



## Analysis of a Compound-Target Network of Oryeong-san

Sang-Kyun Kim\*

*Future Medicine Division, Korea Institute of Oriental Medicine*

### ABSTRACT

Oryeong-san is a prescription widely used for diseases where water is stagnant because it has the effect of circulating the water in the body and releasing it into the urine. In order to investigate the mechanisms of oryeong-san, we in this paper construct and analysis the compound-target network of medicinal materials constituting oryeong-san based on a systems pharmacology approach. First, the targets related to the 475 chemical compounds of oryeong-san were searched in the STITCH database, and the search results for the interactions between compounds and targets were downloaded as XML files. The compound-target network of oryeong-san is visualized and explored using Gephi 0.8.2, which is an open-source software for graphs and networks. In the network, nodes are compounds and targets, and edges are interactions between the nodes. The edge is weighted according to the reliability of the interaction. In order to analysis the compound-target network, it is clustered using MCL algorithm, which is able to cluster the weighted network. A total of 130 clusters were created, and the number of nodes in the cluster with the largest number of nodes was 32. In the clustered network, it was revealed that the active compounds of medicinal materials were associated with the targets for regulating the blood pressure in the kidney. In the future, we will clarify the mechanisms of oryeong-san by linking the information on disease databases and the network of this research.

© 2018 KKITS All rights reserved

**KEY WORDS :** Oryeong-san, Compound-Target network, Clustering, TM-MC, MCL algorithm, Korean medicine

**ARTICLE INFO :** Received 11 September 2018, Revised 28 September 2018, Accepted 12 October 2018.

\*Corresponding author is with the Future Medicine Division, Korea Institute of Oriental Medicine, 1672 Yuseong-daero, Yuseong-gu, Daejeon, 34054, Republic of

Korea.

*E-mail address:* [skkim@kiom.re.kr](mailto:skkim@kiom.re.kr)

## 1. 서론

한의학은 고대부터 발전해 온 우리나라 전통 의학으로서, 침과 뜸을 비롯한 여러 치료법들뿐만 아니라 여러 약재들로 구성된 다양한 처방 지식들이 구축되어 왔다. 오령산(五苓散)은 택사(澤瀉), 백출(白朮), 복령(茯苓), 저령(豬苓), 육계(肉桂)의 5개 약재로 구성되는 처방으로 몸속의 수분을 순환시키고 소변으로 배출이 잘 되게 하는 효능이 있어 수분이 정체되어 나타나는 질환에 많이 쓰인다[1]. 오령산의 효능에 대해서는 여러 실험 논문들이 발표되어 왔지만[2,3], 아직 오령산의 약리학적 작용 기전에 대해서는 명확하게 밝혀지지 않고 있다.

신약을 개발하기 위해서는 후보 약물의 효능을 실험적으로 탐색하고 여러 단계의 임상 시험을 거쳐야 한다. 하지만 이 과정은 매우 오래 걸릴 뿐만 아니라 엄청난 비용이 필요하다. 최근 IT 기술이 발전함에 따라 이러한 신약 개발을 보다 효율적으로 진행하기 위해서 인실리코(In silico) 방법들이 이용되고 있다[4]. 특히, 일반적으로 약물은 하나의 성분이지만 한의학의 경우 하나의 처방이 여러 개의 약재를 가지고 약재는 수백 개의 성분들을 가지기 때문에 이러한 방대한 정보를 시스템적으로 분석할 필요가 있다. 최근 인터넷이 발전함에 따라 약재의 구성성분, 성분의 타겟, 타겟과 연관된 질병들에 대한 정보들을 체계적으로 구축한 데이터베이스들이 공개되어 있다. 또한 이러한 정보들을 네트워크로 연결하고 분석해서 처방의 작용 기전을 밝히는 시스템 약리학 연구가 증가하고 있다 [5,6]. 따라서, 본 연구에서는 오령산을 구성하는 약재의 성분들과 성분들의 타겟 네트워크를 구축하고 구축된 네트워크를 분석하고자 한다. 이를 통해 향후에 질병 정보와 연계해서 오령산의 작용 기전을 시스템적으로 밝히기 위한 자료로 사용할 계획이다.

