

本文节译自:

Zhang WJ. 2017. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines: (IV) Classification and network analysis of medicinal functions of Chinese herbal medicines. Network Pharmacology, 2(3): 82-104

## 中草药属性与功效网络药理学: (IV) 中草药功效属性分类与网络分析

Zhang WJ

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

### 摘要

本研究采用记录有功效属性的中草药交互式编码数据库 CHM-DATA Version 1.0。根据早先的研究数据和方法构建了中草药功效属性网络, 网络分析结果表明, 清热, 解毒, 清肺/润肺, 开胃/益胃, 生津, 止痛, 理气/养气, 温中/和中/补中, 及祛风, 是影响最重要的功效属性。在 $\alpha=0.01$ 水平上, 功效属性关系网络是一个无尺度复杂网络。由子网络/子模块识别方法, 鉴别出 7 个主要的模块及链接关系, 并给出模块功能。例如, 其中三个模块及其功效属性组成为: (清热, 解毒, 止痛, 理气/养气), (润肠, 润燥, 养血/补血, 滋阴, 下气/破气), (解表/发表, 发汗, 解痉, 透疹)。以主成份分析和系统聚类法对 78 种功效属性进行了分类分析。78 种功效属性的主成份分析表明, 功效属性 1~50 占变异总量的 79%, 1~60 占 88%, 说明没有占绝对优势的成份和属性。尽管各属性间功效有不同程度的重叠, 但其独立性仍较为明显。由 78 种功效属性的主成份分析得到的 78 个成份, 实质上是互相独立的综合性功效属性。每个综合性功效属性, 由 78 个原功效属性构成, 但原功效属性的重要性的贡献可大不相同。根据每个成份中各原功效属性的重要性程度, 确定了每个成份的主要功效属性构成, 并对各主成份给出了粗略定义。给出了原功效属性的类群特征, 例如, 在某水平上, -补肾/温肾, -开胃/益胃, 凉血, -理气/养气, -温中/和中/补中, 清热, 解毒, -祛寒, 是综合属性  $F_1$  的主要构成因素。其中, 同号表示作用方向相同。例如, 补肾/温肾, 开胃/益胃, 理气/养气, 温中/和中/补中, 祛寒, 影响方向是一致的; 而清热, 解毒, 凉血, 作用方向相同。系统聚类表明, 补肾/温肾-壮阳/温阳/益精, 通便-润肠, 及清热-解毒, 最早各自归为同一类, 两两之间功效最为接近。同时, 阐述了功效属性合并的一些原则, 也给出了主成份分析和系统聚类法的 Matlab 程序代码。

**关键词** 中草药, 功效属性, 属性分类, 主成份分析, 系统聚类, 网络。

### 1 引言

中医药理论历经数千年, 其基础研究发展十分缓慢, 严重阻碍中医药理论的发展和应用(Zhang, 2017a, b)。有鉴于此, Zhang (2017a)对 1127 种中草药属性进行了较为详尽的统计分析, 计算分析了总数、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。另外, 根据属性间的点相关, 构造出属性与功效关系网络, 归经-功效关系网络, 等等, 阐明了一些网络特性, 给出了较为详尽的属性与功效关系, 以及药理机制等(Zhang, 2017b)。此前, 又以典范相关分析确定了属性类间的典范相关函数, 并结合回归方法, 建立了中草药线性特征模型, 构造出中草药属性类典范相关网络(Zhang, 2017c)。然而, 正如较早些所指出(Zhang, 2017a, b),

中草药性属性、味属性及化学成份，具有较高的客观真实性；归经属性尽管比较抽象，但也能在一定程度上反映生物网络特征。功效属性的客观性，虽在总体上得到了承认，但对一些具体属性，仍存在定义和含义重复、模糊、混乱的情况，需要做进一步检验和完善。

本研究在前期工作基础上，根据早先的研究数据和方法构建了功效属性网络，以主成份分析和系统聚类法对 78 种中草药功效属性进行了分类分析，旨在为了解功效属性的相互关系，以及为功效属性的规范化定义和应用等提供理论和应用基础。

## 2 材料与方法

### 2.1 分析方法

#### 2.1.1 网络分析

采用中心性测度计算各属性的中心性值(Freeman, 1978; Opsahl et al., 2010; Zhang and Zhan, 2011; Huang and Zhang, 2012; Li and Zhang, 2013; Khansari et al., 2016; Zhang, 2016; Zhang and Feng, 2017)。在这里，度中心性是一个基于邻居的局部测度，反映了一个节点对其邻居的影响。度中心性是连接到该节点的链路的权重之和。紧密中心性是一个基于距离的全局性测度，为该节点与所有其他节点间测地距之和的倒数。中介中心性是一个基于距离的测度，代表一个节点控制网络中数据流的能力，为通过给定节点的测地线路径数量占网络中任意节点间测地线路径总数的比例。

应用网络类型检测方法，确定网络类型(Zhang, 2012b, 2017b; Zhang and Zhan, 2011)。

应用早先建立的算法(Zhang, 2016a)，识别可能的子网络/子模块。

#### 2.1.2 主成份分析

主成份分析(PCA)可以用来对属性进行分类排序，构造新的综合属性(张尧庭, 方开泰, 1982; Qi, 2003; Zhang, 2010; Vieira, 2012)。假设有  $n$  个中草药,  $m$  个属性, 已知  $m \times n$  取值矩阵  $(z_{ij})$ 。构造规范化取值矩阵  $(x_{ij})$ , 即取  $x_{ij} = (z_{ij} - z_{bar i}) / s_i$ , 其中

$$z_{bar i} = \sum_{j=1}^n z_{ij} / n$$

$$s_i = (\sum_{j=1}^n (z_{ij} - z_{bar i})^2 / (n-1))^{0.5}$$

$$i=1, 2, \dots, m$$

计算相关性矩阵  $R=(r_{ij})$

$$r_{ij} = \sum_{k=1}^n (x_{ik} x_{jk}) / (n-1) \quad i, j=1, 2, \dots, m$$

根据方程  $|pI - R| = 0$ , 确定特征值  $p_1, p_2, \dots, p_m$ , 及对应的特征向量  $u_1, u_2, \dots, u_m$ 。其中  $I$  为单位阵。设  $p_1 > p_2 > \dots > p_m$ , 令矩阵  $A = (a_{ij}) = (u_1(p_1)^{0.5} \ u_2(p_2)^{0.5} \ \dots \ u_m(p_m)^{0.5})$ , 则中草药  $j(j=1, 2, \dots, n)$  的第  $i$  个成分为

$$F_i = \sum_{k=1}^m (a_{ki} z_{kj}) \quad i=1, 2, \dots, m$$

取

$$a_{bar i} = \sum_{k=1}^m |a_{ki}| / m$$

$$std_i = (\sum_{k=1}^m (|a_{ki}| - a_{bar i})^2 / (m-1))^{0.5}$$

$$i=1, 2, \dots, m$$

对第  $i$  个成分  $F_i$ , 若  $a_{ki} > a_{bar i} + t * std_i$ , 则  $a_{ki}$  为  $F_i$  的主要构成属性,  $k=1, 2, \dots, m$ 。这里,  $t$  为一数值, 如  $t=1.5$ 。

以下是主成份分析的 Matlab 程序 PCA.m

```

clear
t=input('Input threshold t of variable significance beyond the (mean+t*std) (1-2): ');
file=input('Input the excel file name of data, e.g., pca.xls. Columns are indices and rows are samples: ','s');
raw=xlsread(file);
z=raw';
m=size(z,1); n=size(z,2);
zbar=mean(z');
s=std(z');
for i=1:m
for j=1:n
x(i,j)=(z(i,j)-zbar(i))/s(i);
end; end
for i=1:m
for j=1:m
r(i,j)=0;
for k=1:n;
r(i,j)=r(i,j)+x(i,k)*x(j,k)/(n-1);
end; end; end
[u,p]=eig(r);
sums=sum(sum(p));
for i=1:m
p2(i)=i;
end
for i=1:m-1
k=i;
for j=i:m-1
if (p(j+1,j+1)>p(k,k)) k=j+1; end
end
i2=p2(i); p2(i)=p2(k); p2(k)=i2;
l=p(i,i); p(i,i)=p(k,k); p(k,k)=l;
end
iss="";
iss=strcat(iss,'Eigenvalues, contribution percentages, and eigenvectors for principal components\n');
for i=1:m
thr=i;
iss=strcat(iss,num2str(p(i,i)),',' '(' ,num2str(p(i,i)/sums*100),'% ','')\n');
for j=1:m
iss=strcat(iss,num2str(u(j,p2(i))),',' ');
end
iss=strcat(iss,'\n');
end
iss=strcat(iss,'\n');
for j=1:m
for i=1:m a(i,j)=sqrt(p(j,j))*u(i,p2(j));

```

```

end; end
iss=strcat(iss,'Principal Components\n');
for j=1:m
iss=strcat(iss,'F',num2str(j),'=');
for i=1:m
e1=num2str(i);
if (a(i,j)>0) e2=num2str(a(i,j));
elseif (a(i,j)<0) e2=num2str(abs(a(i,j)));
end
if ((a(i,j)>0) & (i~=1)) iss=strcat(iss,'+',e2,'x',e1);
elseif ((a(i,j)>0) & (i==1)) iss=strcat(iss,e2,'x',e1);
elseif (a(i,j)<0) iss=strcat(iss,'-',e2,'x',e1);
end
end
iss=strcat(iss,'\n');
end
iss=strcat(iss,'\n');
mea=mean(abs(a));
stds=std(abs(a));
thr=mea+t*stds;
for j=1:m
for i=1:m
if (abs(a(i,j))>=thr(j)) sig(j,i)=sign(a(i,j));
else sig(j,i)=0;
end
end; end
for i=1:m
iss=strcat(iss,'Significant variables of principal component-',num2str(i),'\n');
for j=1:m
if (sig(i,j)~=0)
if (sig(i,j)<0) iss=strcat(iss,'-x',num2str(j),'');
else iss=strcat(iss,'x',num2str(j),'');
end
end
end
iss=strcat(iss,'\n');
end
fprintf(iss)

