

# 使用说明

(如软件未出现错误, 请直接从第二页开始看详细教程)

如果想获取软件更新或软件出现错误, 请到软件更新网址下载最新版。  
也可以直接与我联系。E-mail: [mwxiao@hnu.edu.cn](mailto:mwxiao@hnu.edu.cn); QQ: 1306410893

软件更新地址:

<https://pan.baidu.com/s/1o7QRFaM>; 密码: n4n1

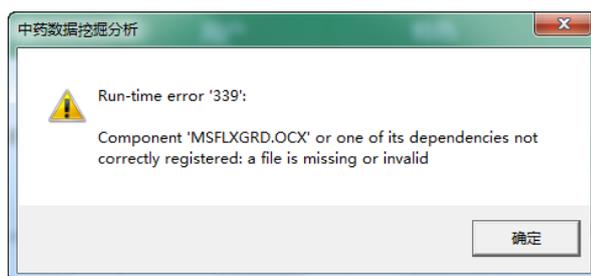
也可以在此网址下载相关软件 gephi, 如果要使用 gephi, 请先安装 java。

软件视频教程:

[http://v.youku.com/v\\_show/id\\_XMTgyNTQ5NjcyMA==.html](http://v.youku.com/v_show/id_XMTgyNTQ5NjcyMA==.html); 密码: haha

常见错误处理:

1. 软件出现 MSFLXGRD 未注册 (如下图):



解决方法: 请右键单击->该软件目录下的“注册 MSFLXRD.bat”文件->选择以管理员身份运行, 即可解决该问题。



如果没有“注册 MSFLXRD.bat ”文件, 请到软件更新网址下载, 并放到该软件目录下。

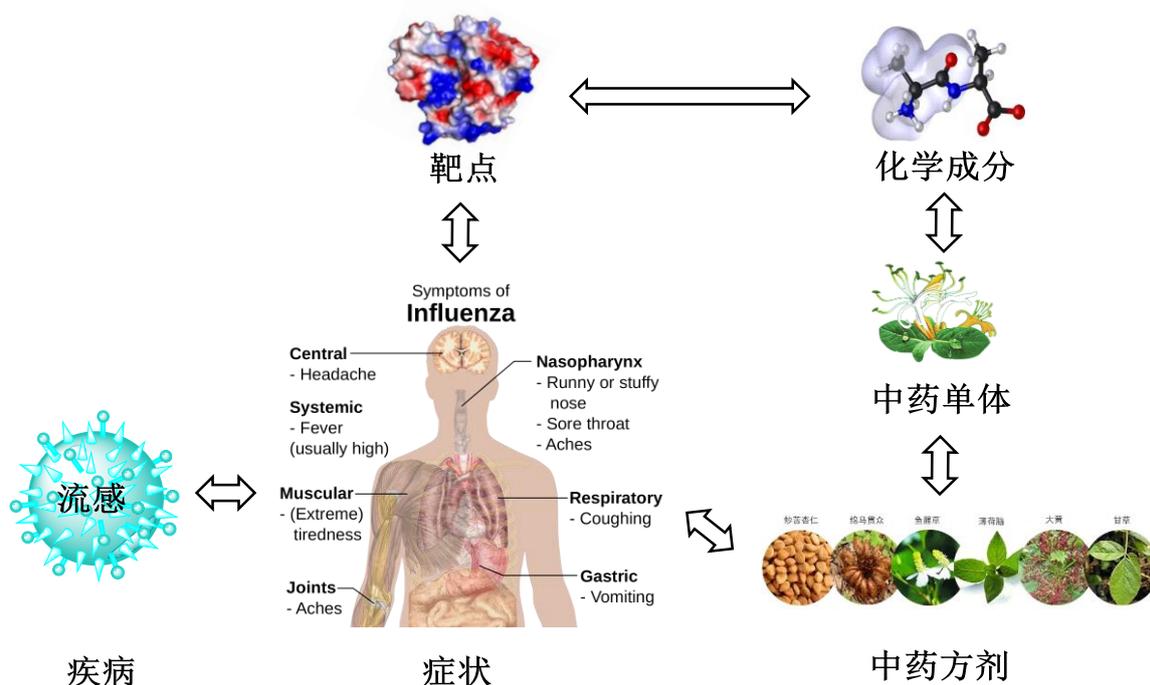
# 中药数据挖掘小软件说明书

肖梦武<sup>1</sup>, 崔满营<sup>1</sup>, 张蒙<sup>1</sup>, 钟莹<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 湖南大学化学与化工学院, <sup>2</sup> 湖南大学信息科学与工程学院)