본 연구의 구성은 다음과 같다. 2장에서는 기존에 존재하는 구성 성분과 타겟 데이터베이스를 조사하고 본 연구에서 사용하는 분석 방법에 대해서 기술한다. 3장에서는 오령산의 성분-타겟 네트워크 구축 결과와 분석 내용을 기술하고 4장에서는 분석 결과에 대한 고찰과 결론을 논한다.

## 2. 기존 연구 및 분석 방법

### 2.1 약재 구성성분 데이터베이스

약재의 구성성분 데이터베이스는 TCMS (The traditional Chinese medicine systems pharmacology database and analysis platform)[7], TCMID (The traditional Chinese medicines integrated database)[8], TCM@Taiwan[9] 등과 같이 주로 중국 및 대만에서 구축되어 왔다. 하지만 이 온라인 데이터베이스들이 가진 정보는 중의학 사전[10]으로부터 구축된 것인데, 개별 성분의 출처가 없을 뿐만 아니라, 최신 연구 결과로 밝혀진 성분을 포함하지 못하는 문제가 있다. 최근, 이러한 문제를 해결하기 위해서 PubMed 논문들에서 약재의 성분 정보를 추출한 TM-MC (A database of medicinal materials and chemical compounds in Northeast Asian traditional medicine)[11]가 구축되었다.

본 연구에서는 성분의 출처와 최신 연구 결과를 제공하는 TM-MC 데이터베이스를 이용하였다. TM-MC 데이터베이스에는 택사 126개, 백출 174개, 복령 84개, 저령 18개, 육계 142개의 총 544개의 오령산 구성약재가 존재하며, 기존 연구에서 각각의 성분에 대해서 SMILES (Simplified molecular input line entry system) 문자열[12]과 물리적 프로퍼티 값들이 이미 계산되었다[13]. 본 연구에서는 기존 연구에서 구축한 SMILES 문자열을 타겟 검색시에 이용하였다.

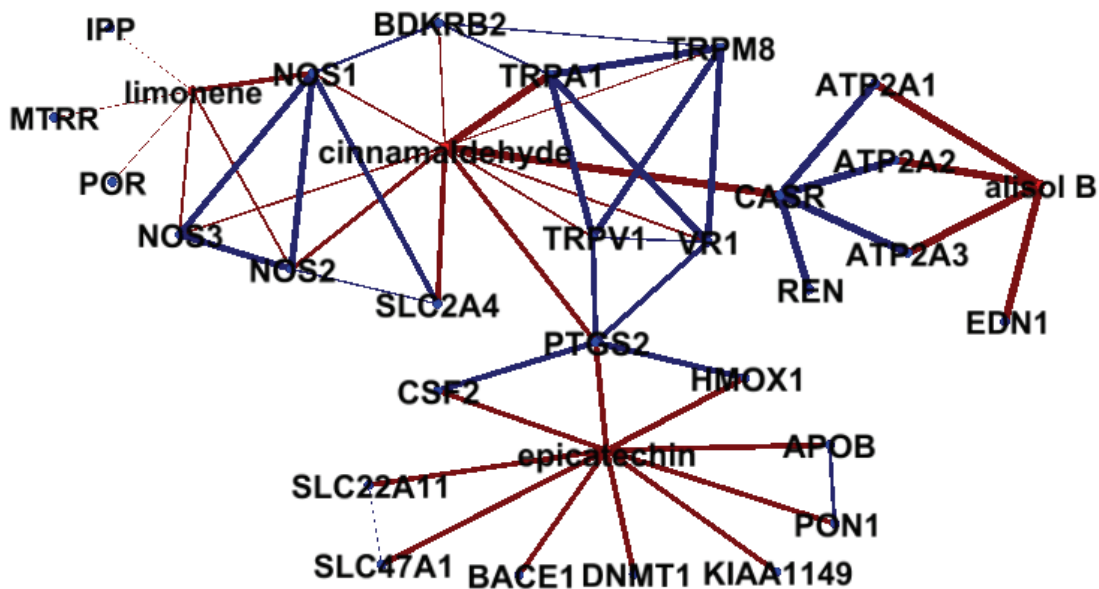


그림 1. 성분-타겟 네트워크 클러스터 예제  
 Figure 1. An example of a cluster in the compound-target network

