揭示其物质结构与生物效应的密切关联性, 为养阴类中药药性阐释及多糖类成分的开发利用提供科学依据。 **方法** 通过检索养阴类中药多糖的结构与生物效应相关信息, 运用 Microsoft Excel 建立养阴类中药多糖相对分子质量、糖苷键类型、单糖组成及其生物活性数据表, 并运用 SPSS Modeler 18.0 软件中 Apriori 算法进行关联分析。 **结果** 养阴类中药多糖主要由葡萄糖、甘露糖、半乳糖通过 1→4 和 1→6 糖苷键连接而成, 其主要的生物效应包括抗氧化、调节免疫和降血糖等。关联分析发现, 养阴类中药多糖的相对分子质量、糖苷键类型和单糖组成与其生物效应具有明显相关性。其中, 相对分子质量 $<1 \times 10^4$ 与抗氧化效应相关性最强, 相对分子质量 $1 \times 10^4 \sim 1 \times 10^5$ 与调节免疫效应相关性最强, 1→4 糖苷键类型与抗肿瘤和调节免疫效应相关性最强, 葡萄糖与调节免疫效应相关性最强。 **结论** 石斛、黄精、麦冬、枸杞子等养阴类中药所含多糖类物质与维持体内阴液, 促进津液生成, 提高免疫功能等生物活性密切相关。多糖结构特征与养阴功效之间的关联关系与规律性认知, 可为揭示其药性特点、指导中医临床合理用药以及发现和创制新药提供科学依据。

关键词: 养阴类中药; 多糖类; 药性; 数据挖掘; 关联性分析; 规律性认识

中图分类号: R285 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2670(2025)07-2441-12

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2025.07.019

Correlation analysis of structure and biological effect of polysaccharide from *yin*-nourishing traditional Chinese medicine based on data mining

DUAN Jialun¹, WANG Xue¹, BAO Chunjie^{1,2}, TAN Jiayi², SU Shulan¹, ZHANG Fang¹, GUO Sheng¹, DUAN Jiniao¹

1. Jiangsu Province Key Laboratory of High Technology Research, National and Local Collaborative Engineering Center of Chinese Medicinal Resources Industrialization and Formulae Innovative Medicine, Jiangsu Collaborative Innovation Center of Chinese Medicinal Resources Industrialization, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing 210023, China
2. School of Medicine, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing 210023, China

Abstract: **Objective** To elucidate the intrinsic relationship between the structural characteristics of polysaccharides from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines (TCMs) and their biological effects through data mining and association analysis taking the *yin*-nourishing TCMs and its polysaccharide components as the research object, thereby providing a scientific foundation for interpreting their pharmacological properties and advancing the development and utilization of polysaccharides. **Methods** By searching for the structure and biological effects of polysaccharides of *yin*-nourishing TCMs, the data on the molecular weight, glycosidic bond types, monosaccharide composition, and bioactivity of these polysaccharides were compiled using Microsoft Excel and correlation analysis was conducted using the Apriori algorithm in SPSS Modeler 18.0. **Results** Data mining revealed that the

收稿日期: 2024-11-23

基金项目: 江苏省自然科学基金青年项目 (BK20231462, BK20240749); 国家自然科学基金青年项目 (82405025); 江苏省高等学校基础科学 (自然科学) 研究面上项目 (23KJB360010, 24KJB360017); 江苏省“双创博士”项目 (JSSCBS20230146); 江苏省中药资源产业化过程协同创新中心开放课题重点项目 (ZDXM-2023-17); 国家中医药管理局高水平中医药重点学科建设项目—中药资源化学 (zyyzdxk-2023083); 国家自然科学基金区域创新发展联合基金重点项目 (U21A20408)

作者简介: 段嘉伦 (1994—), 男, 江苏南京, 讲师, 博士, 从事中药资源新价值发现与利用、新型药物递送系统研究。

E-mail: jialun.duan@njucm.edu.cn

***通信作者:** 段金廛 (1956—), 男, 宁夏中卫, 教授, 博士, 从事中药资源化学与方剂功效物质研究。E-mail: dja@njucm.edu.cn

polysaccharides from *yin*-nourishing TCMs are primarily composed of glucose, mannose, and galactose linked by 1→4 and 1→6 glycosidic bonds, with their predominant biological effects including antioxidant activity, immune regulation, and hypoglycemic effects. The correlation analysis further identified significant correlations between the molecular weight, glycosidic bond types, and monosaccharide composition of these polysaccharides and their biological effects. Specifically, polysaccharides with a molecular weight of less than 1×10^4 were most strongly associated with antioxidant activity, those with a molecular weight of 1×10^4 — 1×10^5 were closely related to immune regulation, the 1→4 glycosidic bond type was closely related to anti-tumor and immune regulation effects, and glucose was closely related to immune regulation effects. **Conclusion** Polysaccharides from *yin*-nourishing TCMs such as Shihu (*Dendrobii Caulis*), Huangjing (*Polygonati Rhizoma*), Maidong (*Ophiopogonis Radix*) and Gouqizi (*Lycii Fructus*) are critically associated with maintaining *yin*-fluid balance, promoting bodily fluid production, and enhancing immune function. The relationship and regularity of polysaccharide structure characteristics and *yin*-nourishing effect can provide scientific basis for revealing its medicinal properties, guiding clinical rational drug use, and discovering and creating new drugs.

Key words: *yin*-nourishing traditional Chinese medicine; polysaccharides; medicinal properties; data mining; correlation analysis; regularity understanding

养阴是中国传统医学阴虚症的基本疗法，在中医中占据着核心地位。《黄帝内经·素问·四气调神大论》认为，养阴即在秋冬季节滋养人体的阴液，以顺应自然界收藏之气的变化。朱丹溪在《丹溪心法》中进一步提升了养阴的重要性，提出“阳有余阴不足论”，并强调“养生之要，莫若养阴”，确立了养阴在中医养生学中的核心地位。同时，《金匱要略》揭示了养阴的深远意义，指出“夫养阴者，所以治未病也”，这不仅体现了养阴作为一种治疗手段，更突出了其在预防疾病、增强体质方面的重要性。因此，养阴不仅是中医学中滋养阴液的方法，更是一种全面的养生策略，对于平衡阴阳、维护人体健康发挥着至关重要的作用。

养阴类中药（养阴药，又称补阴药、滋阴药）药性大多味甘性寒凉，其主要作用是维持体内的阴液，促进津液的生成，从而滋润身体，缓解干燥症状^[1]。养阴类中药主治肺阴虚、脾胃阴虚、肝阴虚、肾阴虚、心阴虚证^[2-3]，具有滋阴润燥、清热降火、养血安神、润肠通便之功效。石斛、枸杞子、沙参、麦冬、百合等是常见的养阴类中药^[4]，现代中药分析结果显示，养阴类中药主要包含多糖、香豆素类、木脂素类、聚炔类、单萜糖苷、酚酸类、挥发油及多种微量元素^[5-6]。

