

ISSN 1008-0805

CN42-1436/R



时珍国医国药

中文核心期刊

美国《化学文摘》统计源期刊

中国科学引文数据库统计源期刊

中国学术期刊综合评价数据库统计源期刊

荣获首届《CAJ-CD规范》执行优秀奖

中国期刊全文数据库全文收录期刊

湖北省优秀期刊

LISHIZHEN
MEDICINE
AND MATERIA
MEDICA
RESEARCH

ISSN 1008-0805



9 771008 080226

万方数据

2022.

11

第33卷 总第327期

2022年11月第11期



月刊
1990年10月创刊
第33卷第11期
(总第327期)
2022年11月30日出版

编辑出版 《时珍国医国药》编辑部
 激光照排 《时珍国医国药》编辑部
 主管单位 湖北省黄石市卫生健康委员会
 主办单位 时珍国医国药杂志社
 名誉主编 张世臣
 编委会主任 肖培根 梅全喜
 编委会副主任 朱保华 赵映前
 陈家春 张朝晖
 社长 肖 璜
 总编辑 肖 璜
 常务副总编辑 雷保清
 副总编辑 张学武 郭 澄
 王发渭 康廷国
 李治淮
 责任编辑 张秀兰 王诗涵
 广告部主任 程小萍
 编辑部地址 湖北省黄石市黄石大道134号副1号
 邮 编 435000
 电 话 (0714) 6224836 6225102
 传 真 (0714) 6232466
 刊 号 ISSN 1008-0805
 CN42-1436/R
 发行范围 公开发行
 订 阅 全国各地邮局(所)
 国内总发行 中国邮政集团公司黄石市分公司
 国外总发行 中国国际图书贸易集团有限公司
 (北京 399 信箱)
 国内代号 38-168
 国外代号 M4340
 光盘检索 中国学术期刊光盘版
 (医药卫生版)

时珍国医 网 址 <http://www.shizhenchina.com>
 国药杂志 E-mail shizhenchina@163.com
 中国知网网址 <http://www.cnki.net>
 激光照排责任人 王 玮
 印 刷 黄石市精信彩印科技有限公司
 期刊基本参数 CN42-1436/R * 1990 * m * 16 * 256 *
 zh * P * ¥15.00 * 4200 * 77 * 2022-11

时珍国医国药

SHIZHEN GUOYI GUOYAO

目 次

* 为基金课题

◇药理药化◇

- * 丹寿汤对抗心磷脂抗体致妊娠丢失孕鼠子宫螺旋动脉重铸障碍的影响 卫爱武,范新雨,石少琦,等(2561)
- * 平喘方调控 PNEC - CGRP - ILC2 - IL - 5 通路改善哮喘小鼠气道炎症的机制研究 周 欢,朴 香,薛 征,等(2565)
- * 补脾强力复方通过 Notch 通路改善 EAMG 大鼠体内 Th17/Treg 细胞的失衡 王 强,李若照,况时祥,等(2569)
- * 多花黄精多糖对免疫抑制小鼠淋巴细胞亚群和肠道菌群的影响 章喜军,刘振杰,谭小明,等(2573)
- * 逍遥散对心理应激肝郁证不孕症患者 SAS、PSQI 评分和冻胚移植妊娠结局的作用 豆 可,吴丽敏,方小茹,等(2578)
- * 温经通络汤含药血清通过 PI3K/AKT 信号通路对 IL - 1 β 诱导软骨细胞凋亡的影响 许 奇,许炜民,赵佩茹,等(2583)
- * 温阳复元方通过调控线粒体铁死亡相关基因 BCRP/FLVCR 保护大鼠脑缺血再灌注损伤 邓秋媚,袁 莉,黄秋霞,等(2588)
- * 化痰通络汤改善大鼠脑缺血再灌注后继发肺炎性损伤作用的研究 刘彩霞,唐 三,丁 煌,等(2592)
- * 健脾消痞方对人结肠癌 HCT116 细胞焦亡的影响 卢林竹,王容容,王其美,等(2597)
- * 基于自噬调控探讨降糖三黄片改善糖尿病小鼠糖脂代谢紊乱的作用机制 施岚尔,尚 鑫,迪娜·塔吾列,等(2601)
- * 基于体外发酵模型的五倍子单宁酸对肠道菌群的调节作用研究 王雪枫,刘洪涛,殷明珠,等(2605)
- * 寒热二分法辨治妊娠咳嗽的疗效与安全性临床观察与实验研究 周 琳,曾 茹,梁启军(2609)
- * 高良姜、大高良姜黄酮类成分对胃溃疡寒证大鼠胃组织 PGE2、EGF 和血清 IL - 8、TNF - α 等指标的影响 秦华珍,牛新迈,谢旭格,等(2612)
- * 金丹含药血清通过 PINK1/Parkin 通路减轻 H9c2 心肌细胞 H/R 损伤的机制研究 李永鑫,高彦宇,王晓雨,等(2615)
- * 益气消癥方对子宫肌瘤大鼠子宫组织 ER、PR、VEGF、VEGFR1、VEGFR2 表达的影响 沈 雪,司红红,王丽丽,等(2618)