指导老师: 胡艾希 教授

中药是药物发现的宝库, 从疾病-病症-(靶点)-中药方剂-中药单体-化学成分-生物活性多层次去展示中药, 用更直观、科学的方式去分析挖掘中药中的宝藏——这是我们做这个软件的初衷。



这个中药数据挖掘这个小软件实现了疾病-病症-方剂-单味药-化学成分-生物活性的基本关联, 初步实现了病症-方剂关联, 方剂-单味药分析, 方剂-药对分析, 单味药-化学成分-生物活性(抗流感、抗肿瘤)关联与分析。

由于时间仓促, 能力和专业受限, 软件中有很多不足之处, 还请老师指正。

## 一、软件用到的数据资源

### 1. 数据来源

(1) 中国中药方剂库, 是由**国家人口与健康科学数据共享平台**的中国中医科学院中医药信息研究所数据室提供的。

(2) 中药化学组分数据库, 是从 TCMSP 中药数据库收集的。主要参考文献: *J Cheminformatics*. 2014, 6(1):13.

(3) 抗流感天然产物数据库, 是由湖南大学化学与化工学院胡艾希课题组搜集文献整理的, 目前数据还在完善。未经授权, 请勿传播使用。

(4) 天然产物抗癌成分数据库, 是从文献中收集的。主要参考文献: *Nucl Acids Res.* 2013, *41(D1):* D1124.

## 2. 数据处理方法

(1) 数据标准化。对方剂库数据、病症、化学结构、参考文献等进行标准化。

比如: 真武汤的方剂“熟附子 3 钱, 姜 1 钱, 焦白术 2 钱, 茯苓 2 钱, 归身 2 钱, 肉桂 1 钱, 炙甘草 8 分, 白芍 (炒) 1 钱 5 分, 净枣仁 (炒) 2 钱。”->标准化为“附子, 姜, 焦术, 茯苓, 归身, 肉桂, 甘草, 白芍, 枣仁”。

A	B	C
1 方剂名称	方剂药物组成	主治
2 秘传牛黄清心丸	天麻4两, 防风2两 (去芦), 牛胆南星2两半, 僵蚕 (炒) 2两半, 全蝎2两	小儿惊风, 大人中风、中痰、中气, 一切风痰。
3 秘传三仙丹	柏枝、槐角子、生矾。	咳嗽。
4 益气散风汤	人参3钱, 黄耆3钱, 甘草1钱, 半夏1钱, 白术5钱, 柴胡2钱, 茯苓3钱,	气虚伤风, 头痛发热, 身疼腰重, 骨节俱痠疼, 恶风无汗。
5 真武汤	熟附子3钱, 姜1钱, 焦术2钱, 茯苓2钱, 归身2钱, 肉桂1钱, 炙甘草8分,	产后类中风症。

