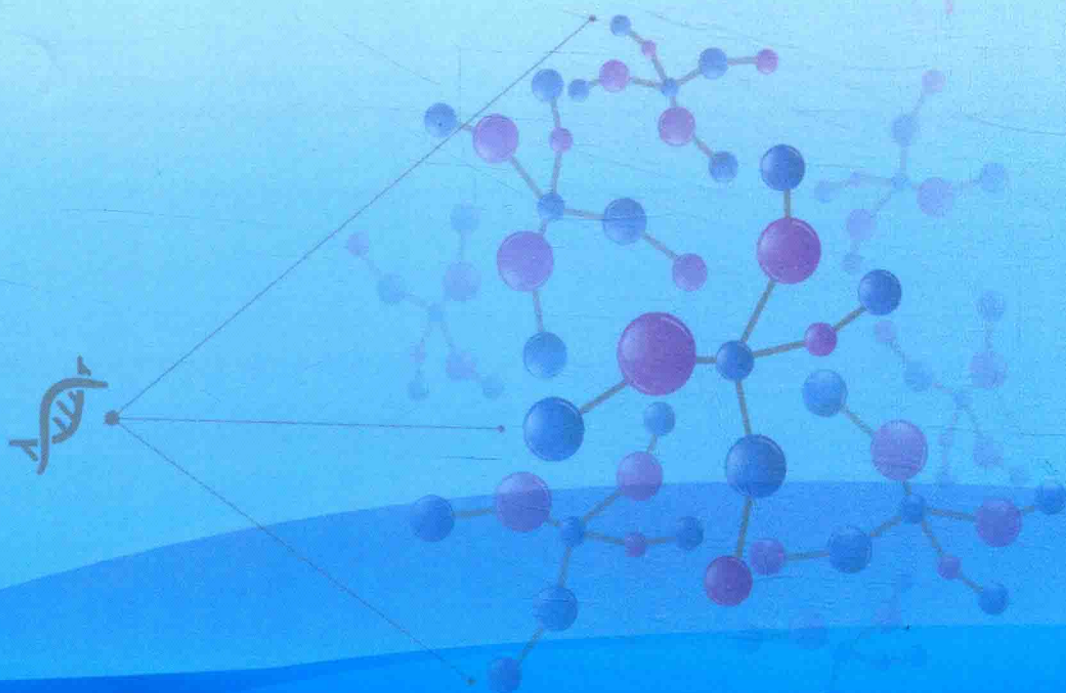


“十二五”国家重点图书出版规划项目

● 中医药信息学丛书 ●

中医类方衍化关系 自动发现

朱彦 高博 崔蒙 著



科学出版社

“十二五”国家重点图书出版规划项目

中医药信息学丛书

中医类方衍化关系自动发现

朱彦高博崔蒙著

北 京

内 容 简 介

本书属于“中医药信息学丛书”之一,主要介绍了类方衍化关系自动发现研究的背景、类方相关概念分析及形式化表达、中药和功效等术语规范化、方剂药物信息自动抽取、功效语义网络构建、方剂功效子网络计算、方剂间功效语义距离计算、类方衍化关系机器学习、类方树自动构建和方剂衍化关系智能分析系统设计与实现等内容。本书从研究项目的选题到数据收集整理,从概念建模与知识表达到新分析方法的提出与验证,最终完成具体案例和分析系统的开发,完整展示了中医药信息学理论应用于实践的一个优秀案例。

本书对中医方剂数据处理与分析的研究者和使用者具有指导意义,也可作为中医药信息化领域科研人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

中医类方衍化关系自动发现 / 朱彦, 高博, 崔蒙著. —北京: 科学出版社, 2017.8
(中医药信息学丛书)

“十二五”国家重点图书出版规划项目

ISBN 978-7-03-054215-1

I. ①中… II. ①朱… ②高 ③…崔 III. ①方剂学—研究 IV. R289

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 202156 号

责任编辑: 刘 亚 曹丽英 / 责任校对: 郑金红

责任印制: 张欣秀 / 封面设计: 陈 敬

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京京华虎彩印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017 年 8 月第 一 版 开本: 787×1092 1/16

2017 年 8 月第一次印刷 印张: 8 1/2

字数: 196 000

定价: **48.00 元**

(如有印刷质量问题, 我社负责调换)