多糖是一种普遍存在于动植物及微生物中的高分子化合物，由 10 个以上单糖分子通过糖苷键相互连接形成，广泛存在于植物、动物、细菌和微生物中^[7]，是高等植物细胞壁、动物细胞膜以及微生物细胞壁的重要成分^[8]。这些生物大分子不仅是生物体的重要组成部分，而且在生物体的多种生理功能中发挥着关键作用。多糖的生物活性受到其自

身的理化性质、结构特征以及制备过程的影响，包括相对分子质量、单糖组成、糖苷键类型、分支度、支链位置、空间构型以及提取过程等多个因素^[9]。目前已有大量研究致力于对不同来源的多糖进行提取、表征以及生物活性的分析，然而，多糖化学结构的复杂性、生物活性的多样性及不稳定特性，使得研究者对于多糖化学结构与其生物活性之间的构效关系理解尚不全面，进而制约了高生物活性多糖的高效提取及其实际应用^[10]。多糖是养阴类中药的重要物质基础，现代药理学研究显示，养阴类中药多糖具有抗肿瘤^[11-12]、免疫调节^[13-14]、抗氧化^[15-16]、降血糖^[17]等多种生物活性。

近年来，研究者围绕养阴类中药多糖的提取纯化、结构解析、生理特性和药理活性等方面进行了深入而系统的研究，为我国养阴类中药的生物学基础研究和临床应用提供了坚实的科学依据。然而，在阐明多糖类成分与养阴类中药生物效应之间内在关联方面，仍然缺乏系统性和客观性的分析。特别是对于多糖结构特征或关键信息与养阴功效之间的规律性认知，目前还显得较为薄弱。本研究从“构效关系”的角度出发，结合文献提取和数理研究方法，对养阴类中药及其多糖成分研究文献进行深度挖掘，以探索多糖的相对分子质量、单糖组成、糖苷键类型与养阴类中药生物效应的内在关联，为养阴类中药多糖的构效关系研究与开发利用提供了科学依据和参考。

1 数据与方法

1.1 数据来源

以人民卫生出版社出版的《中药学》第 4 版、中医药出版社出版的《中药学》（2018 年、2021 年、

2023 年)、《中华临床中药学》(2015 年)、《临床中药学》(2016 年、2021 年)中“养阴类中药”作为数据采集依据。以“枸杞多糖”“玉竹多糖”等养阴类中药多糖作为中文关键词,以“*Dendrobium polysaccharide*”“*Polygonatum odoratum polysaccharide*”等养阴类中药多糖作为英文关键词,分别在中国知网(China National Knowledge Infrastructure, CNKI)、万方数据学术论文总库(China Science Periodical Database, CSPD)、PubMed 及 Web of Science (SCI/SSCI/JCR)中检索文献,收集其名称、相对分子质量、单糖组成、糖苷键类型、生物效应等内容,建立养阴类中药多糖构效关系数据库。

1.2 数据规范

对养阴类中药多糖的生物活性遵循以下标准进行规范:(1)将免疫促进、免疫调节、免疫活性等规范为调节免疫;(2)将缓解细胞内的氧化应激作用等规范为抗氧化;(3)将调节心肌细胞内分泌功能、调节动脉粥样硬化、防治心血管疾病、调节血脂、降胆固醇、抗心肌缺血作用、抗血栓等规范为调节心血管系统;(4)将神经保护、改善记忆、改善睡眠、改善学习记忆障碍、改善学习能力、抗疲劳、抗应激能力、修复大脑记忆、改善阿尔茨海默病、抗阿尔茨海默病等规范为调节神经系统;(5)将抗肿瘤血管生成、抗增殖等规范为抗肿瘤;将对酒精脱氢酶的影响等规范为调节酶活性;(6)将治疗糖尿病、抗糖基化等规范为降血糖;(7)将抗菌、抗溃疡、胃溃疡等规范为抑菌。数据规范后,养阴类中药多糖的生物效应分为 12 个方面,包括调节免疫、抗氧化、降血糖、调节神经系统、抗肿瘤、调节心血管系统、抗炎、抑菌、调节酶活性、抗衰老、抗辐射、抗肥胖。

对养阴类中药多糖的相对分子质量遵循以下标准进行规范:相对分子质量 $>1\times 10^5$ 的养阴类中药多糖为高相对分子质量多糖,相对分子质量为 $1\times 10^4\sim 1\times 10^5$ 的养阴类中药多糖为中等相对分子质量多糖,相对分子质量 $<1\times 10^4$ 的养阴类中药多糖为低相对分子质量^[18]。

1.3 数据挖掘方法

1.3.1 数据剔除 对养阴类中药多糖进行编号,采用 Microsoft Excel 2018 软件建立数据表。剔除仅研究养阴类中药多糖结构或仅研究养阴类中药多糖生物效应的文献。对养阴类中药多糖的糖苷键类型进行统计分析,剔除对应的生物效应频次 <10 的糖

苷键类型。对养阴类中药多糖的单糖组成进行分析,剔除对应的生物效应频次 <30 的单糖类型。

1.3.2 关联分析 通过 IBM SPSS Statistics 25 对养阴类中药多糖的相对分子质量、单糖组成、糖苷键类型进行双变量相关性分析,相关系数设置为皮尔逊,显著性检验设置为双尾。运用 IBM SPSS Modeler 18.0 对养阴类中药多糖的相对分子质量、单糖组成、糖苷键类型与其生物效应进行关联规则分析,设置最低支持度为 15%、最小规则置信度为 20%、最大前项数为 3,并利用 Origin 2021 分别绘制养阴类中药多糖的相对分子质量、单糖组成、糖苷键类型与生物效应提升度的弦图,根据不同板块的面积大小考察养阴类中药多糖结构与生物效应的相关性。

2 结果与分析

2.1 养阴类中药多糖生物效应的频次统计分析

根据上述方法,对来源的全部数据进行规范和剔除,符合要求的养阴类中药共 17 种,包括百合、北沙参、楮实子、枸杞子、黑芝麻、黄精、麦冬、明党参、墨旱莲、南沙参、女贞子、桑葚、沙棘、石斛、天冬、银耳、玉竹。符合要求的中文文献 109 篇,英文文献 111 篇,符合要求的养阴类中药多糖 513 个,其中石斛多糖 111 个、麦冬多糖 65 个、桑葚多糖 55 个、枸杞多糖 42 个、黄精多糖 42 个、银耳多糖 36 个、玉竹多糖 35 个、百合多糖 34 个、天冬多糖 24 个、沙棘多糖 18 个、南沙参多糖 16 个、女贞子多糖 10 个、墨旱莲多糖 9 个、楮实子多糖 7 个、北沙参多糖 4 个、明党参多糖 3 个、黑芝麻多糖 2 个,如表 1 所示。根据数据规范,对符合纳入标准所收录的 513 个养阴类中药多糖的生物效应进行归类,其生物效应频次统计如表 2 所示。

统计分析发现,所收录的养阴类中药多糖生物效应集中分布为抗氧化、调节免疫和降血糖(图 1),频次(占比)分别为 172 (34%)、146 (29%)和 52

表 1 养阴类中药多糖的种类与频次

Table 1 Types and frequency of polysaccharides from yin-nourishing traditional Chinese medicines