(2) 数据可靠性。化学结构-活性数据库是人工录入的, 每个化合物都有参考文献可以追踪。数据录入是采用本实验室自己设计的化学数据库软件进行规范化录入和管理的。

## 二、软件主要功能

### 1. 中药方剂分析

(1) 方剂搜索。

支持多关键词搜索、在结果中搜索和在结果中排除。比如搜索流感的常见症状“咳嗽发烧”, 也可以搜索方剂名如或中药名。

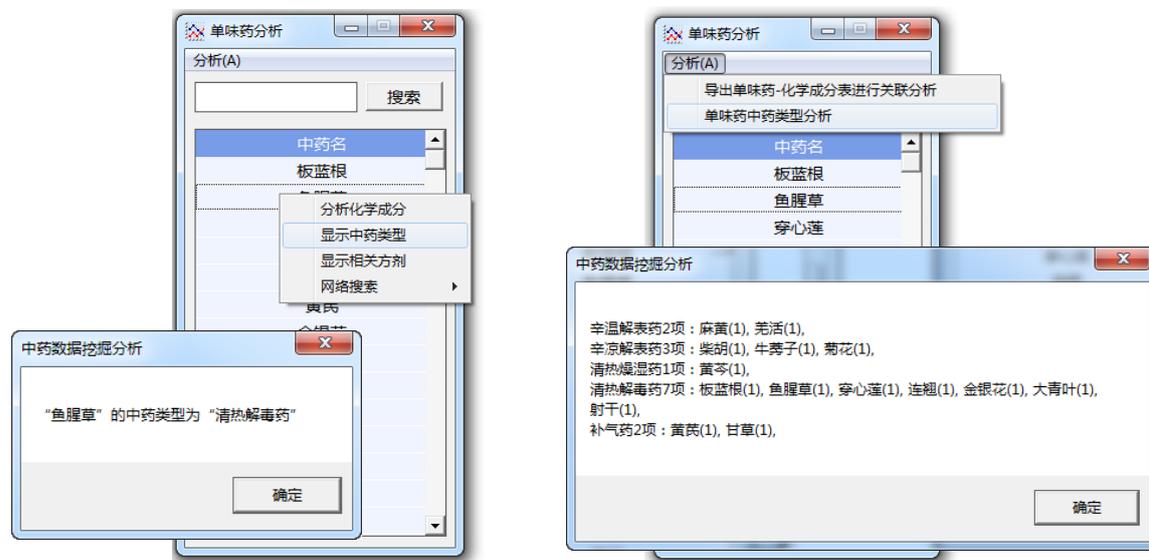


(2) 方剂单味药分析。

对多个方剂中的中药单体进行频数分析, 也支持单味中药分析的功能。而且可以同时分析多个单味药化学成分之间的网络关联。下图是感冒关键词搜索得到的方剂中的单



平喘药, 安神药, 平肝熄风药, 开窍药, 补气药, 补血药, 补阴药, 补阳药, 收涩药, 涌吐药, 解毒杀虫燥湿止痒药, 拔毒化腐生肌药。



例子 3: 涉及感冒的方剂有 215 项, 从中分析发现 633 位中药单体, 分析出现频数大于 10 的中药的得到的结果如下:

辛温解表药 10 项: 防风(48), 羌活(46), 白芷(36), 麻黄(32), 葛根(23), 细辛(19), 紫苏(14), 荆芥(14), 生姜(13), 荆芥穗(12);

辛凉解表药 3 项: 薄荷(34), 柴胡(30), 升麻(12);

清热燥湿药 2 项: 黄芩(44), 黄连(13);

清热解毒药 1 项: 连翘(26);

清热凉血药 1 项: 赤芍(15);

攻下药 1 项: 大黄(11);

祛风湿散寒药 1 项: 独活(18);

化湿药 3 项: 苍术(36), 厚朴(19), 砂仁(15);

利水渗湿药 2 项: 茯苓(35), 木通(12);

温里药 1 项: 干姜(11);

理气药 5 项: 陈皮(51), 枳壳(46), 木香(20), 香附(18), 乌药(10);

消食药 1 项: 麦芽(11);

活血祛瘀药 1 项: 川芎(43);

化痰药 3 项: 桔梗(64), 前胡(39), 半夏(36);

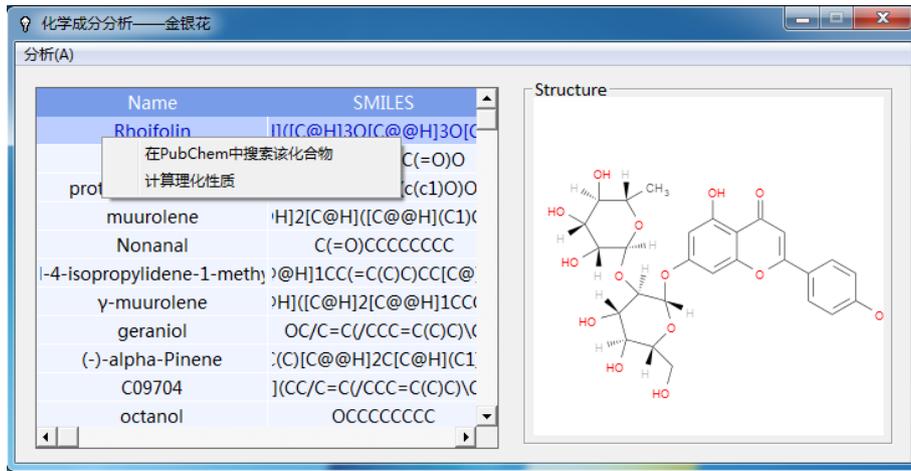
补气药 3 项: 甘草(126), 人参(38), 白术(28);

补血药 2 项: 当归(28), 白芍(13);