```

### 2.1.3 系统聚类

系统聚类又称层次聚类，或等级制聚类。设有  $n$  个属性， $m$  个中草药，已知  $m \times n$  取值矩阵  $(x_{ij})$ 。用二种方法之一构造规范化取值矩阵  $(a_{ij})$ 。标准差法为

$$a_{ij} = (x_{ij} - x_{bar i}) / s_i$$

$$i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n$$

其中

$$\begin{aligned} x_{bar\ i} &= \sum_{j=1}^n x_{ij} / n \\ s_i &= (\sum_{j=1}^n (x_{ij} - x_{bar\ i})^2 / (n-1))^{0.5} \\ & i=1, 2, \dots, m \end{aligned}$$

最大最小法为

$$\begin{aligned} a_{ij} &= (x_{ij} - \min x_{ik}) / (\max x_{ik} - \min x_{ik}) \\ & i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

其中  $\max x_{ik} = \max (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$ ,  $\min x_{ik} = \min (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$ 。

属性间距离采用 Euclidean 距离, Pearson 相关(1-r), 点相关(1-r), Jaccard 系数(1-r), 定义参见 Zhang (2011a-b, 2012b, 2015, 2017b)。类间距离有 3 种方法(张尧庭, 方开泰, 1982; 张文军, 2007), 最短距离法、最长距离法和类平均法。设有类 A 和类 B, 则对最短距离法、最长距离法和类平均法, 类 A 和类 B 之间的距离分别为

$$\begin{aligned} d_{AB} &= \min d_{ij} & i \in A, j \in B \\ d_{AB} &= \max d_{ij} & i \in A, j \in B \\ d_{AB} &= ((\sum_i \sum_j d_{ij}^2) / (n_A n_B))^{0.5} \\ & i \in A, j \in B \end{aligned}$$

其中,  $n_A$  和  $n_B$  分别为类 A 和类 B 中的属性个数。

聚类开始时,  $n$  个属性各自成一类。在类集合中, 选距离值  $d_{AB}$  最小的两类进行合并, 得一新类, ..., 如此类推, 直到  $n$  个属性归为同一类。

以下是系统聚类的 Matlab 程序 SystemCluster.m

```
clear
cluster=input('Choose cluster method (1: The shortest distance; 2: The longest distance; 3: Cluster averaging): ');
sele=input('Choose between sample distance or correlation (1: Euclidean distance; 2: Pearson correlation; 3: Point correlation; 4: Jaccard coefficient): ');
sel=input('Choose data standardization method (1: Standard deviation; 2: Max-min): ');
file=input('Input the excel file name of data, e.g., cluster.xls. Columns are indices and rows are samples to be clustered: ','s');
x=xlsread(file);
m=size(x,2); n=size(x,1);
xbar=mean(x); st=std(x); maxx=max(x); minn=min(x);
for i=1:m
for j=1:n
if (sel==1) a(i,j)=(x(j,i)-xbar(i))/st(i);
elseif (sel==2) a(i,j)=(x(j,i)-minn(i))/(maxx(i)-minn(i));
end
end; end
for i=1:n-1
for j=i+1:n
```

```

if (sele==1)
r(i,j)=sqrt(sum((a(:,i)-a(:,j)).^2))/m;
elseif (sele==2)
r(i,j)=1-corr(a(:,i),a(:,j));
elseif (sele==3)
aa=sum((a(:,i)==0) & (a(:,j)==0));
bb=sum((a(:,i)==0) & (a(:,j)~=0));
cc=sum((a(:,i)~=0) & (a(:,j)==0));
dd=sum((a(:,i)~=0) & (a(:,j)~=0));
r(i,j)=1-(aa*dd-bb*cc)/sqrt((aa+bb)*(cc+dd)*(aa+cc)*(bb+dd));
elseif (sele==4)
bb=sum((a(:,i)==0) & (a(:,j)~=0));
cc=sum((a(:,i)~=0) & (a(:,j)==0));
dd=sum((a(:,i)~=0) & (a(:,j)~=0));
r(i,j)=1-(dd-(cc+bb))/(dd+cc+bb);
end
r(j,i)=r(i,j);
end; end
for j=1:n r(j,j)=0; end
r1=r;
bb1=1;
u(bb1)=0;
nu(bb1)=n;
for i=1:nu(bb1) x(bb1,i)=i; end
for i=1:nu(bb1) y(bb1,i)=1; end
while (nu(bb1)>1)
aa=1e+10;
for i=1:nu(bb1)-1
for j=i+1:nu(bb1)
if (r(i,j)<=aa) aa=r(i,j); end
end; end
aa1=0;
for i=1:nu(bb1)-1
for j=i+1:nu(bb1)
if (abs(r(i,j)-aa)<=1e-06)
aa1=aa1+1; v(aa1)=i; w(aa1)=j;
end; end; end
for i=1:nu(bb1) s(i)=0; end
nn1=0;
for i=1:aa1
if ((v(i)~=0) & (w(i)~=0))
nn1=nn1+1;
for j=1:aa1
if ((v(j)==v(i)) | (v(j)==w(i)) | (w(j)==w(i)) | (w(j)==v(i)))
s(v(j))=nn1; s(w(j))=nn1;

```

```
if (j~=i) v(j)=0; w(j)=0; end; end
end
v(i)=0; w(i)=0;
end; end
for i=1:nn1
y(bb1+1,i)=0;
for j=1:nu(bb1)
if (s(j)==i)
for k=1:n
if (x(bb1,k)==j) x(bb1+1,k)=i; end
end
y(bb1+1,i)=y(bb1+1,i)+y(bb1,j);
end; end; end
for i=1:nu(bb1)
if (s(i)==0)
nn1=nn1+1;
for k=1:n
if (x(bb1,k)==i) x(bb1+1,k)=nn1; end
end
y(bb1+1,nn1)=y(bb1,i); end
end;
bb1=bb1+1;
u(bb1)=aa;
nu(bb1)=nn1;
for i=1:nu(bb1)-1
for j=i+1:nu(bb1)
if (cluster==1) r(i,j)=1e+10;
elseif (cluster==2) r(i,j)=-1e+10;
elseif (cluster==3) r(i,j)=0;
end
nk=0;
for k=1:n
if (x(bb1,k)==i)
nk=nk+1;
nkk=0;
for kk=1:n
if (x(bb1,kk)==j)
nkk=nkk+1;
if (cluster==1)
if (r1(k,kk)<r(i,j)) r(i,j)=r1(k,kk); end
elseif (cluster==2)
if (r1(k,kk)>r(i,j)) r(i,j)=r1(k,kk); end
elseif (cluster==3)
r(i,j)=r(i,j)+r1(k,kk)^2;
end
end
```

```
end; end; end; end
if (cluster==3)
r(i,j)=sqrt(r(i,j)/(nk*nkk));
end
r(j,i)=r(i,j);
end; end; end;
for k=1:n
y(bb1,k)=1; end
for i=bb1-1:-1:1
rr=0;
for j=1:nu(i+1)
ww=0;
for k=1:n
if (y(i+1,k)==j) ww=ww+1; v(ww)=k; end
end
vv=0;
for ii=1:ww
ee=0;
for jj=ii-1:-1:1
if (x(i,v(ii))==x(i,v(jj))) y(i,v(ii))=y(i,v(jj)); break; end
ee=ee+1;
end
if (ee==ii-1) vv=vv+1; y(i,v(ii))=rr+vv; end
end
rr=rr+vv;
end; end
for k=1:bb1
rs(k)=1-u(k);
end;
s=1; i=0;
while (n>0)
ss=1;
for j=s+1:bb1
if (rs(j)==rs(s)) ss=ss+1; end;
end
s=s+ss;
i=i+1;
la(i)=s-1;
if (s>=bb1) break; end
end
bb1=i;
yy=zeros(n);
for k=1:bb1
for i=1:nu(la(k))
for j=1:n
```



```

if (y(la(k),j)==i) yy(k,j)=i; end;
end; end; end
for k=1:bb1
rss(k)=rs(la(k)); uu(k)=u(la(k)); nuu(k)=nu(la(k));
end
iss="";
for k=1:bb1
iss=strcat(iss,'n','r=',num2str(rss(k)),'\n');
for i=1:nuu(k)
iss=strcat(iss,');
for j=1:n
if (yy(k,j)==i) iss=strcat(iss,num2str(j),','); end
end
iss=strcat(iss,');
end; end
fprintf(iss)

```

## 2.2 数据来源

采用中草药交互式编码数据库 CHM-DATA 1.0 (Zhang, 2017a, b)。该数据库记录有化学成份相关记载的中草药，共 1127 种，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。采用 78 种功效属性 (表 1)、1127 种中草药进行分析。本研究中，‘/’表示‘或’或‘和’。