丛书编委会

主 编 崔 蒙 吴朝晖 乔延江

编 委 王映辉 李海燕 张华敏 赵英凯

李园白 王 耘 姜晓红

特别致谢

本书出版过程中得到了以下基金资助，特表感谢。

国家自然科学基金青年科学项目（81503494）

北京市自然科学基金资助项目（7174328）

中国中医科学院博士研究生创新人才培养基金项目（CX201510）

丛 书 序

21 世纪是世界科学技术迅猛发展的时期,学科之间的交叉融合成为科技发展的重要趋势之一。其中,信息科学技术产生了广泛而深远的影响,对于医学领域也不例外。医学信息学是医学、计算机科学、人工智能、决策学、统计学和信息管理学的新兴交叉学科,在电子病历、医院信息系统、临床决策支持系统、远程医疗及数据交换标准等方面取得了丰硕的成果,已经在医院管理、教学和科研,疾病的预防、诊断和治疗等方面发挥了不可替代的作用。不言而喻,中医药信息学的发展历程更为年轻,富有潜力。中医中药流传数千年,至今仍然保持旺盛的生命力,在维护生命健康中发挥着独特而重要的作用。纵观中医药发展历程,总是与时代紧密相连,唯其如此,方能历久弥新。当今,现代科技背景之下,中医药学术繁荣复兴,与现代医学乃至其他学科的汇聚、交流、融合、互补,逐渐成为中医药时代发展的显著态势。

中医药文献典籍浩如烟海,学术经验传承异彩纷呈,蕴藏着极为宝贵的学术资源,有待深入发掘。信息科学技术方法为此提供了崭新的机遇,对中医药学术的当代传承与发展发挥了重要的作用,中医药信息学这门新兴的学科也由此应运而生。同时,也应当看到,缘于学科性质、理论钩沉、社会文化背景、语言表述、思维模式、时代变迁等差异,中医药学术内容本身与信息科学技术的融合过程中必然存在重大挑战,中医药信息的获取、转化与共享等面临许多困难。这一点是医学信息学、地理信息学等其他与信息学交叉的学科发展过程中较少遇到的。所以尽管呈现出蓬勃的生机与巨大的潜力,但至今尚少有学者,也无专著对其内涵、外延进行详细论述。虽然已经成为国家中医药管理局重点建设学科,但其具体的学科建设仍是筚路蓝缕,充满艰辛,亟需奠基性著作充实其理论内核,支撑后备学术人才的教育培养。幸而,以崔蒙研究员等为首的学术团队,多年来致力于中医药信息学原理与方法学的研究、中医药信息数据库及中医药信息国际标准的研制,其进行了大量基础性的研究工作,积累了较丰富的经验和学识,很多工作与研究都充实了学科领域,为中医药信息学学科的设置、建设与发展提供了极其坚实的基础和有益的借鉴。

对于一门学科而言,理论与实践工作同等重要。相比中医药信息研究工作的大量开展,学科理论建设工作有所滞后,长期势必会影响与制约学科发展。由此,“中医药信息学丛书”编撰工作的意义与价值显得极为关键。该丛书从全方位的角度介绍了这门学科的去、现况和未来,对中医药信息的内涵、外延、研究方法、内容及意义等着墨甚多,阐发明晰而深刻,对中医药信息学下中医药信息标准、中医药科学数据、中医药知识服务、中药信息学、中医临床信息学、中医药图书馆学和中医药情报学七个分支学科均有系统论述。概言之,其研究内容几乎涵盖了一切与中医药活动有关的信息,如临床、科研、教育、管理、文化、生产经营等领域所产生的信息,提高了对中医药信息获取、转化、传播与利用的能力。

尤其值得一提的是,书中认为中医药信息是认识论层次的信息,具有现代整体性、动态时空性、现象理论等特征,其“主客融合的体验”及“包含本质的现象”等导致了辨证诊断和疗效的模糊,以及相对重视客体的整体变化状态,这些特点与大数据的“整体性”、“混杂性”、“相关性”三大特点不谋而合。如果能够借助大数据研究所获得的成果,从理论、方法学上解决体

验信息获取、存储及传播的问题，必将对中医学发展起到至关重要的推动作用。

目前，欧美发达国家对医学信息学的教育与训练非常重视，认为掌握必要的现代信息技术是医务工作者必须具备的一项基础知识和基本技能。这一点在中医药领域同样适用，但纵观国内临床医疗系统尤其是中医药领域，对此认识还尚待深化，这对拓展中医药工作者的视野、提升其临床水平及科研能力显然不利。我希望“中医药信息学丛书”的问世能够在较大程度上引发学界对此问题的关注与重视，推动中医药信息学的普及与发展，获得更大范围的学界共识。

相比传承千年、博大精深的中医学，中医药信息学刚刚起步，尚有很多的工作需要一一完成，还有很多的困难需要一一克服，可谓前路漫长且艰、任重而道远。可喜的是，“中医药信息学丛书”的编撰为万里征程开了一个好头，为这门学科的发展奠定了基础，指明了方向，确立了模式。“前人栽树，后人乘凉”，希望广大中医药信息工作者以此为起点，在全面而深刻把握中医药学术特质与发展规律的基础上，有效借鉴、运用信息科学原理、方法、技术，不断丰富中医药信息学的内涵，探寻其内在规律，为中医药学术的传承、发展乃至创新提供更多的助益，充分发挥其独特作用。