其他 14 项: 杏仁(30), 苏叶(20), 藿香(20), 干葛(15), 朱砂(15), 天麻(15), 生地(13), 僵蚕(13), 麝香(12), 神曲(12), 紫苏叶(11), 全蝎(11), 白茯苓(10), 雄黄(10)。

## (2) 化学成分分析

使用方法 1: 单味药窗口->选择中药->右键菜单->化学成分分析。

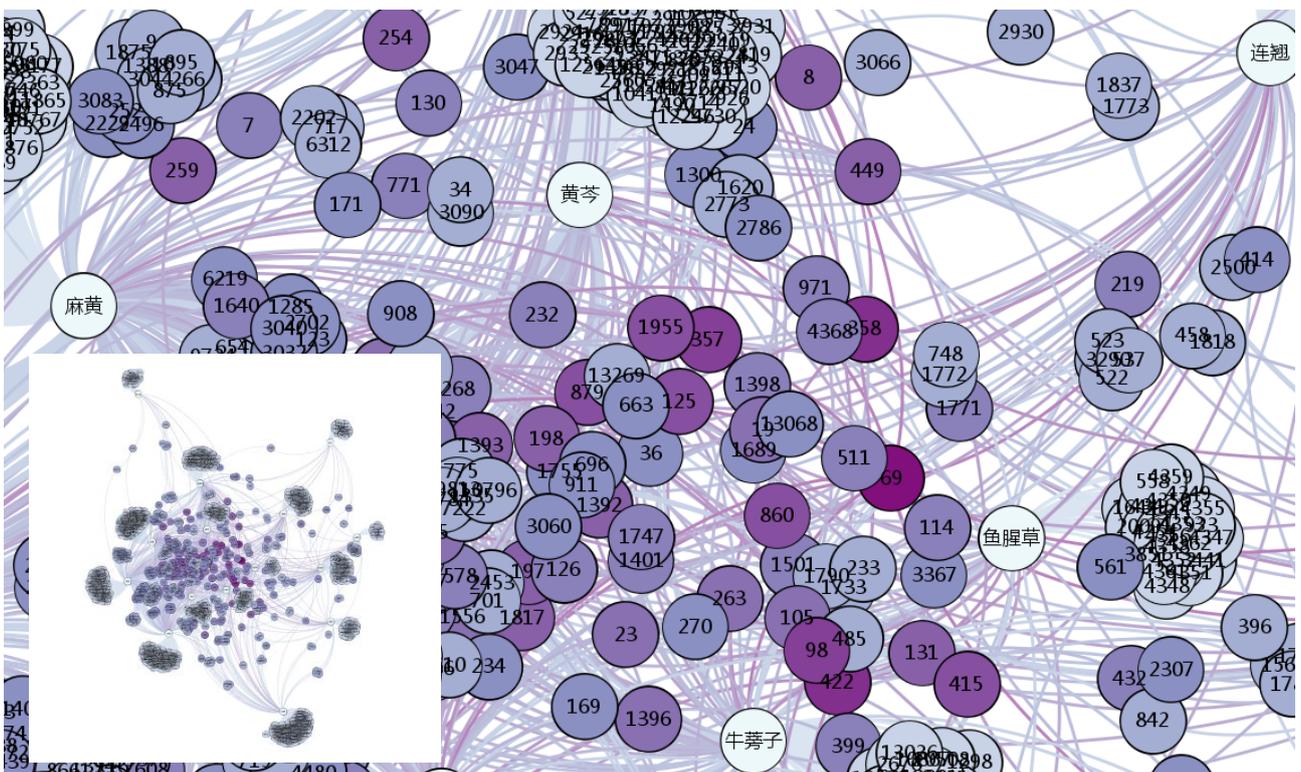


使用方法 2:

主程序菜单-文件->导入单味中药列表->分析->导出单味药-化学成分表->用 gephi 打开分析多个单味药-化学成分的网络关系图。

此处我们研究一下抗流感中药单体的化学成分关联。

文献“邱峰, 张晗, 刘叔文,等. 抗流感病毒中药及抗埃博拉病毒活性化合物的发现策略[J]. 中国科学:生命科学, 2015, 45(3):247-255.”中总结了抗流感病毒的单味中药: 板蓝根、鱼腥草、穿心莲、连翘、黄芩、黄芪、金银花、柴胡、牛蒡子、甘草、麻黄、菊花、大青叶、羌活、射干。本软件对这些中药进行化学成分网络分析(下图), 可以看出它们的相似性、共有的化学成分(深色)及其他关联信息。