表 1 各功效属性(Zhang, 2017c)。

Function	Clean liver, relax liver, consolidate liver, bright eyes or eliminate eye screens	Breed or blacked hair	Benefit gallbladder or cure jaundice	Reduce aminotransferase	Consolidate or warm kidney	Induce diuresis or treat strangurt
功效	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	生发/乌发	利胆/退黄	降转氨酶	补肾/温肾	利尿/通淋
$x$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$
Function	Activate water metabolism or excrete water	Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence	Strengthen bones and muscles	Promote granulation	Remove lung-heat or nourish lung	Eliminate or relieve phlegm
功效	利水/行水	壮阳/温阳/益精	强筋骨	生肌	清肺/润肺	祛痰/化痰
$x$	$x_7$	$x_8$	$x_9$	$x_{10}$	$x_{11}$	$x_{12}$
Function	Anti-asthma	Eliminate or relieve cough	Eliminate or relieve stuffy nose	Eliminate or relieve tuberculosis	Whet the appetite or reinforce stomach	Strengthen and reinforce spleen
功效	平喘/定喘	止咳	通鼻窍	祛肺结核	开胃/益胃	健脾/补脾
$x$	$x_{13}$	$x_{14}$	$x_{15}$	$x_{16}$	$x_{17}$	$x_{18}$
Function	Improve digestion	Promote secretion of saliva or body	Relieve sore throat	Resolve food stagnation	Repel foulness	Prevent or arrest vomiting
功效	消食/化食	生津	利咽	消积/消滞	辟秽	止呕
$x$	$x_{19}$	$x_{20}$	$x_{21}$	$x_{22}$	$x_{23}$	$x_{24}$
Function	Strengthen heart or clean heart-fire	Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest convulsion	Arrest epilepsy	Relieve constipation	Loosen the bowels	Moisten dryness

功效	强心/清心	除烦/安神/解郁/定惊	定痛	通便	润肠	润燥
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>25</sub>	<i>x</i> <sub>26</sub>	<i>x</i> <sub>27</sub>	<i>x</i> <sub>28</sub>	<i>x</i> <sub>29</sub>	<i>x</i> <sub>30</sub>
Function	Astringe intestine	Soften hardness or dissolve masses	Antidiarrheal	Stop diarrheal	Cool blood	Stop bleeding
功效	涩肠	散结/软坚	止痢	止泻	凉血	止血
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>31</sub>	<i>x</i> <sub>32</sub>	<i>x</i> <sub>33</sub>	<i>x</i> <sub>34</sub>	<i>x</i> <sub>35</sub>	<i>x</i> <sub>36</sub>
Function	Tonify blood	Invigorate blood circulation	Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing	Reduce swelling	Antidiabetics	Antiatherosclerosis
功效	养血/补血	活血	化瘀/消痛/敛疮	消肿	降糖	降血脂
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>37</sub>	<i>x</i> <sub>38</sub>	<i>x</i> <sub>39</sub>	<i>x</i> <sub>40</sub>	<i>x</i> <sub>41</sub>	<i>x</i> <sub>42</sub>
Function	Antihypertension	Nourish essential fluid (Yin)	Regulate menstruation or promote blood flow	Prevent miscarriage or abortion	Promote lactation or stimulate milk secretion	Regulate or enhance energy flow (Qi)
功效	降压	滋阴	调经/通淋	安胎	通乳/下乳	理气/养气
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>43</sub>	<i>x</i> <sub>44</sub>	<i>x</i> <sub>45</sub>	<i>x</i> <sub>46</sub>	<i>x</i> <sub>47</sub>	<i>x</i> <sub>48</sub>
Function	Inhibit or break energy flow (Qi)	Anti-aging	Remove obstruction in meridians and collaterals, or relax the muscles and joints	Nourish, warm spleen, stomach or Qi	Relieve pain	Anticancer
功效	下气/破气	抗衰老	通络/活络/舒筋	温中/和中/补中	止痛	抗癌
<i>y</i>	<i>y</i> <sub>49</sub>	<i>y</i> <sub>50</sub>	<i>y</i> <sub>51</sub>	<i>y</i> <sub>52</sub>	<i>y</i> <sub>53</sub>	<i>y</i> <sub>54</sub>
Function	Clear away heat	Eliminate dampness	Detoxification	Decrease internal heat	Quench ones thirst	Relieve summer-heat
功效	清热	利湿	解毒	降火	止渴	解暑/消暑
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>55</sub>	<i>x</i> <sub>56</sub>	<i>x</i> <sub>57</sub>	<i>x</i> <sub>58</sub>	<i>x</i> <sub>59</sub>	<i>x</i> <sub>60</sub>
Function	Dispel endogenous cold	Dispel endogenous damp	Dispel endogenous wind	Relieve rheumatism or lubricate the joints	Dry dampness	Suppress perspiration
功效	祛寒	祛湿	祛风	祛风湿/利关节	燥湿	止汗
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>61</sub>	<i>x</i> <sub>62</sub>	<i>x</i> <sub>63</sub>	<i>x</i> <sub>64</sub>	<i>x</i> <sub>65</sub>	<i>x</i> <sub>66</sub>
Function	Induce perspiration	Relieve external syndrome	Promote astringent function	Discharge pus, diminish inflammation or anti-infection	Relieve itching	Kill or expel parasites
功效	发汗	解表/发表	收敛	排脓/消炎/抗感染	止痒	杀虫/驱虫
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>67</sub>	<i>x</i> <sub>68</sub>	<i>x</i> <sub>69</sub>	<i>x</i> <sub>70</sub>	<i>x</i> <sub>71</sub>	<i>x</i> <sub>72</sub>
Function	Anti-malaria	Relieve muscular spasm	Expose exanthema or promote eruption	Dispel evil spirit	Anesthesia	Eliminate impediment
功效	抗疟/截疟	解痉	透疹	逐邪	麻醉	除痹
<i>x</i>	<i>x</i> <sub>73</sub>	<i>x</i> <sub>74</sub>	<i>x</i> <sub>75</sub>	<i>x</i> <sub>76</sub>	<i>x</i> <sub>77</sub>	<i>x</i> <sub>78</sub>

### 3 结果与分析

#### 3.1 网络分析

根据早先的研究数据和方法(Zhang, 2017b), 对功效属性构建网络( $\alpha=0.01$ ), 结果见图 1。各属性的中心性值如表 2 所示。由表 2 可见, 清热, 解毒, 清肺/润肺, 开胃/益胃, 生津, 止痛, 理气/养气, 温中/和中/补中, 及祛风, 是中心性值最大的 10 个功效属性。在某种意义上, 它们也是影响最重要的功效属性。

功效属性关系网络度分布的斜度为 0.2956, 网络聚集指数为 1.2591, 变异系数为 2.3496, 熵为 6.9513, 判断为复杂网络。二项分布  $p=0.2854$ ,  $\chi^2=12.7229$ , 判断为随机网络。Poisson 分布  $\lambda=5.1507$ ,  $\chi^2=657.8589$ , 判断为非随机网络。指数分布  $\lambda=0.1942$ ,  $\chi^2=27.6564$ , 判断为非指数分布网络。幂律分布  $\alpha=3.7878$ ,  $x_{\min}=6$ , Kolmogorov-Smirnov 拟合优度  $D=0.1667$ ;

节点度符合幂律分布，密度函数为  $p(x)=x^{-3.7878}$ ， $x \geq 6$ 。从各种指标综合来看，在  $\alpha=0.01$  水平上，功效属性关系网络是一个无尺度复杂网络。

表2 各属性的中心性值。

序号	功效	度中心性 (Degree)	功效	紧密中心性 (Closeness)	功效	中介中心性 (Betweenness)
1	清热	20	清热	0.0068	清热	0.2344
2	解毒	15	止痛	0.0062	解毒	0.1853
3	清肺/润肺	12	解毒	0.0062	止痛	0.1062
4	开胃/益胃	11	清肺/润肺	0.0061	祛风	0.1062
5	生津	11	开胃/益胃	0.0061	生津	0.1043
6	止痛	11	生津	0.006	温中/和中/补中	0.1043
7	理气/养气	10	理气/养气	0.006	解表/发表	0.0887
8	温中/和中/补中	10	祛风	0.0059	平喘/定喘	0.0879
9	祛风	10	温中/和中/补中	0.0058	解暑/消暑	0.0864
10	活血	9	活血	0.0057	安胎	0.086
11	祛寒	9	补肾/温肾	0.0056	止泻	0.0856
12	补肾/温肾	8	祛寒	0.0056	清肺/润肺	0.0826
13	消肿	8	消肿	0.0056	祛湿	0.0822
14	安胎	8	强筋骨	0.0055	祛寒	0.0807
15	壮阳/温阳/益精	7	凉血	0.0055	壮阳/温阳/益精	0.0803
16	强筋骨	7	祛湿	0.0053	消肿	0.0769
17	止泻	7	平喘/定喘	0.0053	理气/养气	0.0753
18	养血/补血	7	消食/化食	0.0053	杀虫/驱虫	0.0715
19	祛湿	7	止泻	0.0053	止血	0.0677
20	祛痰/化痰	6	壮阳/温阳/益精	0.0052	活血	0.0674
21	平喘/定喘	6	养血/补血	0.0052	抗癌	0.0635
22	止咳	6	下气/破气	0.0052	收敛	0.0632
23	健脾/补脾	6	化痰/消痈/敛疮	0.0052	除烦/安神/解郁/定惊	0.0624
24	除烦/安神/解郁/定惊	6	通络/活络/舒筋	0.0052	养血/补血	0.0616
25	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	5	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	0.0051	燥湿	0.0613
26	消食/化食	5	健脾/补脾	0.0051	止痢	0.0594
27	润肠	5	利尿/通淋	0.005	排脓/消炎/抗感染	0.059
28	润燥	5	涩肠	0.005	祛风湿/利关节	0.0586
29	凉血	5	利湿	0.005	开胃/益胃	0.051
30	止血	5	除烦/安神/解郁/定惊	0.005	通便	0.0498
31	化痰/消痈/敛疮	5	止血	0.005	止咳	0.0483
32	通络/活络/舒筋	5	祛风湿/利关节	0.005	强心/清心	0.0445
33	祛风湿/利关节	5	止咳	0.0049	消积/消滞	0.0438
34	解表/发表	5	润肠	0.0049	润燥	0.0434
35	杀虫/驱虫	5	安胎	0.0048	降压	0.0426
36	利尿/通淋	4	利咽	0.0048	祛痰/化痰	0.04
37	祛肺结核	4	润燥	0.0048	滋阴	0.0396
38	强心/清心	4	滋阴	0.0048	下气/破气	0.0396

