วิธีการจัดกลุ่มข้อมูลยาสมุนไพรสำหรับคำแนะนำการทดแทนยาสมุนไพรจากสารประกอบพฤษเคมีที่คล้ายคลึงกัน

Clustering method for recommendation of herbal medicine replacement base on similar Phytochemical compound

อนัญญา พรมโคตร1 (Ananya Promkot)[1]

[1]ภาควิชาวิทยาการคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

บทคัดย่อ

ข้อจำกัดสำคัญสำหรับศาสตร์การแพทย์แผนโบราณ คือ หลักฐานด้านวิทยาศาสตร์สำหรับยืนยันความสามารถในการรักษาด้วยศาสตร์การแพทย์แผนโบราณและได้มีความพยายามเปิดเผยข้อมูลตามหลักวิทยาศาสตร์เพื่อยืนยันสรรพคุณรักษา การจัดเก็บข้อมูลสารสนเทศอย่างเป็นระบบขยายวงกว้างขึ้นดังนั้นการใช้ประโยชน์จากข้อมูลดังกล่าวเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการทำงานหรือการตัดสินใจจึงเป็นสิ่งที่มีความสำคัญ การจัดกลุ่มด้วยวิธี Fuzzy c-mean เป็นวิธีการจัดกลุ่มที่ยอมให้ข้อมูลถูกจัดกลุ่มได้มากกว่าหนึ่งกลุ่มมีความเหมาะสมกับข้อมูลสารออกฤทธิ์ในยาสมุนไพร ผลจาการการจัดกลุ่มจะนำไปสู่การอธิบายสรรพคุณรักษาของยาสมุนไพรให้เป็นที่ยอมรับตามหลักฐานทางวิทยาศาสตร์ และเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการเลือกใช้สมุนไพรทดแทนสมุนไพรที่ขาดแคลนที่มีสรรพคุณเหมือนกัน

คำสำคัญ: สมุนไพร, สรรพคุณ,การจัดกลุ่ม

Abstract

The key limitation for traditional medicine is Scientific evidence confirms the ability to treat with traditional medicine and has made efforts to disclose scientific information to confirm its therapeutic properties. therefore the use of such information to maximize performance or decision making is important. Fuzzy c-mean clustering is a overlapping clustering method that allows more than one group. Suitable to classified according to their active ingredient of herbal medicine. The results of the clustering will lead to the description of the therapeutic properties of herbal medicines to be accepted by scientific evidence. And to optimize the use of herbal alternatives that lack the same properties.

Keyword: Herb, Efficacy, Cluster

1. บทนำ

ความซับซ้อนของศาสตร์การรักษาโรคแผนโบราณด้วยยาสมุนไพรเป็นสิ่งที่มีความท้าทายสำหรับแพทย์แผนโบราณ ซึ่งยาสมุนไพรที่ใช้ในการบำบัดรักษาอาการเจ็บป่วยของคนไข้นั้นจำเป็นจะต้องอาศัยองค์ความรู้และประสบการณ์ของแพทย์ ในการตรวจวินิจฉัยและตัดสินใจเลือกใช้ยาสมุนไพรเพื่อบำบัดรักษา หรือบรรเทาอาการเจ็บป่วย โดยมีเป้าหมายสำคัญคือเพื่อให้อาการเจ็บป่วยของผู้ป่วยหายไป คุณภาพชีวิตของผู้ป่วยดีขึ้น ไม่เกิดผลกระทบข้างเคียงที่อาจเป็นอันตรายสำหรับผู้ป่วย

สำหรับการใช้ยาสมุนไพรในศาสตร์การแพทย์แผนโบราณ เป็นองค์ความรู้ที่สืบทอดต่อกันมาจากบรรพบุรุษ และยังคงมีการใช้อย่างแพร่หลายในปัจจุบัน เช่น ศาสตร์การแพทย์แผนจีน แพทย์แผนอินเดีย แพทย์

แผนไทย เป็นต้น โดยใช้ยาสมุนไพรตัวเดียว หรือการใช้ยาสมุนไพรร่วมกันเป็นตำรับยาเพื่อรักษาอาการเจ็บป่วย และเป็นที่ยอมรับเช่น ในศาสตร์การแพทย์แผนจีนใช้ตำรับยาสมุนไพรเพื่อรักษาโรคมะเร็ง โรคเรื้อรัง โรคหัวใจและหลอดเลือด [1] เป็นต้น ซึ่งยาสมุนไพรแต่และชนิดก็มีคุณสมบัติการรักษาที่แตกต่างกัน ร่วมทั้งข้อจำกัดการใช้ต่างๆ ด้วย