- * 解毒活血汤调控肠道菌群干预慢性前列腺炎/慢性盆腔疼痛综合征的机制研究…………… 严张仁,胡香君,王万春,等(2622)
- * 基于 ENaC 泛素化探讨补阳还五汤调控 HK2 细胞钠代谢作用机制…………… 王建波,曲怡,孙杰,等(2627)
- * 七味白术散对糖尿病 KKAy 小鼠糖脂代谢、胰岛素抵抗及胃饥饿素的影响…………… 刘雪辉,周琳悦,刘燕,等(2630)
- * 薏苡仁多糖对溃疡性结肠炎小鼠 Caspase-1 介导细胞焦亡通路的影响…………… 李彦龙,任彦彦,常利军,等(2633)
- * 寿胎丸含药血清对人早孕滋养细胞 Notch/Jagged 信号通路相关基因表达的影响…………… 秦明春,贺兰,蒙妍妃,等(2637)
- * 中药地龙抗凝血活性的谱效相关性研究…………… 于小钧,刘丛颖,宋华英,等(2640)

◇制剂与炮制◇

- * 多指标正交试验优选白藜颗粒的提取纯化工艺…………… 薄双琴,陈晖,曲馨,等(2643)
- * 基于 AHP-熵权法的天南星饮片颜色与有效成分相关性研究…………… 王梦伟,王梦珂,李蒙恩,等(2648)
- * 基于表里关联的黑参炮制过程中颜色变化与内在成分相关性研究…………… 蒋常鹏,陈晶,李昕瞳,等(2653)
- * 葛根总黄酮自微乳的制备工艺及体外释放研究…………… 吕志阳,陈静,陈璟,等(2658)
- * BP 神经网络结合 AHP 综合评分法优选甘露消毒汤提取工艺…………… 吴振起,杨雯惠,张天宇,等(2662)
- * 不同炮制阶段多花黄精内在质量及体外抗氧化作用比较研究…………… 蔡春燕,陈鑫,刘绍美,等(2665)

◇国药鉴定◇

- * 基于转录组和蛋白组的少棘巨蜈蚣足色差异分析…………… 邓霖,胡超逸,吴卫刚,等(2670)
- * 菊花基原、产地及功效的本草考证…………… 杨晴,李兆栋,车开萌,等(2675)