## 2.2 성분-타겟 네트워크

성분의 타겟 정보는 일반적으로 구성성분 데이터베이스에서 같이 제공된다. 하지만 TM-MC는 아직 타겟 정보를 제공하고 있지 않으며, TCMSP와 TCMID 등은 TM-MC에 있는 성분을 포함하고 있지 않는 문제가 있다. 따라서 본 연구에서는 성분과 타겟들간의 상호작용 데이터베이스인 STITCH를 이용하였다[14]. STITCH는 약 2천개의 생물로부터 약 4십 만개의 성분과 약 9백만 개의 타겟 데이터를 가지고 있다. 또한, 이미 알려진 상호작용뿐만 아니라 상호작용의 예측 값을 제공해서 보다 확장된 분석이 가능하게 하고 있다. STITCH에서 성분의 타겟 정보를 검색하기 위해서는 성분의 SMILES 문자열을 입력한 후 검색하면 매칭되는 성분의 타겟 리스트 정보를 XML 형태로 다운받을 수 있다.

XML 파일에는 성분과 타겟에 대한 이름과 설명 그리고 상호작용 링크 및 링크에 대한 0~1 사이의 신뢰점수 등이 포함되어 있다. 또한, 본 연구에서는 최신 연구결과들을 반영하기 위해서 오령산 유효성분들의 작용 타겟들에 대해서 PubMed에서 논문을 검색해서 추가하였다.

## 2.3 네트워크 시각화 및 분석

성분-타겟 네트워크를 시각화하고 탐색하기 위해서 본 연구에서는 그래프와 네트워크를 위한 오픈소스 소프트웨어인 Gephi 0.8.2[15]를 이용하였다. 이 네트워크에서 노드는 성분 및 타겟 이름이고, 링크는 이들 간의 상호작용이 존재하면 연결된다. 특히, 링크는 신뢰점수의 가중치 값을 가지도록 하였다. 본 연구에서는 이렇게 구축된 네트워크에서

가중치를 기반으로 네트워크를 클러스터링 하였으며, 각각의 클러스터에서 성분과 타겟의 관계를 분석하였다. 가중치를 가지는 네트워크를 클러스터링하기 위해서 MCL(Markov cluster)[16] 알고리즘을 이용하였으며, 이 MCL 알고리즘은 Gephi의 플러그인으로 구현되어 있다.

### 3. 연구 결과

#### 3.1 성분-타겟 네트워크 클러스터

오령산 약재의 구성성분 544개 중에서 SMILES 문자열이 중복되는 성분을 제외하면 성분의 개수는 475개이다[12]. STITCH 검색 페이지에서 개별 성분들의 SMILES 문자열을 입력하고 검색해서 성분과 타겟 상호작용 결과에 대한 XML 파일을 다운로드하였다. XML 문서를 파싱한 결과 본 연구에서는 총 117개의 성분과 456개의 타겟들간의 상호작용 리스트를 얻었다.

Gephi에서 이 리스트를 로딩한 후 성분-타겟 네트워크를 구축하였으며, MCL 알고리즘을 이용해서 네트워크를 클러스터링 하였다. 클러스터의 개수는 총 130개가 나왔다. 이 중 120개의 클러스터들은 노드의 개수가 11개 이하였으며, 대부분 다른 클러스터들과의 링크가 없이 단독으로 존재하였다. 12개 이상의 노드를 가지는 클러스터는 10개 밖에 존재하지 않았으며, 가장 많은 노드를 가지는 클러스터는 32개의 노드를 가지고 있었다.

#### 3.2 네트워크 클러스터 분석

<그림 1>은 가장 많은 32개의 노드를 가지고 있는 클러스터이며, <표 1>은 이 클러스터에 있는 노드들의 리스트로써, 4개의 성분과 28개의 타겟 노

드들로 구성되어 있다. <그림 1>에서 노드들 간의 가중치가 높을수록 링크가 굵게 표현되어 있다.