传统与现代的交融总是令人充满无限的遐想与期待，处于高概念和大数据时代的中医药信息学更加深化其学科特质，望能引领中医药学科、事业与产业的发展。对于崔蒙、吴朝晖、乔延江主编及编写团队，我比较熟悉他们的工作，感佩学者们孜孜不倦、辛勤耕耘、认真治学的精神，创建一个崭新的二级学科实在不易，此丛书乃中医药信息学的奠基之作。邀我作序，是对我的信任和鼓励，谨志数语乐观厥成。

王永炎
甲午季秋

前 言

身处当前这个信息化的时代，信息技术正深刻改变我们的学习、工作、生活。中医学与信息科学交叉融合而形成的中医药信息学，其发展也为中医学的传承和创新带来了新的思路和方法。由中国中医科学院中医药信息研究所、浙江大学、北京中医药大学、中国中医科学院广安门医院四家单位数十位科研人员通力合作、撰写而成的“中医药信息学丛书”已经陆续出版，该丛书对数十年来中医药信息学学科研究成功进行了沉淀和梳理。作为丛书分册之一，与其他分册不同的是，本书着眼于中医药信息学的应用领域，以类方衍化关系自动发现为例，是将中医药信息学方法应用于传统方剂研究领域的有益尝试和成功案例。

方剂是历代医家根据中医理论指导，按照一定配伍原则形成的治疗疾病的药物组合，是医家治疗经验及智慧的载体。类方有组成结构相近、功效治法相类的特点，其研究对方剂理论的提高和临床实践均有重要价值。中医数千年临床实践积累下来海量的成方，如果通过手工查询、整理和分析，难免存在错讹疏漏；若能发挥计算机的长处，对类方进行自动分析整理，将大大提高效率。

近几年来，我们团队一直以“面向中医药信息化的实际需求，解决实际问题”为宗旨开展研究工作，本书正是近年来团队研究心路历程的总结。我们选择了类方自动分析这一实际需求，着力于分析类方衍化规律，挖掘类方衍化关系的内涵并构建数学模型，进而实现了类方衍化关系的自动识别，能有效辅助构建古今类方衍化关系知识体系。

本书分为 14 章，分别介绍了研究的背景和意义概述，类方相关概念分析及形式化表达，中药术语规范化，功效术语规范化，方剂药物信息自动抽取研究，数据库设计与构建，饮片功效强度量化，功效语义网络构建，方剂功效子网络计算，方剂间功效语义距离的计算，类方衍化关系机器学习，应用案例：类方树自动构建，方剂衍化关系智能分析系统设计与实现，以及对未来工作的总结展望等内容。从立题到数据收集整理，再到建模和新分析方法的提出，最后完成应用案例展示和分析系统的设计开发，各章内容环环相扣，完整地展示了一个研究课题的执行过程。希望本书能给相关领域的同道一点启发，为中医的传承和发展贡献些许微薄之力。

在即将出版之际，感谢中国中医科学院中医药信息研究所、中国中医科学院研究生院提供的便利和支持，感谢科学出版社在本书出版发行上给予的支持和帮助。同时也感谢西苑医院翁维良研究员、广安门医院刘瓦利主任、中国中医科学院研究生院史欣德教授、北京中医医院张声生主任在方剂学理论及临床应用方面的指导。最后感谢我家人无微不至的关怀，尤其是爱人王俊慧医师的激励，让我有勇气向出版社投稿出版。

因本人学识浅薄，书中肯定存在很多不足之处，欢迎各位同道和读者批评指正。

朱 彦

2017 年 5 月

目 录

第一章 概述	1
第一节 面临的问题及解决方案	2
第二节 示范性研究：四君子汤类方	2
第二章 类方相关概念分析及形式化表达	5
第一节 相关基础概念和关系的形式化表达	5
第二节 “衍化类方”概念分析及形式化表达	7
第三节 “类方衍化关系”内涵分析	9
第三章 中药术语规范化	13
第一节 中药名物异同现状	13
第二节 基于本体知识论的表达方法	14
第三节 统计分析	14
第四节 本研究的饮片术语规范化	19
第四章 功效术语规范化	20
第一节 功效术语来源	20
第二节 动宾结构分析	20
第三节 作用对象分析	20
第四节 作用类型分析	21
第五节 规范化及概念的抽取	22
第五章 方剂药物信息自动抽取研究	24
第一节 研究现状	24
第二节 方剂药物信息抽取总体框架	25
第三节 基础数据准备	26
第四节 信息抽取和标准化	27
第五节 应用案例：历代汤剂用药剂量变化规律分析	29
第六节 小结	31
第六章 数据库设计与构建	32
第一节 基本组成	32
第二节 数据库设计	33
第三节 中药数据库	35
第四节 方剂数据库	37
第七章 饮片功效强度量化	43
第一节 研究目的	43
第二节 数据来源	43
第三节 研究方法	44
第四节 研究过程	45
第五节 量化结果	46
第八章 功效语义网络构建	53