◇临床报道◇

- * 中医辨证治疗儿童紫癜性肾炎孤立性血尿型的临床观察…………… 张蒙蒙,翟文生,李冰,等(2679)
- * 针药联合治疗肾虚肝郁证早发性卵巢功能不全的临床观察…………… 梁少荣,黄晓桃,何丹娟(2682)
- * 补肾泄浊方联合穴位注射治疗慢性肾衰竭脾肾阳虚兼血瘀证临床疗效观察…………… 金丽霞,韩美妮,栾仲秋(2685)
- * 基于“穴位敏化”热敏灸治疗脊髓损伤后神经源性膀胱的临床随机对照研究…………… 孙伟娟,刘承梅,王磊,等(2688)
- * 固肾安胎中药对体外受精-胚胎移植孕妇妊娠早期结局及肠道菌群影响的观察…………… 赵以琳,王杨,刘婀娜,等(2691)
- * 益气养阴通络方治疗气阴两虚型类风湿关节炎的临床疗效与安全性观察…………… 张博纶,高明利,于静,等(2695)
- * 健脾滋肾泻火方治疗原发免疫性血小板减少症患者的临床疗效及机制研究…………… 李晓靖,朱文伟,汪凯,等(2699)
- * 薏苡附子败酱散加味联合美沙拉嗪治疗溃疡性结肠炎寒湿瘀结型证的临床研究…………… 郑安锐,齐云,王品发,等(2702)

- 中西医结合治疗肾虚肝郁型黄褐斑的临床研究…………… 刘亮,李文霞,皮先明(2705)

◇学术探讨◇

- * 从“经方”角度探讨清肺排毒汤的应用…………… 姚瑞元,杨帆,薛付忠,等(2707)
- * 基于“脾肾互赞”理论探讨失重对“肌骨 crosstalk”的影响…………… 宋采秋,刘昱麟,张林(2710)
- * 基于《黄帝内经》浅谈经络平衡与失衡在疾病方面的应用…………… 宁容容,刘明,丁小媛,等(2712)
- * 关于实验用大鼠膻穴定位的争议…………… 袁涌昊,赵若曦,夏庆昌,等(2714)
- * 从中西医角度汇通三焦气化与玄府气液理论兼论两者异同…………… 许少华,侯仙明,苏慈(2716)
- * 基于中医瘀血理论探讨线粒体自噬与心力衰竭的关系…………… 孙静,梁雪娟(2718)
- * 论脑为奇恒之脏及元树论…………… 陈亮,于晓明,周丽萍,等(2721)
- * 从脾土不生君火不长论述老年 HIV/AIDS 并发抑郁症发病关键…………… 郭娅娅,徐立然,桑锋,等(2724)
- * 基于形气神一体观的心脾肾同治法辨治骨髓增生异常综合征初探…………… 刘健,唐旭东(2726)
- * 中西方体质理论探析…………… 王诗洋,王志宏,尚晓玲(2729)
- 《黄帝内经》中蕴含的传统人文思想解读…………… 彭丹,胡岗,苏振宏(2732)
- * 人体“四段”用药阐述及对糖尿病治疗启示…………… 覃锦,宗星煜,李梓荣,等(2734)

◇文献综述◇

- * 针刺治疗缺血性脑血管疾病的分子机制研究进展…………… 占超,姜晖,袁颖,等(2737)
- * 罗布麻叶的化学成分及药理作用研究进展…………… 陈小露,刘起棠,张洁帅,等(2739)

◇资源开发◇

- * 不同海拔高度对薏苡农艺性状及药用品质的影响…………… 敖茂宏,宋智琴(2743)
- * 栀子炭疽病接种诱导的转录组研究…………… 罗光明,朱佩,柴华文,等(2746)
- * 前作和稻草覆盖对川芎栽培土壤理化性质的影响…………… 郭俊霞,张松林,王晓宇,等(2751)

◇教学实践与改革◇

- * 《中医诊断学》教学互动的优化研究…………… 闵莉,林雪娟,梁文娜(2757)
- * 形成性评价在《中药化学》教学中的探索与应用…………… 朱立俏,盛华刚,周洪雷,等(2759)
- * 基于中医基础课程深度融合的虚拟教研室建设初探…………… 杨秀娟,梁永林,杨志军,等(2761)
- * 基于国家级一流课程《中药分析学》线上线下混合式课程思政教学改革探索…………… 李姗姗,贡济宇(2763)
- * 构建医学类高校创新创业教育共同体研究…………… 汤钰文,朱璐,黄必胜(2765)
- * 融合中医药文化的“五位一体”心理健康教育实践机制探析…………… 方勇,熊振芳,范翠英,等(2767)
- * 基于虚拟仿真平台开展具有中医药思维的虚实共融情景化教学实践…………… 王锐,李永吉,王艳宏,等(2769)

