

本文节译自:

Zhang WJ. 2017. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines: (II) Relational networks and pharmacological mechanisms of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines. *Network Pharmacology*, 2(2): 38-66

中草药属性与功效网络药理学: (II) 中草药属性与功效关系网络及药理机制

Zhang WJ

E-mail: zhwj@mail.sysu.edu.cn, wjzhang@iaees.org

摘要

本研究首次全面定量的阐述了中草药属性与功效的关系。首先,在前期工作基础上选用 1127 种中草药,共 125 个属性的数据。其中包括 7 个味属性,5 个药性属性,1 个毒性属性,22 个化学成份类别,12 个归经,78 种功效。计算了属性间的点相关,构造出属性与功效关系网络,化学成份-归经关系网络,归经-功效关系网络,以及归经关系网络。网络分析结果表明,前三者均为无尺度复杂网络,归经关系网络偏向随机网络,节点度均符合幂律分布。给出了较为详尽的属性与功效关系,以及药理机制。例如,在化学成份关系和机制方面,生物碱类与胺类有正相关对应,生物碱类多,则胺类一般也多。生物碱类与挥发油类/油类、糖类/淀粉、(黄)酮类、烯类有负相关对应。生物碱类主攻降火、燥湿等。有机酸类与生物碱类有负相关对应,有机酸类多,则生物碱类少。有机酸类主要作用于大肠经,主攻润燥。在归经方面,肾经与肺、胃、大肠经有负相关对应,正功效于补肾/温肾、壮阳/温阳/益精、强筋骨、止泻、调经/通淋、祛风湿/利关节,负功效于清热、解毒。

关键词 中草药, 药性, 功效, 属性, 点相关, 网络, 药理机制。

1 引言

近 20 多年来,药物设计的成功案例显著下降。由于药物功效不彰和毒副作用,临床试验中的失败病例达药物设计失败病例的一半以上,原因主要在于传统药理学中基于单药物-单靶标-单疾病观点的药物设计思想(Hopkins, 2007, 2008; Budovsky and Fraifeld, 2012; Zhang, 2016b, c)。复杂疾病通常并非单分子的突变或功能障碍,而通常由整体调节网络的功能障碍所引起(Zhang, 2016a, b, 2017)。即使单个分子变化不明显,多个分子也可能会共同导致整个信号路径的显著变化。从而,基于生物网络的疾病研究和治疗渐成趋势。中医药理论以生物网络调节为基本思想,从而为解决疾病防治和药物研发问题提供了新途径。然而众所周知,中医药、尤其是中草药主要集中在中草药属性和功效的表面化描述等数方面,对其内部关系和功效机制等,缺乏合理的解释。因而,建立更为合理的解释体系很有必要。通过这些基础研究,可修正药性认识的偏差,进一步丰富、完善和发展药性理论(王淑贤, 2012)。过去有人用从宏观上对中草药四气与功效、药物自然属性、五味等进行过分析研究。Zhang (2017) 对 1127 种中草药属性进行了较详尽的统计分析,计算和分析了总数、频率、百分数等统计量。对 1127 种中草药,按科别对属性进行了分析。得到了中草药药性和功效的各种属性统计量。然而,在这方面仍然缺乏广泛和深入的研究报道。本研究在前期工作基础上,较为详尽的探讨了中草药属性间关系、关系网络及药理机制,以期中草药理论与应用研究,提供一些应用基础。

2 材料与方法

2.1 数据来源

基于中国药典和中华本草等，主要选取了已有化学成份相关记载的中草药，共 1127 种，涉及 210 个科，约 2000 种药用植物和真菌。其中，药用植物占 98.94%，药用真菌占 1.06%，总计约占中国药用植物和真菌总数的 1/5。根据比较归纳，确定了 22 个药用部位，7 个味属性，5 个药性属性，1 个毒性属性，22 个化学成份类别，12 个归经，78 种功效。对选定的 1127 种中草药，按药名，种，科，药用部位，味属性，性属性，有毒与否，有效成份类型，归经，及功效属性等进行数值编码；对缺失属性类，也予以标记。最后，形成一个交互式编码数据库，CHM-DATA Version 1.0，共含 8 个表(Zhang, 2017)。药用部位在本研究中没有意义，不予应用。分析时，有缺失属性类的中草药，不参加计算。

2.2 分析方法

2.2.1 点相关

设共有 n 个中草药。属性 x 与属性 y 同时为某中草药所具有的中草药数为 a ，属性 x 与属性 y 同时为某中草药所不具有的中草药数为 d ，某中草药具有属性 x 而不具有属性 y 的中草药数为 c ，某中草药具有属性 y 而不具有属性 x 的中草药数为 b 。显然有 $n=a+b+c+d$ 。

计算属性 x 与属性 y 的点相关 r (张文军, 2007; Zhang, 2012b, 2014, 2015b; Zhang et al., 2014; 张尧庭, 方开泰, 1982)

$$r=(ad-bc)/[(a+b)(c+d)(a+c)(b+d)]^{1/2}$$

点相关 r 的取值范围是 $[-1, 1]$ 。若 $r=0$ ，表明属性 x 与属性 y 之间不存在点相关关系；若 $0<r\leq 1$ ，表明属性 x 与属性 y 之间存在正的点相关关系，且 r 愈大，则正的点相关关系愈强；若 $-1\leq r<0$ ，表明属性 x 与属性 y 之间存在负的点相关关系，且 r 愈小，则负的点相关关系愈强。

检验点相关关系的显著性。对点相关，计算

$$\chi^2=n(ad-bc)^2/[(a+b)(c+d)(a+c)(b+d)]$$

$\chi^2>\chi_{\alpha}^2(1)$ ，则在 α 的置信水平上认为，属性 x 与属性 y 之间的点相关关系显著。

以下是点相关系数及其显著性检验的 Matlab 函数 pointCorrTest.m

```
%Zhang WJ. 2017. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines:
%(II) Relational networks and pharmacological mechanisms of medicinal attributes and functions of Chinese
%herbal medicines. Network Pharmacology, 2(2): 38-66
function [pointcorr,sigpairs]= pointCorrTest(d,sig)
%Matrix d - rows: medicines; columns: attributes; sig=0.01, 0.001, 0.005, etc.
%pointcorr: matrix of between-attribute point correlations; sigpairs: attribute pairs at significant statistic
%level and corresponding point correlations.
m=size(d,2); n=size(d,1);
for i=1:m-1
for j=i:m
x=d(:,i); y=d(:,j);
aa=sum((x==0) & (y==0));
bb=sum((x==0) & (y~=0));
cc=sum((x~=0) & (y==0));
```

```

dd=sum((x~=0) & (y~=0));
pointcorr(i,j)=(aa*dd-bb*cc)/sqrt((aa+bb)*(cc+dd)*(aa+cc)*(bb+dd));
chi2(i,j)=n*(aa*dd-bb*cc)^2/((aa+bb)*(cc+dd)*(aa+cc)*(bb+dd));
pointcorr(j,i)=pointcorr(i,j);
chi2(j,i)=chi2(i,j);
end; end
chi2test=chi2>chi2inv(1-sig,1);
%chi2=10.8 for alpha=0.001; chi2=6.635 for alpha=0.01; chi2=7.87 for alpha=0.005
sigmat=chi2test.*pointcorr-eye(m);
[pairx,pairy,corrvalues]=find(sigmat);
temp1=pairx; temp2=pairy;
pairxs=pairx(temp1<temp2);
pairys=pairy(temp1<temp2);
corrvaluess=corrvalues(temp1<temp2);
sigpairs=[pairxs pairys corrvaluess]

```

2.2.2 网络图方法

最短路径，为网络图中从一结点到另一结点的最短路径。本研究用 Floyd 方法(Floyd, 1962; Zhang, 2012b, 2016a) 寻找属性链。

应用网络类型检测方法，确定网络类型(Zhang, 2012b; Zhang and Zhan, 2011)。

以网络连通性计算方法，计算连通块(Zhang, 2012b, 2016b)。

3 结果与分析

3.1 点相关与关系网络

3.1.1 属性与功效关系网络

根据计算和检验，得到点相关显著的成对属性及点相关($\alpha=0.005$)，见表 1。由这些点相关显著的成对属性，可得到中草药属性与功效关系网络(Zhang, 2011, 2012a-c)，见图 1。在此统计网络中，共有 587 个链接。

在一定意义上，图 1 的中草药属性与功效关系网络，及表 1 点相关显著的成对属性及点相关，描绘了中草药属性与功效的网络药理学机制。

为了更全面的反映这种机制，本文也列出了 $\alpha=0.01$ 水平上点相关显著的成对属性及点相关，见附表 1(只列出表 1 所没有的部份)。 $\alpha=0.01$ 水平上的网络药理学机制，更为详尽(692 个链接)，但置信度有所降低。因此，本文重点讨论 $\alpha=0.005$ 水平上的网络药理学。

对图 1 的网络，应用网络类型检测方法，得到度分布的斜度为 0.1341，网络聚集指数为 1.5407，变异系数为 6.1152，熵为 48.0418，从而判断为复杂网络。二项分布 $p=0.242$ ， $\chi^2=46.6529$ ，Poisson 分布 $\lambda=9.392$ ， $\chi^2=38578.6158$ ，判断为非随机网络。指数分布 $\lambda=0.1065$ ， $\chi^2=44.3965$ ，判断为非指数分布网络。幂律分布 $\alpha=2.8498$ ， $x_{\min}=7$ ，Kolmogorov-Smirnov 拟合优度 $D=0.1389$ ；节点度符合幂律分布，密度函数为 $p(x)=x^{-2.8498}$ ， $x \geq 7$ 。显然，从各种指标综合来看，这是一个无尺度复杂网络。

网络连通性计算结果是，该网络有 6 个连通块。其中有 5 个块各只含 1 个节点(属性)，均为孤立节点。

3.1.2 化学成份-归经关系网络

在上述网络中，化学成份-归经关系网络是直接反映药理机制的子网络之一。图 2 即为化学成份-归经关系网络。

化学成份-归经关系网络度分布的斜度为 0.3956, 网络聚集指数为 1.1963, 变异系数为 1.803, 熵为 3.2121, 从而判断为复杂网络。二项分布 $p=0.4118$, $\chi^2=40.9913$, Poisson 分布 $\lambda=4$, $\chi^2=52.2854$, 判断为非随机网络。指数分布 $\lambda=0.25$, $\chi^2=9.9663$, 判断为指数分布网络。幂律分布 $\alpha=4.0365$, $x_{\min}=4$, Kolmogorov-Smirnov 拟合优度 $D=0.2289$; 节点度符合幂律分布, 密度函数为 $p(x)=x^{-4.0365}$, $x \geq 4$ 。显然, 从各种指标综合来看, 这是一个无尺度复杂网络。从各指标看, 复杂性低于图 1 的属性与功效关系网络。

网络连通性计算结果是, 该网络有 3 个连通块。其中有 2 个块各只含 1 个节点(属性), 均为孤立节点。

3.1.3 归经-功效关系网络

归经-功效关系网络反映人体的自组织结构。图 3 即为归经-功效关系网络。

归经-功效关系网络度分布的斜度为 0.2133, 网络聚集指数为 1.4401, 变异系数为 3.7343, 熵为 16.8312, 判断为复杂网络。二项分布 $p=0.2431$, $\chi^2=28.1421$, Poisson 分布 $\lambda=6.1556$, $\chi^2=2409.9121$, 判断为非随机网络。指数分布 $\lambda=0.1625$, $\chi^2=29.5096$, 判断为指数分布网络。幂律分布 $\alpha=5.1216$, $x_{\min}=13$, Kolmogorov-Smirnov 拟合优度 $D=0.1306$; 节点度符合幂律分布, 密度函数为 $p(x)=x^{-5.1216}$, $x \geq 13$ 。从各种指标综合来看, 归经-功效关系网络是一个无尺度复杂网络。