多糖名称	频次	多糖名称	频次	多糖名称	频次
石斛多糖	111	玉竹多糖	35	墨旱莲多糖	9
麦冬多糖	65	百合多糖	34	楮实子多糖	7
桑葚多糖	55	天冬多糖	24	北沙参多糖	4
枸杞多糖	42	沙棘多糖	18	明党参多糖	3
黄精多糖	42	南沙参多糖	16	黑芝麻多糖	2
银耳多糖	36	女贞子多糖	10		

表 2 养阴类中药多糖中频次>4 的生物效应

Table 2 Biological effects of polysaccharides from yin-nourishing traditional Chinese medicines with frequency greater than four

生物效应	频次	生物效应	频次
抗氧化	172	调节神经系统	22
调节免疫	146	抑菌	10
降血糖	52	调节酶活性	7
抗肿瘤	32	抗肥胖	7
调节心血管系统	31	抗衰老	6
抗炎	23	抗辐射	5

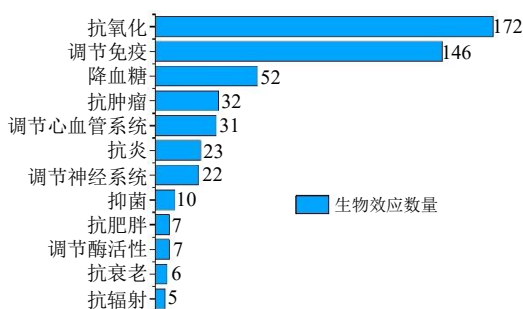


图 1 养阴类中药多糖中频次>4 的生物效应

Fig. 1 Biological effects of polysaccharides from yin-nourishing traditional Chinese medicines with frequency greater than four

(10%)。牧丹等^[19]通过体外活性实验发现,天冬多糖具有显著的免疫调节活性,能够有效促进脾脏中淋巴细胞的增殖,上调肿瘤坏死因子- α (tumor necrosis factor- α , TNF- α)、白细胞介素-1 β (interleukin-1 β , IL-1 β) 和 IL-6 等细胞因子的分泌水平。文丹等^[20]证明麦冬多糖在体外实验中展现出与抗坏血酸相似的抗氧化能力,能有效清除 2,2-二苯基-1-苦味肼 (2,2-diphenyl-1-bitter-hydrazine, DPPH) 和羟基自由基。同时,在 H_2O_2 诱导的细胞损伤模型中,麦冬多糖也显示出良好的抗氧化活性。杨绍春等^[21]研究表明,黄精多糖能够提高艾滋病患者体内关键的免疫细胞 $CD4^+T$ 水平,具有免疫调节作用。王世伟等^[22]建立了 2 型糖尿病大鼠模型,发现玉竹多糖具有降血糖作用,能有效提升模型大鼠的空腹胰岛素、C-肽、糖化血红蛋白的水平以及超氧化物歧化酶 (superoxide dismutase, SOD) 的活性,同时显著降低磷酸化-c-Jun 氨基末端激酶蛋白和核因子- κB 蛋白的表达水平。

除了上述 3 种最主要的生物效应外,养阴类中药多糖的生物效应还集中于抗肿瘤 (频次为 32)、

调节心血管系统 (频次为 31)、抗炎 (频次为 23) 和调节神经系统 (频次为 22)。如多花黄精多糖能够显著抑制 HeLa 细胞的增殖,引发细胞自噬,具有显著的抗肿瘤活性^[23]。

2.2 养阴类中药多糖结构特点与生物效应的统计分析

养阴类中药多糖的相对分子质量范围广泛 ($1 \times 10^4 \sim 1 \times 10^7$)^[24],由阿拉伯糖、葡萄糖、半乳糖等单糖通过糖苷键连接而成。养阴类中药多糖的主链通常由 α -1,4-糖苷键和 β -1,4-糖苷键构成,而支链与主链之间则主要依靠 α -1,6-糖苷键连接。养阴类中药多糖的相对分子质量大小、单糖组成、糖苷键类型等结构特征决定了其在生物体内的特定作用和生物效应^[25]。

2.2.1 养阴类中药多糖相对分子质量与生物效应的统计分析

养阴类中药多糖相对分子质量与其生物效应密切相关 (表 3)。相对分子质量 $>1 \times 10^5$ 的养阴类中药多糖在调节免疫 (频次为 69) 和抗氧化 (频次为 35) 方面起主导作用;相对分子质量 $1 \times 10^4 \sim 1 \times 10^5$ 的养阴类中药多糖在调节免疫 (频次为 36) 和抗氧化 (频次为 36) 等方面起主导作用;相对分子质量 $<1 \times 10^4$ 的养阴类中药多糖在抗氧化 (频次为 76)、调节免疫 (频次为 22) 和降血糖 (频次为 16) 等方面起主导作用。Liu 等^[26]在荷瘤小鼠模型中发现相对分子质量 $5 \times 10^4 \sim 1 \times 10^5$ 的枸杞多糖可增强复极化巨噬细胞对乳腺癌细胞的吞噬作用,具有调节免疫作用。

随着中药多糖相对分子质量的增加,其空间结构的复杂性也随之提高。不同养阴类中药多糖的高级结构各不相同,包括无序卷曲、单一螺旋、双螺旋、三螺旋、杆状、丝状、多孔状、片状和球状等。Liu 等^[26]研究发现相对分子质量 $5 \times 10^4 \sim 1 \times 10^5$ 的枸杞多糖呈现蜂窝状多孔结构,这种松散的网状结构有助于与巨噬细胞、树突状细胞和淋巴细胞等免疫细胞的表面受体结合,触发免疫反应 (图 2)。相对分子质量 $<1 \times 10^4$ 的多糖结构相对简单,空间位阻较小,更容易穿透组织而被细胞摄取,从而直接、快速进入胞内作用于 SOD 和谷胱甘肽过氧化物酶等抗氧化酶系统,清除自由基,减少氧化应激损伤^[27] (图 2)。此外,相对分子质量 $<1 \times 10^4$ 的多糖还可能通过增加胰岛素敏感性和改善葡萄糖代谢来发挥降血糖的作用 (图 2)。因此,养阴类中药多糖的生物效应与其相对分子质量密切相关,不

表 3 不同相对分子质量的养阴类中药多糖生物效应统计
Table 3 Statistics on biological effects of polysaccharides from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines with different relative molecular weights

生物效应	频次		
	$<1 \times 10^4$	$1 \times 10^4 \sim 1 \times 10^5$	$>1 \times 10^5$
抗氧化	76	36	35
调节免疫	22	36	69
降血糖	16	9	12
抗肿瘤	7	9	9
调节心血管系统	8	11	2
抗炎	5	11	4
调节神经系统	5	8	3
调节酶活性	1	0	5
抗肥胖	0	0	5
抗衰老	1	2	1
抑菌	0	1	3
抗辐射	1	0	1

