本文节译自：

**Zhang WJ. 2017. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines: (III) Canonical correlation functions between attribute classes and linear eignmodels of Chinese herbal medicines. Network Pharmacology, 2(3): 67-81**

# 中草药属性与功效网络药理学: (III) 中草药属性类间典范相关函数及线性特征模型

Zhang WJ
E-mail：zhwj@mail.sysu.edu.cn，wjzhang@iaees.org

**摘要**

在前期工作基础上，本研究采用了中草药交互式编码数据库 CHM-DATAVersion 1.0。该数据库记录有化学成份相关记载的 1127 种中草药。对味属性类(7 个味属性)，药性属性类(5 个药性属性)，化学成份属性类(22 个化学成份类别属性)，归经属性类(12 个归经)，功效属性类(77 种功效属性)，以典范相关分析确定了属性类间的典范相关函数，并结合回归方法，建立了中草药线性特征模型。在统计意义上，任一种中草药各属性值满足相应的线性特征模型。 给出了典范相关分析和线性特征模型的 Matlab 代码。最后，构造出中草药属性类典范相关网络。

**关键词** 中草药，功效，属性，典范相关，特征模型。

## 1 引言

传统药理学基于单药物-单靶标-单疾病观点的药物设计思想(Hopkins，2007，2008；Budovsky and Fraifeld，2012)，在近 20 多年来，在药物研发设计中出现了种种弊端(Zhang，2016，2017a-b)。中医药理论以生物网络调节为基本思想，为解决疾病防治和药物研发问题提供了新思路和新途径。然而，中医药理论已历经数千年，发展极其缓慢。目前，对中草药的整体性基础研究，仍然十分匮乏，从而严重阻碍了中医药理论的发展和应用。基于此，Zhang (2017a)对 1127 种中草药属性进行了较详尽的统计分析，计算和分析了总数、频率、百分数等统计量。对 1127 种中草药，按科别对属性进行了分析。得到了中草药药性和功效的各种属性统计量。此后，根据属性间的点相关，构造出属性与功效关系网络，化学成份-归经关系网络，归经-功效关系网络，以及归经关系网络，并给出了一些网络特性。结果表明，前三者均为无尺度复杂网络，节点度均符合幂律分布。给出了较为详尽的属性与功效关系，以及药理机制(Zhang，2017b)。

本研究将在前期工作基础上，确定中草药属性类间的关系，以及属性标准模型，为今后的深入研究和应用提供基础。

## 2 材料与方法

### 2.1 分析方法

#### 2.1.1 典范相关分析

在本研究中，典范相关分析用于分析两个属性类间(或属性类与功效类之间)的关系(张尧庭，方开泰，1982；Qi and Xu，2009)。设属性类 $x$ 有 $m$ 个属性 $x_1$，$x_2$，…，$x_m$，$x$=($x_1$，$x_2$，…，$x_m$)；属性类 $y$ 有 $p$ 个属性 $y_1$，$y_2$，…，$y_p$，$y$=($y_1$，$y_2$，…，$y_p$)；$m \le p$。要通过确定 $ux^{\mathrm{T}}$ 与 $vy^{\mathrm{T}}$ 的关系，来分析 $x$ 与 $y$ 的关系，其中 $u$=($u_1$，$u_2$，…，$u_m$)，$v$=($v_1$，$v_2$，…，$v_p$)。

随 $u$，$v$ 的不同，$ux^T$ 与 $vy^T$ 的关系程度也不同，需要确定 $u$，$v$，使得 $ux^T$ 与 $vy^T$ 的线性相关关系最强。首先，设共有 $n$ 个中草药，原始数据如下

$$x=(x_{ij})，\ j=1，2，...，m$$
$$y=(y_{ij})，\ j=1，2，...，p$$
$$i=1，2，...，n$$

在本研究中，$x_{ij}$与$y_{ij}$取值0或1。取$x_{ij}= x_{ij} - x_{bar\,j}$，$y_{ij}= y_{ij} - y_{bar\,j}$，其中

$$x_{bar\,j}=\sum_{i=1}^{n} x_{ij}/n，\quad j=1，2，...，m$$
$$y_{bar\,j}=\sum_{i=1}^{n} y_{ij}/n，\quad j=1，2，...，p$$

计算

$$e_{ij}=\sum_{k=1}^{n} x_{ik}\,x_{kj}/n，\ i，j=1，2，...，m$$
$$f_{ij}=\sum_{k=1}^{n} y_{ik}\,y_{kj}/n，\ i，j=1，2，...，p$$
$$g_{ij}=\sum_{k=1}^{n} x_{ki}\,y_{kj}/n，\ i=1，2，...，m；\ j=1，2，...，p$$
$$h_{ij}=\sum_{k=1}^{n} y_{ki}\,x_{kj}/n，\ i=1，2，...，p；\ j=1，2，...，m$$

令$E=(e_{ij})$，$F=(f_{ij})$，$G=(g_{ij})$，$H=(h_{ij})$。由下列方程确定特征值$l_1^2$，$l_2^2$，…，$l_m^2$，及对应的特征向量对$u_1$，$v_1$；$u_2$，$v_2$；…；$u_m$，$v_m$，

$$(E^{-1}*G*F^{-1}*H-l^2*I)u=0$$
$$(F^{-1}*H*E^{-1}*G-l^2*I)v=0$$

其中，$I$为单位矩阵。从而，典范相关系数为$l_1$，$l_2$，…，$l_m$；典范属性类对，或相关性函数对为

$$u_i=\sum_{k=1}^{m} u_{ik}\,x_k$$
$$v_i=\sum_{k=1}^{p} v_{ik}\,y_k$$
$$i=1，2，...，m$$