3.1.4 归经关系网络

归经关系网络反映人体的自组织结构。图 4 即为归经关系网络。

归经关系网络度分布的斜度为 0.8299, 网络聚集指数为 0.9379, 变异系数为 0.8364, 熵为 -0.9041, 判断为随机网络。二项分布 $p=0.5208$, $\chi^2=1.874$, Poisson 分布 $\lambda=2.5$, $\chi^2=0.2509$, 判断为随机网络。指数分布 $\lambda=0.4$, $\chi^2=21.1263$, 判断为非指数分布网络。幂律分布 $\alpha=3.5576$, $x_{\min}=2$, Kolmogorov-Smirnov 拟合优度 $D=0.3122$; 节点度符合幂律分布, 密度函数为 $p(x)=x^{-3.5576}$, $x \geq 2$ 。从各种指标综合来看, 归经关系网络偏向随机网络。

网络连通性计算结果是, 该网络有 3 个连通块。其中有 1 个块只含 1 个节点(属性), 1 个块含 2 个节点(属性)。

表 1 点相关显著的成对属性及点相关($\alpha=0.005$)

Attribute	属性	Attribute	属性	r	Attribute	属性	Attribute	属性	r
Bitter	苦	Sweet	甘	-0.4051	Anthracene or quinones	蒽类/醌类	Antihypertension	降压	0.1541
Bitter	苦	Light	淡	-0.211	Tannins	鞣质类	Astringe intestine	涩肠	0.1491
Bitter	苦	Sour	酸	-0.2008	Tannins	鞣质类	Stop bleeding	止血	0.1389
Bitter	苦	Cold	寒	0.2463	Tannins	鞣质类	Promote astringent function	收敛	0.1453
Bitter	苦	Temperate	平	-0.1084	Vitamins	维生素类	Inorganic substances	无机物	0.3848
Bitter	苦	Warm	温	-0.1917	Vitamins	维生素类	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.1078
Bitter	苦	Toxic	毒	0.1775	Vitamins	维生素类	Promote secretion of saliva or body	生津	0.1504
Bitter	苦	Alkaloids	生物碱类	0.117	Vitamins	维生素类	Antiatherosclerosis	降血脂	0.1264
Bitter	苦	Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	-0.1109	Vitamins	维生素类	Anti-aging	抗衰老	0.1264
Bitter	苦	Aldehydes	醛类	-0.1062	Vitamins	维生素类	Relieve pain	止痛	-0.1265
Bitter	苦	Olefins	烯类	-0.1064	Vitamins	维生素类	Quench ones thirst	止渴	0.1164
Bitter	苦	Vitamins	维生素类	-0.1808	Vitamins	维生素类	Relieve summer-heat	解暑/消暑	0.1164
Bitter	苦	Spleen meridians and collaterals	脾	-0.1137	Inorganic substances	无机物	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.1516
Bitter	苦	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	-0.111	Inorganic substances	无机物	Stop diarrheal	止泻	0.1235
Bitter	苦	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	-0.1194	Inorganic substances	无机物	Antiatherosclerosis	降血脂	0.1264

Bitter	苦	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	-0.1729	Inorganic substances	无机物	Relieve pain	止痛	-0.1146
Bitter	苦	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	-0.1187	Liver meridians and collaterals	肝	Lung meridians and collaterals	肺	-0.2843
Bitter	苦	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	-0.1502	Liver meridians and collaterals	肝	Stomach meridians and collaterals	胃	-0.1819
Bitter	苦	Clear away heat	清热	0.17	Liver meridians and collaterals	肝	Large intestine meridians and collaterals	大肠	-0.1483
Bitter	苦	Detoxification	解毒	0.1069	Liver meridians and collaterals	肝	Small intestine meridians and collaterals	小肠	-0.1283
Bitter	苦	Decrease internal heat	降火	0.1271	Liver meridians and collaterals	肝	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes or eliminate eye screens	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	0.235
Bitter	苦	Dispel endogenous cold	祛寒	-0.1487	Liver meridians and collaterals	肝	Strengthen bones and muscles	强筋骨	0.1337
Symplectic	辛	Sweet	甘	-0.3608	Liver meridians and collaterals	肝	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	-0.1579
Symplectic	辛	Light	淡	-0.1752	Liver meridians and collaterals	肝	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	-0.1488
Symplectic	辛	Sour	酸	-0.1646	Liver meridians and collaterals	肝	Anti-asthma	平喘/定喘	-0.1111
Symplectic	辛	Astringent	涩	-0.1872	Liver meridians and collaterals	肝	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	-0.1211
Symplectic	辛	Cold	寒	-0.2817	Liver meridians and collaterals	肝	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	-0.1729
Symplectic	辛	Cool	凉	-0.1142	Liver meridians and collaterals	肝	Promote secretion of saliva or body	生津	-0.1026
Symplectic	辛	Warm	温	0.4221	Liver meridians and collaterals	肝	Relieve sore throat	利咽	-0.1068
Symplectic	辛	Hot	热	0.1452	Liver meridians and collaterals	肝	Strengthen heart or clean heart-fire	强心/清心	-0.1259
Symplectic	辛	Toxic	毒	0.1639	Liver meridians and collaterals	肝	Cool blood	凉血	0.105
Symplectic	辛	Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	0.2202	Liver meridians and collaterals	肝	Stop bleeding	止血	0.1121
Symplectic	辛	Phenols	酚类	0.1104	Liver meridians and collaterals	肝	Invigorate blood circulation	活血	0.2046
Symplectic	辛	Aldehydes	醛类	0.1305	Liver meridians and collaterals	肝	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	化瘀/消痈/敛疮	0.1822
Symplectic	辛	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	-0.1197	Liver meridians and collaterals	肝	Regulate menstruation or promote blood flow	调经/通淋	0.1513
Symplectic	辛	Alcohols	醇类	0.1508	Liver meridians and collaterals	肝	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	-0.1269
Symplectic	辛	Olefins	烯类	0.2366	Liver meridians and collaterals	肝	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	-0.16
Symplectic	辛	Spleen meridians and collaterals	脾	0.1533	Liver meridians and collaterals	肝	Relieve pain	止痛	0.1267
Symplectic	辛	Large intestine meridians and collaterals	大肠	-0.1037	Liver meridians and collaterals	肝	Dispel endogenous wind	祛风	0.1331
Symplectic	辛	Induce diuresis or treat strangury	利尿/通淋	-0.1474	Liver meridians and collaterals	肝	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	0.1242
Symplectic	辛	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	0.1013	Liver meridians and collaterals	肝	Relieve external syndrome	解表/发表	-0.1116
Symplectic	辛	Promote secretion of saliva or body	生津	-0.1488	Gallbladder meridians and collaterals	胆	Triple burner	三焦	0.2137
Symplectic	辛	Relieve constipation	通便	-0.1456	Gallbladder meridians and collaterals	胆	Benefit gallbladder or cure jaundice	利胆/退黄	0.1471
Symplectic	辛	Loosen the bowels	润肠	-0.1093	Gallbladder meridians and collaterals	胆	Prevent or arrest vomiting	止呕	0.1038
Symplectic	辛	Cool blood	凉血	-0.1166	Gallbladder meridians and collaterals	胆	Prevent miscarriage or abortion	安胎	0.1252
Symplectic	辛	Tonify blood	养血/补血	-0.1272	Gallbladder meridians and collaterals	胆	Dry dampness	燥湿	0.1222
Symplectic	辛	Nourish essential fluid (Yin)	滋阴	-0.1011	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	Spleen meridians and collaterals	脾	-0.1246
Symplectic	辛	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.17	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	Stomach meridians and collaterals	胃	-0.1016
Symplectic	辛	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	0.1196	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	Induce diuresis or treat strangury	利尿/通淋	0.3091
Symplectic	辛	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.1909	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	Activate water metabolism or excrete water	利水/行水	0.1186
Symplectic	辛	Relieve pain	止痛	0.2118	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	Dispel evil spirit	逐邪	0.1219
Symplectic	辛	Clear away heat	清热	-0.2949	Kidney meridians and collaterals	肾	Lung meridians and collaterals	肺	-0.1467
Symplectic	辛	Eliminate dampness	利湿	-0.1128	Kidney meridians and collaterals	肾	Stomach meridians and collaterals	胃	-0.2019
Symplectic	辛	Detoxification	解毒	-0.1499	Kidney meridians and collaterals	肾	Large intestine meridians and collaterals	大肠	-0.1538
Symplectic	辛	Decrease internal heat	降火	-0.1245	Kidney meridians and collaterals	肾	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	0.4801
Symplectic	辛	Dispel endogenous cold	祛寒	0.26	Kidney meridians and collaterals	肾	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	0.3026
Symplectic	辛	Dispel endogenous damp	祛湿	0.1815	Kidney meridians and collaterals	肾	Strengthen bones and muscles	强筋骨	0.2189
Symplectic	辛	Dispel endogenous wind	祛风	0.2155	Kidney meridians and collaterals	肾	Stop diarrheal	止泻	0.1352
Symplectic	辛	Relieve external syndrome	解表/发表	0.1351	Kidney meridians and collaterals	肾	Regulate menstruation or promote blood flow	调经/通淋	0.1155

Symplectic	辛	Promote astringent function	收敛	-0.1035	Kidney meridians and collaterals	肾	Clear away heat	清热	-0.1137
Sweet	甘	Light	淡	0.1573	Kidney meridians and collaterals	肾	Detoxification	解毒	-0.1206
Sweet	甘	Temperate	平	0.1831	Kidney meridians and collaterals	肾	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	0.1179
Sweet	甘	Warm	温	-0.1274	Lung meridians and collaterals	肺	Spleen meridians and collaterals	脾	-0.1437
Sweet	甘	Toxic	毒	-0.1999	Lung meridians and collaterals	肺	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	-0.139
Sweet	甘	Organic acids	有机酸类	0.1033	Lung meridians and collaterals	肺	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	-0.1076
Sweet	甘	Sterols	甾醇类	0.1027	Lung meridians and collaterals	肺	Strengthen bones and muscles	强筋骨	-0.1364
Sweet	甘	Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	0.1239	Lung meridians and collaterals	肺	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	0.2941
Sweet	甘	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	0.1415	Lung meridians and collaterals	肺	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	0.2825
Sweet	甘	Olefins	烯类	-0.1307	Lung meridians and collaterals	肺	Anti-asthma	平喘/定喘	0.2014
Sweet	甘	Vitamins	维生素类	0.1848	Lung meridians and collaterals	肺	Eliminate or relieve cough	止咳	0.263
Sweet	甘	Kidney meridians and collaterals	肾	0.1463	Lung meridians and collaterals	肺	Stop diarrheal	止泻	-0.1082
Sweet	甘	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	0.1438	Lung meridians and collaterals	肺	Tonify blood	养血/补血	-0.1014
Sweet	甘	Induce diuresis or treat strangury	利尿/通淋	0.1176	Lung meridians and collaterals	肺	Invigorate blood circulation	活血	-0.1307
Sweet	甘	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	0.1386	Lung meridians and collaterals	肺	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	化瘀/消痈/敛疮	-0.1076
Sweet	甘	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	0.1544	Lung meridians and collaterals	肺	Regulate menstruation or promote blood flow	调经/通淋	-0.1063
Sweet	甘	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.198	Lung meridians and collaterals	肺	Clear away heat	清热	0.1228
Sweet	甘	Promote secretion of saliva or body	生津	0.2125	Lung meridians and collaterals	肺	Detoxification	解毒	0.1489
Sweet	甘	Loosen the bowels	润肠	0.1404	Lung meridians and collaterals	肺	Dispel endogenous damp	祛湿	-0.1111
Sweet	甘	Moisten dryness	润燥	0.14	Lung meridians and collaterals	肺	Relieve external syndrome	解表/发表	0.1223
Sweet	甘	Tonify blood	养血/补血	0.1283	Spleen meridians and collaterals	脾	Stomach meridians and collaterals	胃	0.104
Sweet	甘	Nourish essential fluid (Yin)	滋阴	0.1597	Spleen meridians and collaterals	脾	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	0.1017
Sweet	甘	Relieve pain	止痛	-0.2017	Spleen meridians and collaterals	脾	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	0.196
Sweet	甘	Dispel endogenous cold	祛寒	-0.1331	Spleen meridians and collaterals	脾	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.3217
Sweet	甘	Dispel endogenous wind	祛风	-0.1174	Spleen meridians and collaterals	脾	Improve digestion	消食/化食	0.1684
Sweet	甘	Dry dampness	燥湿	-0.1144	Spleen meridians and collaterals	脾	Prevent or arrest vomiting	止呕	0.1168
Sweet	甘	Relieve itching	止痒	-0.1265	Spleen meridians and collaterals	脾	Stop diarrheal	止泻	0.1412
Sweet	甘	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	-0.1224	Spleen meridians and collaterals	脾	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1916
Light	淡	Cool	凉	0.187	Spleen meridians and collaterals	脾	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.2126
Light	淡	Warm	温	-0.1247	Spleen meridians and collaterals	脾	Clear away heat	清热	-0.1808
Light	淡	Sterols	甾醇类	0.1218	Spleen meridians and collaterals	脾	Detoxification	解毒	-0.127
Light	淡	Small intestine meridians and collaterals	小肠	0.1567	Spleen meridians and collaterals	脾	Dispel endogenous cold	祛寒	0.1226
Light	淡	Eliminate dampness	利湿	0.1925	Stomach meridians and collaterals	胃	Heart meridians and collaterals	心	-0.1082
Sour	酸	Astringent	涩	0.14	Stomach meridians and collaterals	胃	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	-0.1256
Sour	酸	Temperate	平	0.109	Stomach meridians and collaterals	胃	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	0.2722
Sour	酸	Organic acids	有机酸类	0.1683	Stomach meridians and collaterals	胃	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.1454
Sour	酸	Vitamins	维生素类	0.2357	Stomach meridians and collaterals	胃	Improve digestion	消食/化食	0.2174
Sour	酸	Promote secretion of saliva or body	生津	0.1763	Stomach meridians and collaterals	胃	Promote secretion of saliva or body	生津	0.1217
Sour	酸	Astringe intestine	涩肠	0.2838	Stomach meridians and collaterals	胃	Resolve food stagnation	消积/消滞	0.1456
Astringent	涩	Tannins	鞣质类	0.1336	Stomach meridians and collaterals	胃	Prevent or arrest vomiting	止呕	0.1585
Astringent	涩	Astringe intestine	涩肠	0.1782	Stomach meridians and collaterals	胃	Regulate menstruation or promote blood flow	调经/通淋	-0.1016
Astringent	涩	Antidiarrheal	止痢	0.1711	Stomach meridians and collaterals	胃	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.2408
Astringent	涩	Stop diarrheal	止泻	0.2077	Stomach meridians and collaterals	胃	Relieve summer-heat	解暑/消暑	0.1552
Astringent	涩	Stop bleeding	止血	0.2336	Stomach meridians and collaterals	胃	Relieve external syndrome	解表/发表	0.1165