### (3) 抗流感化学成分分析

使用方法：化学成分分析窗口-分析菜单->可能的活性成分分析->抗流感活性。

该窗口还支持化学成分-活性的文献追踪，理化性质计算、PubChem 搜索和由化学活性成分找被包含的中药。下图显示了金银花中的具有抗流感活性的 12 个化学组分。

中药名	成分中文名	成分英文名	抗流感活性	参考文献
杜鹃花	熊果酸	Ursolic acid	熊果酸药物血清可降低轮状病毒的毒力，使其感	王婷, 宋怀燕. 熊果酸药理作用研究进展[J]. 中华医学研究杂志.
金银花	绿原酸	Chlorogenic	绿原酸	沈露, 罗旋, 李娜. 金银花抗流感病毒H5N1的分子机理研究[J]. 陕西
草豆蔻	金合欢醇	ns,trans-farne		Grienke U, Schmidtke M, von Grafenstein S, et al. Influenza
	紫云英苷	astragalinc		Grienke U, Schmidtke M, von Grafenstein S, et al. Influenza
	金丝桃苷	Hyperoside	对	于淼. 中药单体化合物中神经氨酸酶抑制剂的筛选及其抗流感病毒
	芦丁	Rutinum	对	于淼. 中药单体化合物中神经氨酸酶抑制剂的筛选及其抗流感病毒
天景红	槲非醇	kaempferol	an IC50 of 1.25 µg/ml for both H1N1 and	Hu Ge,Yi-Fei Wang,Jun Xu .Anti-influenza agents from
细纹香薷	木犀草素	Luteolin	对抗H1N1病毒的IC50为33.68ug/ml ;对抗	刘文林, 杜冠华, 秦海林,等. 细纹香薷中主要化学成分及有效组份
	大波斯菊甙	cosmosin	IC50(H1N1)=46.9µM;	Grienke U, Schmidtke M, von Grafenstein S, et al. Influenza
	芹菜素	apigenin	highly potent against influenza virus, with	Hu Ge,Yi-Fei Wang,Jun Xu .Anti-influenza agents from

### (4) 抗癌化学成分分析

使用方法：化学成分分析窗口-分析菜单->可能的活性成分分析->抗流感活性。同样支持文献追踪，理化性质计算、PubChem 搜索等。

SMILES	NPACT_ID
Oc1cc(ccc1O)C(=O)O	881
OC([C@H]1CC=C(C(C1)C)C)C	240
Oc1cc(O)ccc1c1oc2c3c(O)C(C=C3)C(Cc1c2c(=O)C)C(C)O	778
Oc1ccc(c	676
Oc1ccc(cc1	716
[O]C@12CC[C@@]3([C@@H]([C@H]2[C@@H](C	333
OC(=O)[C@12CC[C@@]3(C=C[C@H]4[C@@]3(C	831
Oc1cc2O[C@H](CC(=O)C2c(c1)O)c1cccc1	868
[O][C@H]1CC[C@]2(C(=CC[C@H]3[C@H]2CC[C@]2([C@H]3CC[C@H]2[C@H](C)CC(C)C)C)C1)C	329
Oc1c(O)cc2c(c1)oc(=O)cc2	941
c1oc2cc(O)cc(c2c(=O)c1O)[C@@H]1O[C@H](CO[C@@H]2O[C@H](C)[C@@H]([C@H]2O)O)[C@H]1(C)[C@H](C	930