2.1.2 线性特征模型

对以上得到的($u_i$，$v_i$)，$i$=1，2，...，$m$，分别以 $u_i$(或 $v_i$)为自变量，$v_i$(或 $u_i$)为因变量，建立线性回归模型，并选用统计检验显著的模型，例如，

$$u_i=a+b\,v_i$$

从而，就得到中草药线性特征模型

$$\sum_{k=1}^{m} u_{ik}\,x_k= a+b\sum_{k=1}^{p} v_{ik}\,y_k$$

在统计意义上，任一种中草药，各属性值(0 或 1)满足相应的线性特征模型。

以下是典范相关分析及线性特征模型的 Matlab 程序 CanonicalCorreAnaly.m

```
% Zhang WJ. 2017. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines:
```

```
% (III) Canonical correlation functions between attribute classes and linear eignmodels of Chinese herbal medicines.
% Network Pharmacology, 2(3)
m=input('Input the number of variables x: ');
p=input('Input the number of variables y: ');
if (m>p) disp('Variables x should be less than variables y'); pause; end
file=input('Input the excel file name of data, e.g., cano.xls. The first m columns are for variables x and the followed p columns are for variables y: ','s');
xy=xlsread(file);
n=size(xy,1);
x=xy(:,1:m);
y=xy(:,m+1:m+p);
xb=zeros(1,m); yb=zeros(1,p);sigx=zeros(m); sigy=zeros(p);
sigxy=zeros(m,p); sigyx=zeros(p,m); mat1=zeros(m); mat2=zeros(p);
u=zeros(m); v=zeros(p); val1=zeros(m); val2=zeros(p);
xb=mean(x);
yb=mean(y);
for i=1:m
x(:,i)=x(:,i)-xb(i);
end;
for i=1:p
y(:,i)=y(:,i)-yb(i);
end;
for i=1:m
for j=1:m
sigx(i,j)=0;
for k=1:n
sigx(i,j)=sigx(i,j)+x(k,i)*x(k,j);
end
sigx(i,j)=sigx(i,j)/n;
end; end
for i=1:p
for j=1:p
sigy(i,j)=0;
for k=1:n
sigy(i,j)=sigy(i,j)+y(k,i)*y(k,j);
end
sigy(i,j)=sigy(i,j)/n;
end; end
for i=1:m
for j=1:p
sigxy(i,j)=0;
for k=1:n
sigxy(i,j)=sigxy(i,j)+x(k,i)*y(k,j);
end
sigxy(i,j)=sigxy(i,j)/n;
```

```
end; end
for i=1:p
for j=1:m
sigyx(i,j)=0;
for k=1:n
sigyx(i,j)=sigyx(i,j)+y(k,i)*x(k,j);
end
sigyx(i,j)=sigyx(i,j)/n;
end; end
sigx=sigx^(-1);
sigy=sigy^(-1);
mat1=sigx*sigxy*sigy*sigyx;
mat2=sigy*sigyx*sigx*sigxy;
[u,val1]=eig(mat1);
[v,val2]=eig(mat2);
for i=1:m
p2(i)=i;
end
for i=1:m-1
k=i;
for j=i:m-1
if (val1(j+1,j+1)>val1(k,k)) k=j+1; end
end
i2=p2(i); p2(i)=p2(k); p2(k)=i2;
l=val1(i,i); val1(i,i)=val1(k,k); val1(k,k)=l;
end
iss='\n';
for k=1:m
iss=strcat(iss,'No. ',num2str(k),' canonical correlation coefficient: ',num2str(round(sqrt(val1(k,k))*10000)/10000.00),'\n');
iss=strcat(iss,'u',num2str(k),'=');
for i=1:m
e1=num2str(i);
if (u(i,p2(k))>0) e2=num2str(round(u(i,p2(k))*100000)/100000.00);
elseif (u(i,p2(k))<0) e2=num2str(round(abs(u(i,p2(k)))*100000)/100000.00);
end
if (u(i,p2(k))>0) iss=strcat(iss,'+',e2,'x',e1);
elseif (u(i,p2(k))<0) iss=strcat(iss,'-',e2,'x',e1);
end
end
iss=strcat(iss,'\n');
iss=strcat(iss,'v',num2str(k),'=');
for i=1:p
e1=num2str(i);
if (v(i,p2(k))>0) e2=num2str(round(v(i,p2(k))*100000)/100000.00);
elseif (v(i,p2(k))<0) e2=num2str(round(abs(v(i,p2(k)))*100000)/100000.00);
```

```
end
if (v(i,p2(k))>0) iss=strcat(iss,'+',e2,'y',e1);
elseif (v(i,p2(k))<0) iss=strcat(iss,'-',e2,'y',e1);
end
end
iss=strcat(iss,'\nLinear regression between u',num2str(k),' and', ' v',num2str(k),'\n');
for j=1:n
uxx(j)=x(j,:)*u(:,k); vyy(j)=y(j,:)*v(:,k);
end
for j=1:2
if (j==1) xx=uxx'; yy=vyy';
else xx=vyy';yy=uxx';
end
[bb,bint,rr,rrint,stats]=regress(yy,[ones(n,1) xx]);
if (j==1) iss=strcat(iss,'u',num2str(k),'=',num2str(bb(1)),'+',num2str(bb(2)),'*','v',num2str(k),'\n');
else iss=strcat(iss,'v',num2str(k),'=',num2str(bb(1)),'+',num2str(bb(2)),'*','u',num2str(k),'\n');
iss=strcat(iss,'Pearson r=',num2str(sign(bb(2))*sqrt(stats(1))),', p=',num2str(stats(3)),'\n');
end
end
iss=strcat(iss,'\n');
end
fprintf(iss)
```