표 1. 그림 1의 클러스터 노드 리스트  
Table 1. List of nodes in the cluster of Figure 1

	노드명
성분	aliso B (택사), cinnamaldehyde (육계), epicatechin (육계), limonene (백출,육계)
타겟	ATP2A1, ATP2A2, ATP2A3, APOB, BACE1, BDKRB2, CASR, CSF2, DNMT1, EDN1, HMOX1, IPP, KIAA1149, MTRR, NOS1, NOS2, NOS3, POR, PON1, PTGS2, REN, SLC22A11, SLC2A4, SLC47A1, TRPA1, TRPM8, TRPV1, VR1

본 연구에서는 네트워크의 수많은 노드와 링크를 효율적으로 분석하기 위해서 링크의 가중치값을 이용하였다.

표 2. 성분의 타겟과 가중치값 리스트  
Table 2. List of targets and their weights of compounds

성분명	타겟명(가중치값)
aliso B	ATP2A1(0.9), ATP2A2(0.9), ATP2A3(0.9), EDN1(0.9)
cinnamaldehyde	BDKRB2(0.547), CASR(0.9), NOS1(0.596), NOS2(0.733), NOS3(0.596), PTGS2(0.8), SLC2A4(0.8), TRPA1(0.971), TRPV1(0.61), VR1(0.62)
epicatechin	APOB(0.822), BACE1(0.8), CSF2(0.8), DNMT1(0.837), HMOX1(0.855), KIAA1149(0.8),PON1(0.814),PTGS2(0.833), SLC22A11(0.8), SLC47A1(0.824)
limonene	IPP(0.439), MTRR(0.473), NOS1(0.786), NOS2(0.613), NOS3(0.613), POR(0.473)

<표 2>는 각 성분과 연결된 타겟들과의 연결 가중치값을 보인 것이다. STITCH에서는 Curated 데이터베이스, PubMed 초록의 co-occurrence, 실험 데이터, 예측치 점수 등을 모아서 최종 가중치 값을 계산해 제공하고 있으며, 이 값은 성분과 타겟들간에 얼마나 연관성이 있는지 객관적으로 보일 수 있는 지표로 활용될 수 있다. 즉, 가중치 값이 높으면 높을수록 많은 문헌 및 데이터베이스에서 서로 관련이 있다고 얘기된 것들이다. 특히, Curated 데이터베이스에 연결 정보가 있는 경우 0.9의 가중치 값이 부여된다. 따라서, 본 연구에서는 가중치 값이 0.9 이상인 링크를 중심으로 네트워크를 분석하였다.

일반적으로 신장에서는 RAAS(Renin angiotensin aldosterone system)[17,18]를 통해서 소변의 배출을 조절한다. 특히, 몸 속의 물이 많으면 혈압이 높아지기 때문에 신장에서는 혈압을 낮추기 위해서 소변을 통해 물을 배출 시키는 것으로 알려져 있다. <표 1>의 성분과 단백질들은 신장에서의 소변 배출과 이로 인한 혈압 조절과 관련된 단백질들을 포함하고 있다.

텍사의 유효성분 중의 하나인 alisol B는 SERCA(Sarco/endoplasmic reticulum  $Ca^{2+}$ -ATPase) 인 ATP2A1, ATP2A2, ATP2A3들과 EDN1(Endothelin-1) 단백질과 0.9의 가중치 값을 가지고 연관되어 있다. Alisol B는 SERCA를 억제하는데, 이를 통해 세포 내  $Ca^{2+}$  양이 증가해서 CASR(Calcium-sensing receptor)가 REN(Renin)의 발현을 억제하는 것으로 알려져 있다. RAAS에서 REN이 억제되면 신장에서 물이 재흡수 되지 않기 때문에 소변 양이 많아져 혈압이 낮아지게 된다. 또한 alisol B는 혈관을 수축시키는 EDN1을 억제해서 혈압을 내리는 역할을 한다.

Cinnamaldehyde는 육계의 유효성분 중의 하나이다. 이 성분은 alisol B와 마찬가지로 세포 내  $Ca^{2+}$

양에 따라서 REN을 억제하는 CASR과도 0.9의 가중치 값을 가지고 연결되어 있으며, 혈압과 조절하는 BDKRB2 (Bradykinin receptor B<sub>2</sub>) 단백질과도 연관이 있었다. 또한, 감각을 전달하는 이온 채널로 알려진 TRPV(Transient receptor potential channel)의 종류인 TRPA1, TRPM8, TRPV1, VR1등과도 연관되어 있는데, 특히 TRPA1과 0.971의 가중치 값을 가지고 연결되어 있었다.