Astringent	涩	Promote astringent function	收敛	0.3186	Heart meridians and collaterals	心	Large intestine meridians and collaterals	大肠	-0.1238
Salty	咸	Soften hardness or dissolve masses	散结/软坚	0.2018	Heart meridians and collaterals	心	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes or eliminate eye screens	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	-0.1216
Cold	寒	Cool	凉	-0.3045	Heart meridians and collaterals	心	Strengthen heart or clean heart-fire	强心/清心	0.2542
Cold	寒	Temperate	平	-0.3696	Heart meridians and collaterals	心	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest	除烦/安神/解郁/定惊	0.2545
Cold	寒	Warm	温	-0.4128	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Small intestine meridians and collaterals	小肠	0.121
Cold	寒	Alkaloids	生物碱类	0.1306	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Resolve food stagnation	消积/消滞	0.1427
Cold	寒	Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	-0.1671	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Relieve constipation	通便	0.2013
Cold	寒	Olefins	烯类	-0.1036	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Loosen the bowels	润肠	0.2886
Cold	寒	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	0.1374	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Astringe intestine	涩肠	0.171
Cold	寒	Kidney meridians and collaterals	肾	-0.1103	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Antidiarrheal	止痢	0.1165
Cold	寒	Spleen meridians and collaterals	脾	-0.1549	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Invigorate blood circulation	活血	-0.1071
Cold	寒	Small intestine meridians and collaterals	小肠	0.1202	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Decrease internal heat	降火	0.1021
Cold	寒	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	-0.1537	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Dispel endogenous wind	祛风	-0.1167
Cold	寒	Induce diuresis or treat strangurt	利尿/通淋	0.1657	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Dry dampness	燥湿	0.1357
Cold	寒	Strengthen bones and muscles	强筋骨	-0.1223	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	0.1018
Cold	寒	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	-0.1209	Small intestine meridians and collaterals	小肠	Induce diuresis or treat strangurt	利尿/通淋	0.1739
Cold	寒	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	-0.1237	Small intestine meridians and collaterals	小肠	Activate water metabolism or excrete water	利水/行水	0.1281
Cold	寒	Relieve constipation	通便	0.1066	Small intestine meridians and collaterals	小肠	Clear away heat	清热	0.109
Cold	寒	Soften hardness or dissolve masses	散结/软坚	0.1164	Blood phase	血分	Relieve sore throat	利咽	0.265
Cold	寒	Cool blood	凉血	0.1651	Blood phase	血分	Cool blood	凉血	0.1188
Cold	寒	Invigorate blood circulation	活血	-0.1265	Triple burner	三焦	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest	除烦/安神/解郁/定惊	0.1545
Cold	寒	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	-0.1749	Triple burner	三焦	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1119
Cold	寒	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	-0.1547	Triple burner	三焦	Decrease internal heat	降火	0.1037
Cold	寒	Relieve pain	止痛	-0.129	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	0.2956
Cold	寒	Clear away heat	清热	0.4167	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	Strengthen bones and muscles	强筋骨	0.155
Cold	寒	Detoxification	解毒	0.2518	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	Prevent miscarriage or abortion	安胎	0.1355
Cold	寒	Decrease internal heat	降火	0.1974	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	Detoxification	解毒	-0.1391
Cold	寒	Dispel endogenous cold	祛寒	-0.1589	Breed or blacked hair	生发/乌发	Tonify blood	养血/补血	0.161
Cold	寒	Dispel endogenous damp	祛湿	-0.1524	Breed or blacked hair	生发/乌发	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	0.1133
Cold	寒	Dispel endogenous wind	祛风	-0.1396	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	0.4933
Cool	凉	Temperate	平	-0.2151	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	Strengthen bones and muscles	强筋骨	0.2865
Cool	凉	Warm	温	-0.272	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.1389
Cool	凉	Cool blood	凉血	0.1518	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	Stop diarrheal	止泻	0.1312
Cool	凉	Clear away heat	清热	0.2518	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	Prevent miscarriage or abortion	安胎	0.1725
Cool	凉	Eliminate dampness	利湿	0.1638	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	Clear away heat	清热	-0.1794
Cool	凉	Detoxification	解毒	0.1853	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	Detoxification	解毒	-0.177
Temperate	平	Warm	温	-0.3361	Induce diuresis or treat strangurt	利尿/通淋	Strengthen heart or clean heart-fire	强心/清心	0.1871
Temperate	平	Olefins	烯类	-0.114	Induce diuresis or treat strangurt	利尿/通淋	Antiatherosclerosis	降血脂	0.1067
Temperate	平	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	-0.1073	Induce diuresis or treat strangurt	利尿/通淋	Clear away heat	清热	0.1205
Temperate	平	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.128	Activate water metabolism or excrete water	利水/行水	Reduce swelling	消肿	0.1918
Temperate	平	Cool blood	凉血	-0.1127	Activate water metabolism or excrete water	利水/行水	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	0.1294
Temperate	平	Invigorate blood circulation	活血	0.1123	Activate water metabolism or excrete water	利水/行水	Dispel evil spirit	逐邪	0.1383
Temperate	平	Clear away heat	清热	-0.1663	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male	壮阳/温阳/益精	Stop diarrheal	止泻	0.2727
Temperate	平	Dispel endogenous cold	祛寒	-0.1294	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male	壮阳/温阳/益精	Relieve external syndrome	解表/发表	0.1335

Temperate	平	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	0.1196	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male	壮阳/温阳/益精	Expose exanthema or promote eruption	透疹	0.1389
Warm	温	Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	0.2755	Strengthen bones and muscles	强筋骨	Tonify blood	养血/补血	0.1022
Warm	温	Aldehydes	醛类	0.1283	Strengthen bones and muscles	强筋骨	Prevent miscarriage or abortion	安胎	0.1118
Warm	温	Esters or fats	酯类/脂肪	0.132	Strengthen bones and muscles	强筋骨	Clear away heat	清热	-0.1408
Warm	温	Alcohols	醇类	0.1428	Strengthen bones and muscles	强筋骨	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	0.2508
Warm	温	Ethers	醚类	0.1269	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Eliminate or relieve cough	止咳	0.1956
Warm	温	Olefins	烯类	0.2652	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Promote secretion of saliva or body	生津	0.2021
Warm	温	Spleen meridians and collaterals	脾	0.1431	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Relieve sore throat	利咽	0.1822
Warm	温	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	0.1998	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Loosen the bowels	润肠	0.1284
Warm	温	Induce diuresis or treat strangury	利尿/通淋	-0.128	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Astringe intestine	涩肠	0.1283
Warm	温	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	0.1265	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Nourish essential fluid (Yin)	滋阴	0.2319
Warm	温	Strengthen bones and muscles	强筋骨	0.1649	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	0.1235
Warm	温	Eliminate or relieve stuffy nose	通鼻窍	0.1029	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Relieve pain	止痛	-0.1265
Warm	温	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	0.154	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Detoxification	解毒	-0.1046
Warm	温	Improve digestion	消食/化食	0.1045	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Dispel endogenous damp	祛湿	-0.1093
Warm	温	Cool blood	凉血	-0.1841	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Dispel evil spirit	逐邪	0.1264
Warm	温	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.2191	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	Eliminate or relieve cough	止咳	0.3289
Warm	温	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	0.1168	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	Soften hardness or dissolve masses	散结/软坚	0.1644
Warm	温	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.2397	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	化瘀/消痈/敛疮	-0.1086
Warm	温	Relieve pain	止痛	0.2316	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	0.1895
Warm	温	Clear away heat	清热	-0.449	Anti-asthma	平喘/定喘	Eliminate or relieve cough	止咳	0.4146
Warm	温	Eliminate dampness	利湿	-0.1464	Anti-asthma	平喘/定喘	Antidiabetics	降糖	0.1152
Warm	温	Detoxification	解毒	-0.3226	Anti-asthma	平喘/定喘	Antiatherosclerosis	降血脂	0.1704
Warm	温	Decrease internal heat	降火	-0.1134	Anti-asthma	平喘/定喘	Anticancer	抗癌	0.2001
Warm	温	Dispel endogenous cold	祛寒	0.2796	Anti-asthma	平喘/定喘	Dispel evil spirit	逐邪	0.1704
Warm	温	Dispel endogenous damp	祛湿	0.1426	Eliminate or relieve cough	止咳	Antiatherosclerosis	降血脂	0.1067
Warm	温	Dispel endogenous wind	祛风	0.1514	Eliminate or relieve cough	止咳	Anti-aging	抗衰老	0.1067
Warm	温	Induce perspiration	发汗	0.133	Eliminate or relieve cough	止咳	Anticancer	抗癌	0.1161
Hot	热	Toxic	毒	0.2096	Eliminate or relieve stuffy nose	通鼻窍	Dispel endogenous cold	祛寒	0.1733
Hot	热	Amines	胺类	0.1215	Eliminate or relieve tuberculosis	祛肺结核	Improve digestion	消食/化食	0.1216
Hot	热	Alkanes or hydrocarbons	烷类/烃类	0.1119	Eliminate or relieve tuberculosis	祛肺结核	Soften hardness or dissolve masses	散结/软坚	0.1194
Hot	热	Spleen meridians and collaterals	脾	0.1281	Eliminate or relieve tuberculosis	祛肺结核	Reduce swelling	消肿	0.1073
Hot	热	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	0.1459	Eliminate or relieve tuberculosis	祛肺结核	Discharge pus, diminish inflammation or anti-infection	排脓/消炎/抗感染	0.1194
Hot	热	Dispel endogenous cold	祛寒	0.2748	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.2521
Toxic	毒	Alkaloids	生物碱类	0.2361	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Improve digestion	消食/化食	0.339
Toxic	毒	Activate water metabolism or excrete water	利水/行水	0.1376	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Promote secretion of saliva or body	生津	0.1595
Toxic	毒	Anti-asthma	平喘/定喘	0.1038	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1651
Toxic	毒	Soften hardness or dissolve masses	散结/软坚	0.149	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.1254
Toxic	毒	Reduce swelling	消肿	0.1285	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Clear away heat	清热	-0.1479
Toxic	毒	Relieve pain	止痛	0.129	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Detoxification	解毒	-0.1559
Toxic	毒	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	0.2268	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Relieve summer-heat	解暑/消暑	0.1224
Glycosides	甙类	Organic acids	有机酸类	0.2044	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Dispel endogenous cold	祛寒	0.1192
Glycosides	甙类	Alkaloids	生物碱类	-0.1577	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Dispel endogenous wind	祛风	-0.1052
Glycosides	甙类	Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	-0.101	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	Improve digestion	消食/化食	0.1616