## 2.2 数据来源

采用中草药交互式编码数据库，CHM-DATA Version 1.0，共含 8 个表(Zhang，2017a，b)。该数据库记录有化学成份相关记载的中草药，共 1127 种，210 个科，约 2000 种药用植物和真菌。其中，药用植物占 98.94%，药用真菌占 1.06%，总计约占中国药用植物和真菌总数的 1/5。分析时，有缺失属性类的中草药，不参加计算。最后，采用味属性类(7 个味属性，表 1)，药性属性类(5 个药性属性，表 2)，化学成份属性类(22 个化学成份类别属性，表 3)，归经属性类(12 个归经，表 4)，功效属性类(77 种功效属性，表 5)。

**表 1** 味属性类下各属性。

| Taste | Bitter | Symplectic | Sweet | Light | Sour | Astringent | Salty |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 味 | 苦 | 辛 | 甘 | 淡 | 酸 | 涩 | 咸 |
| $x$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ |
| $y$ | $y_1$ | $y_2$ | $y_3$ | $y_4$ | $y_5$ | $y_6$ | $y_7$ |

注: 计算药性属性类-味属性类典范相关时，味属性类用 $y=(y_1, y_2, \ldots, y_7)$；味属性类对其它属性类用 $x=(x_1, x_2, \ldots, x_7)$。

**表 2** 药性属性类下各属性。

| Property | Cold | Cool | Temperate | Warm | Hot |
|---|---|---|---|---|---|
| 性 | 寒 | 凉 | 平 | 温 | 热 |
| $x$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ |

注: 计算典范相关时，药性属性类均用 $x=(x_1, x_2, \ldots, x_7)$。

**表 3** 化学成份属性类下各属性。

| Chemical composition Categories | Glycosides | Organic acids | Alkaloids | Amines | Sterols | Volatile oils or ordinary oils | Proteins or amino acids | Terpenoids | Phenols | Aldehydes | Esters or fats |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 成份 | 甙类 | 有机酸类 | 生物碱类 | 胺类 | 甾醇类 | 挥发油类/油类 | 蛋白质/氨基酸类 | 萜类 | 酚类 | 醛类 | 酯类/脂肪 |
| $y$ | $y_1$ | $y_2$ | $y_3$ | $y_4$ | $y_5$ | $y_6$ | $y_7$ | $y_8$ | $y_9$ | $y_{10}$ | $y_{11}$ |
| Chemical composition Categories | Carbohydrates or starch | Alcohols | Enzymes | Ketones or flavonoids | Alkanes or hydrocarbons | Ethers | Olefins | Anthracene or quinones | Tannins | Vitamins | Inorganic substances |
| 成份 | 糖类/淀粉 | 醇类 | 酶类 | (黄)酮类 | 烷类/烃类 | 醚类 | 烯类 | 蒽类/醌类 | 鞣质类 | 维生素类 | 无机物 |
| $y$ | $y_{12}$ | $y_{13}$ | $y_{14}$ | $y_{15}$ | $y_{16}$ | $y_{17}$ | $y_{18}$ | $y_{19}$ | $y_{20}$ | $y_{21}$ | $y_{22}$ |

注: 计算典范相关时，化学成份属性类均用 $y=(y_1, y_2, \ldots, y_{22})$。

**表 4** 归经属性类下各属性。

| Meridians & Collaterals | Liver meridians and collaterals | Gallbaldder meridians and collaterals | Urinary bladder meridians and collaterals | Kidney meridians and collaterals | Lung meridians and collaterals | Spleen meridians and collaterals |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 归经 | 肝 | 胆 | 膀胱 | 肾 | 肺 | 脾 |
| $x$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ |
| Meridians & Collaterals | Stomach meridians and collaterals | Heart meridians and collaterals | Large intestine meridians and collaterals | Small intestine meridians and collaterals | Blood phase | Triple burner |
| 归经 | 胃 | 心 | 大肠 | 小肠 | 血分 | 三焦 |
| $x$ | $x_7$ | $x_8$ | $x_9$ | $x_{10}$ | $x_{11}$ | $x_{12}$ |