同相对分子质量的多糖可能通过不同的作用机制发挥不同的生物效应。

2.2.2 养阴类中药多糖糖苷键与生物效应的统计分析 养阴类中药多糖中特定的糖苷键种类很大程度上影响其生物效应(表 4)。研究发现沙棘多糖主要是由 1→4、1→6 糖苷键构成,具有显著的抗氧化、抗菌、免疫调节等活性^[27-29]。Wu 等^[30]研究表明石斛多糖中的(1→4)-β-D-甘露糖苷键和 O-乙酰基团是其具有抗氧化作用的关键结构特征,这种链

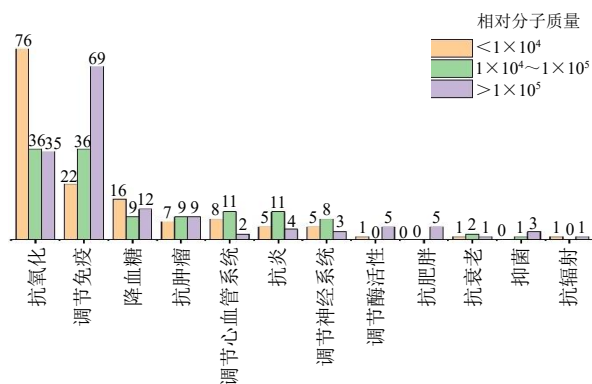


图 2 不同相对分子质量养阴类中药多糖的生物效应统计柱状图

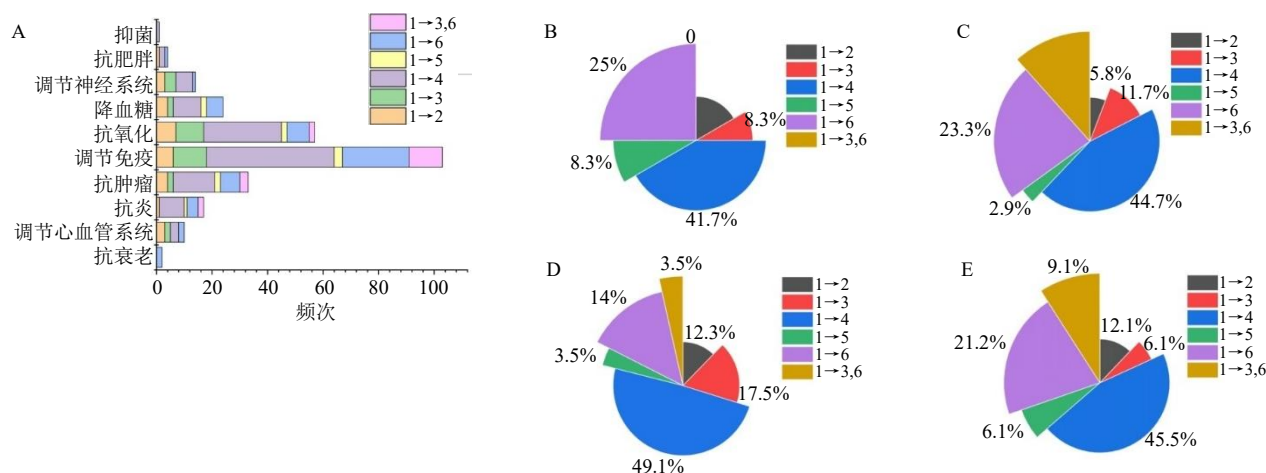
Fig. 2 Statistical histogram of biological effects of polysaccharides from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines with different relative molecular weights

接结构有助于清除自由基、保护细胞免受氧化损伤。陈璋辉等^[31]发现铁皮石斛多糖的免疫调节作用与其所含的 1→3 和 1→4 糖苷键有关。养阴类中药多糖主要由 1→4 糖苷键(频次为 120, 频率 45%)和 1→6 糖苷键(频次为 55, 频率 21%)组成,这表明 1→4 和 1→6 糖苷键在养阴类中药多糖发挥生物效应中至关重要。1→2 糖苷键、1→3 糖苷键、1→5 糖苷键和 1→3, 6 糖苷键占比相对较少。养阴类中药多糖糖苷键与生物效应相关统计见图 3-A,从图可以看出,具有调节免疫生物效应的养阴类中药多糖的糖苷键类型是最丰富的,包括 6 种糖苷键

表 4 不同糖苷键类型养阴类中药多糖的生物效应统计

Table 4 Statistics on biological effects of polysaccharides from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines with different glycosidic bond types

生物效应	频次					
	1→2 糖苷键	1→3 糖苷键	1→4 糖苷键	1→5 糖苷键	1→6 糖苷键	1→3,6 糖苷键
抗衰老	0	0	0	0	2	0
调节心血管系统	3	2	3	0	2	0
抗炎	1	0	9	1	4	2
抗肿瘤	4	2	15	2	7	3
调节免疫	6	12	46	3	24	12
抗氧化	7	10	28	2	8	2
降血糖	4	2	10	2	6	0
调节神经系统	3	4	6	0	1	0
抗肥胖	1	0	2	0	1	0
抑菌	0	0	1	0	0	0
总计	29	32	120	10	55	19
占比/%	11	12	45	4	21	7



A-不同糖苷键类型养阴类中药多糖的糖苷键堆积条形图; B-具有降血糖效应的糖苷键类型占比; C-具有调节免疫效应的糖苷键类型占比; D-具有抗氧化效应的糖苷键类型占比; E-具有抗肿瘤效应的糖苷键类型占比。

A-stack bar charts of polysaccharides from yin-nourishing traditional Chinese medicine with different glycosidic bond types; B-proportion of glycosidic bond types with hypoglycemic effect; C-proportion of glycosidic bond types with immune regulation effect; D-proportion of glycosidic bond types with antioxidant effect; E-proportion of glycosidic bond types with antitumor effect.

图 3 养阴类中药多糖糖苷键类型的相关统计图

Fig. 3 Statistical diagram of polysaccharides from yin-nourishing traditional Chinese medicines with different glycosidic bond types

类型, 其中 1→4 糖苷键、1→6 糖苷键和 1→3,6 糖苷键占比较多, 这表明具有高分支度和复杂糖苷键的养阴类中药多糖通常具有更强的免疫调节作用, 其分支结构有助于多糖与免疫细胞表面的受体特异性结合, 激活不同的免疫途径。此外, 养阴类中药多糖的抗氧化、抗肿瘤等生物效应都涵盖了 6 种主要的糖苷键类型, 这些复杂的糖苷键结构为其发挥生物效应提供了多个反应位点。1→4 糖苷键是养阴类中药多糖结构最重要的组成部分, 如 (1→4)- α -半乳糖糖苷键、(1→4)- α -葡萄糖糖苷键、(1→4)- β -甘露糖糖苷键等, 其在调节免疫、抗氧化、抗肿瘤、降血糖这 4 种主要生物效应中均占据超过 40% 的比例 (图 3-B~E)。因此, 糖苷键的类型、位置和复杂性决定了养阴类中药多糖的三维结构和功能, 不同糖苷键类型的活性取向不同, 可能通过不同的机制来发挥生物活性^[32]。