◇李时珍研究◇

- * 李时珍对药食同源重大贡献的评析 张露,陈丹,黄明安(2772)

◇名家名流◇

- * 基于国医大师张震疏调气机理论治疗 PCOS 临床体会 ... 杨亚楠,罗佳,刘蓝,等(2776)
- * 韩碧英教授针刺治疗动眼神经麻痹经验浅析 张萍萍,李贺,彭唯娜,等(2778)
- * 国医大师韩明向辨治脑梗死后感觉障碍经验 刘贾波,韩辉,刘祥,等(2780)
- * 刘燕池治疗阳痿早泄经验采撷 章骊兰,郭红梅,刘真真,等(2782)
- * 李盛华教授从“虚、痰、瘀、毒”论治膝骨关节炎的思路探析 何帮靖,周明旺,李盛华,等(2784)

◇中医现代研究◇

- * 基于肠道菌群探讨“调脏通络”电针对 db/db 小鼠糖脂代谢的影响 潘婷,陈春海,杨波,等(2786)

- * 基于真实世界喜炎平注射液治疗上呼吸道感染的临床特征和用药分析 董晗硕,王智,李利寻,等(2790)
- * 基于 Nr12-HO-1 信号通路的针灸改善顺铂肾损伤小鼠的作用机制研究 于冬冬,王永欣,庄语,等(2794)
- * 疾病归经预测模型不同建模方法比较研究 罗悦,石燕,高园,等(2798)
- * 基于支持向量机的中药升降浮沉药性识别模型 油雨忻,李若轩,段梦雨,等(2801)
- * 基于化学成分药理作用及网络药理学的蒺藜质量标志物预测分析 王福燕,江丰,范小龙,等(2805)
- * 高质量发展下的我国中医药信息化建设实现路径研究 肖勇,常凯,沈绍武,等(2809)
- * 基于网络药理学方法探讨生精胶囊治疗少精子症的作用机制 王军玲,罗淑红,袁奔,等(2812)
- * 基于 SVM 算法的中药化合物寒热药性预测研究 吴智妍,金卫,岳路,等(2816)



版 权 声 明

一、向本刊投稿的文章一经本刊录用,作者(文章的全体作者)即将文章整体以及附属于作品的图、表、摘要或其他可以从作品中提取部分的全部复制传播的权利——包括但不限于复制权、发行权、信息网络传播权、翻译权、汇编权、改编权,在著作权保护期内免费转让给本刊,本刊有权通过但不限于以下使用方式使用稿件:

1. 以各种已知或将来出现的形态、格式和媒介(包括但不限于纸质、数字化和电子形式)复制、发行、信息网络传播该文章;
2. 翻译、改编、汇编该文章,以及利用该作品中的图表、摘要或任何部分衍生其他文章。

二、本刊可将该权利全部或者部分转让或许可给第三方使用。本协议权利转让的范围为全球范围。

所有署名作者向本刊提交文章发表之行为视为同意上述声明。如作者不同意网络传播,请在投稿时声明,本刊将作适当处理。

时珍国医国药杂志社编辑部

**LISHIZHEN MEDICINE AND
MATERIA MEDICA RESEARCH**

(Monthly)

Vol. 33 No. 11 2022 (Total 327)

Published on Nov. 30th 2022

Editor & Editorial Board of Lishizhen

Publisher Medicine and Materia Medica
Research

Add. No. 134 - 1, Huangshi Avenue, Huang-
shi, Hubei, P. R. China

Post Code 435000

Tel. (0714)6225102 Fax. (0714)6232466

ISSN 1008 - 0805

CN 42 - 1436/R

Sponsor Editorial Office of Lishizhen Medi-
cine and Materia Medica Research

Honorary Editor ZHANG Shi-chen

Head of Editorial Board XIAO Pei-gen
MEI Quan-xi

Editor - in - chief XIAO Huang

Executive Deputy
Editor - in - chief LEI Bao-qing

Deputy Chief Editor ZHANG Xue-wu

GUO Cheng

WANG Fa-wei

KANG Ting-guo

LI Zhi-huai

Subscriptions Local Post Bureaus (Offices)