ข้อจำกัดสำคัญสำหรับศาสตร์การแพทย์แผนโบราณคือ หลักฐานด้านวิทยาศาสตร์สำหรับยืนยันความสามารถในการรักษาด้วยศาสตร์การแพทย์แผนโบราณ [2] ในปัจจุบันนักวิทยาศาตร์ แพทย์แผนปัจจุบันต่างวิจัยศึกษาค้นคว้าทดลองเพื่อพิสูจน์สรรพคุณการรักษาที่ได้มีการใช้ตั้งแต่ในอดีต ที่มีการบันทึกไว้ในตำรับการแพทย์แผนโบราณ หรือแม้กระทั้งคำบอกเล่าที่ส่งต่อกันมาจากรุ่นสู่รุ่น

มีงานวิจัยจำนวนมากที่ให้ความสนใจในการศึกษากลไกการรักษา สารออกฤธิ์ของยาสมุนไพร ซึ่งเป็นการนำไปสู่การพัฒนาการใช้ยาสมุนไพรที่มีประสิทธิภาพมากยิ่งขึ้น [2] ความสามารถในการรักษาของยาสมุนไพรอาจได้รับจากคุณสมบัติจากสารออกฤธิ์ 1 ชนิด หรือหลายชนิดที่เสริมกัน

ยาสมุนไพรบางชนิดได้รับการยอมรับในวงกว้างว่ามีความสามารถในการรักษาอาการเจ็บป่วยได้เป็นอย่างดี ซึ่งบางชนิดเป็นพืชที่หายากและใกล้สูญพันธุ์ บางชนิดสามารถเติบโตได้ดีด้วยวิธีธรรมชาติไม่สามารถนำมาขยายพันธุ์ได้ และในบางครั้งมีข้อจำกัดเกี่ยวกับฤดูกาลเก็บเกี่ยว ระยะเวลาการเก็บรักษา ไม่สามารถนำมาใช้ได้ทันเวลา หรือมีราคาสูง มีงานวิจัยที่ได้พยายามวิเคราะห์และสร้างเกณฑ์เพื่อหายาสมุนไพรสรรพคุณสมุนไพรที่เหมือนกันรวมทั้งปรับปรุงตำรับยาสมุนไพรโดยลดความซับซ้อนหรือจำนวนสมุนไพรโดยที่สรรพคุณการรักษาไม่มีการเปลี่ยนแปลง[3] และนอกจากนี้งานวิจัยของ Sang และคณะ ได้นำเสนออัลกอริทึมเพื่อใช้ในการเลือกสมุนไพรที่มีประสิทธิภาพเหมือนกันเพื่อใช้ทดแทนกันด้วยเทคนิคเหมืองข้อมูล

เทคโนโลยีด้านการวิเคราะห์ข้อมูลสารสนเทศในปัจจุบันได้พัฒนาและได้มีการประยุกต์ใช้ในงานด้านต่างๆ มากมายเช่น วิทยาศาสตร์ งานด้านธุรกิจ รวมทั้งการแพทย์แผนโบราณ นอกจากนั้นการรวบรวมข้อมูลที่มีความเป็นระบบมากยิ่งขึ้นจึงมีความเป็นไปได้ในการใช้ประโยชน์จากการรวบรวมและเผยแพร่ข้อมูลอย่างเป็นระบบ เพื่อจำแนกกลุ่มข้อมูลยาสมุนไพรตามข้อมูลสารออกฤทธิ์จากยาสมุนไพร เพื่อใช้สำหรับค้นหาสมุนไพรที่ใช้ทดแทนสมุนไพรหายาก แนวทางการเปรียบเทียบสารออกฤทธิ์สำคัญจึงเป็นแนวทางหนึ่งที่มีความน่าสนใจ โดยใช้ข้อมูลจากฐานข้อมูลพืชยาสมุนไพรในเขตเอเชียตะวันออกเฉียงเหนือ[4] เพื่อจัดกลุ่ม (cluster) สมุนไพรที่มีสารออกฤทธิ์เหมือนกันซึ่งเป็นแนวทางหนึ่งในการแนะนำการใช้สมุนไพรสำหรับกรณีที่ยาสมุนไพรนั้นขาดแคลน สูญพันธุ์ หรือมีราคาสูง เป็นต้น ซึ่งภายในสมมุติฐานยาสมุนไพรมีสารออกฤทธิ์จำนวนมากซึ่งอาจมีสารที่ซ้ำซ้อนกัน ดังนั้นจึงเสนอแนวทางการประยุกต์ใช้เทคนิคการจัดกลุ่ม (clustering methods) แบบ Fuzzy C-Mean (FCM) ซึ่งผลการจัดกลุ่มจะให้ค่าระดับความเป็นสมาชิกข้อข้อมูล (degree of membership) ผลการทดลองที่ได้จากงานวิจัยนี้ได้แนวทางในการแนะนำสมุนไพรที่มีประสิทธิภาพเหมือนกันโดยเปรียบเทียบจากสารออกฤทธิ์ของพืชสมุนไพร เพื่อนำไปสู่การอธิบายสรรพคุณรักษาของยาสมุนไพรให้เป็นที่ยอมรับตามหลักฐานทางวิทยาศาสตร์ และเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการเลือกใช้