注: 计算典范相关时，归经属性类均用 $x=(x_1, x_2, \ldots, x_{12})$。

**表 5** 功效属性类下各属性。

| Function | Clean liver， relax liver， consolidate liver， bright eyes or eliminate eye screens | Breed or blacked hair | Benefit gallbladder or cure jaundice | Reduce aminotransferase | Consolidate or warm kidney | Induce diuresis or treat strangurt |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 功效 | 清肝/补肝/舒肝/明目/退翳 | 生发/乌发 | 利胆/退黄 | 降转氨酶 | 补肾/温肾 | 利尿/通淋 |
| $y$ | $y_1$ | $y_2$ | $y_3$ | $y_4$ | $y_5$ | $y_6$ |
| Function | Activate water metabolism or excrete water | Invigorate male impotence (Yang) or strengthen male essence | Strengthen bones and muscles | Promote granulation | Remove lung-heat or nourish lung | Eliminate or relieve phlegm |
| 功效 | 利水/行水 | 壮阳/温阳/益精 | 强筋骨 | 生肌 | 清肺/润肺 | 祛痰/化痰 |
| $y$ | $y_7$ | $y_8$ | $y_9$ | $y_{10}$ | $y_{11}$ | $y_{12}$ |
| Function | Anti-asthma | Eliminate or relieve cough | Eliminate or relieve stuffy nose | Eliminate or relieve tuberculosis | Whet the appetite or reinforce stomach | Strengthen and reinforce spleen |
| 功效 | 平喘/定喘 | 止咳 | 通鼻窍 | 祛肺结核 | 开胃/益胃 | 健脾/补脾 |
| $y$ | $y_{13}$ | $y_{14}$ | $y_{15}$ | $y_{16}$ | $y_{17}$ | $y_{18}$ |
| Function | Improve digestion | Promote secretion of saliva or body | Relieve sore throat | Resolve food stagnation | Repel foulness | Prevent or arrest vomiting |
| 功效 | 消食/化食 | 生津 | 利咽 | 消积/消滞 | 辟秽 | 止呕 |
| $y$ | $y_{19}$ | $y_{20}$ | $y_{21}$ | $y_{22}$ | $y_{23}$ | $y_{24}$ |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Function | Strengthen heart or clean heart-fire | Relieve restlessness, calm the nerves, alleviate mental depression, or arrest convulsion | Arrest epilepsy | Relieve constipation | Loosen the bowels | Moisten dryness |
| 功效 | 强心/清心 | 除烦/安神/解郁/定惊 | 定痫 | 通便 | 润肠 | 润燥 |
| $y$ | $y_{25}$ | $y_{26}$ | $y_{27}$ | $y_{28}$ | $y_{29}$ | $y_{30}$ |
| Function | Astringe intestine | Soften hardness or dissolve masses | Antidiarrheal | Stop diarrheal | Cool blood | Stop bleeding |
| 功效 | 涩肠 | 散结/软坚 | 止痢 | 止泻 | 凉血 | 止血 |
| $y$ | $y_{31}$ | $y_{32}$ | $y_{33}$ | $y_{34}$ | $y_{35}$ | $y_{36}$ |
| Function | Tonify blood | Invigorate blood circulation | Absorb clots, eliminate stasis, resolve carbuncle or promote wound healing | Reduce swelling | Antidiabetics | Antiatherosclerosis |
| 功效 | 养血/补血 | 活血 | 化瘀/消痈/敛疮 | 消肿 | 降糖 | 降血脂 |
| $y$ | $y_{37}$ | $y_{38}$ | $y_{39}$ | $y_{40}$ | $y_{41}$ | $y_{42}$ |
| Function | Antihypertension | Nourish essential fluid (Yin) | Regulate menstruation or promote blood flow | Prevent miscarriage or abortion | Promote lactation or stimulate milk secretion | Regulate or enhance energy flow (Qi) |
| 功效 | 降压 | 滋阴 | 调经/通淋 | 安胎 | 通乳/下乳 | 理气/养气 |
| $y$ | $y_{43}$ | $y_{44}$ | $y_{45}$ | $y_{46}$ | $y_{47}$ | $y_{48}$ |
| Function | Inhibit or break energy flow (Qi) | Anti-aging | Remove obstruction in meridians and collaterals, or relax the muscles and joints | Nourish, warm spleen, stomach or Qi | Relieve pain | Anticancer |
| 功效 | 下气/破气 | 抗衰老 | 通络/活络/舒筋 | 温中/和中/补中 | 止痛 | 抗癌 |
| $y$ | $y_{49}$ | $y_{50}$ | $y_{51}$ | $y_{52}$ | $y_{53}$ | $y_{54}$ |
| Function | Clear away heat | Eliminate dampness | Detoxification | Decrease internal heat | Quench ones thirst | Relieve summer-heat |
| 功效 | 清热 | 利湿 | 解毒 | 降火 | 止渴 | 解暑/消暑 |
| $y$ | $y_{55}$ | $y_{56}$ | $y_{57}$ | $y_{58}$ | $y_{59}$ | $y_{60}$ |
| Function | Dispel endogenous cold | Dispel endogenous damp | Dispel endogenous wind | Relieve rheumatism or lubricate the joints | Dry dampness | Suppress perspiration |
| 功效 | 祛寒 | 祛湿 | 祛风 | 祛风湿/利关节 | 燥湿 | 止汗 |
| $y$ | $y_{61}$ | $y_{62}$ | $y_{63}$ | $y_{64}$ | $y_{65}$ | $y_{66}$ |
| Function | Induce perspiration | Relieve external syndrome | Promote astringent function | Discharge pus, diminish inflammation or anti-infection | Relieve itching | Kill or expel parasites |
| 功效 | 发汗 | 解表/发表 | 收敛 | 排脓/消炎/抗感染 | 止痒 | 杀虫/驱虫 |
| $y$ | $y_{67}$ | $y_{68}$ | $y_{69}$ | $y_{70}$ | $y_{71}$ | $y_{72}$ |
| Function | Anti-malaria | Relieve muscular spasm | Expose exthanthema or promote eruption | Dispel evil spirit | Eliminate impediment | |
| 功效 | 抗疟/截疟 | 解痉 | 透疹 | 逐邪 | 除痹 | |
| $y$ | $y_{73}$ | $y_{74}$ | $y_{75}$ | $y_{76}$ | $y_{77}$ | |

注: 计算典范相关时，功效属性类均用 $y=(y_1, y_2, \ldots, y_{77})$。

## 3 结果与分析

### 3.1 归经属性类-化学成份属性类典范相关及线性特征模型

归经属性类(表4)与化学成份属性类(表3)的典范相关与线性特征模型结果如下(只列出

相关性最强的三组典范相关与线性特征模型)

第 1 对典范相关: 0.3621

$u_1$=-0.1109$x_1$+0.10734$x_2$+0.06532$x_3$+0.0079$x_4$+0.01398$x_5$+0.16885$x_6$+0.12342$x_7$-0.00023$x_8$-0.16883$x_9$-0.14579$x_{10}$+0.14219$x_{11}$+0.92625$x_{12}$

$v_1$=-0.13876$y_1$+0.02522$y_2$-0.00081$y_3$+0.61501$y_4$-0.05993$y_5$+0.29265$y_6$+0.28537$y_7$-0.04131$y_8$-0.13212$y_9$+0.10198$y_{10}$+0.153$y_{11}$+0.15954$y_{12}$+0.03951$y_{13}$-0.13407$y_{14}$+0.15844$y_{15}$-0.00407$y_{16}$+0.07677$y_{17}$+0.38053$y_{18}$-0.22554$y_{19}$-0.28935$y_{20}$+0.06036$y_{21}$+0.13855$y_{22}$