39	通便	4	祛痰/化痰	0.0047	利尿/行水	0.0392
40	降血脂	4	解暑/消暑	0.0047	利尿/通淋	0.0384
41	滋阴	4	通便	0.0047	止汗	0.0381
42	下气/破气	4	逐邪	0.0047	润肠	0.0373
43	抗癌	4	利尿/行水	0.0046	消食/化食	0.0369
44	解暑/消暑	4	强心/清心	0.0045	强筋骨	0.0361
45	燥湿	4	杀虫/驱虫	0.0045	健脾/补脾	0.0361
46	利尿/行水	3	祛肺结核	0.0045	化痰/消痈/敛疮	0.0346
47	消积/消滞	3	抗衰老	0.0045	降火	0.0339
48	止呕	3	止渴	0.0045	降血脂	0.0327
49	涩肠	3	辟秽	0.0045	逐邪	0.0327
50	散结/软坚	3	抗癌	0.0045	利湿	0.0323
51	止痢	3	排脓/消炎/抗感染	0.0045	涩肠	0.032
52	抗衰老	3	止呕	0.0044	补肾/温肾	0.0308
53	利湿	3	散结/软坚	0.0044	祛肺结核	0.0308
54	止渴	3	降血脂	0.0044	凉血	0.0308
55	止汗	3	止汗	0.0044	止渴	0.0304
56	收敛	3	消积/消滞	0.0043	散结/软坚	0.0293
57	排脓/消炎/抗感染	3	燥湿	0.0042	抗衰老	0.0293
58	逐邪	3	解表/发表	0.0041	降糖	0.0289
59	生发/乌发	2	止痒	0.0041	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳	0.0274
60	利咽	2	收敛	0.0041	生发/乌发	0.0274
61	辟秽	2	降糖	0.004	生肌	0.0274
62	降糖	2	调经/通淋	0.004	通鼻窍	0.0274
63	降压	2	通鼻窍	0.004	利咽	0.0274
64	降火	2	透疹	0.0039	辟秽	0.0274
65	发汗	2	生发/乌发	0.0039	止呕	0.0274
66	止痒	2	除痹	0.0038	调经/通淋	0.0274
67	解痉	2	降压	0.0038	通络/活络/舒筋	0.0274
68	透疹	2	降火	0.0038	发汗	0.0274
69	生肌	1	止痢	0.0037	止痒	0.0274
70	通鼻窍	1	生肌	0.0034	抗疟/截疟	0.0274
71	调经/通淋	1	发汗	0.0032	解痉	0.0274
72	抗疟/截疟	1	解痉	0.0032	透疹	0.0274
73	除痹	1	抗疟/截疟	0.0029	除痹	0.0274
74	利胆/退黄	0	利胆/退黄	0	利胆/退黄	0
75	降转氨酶	0	降转氨酶	0	降转氨酶	0
76	定痫	0	定痫	0	定痫	0
77	通乳/下乳	0	通乳/下乳	0	通乳/下乳	0
78	麻醉	0	麻醉	0	麻醉	0

由前述子网络/子模块识别方法，鉴别出如下 7 个主要的模块及链接关系，并由此给出模块功能

模块 1:

(理气/养气, 止痛) (理气/养气, 清热) (理气/养气, 解毒) (止痛, 清热) (止痛, 解毒)

功效属性组成: 清热, 解毒, 止痛, 理气/养气

模块功能: 清热-解毒-理气

模块 2:

(润肠, 润燥) (润肠, 养血/补血) (润肠, 下气/破气) (润燥, 养血/补血) (润燥, 滋阴)

功效属性组成: 润肠, 润燥, 养血/补血, 滋阴, 下气/破气

模块功能: 润肠-润燥-滋阴

模块 3:

(发汗, 解表/发表) (发汗, 解痉) (解表/发表, 解痉) (解表/发表, 透疹)

功效属性组成: 解表/发表, 发汗, 解痉, 透疹

模块功能: 解表-发汗-解痉

模块 4:

(平喘/定喘, 降血脂) (平喘/定喘, 抗癌) (止咳, 降血脂) (止咳, 抗癌)

功效属性组成: 平喘/定喘, 止咳, 降血脂, 抗癌

模块功能: 平喘-止咳

模块 5:

(祛肺结核, 散结/软坚) (祛肺结核, 消肿) (散结/软坚, 消肿)

功效属性组成: 散结/软坚, 消肿, 祛肺结核

模块功能: 散结-消肿

模块 6:

(开胃/益胃, 止呕) (止呕, 温中/和中/补中) (止呕, 祛寒)

功效属性组成: 止呕, 温中/和中/补中, 开胃/益胃, 祛寒

模块功能: 补脾-益胃

模块 7:

(清肝/补肝/舒肝/明目/退翳, 壮阳/温阳/益精) (补肾/温肾, 壮阳/温阳/益精) (壮阳/温阳/益精, 止泻)

功效属性组成: 壮阳/温阳/益精, 补肾/温肾, 清肝/补肝/舒肝/明目/退翳, 止泻

模块功能: 养肝-养肾

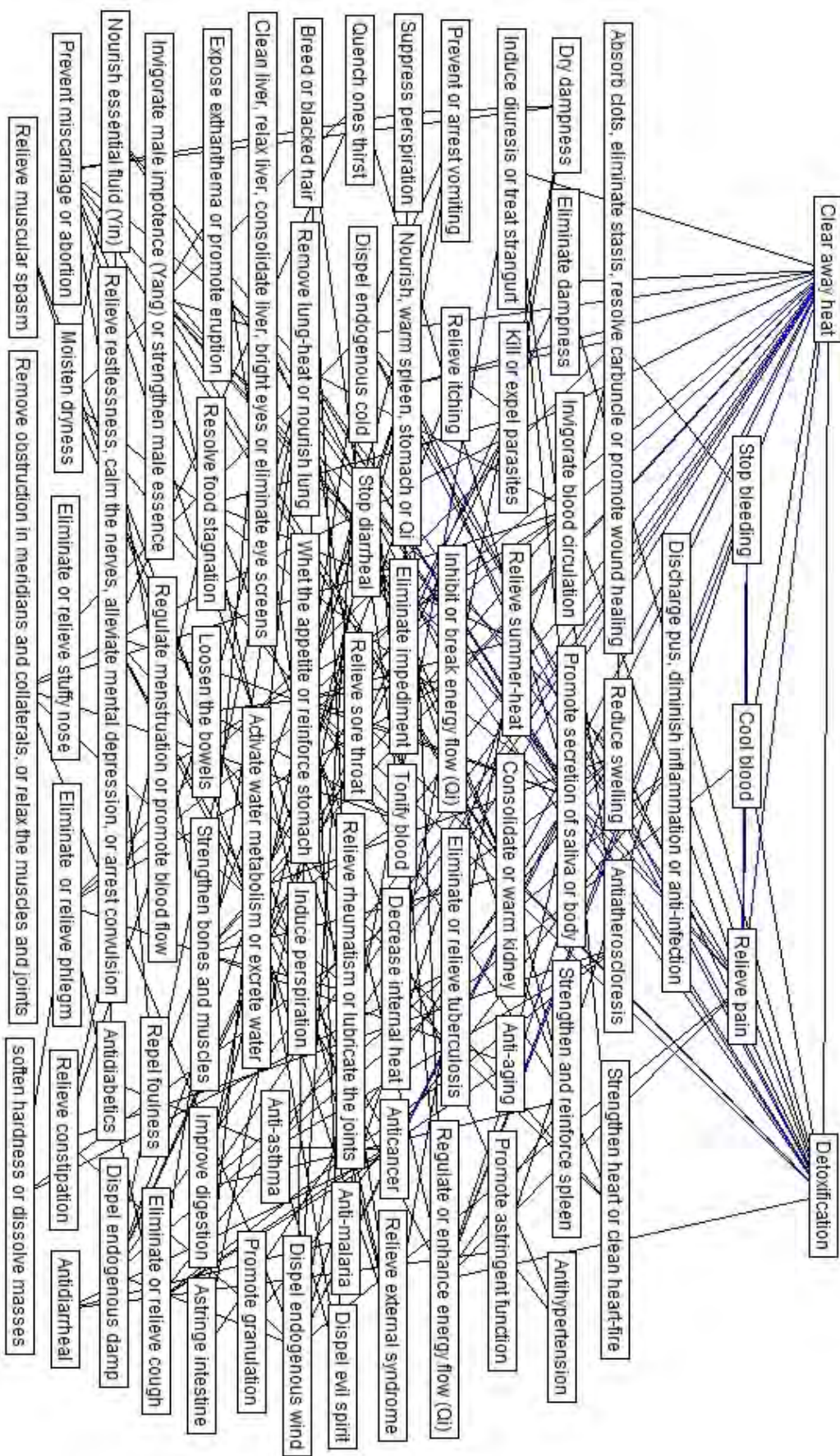


图 1 中草药功效关系网络(Zhang, 2012a)。黑色链接为正的点相关，蓝色为负的点相关。未列孤立节点。

### 3.2 主成份分析

78种功效属性的主成份分析表明,功效属性  $x_1 \sim x_{15}$  占变异总量的33%,  $x_1 \sim x_{50}$  占79%,  $x_1 \sim x_{60}$  占88%(表3)。最大特征值为2.7571(3.5348%), 最小特征值为0.3495(0.4481%)。从而说明,没有占绝对优势的成份和属性。尽管各属性间功效有不同程度的重叠,但其独立性也是较为明显的。

由78种功效属性的主成份分析得到的78个成份(见附件),实质上就是78个没有重叠的、互相独立的综合性功效属性。每个综合性功效属性,由78个原功效属性构成,但原功效属性的重要性的贡献可大不相同(表3,主成份分析附件)。