Glycosides	甙类	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	0.2124	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	Strengthen heart or clean heart-fire	强心/清心	0.1795
Glycosides	甙类	Enzymes	酶类	-0.1407	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	Stop diarrheal	止泻	0.1284
Glycosides	甙类	Prevent or arrest vomiting	止呕	-0.1097	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1398
Glycosides	甙类	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	-0.1049	Improve digestion	消食/化食	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.1092
Glycosides	甙类	Relieve pain	止痛	-0.1111	Improve digestion	消食/化食	Clear away heat	清热	-0.1131
Organic acids	有机酸类	Alkaloids	生物碱类	-0.1889	Promote secretion of saliva or body	生津	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest	除烦/安神/解郁/定惊	0.1442
Organic acids	有机酸类	Sterols	甾醇类	0.1443	Promote secretion of saliva or body	生津	Moisten dryness	润燥	0.1689
Organic acids	有机酸类	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	0.1049	Promote secretion of saliva or body	生津	Astringe intestine	涩肠	0.1248
Organic acids	有机酸类	Large intestine meridians and collaterals	大肠	0.1219	Promote secretion of saliva or body	生津	Nourish essential fluid (Yin)	滋阴	0.3537
Organic acids	有机酸类	Moisten dryness	润燥	0.1083	Promote secretion of saliva or body	生津	Anti-aging	抗衰老	0.1823
Organic acids	有机酸类	Dry dampness	燥湿	-0.1095	Promote secretion of saliva or body	生津	Relieve pain	止痛	-0.1042
Alkaloids	生物碱类	Amines	胺类	0.1341	Promote secretion of saliva or body	生津	Quench ones thirst	止渴	0.1816
Alkaloids	生物碱类	Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	-0.1855	Resolve food stagnation	消积/消滞	Relieve constipation	通便	0.1335
Alkaloids	生物碱类	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	-0.1621	Resolve food stagnation	消积/消滞	Relieve summer-heat	解暑/消暑	0.1071
Alkaloids	生物碱类	Ketones or flavonoids	(黄)酮类	-0.141	Resolve food stagnation	消积/消滞	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	0.1688
Alkaloids	生物碱类	Olefins	烯类	-0.1865	Repel foulness	辟秽	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest	除烦/安神/解郁/定惊	0.1777
Alkaloids	生物碱类	Decrease internal heat	降火	0.1394	Repel foulness	辟秽	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.2056
Alkaloids	生物碱类	Dry dampness	燥湿	0.1145	Prevent or arrest vomiting	止呕	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.1242
Amines	胺类	Triple burner	三焦	0.142	Prevent or arrest vomiting	止呕	Dispel endogenous cold	祛寒	0.1691
Amines	胺类	Eliminate impediment	除痹	0.1206	Strengthen heart or clean heart-fire	强心/清心	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest	除烦/安神/解郁/定惊	0.2251
Sterols	甾醇类	Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	-0.1201	Strengthen heart or clean heart-fire	强心/清心	Decrease internal heat	降火	0.1052
Sterols	甾醇类	Olefins	烯类	-0.1306	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental	除烦/安神/解郁/定惊	Anticancer	抗癌	0.1585
Sterols	甾醇类	Kidney meridians and collaterals	肾	0.1095	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental	除烦/安神/解郁/定惊	Quench ones thirst	止渴	0.1308
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Phenols	酚类	0.1267	Relieve constipation	通便	Loosen the bowels	润肠	0.5081
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Aldehydes	醛类	0.2226	Relieve constipation	通便	Antiatherosclerosis	降血脂	0.1856
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Esters or fats	酯类/脂肪	0.1317	Loosen the bowels	润肠	Moisten dryness	润燥	0.1265
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Alcohols	醇类	0.1855	Loosen the bowels	润肠	Tonify blood	养血/补血	0.1799
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Ethers	醚类	0.1329	Loosen the bowels	润肠	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	0.1074
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Olefins	烯类	0.4555	Moisten dryness	润燥	Tonify blood	养血/补血	0.1432
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Spleen meridians and collaterals	脾	0.1506	Moisten dryness	润燥	Nourish essential fluid (Yin)	滋阴	0.2102
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Triple burner	三焦	0.1226	Moisten dryness	润燥	Quench ones thirst	止渴	0.108
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	0.1017	Astringe intestine	涩肠	Stop diarrheal	止泻	0.2244
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Eliminate or relieve stuffy nose	通鼻窍	0.1226	Soften hardness or dissolve masses	散结/软坚	Reduce swelling	消肿	0.1413
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	0.1241	Antidiarrheal	止痢	Anticancer	抗癌	0.1138
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Improve digestion	消食/化食	0.1296	Antidiarrheal	止痢	Promote astringent function	收敛	0.1616
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Stop bleeding	止血	-0.103	Antidiarrheal	止痢	Anti-malaria	抗疟/截疟	0.1795
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1615	Stop diarrheal	止泻	Prevent miscarriage or abortion	安胎	0.1325
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.2395	Stop diarrheal	止泻	Detoxification	解毒	-0.1175
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Clear away heat	清热	-0.1731	Cool blood	凉血	Stop bleeding	止血	0.2272
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Detoxification	解毒	-0.1481	Cool blood	凉血	Relieve pain	止痛	-0.1373
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Dispel endogenous cold	祛寒	0.17	Cool blood	凉血	Clear away heat	清热	0.2204
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Induce perspiration	发汗	0.1186	Cool blood	凉血	Detoxification	解毒	0.1469
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	0.2339	Cool blood	凉血	Dispel endogenous damp	祛湿	-0.1023
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Vitamins	维生素类	0.273	Stop bleeding	止血	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	化瘀/消癥/敛疮	0.1162

Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Inorganic substances	无机物	0.3102	Stop bleeding	止血	Relieve pain	止痛	-0.1116
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Liver meridians and collaterals	肝	-0.1382	Stop bleeding	止血	Promote astringent function	收敛	0.2079
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Blood phase	血分	0.1264	Tonify blood	养血/补血	Remove obstruction in meridians and collaterals, or relax the muscles and joints	通络/活络/舒筋	0.1101
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	0.1052	Tonify blood	养血/补血	Clear away heat	清热	-0.1011
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.1516	Tonify blood	养血/补血	Suppress perspiration	止汗	0.161
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Relieve sore throat	利咽	0.1086	Invigorate blood circulation	活血	Regulate menstruation or promote blood flow	调经/通淋	0.1986
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Anti-aging	抗衰老	0.1264	Invigorate blood circulation	活血	Remove obstruction in meridians and collaterals, or relax the muscles and joints	通络/活络/舒筋	0.1079
Terpenoids	萜类	Stomach meridians and collaterals	胃	-0.1163	Invigorate blood circulation	活血	Relieve pain	止痛	0.1588
Terpenoids	萜类	Relieve itching	止痒	0.1227	Invigorate blood circulation	活血	Clear away heat	清热	-0.1202
Phenols	酚类	Aldehydes	醛类	0.119	Invigorate blood circulation	活血	Dispel endogenous wind	祛风	0.1116
Phenols	酚类	Ketones or flavonoids	(黄)酮类	0.1284	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote	化瘀/消癥/敛疮	Reduce swelling	消肿	0.1104
Phenols	酚类	Olefins	烯类	0.1543	Reduce swelling	消肿	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	-0.1444
Phenols	酚类	Stop bleeding	止血	0.1032	Reduce swelling	消肿	Detoxification	解毒	0.2008
Aldehydes	醛类	Alcohols	醇类	0.22	Antidiabetics	降糖	Nourish essential fluid (Yin)	滋阴	0.1521
Aldehydes	醛类	Ketones or flavonoids	(黄)酮类	0.1474	Antihypertension	降压	Prevent miscarriage or abortion	安胎	0.1366
Aldehydes	醛类	Ethers	醚类	0.1014	Antihypertension	降压	Promote astringent function	收敛	0.1081
Aldehydes	醛类	Olefins	烯类	0.26	Prevent miscarriage or abortion	安胎	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	0.1027
Aldehydes	醛类	Spleen meridians and collaterals	脾	0.1138	Prevent miscarriage or abortion	安胎	Dry dampness	燥湿	0.1118
Aldehydes	醛类	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	0.1044	Prevent miscarriage or abortion	安胎	Suppress perspiration	止汗	0.2464
Aldehydes	醛类	Prevent or arrest vomiting	止呕	0.2037	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.1897
Aldehydes	醛类	Reduce swelling	消肿	-0.1049	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	Relieve pain	止痛	0.2089
Aldehydes	醛类	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1086	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	Clear away heat	清热	-0.1913
Aldehydes	醛类	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.129	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	Detoxification	解毒	-0.1709
Aldehydes	醛类	Dispel endogenous cold	祛寒	0.1011	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	Dispel endogenous cold	祛寒	0.106
Esters or fats	酯类/脂肪	Alcohols	醇类	0.1233	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	Clear away heat	清热	-0.1033
Esters or fats	酯类/脂肪	Olefins	烯类	0.1568	Remove obstruction in meridians and collaterals, or	通络/活络/舒筋	Dispel endogenous wind	祛风	0.1835
Esters or fats	酯类/脂肪	Spleen meridians and collaterals	脾	0.1026	Remove obstruction in meridians and collaterals, or	通络/活络/舒筋	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	0.1106
Esters or fats	酯类/脂肪	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.1046	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	Clear away heat	清热	-0.1626
Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	Vitamins	维生素类	0.1998	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	Detoxification	解毒	-0.1607
Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	Relieve pain	止痛	-0.1146	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	Relieve summer-heat	解暑/消暑	0.1541
Alcohols	醇类	Olefins	烯类	0.2552	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	Dispel endogenous cold	祛寒	0.1629
Alcohols	醇类	Repel foulness	辟秽	0.1206	Relieve pain	止痛	Clear away heat	清热	-0.1654
Alcohols	醇类	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1169	Relieve pain	止痛	Detoxification	解毒	-0.1146
Alcohols	醇类	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.1196	Relieve pain	止痛	Dispel endogenous cold	祛寒	0.2166
Alcohols	醇类	Clear away heat	清热	-0.1557	Relieve pain	止痛	Dispel endogenous wind	祛风	0.1423
Enzymes	酶类	Strengthen and reinforce spleen	健脾/补脾	0.133	Clear away heat	清热	Eliminate dampness	利湿	0.2552
Enzymes	酶类	Relieve sore throat	利咽	0.1517	Clear away heat	清热	Detoxification	解毒	0.4939
Enzymes	酶类	Astringe intestine	涩肠	0.1479	Clear away heat	清热	Dispel endogenous cold	祛寒	-0.1798
Ketones or flavonoids	(黄)酮类	Alkanes or hydrocarbons	烷类/烃类	0.1265	Clear away heat	清热	Dispel endogenous damp	祛湿	-0.1267
Ketones or flavonoids	(黄)酮类	Olefins	烯类	0.1821	Clear away heat	清热	Dispel endogenous wind	祛风	-0.1138
Ketones or flavonoids	(黄)酮类	Triple burner	三焦	0.1022	Clear away heat	清热	Relieve rheumatism or lubricate the joints	祛风湿/利关节	-0.1259
Ketones or flavonoids	(黄)酮类	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1136	Eliminate dampness	利湿	Detoxification	解毒	0.1492
Alkanes or hydrocarbons	烷类/烃类	Kidney meridians and collaterals	肾	0.1032	Eliminate dampness	利湿	Dispel endogenous damp	祛湿	-0.1239
Alkanes or hydrocarbons	烷类/烃类	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.1291	Detoxification	解毒	Dispel endogenous cold	祛寒	-0.1536