2.2.3 养阴类中药多糖单糖组成与生物效应的统计分析 多糖是由 10 个以上单糖通过糖苷键连接而成的聚糖^[33]。化学结构是多糖生物活性的基础, 结构变化或修饰可能赋予多糖新的生物活性或增加多糖的生物活性。单糖不仅影响多糖的生物活性, 而且是检测多糖最简单的指标之一。养阴类中药多糖主要由阿拉伯糖、半乳糖、葡萄糖、鼠李糖、甘露糖和果糖组成 (表 5), 单糖的种类和比例决定

表 5 不同单糖组成养阴类中药多糖的生物效应统计

Table 5 Statistics on biological effects of polysaccharides from yin-nourishing traditional Chinese medicines with different monosaccharide compositions

生物效应	频次					
	阿拉伯糖	半乳糖	葡萄糖	鼠李糖	甘露糖	果糖
调节酶活性	3	1	3	2	0	0
调节免疫	15	26	48	5	43	27
调节神经系统	4	3	3	2	3	0
调节心血管系统	2	4	8	2	3	2
抗肥胖	2	2	0	0	1	0
抗辐射	2	0	2	2	0	0
抗衰老	3	0	3	2	0	0
抗炎	1	2	7	1	5	0
抗氧化	20	30	53	14	39	29
抗肿瘤	3	4	5	2	13	0
抑菌	0	0	1	0	0	0
降血糖	4	10	16	0	10	3
总计	59	82	149	32	117	61
占比/%	12	17	30	6	23	12

了养阴类中药多糖的生物活性。

Chen 等^[34]通过 4 种方法提取得到不同桑椹多糖, 其中超声波提取法得到的桑椹多糖中糖醛酸比例最高, 其抗氧化和降血糖活性最强。Wang 等^[35]

研究结果表明,枸杞多糖中阿拉伯糖和半乳糖的占比与其免疫调节活性密切相关。阿拉伯半乳聚糖结构的多糖,尤其是相对分子质量较大的多糖具有更强的免疫调节活性。以上实验均表明养阴类中药多糖的单糖组成与生物效应相关。

如表 5 和图 4 所示,养阴类中药多糖最主要的单糖组成是葡萄糖(频次为 149,占比 30%),其次是甘露糖(频次为 117,占比 23%)、半乳糖(频次为 82,占比 17%)、阿拉伯糖(频次为 59,占比 12%)、果糖(频次为 61,占比为 12%)。其中占比最少的单糖组成是鼠李糖(频次为 32,占比 6%)。同一种养阴类中药多糖往往具有免疫调节和抗氧化等多种生物效应,这种多功能性可能与其多样的单糖组成和复杂的结构特性密切相关。

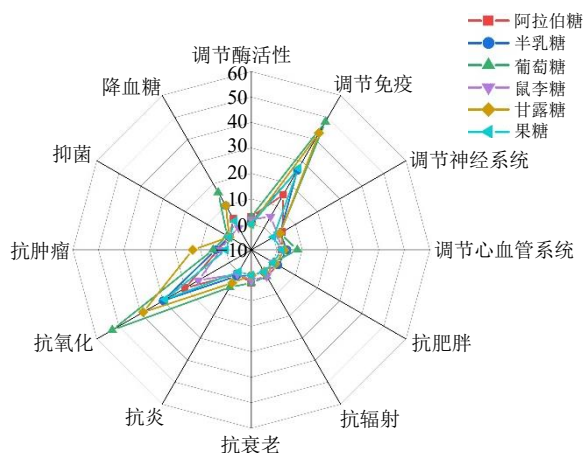


图 4 不同单糖组成养阴类中药多糖的生物效应统计雷达图
Fig. 4 Statistical radar chart of biological effects of polysaccharides from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines with different monosaccharide compositions

2.3 养阴类中药多糖结构与生物效应的相关性分析

如表 6 所示,养阴类中药多糖的相对分子质量、糖苷键类型以及单糖组成与生物效应的相关性显著性均小于 0.05,皮尔逊相关性数值均接近 1,表明养阴类中药多糖的结构与生物效应应具有相关性。

表 6 养阴类中药多糖结构与生物效应的相关性

Table 6 Correlation between structure and biological effects of polysaccharides from <i>yin</i> -nourishing traditional Chinese medicines			
相关性	相对分子质量	糖苷键类型	单糖组成
皮尔逊相关系数	0.996	0.871	0.842
显著性(双尾)	<0.000 1	<0.000 1	0.002

2.3.1 养阴类中药多糖相对分子质量与生物效应的相关性分析 养阴类中药多糖中相对分子质量与生物效应关联规则见表 7,相关性弦图如图 5 所示。养阴类中药多糖的抗氧化效应与相对分子质量 $<1\times10^4$ 的相关性最强(提升度为 2.30)。有研究表明,相对分子质量较小的多糖由于分子内氢键作用较弱,含有更多的游离氨基和羟基,使得它们更易于发挥其生物活性^[36-38]。养阴类中药多糖的调节免疫效应与相对分子质量具有相关性,其中与 $1\times10^4\sim1\times10^5$ 相关性最强(提升度 1.58),与 $>1\times10^5$ 相关性次强(提升度 1.40),提示相对分子质量较大的养阴类中药多糖具有高级空间结构,其能与巨噬细胞、淋巴细胞、树突状细胞等相互作用,免疫调节效应较强^[39-40]。除此之外,养阴类中药多糖的降血糖效应与相对分子质量 $<1\times10^4$ 相关性最强(提升度为 1.38),调节心血管系统效应与相对分子质量 $<1\times10^4$ 相关性最强(提升度为 1.15)。其余各相对分子质量段与各生物效应之间相关性相对较小或没有相关性。

表 7 养阴类中药多糖相对分子质量与生物效应关联规则分析

Table 7 Association rules analysis of relative molecular weight of polysaccharide from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines related to biological effects

相对分子质量(前项)	生物效应(后项)	提升度	相对分子质量(前项)	生物效应(后项)	提升度
$<1\times10^4$	抗氧化	2.30	$>1\times10^5$	抗肿瘤	0.60
$<1\times10^4$	降血糖	1.38	$>1\times10^5$	调节心血管系统	0.60
$<1\times10^4$	调节免疫	1.38	$1\times10^4\sim1\times10^5$	调节免疫	1.58
$<1\times10^4$	调节心血管系统	1.15	$1\times10^4\sim1\times10^5$	抗氧化	1.58
$<1\times10^4$	抗肿瘤	0.69	$1\times10^4\sim1\times10^5$	降血糖	1.05
$>1\times10^5$	抗氧化	2.20	$1\times10^4\sim1\times10^5$	调节神经系统	0.88
$>1\times10^5$	调节免疫	1.40	$1\times10^4\sim1\times10^5$	调节心血管系统	0.88
$>1\times10^5$	降血糖	1.00	$1\times10^4\sim1\times10^5$	抗炎	0.70
$>1\times10^5$	抗肥胖	0.80	$1\times10^4\sim1\times10^5$	抗肿瘤	0.70