因而,可根据每个成份中各原功效属性的重要性程度,大体判断该成份的主要功效,以及原功效属性的类群特征。可给定不同的  $t$  值,来大体确定每个成份(表3)的主要功效属性构成(表4)。由表4可见,可以对各主成份给出粗略定义如下

- $F_1$ : 清热-解毒综合属性
- $F_2$ : 祛湿-祛风-止痛综合属性
- $F_3$ : 补肾-壮阳-益精综合属性
- $F_4$ : 通便-润肠综合属性
- $F_5$ : 杀虫-止痒综合属性
- $F_6$ : 解表-发表综合属性
- $F_7$ : 生津-润燥-滋阴综合属性
- $F_8$ : 降火-燥湿-安胎综合属性
- $F_9$ : 利尿-通淋综合属性
- $F_{10}$ : 止汗综合属性
- $F_{11}$ : 强心-收敛综合属性
- $F_{12}$ : 发汗综合属性
- $F_{13}$ : 降血脂-抗癌综合属性
- $F_{14}$ : 涩肠-止泻综合属性
- $F_{15}$ : 补脾-利湿综合属性

原功效属性的类群特征见表4所示。例如,在  $t=1.5$  水平上, -补肾/温肾, -开胃/益胃, 凉血, -理气/养气, -温中/和中/补中, 清热, 解毒, -祛寒, 大体上为更广义上的同类功效属性,它们是综合属性  $F_1$  的主要构成因素。其中,负号表示负的作用。同号表示作用方向相同。例如,补肾/温肾, 开胃/益胃, 理气/养气, 温中/和中/补中, 祛寒, 影响方向是一致的;而清热, 解毒, 凉血, 也是一致的。

表3 78种功效属性的成份构成(只列出前15个)。

	$F_1$	$F_2$	$F_3$	$F_4$	$F_5$	$F_6$	$F_7$	$F_8$	$F_9$	$F_{10}$	$F_{11}$	$F_{12}$	$F_{13}$	$F_{14}$	$F_{15}$
Eigenvalues	2.7571	2.3739	2.1204	1.8337	1.7209	1.6407	1.6256	1.6178	1.5005	1.4296	1.4045	1.3683	1.3393	1.3252	1.3002
Contribution (%)	3.5348	3.0435	2.7185	2.3509	2.2063	2.1035	2.0841	2.074	1.9237	1.8329	1.8006	1.7542	1.717	1.699	1.6669
$x_1$	-0.1693	0.1789	0.3681	-0.0574	0.0282	-0.1052	-0.0042	0.2013	-0.1289	-0.1338	0.0063	-0.0503	0.0823	0.1918	0.2121
$x_2$	-0.0272	0.0555	0.1389	-0.0338	-0.0315	-0.0394	-0.0559	0.0022	0.0552	-0.0378	-0.004	-0.0274	0.1508	0.1494	0.0335
$x_3$	0.0401	0.0355	0.0227	0.0558	-0.0251	-0.0413	0.0118	0.0163	-0.1702	-0.1067	-0.1143	-0.1444	-0.1003	0.0737	0.1985
$x_4$	0.0391	0.0123	0.0006	0.0225	0.019	-0.0131	0.0064	0.0011	-0.0227	-0.0154	0.0348	-0.0292	-0.0043	0.0173	0.0226
$x_5$	-0.3515	0.2398	0.5695	-0.0442	-0.0392	-0.1643	0.1865	0.0786	0.0543	0.1167	0.0657	0.0232	-0.0677	0.0726	0.0584
$x_6$	0.1279	0.1516	0.0507	-0.005	-0.063	-0.0053	0.0436	0.0895	-0.3745	0.1033	-0.1528	-0.1463	-0.2109	-0.0205	-0.1618
$x_7$	0.0522	-0.0412	-0.0629	-0.1828	0.1094	0.3182	0.1227	0.0513	-0.0403	0.1724	0.0493	0.2705	-0.0593	-0.1856	0.1746
$x_8$	-0.2843	0.2224	0.4342	0.0165	0.1387	-0.2561	0.2082	-0.0149	-0.044	0.1574	0.0862	0.131	-0.1807	-0.0931	-0.145
$x_9$	-0.1715	-0.0437	0.4293	-0.0848	-0.1627	-0.0592	-0.0539	0.1214	0.0545	0.1026	0.0838	0.0323	0.1443	0.1776	0.069
$x_{10}$	0.0958	-0.0105	0.0746	0.0857	-0.1105	-0.026	0.0547	-0.0841	0.1824	0.024	-0.1423	0.1404	0.219	-0.0978	-0.2375
$x_{11}$	-0.1366	0.3316	-0.2734	-0.2605	0.0048	-0.1736	-0.1308	-0.0416	0.2662	0.1011	0.0625	-0.0043	-0.2178	0.0047	0.1282
$x_{12}$	-0.0978	0.0285	-0.4061	-0.2711	0.0353	-0.0656	0.1444	0.2145	0.0827	0.0126	-0.2158	0.0766	-0.0273	0.3555	-0.0981