Alkanes or hydrocarbons	烷类/烃类	Eliminate impediment	除痹	0.1121	Detoxification	解毒	Discharge pus, diminish inflammation or anti-infection	排脓/消炎/抗感染	0.1319
Ethers	醚类	Olefins	烯类	0.2113	Decrease internal heat	降火	Dry dampness	燥湿	0.2968
Ethers	醚类	Eliminate or relieve stuffy nose	通鼻窍	0.1446	Relieve summer-heat	解暑/消暑	Relieve external syndrome	解表/发表	0.2078
Ethers	醚类	Dispel endogenous cold	祛寒	0.1397	Dispel endogenous cold	祛寒	Dispel endogenous wind	祛风	0.1431
Ethers	醚类	Dispel endogenous wind	祛风	0.113	Dispel endogenous damp	祛湿	Dispel endogenous wind	祛风	0.433
Olefins	烯类	Spleen meridians and collaterals	脾	0.1563	Dispel endogenous damp	祛湿	Relieve itching	止痒	0.1082
Olefins	烯类	Large intestine meridians and collaterals	大肠	-0.1164	Dispel endogenous damp	祛湿	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	0.1044
Olefins	烯类	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	0.1875	Dry dampness	燥湿	Suppress perspiration	止汗	0.1216
Olefins	烯类	Prevent or arrest vomiting	止呕	0.1277	Dry dampness	燥湿	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	0.1063
Olefins	烯类	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.1907	Induce perspiration	发汗	Relieve external syndrome	解表/发表	0.1758
Olefins	烯类	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.2133	Induce perspiration	发汗	Relieve muscular spasm	解痉	0.1948
Olefins	烯类	Clear away heat	清热	-0.1055	Relieve external syndrome	解表/发表	Relieve muscular spasm	解痉	0.1758
Olefins	烯类	Detoxification	解毒	-0.1085	Relieve external syndrome	解表/发表	Expose exanthema or promote eruption	透疹	0.3065
Olefins	烯类	Dispel endogenous cold	祛寒	0.2672	Relieve itching	止痒	Kill or expel parasites	杀虫/驱虫	0.2709
Olefins	烯类	Relieve external syndrome	解表/发表	0.1121					