백출과 육계의 성분 중 하나인 limonene는 산화 질소를 생성하는 NOS(Nitric oxide synthase) 등의 타겟들과 연결이 되어 있으나 대부분 연결 가중치가 높지 않았다. 육계의 또 다른 유효성분 중의 하나인 epicatechin은 염증과 관련된 PTGS2(Prostaglandin-endoperoxide synthase 2), heme catabolism 단백질인 HMOX1 (Heme oxygenase 1), 백혈구의 성장인자인 CSF2 (Colony stimulating factor 2) 등의 다양한 단백질과도 연관이 되어 있었으나, 모두 0.8~0.9 사이의 가중치의 연결을 가지고 있었다.

대한민국 약전[19]과 중국 약전[20]에는 텍사의 유효성분은 alisol B 23-acetate, 육계의 유효성분은 cinnamaldehyde와 cinnamic acid, 저령의 유효성분은 ergosterol로 명시되어 있다. <그림 1>은 이 중에서 cinnamaldehyde와 alisol B 23-acetate의 deacetylation된 성분인 alisol B에 대한 타겟 네트워크를 알 수 있으며, 이 네트워크를 통해 이 유효성분들과 관련된 REN, ATP2A1, ATP2A2, ATP2A3, CASR, EDN1, BDKRB2의 단백질들이 신장의 소변 배출 및 혈압 조절의 기능을 하고 있음을 알 수 있었다. 특히, REN, ATP2A1, ATP2A2, ATP2A3, CASR은 신장의 RAAS와 연관이 있는 단백질들로서 신장의 기능에 많은 영향을 주는 타겟들이다.

#### 4. 고찰 및 결론

오령산은 몸 속의 정체된 물을 배출하게 하는 효과를 가지는 처방으로, 최근 신장기능 개선, 고혈압 억제 등 다양한 질병에 효능이 있는 것으로 알려져 있다[2]. 본 연구에서는 네트워크 약리학 접근 방법을 이용해서 오령산의 효능을 탐색해 보기 위한 연구로써, 오령산 구성약재의 성분들에 대해서 성분의 타겟 단백질 네트워크를 구축하고 성분과 타겟의 관계를 살펴보았다. 특히, 네트워크 클러스터링을 통해 연관성 있는 서브 네트워크들을 구분해서 분석하였으며, 네트워크 링크에 신뢰도가중치를 부여해서 중요한 연결들을 중심으로 성분과 타겟간에 어떤 상관성이 있는지 살펴보았다.

오령산의 성분-타겟 네트워크는 수백 개의 타겟을 포함하고 있지만 타겟 노드들간의 연결이 적어서 비교적 많은 개수의 클러스터가 만들어졌다. 따라서 네트워크 클러스터 별로 어떤 연구 주제나 효능 군집을 분석하기에는 한계가 있었다. 본 논문에서는 지면의 한계상 성분-타겟 네트워크의 전체 그림을 제시하지는 못했다. 대신, 네트워크 분석 결과의 한 예제로써 가장 많은 노드를 가지는 클러스터에 대해서 성분과 타겟들을 리스트하였으며, 각 성분과 타겟 노드들간에 가중치가 높은 링크들을 중심으로 어떤 연관성이 있는지 분석하였다. 특히, 이 클러스터는 오령산 구성약재의 유효 성분들과 신장의 배뇨 기능 및 혈압 조절을 담당하는 단백질들과의 연관성을 포함하고 있었다. 따라서 오령산이 신장의 수분 배출과 이로 인한 혈압 조절 기능에 효능이 있음을 예측할 수 있었다.

일반적으로 기존의 약물 연구들에서는 특정 약재나 성분이 타겟 단백질에 효능이 있는지를 실험을 통해 밝혀왔지만, 본 연구에서는 시스템 약리학적 방법을 이용해서 성분과 타겟들간의 지식 네트워크를 구축하고 분석함으로써 어떤 성분이 어

떤 타겟에 작용하는지에 대한 작용 기전을 탐색해 볼 수 있었다.