$x_{13}$	-0.0742	0.0261	-0.2953	-0.3666	-0.1404	-0.2958	0.1322	0.1292	-0.0978	-0.0318	0.0235	-0.0477	0.1287	-0.2879	0.1685
$x_{14}$	-0.0317	0.0398	-0.4005	-0.3894	-0.159	-0.3815	0.1136	0.151	0.1221	0.016	-0.1466	-0.0817	0.0097	-0.0159	0.1247
$x_{15}$	-0.0603	-0.0379	-0.0576	-0.0404	0.0243	-0.0753	-0.0406	0.0266	0.071	-0.0376	0.02	-0.0808	-0.0737	0.0762	-0.0325
$x_{16}$	0.0081	0.0236	-0.07	0.013	-0.0719	0.113	0.1541	0.0594	-0.1049	0.1983	0.1357	0.0992	0.0407	0.1906	-0.2141
$x_{17}$	-0.3771	0.1847	-0.2177	0.2997	-0.1111	0.146	0.2021	-0.105	0.0258	0.1473	0.1437	-0.0523	0.0399	0.208	0.0942
$x_{18}$	-0.3044	0.2325	0.0142	0.2184	-0.0587	0.0922	0.2403	-0.1277	0.0074	0.0956	-0.0349	-0.028	-0.0888	0.0372	0.2661
$x_{19}$	-0.2247	0.1042	-0.1928	0.2088	-0.131	0.1911	0.2144	-0.1713	-0.0663	0.1779	0.1429	0.0093	0.1292	0.1512	-0.0452
$x_{20}$	-0.143	0.4428	-0.2235	0.1312	-0.1112	0.0635	-0.4509	-0.0641	0.0665	0.184	0.0863	0.095	0.0619	-0.0651	-0.056
$x_{21}$	0.0412	0.1353	-0.0997	-0.1083	0.0396	-0.0862	-0.0732	-0.0142	-0.0187	0.0674	0.016	-0.1202	-0.1941	0.0029	-0.1041
$x_{22}$	-0.0139	-0.0009	-0.0217	-0.0634	0.2377	0.2596	0.1001	-0.2142	0.0505	0.0468	-0.1432	0.0342	0.1396	0.0173	0.1878
$x_{23}$	-0.0962	-0.0541	-0.0535	0.1059	-0.0171	0.0392	-0.0343	-0.0467	-0.1368	-0.1431	-0.2613	-0.0853	0.0178	-0.0563	-0.0531
$x_{24}$	-0.1566	0.0284	-0.1591	0.1184	0.1102	0.0069	0.2046	0.0841	0.0754	-0.1229	0.1044	-0.0467	0.0189	0.0702	-0.2129
$x_{25}$	-0.115	0.2153	-0.0086	0.1227	-0.1387	0.1421	0.0178	0.0606	-0.3516	-0.0347	-0.3945	-0.0281	-0.203	-0.0541	0.0464
$x_{26}$	-0.1274	0.2129	-0.1041	0.1265	-0.2083	0.091	-0.1156	-0.0101	-0.3935	-0.0945	-0.2715	-0.0149	0.0182	-0.0672	-0.0312
$x_{27}$	-0.0131	-0.0188	-0.0004	-0.004	-0.0236	0.0125	-0.0102	-0.0051	0.0034	-0.028	-0.0018	-0.0128	-0.0017	-0.0125	-0.0295
$x_{28}$	0.0089	0.1835	0.1261	-0.4368	0.3147	0.1178	0.1109	-0.3428	-0.1499	-0.1744	0.0221	-0.1868	0.0407	-0.0555	-0.1682
$x_{29}$	-0.0939	0.2233	0.1453	-0.4871	0.3035	0.0768	0.0767	-0.3748	-0.0257	-0.1972	0.0238	-0.069	0.0287	-0.0004	-0.1747
$x_{30}$	-0.062	0.2285	-0.0302	-0.0735	0.1287	0.1302	-0.374	-0.1395	0.0264	-0.0287	0.1416	0.0823	0.1452	-0.0553	-0.0757
$x_{31}$	-0.0812	0.123	-0.0566	0.023	0.0141	-0.0676	-0.0364	0.0387	0.174	0.1953	-0.0637	-0.1378	-0.1813	-0.352	-0.2613
$x_{32}$	0.091	-0.0081	-0.099	-0.1073	0.0237	0.1381	0.1471	0.2457	-0.1446	0.0901	0.0131	0.2248	-0.0936	0.1447	-0.2751
$x_{33}$	0.0488	0.0763	0.0312	0.0283	-0.0672	-0.0312	0.0158	0.0837	0.1881	-0.1133	-0.2665	0.1859	0.1021	-0.0728	0.0108
$x_{34}$	-0.1994	0.0865	0.152	0.1447	0.0135	-0.1721	0.1839	0.0809	0.1754	0.1736	-0.0285	-0.1266	-0.1824	-0.3956	-0.2097
$x_{35}$	0.3545	0.1121	0.0358	0.1504	0.002	-0.1943	-0.0498	-0.0613	0.1903	-0.045	-0.0214	-0.1176	0.0457	0.1741	-0.0658
$x_{36}$	0.3226	0.0202	0.1398	0.1293	-0.0896	-0.1355	-0.0163	-0.1527	0.3665	0.0539	-0.2049	0.0037	0.0482	-0.0016	-0.2104
$x_{37}$	-0.1533	0.1895	0.202	-0.1381	0.0044	0.099	-0.2006	-0.1782	-0.0763	-0.2359	0.0554	0.1561	0.0377	0.0055	0.0206
$x_{38}$	-0.0015	-0.3231	0.1392	-0.1483	-0.3094	0.1882	-0.0882	-0.1468	0.0251	-0.092	0.0953	0.1165	-0.0791	-0.094	-0.0491
$x_{39}$	0.1828	-0.1959	0.0974	-0.0753	-0.1496	0.1805	0.001	-0.1648	0.1	0.0561	0.0062	0.1517	-0.1291	0.0499	-0.0115
$x_{40}$	0.3104	-0.2044	-0.0495	-0.1411	-0.2332	0.1141	0.1557	0.0225	-0.0457	0.1654	0.264	0.228	-0.1147	-0.0144	-0.0293
$x_{41}$	0.058	0.0585	-0.0703	-0.0537	-0.05	-0.1077	-0.0359	0.0348	-0.0622	0.0178	0.1175	-0.0572	-0.0469	-0.1004	0.1634
$x_{42}$	0.0144	0.0077	0.0046	-0.1627	-0.0773	-0.0528	0.053	0.0648	-0.1784	-0.0246	0.1091	-0.1814	0.3637	-0.1765	-0.0423
$x_{43}$	-0.034	0.0691	0.0505	-0.0069	-0.1103	0.0072	-0.0566	0.2067	-0.1155	-0.0286	-0.1301	-0.0043	0.2303	0.0644	-0.08
$x_{44}$	-0.0688	0.338	-0.1324	0.0322	-0.0788	-0.0194	-0.4167	-0.0817	0.1157	0.0226	0.2143	0.0258	-0.0529	-0.0289	0.1659
$x_{45}$	0.0052	-0.0634	0.1878	-0.0945	-0.18	0.1241	-0.0093	-0.0873	0.0575	-0.1063	-0.2224	0.1656	-0.1738	-0.1308	0.0695
$x_{46}$	-0.149	0.0887	0.2435	0.0493	-0.0447	0.0362	0.0642	0.3511	0.1398	-0.1784	0.1044	0.0638	0.015	-0.0687	0.1011
$x_{47}$	0.0753	0.0055	0.0674	0.0387	-0.0823	0.141	0.0774	0.0648	0.0014	-0.0618	0.0295	0.0643	-0.0222	-0.138	0.1216
$x_{48}$	-0.3885	-0.0443	-0.1671	0.1599	-0.1775	0.102	0.077	-0.1369	0.0644	-0.2944	0.1399	-0.0377	-0.1115	-0.1372	0.0896
$x_{49}$	-0.0895	0.0868	-0.1637	-0.1793	0.1886	0.0886	0.1577	-0.0697	0.1751	0.089	-0.146	0.1328	0.0892	0.2489	0.0745
$x_{50}$	-0.0267	0.0642	-0.1008	-0.0516	-0.0378	-0.0451	-0.0853	0.043	0.0632	0.0827	-0.0685	0.0357	0.0462	0.0762	-0.0334
$x_{51}$	-0.1168	-0.2783	0.0355	-0.1407	-0.0166	0.0201	-0.203	-0.0229	-0.0429	0.0152	0.0565	-0.1265	0.031	0.0116	-0.117
$x_{52}$	-0.3433	-0.1138	-0.2162	0.2256	0.1114	0.0074	0.2017	-0.0745	0.0837	-0.2521	0.0822	-0.0924	0.1057	-0.0944	-0.129
$x_{53}$	-0.1782	-0.4668	-0.0429	-0.0314	-0.2837	0.0618	-0.0491	-0.0702	0.0148	-0.1952	0.0872	-0.0325	-0.1064	-0.0923	-0.0805
$x_{54}$	0.0034	-0.0069	-0.0975	-0.0637	-0.1424	-0.0827	0.1002	0.101	-0.2163	-0.0981	0.0751	-0.0324	0.3897	-0.1851	-0.0449
$x_{55}$	0.6484	0.1534	-0.0138	0.2437	0.1308	-0.1465	0.0238	-0.0084	-0.1064	-0.1442	0.0983	-0.1266	-0.0738	0.0401	0.101
$x_{56}$	0.292	0.0315	-0.0201	0.1483	-0.0377	-0.1389	0.1559	-0.1929	0.1032	-0.1998	0.0456	-0.0789	-0.0227	-0.0041	0.2794
$x_{57}$	0.646	0.0014	-0.018	0.0813	0.04	-0.0497	0.0891	-0.0104	-0.0894	0.0047	0.2456	-0.0104	-0.0646	0.0108	0.0603
$x_{58}$	0.091	0.2033	-0.0384	0.0708	0.1464	0.1254	-0.2039	0.3712	0.0156	-0.2429	0.0531	0.0278	-0.0902	-0.0285	-0.1411
$x_{59}$	-0.04	0.2101	-0.1362	0.0642	-0.1284	0.064	-0.275	-0.0562	-0.1109	0.1667	0.0106	-0.0011	0.1252	-0.0096	-0.1286
$x_{60}$	-0.0313	-0.0422	-0.0297	0.248	0.1496	-0.1047	0.0484	-0.179	0.0083	-0.0191	-0.0423	0.0702	0.2164	-0.0285	0.088
$x_{61}$	-0.3711	-0.2702	-0.1774	0.0538	0.0239	-0.0606	0.0663	0.0389	0.0819	-0.2135	0.1758	-0.1062	-0.0887	0.0825	-0.1433
$x_{62}$	-0.2145	-0.4672	0.044	0.0799	0.1392	-0.063	-0.2521	-0.0129	-0.0336	0.1864	-0.1813	-0.1136	-0.083	0.0801	0.0716
$x_{63}$	-0.2026	-0.5501	0.0103	-0.0019	0.1901	-0.128	-0.32	0.0176	-0.0504	0.0741	-0.0466	-0.043	-0.092	0.0887	0.0273
$x_{64}$	-0.096	-0.093	0.263	-0.1467	-0.1965	0.0001	-0.1033	0.1807	0.0566	0.1669	0.0675	-0.2013	0.2701	0.0943	0.0765
$x_{65}$	-0.0136	0.0724	-0.0364	0.1065	0.332	0.1731	-0.0418	0.4672	0.1067	-0.2376	0.1359	0.0416	-0.0471	0.0332	-0.1074
$x_{66}$	-0.067	0.1057	0.0291	-0.0298	0.0028	0.1199	-0.1198	0.2447	0.1753	-0.3054	-0.0081	0.2807	-0.0339	-0.0892	0.0854
$x_{67}$	-0.1137	-0.1097	-0.0635	0.0274	0.1399	-0.2247	-0.0191	-0.083	-0.1093	0.0664	-0.058	0.3884	0.0668	-0.0746	0.0664
$x_{68}$	-0.1465	-0.1613	-0.0835	0.186	0.2594	-0.4408	-0.0145	-0.1322	-0.2117	-0.0388	0.0902	0.3913	0.1084	-0.0921	0.0024
$x_{69}$	0.09	0.0554	0.0626	0.1206	-0.0991	-0.0516	0.0434	-0.0809	0.2483	-0.0843	-0.365	0.1349	0.2442	-0.0761	-0.1079
$x_{70}$	0.1305	0.0321	0.0072	0.0542	-0.0961	0.1137	0.0763	0.1002	-0.0086	0.1246	0.2145	-0.0142	0.2811	-0.1582	-0.1094
$x_{71}$	-0.0057	-0.1497	-0.0225	0.1554	0.3988	0.0865	-0.0578	0.1353	0.0274	0.1083	-0.0517	-0.1496	0.1229	-0.1529	0.1613
$x_{72}$	0.0044	-0.1103	0.0008	-0.004	0.4319	0.3091	0.0022	0.133	0.0812	0.2985	-0.0821	-0.114	0.0854	-0.2247	0.1309
$x_{73}$	0.0472	0.0106	-0.0523	0.0036	0.0614	0.1736	0.09	0.1107	-0.0737	0.0397	-0.1615	0.1103	0.0296	-0.0866	0.0748
$x_{74}$	-0.0443	-0.0774	-0.0513	-0.0319	0.0987	-0.1673	-0.0352	0.0776	-0.1091	-0.0065	-0.0257	0.3087	0.0456	0.0198	-0.0054
$x_{75}$	-0.0308	0.0407	0.0569	0.1399	0.1264	-0.2814	-0.0956	-0.082	-0.2849	0.0762	0.1247	0.1989	-0.0616	0.0135	-0.1054
$x_{76}$	-0.0052	0.0231	-0.0809	-0.1522	-0.0299	-0.0229	0.0483	0.0421	0.0176	0.1034	0.0757	0.1148	-0.0453	-0.2127	0.2031
$x_{77}$	-0.0407	-0.0889	0.0391	-0.0223	-0.0279	-0.0111	-0.109	0.0393	0.007	0.0816	-0.0246	-0.1312	0.0766	0.0734	0.0367
$x_{78}$	-0.0334	-0.0434	0.0329	0.0177	0.0097	0.0485	0.0061	0.029	0.0413	0.1418	0.0138	-0.131	0.0472	-0.176	0.0591