Domestic Issuer Post Bureau of Huangshi,
China

Foreign Issuer China International Book
Corp. (P. O. Box 399,
Beijing, China)

<http://www.shizhenchina.com>

E-mail: shizhenchina@163.com

Main Contents

- Effect of Danshou Decoction on Uterine Spiral Artery Recasting Disturbance in Rats with Pregnancy Loss Caused by Anti - cardioliipin Antibody** WEI Ai-wu, FAN Xin-yu, SHI Shao-qi, et al(2561)
- Effect of Xiaoyao Powder on SAS and PSQI score and pregnancy outcome of frozen embryo transfer in infertile patients with liver depression syndrome induced by psychological stress** DOU Ke, WU Li-min, FANG Xiao-ru, et al(2578)
- Effect of Wenjingtongluo decoction drug contained serum on IL - 1 β induced chondrocyte apoptosis through PI3K/AKT signaling pathway** XU Qi, XU Wei-min, ZHAO Pei-ru, et al(2583)
- Protective effect of HuatanTongluo Decoction on lung inflammatory injury secondary to cerebral ischemia - reperfusion in rats** LIU Cai-xia, TANG San, DING Huang, et al(2592)
- Effect of Jianpi Xiaoi Prescription on Pyroptosis of Colorectal Cancer HCT116 Cells** LU Lin-zhu, WANG Rong-rong, WANG Qi-mei, et al(2597)
- Study on the mechanism of Jiangtang Sanhuang tablet improving glucose and lipid metabolism disorder in diabetic mice based on autophagy regulation** SHI Lan-er, SHANG Xin, DINA Ta-wu-lie, et al(2601)
- Study on the mechanism of Buyang Huanwu Decoction regulating sodium metabolism in HK2 cells based on ENaC ubiquitination** WANG Jian-bo, QU Yi, SUN Jie, et al(2627)
- Effect of serum containing Shoutai Wan(寿胎丸) on expression of Notch signal pathway - related genes in human trophoblast cells of early pregnancy** QIN Ming-chun, HE Lan, MENG Yan-fei, et al(2637)
- Optimization of Extraction and purification process of Bailei Granules by Multi - Index Orthogonal Experiment** BO Shuang-qin, CHEN Hui, QU Xin, et al(2643)
- Research on Correlation Between the Color Change and the Chemical Composition of Black Ginseng During Processing based on Correlation Between External Appearance Color and Internal Component** JIANG Chang-Peng, CHEN Jing, LI Xin-Tong, et al(2653)
- Study on Preparation Technology and In Vitro Release of Pueraria Total Flavonoids Self - Microemulsion** LÜ Zhi-yang, CHEN Jing, CHEN Jing, et al(2658)
- Extraction Process Optimization for Ganlu Xiaodu Decoction by Back Propagation Neural Network and AHP - comprehensive Scoring** WU Zhen-qi, YANG Wen-hui, ZHANG Tian-yu, et al(2662)
- Transcriptome and proteome analysis revealed the diversity of the foot color of *Scelopendra subspinipes mutilans* L. Koch** DENG Ben, HU Chao-yi, WU Wei-gang, et al(2670)
- Herbal textual research on the origin, habitat and efficacy of Chrysanthemum** YANG Qing, LI Zhao-dong, CHE Kai-meng, et al(2675)
- Clinical Observation on Treatment of Isolated Hematuria in Children with Henoch - Schonlein Purpura Nephritis by TCM Syndrome Differentiation** ZHANG Meng-meng, ZHAI Wen-sheng, LI Bing, et al(2679)

Clinical Observation of Combined Acupuncture and Medicine in the Treatment of Premature Ovarian Insufficiency with Kidney Deficiency and Liver Stagnation Syndrome LIANG Shao-rong, HUANG Xiao-tao, HE Dan-juan(2682)