하지만, 본 연구에서 구축한 성분-타겟 네트워크에서는 특정 성분과 단백질들의 효능을 보고 고혈압과 같은 특정 질환과의 연관될 수 있는 가능성을 제시하였으나 고혈압과 직접적인 연관이 있는지를 명확히 밝히기 위한 구체적인 데이터를 제시하는 데는 한계가 있었다. 향후에는 이러한 한계를 극복하기 위해서 질병 데이터베이스들과의 연결을 통해 고혈압이나 신장 질환 같은 질병과의 연관성을 추가적으로 분석할 예정이다. 본 연구에서는 타겟 단백질의 일반적인 특징을 보고 효능을 예측했지만, 타겟과 질병간의 연결 정보가 추가되면 보다 명확한 연관성을 찾을 수 있을 것이다. 또한, pathway 분석을 통해 오령산의 성분이 어떤 타겟 단백질을 통해 어떤 작용기전을 가지고 질병에 효능을 보이는지에 대한 검증도 수행할 예정이다.

#### References

- [1] Joint Text Compilation Committee for Formula Study, *Bangjehak*, Younglimsa, Seoul, 2003.
- [2] J. H. Kim, and H. K. Shin, *Analysis of biological experiment on Oryeong-san*, The Journal of Korean Oriental Internal Medicine, Vol. 33, No. 1, pp. 69-82, 2012.
- [3] Y. J. Lee, S. M. Lee, X. Cui, J. J. Yoon, H. C. Oh, Y. C. Kim, M. C. Park, D. G. Kang, and H. S. Lee, *Quantitative evaluation of Oryeongsan and its action on water regulation in renal inner medullary collecting duct cells*. Journal of Ethnopharmacology, Vol. 185, pp. 310-318, 2016.
- [4] G. R. Bickerton, G. V. Paolini, J. Besnard,

- S. Muresan, and A. L. Hopkins, *Quantifying the chemical beauty of drugs*, Nature Chemistry, Vol. 4, No. 2, pp. 90-98, 2012.
- [5] S. Zhao, and R. Iyengar, *Systems pharmacology: network analysis to identify multiscale mechanisms of drug action*, Annual Review of Pharmacology and Toxicology. Vol. 52, pp. 505-521, 2012.
- [6] Y. Yao, X. Zhang, Z. Wang, C. Zheng, P. Li, C. Huang, W. Tao, W. Xiao, Y. Wang, L. Huang, and L. Yang, *Deciphering the combination principles of Traditional Chinese Medicine from a systems pharmacology perspective based on Ma-huang Decoction*, Journal of Ethnopharmacology. Vol. 150, No. 2, pp. 619-638, 2013.
- [7] J. Ru, P. Li, J. Wang, W. Zhou, B. Li, C. Huang, P. Li, Z. Guo, W. Tao, Y. Yang, X. Xu, Y. Li, Y. Wang, and L. Yang, *TCMSP: a database of systems pharmacology for drug discovery from herbal medicines*, Journal of Cheminformatics, Vol. 6, No. 13, 2014.
- [8] R. Xue, Z. Fang, M. Zhang, Z. Yi, C. Wen, T. Shi, *TCMID: Traditional Chinese Medicine integrative database for herb molecular mechanism analysis*, Nucleic Acids Research, Vol. 41, pp. D1089-1095, 2013.
- [9] C. Y. Chen, *TCM Database@Taiwan: the world's largest traditional Chinese medicine database for drug screening in silico*, PLoS One, Vol. 6, No. 1, pp. e15939, 2011.
- [10] J. Zhou, G. Xie, and X. Yan, *Encyclopedia of traditional Chinese medicines molecular structures, pharmacological activities, natural sources and applications*, Springer-Verlag, New York, 2011.
- [11] 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*, BMC Complementary and Alternative Medicine, Vol. 218, 2015.
- [12] SMILES, [https://en.wikipedia.org/wiki/Simplified\\_molecular-input\\_line-entry\\_system](https://en.wikipedia.org/wiki/Simplified_molecular-input_line-entry_system), Aug. 2018.
- [13] S. K. Kim, and S. Lee, *Drug-likeness and Oral bioavailability for Chemical Compounds of Medicinal Materials Constituting Oryeong-san*, The Korea Journal of Herbology, Vol. 33, No. 5, pp. 19-37, 2018.
- [14] D. Szklarczyk, A. Santos, C.v. Mering, L.J. Jensen, P. Bork, and M. Kuhn, *STITCH 5: augmenting protein-chemical interaction networks with tissue and affinity data*, Nucleic Acids Research, Vol. 44, pp. D380-384, 2016.
- [15] M. Bastian, S. Heymann, and M. Jacomy, *Gephi: An open source software for exploring and manipulating networks*, Third International AAAI Conference on Weblogs and Social Media, pp. 361-362, 2009.
- [16] S.v. Dongen, and C. Abreu-Goodger, *Using MCL to extract clusters from networks*, In Bacterial Molecular Networks: Methods and Protocols, Vol. 804, pp. 281-295, 2012.
- [17] Renin-angiotensin system, [https://en.wikipedia.org/wiki/Renin-angiotensin\\_system](https://en.wikipedia.org/wiki/Renin-angiotensin_system), Aug. 2018.
- [18] A. Vaidya, J. M. Brown, and J. S. Williams, *The renin-angiotensin-aldosterone system and calcium-regulatory hormones*, Journal of Human Hypertension, Vol. 29, pp. 515-521, 2015.