第一节	概述	53
第二节	功效语义关系的构建	54
第三节	结果	57
第四节	总结	59
第九章	方剂功效子网络计算	61
第一节	方剂功效自动分析概述	61
第二节	方剂功效子网络算法简介	63
第三节	方剂功效子网络算法计算步骤	66
第四节	结果评价与参数最优化	69
第五节	计算示例: 四君子汤	73
第六节	方剂对比计算示例: 四物汤和桃红四物汤	77
第七节	计算结果分析	79
第十章	方剂间功效语义距离的计算	83
第一节	概述	83
第二节	基于图理论的语义距离计算	83
第三节	方剂间功效语义距离函数定义	86
第四节	功效子网络间语义距离计算步骤	86
第五节	计算示例	88
第六节	小结	94
第十一章	类方衍化关系的机器学习	95
第一节	指标计算	95
第二节	机器学习数据集的生成	99
第三节	机器学习模型的选择	100
第四节	实验过程	101
第五节	类方衍化关系量化模型结果	103
第六节	分析和评价	103
第十二章	应用案例: 类方树的自动构建	110
第一节	类方树及其构建函数的定义	110
第二节	算法	110
第三节	结果	111
第四节	小结	114
第十三章	方剂衍化关系智能分析系统设计与实现	115
第一节	系统框架设计	115
第二节	开发环境和平台	117
第三节	重要功能模块介绍	117
第十四章	总结与展望	123
第一节	研究结果	123
第二节	未来的工作	124
参考文献		125

第一章 概述

“方剂”是以药物按一定的规矩和方法组合成方^[1]，是中药应用的基本形式，是治法的体现，是根据配伍原则，总结临床经验，以若干药物配合而成的药方。

中医数千年临床实践积累下来大量的成方，根据不完全统计，截至晚清的历代古方就超过 10 万首。这些方剂都是在历代临床实践中总结出来，并经过实践检验后留存至今的，是医家治疗经验及智慧的载体。对方剂学的学习是中医学习中必不可少的一步，将方剂结合其主治、尤其是结合相关医案进行综合分析，挖掘用药规律，是提高临床疗效的重要手段。但这样庞大的方剂知识，要一一精习、掌握并不现实，因而对类方的分析研究就必不可少。

类方有组成结构相近、功效治法相类的特点，一般有一个制方较早的基础方剂，其他方剂均为该方的加减衍化。因为类方有这种特点，所以在方剂学习过程中，类方是一条学习的捷径，只要熟练掌握了祖方及加减变化规律，在临床中就能够应对自如；而类方组成结构和功效方面的相似性，也对配伍规律研究有着重要意义。清代徐大椿在《伤寒论类方》中就采用了“以方类证”的方法，将《伤寒论》113 方分为桂枝汤类（19 方）、麻黄汤类（6 方）、葛根汤类（3 方）、柴胡汤类（6 方）、栀子汤类（7 方）、承气汤类（12 方）、泻心汤类（11 方）、白虎汤类（3 方）、五苓散类（4 方）、四逆汤类（11 方）、理中汤类（9 方）、杂方（22 方）等 12 类。这样不仅将《伤寒论》诸方做了分类，并对同类诸方随证加减变化做了深入研究，这种研究方法，不但易于掌握，而且对临床应用颇有意义。

另外，类方是传统名方繁衍发展而成的方剂系统，是历代名医应用古方的精华，是指导临床组方用药、加减变化的规矩与准绳^[2]，对类方的研究，也是对历代组方配伍衍化规律的学习过程。例如，二陈汤首见于《太平惠民和剂局方》，原方用于治痰饮为患，被后世誉为祛痰通剂的祖方，历代医家以二陈汤为基础加减变化，逐渐形成以二陈汤为核心的治痰方剂二陈汤类方，《太平惠民和剂局方》以后二陈汤类方有数百首之多，这些方剂不但含有二陈汤基本药物，而且主要病因病机均为脾不健运、湿聚为痰、气机阻滞，治法均以燥湿化痰、理气和中为主，故均为二陈汤类方，这样明确了二陈汤类方的发展演变过程，更有利于研究此类方剂的配伍规律。

类方研究也为越来越多的学者所重视。例如，范欣生等^[3]认为，类方在基本的共性规律之外又存在各异性，其共性基础在于类方基本方，体现了清晰的组方思路和结构特征，是学习和探讨方剂科学内涵的基础；各异性反映了证候变化的动态性和复杂性，蕴含着随证候变化而调整的加减化裁方法，揭示了“方证相关”的组方特点。黄煌^[4]、宋小莉等^[5]认为，从类方入手研究便于理解药性及方意，有利于中医方证规范化研究，有利于阐释复方的配伍规律和演变规律，更加方便临床使用。另外，探讨祖方与衍方的源流关系也是类方研究的内容之一^[6]，是自《祖剂》以来的重要研究内容。

然而，中医数千年临床实践积累下来海量的成方，以及临床实际应用中不断产生的新衍方，如果单纯靠手工查询、整理和分析，难免错讹疏漏，如果能基于计算机技术，对类方衍化关系