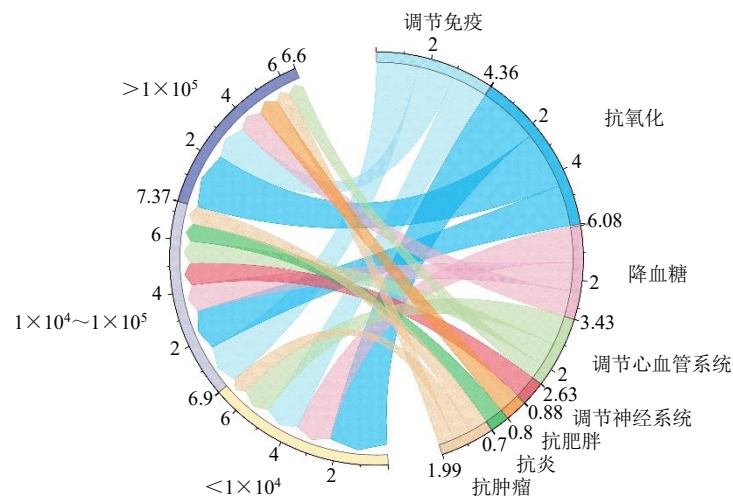


图 5 养阴类中药多糖相对分子质量与生物效应关联规则弦图

Fig. 5 Chord plot of association rules of relative molecular weight of polysaccharide from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines related to biological effects

2.3.2 养阴类中药多糖糖苷键与生物效应的相关性分析 养阴类中药多糖中糖苷键类型与生物效应关联规则见表 8，相关性弦图如图 6 所示。从糖苷键的角度来看，养阴类中药多糖中最丰富的 1→4 糖苷键类型与抗肿瘤和调节免疫效应相关性最强（提升度均为 2.11），与抗氧化、调节神经系统、抗炎、降血糖效应也具有相关性。1→6 糖苷键是养阴类中药多糖中比较丰富的糖苷键类型，其与抗氧化（提升度为 2.09）和调节免疫（提升度为 1.75）效应相关性较强。

从生物效应的角度来看，抗氧化效应与 1→3、1→2、1→6、1→4 糖苷键都具有明显的相关性，提

升度分别为 4.72、2.95、2.09 和 1.81。调节免疫效应除了与 1→4 和 1→6 糖苷键具有明显相关性外，还与 1→3 和 1→2 糖苷键具有明显相关性，其提升度分别为 3.54 和 1.77。这些结果表明糖苷键类型的丰富性在养阴类多糖发挥抗氧化效应和调节免疫效应中具有重要作用。糖苷键的类型和位置决定了养阴类中药多糖的三维空间结构，这直接影响其与生物大分子（如蛋白质、酶、受体等）的相互作用。不同类型的糖苷键会导致多糖形成不同的构象，从而使多糖具有不同的生物效应。

2.3.3 养阴类中药多糖单糖组成与生物效应的相关性分析 养阴类中药多糖中单糖组成与生物效

表 8 养阴类中药多糖糖苷键与生物效应关联规则分析

Table 8 Association rules analysis of glucoside bonds of polysaccharide from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines related to biological effects

糖苷键类型（前项）	生物效应（后项）	提升度	糖苷键类型（前项）	生物效应（后项）	提升度
1→6	抗氧化	2.09	1→3	调节免疫	3.54
1→6	调节免疫	1.75	1→3	调节心血管系统	1.18
1→6	降血糖	1.40	1→3	调节神经系统	1.18
1→6	抗肿瘤	1.40	1→3	降血糖	1.18
1→4	抗肿瘤	2.11	1→3	抗肿瘤	1.18
1→4	调节免疫	2.11	1→2	抗氧化	2.95
1→4	抗氧化	1.81	1→2	调节神经系统	1.77
1→4	调节神经系统	1.20	1→2	降血糖	1.77
1→4	抗炎	0.90	1→2	调节免疫	1.77
1→4	降血糖	0.90	1→2	调节心血管系统	1.18
1→3	抗氧化	4.72			

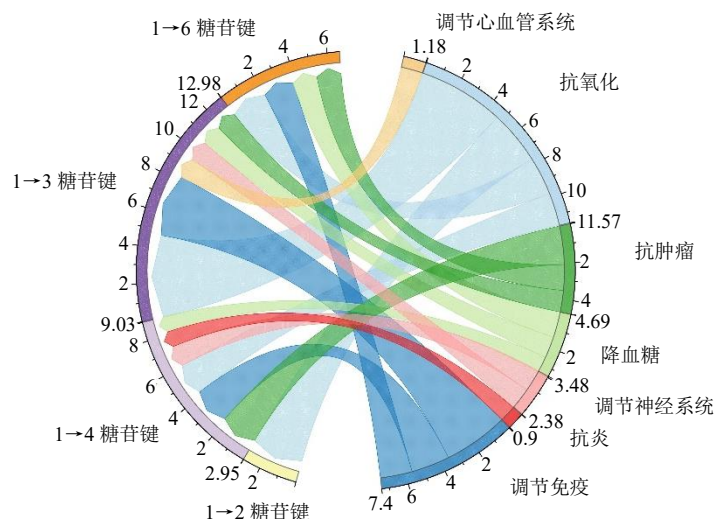


图 6 养阴类中药多糖糖苷键与生物效应关联规则弦图

Fig. 6 Chord plot of association rules of glucoside bonds of polysaccharide from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines related to biological effects

应关联规则见表 9，相关性弦图如图 7 所示。由表 9 可知，养阴类中药多糖的抗氧化效应与阿拉伯糖（提升度为 3.32）、鼠李糖（提升度为 2.79）和半乳糖（提升度 2.73）相关性较强，这些单糖可以通过清除自由基、抑制脂质过氧化以及增强细胞抗氧化酶的活性来发挥抗氧化作用。其中半乳糖、鼠李糖与抗氧化的相关性较强的结果与 Wang 等^[35]总结单糖组成和比例对多糖生物活性的影响研究进展所得出的结果一致。调节免疫效应与阿拉伯糖（提升度为 2.77）和葡萄糖（提升度为 2.73）相关性最强，这些单糖能够通过调节巨噬细胞、T 细胞和自然杀伤细胞的活性来增强免疫系统功能，从而提高机体抵抗疾病的能力。此外，抗炎效应与葡萄糖相关性最强（提升度为 1.71）。

从单糖组成来看，具有葡萄糖和半乳糖等单糖

组成养阴类中药多糖的生物效应最丰富，包含抗氧化、调节免疫、降血糖、抗炎、调节心血管系统、抗肿瘤等。其余各单糖组成与各生物效应之间相关性较小或没有相关性。

养阴类中药多糖的生物效应与其单糖组成密切相关。不同的单糖组成不仅决定了多糖的物理化学性质，还直接影响其在抗氧化、调节免疫、抗炎、抗肿瘤等方面的生物效应。深入研究多糖的单糖组成与生物效应之间的关联性，有助于优化养阴类中药多糖的提取与应用，提升其临床效果。

3 讨论

关联分析表明，养阴类中药多糖的研究大多集中于其免疫调节、抗氧化以及降血糖等生物活性，对于抗辐射、抗衰老、抗肥胖、调节酶活性等相关的生物效应研究较少。相关研究报道证实了养阴类