Effect of heat sensitive moxibustion on neurogenic bladder after spinal cord injury clinical randomized controlled study
..... SUN Wei-juan, LIU Cheng-mei, WANG Lei, et al(2688)

Pregnancy Outcome and Intestinal Flora of Pregnant women With IVF – ET
..... ZHAO Yi-lin, WANG Yang, LIU E-nuo, et al(2691)

The controversy about the location of experimental rats' acupoints—Taking Shenque as an example
..... YUANG Yong-hao, ZHAO Ruo-xi, XIA Qing-chang, et al(2714)

Discussion on the key to the pathogenesis of HIV / AIDS complicated with depression in the elderly
..... GUO Ya-ya, XU Li-ran, SANG Feng, et al(2724)

Effects of different altitudes on Agronomic Characters and medicinal quality in *Coix lacryma – jobi L.*
..... AO Mao-hong, SONG Zhi-qin(2743)

Study on Transcriptome of *Gardenia Anthracnose* Anthax inoculation in duction
..... LUO Guang-ming, ZHU Pei, CHAI Hua-wen, et al(2746)

Effects of preceding crops and straw covering on soil physical and chemical properties of *Ligusticum chuanxiong Hort.*
..... GUO Jun-xia, ZHANG Song-lin, WANG Xiao-yu, et al(2751)

Clinical features and drug use analysis of Xiyanping injection in real world in the treatment of upper respiratory tract infection ...
..... DONG Han-shuo, WANG Zhi, LI Li-xun, et al(2790)

Classification Model of Uplift, Float and Sink Properties of Traditional Chinese Medicine Based on SVM
..... YOU Yu-xin, LI Ruo-xuan, DUAN Meng-yu, et al(2801)

English Editor TANG Lu

Serial parameters: CN 42-1436/R * 1990 * m * 16 * 256 * zh * P * ¥15.00 * 4200 * 77 * 2022-11

3.2 药性预测分类模型评估分析 在机器学习算法中对模型的评估至关重要,靠模型预测的准确率一个方面来衡量是存在局限性的。本研究选择与分类模型评估的几种方法,能够快速发现模型参数优化或训练过程中出现的问题,引入混淆矩阵、召回率、精确度、F1分数和ROC曲线几种预测模型的性能,它们由公式(4)~(6)所示。如下表2是在SVM算法模型下中药化合物的混淆矩阵。有一些缩写定义如下,TN代表真实值是寒性化合物,预测值也是寒性化合物。FP代表真实值是寒性化合物,但预测值是热性化合物。FN代表真实值是热性化合物,预测值也是热性化合物。TP代表真实值是热性化合物,但预测值是寒性化合物。Recall定义为召回率,Precision定义为预测准确率,F1分数定义为F1_score。ROC(Receiver Operating Characteristic Curve)曲线是机器学习领域中最常见最广泛的分类器,用来评估中药化合物寒热药性,是二值分类器最重要的指标之一。AUC(Area under the ROC curve)是指ROC曲线下的面积,该值能够量化的反映基于ROC曲线衡量出的模型性能。AUC曲线面积越大,说明构建的中药化合物寒热药性预测模型越稳定,分类效果越好。

表2 SVM算法模型下化合物混淆矩阵

真实值	预测值	
	寒性	热性
寒性	191	29
热性	15	125

$$\text{Precision} = \frac{TP}{FP + TP} \quad (4)$$

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN} \quad (5)$$

$$F1_score = \frac{1}{\frac{1}{\text{Precision}} + \frac{1}{\text{Recall}}} \quad (6)$$

由此看来,通过构建三种算法模型,SVM算法预测准确率最高,效果更好。表3显示了该算法模型下的准确率、召回率和F1_score。SVM算法的预测准确率比RT算法和LR算法效果更好一些,预测模型的精准率和召回率分别是0.812、0.892,F1_score和AUC面积的值分别是0.851、0.855。结果证明构建SVM算法的中药化合物寒热药性识别具有更好的分类性能。