进行自动分析研究,将大大提高研究效率。因而,研究类方衍化规律,挖掘类方衍化关系的内涵并构建数学模型,进而实现类方衍化关系的自动识别,辅助构建古今类方衍化关系知识体系,对方剂的学习和临床应用都有十分重要的意义。

第一节 面临问题及解决方案

基于已有的文献调研来看,使用计算机技术完成类方衍化关系的自动发现尚未见报道。归纳其研究难点主要包括以下几方面。

1)“类方”作为中医方剂学中一个十分重要的概念,不但广泛出现在诸多方剂著述中,也已作为一个特定的专题研究领域。然而,从权威著述、教材及已公开发表的研究成果来看,对类方的内涵和外延,仍存在着不同的理解,类方衍化关系更是一个比较模糊的概念,需要构建一个适合计算机进行分析处理的类方衍化关系模型。

2)类方衍化关系涉及方剂的相似度计算,而已有的相似度模型主要从方剂的组成药物和剂量上来进行计算,无法满足对类方衍化关系的判别需求。需要从方剂的时间源流关系、性、味、归经、功效相似性等方面综合考虑,来实现相似度的度量。

3)类方衍化的过程十分复杂,除了需要考虑性、味、归经、功效这些维度以外,还要**体现出功效的改变**。也就是要考虑随着药物和药量的增减,药物间的配伍关系如何发生相应变化,从而导致方剂整体功效发生变化的过程。这不仅需要实现基于方剂整体功效的自动计算,还要完成衍化方相对于祖方的整体功效变化程度的度量。

本研究拟针对以上研究难点,通过对类方衍化关系相关概念的梳理和分析,确定适合计算机分析和处理的因素和指标,设计出一套自动计算方剂功效子网络的算法,并完成不同方剂间整体功效的变化程度的度量,实现类方衍化关系的自动发现。最终选用四君子汤类方为例,获得基于方剂的时间源流关系、性、味、归经、功效相似性等多个因素的类方衍化关系的判别模型,实现了四君子汤类方衍化关系的自动发现,并进行了可视化展示。

第二节 示范性研究:四君子汤类方

本研究以四君子汤类方为例,收集衍化方数据集,进行类方衍化关系判别模型的训练和评价,然后再推广到其他类方。

四君子汤由人参、白术、茯苓、甘草各等份组成,具有“补而不滞,利而不峻”之功效,且其作用冲和平淡,如宽厚平和之君子,故名“四君子汤”。作为补气的基本方,为后世医家继承并在临床实践中大量地灵活运用,创造出以四君子汤为基础方的四君子汤类方,包括异功散、六君子汤、香砂六君子汤、保元汤等大量的衍化方^[7,8]。

一般认为,四君子汤的名称首见于北宋《太平惠民和剂局方》卷三(新添诸局经验秘方)。而该方在不同方书以不同名称出现,更早的文献《圣济总录》卷八十中,称为“白术汤”。现代的较权威的《中医方剂大辞典》^[9]中,也将“白术汤”作为主词条,“四君子汤”作为副词条。

本研究不做文献学上的考证,只为方便纳入更多的四君子汤候选方,将四君子汤的来源定

为较早的文献《圣济总录》卷八十。

研究拟实现以下内容。

1) 对类方相关概念进行梳理和分析,明确类方、类方衍化关系、类方树等概念的定义,将其转化为能够为计算机分析和计算的表述,完成形式化表达。

2) 基于大量临床医案的文献数据,对饮片及其功效的关联强度进行量化研究。通过与《中华人民共和国药典》(以下简称《药典》)记载的功效和临床用药经验进行比较分析,较好地反映饮片和功效在临床使用上的关联度。

3) 构建一个较为完善的功效语义网络。首先,基于功效术语标准化过程抽取出的功效概念,作为语义网络的节点;其次,对功效间的语义关系进行系统分析,总结语义关系;再次,通过文献共现和专家咨询相结合的方法,对功效间语义强度进行量化和强度级别归类。最终构建功效语义网络。

4) 提出基于功效语义网络自动计算方剂功效子网络的方法。

5) 提出基于图理论的计算方剂间功效语义距离的方法,将方剂间的功效语义距离,转化为计算不同方剂的功效子网络的最小费用流问题。

6) 以四君子汤类方为例,基于 Logistic 回归方法构建类方衍化关系判别模型。该模型将包含时间源流关系、方剂药物组成、方剂间的归经相似度、共同药物功效比率、方剂间功效语义距离等参数。

7) 基于类方衍化关系判别模型,完成对四君子汤类方树的自动构建的应用案例,探询模型的实用价值和应用前景。

研究过程中主要采用了如下研究方法。

文献研究法:通过阅读和分析已有的大量文献,对其中关于类方相关概念进行梳理和分析,明确类方、类方衍化关系、类方树等概念的定义。

调查法:一方面,以面对面咨询的方式,向方剂学领域专家咨询请教,征求其关于类方、类方衍化关系等概念内涵的看法和建议;另一方面,通过问卷调查法,将类方候选集以书面形式分发给领域专家,然后回收整理、统计答案,获得类方衍化关系数据集。