线性回归 $u_1$ - $v_1$

$u_1$=-2.2731*$10^{-17}$+0.81879*$v_1$

线性回归 $v_1$ - $u_1$

$v_1$=6.7937*$10^{-19}$+0.16017*$u_1$

Pearson $r$=0.36214, $p$≈0

第 2 对典范相关: 0.272

$u_2$=0.03819$x_1$-0.03038$x_2$+0.05457$x_3$+0.22421$x_4$+0.03326$x_5$+0.08942$x_6$+0.08308$x_7$+0.00758$x_8$-0.02874$x_9$+0.4307$x_{10}$+0.02628$x_{11}$-0.86098$x_{12}$

$v_2$=-0.065$y_1$-0.03642$y_2$-0.11035$y_3$-0.44763$y_4$+0.20343$y_5$-0.15458$y_6$-0.09163$y_7$-0.03051$y_8$+0.12594$y_9$+0.12925$y_{10}$+0.05717$y_{11}$+0.00476$y_{12}$+0.01791$y_{13}$-0.28158$y_{14}$-0.08924$y_{15}$+0.66085$y_{16}$-0.06079$y_{17}$+0.02648$y_{18}$-0.20732$y_{19}$-0.0557$y_{20}$+0.26351$y_{21}$+0.165$y_{22}$

线性回归 $u_2$ - $v_2$

$u_2$=1.7621*$10^{-17}$+0.40353*$v_2$

线性回归 $v_2$ - $u_2$

$v_2$=-4.848*$10^{-19}$+0.18337*$u_2$

Pearson $r$=0.27202, $p$=1.4544*$10^{-14}$

第 3 对典范相关: -0.2564

$u_3$=0.20417$x_1$+0.46968$x_2$-0.03453$x_3$+0.01421$x_4$-0.18606$x_5$-0.1553$x_6$+0.24551$x_7$-0.05308$x_8$-0.23747$x_9$-0.23558$x_{10}$+0.59032$x_{11}$-0.39259$x_{12}$

$v_3$=0.03547$y_1$+0.31571$y_2$+0.08208$y_3$-0.33568$y_4$-0.04326$y_5$+0.14556$y_6$+0.25362$y_7$+0.6057$y_8$+0.09551$y_9$+0.27246$y_{10}$+0.04342$y_{11}$-0.25632$y_{12}$-0.1215$y_{13}$+0.18414$y_{14}$-0.06771$y_{15}$-0.0101$y_{16}$+0.09705$y_{17}$-0.11578$y_{18}$-0.20692$y_{19}$+0.15564$y_{20}$+0.15817$y_{21}$-0.07883$y_{22}$

线性回归 $u_3$ - $v_3$

$u_3$=3.5186*$10^{-17}$-0.31822*$v_3$

线性回归 $v_3$ - $u_3$

$v_3$=2.3784*$10^{-17}$-0.2066*$u_3$

Pearson $r$=-0.25641, $p$=4.6907*$10^{-13}$

各典范相关及线性特征模型经统计检验，为极显著，$p$≤4.6907*$10^{-13}$。

## **3.2** 药性属性类-味属性类典范相关及线性特征模型

药性属性类(表 2)与味属性类(表 1)的典范相关与线性特征模型结果如下(只列出相关性最强的三组典范相关与线性特征模型)

第 1 对典范相关: 0.518

$u_1$=-0.17722$x_1$-0.07275$x_2$+0.11248$x_3$+0.60466$x_4$+0.76488$x_5$

$v_1$=-0.4475$y_1$+0.80495$y_2$-0.03154$y_3$-0.33218$y_4$+0.0044$y_5$+0.071$y_6$-0.18812$y_7$

线性回归 $u_1$ - $v_1$

$u_1$=-1.8564*$10^{-17}$+0.76742*$v_1$

线性回归 $v_1$ - $u_1$

$v_1$=1.3387*$10^{-17}$+0.34969*$u_1$

Pearson $r$=0.51804, $p$≈0

第 2 对典范相关: 0.2801

$u_2$=-0.5943$x_1$-0.18773$x_2$-0.0663$x_3$-0.45966$x_4$-0.62919$x_5$

$v_2$=-0.01513$y_1$+0.16663$y_2$+0.38585$y_3$+0.61173$y_4$+0.34056$y_5$+0.55242$y_6$-0.16663$y_7$

线性回归 $u_2$ - $v_2$

$u_2$=-1.5874*$10^{-17}$+0.36872*$v_2$

线性回归 $v_2$ - $u_2$

$v_2$=2.5131*$10^{-17}$+0.2128*$u_2$

Pearson $r$=0.28011, $p$=2.2204*$10^{-15}$

第 3 对典范相关: -0.1656

$u_3$=-0.36991$x_1$-0.55525$x_2$-0.31421$x_3$-0.4035$x_4$-0.5416$x_5$

$v_3$=0.17287$y_1$+0.15472$y_2$-0.10007$y_3$+0.95268$y_4$-0.07593$y_5$-0.13697$y_6$-0.06357$y_7$

线性回归 $u_3$ - $v_3$

$u_3$=1.3933*$10^{-17}$-0.42811*$v_3$

线性回归 $v_3$ - $u_3$

$v_3$=3.3344*$10^{-17}$-0.064044*$u_3$

Pearson $r$=-0.16558, $p$=3.7421*$10^{-6}$

各典范相关及线性特征模型经统计检验，为极显著，$p$≤3.7421*$10^{-6}$。

## **3.3** 味属性类-化学成份属性类典范相关及线性特征模型

味属性类(表 1)与化学成份属性类(表 3)的典范相关与线性特征模型结果如下(只列出相关性最强的三组典范相关与线性特征模型)