### (5) 由化学成分找包含该成分的中药

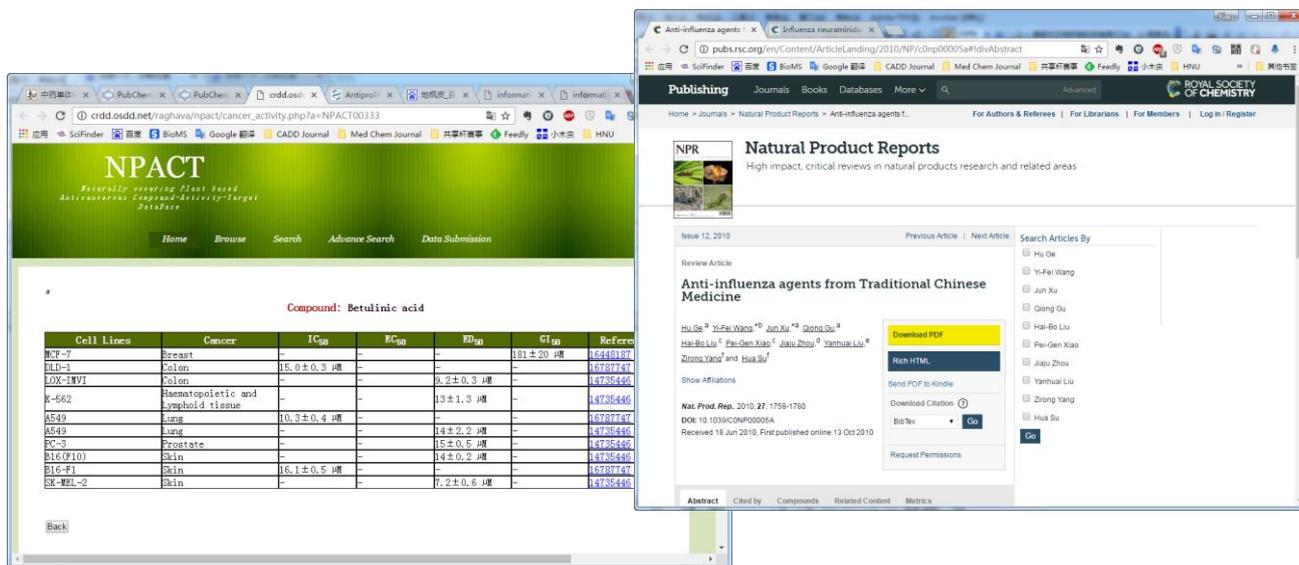
使用方法：右键菜单->搜索包含该活性成分的中药。

例子：分析中药单体“柴胡”中包含 4 个抗流感化学成分，其中异甘草素也出现在其他的 11 个中药单体中。

中药名	成分中文名	成分英文名	抗流感活性
甘草	异甘草素	Isoliquiritin	IC50 values of 9.0 µg/ml
黄芩	黄芩苷	Scutellarein	复制的IC50 for
天景红	槲非醇	kaempferol	25 µg/ml for
	金丝桃苷	Hyperoside	7N9 NA (N9
	芦丁	Rutinum	7N9 NA (N9

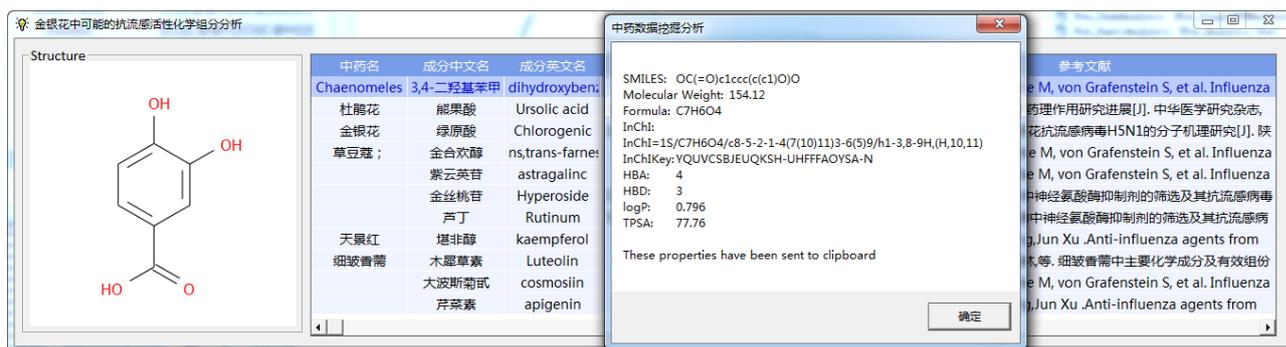
### (6) 追踪活性化合物的参考文献

使用方法：右键->打开参考文献。可以打开相应中药化学组分活性数据的参考文献网址。



### (7) 计算化学成分的理化性质

可以计算分子基本理化性质，特别是类药性参数 logP、HBA、HBD 和分子量。



### (8) 网络搜索中药信息

软件暂时设置了以下 6 个网站的搜索：“中医百科、中医药搜索、百度、百度学术、TCMSP、TM-MC”。使用方法：右键->网络搜索->中医百科



由于时间和能力的不足，本软件还存在很多不足之处，还请您批评指正！  
我的 E-mail: [mwxiao@hnu.edu.cn](mailto:mwxiao@hnu.edu.cn)