公理化方法:提出类方衍化关系内涵假设,构建类方衍化模型;通过公理化及形式化表达,将方剂、类方、类方树等概念符号化成为显性信息。

数学统计方法:基于收集的数据,对提出的类方衍化模型进行机器学习,获得模型的定量公式,并以图表形式实现成果的可视化展示。

研究技术路线如图 1-1 所示。

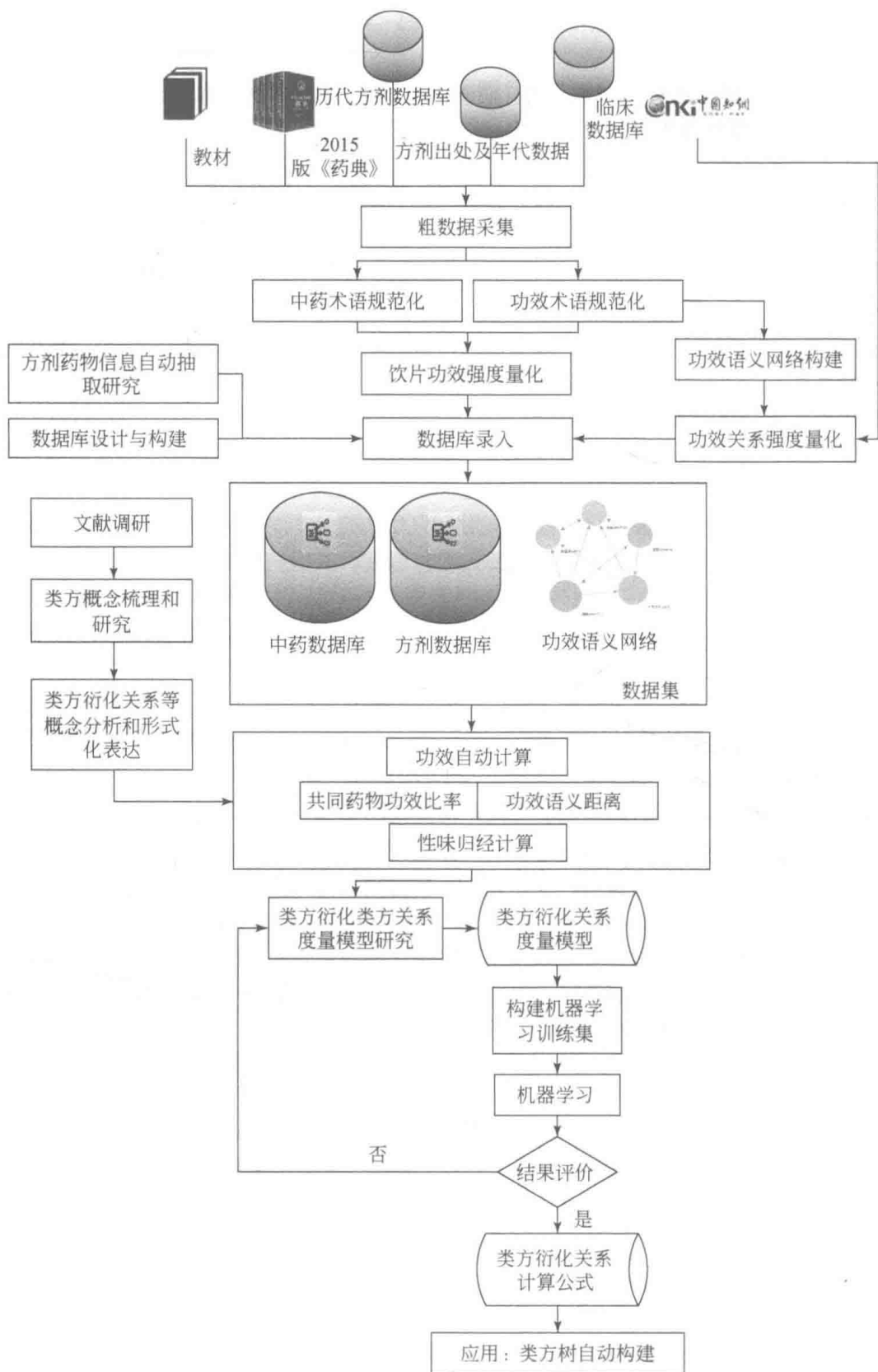


图 1-1 技术路线图

第二章 类方相关概念分析及形式化表达

在类方衍化关系进行建模之前，需要对类方及类方衍化关系等相关概念进行梳理和辨析，划定适合计算机表达和分析的对象和范围，并进行形式化表达，完成从领域概念到计算机能进行分析的数学模型的转换。