สมุนไพรทดแทนสมุนไพรที่ขาดแคลนที่มีสรรพคุณเหมือนกัน

2. งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

งานวิจัยที่มีความพยายามยืนยันองค์ความรู้เกี่ยวกับศาสตร์การแพทย์แผนโบราณมากมาย Gao และคณะ[5] ได้นำเสนอวิธี pattern recognition เพื่อจำแนกคุณสมบัติของยากสมุนไพรโดยใช้หลักเกณฑ์การแบ่งตามคุณสมบัติร้อนเย็นของสมุนไพร และวิเคราะห์ความสัมพันธ์ของสารออกฤทธิ์ในยาสมุนไพร และนำข้อมูลสารออกฤทธิ์ที่อยู่ในยาสมุนไพรจับคู่กับ target protein เป้าหมายของงานวิจัยเพื่ออธิบายคุณสมบัติของสมุนไพรจีนที่มีคุณสมบัติร้อนและเย็นว่ามีความสัมพันธ์ต่อ target protein อย่างไร ซึ่งสามารถแสดงลำดับขั้นตอน ข้อจำกัดของงานวิจัยคือจำนวนข้อมูลและความสมดุลของข้อมูลที่นำมาทดสอบ

Ding และคณะได้ใช้วิธีการวิเคราะห์เครือข่าย (network analysis) ของสารสำคัญของตำรับยาสมุนไพรจีนหลักที่ใช้สำหรับการรักษาโรคหลอดเลือดหัวใจ จำนวน 8 ตำรับ ประกอบด้วย ยาสมุนไพรจีนจำนวน 36 ชนิดและมีข้อมูลสารสำคัญในยาสมุนไพรจำนวนทั้งสิ้น 1,588 สาร [1] โดยจัดประเภทของสารเคมีตามโครงสร้างทางเคมี หลักเกณฑ์ในการจัดประเภทอ้างอิงจาก Natural Pharmaceutical Chemistry ออกเป็น 15 กลุ่ม ประกอบด้วย 1) alkaloids 2) amino acid 3) fatty acid 4) flavonoids and its glycosides 5) glycosides 6) phenylpropanoids and its dervate 7) protein and enzyme 8) quinones 9) saccharides and its dervate 10) steroids and its glycosides 11) stilbenoids 12) terpenoids and its dervaed 13) triterpenoids and it glycoside 14) volatile oils และ 15) Terpenoids and its glycosides จากการทดสอบได้นำเสนอด้วยแผนภาพเครือข่าย ที่แสดงจำนวนกลุ่มสารเคมีจำนวน 9 กลุ่มที่มีความหนาแน่นและรายชื่อสมุนไพรที่มีการใช้ในกลุ่มนั้น ซึ่งผลที่ได้จากการวิจัยนี้เป็นประโยชน์สำหรับการศึกษาด้านเภสัชวิทยาเพื่อการพัฒนายาใหม่ ซึ่งงานวิจัยดังกล่าวเป็นเพียงการทดลองกับชุดข้อมูลเฉพาะกลุ่มโรคและใช้จำนวนข้อมูลยาสมุนไพรน้อยเกินไป