第 1 对典范相关: -0.4127

$u_1$=0.04686$x_1$-0.20019$x_2$+0.31934$x_3$+0.0961$x_4$+0.89134$x_5$+0.20428$x_6$+0.10154$x_7$

$v_1$=0.0215$y_1$-0.20678$y_2$+0.14947$y_3$+0.21587$y_4$+0.00813$y_5$+0.18111$y_6$+0.16217$y_7$+0.08229$y_8$+0.14266$y_9$-0.05774$y_{10}$+0.01542$y_{11}$-0.06934$y_{12}$+0.07574$y_{13}$-0.37881$y_{14}$+0.0051$y_{15}$-0.17602$y_{16}$+0.10964$y_{17}$+0.22318$y_{18}$+0.04404$y_{19}$-0.28013$y_{20}$-0.68449$y_{21}$+0.04637$y_{22}$

线性回归 $u_1$ - $v_1$

$u_1$=-6.2815*$10^{-18}$-0.35265*$v_1$

线性回归 $v_1$ - $u_1$

$v_1$=9.4197*$10^{-18}$-0.48309*$u_1$

Pearson $r$=0.41275, $p$≈0

第 2 对典范相关: 0.3378

$u_2$=0.71443$x_1$-0.48748$x_2$-0.10732$x_3$+0.44241$x_4$-0.17876$x_5$-0.09808$x_6$-0.05594$x_7$

$v_2$=0.2426$y_1$-0.05867$y_2$+0.20069$y_3$-0.0215$y_4$-0.06164$y_5$-0.15208$y_6$-0.28724$y_7$+0.13741$y_8$-0.07541$y_9$-0.34951$y_{10}$-0.18074$y_{11}$+0.00479$y_{12}$-0.15872$y_{13}$-0.15044$y_{14}$+0.17092$y_{15}$-0.18414$y_{16}$-0.15651$y_{17}$-0.30307$y_{18}$+0.31954$y_{19}$+0.23849$y_{20}$-0.46478$y_{21}$+0.07628$y_{22}$

线性回归 $u_2$ - $v_2$

$u_2$=-2.9681*$10^{-18}$+0.2791*$v_2$

线性回归 $v_2$ - $u_2$

$v_2$=-1.0703*$10^{-18}$+0.40893*$u_2$

Pearson $r$=0.33783, $p$≈0

第 3 对典范相关: -0.2617

$u_3$=0.30342$x_1$+0.29661$x_2$-0.08946$x_3$-0.37942$x_4$+0.81177$x_5$-0.05866$x_6$-0.07469$x_7$

$v_3$=-0.0796$y_1$-0.22354$y_2$-0.08376$y_3$+0.14587$y_4$+0.2728$y_5$-0.13554$y_6$+0.31414$y_7$+0.10453$y_8$+0.03226$y_9$-0.07441$y_{10}$+0.01787$y_{11}$+0.26868$y_{12}$-0.02162$y_{13}$+0.38821$y_{14}$-0.19486$y_{15}$+0.23667$y_{16}$+0.16262$y_{17}$-0.00395$y_{18}$+0.43165$y_{19}$-0.25989$y_{20}$-0.25808$y_{21}$+0.20452$y_{22}$

线性回归 $u_3$ - $v_3$

$u_3$=-2.8082*$10^{-18}$-0.24437*$v_3$

线性回归 $v_3$ - $u_3$

$v_3$=3.0321*$10^{-17}$-0.28017*$u_3$

Pearson $r$=-0.26166, $p$=1.4966*$10^{-13}$

各典范相关及线性特征模型经统计检验，为极显著，$p$≤1.4966*$10^{-13}$。

## **3.4** 药性属性类-化学成份属性类典范相关及线性特征模型

药性属性类(表 2)与化学成份属性类(表 3)的典范相关与线性特征模型结果如下(只列出相关性最强的三组典范相关与线性特征模型)

第 1 对典范相关: -0.3723

$u_1$=-0.08775$x_1$-0.04354$x_2$+0.05009$x_3$+0.71101$x_4$+0.69452$x_5$

$v_1$=0.0989$y_1$+0.0559$y_2$+0.0374$y_3$-0.5289$y_4$-0.14064$y_5$-0.47068$y_6$+0.03507$y_7$+0.16535$y_8$+0.03438$y_9$-0.08874$y_{10}$-0.17874$y_{11}$-0.00847$y_{12}$-0.08475$y_{13}$+0.05523$y_{14}$+0.07855$y_{15}$-0.31922$y_{16}$-0.24531$y_{17}$-0.38085$y_{18}$+0.04074$y_{19}$+0.10758$y_{20}$+0.2378$y_{21}$-0.04105$y_{22}$

线性回归 $u_1$ - $v_1$

$u_1$=-3.156*$10^{-17}$-0.40118*$v_1$

线性回归 $v_1$ - $u_1$

$v_1$=-1.6295*$10^{-17}$-0.34547*$u_1$

Pearson $r$=-0.37228, $p$≈0

第 2 对典范相关: -0.2817

$u_2$=0.40483$x_1$+0.36083$x_2$+0.30733$x_3$+0.35588$x_4$+0.69628$x_5$

$v_2$=-0.12512$y_1$-0.01661$y_2$-0.32913$y_3$-0.32527$y_4$+0.10112$y_5$+0.07457$y_6$-0.00013$y_7$-0.00566$y_8$+0.09068$y_9$+0.01763$y_{10}$-0.02882$y_{11}$-0.00068$y_{12}$+0.11194$y_{13}$+0.25656$y_{14}$-0.04017$y_{15}$-0.71883$y_{16}$+0.08554$y_{17}$-0.23867$y_{18}$-0.12695$y_{19}$-0.01813$y_{20}$-0.01006$y_{21}$+0.25932$y_{22}$