n=772

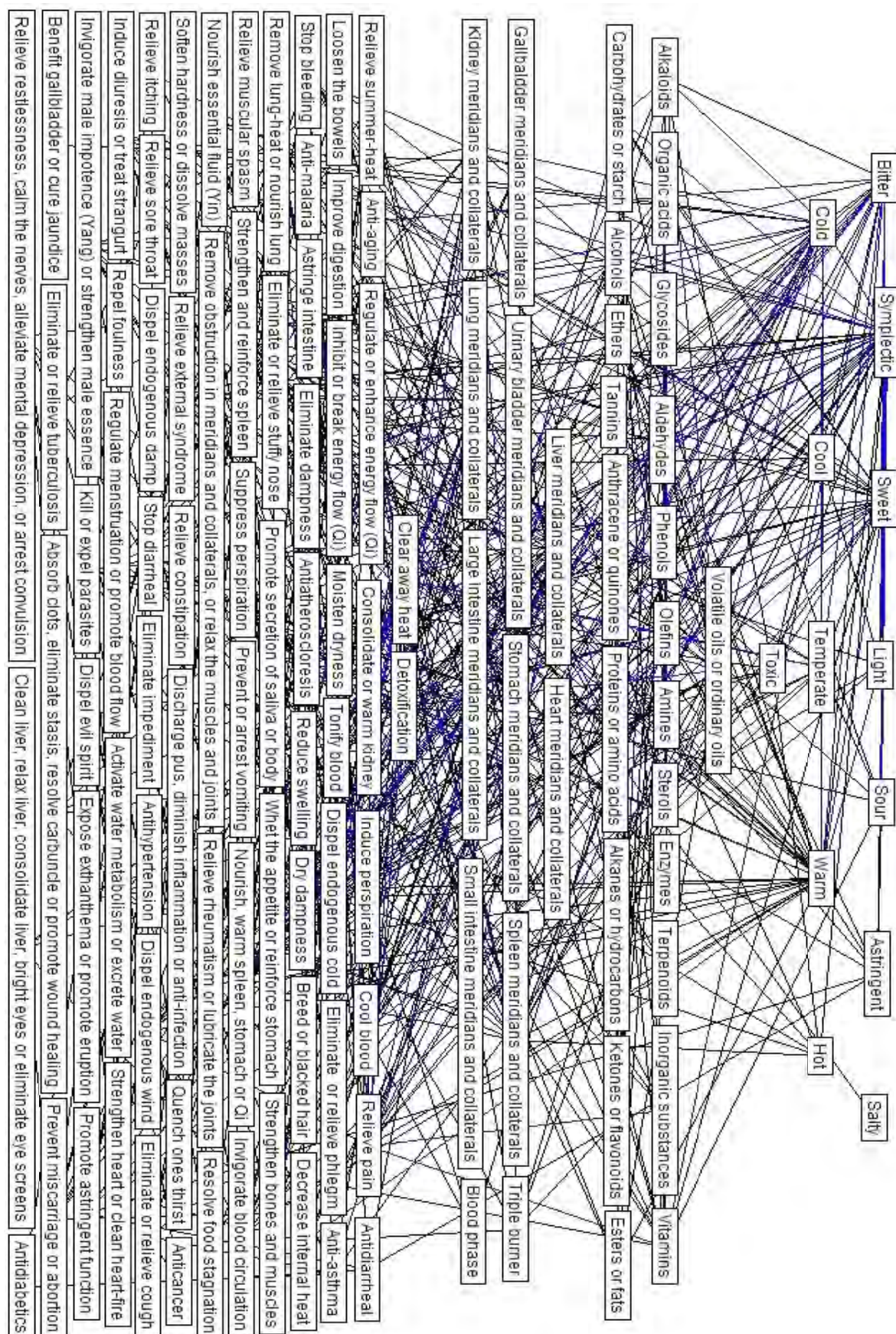


图1 中草药属性与功效关系网络(Zhang, 2012a)。黑色链接为正的点相关，蓝色为负的点相关。未列孤立节点。

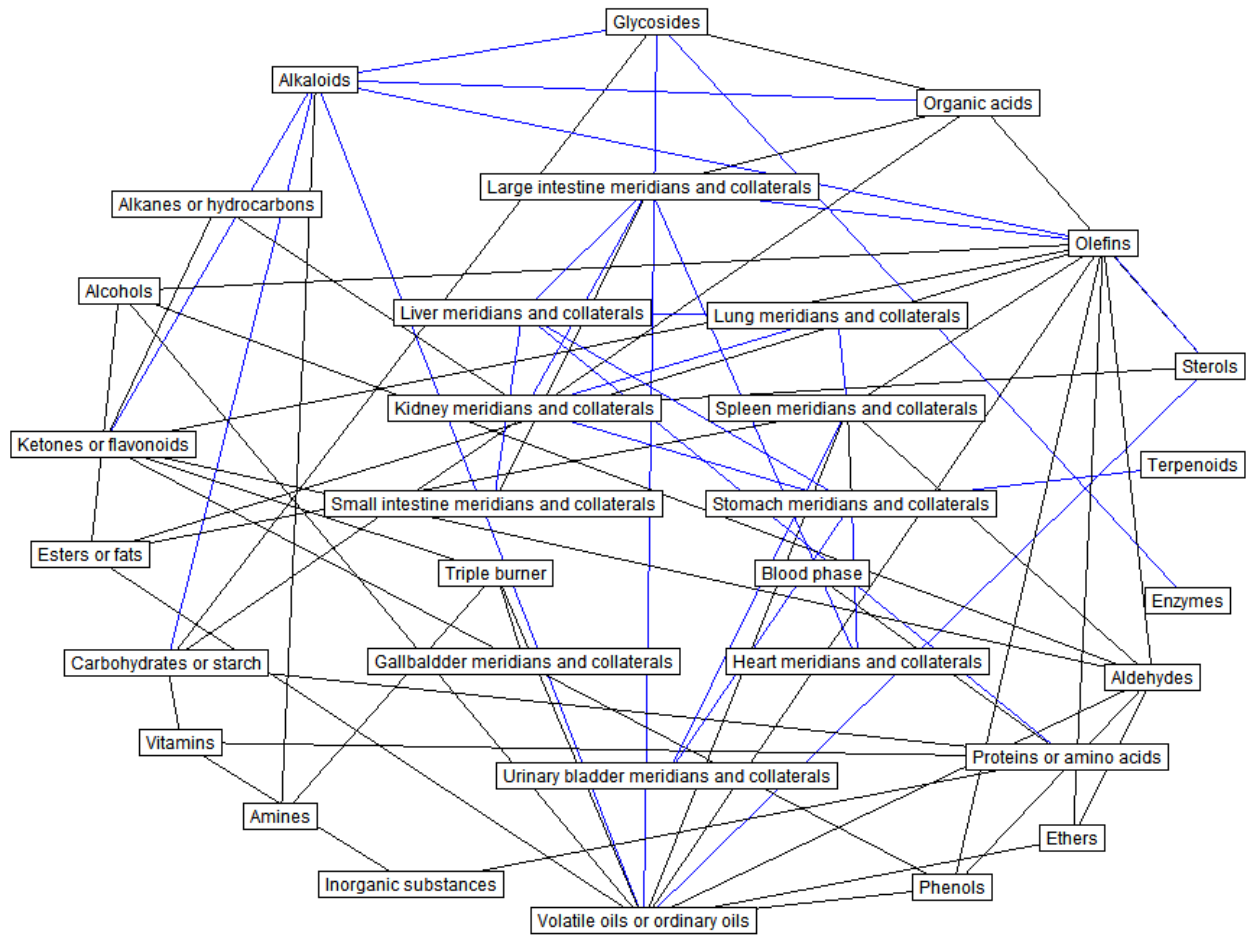


图 2 中草药化学成份-归经关系网络(Zhang, 2012a)。黑色链接为正的点相关，蓝色为负的点相关。未列孤立节点。

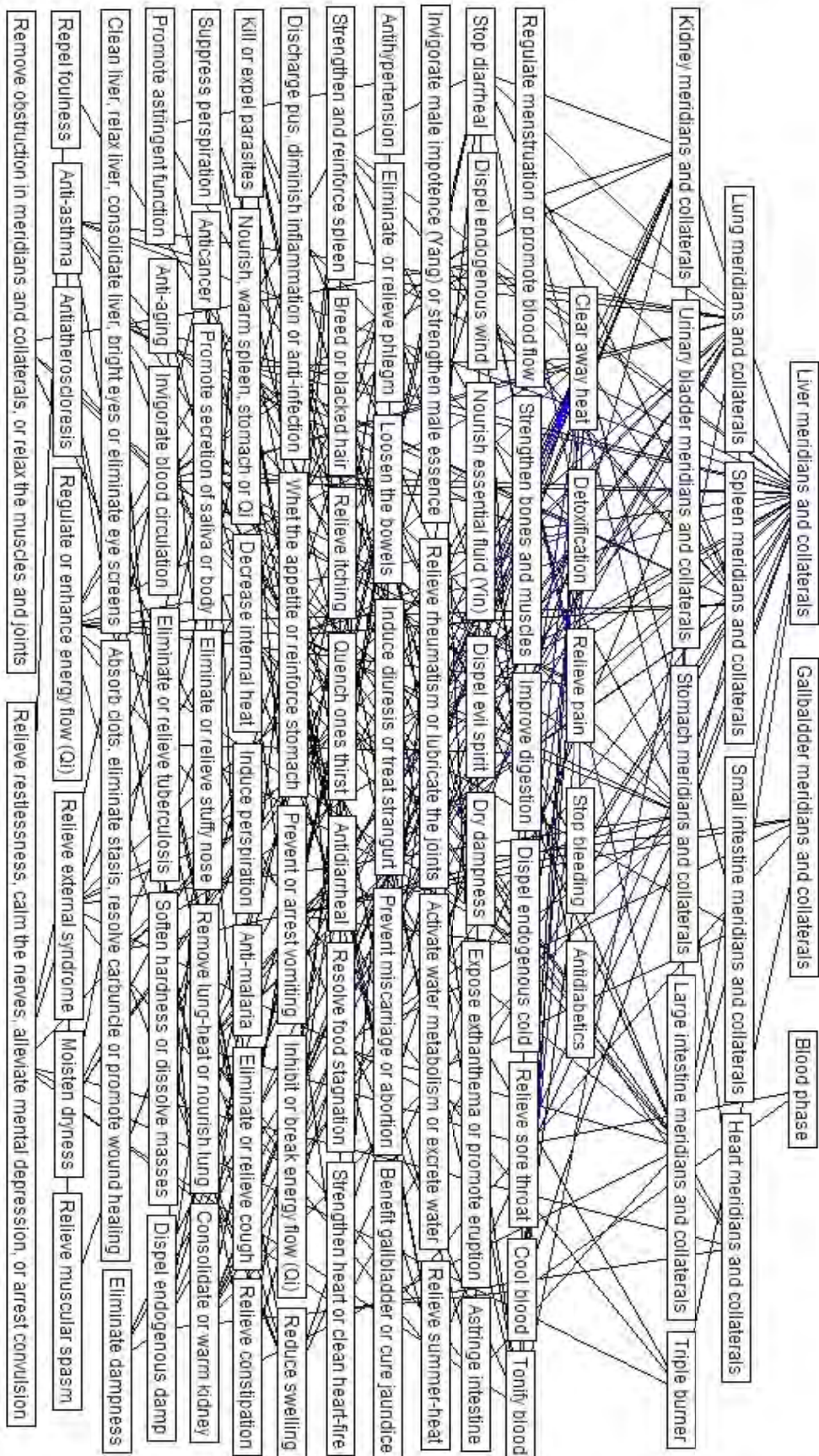


图3 中草药归经-功效关系网络(Zhang, 2012a)。黑色链接为正的点相关, 蓝色为负的点相关。未列孤立节点。

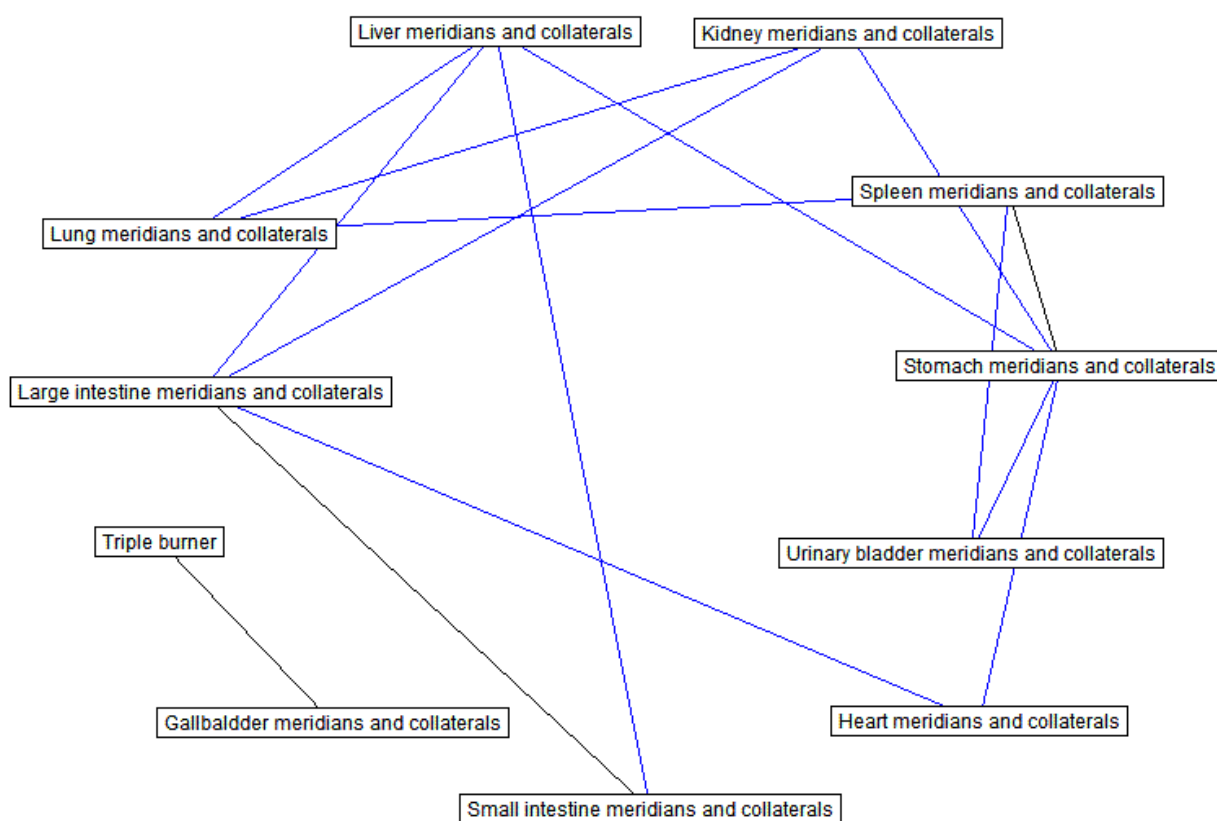


图4 中草药归经关系网络(Zhang, 2012a)。黑色链接为正的点相关, 蓝色为负的点相关。未列孤立节点。

3.2 属性与功效关系

3.2.1 味属性

根据表 1, 苦-寒、苦-毒有正相关对应, 也即苦味中草药有毒概率也大。苦-生物碱类有正相关对应, 苦味与蛋白质/氨基酸类、醛类、烯类、维生素类之间为负相关对应, 也即苦味中草药往往含较多的生物碱类。苦-脾经有负相关对应, 也即苦味中草药忌用于脾经。味苦中草药主要用于清热、解毒、降火, 但忌用于补肾/温肾、壮阳/温阳/益精、开胃/益胃、健脾/补脾等。

辛-温热、辛-毒有正相关对应, 辛味中草药有毒概率也大。辛-糖类/淀粉为负相关对应, 糖类/淀粉少的中草药, 趋于辛味; 辛味与挥发油类/油类、酚类、醛类、醇类、烯类有正相关对应。辛-脾经有正相关对应, 辛-大肠经有负相关对应, 也即辛味中草药忌用于大肠经。辛味中草药主功理气/养气、祛痰/化痰、下气/破气、温中/和中/补中、止痛、祛寒、祛湿、祛风、解表/发表等, 但忌用于利尿/通淋、通便、润肠、凉血、养血/补血等等。

甘-毒有负相关对应, 也即甘味中草药有毒概率小。甘-烯类为负相关对应, 而与有机酸类、甾醇类、蛋白质/氨基酸类、糖类/淀粉、维生素类为正相关对应。甘味中草药主要作用于脾经。味甘中草药多用于补肾/温肾、利尿/通淋、壮阳/温阳/益精、清肺/润肺、健脾/补脾、生津等等, 但忌用于止痛、祛寒、祛风、燥湿等。

酸-涩平有正相关对应。酸味与有机酸类、维生素类有正相关对应, 有机酸类含量高, 则中草药酸味重。酸味中草药主功生津、涩肠等。

涩味中草药鞣质类含量高。涩味中草药主功涩肠、止痢、止泻、止血、收敛等。

咸味主功散结/软坚。

3.2.2 性属性

根据表 1, 寒-生物碱类有正相关对应, 寒性中草药往往含较多的生物碱类。寒性中草药主要作用于膀胱和小肠经, 而忌用于脾、肾经。寒性中草药主功利尿/通淋、通便、散结/软坚、凉血、清热、解毒、降火, 忌用于补肾/温肾、开胃/益胃、健脾/补脾、止痛、理气/养气、温中/和中/补中、祛寒湿风等等。

凉性中草药主功凉血、清热、解毒、利湿等。

温性中草药往往含较多的挥发油类/油类、醛类、酯类/脂肪、醇类、醚类、烯类。主要作用于脾经, 主功补肾/温肾、壮阳/温阳/益精、强筋骨、开胃/益胃、理气/养气、下气/破气、温中/和中/补中、止痛、祛寒湿风、发汗等, 忌用于利尿/通淋、清热、利湿、解毒、降火等。

热性中草药多含胺类、烷类/烃类, 有毒概率较大, 主要作用于脾经, 主功壮阳/温阳/益精、祛寒等。

3.2.3 毒性属性

根据表 1, 中草药毒性多源自生物碱类。毒性中草药主功消肿、止痛、杀虫/驱虫、平喘/定喘等等。

3.2.4 化学成份类别

根据表 1, 甙类与有机酸类、糖类/淀粉有正相关对应, 其水解产物多为后者, 而与生物碱类、挥发油类/油类、酶类有负相关对应。多数甙类可能不利于止呕、温中/和中/补中、止痛。

有机酸类与生物碱类有负相关对应, 有机酸类多, 则生物碱类少。有机酸类与甾醇类及糖类/淀粉有正相关对应。有机酸类主要作用于大肠经, 主功润燥。

生物碱类与胺类有正相关对应, 生物碱类多, 则胺类一般也多。生物碱类与挥发油类/油类、糖类/淀粉、(黄)酮类、烯类有负相关对应。生物碱类主功降火、燥湿等, 在 $\alpha=0.01$ 水平上, 还有止痛等功效。

胺类主要作用于三焦, 有除痹功效。

甾醇类与挥发油类/油类、烯类有负相关对应, 主要作用于肾经。

挥发油类/油类与酚类、醛类、酯类/脂肪、醇类、醚类、烯类有正相关对应, 主要作用于脾经和三焦, 主功祛痰/化痰、通鼻窍、开胃/益胃、消食/化食、理气/养气、温中/和中/补中等, 忌用于止血、清热、解毒。

蛋白质/氨基酸类与糖类/淀粉、维生素类、无机物有正相关对应, 主要作用于血分, 忌用于肝经, 主功清肺/润肺、健脾/补脾、利咽、抗衰老等等。

萜类忌用于胃经, 有止痒等功效。

酚类与醛类、(黄)酮类、烯类有正相关对应, 有止血等功效。

醛类与醇类、(黄)酮类、醚类、烯类有正相关对应, 主要作用于脾经, 主功祛痰/化痰、止呕、理气/养气、温中/和中/补中、祛寒等, 忌用于消肿。

酯类/脂肪与醇类、烯类有正相关对应, 主要作用于脾经, 主功健脾/补脾。

糖类/淀粉忌用于止痛。

醇类与烯类有正相关对应, 主功辟秽、理气/养气、温中/和中/补中, 忌用于清热。

酶类主功健脾/补脾等。

(黄)酮类与烷类/烃类、烯类有正相关对应, 主要作用于三焦, 主功除痹。

醚类与烯类有正相关对应, 往往均为挥发油成份, 主功通鼻窍、祛寒、祛风。

烯类主要作用于脾经, 忌用于大肠经。主功开胃/益胃、止呕、理气/养气、温中/和中/补中、祛寒、解表/发表, 忌用于清热、解毒。

蒽类/醌类主功降压作用。

鞣质类主功涩肠、止血、收敛。

维生素类主功生津、降血脂、抗衰老、止渴、解暑/消暑等。

3.2.5 归经

根据表 1, 肝经与肺、胃、大肠、小肠经有负相关对应, 正功效于清肝/补肝/舒肝/明目/退翳、强筋骨、凉血、止血、活血、化瘀/消痈/敛疮、调经/通淋、止痛、祛风、祛风湿/利关节, 负功效于清肺/润肺、祛痰/化痰、平喘/定喘、开胃/益胃、健脾/补脾、生津利咽、强心/清心等等。