表3 三种算法模型下的性能指标

	SVM	LR	RT
Recall	0.893	0.805	0.792
Precision	0.812	0.790	0.814
F1_score	0.851	0.798	0.803
AUC	0.855	0.810	0.832

4 讨论

本研究是基于中药药性构建化合物寒热药性预测模型,依据化合物的分子结构决定了它的特性等特点,首次作出了通过多种算法模型来预测中药化合物的药性,并且利用算法模型的评价分类性能指标来衡量模型之间的好坏。同时也验证了中药四性“性-效-物质三元论”假说,中药药性确实与中药主要成分的分子结构式存在一定的关联关系,不同性质的化合物也存在着不同的功能,计算每种成分的分子描述符,物质成分相似的中药,其药性也是相似的。中药化合物的物质基础是其物质成分,在寒

性、热性药物中物质成分也存在着共性,同一药性的物质成分是由多种不同化合物组成的,分子是组成物质的基本单位,中药化合物内部的分子描述符决定了化合物所表现性质。本研究针对中药寒热药性数据,利用多种人工智能方法构建符合中医药数据的预测模型,对中药化合物数据进行识别,进一步验证了“性-效-物质三元论”假说。

本研究构建的SVM算法模型是基于二值化的药性数据来判断中药化合物的寒热药性,并且取得了非常好的预测准确率,是基于“性-构”关系研究的有效预测方法。本研究采用3种机器学习算法,着重研究基于中药化合物寒热药性的预测分析。依据中药四性“性-效-物质三元论”假说,将中药化合物数据集划分为寒性与热性,采用逻辑回归算法、支持向量机、决策树算法构建中药化合物寒热药性预测模型,通过分析对比不同的算法在寒热药性识别上的效果。从研究结果可知,3种算法模型的准确率都有不同程度的预测效果,而此时的SVM算法模型的准确率显然优于其他两种算法,可以达到87.79%。所以利用SVM算法的方法预测中药化合物寒热药性定量化研究具有很高的可行性。

对构建的寒热药性预测模型进行评价,我们选取了混淆矩阵、精准率、召回率、F1和AUC等5个衡量指标,通过评价的结果可以看出3种算法对化合物寒热药性预测的模型性能。在中药化合物数据集中,SVM模型评价效果优于其他两种算法,其中AUC的面积为0.855,准确率、召回率和F1_score的值分别为0.812、0.893、0.851。模型评价的拟合效果较好,说明SVM算法预测模型是有效、可行的。

综上所述,依据“性-效-物质三元论”假说,物质成分相似的中药,其药性也相似。在本研究中,基于机器学习算法构建中药化合物药性预测模型也证明了上述假说,对于药性分类也是合理和可行的,通过算法模型研究化合物的分子描述符来判断其寒热药性。中草药预测模型在未来中医辅助诊断方面也具有良好的研究前景,通过机器学习算法判断中药药性也是未来研究的方向。

参考文献:

- [1] 王振国,王鹏,欧阳兵. 中药物质成分与寒热药性相关性研究的方法学框架[J]. 浙江中医药大学学报, 2009, 33(5): 734.
- [2] 夏元枢,魏国辉,王振国,等. 中药寒热药性研究方法综述[J]. 中华中医药杂志, 2021, 36(2): 990.
- [3] 闫波,孙国祥,孙万阳,等. 中药寒热温凉四性研究方法思路[J]. 中南药学, 2016, 14(6): 572.
- [4] 欧阳兵,王振国,李峰,等. 中药四性“性-效-物质三元论”假说及其论证[J]. 山东中医药大学学报, 2008, 32(3): 182.
- [5] 张磊. 基于分子描述符的中草药化合物类药性预测及应用研究[D]. 哈尔滨商业大学硕士学位论文, 2019.
- [6] 魏国辉,张丰聪,付先军,等. 中药成分相似性量化建模及寒热药性预测分析[J]. 数据分析与知识发现, 2020, 4(5): 75.
- [7] 付先军,王振国,李学博. 基于多维结构描述符的中药“性-构”关系研究[J]. 世界科技技术-中医药现代化, 2017, 19(4): 549.