第一节 相关基础概念和关系的形式化表达

为了便于后续的分析 and 讨论，首先要对饮片、方剂等相关的基础概念进行定义及建立其关系函数。

一、饮片相关概念

药材 (DrugMaterial) = <DMID, DMName>

药材 ID: DMID

药材名称: DMName

功效 (Efficacy) = <EID, EName>

功效 ID: EID

功效名称: EName

药性 (DrugNature) = {大寒, 寒, 微寒, 大凉, 凉, 平, 微温, 温, 热, 大热}

药味 (DrugFlavor) = {酸, 苦, 甘, 辛, 咸, 淡}

归经 (Channel) = {胆, 肝, 肺, 大肠, 胃, 脾, 心, 小肠, 膀胱, 肾, 心包, 三焦}

饮片 (PreparedDrug): <PDID, PDName, PDAlias, DrugMaterial, PDE, PDN, PDF, PDC, PDRegularMinDosage, PDRegularMaxDosage>

饮片的标识符: PDID

饮片名称: PDName

饮片名称异名集合: PDAlias = {alias₁: String, alias₂: String, ..., alias_n: String}

药材来源: DrugMaterial

功效集合: PDE = {efficacy₁: Efficacy, efficacy₂: Efficacy, ..., efficacy_n: Efficacy}

药性集合: PDN = {nature₁: DrugNature, nature₂: DrugNature, ..., nature_n: DrugNature}

药味集合: PDF = {flavor₁: DrugFlavor, flavor₂: DrugFlavor, ..., flavor_n: DrugFlavor}

归经集合: PDC = {channel₁: Channel, channel₂: Channel, ..., channel_n: Channel}

常用最小剂量: PDRegularMinDosage

常用最大剂量: PDRegularMaxDosage

定义关系: 饮片的药材来源相同 **FromSameMaterial** (prepareddrug1: PreparedDrug, prepareddrug2:

$\text{PreparedDrug}) \equiv \text{prepareddrug1.DrugMaterial} = \text{prepareddrug2.DrugMaterial}$

二、方剂相关概念

文献出处 LQ (Formula literaturequote) = <LQID, LQName, LQYear, Position>

文献标识符 LQID: 用来识别该文献的身份

文献名称: LQName

文献产生年代: LQYear

在文献中出现的位置: Position

定义关系: 文献来源出现晚 $\text{LQ_IsLater}(lq_1:LQ, lq_2:LQ) \equiv (lq_1.LQYear > lq_2.LQYear) \vee ((lq_1.LQID = lq_2.LQID) \wedge (lq_1.Position > lq_2.Position))$ 。

配伍角色(Formula Ingredient Role) FIR = {君, 臣, 佐, 使, 其他}

药物组成单元(Formula Composition Unit)FCU = <PreparedDrug, Dosage, DosageUnit, Role>

饮片: PreparedDrug

剂量: Dosage

剂量单位: DosageUnit

该药物组成在方剂中的配伍角色: Role

定义关系: 药物组成单元 fcu_2 **和药物组成单元** fcu_1 **相同**, 即 $\text{FCUSameAs}(\text{fcu}_1:\text{FCU}, \text{fcu}_2:\text{FCU}) \equiv \text{fcu}_1.\text{PreparedDrug} = \text{fcu}_2.\text{PreparedDrug} \wedge \text{fcu}_1.\text{Dosage} = \text{fcu}_2.\text{Dosage} \wedge \text{fcu}_1.\text{DosageUnit} = \text{fcu}_2.\text{DosageUnit}$

方剂 (Formula) 的形式化描述为: $\text{Formula} = \langle \text{FID}, \text{FName}, \text{FC}, \text{FE}, \text{LQ} \rangle$

方剂标识符 FID: 用来识别该方剂的身份

方剂名称 FName (Formula Name): 文献记载的方剂名称

药物组成集合 FC (Formula Compositions) = { $\text{fcu}_1:\text{FCU}, \text{fcu}_2:\text{FCU}, \dots, \text{fcu}_n:\text{FCU}$ }

功效集合 FE = { $\text{efficacy}_1:\text{Efficacy}, \text{efficacy}_2:\text{Efficacy}, \dots, \text{efficacy}_n:\text{Efficacy}$ }

文献出处: LQ

定义关系: 方剂 f_2 **和方剂** f_1 **组成相同**, 即 $\text{FormulaCompositionIsSame}(\text{f}_2:\text{Formula}, \text{f}_1:\text{Formula}) \equiv (\forall \text{fcu}_1 \in \text{f}_1.\text{FC}, \exists \text{fcu}_2 \in \text{f}_2.\text{FC}, \text{满足 } \text{FCUSameAs}(\text{fcu}_1, \text{fcu}_2)) \wedge (\forall \text{fcu}_2 \in \text{f}_2.\text{FC}, \exists \text{fcu}_1 \in \text{f}_1.\text{FC}, \text{满足 } \text{FCUSameAs}(\text{fcu}_2, \text{fcu}_1))$