属性  $x_{1}$ - $x_{78}$  见表 1。



表 4 78 种功效属性的成份属性构成(只列出前 15 个)。

	t=1.5	t=2	t=2.5
F <sub>1</sub>	-补肾/温肾, -开胃/益胃, 凉血, -理气/养气, -温中/和中/补中, 清热, 解毒, -祛寒;	清热, 解毒	清热, 解毒
F <sub>2</sub>	清肺/润肺, 生津, -活血, 滋阴, -止痛, -祛湿, -祛风;	生津, -止痛, -祛湿, -祛风	生津, -止痛, -祛湿, -祛风
F <sub>3</sub>	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳, 补肾/温肾, 壮阳/温阳/益精, 强筋骨, -祛痰/化痰, -平喘/定喘, -止咳;	清肝/补肝/舒肝/明目/退翳, 补肾/温肾, 壮阳/温阳/益精, 强筋骨, -祛痰/化痰, -止咳	补肾/温肾, 壮阳/温阳/益精, 强筋骨
F <sub>4</sub>	-祛痰/化痰, -平喘/定喘, -止咳, 开胃/益胃, -通便, -润肠;	-平喘/定喘, -止咳, -通便, -润肠	-止咳, -通便, -润肠
F <sub>5</sub>	通便, 润肠, -活血, -止痛, 燥湿, 解表/发表, 止痒, 杀虫/驱虫;	通便, -活血, 燥湿, 止痒, 杀虫/驱虫	止痒, 杀虫/驱虫
F <sub>6</sub>	利水/行水, -壮阳/温阳/益精, -平喘/定喘, -止咳, 消积/消滞, -解表/发表, 杀虫/驱虫, -透疹;	利水/行水, -平喘/定喘, -止咳, -解表/发表, 杀虫/驱虫	-止咳, -解表/发表
F <sub>7</sub>	-生津, -润燥, -滋阴, -止渴, -祛风;	-生津, -润燥, -滋阴, -祛风	-生津, -润燥, -滋阴
F <sub>8</sub>	-通便, -润肠, 安胎, 降火, 燥湿;	-通便, -润肠, 安胎, 降火, 燥湿	-润肠, 安胎, 降火, 燥湿
F <sub>9</sub>	-利尿/通淋, 清肺/润肺, -强心/清心, -除烦/安神/解郁/定惊, 止血, 收敛, -透疹;	-利尿/通淋, -强心/清心, -除烦/安神/解郁/定惊, 止血	-利尿/通淋, -强心/清心, -除烦/安神/解郁/定惊, 止血
F <sub>10</sub>	-养血/补血, -理气/养气, -温中/和中/补中, -降火, -燥湿, -止汗, 杀虫/驱虫;	-理气/养气, -止汗, 杀虫/驱虫	-止汗
F <sub>11</sub>	-辟秽, -强心/清心, -除烦/安神/解郁/定惊, -止痢, 消肿, 解毒, -收敛;	-强心/清心, -收敛	-强心/清心, -收敛
F <sub>12</sub>	利水/行水, 止汗, 发汗, 解表/发表, 解痉;	止汗, 发汗, 解表/发表, 解痉	发汗, 解表/发表
F <sub>13</sub>	降血脂, 降压, 抗癌, 祛风湿/利关节, 收敛, 排脓/消炎/抗感染;	降血脂, 抗癌, 祛风湿/利关节, 排脓/消炎/抗感染	降血脂, 抗癌
F <sub>14</sub>	祛痰/化痰, -平喘/定喘, -涩肠, -止泻, 下气/破气;	祛痰/化痰, -平喘/定喘, -涩肠, -止泻	祛痰/化痰, -涩肠, -止泻
F <sub>15</sub>	-生肌, 健脾/补脾, -涩肠, -散结/软坚, 利湿;	健脾/补脾, -涩肠, -散结/软坚, 利湿	无

-: 表示负的作用。

### 3.3 系统聚类

选用距离测度为点相关(1-r), 采用最大-最小标准化, 以类平均法进行聚类。78 种功效属性的系统聚类图见图 2。图 2 代表了不同尺度上功效属性的类别归属, 可根据需要划定尺度, 确定各功效属性所属的类别。

系统聚类结果见系统聚类附件, 下面是部分结果

r=-0.00025741 (8 类)

(x1, x2, x5, x8, x9, x33, x37, x46, x58, x64, x65, x66, x73)

(x3, x6, x23, x25, x26, x41)

(x11, x12, x13, x14, x20, x21, x22, x28, x29, x30, x44, x49, x50, x59)

(x15, x17, x18, x19, x24, x27, x31, x34, x48, x52, x53, x61, x78)

(x51, x62, x63, x67, x68, x71, x72, x74, x75, x77)

(x4, x10, x35, x36, x55, x56, x57, x60, x69)

(x7, x16, x32, x40, x42, x43, x54, x70, x76)

(x38, x39, x45, x47)

$r=-0.0011981$  (7 类)

(x1, x2, x5, x8, x9, x33, x37, x46, x58, x64, x65, x66, x73)

(x3, x6, x23, x25, x26, x41)

(x11, x12, x13, x14, x20, x21, x22, x28, x29, x30, x44, x49, x50, x59)

(x15, x17, x18, x19, x24, x27, x31, x34, x48, x51, x52, x53, x61, x62, x63, x67, x68, x71, x72, x74, x75, x77, x78)

(x4, x10, x35, x36, x55, x56, x57, x60, x69)

(x7, x16, x32, x40, x42, x43, x54, x70, x76)

(x38, x39, x45, x47)

$r=-0.0015333$  (6 类)

(x1, x2, x5, x8, x9, x33, x37, x46, x58, x64, x65, x66, x73)

(x3, x6, x23, x25, x26, x41)

(x11, x12, x13, x14, x20, x21, x22, x28, x29, x30, x44, x49, x50, x59)

(x15, x17, x18, x19, x24, x27, x31, x34, x48, x51, x52, x53, x61, x62, x63, x67, x68, x71, x72, x74, x75, x77, x78)

(x4, x10, x35, x36, x55, x56, x57, x60, x69)

(x7, x16, x32, x38, x39, x40, x42, x43, x45, x47, x54, x70, x76)

$r=-0.0029599$  (5 类)

(x1, x2, x5, x8, x9, x33, x37, x46, x58, x64, x65, x66, x73)

(x3, x6, x11, x12, x13, x14, x20, x21, x22, x23, x25, x26, x28, x29, x30, x41, x44, x49, x50, x59)

(x15, x17, x18, x19, x24, x27, x31, x34, x48, x51, x52, x53, x61, x62, x63, x67, x68, x71, x72, x74, x75, x77, x78)

(x4, x10, x35, x36, x55, x56, x57, x60, x69)

(x7, x16, x32, x38, x39, x40, x42, x43, x45, x47, x54, x70, x76)

$r=-0.0073534$  (4 类)

(x1, x2, x3, x5, x6, x8, x9, x11, x12, x13, x14, x20, x21, x22, x23, x25, x26, x28, x29, x30, x33, x37, x41, x44, x46, x49, x50, x58, x59, x64, x65, x66, x73)

(x15, x17, x18, x19, x24, x27, x31, x34, x48, x51, x52, x53, x61, x62, x63, x67, x68, x71, x72, x74, x75, x77, x78)

(x4, x10, x35, x36, x55, x56, x57, x60, x69)

(x7, x16, x32, x38, x39, x40, x42, x43, x45, x47, x54, x70, x76)

$r=-0.0079395$  (3 类)

(x1, x2, x3, x5, x6, x8, x9, x11, x12, x13, x14, x20, x21, x22, x23, x25, x26, x28, x29, x30, x33, x37, x41, x44, x46, x49, x50, x58, x59, x64, x65, x66, x73)

(x15, x17, x18, x19, x24, x27, x31, x34, x48, x51, x52, x53, x61, x62, x63, x67, x68, x71, x72, x74, x75, x77, x78)

(x4, x7, x10, x16, x32, x35, x36, x38, x39, x40, x42, x43, x45, x47, x54, x55, x56, x57, x60, x69, x70, x76)

$r= -0.009277$  (1 类)

由图 1 的系统聚类结果可见, 补肾/温肾-壮阳/温阳/益精, 通便-润肠, 及清热-解毒, 最早各自归为同一类, 两两之间功效最为接近, 或重叠度最大。

在某水平上, 例如  $r=-0.00025741$ , 78 种功效属性, 可分为 8 个综合功效属性类如下

第 1 类:

清肝/补肝/舒肝/明目/退翳, 生发/乌发, 补肾/温肾, 壮阳/温阳/益精, 强筋骨, 止痢, 养血/补血, 安胎, 降火, 祛风湿/利关节, 燥湿, 止汗, 抗疟/截疟;

类功能: 温补肝肾-强筋补血

第 2 类:

利胆/退黄, 利尿/通淋, 辟秽, 强心/清心, 除烦/安神/解郁/定惊, 降糖;

类功能: 清心安神-利尿利胆

第 3 类:

清肺/润肺, 祛痰/化痰, 平喘/定喘, 止咳, 生津, 利咽, 消积/消滞, 通便, 润肠, 润燥, 滋阴, 下气/破气, 抗衰老, 止渴;

类功能: 润肺祛痰-止咳润燥

第 4 类:

通鼻窍, 开胃/益胃, 健脾/补脾, 消食/化食, 止呕, 定痢, 涩肠, 止泻, 理气/养气, 温中/和中/补中, 止痛, 祛寒, 除痹;

类功能: 补脾益胃-理气止痛

第 5 类:

通络/活络/舒筋, 祛湿, 祛风, 发汗, 解表/发表, 止痒, 杀虫/驱虫, 解痉, 透疹, 麻醉;

类功能: 解表发汗-活络解痉

第 6 类:

降转氨酶, 生肌, 凉血, 止血, 清热, 利湿, 解毒, 解暑/消暑, 收敛;