Wijaya และคณะ[6] นำเสนอแนวทางการเลือกวิธีการวัดความเหมือนและความแตกต่างข้อมูลไบนารี โดยรวบรวมสมการที่ใช้สำหรับการคำนวณความเหมือนและความแตกต่างจำนวนทั้งสิ้น 79 สมการ โดยทดสอบเปรียบเทียบความเหมือนชุดข้อมูลตำรับยาสมุนไพรตามศาสตร์การแพทย์แผนอินโดนีเซีย และญี่ปุ่น ว่าตำรับยาแต่ละตำรับมีสมุนไพรที่ใช้เหมือนหรือแตกต่างกัน โดยได้แนะนำสมการ Forbes-2 similarity และ Variant of Correlation similarity ว่ามีความเหมาะสมกับชุดข้อมูลดังกล่าว

[7] Cao ได้ประยุกต์ใช้เทคนิคการจัดกลุ่มแบบลำดับชั้น เพื่อออกแบบวิธีการค้นหารูปแบบทั่วไป (common prescription pattern)ของการใช้ตำรับยาสมุนไพรจีน โดยการวิเคราะห์จากคู่ของสมุนไพรจีนโดยเปรียบเทียบสรรพคุณรักษา (Herb-Pair Efficacies: HPEs) จากงานวิจัยดังกล่าวทำให้เห็นรูปแบบการใช้ยาสมุนไพรสำหรับการรักษาโรคว่าสมุนไพรอะไรเป็นตัวหลักหรือพื้นฐานที่ต้องมีในตำรับยา นอกจากนี้ค้นพบสมุนไพรจีนจำนวน 33 ชนิด ที่ใช้สำหรับการกระตุ้นการไหลเวียนของเลือด ซึ่งเป็นการวิคราะห์ตามเอกสารตำรับการรักษาตามศาสตร์การแพทย์แผนโบราณเท่านั้นไม่ได้วิเคราะห์และยืนยันด้วยข้อมูลทางวิทยาศาสตร์

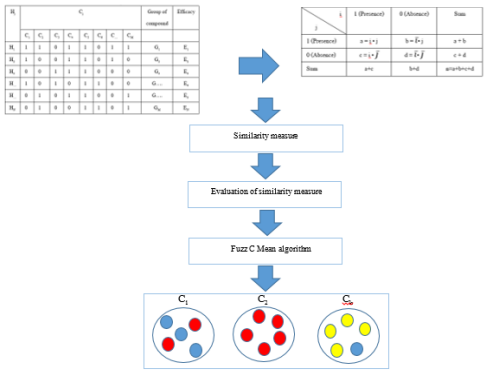
นอกจาการใช้การจัดกลุ่มแบบลำดับชั้นแล้วยังมีงานวิจัยที่ใช้วิธีการจัดกลุ่มแบบตัดเป็นส่วนตัวอย่างเช่นการวิเคราะห์หารูปแบบความเข้ากันได้ของ

การใช้ยาสมุนไพรจีนโดยใช้เทคนิคการจัดกลุ่ม k-mean และจำแนกตามธรรมชาติของสมุนไพร (herbs nature) ซึ่งธรรมชาติของสมุนไพร ประกอบด้วย รสของยาสมุนไพร 5 รส (เปรี้ยว ขม หวาน ร้อน และเค็ม) การเข้าไปรักษาอวัยวะในร่างกาย 12 ส่วน โดยแปรงค่าคุณสมบัติต่างๆ เป็นด้วยเลขด้วยหลักการ fuzzy membership function [8]

Zhong และคณะ[9] วิเคราะห์กฎความเข้ากันได้ของตำรับยาสมุนไพรจีนสำหรับการรักษาโรคหลอดเลือดหัวใจ ด้วยกฎความสัมพันธ์และการวิเคราะห์เครือข่าย