表 9 养阴类中药多糖单糖组成与生物效应关联规则分析

Table 9 Association rules analysis of monosaccharide composition of polysaccharide from *yin*-nourishing traditional Chinese medicines related to biological effects

单糖组成（前项）	生物效应（后项）	提升度	单糖组成（前项）	生物效应（后项）	提升度
鼠李糖	抗氧化	2.79	半乳糖	抗氧化	2.73
鼠李糖	调节免疫	1.40	半乳糖	调节免疫	2.05
葡萄糖	调节免疫	2.73	半乳糖	降血糖	1.37
葡萄糖	抗氧化	2.39	半乳糖	调节心血管系统	1.03
葡萄糖	降血糖	2.05	半乳糖	抗肿瘤	1.03
葡萄糖	抗炎	1.71	阿拉伯糖	抗氧化	3.32
葡萄糖	调节心血管系统	1.37	阿拉伯糖	调节免疫	2.77

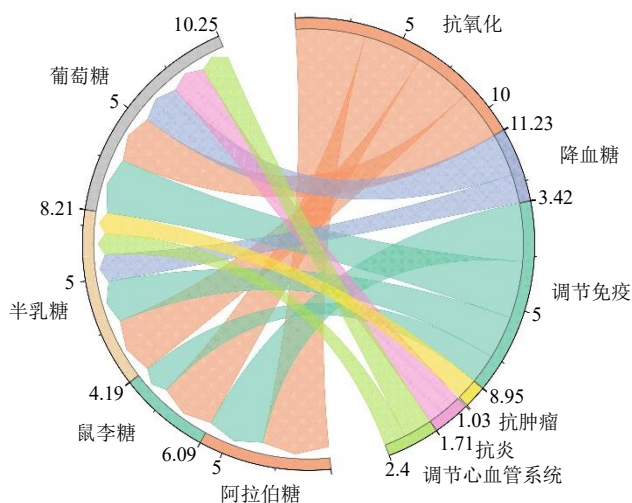


图 7 养阴类中药多糖单糖组成与生物效应关联规则弦图

Fig. 7 Chord plot of association rules of monosaccharide composition of polysaccharide from yin-nourishing traditional Chinese medicines related to biological effects

中药多糖具有调节免疫系统，提高机体的免疫功能，在预防和治疗因阴虚引起的免疫功能低下疾病时效果显著，这与其“扶正固本”之功效紧密相关。研究表明，天冬多糖增加小鼠的各类免疫，显著提升了实验小鼠免疫系统的全面功能^[41]。尚有报道，枸杞多糖能降低 α -淀粉酶和 α -葡萄糖苷酶的活性，从而达到降血糖的作用^[42]，表明养阴类中药多糖还能调节糖脂代谢，改善阴虚体质常伴的代谢紊乱。此外，大部分养阴类中药多糖如枸杞多糖、百合多糖、黄精多糖、麦冬多糖等均具有辅助抗肿瘤作用，从中医“扶正祛邪”法治疗肿瘤的理论来看，养阴类中药多糖能够补充阴液、增强身体的抵抗力。养阴类中药多糖还能改善微循环，其保水性和黏性有助于维持水分平衡、滋阴润燥、改善阴虚引起的干燥症状，同时还有助于缓解阴虚津亏导致的便秘，如麦冬多糖、玉竹多糖和黑芝麻多糖具有养血安神、活血化瘀的作用。综上表明，养阴类中药多糖类资源性物质与其功效具有紧密的关联。

通过数据挖掘方法对养阴类中药多糖的结构特点与生物效应进行了关联分析，结果表明，相对分子质量 $< 1 \times 10^4$ 与抗氧化效应相关性最强， $1 \times 10^4 \sim 1 \times 10^5$ 与调节免疫效应相关性最强。从糖苷键方面看，1 $\rightarrow$ 4 糖苷键类型与抗肿瘤和调节免疫效应相关性最强。从单糖组成方面看，葡萄糖与调节免疫效应相关性最强。虽然糖苷键类型和单糖组成各自具有相对独立的数据属性，通过分别分析可以更

明确地了解二者各自对生物效应的贡献，但养阴类中药多糖的糖苷键种类繁多，后续研究者在综合分析时应进一步明确单糖组成的基础上，结合具体的单糖和其对应的糖苷键类型与构型进行研究，以更全面地反映多糖结构对生物效应的影响机制。本研究初步认识到养阴类中药多糖类化学结构与其生物活性间存在的构效关系及其规律性。相信随着分析技术和生物技术的发展，人们对养阴类中药多糖的结构特征和生物活性机制的认识将会不断深入。

通过数据挖掘和关联分析，揭示其生物效应与相对分子质量、糖苷键类型和单糖组成的密切关联性，为养阴类中药多糖的构效关系研究与开发利用提供了借鉴和参考。为养阴类中药在医药、食品、化妆品等领域的开发利用和产品创制提供了科学依据，展现出广阔的应用前景。

展望未来，在探讨养阴类中药多糖时可根据本研究对多糖结构与其生物效应的关联性规律识别并揭示养阴类中药多糖的主要结构特征及其关键信息，或根据其结构特征推测其潜在的生物效应，亦可根据其生物效应推断其可能的关键结构信息。相信随着先进结构分析技术和生物活性评价技术的发展，养阴类中药多糖的结构特征与生物活性的关联性研究将会更加活跃，尤其是相对分子质量与生物效应的联系，糖苷键类型和数量与特定生物效应的关联，单糖组成及其不同排列与生物效应之间的关系。化学、生物学和药学等多学科交叉研究，