- [19] Ministry of Food and Drug Safety. *The Korean Pharmacopoeia 11th edition*, 2017.
- [20] Chinese Pharmacopoeia Commission. *Pharmacopoeia of the people's Republic of China*, China Medical Science Press, 2015.

사업 “한의 PHR 활용기술 개발(K18093)”의 지원을 받아 수행되었습니다.

---

## 오령산 구성성분-타겟 네트워크 분석

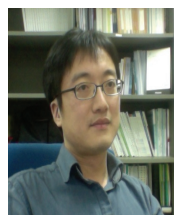
김상균

미래의학부, 한국한의학연구원

---

### 요 약

오령산은 몸 속의 수분을 순환시키고 소변으로 배출이 잘 되게 하는 효능이 있어 수분이 정체되어 나타나는 질환에 많이 쓰이는 처방이다. 본 연구에서는 시스템 약리학 접근 방법을 이용해서 오령산의 작용기전을 탐색하기 위해서 오령산의 구성약재의 성분-타겟 네트워크를 구축하고 분석하였다. 우선, 오령산의 475개 성분에 대해서 STITCH 데이터베이스에서 연관된 타겟을 검색하였으며, 성분과 타겟의 상호작용에 대한 검색 결과는 XML 파일로 다운로드하였다. 본 연구에서 성분-타겟 네트워크는 Gephi를 이용해서 시각화하고 탐색하였다. 노드는 성분과 타겟이 되고, 링크는 성분과 타겟들간에 상호작용이 존재하면 연결되며, 상호작용의 신뢰도에 따라 링크에 가중치를 부여하였다. MCL 알고리즘을 이용해서 네트워크를 클러스터링 하였으며, 총 130개의 클러스터가 생성되었다. 가장 많은 노드를 가지는 클러스터에서 노드의 개수는 32개였다. 성분-타겟 네트워크에서 약재의 유효 성분들이 신장의 혈압 조절 기능과 관련된 타겟들과 연결되어 있는 것을 발견할 수 있었다. 향후에는 질병 데이터베이스와 연계해서 보다 명확한 오령산의 작용기전을 밝힐 수 있도록 할 계획이다.



**Sang Kyun Kim** He received his M.S. degree and his Ph.D. degree from Department of Computer Engineering at Chungnam National University in 2001 and 2008, respectively. After graduation, he has been researched on Korean medicine informatics in Korea Institute of Oriental Medicine.

E-mail address: skkim@kiom.re.kr

---

## 감사의 글

이 논문은 한국연구재단의 신진연구자지원사업 (2015R1C1A1A01052309)과 한국한의학연구원 주요