3. สรุป

งานวิจัยที่ได้อธิบายมาแล้วในข้างต้นเป็นการศึกษาเพื่อจำแนกลักษณะของการใช้ยาสมุนไพร กฎความสัมพันธ์การใช้ยาสมุรไพร รูปแบบทั่วไปของตำรับยาสมุนไพร โดยใช้เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลต่างๆ เช่น Network Analysis Cluster, Analysis Pattern recognition, associaiton rules แต่ยังมีงานวิจัยน้อยมากที่ให้ความสนใจการวิเคราะห์ลักษณะของสมุนไพรเดี่ยวโดยใช้เกณฑ์คุณสมบัติด้านสารเคมีของยาสมุนไพรสำหรับแนะนำยาสมุนไพรที่ขาดแคลน เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการเปรียบเทียบสรรพคุณด้านสารสำคัญของยาสมุนไพรจึงเสนอแนวกรอบแนวคิดในการใช้เทคนิคการจัดกลุ่มข้อมูล Fuzzy c-mean เพื่อจัดกลุ่มข้อมูลยาสมุนไพรตามสารสำคัญ โดยใช้ข้อมูลจากการรวบรวมโดย Kim และคณะ[4] ซึ่งเป็นข้อมูลพืชสมุนไพรที่ใช้ในการรักษาตามศาสตร์การแพทย์แผนโบราณในเขตพื้นที่เอเชียตะวันออกเฉียงเหนือ ซึ่งได้จากการวิเคราะห์เอกสารบทความวิจัยในฐานข้อมูลด้านการแพทย์ MEDLINE และ PMC ประมาณ 4,000 รายการ ประกอบด้วยข้อมูลสารสำคัญจำนวน21,406 รายการจากพืชสมุนไพรจำนวน 554 ชนิด ทำการเลือกใช้เขตข้อมูล ชื่อสมุนไพร และชื่อสารเคมี เพื่อนำข้อมูลที่ได้แบ่งกลุ่มไว้แล้วสำหรับระบบแนะนำการใช้ยาสมุนไพรทดแทนสมุนไพรที่ขาดแคลน



การจัดกลุ่มยาสมุนไพรจากสารประกอบพฤษเคมีที่คล้ายคลึงกัน

เอกสารอ้างอิง

[1] F. Ding *et al.*, "An analysis of chemical ingredients network of Chinese herbal formulae for the treatment of coronary heart disease," *PloS one,* vol. 10, no. 2, p. e0116441, 2015.

[2] T. M. Ehrman, D. J. Barlow, and P. J. Hylands, "Phytochemical informatics of traditional Chinese medicine and therapeutic relevance," (in English), *Journal of Chemical Information and Modeling,* Article vol. 47, no. 6, pp. 2316-2334, Nov-Dec 2007.

[3] Z. Fang, M. X. Zhang, Z. H. Yi, C. P. Wen, M. Qian, and T. L. Shi, "Replacements of Rare Herbs and Simplifications of Traditional Chinese Medicine Formulae Based on Attribute Similarities and Pathway Enrichment Analysis," (in English), *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine,* Article p. 9, 2013, Art. no. 136732.

[4] S. K. Kim, S. Nam, H. Jang, A. Kim, and J. J. Lee, "TM-MC: a database of medicinal materials and chemical compounds in Northeast Asian traditional medicine," (in English), *Bmc Complementary and Alternative Medicine,* Article vol. 15, p. 8, Jul 2015, Art. no. 218.

[5] H. Gao, J. Cui, and Y. Gao, "Identifying the cold and hot properties of medicinal herbs based on the associated target proteins by pattern recognition technology " presented at the 2012 6th International Conference on New Trends in Information Science, Service Science and Data Mining (ISSDM2012), Taipei, Taiwan, 2012. Available: http://ieeexplore.ieee.org/document/6528732/

[6] S. H. Wijaya, F. M. Afendi, I. Batubara, L. K. Darusman, M. Altaf-Ul-Amin, and S. Kanaya, "Finding an appropriate equation to measure similarity between binary vectors: case studies on Indonesian and Japanese herbal medicines," (in English), *Bmc Bioinformatics,* Article vol. 17, p. 19, Dec 2016, Art. no. 520.

[7] J. Cao, "The common prescription patterns based on the hierarchical clustering of herb-pairs efficacies," *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine,* vol. 2016, 2016.

[8] J. Gong, J. Dong, J. Tang, L. Zhang, and M. Liang, "A method to discover compatibility regulation of Chinese herbs based on the combination of clustering analysis and herbs nature," in *Intelligent Computing and Intelligent Systems (ICIS), 2010 IEEE International Conference on*, 2010, vol. 3, pp. 228-232: IEEE.

[9] X. Zhong, Q. He, J. Liao, X. Yin, G. Zhao, and M. Li, "The compatibility law of chinese patent medicines for the treatment of coronary heart disease angina pectoris based on association rules and complex network," *Int. J. Clin. Exp. Med,* vol. 9, no. 6, pp. 9418-9424, 2016.