能够更深入地探讨养阴类中药多糖的重要结构特征、关键质量属性、药理作用机制,从而更全面探讨养阴类中药多糖的功能和应用潜力。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 郑琴, 冯怡, 徐德生. 养阴类中药成分与药理研究现状 [J]. 亚太传统医药, 2005, 1(4): 74-77.
- [2] 徐德生, 冯怡, 林晓, 等. 麦冬多糖 MDG-1 的分离纯化和结构分析 [J]. 药学学报, 2005, 40(7): 636-639.
- [3] 杜宝香. 北沙参多糖的分离纯化、结构表征及其生物药理活性研究 [D]. 济南: 山东中医药大学, 2019.
- [4] 黄钰婷. 益气养阴类方药治疗干燥综合征临床疗效的 meta 分析 [D]. 沈阳: 辽宁中医药大学, 2019.
- [5] 景永帅, 张浩, 程文境, 等. 北沙参多糖的提取工艺、理化性质和生物活性研究进展 [J]. 食品安全质量检测学报, 2022, 13(8): 2610-2617.
- [6] 陆佳岑, 薛畅, 姜程曦. 黄精及有效成分抗衰老作用机制的研究进展 [J]. 中草药, 2023, 54(14): 4732-4739.
- [7] Mu S, Yang W J, Huang G L. Antioxidant activities and mechanisms of polysaccharides [J]. *Chem Biol Drug Des*, 2021, 97(3): 628-632.
- [8] Yu Y, Shen M Y, Song Q Q, *et al*. Biological activities and pharmaceutical applications of polysaccharide from natural resources: A review [J]. *Carbohydr Polym*, 2018, 183: 91-101.
- [9] 汪文丽, 朱晓明, 刘小玲. 多糖生物活性影响因素研究进展 [J]. 化学与生物工程, 2024, 41(8): 9-17.
- [10] Liu T B, Ren Q Q, Wang S, *et al*. Chemical modification of polysaccharides: A review of synthetic approaches, biological activity and the structure-activity relationship [J]. *Molecules*, 2023, 28(16): 6073.
- [11] 王晓琴, 苏柯萌. 北沙参化学成分与药理活性研究进展 [J]. 中国现代中药, 2020, 22(3): 466-474.
- [12] Zhu Z Y, Liu X C, Fang X N, *et al*. Structural characteristics and anti-tumor activity of polysaccharides from cordyceps species [J]. *Acta Pharm Sin*, 2023, 58: 285-297.
- [13] 刘晓轩, 张驰, 黄思琪, 等. 黄精多糖类物质研究现状及发展动态的文献计量学分析 [J]. 中草药, 2023, 54(21): 7130-7141.
- [14] Wang Y J, Li Q M, Zha X Q, *et al*. Intervention and potential mechanism of non-starch polysaccharides from natural resources on ulcerative colitis: A review [J]. *Int J Biol Macromol*, 2022, 210: 545-564.
- [15] 姜南辉. 女贞子的化学成分及药理作用 [J]. 河南中医, 2015, 35(11): 2848-2849.
- [16] 龚欢, 覃宝怡, 施松善, 等. 制黄精多糖的结构表征及其抗氧化活性研究 [J]. 中草药, 2024, 55(16): 5418-5427.
- [17] 崔永霞, 尚子慧, 侯亚迪, 等. 基于血清代谢组学探究山茱萸多糖对 2 型糖尿病大鼠的干预机制 [J]. 中草药, 2024, 55(9): 2976-2986.
- [18] 姚安妮, 汤燕, 罗大英, 等. 药用植物资源多糖类成分相对分子质量与其功效关联性的分析与展望 [J]. 中国中药杂志, 2024, 49(5): 1186-1195.
- [19] 牧丹, 萨仁高娃, 包良, 等. 天冬多糖的结构、免疫调节活性及体外抗氧化活性 [J]. 中国食品学报, 2022, 22(8): 51-60.
- [20] 文丹, 付成, 丁菲. 麦冬多糖的抗氧化、降血糖活性研究 [J]. 江汉大学学报: 自然科学版, 2023, 51(3): 55-67.
- [21] 杨绍春, 段呈玉, 赵竞, 等. 中医药治疗对 HIV/AIDS 患者 CD4 计数变化的临床分析研究 [J]. 云南中医中药杂志, 2011, 32(10): 18-20.
- [22] 王世伟, 徐宁. 玉竹多糖对糖尿病大鼠降糖作用及机制研究 [J]. 辽宁中医杂志, 2017, 44(8): 1739-1741.
- [23] 李玲. 连续制备的多花黄精多糖的理化性质及活性研究 [D]. 合肥: 合肥工业大学, 2018.
- [24] 韩陶, 陈彦, 瞿鼎. 天然多糖及其纳米递药系统调控肿瘤微环境的研究进展 [J]. 药学学报, 2021, 56(12): 3212-3223.
- [25] Xu Y, Wu Y J, Sun P L, *et al*. Chemically modified polysaccharides: Synthesis, characterization, structure activity relationships of action [J]. *Int J Biol Macromol*, 2019, 132: 970-977.
- [26] Liu M Q, Bao C J, Liang X F, *et al*. Specific molecular weight of *Lycium barbarum* polysaccharide for robust breast cancer regression by repolarizing tumor-associated macrophages [J]. *Int J Biol Macromol*, 2024, 261(Pt 1): 129674.
- [27] 秦蕾. 沙棘叶多糖的提取、功能及其分子修饰的研究 [D]. 哈尔滨: 东北林业大学, 2010.
- [28] 宋亮, 张威, 董仕超, 等. 沙棘多糖的提取纯化及其对巨噬细胞的作用研究 [J]. 内蒙古农业大学学报: 自然科学版, 2013, 34(5): 87-92.
- [29] Tian X Y, Liu Y J, Zhu H Y, *et al*. Purification, identification of polysaccharide HRPIa of *Hippophae rhamnoides* L. [J]. *J Food Sci*, 2010, 29(1): 23-26.
- [30] Wu Y G, Wang K W, Zhao Z R, *et al*. A novel polysaccharide from *Dendrobium devonianum* serves as a TLR4 agonist for activating macrophages [J]. *Int J Biol Macromol*, 2019, 133: 564-574.
- [31] 陈璋辉, 陈云龙, 吴涛, 等. 细茎石斛多糖 DMP4a-1 的结构特性及免疫活性研究 [J]. 中国药理学杂志, 2005, 40(23): 1781-1784.
- [32] 刘思, 宋娟, 洋雯茜, 等. 枸杞多糖结构特征、生物活性及其降解研究进展 [J]. 中草药, 2025, 56(4): 1440-1455.

- [33] 朱赤云, 肖平, 方悦悦, 等. 多糖体内过程与免疫调节机制研究方法和技术进展 [J]. 药学报, 2024, 59(02): 322-335.
- [34] Chen C, Wang P P, Huang Q, *et al.* A comparison study on polysaccharides extracted from *Fructus Mori* using different methods: Structural characterization and glucose entrapment [J]. *Food Funct*, 2019, 10(6): 3684-3695.
- [35] Wang Z C, Zheng Y, Lai Z R, *et al.* Effect of monosaccharide composition and proportion on the bioactivity of polysaccharides: A review [J]. *Int J Biol Macromol*, 2024, 254: 127955.
- [36] Li X, Peng B, Cheung P C, *et al.* Depolymerized non-digestible sulfated algal polysaccharides produced by hydrothermal treatment with enhanced bacterial fermentation characteristics [J]. *Food Hydrocoll*, 2022, 130: 107687.
- [37] Zhu B W, Ni F, Xiong Q, *et al.* Marine oligosaccharides originated from seaweeds: Source, preparation, structure, physiological activity and applications [J]. *Crit Rev Food Sci Nutr*, 2021, 61(1): 60-74.
- [38] Brasselet C, Pierre G, Dubessay P, *et al.* Modification of chitosan for the generation of functional derivatives [J]. *Appl Sci*, 2019, 9(7): 1321.
- [39] Zhao T, Yang M, Ma L N, *et al.* Structural modification and biological activity of polysaccharides [J]. *Molecules*, 2023, 28(14): 5416.
- [40] Torres F G, Troncoso O P, Pisani A, *et al.* Natural polysaccharide nanomaterials: An overview of their immunological properties [J]. *Int J Mol Sci*, 2019, 20(20): 5092.
- [41] 汤小蕾. 天冬多糖对小鼠免疫功能影响的实验研究 [J]. 中医药导报, 2014, 20(10): 83-84.
- [42] 郭峰, 董晓婷. 枸杞多糖的降血糖活性研究 [J]. 食品工业, 2024, 45(3): 136-140.

[责任编辑 潘明佳]