线性回归 $u_2$ - $v_2$

$u_2$=1.0498*$10^{-17}$-0.99578*$v_2$

线性回归 $v_2$ - $u_2$

$v_2$=-3.8825*$10^{-18}$-0.079667*$u_2$

Pearson $r$=-0.28166, $p$=1.5543*$10^{-15}$

第 3 对典范相关: 0.1889

$u_3$=-0.2568$x_1$-0.34642$x_2$-0.50593$x_3$-0.30834$x_4$-0.68045$x_5$

$v_3$=0.1908$y_1$-0.01518$y_2$+0.07877$y_3$-0.49439$y_4$+0.10412$y_5$-0.06303$y_6$+0.0986$y_7$+0.05814$y_8$+0.22266$y_9$+0.11985$y_{10}$+0.07737$y_{11}$-0.13853$y_{12}$-0.04033$y_{13}$-0.38498$y_{14}$-0.05785$y_{15}$-0.4866$y_{16}$-0.0101$y_{17}$+0.19452$y_{18}$+0.01162$y_{19}$-0.18955$y_{20}$+0.35499$y_{21}$-0.07564$y_{22}$

线性回归 $u_3$ - $v_3$

$u_3$=-1.3625*$10^{-17}$+0.37177*$v_3$

线性回归 $v_3$ - $u_3$

$v_3$=2.4076*$10^{-18}$+0.095984*$u_3$

Pearson $r$=0.1889, $p$=1.2381*$10^{-7}$

各典范相关及线性特征模型经统计检验，为极显著，$p$≤1.2381*$10^{-7}$。

**3.5** 归经属性类-功效属性类典范相关及线性特征模型

归经属性类(表 4)与功效属性类(表 5)的典范相关与线性特征模型结果如下(只列出相关性最强的三组典范相关与线性特征模型)

第 1 对典范相关: 0.6934

$u_1$=0.49467$x_1$-0.15557$x_2$+0.15316$x_3$+0.01776$x_4$-0.16345$x_5$-0.44071$x_6$-0.36465$x_7$+0.17153$x_8$-0.15786$x_9$+0.19911$x_{10}$-0.02969$x_{11}$+0.50847$x_{12}$

$v_1$=0.13649$y_1$-0.09307$y_2$+0.13187$y_3$+0.29866$y_4$-0.00691$y_5$+0.03045$y_6$-0.04238$y_7$-0.00393$y_8$+0.05936$y_9$+0.0644$y_{10}$-0.03536$y_{11}$-0.07812$y_{12}$-0.0772$y_{13}$+0.01804$y_{14}$-0.05598$y_{15}$+0.25528$y_{16}$-0.12064$y_{17}$-0.24571$y_{18}$-0.07139$y_{19}$-0.04577$y_{20}$-0.13601$y_{21}$-0.15049$y_{22}$-0.07495$y_{23}$-0.18769$y_{24}$-0.00838$y_{25}$+0.06461$y_{26}$+0.11783$y_{27}$+0.01996$y_{28}$-0.13667$y_{29}$-0.05599$y_{30}$-0.03833$y_{31}$-0.01582$y_{32}$-0.04764$y_{33}$-0.09478$y_{34}$+0.07603$y_{35}$-0.00203$y_{36}$+0.09609$y_{37}$+0.0487$y_{38}$+0.0661$y_{39}$-0.00396$y_{40}$+0.18242$y_{41}$-0.00418$y_{42}$+0.07974$y_{43}$-0.01147$y_{44}$+0.11266$y_{45}$-0.06142$y_{46}$-0.01383$y_{47}$-0.03661$y_{48}$-0.12066$y_{49}$-0.39311$y_{50}$+0.04015$y_{51}$-0.23655$y_{52}$+0.03633$y_{53}$+0.08624$y_{54}$-0.00645$y_{55}$-0.00171$y_{56}$-0.02411$y_{57}$+0.05085$y_{58}$-0.08999$y_{59}$-0.02453$y_{60}$-0.0539$y_{61}$-0.02482$y_{62}$+0.06042$y_{63}$+0.07667$y_{64}$-0.10442$y_{65}$-0.31382$y_{66}$-0.01055$y_{67}$-0.19222$y_{68}$+0.00545$y_{69}$+0.0016$y_{70}$-0.02364$y_{71}$-0.05152$y_{72}$+0.1043$y_{73}$+0.1241$y_{74}$-0.1475$y_{75}$+0.12906$y_{76}$+0.0445$y_{77}$

线性回归 $u_1$ - $v_1$

$u_1$=1.0577*$10^{-17}$+0.28372*$v_1$

线性回归 $v_1$ - $u_1$

$v_1$=-1.1712*$10^{-17}$+1.6948*$u_1$

Pearson $r$=0.69344, $p$≈0

第 2 对典范相关: 0.642

$u_2$=-0.02594$x_1$+0.34996$x_2$+0.13919$x_3$+0.7065$x_4$-0.47434$x_5$+0.25881$x_6$+0.0498$x_7$-0.11854$x_8$+0.15169$x_9$-0.02658$x_{10}$-0.14876$x_{11}$+0.06305$x_{12}$