胆经与三焦有正相关对应, 正功效于利胆/退黄、止呕、安胎、燥湿等。

膀胱经与脾、胃经有负相关对应, 正功效于利尿/通淋、利水/行水、逐邪。

肾经与肺、胃、大肠经有负相关对应, 正功效于补肾/温肾、壮阳/温阳/益精、强筋骨、止泻、调经/通淋、祛风湿/利关节, 负功效于清热、解毒。

肺经与脾经有负相关对应, 正功效于清肺/润肺、祛痰/化痰、平喘/定喘、止咳、清热、解毒、解表/发表, 负功效于补肾/温肾、壮阳/温阳/益精、强筋骨、止泻、养血/补血、活血、化瘀/消痈/敛疮、调经/通淋、祛湿。

脾经与胃经有正相关对应, 正功效于壮阳/温阳/益精、开胃/益胃、健脾/补脾、消食/化食、止呕、止泻、理气/养气、温中/和中/补中、祛寒, 负功效于清热、解毒。

胃经与心经有负相关对应, 正功效于开胃/益胃、健脾/补脾、消食/化食、生津、消积/消滞、止呕、温中/和中/补中、解暑/消暑、解表/发表, 负功效于补肾/温肾、调经/通淋。

心经与大肠经有负相关对应, 正功效于强心/清心、除烦/安神/解郁/定惊, 负功效于清肝/补肝/舒肝/明目/退翳。

大肠经与小肠经有正相关对应, 正功效于消积/消滞、通便、润肠、涩肠、止痢、降火、燥湿、杀虫/驱虫、利尿/通淋、利水/行水、清热, 负功效于活血、祛风。

血分正功效于利咽、凉血。

三焦正功效于除烦/安神/解郁/定惊、理气/养气、降火。

3.2.6 功效

功效关系详见各表。

3.3 多重属性链

在本研究中, 多重属性链的长度表示了属性类间的相关性影响深度, 但并不一定是一致正或一致负的影响。属性类间的多重属性链结果见附表 2。必须注意的是, 在一条多重属性链中, 前后两两属性之间并非只有正的(负的)相关关系。例如, 多重属性链: 苦-寒-挥发油类/油类-止血, 其中苦-寒为正相关对应, 寒-挥发油类/油类为负相关对应, 等等。

4 讨论

前述一些药理结果, 在实践中已有应用实证。例如, 大麻、罂粟等富含生物碱, 常用来降火、止痛等。含生物碱的植物, 如茶等, 可降火、燥湿等。多数瓜果富含有机酸类, 食之有助润燥。毒性中草药主功消肿、止痛、杀虫/驱虫等, 凉性中草药主功凉血、清热、解毒等, 均为医者所广泛应用。

中草药复方, 往往针对多个经络和多个靶点, 形成一个药理网络。本研究结果也说明, 中草药药理系统具有复杂网络结构。从而, 在一个侧面说明了中医药理论的网络观、系统观和整体观。

人体是一个自组织系统, 在正常范围内可自组织调节自身功能, 勿需外界干预(Zhang, 2013, 2016d)。在一定意义上, 归经网络和归经-功效网络就是自组织系统, 理论上, 可用网络进化等模型模拟其动态行为(Zhang, 2015a, 2016f; Haliki and Kazanci, 2017)。

本研究的结果,对指导中草药应用、药物开发及完善中医药理论,期望有一定的价值。另一方面,本研究对功效属性、尤其是化学成份类的分类,是一种框架性定义。例如,化学成份类的作用,只是一种总体的结果。实际上,即使同类内的不同分子,作用也不完全一致,甚而可能相反。另外在理论上,归经网络应是连通的。在较为宽松的统计水平上,前述结果可能会符合该规律。不足之处,待条件成熟时,将一并做进一步完善。

主要参考文献

- 王淑贤. 2012. 中药功效分类与药性系统间的内在规律分析. <http://www.hi138.com/yiyao/yaoxue/201201/371916.asp>
- 张文军. 生态学研究方法. 中山大学出版社, 广州, 2007
- 张尧庭, 方开泰. 多元统计分析引论. 科学出版社, 北京, 1982
- Budovsky A, Fraifeld VE. 2012. Medicinal plants growing in the Judea region: network approach for searching potential therapeutic targets. *Network Biology*, 2(3): 84-94
- Floyd RW. 1962. Algorithm 97: shortest path. *Comm ACM*, 5: 345
- Haliki E, Kazanci N. 2017. Effects of a silenced gene in Boolean network models. *Network Biology*, 7(1): 10-20
- Hopkins AL. 2007. Network pharmacology. *Nature Biotechnology*, 25(10): 1110-1111
- Hopkins AL. 2008. Network pharmacology: the next paradigm in drug discovery. *Nature Chemical Biology*, 4(11): 682-690
- Zhang WJ. 2011. Constructing ecological interaction networks by correlation analysis: hints from community sampling. *Network Biology*, 1(2): 81-98
- Zhang WJ. 2012a. A Java software for drawing graphs. *Network Biology*, 2(1): 38-44
- Zhang WJ. 2012b. *Computational Ecology: Graphs, Networks and Agent-based Modeling*. World Scientific, Singapore
- Zhang WJ. 2012c. How to construct the statistic network? An association network of herbaceous plants constructed from field sampling. *Network Biology*, 2(2): 57-68
- Zhang WJ. 2013. *Self-organization: Theories and Methods*. Nova Science Publishers, New York, USA
- Zhang WJ. 2014. Interspecific associations and community structure: A local survey and analysis in a grass community. *Selforganizology*, 1(2): 89-129
- Zhang WJ. 2015a. A generalized network evolution model and self-organization theory on community assembly. *Selforganizology*, 2(3): 55-64
- Zhang WJ. 2015b. Calculation and statistic test of partial correlation of general correlation measures. *Selforganizology*, 2(4): 65-77
- Zhang WJ. 2016a. A Matlab program for finding shortest paths in the network: Application in the tumor pathway. *Network Pharmacology*, 1(1): 42-53
- Zhang WJ. 2016b. Detecting connectedness of network: A Matlab program and application in tumor pathways and a phylogenetic network. *Selforganizology*, 3(4): 117-120
- Zhang WJ. 2016c. Network pharmacology: A further description. *Network Pharmacology*, 1(1): 1-14
- Zhang WJ. 2016d. *Selforganizology: The Science of Self-Organization*. World Scientific, Singapore
- Zhang WJ. 2016f. A random network based, node attraction facilitated network evolution method. *Selforganizology*, 3(1): 1-9
- Zhang WJ. 2017. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines: (I) Basic statistics of medicinal attributes and functions for more than 1100 Chinese herbal medicines.

Network Pharmacology, 2(2): 17-36

Zhang WJ, Wang R, Zhang DL, et al. 2014. Interspecific associations of weed species around rice fields in Pearl River Delta, China: A regional survey. Selforganizology, 1(3-4): 143-205

Zhang WJ, Zhan CY. 2011. An algorithm for calculation of degree distribution and detection of network type: with application in food webs. Network Biology, 1(3-4):159-170

附表 1 点相关显著的成对属性及点相关($\alpha=0.01$)(只列出不同于表 1 的部份)。

Attribute	属性	Attribute	属性	r	Attribute	属性	Attribute	属性	r
Bitter	苦	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	-0.0969	Aldehydes	醛类	Esters or fats	酯类/脂肪	0.0981
Bitter	苦	Enzymes	酶类	-0.0939	Aldehydes	醛类	Repel foulness	辟秽	0.0939
Bitter	苦	Liver meridians and collaterals	肝	0.1009	Aldehydes	醛类	Relieve muscular spasm	解痉	0.0939
Bitter	苦	Repel foulness	辟秽	-0.0965	Esters or fats	酯类/脂肪	Clear away heat	清热	-0.0956
Bitter	苦	Dry dampness	燥湿	0.1002	Esters or fats	酯类/脂肪	Dispel endogenous cold	祛寒	0.097
Symplectic	辛	Vitamins	维生素类	-0.0945	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	0.1007
Symplectic	辛	Repel foulness	辟秽	0.098	Alcohols	醇类	Ketones or flavonoids	(黄)酮类	0.1007
Symplectic	辛	Antidiarrheal	止痢	-0.099	Alcohols	醇类	Triple burner	三焦	0.0933
Symplectic	辛	Reduce swelling	消肿	0.0927	Alcohols	醇类	Antihypertension	降压	0.1003
Symplectic	辛	Induce perspiration	发汗	0.098	Enzymes	酶类	Eliminate impediment	除痹	0.0961
Symplectic	辛	Relieve itching	止痒	0.0983	Olefins	烯类	Stomach meridians and collaterals	胃	0.1006
Sweet	甘	Sour	酸	0.0935	Olefins	烯类	Repel foulness	辟秽	0.0978
Sweet	甘	Alkaloids	生物碱类	-0.0939	Anthracene or quinones	蒽类/醌类	Eliminate dampness	利湿	0.0952
Sweet	甘	Inorganic substances	无机物	0.0935	Anthracene or quinones	蒽类/醌类	Promote astringent function	收敛	0.0982
Sweet	甘	Relieve constipation	通便	0.0927	Tannins	鞣质类	Antidiabetics	降糖	0.0948
Light	淡	Reduce swelling	消肿	0.0929	Vitamins	维生素类	Consolidate or warm kidney	补肾/温肾	0.0952
Sour	酸	Tannins	鞣质类	0.0943	Vitamins	维生素类	Loosen the bowels	润肠	0.0989
Sour	酸	Stop diarrheal	止泻	0.0946	Liver meridians and collaterals	肝	Activate water metabolism or excrete water	利水/行水	-0.0981
Astringent	涩	Temperate	平	0.094	Liver meridians and collaterals	肝	Stop diarrheal	止泻	-0.0963
Astringent	涩	Enzymes	酶类	0.0972	Urinary bladder meridians and collaterals	膀胱	Induce perspiration	发汗	0.095
Astringent	涩	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	-0.1005	Kidney meridians and collaterals	肾	Tonify blood	养血/补血	0.0955
Cold	寒	Glycosides	甙类	0.0948	Kidney meridians and collaterals	肾	Prevent miscarriage or abortion	安胎	0.0933
Cold	寒	Benefit gallbladder or cure jaundice	利胆/退黄	0.0985	Lung meridians and collaterals	肺	Relieve sore throat	利咽	0.0957
Cold	寒	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	-0.0932	Spleen meridians and collaterals	脾	Dry dampness	燥湿	0.0944
Cold	寒	Nourish essential fluid (Yin)	滋阴	0.0996	Stomach meridians and collaterals	胃	Invigorate blood circulation	活血	-0.1003
Cold	寒	Remove obstruction in meridians and collaterals, or relax the muscles and joints	通络/活络/舒筋	-0.095	Stomach meridians and collaterals	胃	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.0954
Cool	凉	Stop bleeding	止血	0.0965	Stomach meridians and collaterals	胃	Dispel endogenous wind	祛风	-0.0987
Cool	凉	Relieve pain	止痛	-0.0932	Heart meridians and collaterals	心	Clear away heat	清热	0.0985
Temperate	平	Toxic	毒	-0.094	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Inhibit or break energy flow (Qi)	下气/破气	0.099
Warm	温	Repel foulness	辟秽	0.0966	Large intestine meridians and collaterals	大肠	Detoxification	解毒	0.0998
Warm	温	Prevent or arrest vomiting	止呕	0.0994	Triple burner	三焦	Improve digestion	消食/化食	0.0952
Warm	温	Relieve muscular spasm	解痉	0.0966	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes or eliminate eye screens	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	0.0993