类功能: 清热解毒-凉血利湿

第 7 类:

利尿/行水, 祛肺结核, 散结/软坚, 消肿, 降血脂, 降压, 抗癌, 排脓/消炎/抗感染, 逐邪;

类功能: 利尿排脓-散结消肿

第 8 类:

活血, 化瘀/消痈/敛疮, 调经/通淋, 通乳/下乳。

类功能: 活血化瘀-调经通淋

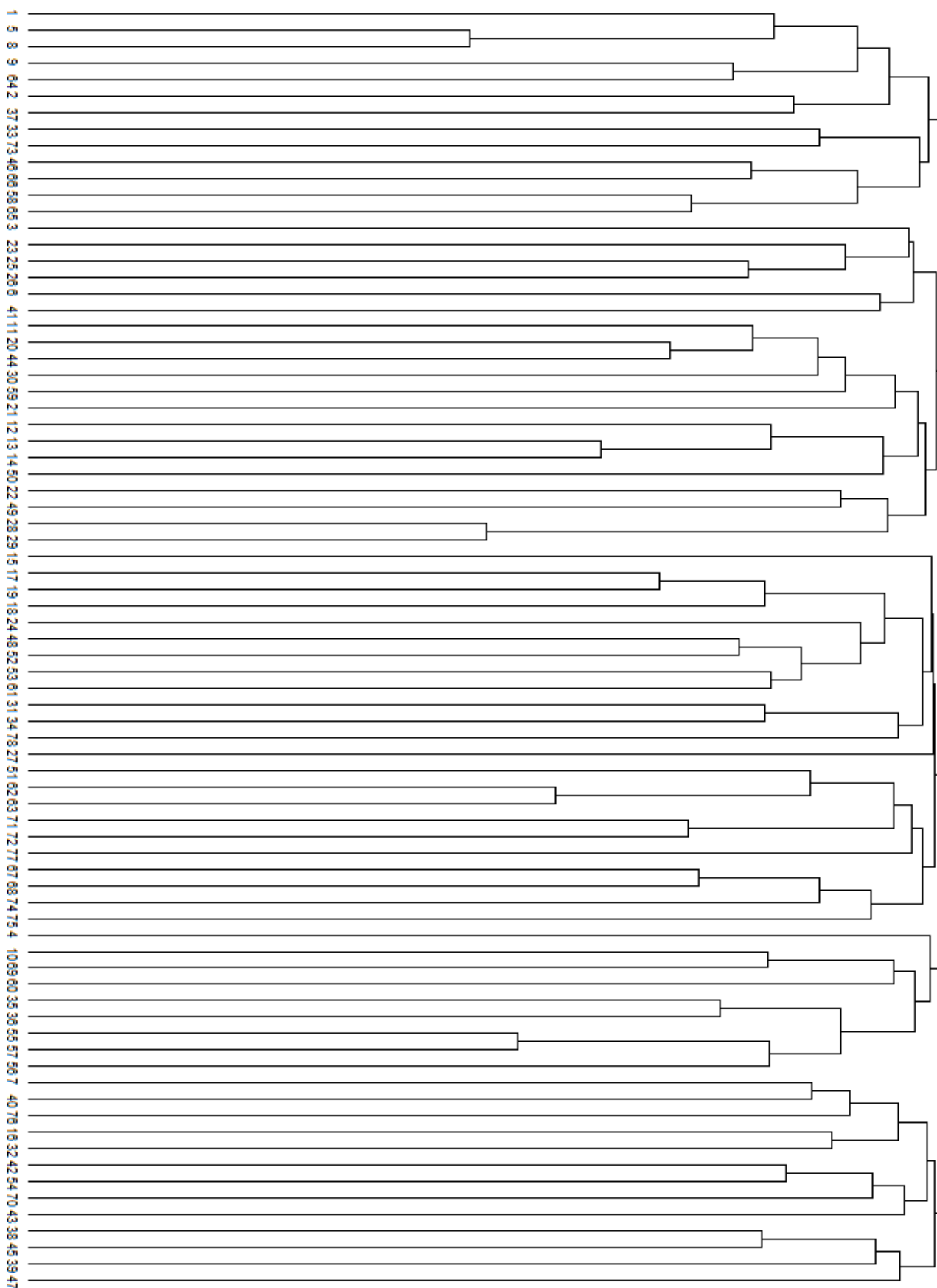


图 2 78 种功效属性的系统聚类图。距离测度为点相关(1-r)，最大-最小标准化，类平均法聚类。其中，属性 1~78 分别为表 1 的属性  $x_1 \sim x_{78}$ 。

## 4 讨论

严格来讲, 各功效属性多少都有一定的相关性; 一个功效属性的变化, 会通过网络影响到其它属性(Zhang, 2017b)。因而, 功效属性的类群划分, 是一个连续统, 如图 2 和系统聚类附件所示。

两个功效属性  $x_i$  与  $x_j$  属于同一类, 其可能成因主要包括:

(1)  $x_i$  与  $x_j$  为两个完全不同的功效属性, 但相关性强, 两者直接或间接的高度联动。例如, 清热引致解毒。对于此种情形, 也可考虑将  $x_i$  与  $x_j$  合并为同一功效属性。

(2)  $x_i$  与  $x_j$  功效上有不同程度的重叠, 但也有独立性。

(3)  $x_i$  与  $x_j$  功效名称不同, 含义差别很小, 基本上为同一功效。例如, 补肾/温肾-壮阳/温阳/益精, 通便-润肠, 等等。对此种情形, 可考虑将  $x_i$  与  $x_j$  合并为同一功效属性。

总的看来, 由于网络/子模块识别方法鉴别出的模块, 其客观性最强, 功能也最为清晰。系统聚类的结果, 也有较好的可解释性。对 PCA, 每个综合性功效属性都有一定的功效含义, 但限于问题的复杂性, 我们很难准确的厘清含义, 及给出定义。

模块、属性类等形成的机制是归经。中草药作用于不同的归经(器官、生理系统或功能系统), 进一步促生了不同的功效群(Zhang, 2017a, b)。而且, 由于不同归经之间有一定的相互作用(Zhang, 2017b), 所促生的功效群不只是简单的叠加效应, 还可能产生了新的功效。在数学映射上, 设中草药为  $x$ , 化学成份为  $y$ , 归经(器官、生理系统或功能系统)为  $z$ , 功效为  $w$ ; 给定的中草药要产生确定的功效, 则有

$$y=f(x), z=g(y), w=h(z)$$

从而

$$w=(h \circ g \circ f)(x)$$

我们的目的, 就是要尽可能准确的确定这些关系。

关于功效属性, 以后需要做的工作主要包括: (1) 功效属性的裁并生成, 以及名称的进一步清晰化和规范化; (2) 功效属性的严格科学定义, 包括所作用的具体器官和系统、基本药理及可测指标等等。其中, 需要将功效属性归类于人体各大系统: 运动系统, 神经系统, 内分泌系统, 血液循环系统, 呼吸系统, 消化系统, 泌尿系统, 生殖系统, 或某些组合。在本系列研究的中草药交互式编码数据库 CHM-DATA 1.0 中, 基于功效属性的大致归经, 选择归类功效属性(Zhang, 2017a, 2017b, 2017c), 在不同程度上考虑到了这种需要。对功效属性分类, 本研究给出了初步方案和基础, 今后可对各类所属人体系统和器官, 做进一步深入的判定。这也是中医药科学化和规范化的一个组成部分。

## 参考文献

- 齐艳红. 2003. JavaPCA: 情报信息压缩抽取分析的一种网络共享软件. 情报杂志, 11: 33-34
- 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
- Freeman LC. 1978. Centrality in social networks conceptual clarification. Social Networks, 1: 215-239
- Huang JQ, Zhang WJ. 2012. Analysis on degree distribution of tumor signaling networks. Network Biology, 2(3): 95-109
- Khansari M, Kaveh A, Heshmati Z, et al. 2016. Centrality measures for immunization of weighted networks. Network Biology, 6(1): 12-27
- Li JR, Zhang WJ. 2013. Identification of crucial metabolites/reactions in tumor signaling networks. Network Biology, 3(4): 121-132
- Opsahl T, Agneessens F, Skvoretz J. 2010. Node centrality in weighted networks: Generalizing degree and

- shortest paths. *Social Networks*, 32(3): 245-251
- Vieira VMNCS. 2012. Permutation tests to estimate significances on Principal Components Analysis. *Computational Ecology and Software*, 2(2): 103-123
- Zhang WJ. 2010. *Computational Ecology: Artificial Neural Networks and Their Applications*. World Scientific, Singapore
- Zhang WJ. 2011a. A Java program for non-parametric statistic comparison of community structure. *Computational Ecology and Software*, 1(3): 183-185
- Zhang WJ. 2011b. A Java algorithm for non-parametric statistic comparison of network structure. *Network Biology*, 1(2): 130-133
- 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. 2015. Calculation and statistic test of partial correlation of general correlation measures. *Selforganizology*, 2(4): 65-77
- Zhang WJ. 2016a. A method for identifying hierarchical sub-networks / modules and weighting network links based on their similarity in sub-network / module affiliation. *Network Pharmacology*, 1(2): 54-65
- Zhang WJ. 2016b. Screening node attributes that significantly influence node centrality in the network. *Selforganizology*, 3(3): 75-86
- Zhang WJ. 2017a. 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. 2017b. 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
- Zhang WJ. 2017c. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines: (III) Canonical correlation functions between attribute classes and linear eignmodels of Chinese herbal medicines. *Network Pharmacology*, 2(2): 38-66
- Zhang WJ, Feng YT. 2017. Metabolic pathway of non-alcoholic fatty liver disease: Network properties and robustness. *Network Pharmacology*, 2(1): 1-12
- 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