定义关系: 药物组成集合 FC **含有饮片** prepareddrug, 即 $\text{FC_ContainDrug}(\text{fc}:\text{FC}, \text{prepareddrug}:\text{PreparedDrug}) \equiv \exists \text{fcu} \in \text{fc} \wedge \text{fcu}.\text{PreparedDrug} = \text{prepareddrug}$

定义关系: 方剂 f **含有饮片** prepareddrug, 即 $\text{Formula_ContainDrug}(\text{f}:\text{Formula}, \text{prepareddrug}:\text{PreparedDrug}) \equiv \text{FC_ContainDrug}(\text{f}.\text{FC}, \text{prepareddrug})$

定义关系: 方剂 f_2 **药物组成包含方剂** f_1 , 即 $\text{FormulaInclude}(\text{f}_2:\text{Formula}, \text{f}_1:\text{Formula}) \equiv \forall \text{fcu}_1 \in \text{f}_1.\text{FC}, \text{Formula_ContainDrug}(\text{f}_2, \text{fcu}_1.\text{PreparedDrug})$

定义关系: 方剂 f_2 **真包含方剂** f_1 , 即 $\text{FormulaProperInclude}(\text{f}_2:\text{Formula}, \text{f}_1:\text{Formula}) \equiv \text{FormulaInclude}(\text{f}_2, \text{f}_1) \wedge (\text{NotFormulaCompositionIsSame}(\text{f}_2, \text{f}_1))$

如果包含关系也考虑来自相同药材的饮片的话, 可以类似地定义以下函数。

定义关系: 药物组成集合 FC **扩展含有饮片** prepareddrug, 即 $\text{FC_ExContainDrug}(\text{fc}:\text{FC}, \text{prepareddrug}:\text{PreparedDrug}) \equiv \exists \text{fcu} \in \text{fc} \wedge (\text{fcu}.\text{PreparedDrug} = \text{prepareddrug} \vee \text{FromSameMaterial})$

(fcu. PreparedDrug, prepareddrug)

定义关系：方剂 f 扩展含有饮片 prepareddrug，即 $\text{Formula_ExContainDrug}(f:\text{Formula}, \text{prepareddrug}:\text{PreparedDrug}) \equiv \text{FC_ExContainDrug}(f.\text{FC}, \text{prepareddrug})$

定义关系：方剂 f_2 扩展包含方剂 f_1 ，即 $\text{FormulaExInclude}(f_2:\text{Formula}, f_1:\text{Formula}) \equiv \forall fcu_1 \in f_1.\text{FC}, \text{Formula_ExContainDrug}(f_2, fcu_1.\text{PreparedDrug})$

定义关系：方剂 f_2 扩展真包含方剂 f_1 ，即 $\text{FormulaProperExInclude}(f_2:\text{Formula}, f_1:\text{Formula}) \equiv \text{FormulaExInclude}(f_2, f_1) \wedge (\text{NotFormulaCompositionIsSame}(f_2, f_1))$

第二节 “衍化类方”概念分析及形式化表达

一、广义类方和衍化（狭义）类方

基于已有关于类方概念的研究论述，总结出两种接受度较广的类方定义。

(1) 广义类方：功效主治病证等方面极相类似的一组方剂。

(2) 衍化类方（狭义类方）：①由一首祖方及其衍化出的若干不同方剂所构成，即组成类方的方剂之间存在着渊源关系；②在组成结构功效主治病证上极相类似。

衍化类方一般有一个制方较早的基础方剂，其他方剂均为该方的加减衍化，因此有着组成结构相近、功效治法相类的特点，对方剂理论的总结和临床实践的指导均有重要价值。故本研究采用了衍化类方作为研究对象。

二、事实类方和理论类方

衍化类方又可以分为事实类方和理论类方。

事实类方指有文献学证据的类方，即从文献学上，有明确的证据表明若干方剂组成为一组类方。例如，“四君子汤类方中包含异功散、六君子汤、香砂六君子汤、保元汤”，在《祖剂》和各版教材都有明确记载。

理论类方即无文献学证据的类方，是没有明确的文献学证据的若干方剂组成的一组类方，只从类方的特点和定义来判断的一组方剂。

本文讨论的类方既包括理论类方，也包括事实类方，不从文献学上进行考证，只将文献学上的证据来作为纳入考察对象的标准之一。

广义类方、衍化类方、理论类方和事实类方的关系如图 2-1 所示。

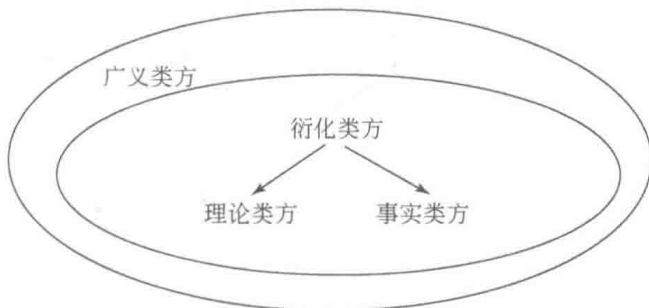


图 2-1 几种类方概念及其关系