Hot	热	Alkaloids	生物碱类	0.0997	Induce diuresis or treat strangurt	利尿/通淋	Dispel endogenous wind	祛风	-0.0958
Hot	热	Dispel endogenous damp	祛湿	0.093	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	Reduce swelling	消肿	-0.0942
Toxic	毒	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	化瘀/消癰/敛疮	0.0993	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	壮阳/温阳/益精	Relieve pain	止痛	-0.093
Glycosides	甙类	Stop diarrheal	止泻	-0.1001	Strengthen bones and muscles	强筋骨	Invigorate blood circulation	活血	0.0966
Glycosides	甙类	Cool blood	凉血	0.0989	Promote granulation	生肌	Discharge pus, diminish inflammation or anti-infection	排脓/消炎/抗感染	0.0933
Glycosides	甙类	Stop bleeding	止血	0.0966	Remove lung-heat or nourish lung	清肺/润肺	Invigorate blood circulation	活血	-0.0965
Organic acids	有机酸类	Esters or fats	酯类/脂肪	0.0958	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	Invigorate blood circulation	活血	-0.0974
Organic acids	有机酸类	Relieve constipation	通便	0.0961	Eliminate or relieve phlegm	祛痰/化痰	Anti-aging	抗衰老	0.0961
Organic acids	有机酸类	Loosen the bowels	润肠	0.0984	Anti-asthma	平喘/定喘	Clear away heat	清热	-0.0963
Alkaloids	生物碱类	Aldehydes	醛类	-0.0971	Whet the appetite or reinforce stomach	开胃/益胃	Prevent or arrest vomiting	止呕	0.0956
Alkaloids	生物碱类	Alcohols	醇类	-0.0991	Promote secretion of saliva or body	生津	Reduce swelling	消肿	-0.0938
Alkaloids	生物碱类	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	-0.0978	Promote secretion of saliva or body	生津	Dispel endogenous wind	祛风	-0.0946
Alkaloids	生物碱类	Relieve pain	止痛	0.098	Relieve sore throat	利咽	Detoxification	解毒	0.0981
Amines	胺类	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	0.0981	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest convulsion	除烦/安神/解郁/定惊	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	0.0967
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Carbohydrates or starch	糖类/淀粉	-0.093	Relieve constipation	通便	Dispel endogenous wind	祛风	-0.0929
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Liver meridians and collaterals	肝	-0.0967	Stop diarrheal	止泻	Eliminate impediment	除痹	0.0935
Volatile oils or ordinary oils	挥发油类/油类	Eliminate impediment	除痹	0.0971	Stop bleeding	止血	Regulate or enhance energy flow (Qi)	理气/养气	-0.0929
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Stop diarrheal	止泻	0.0946	Invigorate blood circulation	活血	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	化瘀/消癰/敛疮	0.0957
Proteins or amino acids	蛋白质/氨基酸类	Relieve muscular spasm	解痉	0.0995	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	化瘀/消癰/敛疮	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	温中/和中/补中	-0.0932
Phenols	酚类	Ethers	醚类	0.1004	Remove obstruction in meridians and collaterals, or relax the muscles and joints	通络/活络/舒筋	Clear away heat	清热	-0.0966
Phenols	酚类	Tannins	鞣质类	0.0983					

n=772

附表 2 多重属性链(部分)。

属性	属性	属性	属性	属性	属性	属性	属性	属性
苦	寒	挥发油类/油类	止血		淡	温	发汗	
苦	寒	膀胱	逐邪		淡	甾醇类	肾	止泻
苦	寒	利尿/通淋			淡	甾醇类	肾	调经/通淋
苦	寒	强筋骨			淡	甾醇类	肾	祛风湿/利关节
苦	寒	通便			淡	小肠	利水/行水	
苦	寒	散结/软坚			酸	平	温	通鼻窍
苦	寒	凉血			酸	平	温	发汗
苦	寒	活血			酸	平	毒	消肿

苦	寒	理气/养气		酸	平	烯类	止呕
苦	寒	止痛		酸	平	烯类	理气/养气
苦	寒	祛湿		酸	平	烯类	解表/发表
苦	寒	祛风		酸	平	膀胱	利水/行水
苦	平	祛风湿/利关节		酸	平	膀胱	逐邪
苦	温	醇类	辟秽	酸	平	健脾/补脾	
苦	温	通鼻窍		酸	平	凉血	
苦	温	消食/化食		酸	平	活血	
苦	温	下气/破气		酸	平	清热	
苦	温	利湿		酸	平	祛寒	
苦	温	发汗		酸	平	祛风湿/利关节	
苦	毒	利水/行水		酸	有机酸类	大肠	消积/消滞
苦	毒	平喘/定喘		酸	有机酸类	大肠	通便
苦	毒	消肿		酸	有机酸类	大肠	止痢
苦	毒	杀虫/驱虫		酸	有机酸类	润燥	
苦	生物碱类	燥湿		酸	有机酸类	燥湿	
苦	蛋白质/氨基酸类	肝	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	酸	维生素类	降血脂	
苦	蛋白质/氨基酸类	肝	强心/清心	酸	维生素类	抗衰老	
苦	蛋白质/氨基酸类	肝	化痰/消痈/敛疮	酸	维生素类	止痛	
苦	蛋白质/氨基酸类	肝	调经/通淋	酸	维生素类	止渴	
苦	蛋白质/氨基酸类	清肺/润肺		酸	维生素类	解暑/消暑	
苦	蛋白质/氨基酸类	利咽		寒	生物碱类	燥湿	
苦	蛋白质/氨基酸类	抗衰老		寒	挥发油类/油类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊
苦	醛类	祛痰/化痰		寒	挥发油类/油类	通鼻窍	
苦	醛类	止呕		寒	挥发油类/油类	消食/化食	
苦	烯类	大肠	消积/消滞	寒	挥发油类/油类	止血	
苦	烯类	大肠	止痢	寒	挥发油类/油类	发汗	
苦	烯类	解表/发表		寒	烯类	止呕	
苦	维生素类	生津		寒	膀胱	利水/行水	
苦	维生素类	降血脂		寒	膀胱	逐邪	
苦	维生素类	止渴		寒	肾	止泻	
苦	维生素类	解暑/消暑		寒	肾	调经/通淋	
苦	脾	止泻		寒	肾	祛风湿/利关节	
辛	寒	膀胱	逐邪	平	烯类	大肠	消积/消滞
辛	寒	肾	调经/通淋	平	烯类	大肠	止痢
辛	寒	补肾/温肾		平	烯类	止呕	
辛	寒	强筋骨		平	烯类	理气/养气	
辛	寒	开胃/益胃		平	烯类	解表/发表	
辛	寒	健脾/补脾		平	膀胱	利水/行水	
辛	寒	散结/软坚		平	膀胱	逐邪	
辛	寒	活血		平	健脾/补脾		
辛	温	壮阳/温阳/益精		平	凉血		
辛	温	通鼻窍		平	活血		
辛	温	消食/化食		平	清热		

辛	温	发汗			平	祛寒		
辛	热	胺类	除痹		平	祛风湿/利关节		
辛	毒	利水/行水			温	挥发油类/油类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊
辛	毒	平喘/定喘			温	挥发油类/油类	止血	
辛	毒	消肿			温	醛类	止呕	
辛	毒	杀虫/驱虫			温	醛类	消肿	
辛	挥发油类/油类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊		温	醇类	辟秽	
辛	挥发油类/油类	止血			温	脾	止泻	
辛	醛类	止呕			热	毒	蛋白质/氨基酸类	利咽
辛	醇类	辟秽			热	毒	蛋白质/氨基酸类	抗衰老
辛	脾	止泻			热	毒	维生素类	降血脂
辛	大肠	消积/消滞			热	毒	维生素类	止渴
辛	大肠	涩肠			热	毒	维生素类	解暑/消暑
辛	大肠	止痢			热	毒	利水/行水	
辛	大肠	燥湿			热	毒	平喘/定喘	
甘	平	膀胱	逐邪		热	毒	散结/软坚	
甘	平	凉血			热	毒	消肿	
甘	平	活血			热	毒	杀虫/驱虫	
甘	平	清热			热	胺类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊
甘	平	祛风湿/利关节			热	胺类	除痹	
甘	温	挥发油类/油类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊	热	烷类/烃类	肾	调经/通淋
甘	温	挥发油类/油类	止血		热	烷类/烃类	肾	祛风湿/利关节
甘	温	醇类	辟秽		热	脾	开胃/益胃	
甘	温	强筋骨			热	脾	健脾/补脾	
甘	温	通鼻窍			热	脾	消食/化食	
甘	温	开胃/益胃			热	脾	止呕	
甘	温	消食/化食			热	脾	止泻	
甘	温	理气/养气			有机酸类	大肠	消积/消滞	
甘	温	下气/破气			有机酸类	大肠	通便	
甘	温	温中/和中/补中			有机酸类	大肠	止痢	
甘	温	利湿			有机酸类	大肠	活血	
甘	温	解毒			有机酸类	大肠	降火	
甘	温	降火			胺类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊	
甘	温	祛湿			胺类	三焦	理气/养气	
甘	温	发汗			胺类	三焦	降火	
甘	毒	利水/行水			甾醇类	肾	强筋骨	
甘	毒	平喘/定喘			甾醇类	肾	止泻	
甘	毒	散结/软坚			甾醇类	肾	调经/通淋	
甘	毒	消肿			甾醇类	肾	清热	
甘	有机酸类	大肠	消积/消滞		甾醇类	肾	解毒	
甘	有机酸类	大肠	止痢		甾醇类	肾	祛风湿/利关节	
甘	蛋白质/氨基酸类	肝	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳		挥发油类/油类	脾	止呕	
甘	蛋白质/氨基酸类	肝	强心/清心		挥发油类/油类	脾	止泻	

甘	蛋白质/氨基酸类	肝	化痰/消痈/敛疮	除烦/安神/ 解郁/定惊	挥发油类/油类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊
甘	蛋白质/氨基酸类	利咽			蛋白质/氨基酸类	肝	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳
甘	蛋白质/氨基酸类	抗衰老			蛋白质/氨基酸类	肝	强筋骨
甘	烯类	止呕			蛋白质/氨基酸类	肝	祛痰/化痰
甘	烯类	解表/发表			蛋白质/氨基酸类	肝	平喘/定喘
甘	维生素类	降血脂			蛋白质/氨基酸类	肝	强心/清心
甘	维生素类	止渴			蛋白质/氨基酸类	肝	凉血
甘	维生素类	解暑/消暑			蛋白质/氨基酸类	肝	止血
甘	肾	止泻			蛋白质/氨基酸类	肝	活血
甘	肾	调经/通淋			蛋白质/氨基酸类	肝	化痰/消痈/敛疮
淡	凉	毒	平喘/定喘		蛋白质/氨基酸类	肝	调经/通淋
淡	凉	大肠	消积/消滞		蛋白质/氨基酸类	肝	下气/破气
淡	凉	大肠	涩肠		蛋白质/氨基酸类	肝	祛风湿/利关节
淡	凉	大肠	止痢		蛋白质/氨基酸类	肝	解表/发表
淡	凉	凉血			萜类	胃	补肾/温肾
淡	凉	清热			萜类	胃	开胃/益胃
淡	凉	解毒			萜类	胃	健脾/补脾
淡	温	挥发油类/油类	三焦		萜类	胃	消食/化食
淡	温	挥发油类/油类	止血		萜类	胃	生津
淡	温	蛋白质/氨基酸类	利咽		萜类	胃	消积/消滞
淡	温	蛋白质/氨基酸类	抗衰老	萜类	胃	止呕	
淡	温	醛类	止呕	萜类	胃	调经/通淋	
淡	温	醛类	消肿	萜类	胃	温中/和中/补中	
淡	温	醇类	辟秽	萜类	胃	解暑/消暑	
淡	温	维生素类	降血脂	萜类	胃	解表/发表	
淡	温	维生素类	止渴	醛类	脾	止泻	
淡	温	维生素类	解暑/消暑	酯类/脂肪	脾	止呕	
淡	温	补肾/温肾		酯类/脂肪	脾	止泻	
淡	温	利尿/通淋		(黄)酮类	三焦	除烦/安神/解郁/定惊	
淡	温	壮阳/温阳/益精		(黄)酮类	三焦	降火	
淡	温	强筋骨		烷类/烃类	肾	补肾/温肾	
淡	温	通鼻窍		烷类/烃类	肾	强筋骨	
淡	温	开胃/益胃		烷类/烃类	肾	止泻	
淡	温	消食/化食		烷类/烃类	肾	调经/通淋	
淡	温	理气/养气		烷类/烃类	肾	清热	
淡	温	下气/破气		烷类/烃类	肾	解毒	
淡	温	温中/和中/补中		烷类/烃类	肾	祛风湿/利关节	
淡	温	止痛		烯类	脾	止泻	
淡	温	降火		烯类	大肠	消积/消滞	
淡	温	祛寒		烯类	大肠	涩肠	
淡	温	祛湿		烯类	大肠	止痢	
淡	温	祛风					