$v_2$=-0.05718$y_1$-0.09725$y_2$+0.11827$y_3$+0.03042$y_4$+0.33338$y_5$+0.07635$y_6$+0.12309$y_7$+0.12355$y_8$+0.1136$y_9$-0.08907$y_{10}$-0.16118$y_{11}$-0.11538$y_{12}$-0.14925$y_{13}$-0.06186$y_{14}$-0.16157$y_{15}$-0.09974$y_{16}$-0.02988$y_{17}$+0.11625$y_{18}$+0.07177$y_{19}$-0.01486$y_{20}$+0.00217$y_{21}$+0.07963$y_{22}$+0.02743$y_{23}$+0.14218$y_{24}$-0.18586$y_{25}$-0.0417$y_{26}$-0.11175$y_{27}$+0.04257$y_{28}$+0.07794$y_{29}$-0.02564$y_{30}$+0.18975$y_{31}$-0.05725$y_{32}$+0.05317$y_{33}$+0.15256$y_{34}$+0.00541$y_{35}$-0.04797$y_{36}$+0.11159$y_{37}$+0.00752$y_{38}$-0.0132$y_{39}$-0.00668$y_{40}$+0.11641$y_{41}$-0.16541$y_{42}$-0.03908$y_{43}$+0.06415$y_{44}$+0.06334$y_{45}$+0.05264$y_{46}$-0.06521$y_{47}$-0.02699$y_{48}$-0.0349$y_{49}$+0.34454$y_{50}$+0.07858$y_{51}$-0.02831$y_{52}$-0.00941$y_{53}$+0.29596$y_{54}$-0.05626$y_{55}$+0.03358$y_{56}$-0.04869$y_{57}$-0.0028$y_{58}$+0.00304$y_{59}$-0.09212$y_{60}$+0.06052$y_{61}$+0.09518$y_{62}$-0.0672$y_{63}$+0.0333$y_{64}$+0.1653$y_{65}$-0.08444$y_{66}$-0.28706$y_{67}$-0.08007$y_{68}$-0.05711$y_{69}$-0.12115$y_{70}$+0.098$y_{71}$-0.05477$y_{72}$-0.04852$y_{73}$-0.00402$y_{74}$-0.06633$y_{75}$-0.09029$y_{76}$+0.20663$y_{77}$

线性回归 $u_2$ - $v_2$

$u_2$=4.2019*$10^{-18}$+0.27965*$v_2$

线性回归 $v_2$ - $u_2$

$v_2$=-2.3996*$10^{-17}$+1.474*$u_2$

Pearson $r$=0.64203, $p$≈0

第 3 对典范相关: -0.5807

$u_3$=0.15424$x_1$+0.2169$x_2$-0.24008$x_3$-0.45988$x_4$-0.38404$x_5$+0.1403$x_6$+0.15062$x_7$+0.22277$x_8$+0.17801$x_9$-0.44047$x_{10}$-0.41109$x_{11}$+0.16079$x_{12}$

$v_3$=-0.01495$y_1$+0.09547$y_2$-0.11743$y_3$-0.12479$y_4$+0.26804$y_5$+0.18104$y_6$+0.14225$y_7$+0.02223$y_8$+0.03199$y_9$+0.01492$y_{10}$+0.14704$y_{11}$+0.12018$y_{12}$+0.14377$y_{13}$+0.06358$y_{14}$+0.1551$y_{15}$-0.11239$y_{16}$+0.00549$y_{17}$-0.07201$y_{18}$-0.12257$y_{19}$+0.06791$y_{20}$+0.07759$y_{21}$-0.10637$y_{22}$-0.02166$y_{23}$-0.09282$y_{24}$-0.04642$y_{25}$-0.08974$y_{26}$-0.29102$y_{27}$-0.00671$y_{28}$-0.11823$y_{29}$+0.10677$y_{30}$-0.08302$y_{31}$+0.04944$y_{32}$-0.08483$y_{33}$+0.00079$y_{34}$-0.05164$y_{35}$-0.02157$y_{36}$-0.01083$y_{37}$-0.0271$y_{38}$-0.04485$y_{39}$+0.01506$y_{40}$-0.08502$y_{41}$-0.3371$y_{42}$-0.04491$y_{43}$+0.07967$y_{44}$+0.03352$y_{45}$+0.05982$y_{46}$-0.03551$y_{47}$+0.03506$y_{48}$+0.00255$y_{49}$-0.4097$y_{50}$+0.00839$y_{51}$-0.01087$y_{52}$-0.03877$y_{53}$-0.00613$y_{54}$+0.03612$y_{55}$+0.11123$y_{56}$+0.02982$y_{57}$+0.08211$y_{58}$+0.01416$y_{59}$-0.09318$y_{60}$+0.09175$y_{61}$+0.00523$y_{62}$+0.04333$y_{63}$+0.03289$y_{64}$-0.11441$y_{65}$-0.20519$y_{66}$+0.16499$y_{67}$+0.07476$y_{68}$-0.04746$y_{69}$-0.01706$y_{70}$-0.00924$y_{71}$-0.00954$y_{72}$-0.06098$y_{73}$-0.00212$y_{74}$+0.00872$y_{75}$+0.05784$y_{76}$+0.31212$y_{77}$

线性回归 $u_3$ - $v_3$

$u_3$=5.5161*$10^{-18}$-0.24472*$v_3$

线性回归 $v_3$ - $u_3$

$v_3$=-3.3233*$10^{-17}$-1.3781*$u_3$

Pearson $r$=-0.58073, $p$≈0

各典范相关及线性特征模型经统计检验，为极显著，$p$≤$10^{-15}$。

## **3.6** 味属性类-功效属性类典范相关及线性特征模型

味属性类(表 1)与功效属性类(表 5)的典范相关与线性特征模型结果如下(只列出相关性最强的三组典范相关与线性特征模型)

第 1 对典范相关: -0.6338

$u_1$=0.28926$x_1$-0.82418$x_2$+0.31268$x_3$+0.0237$x_4$+0.04424$x_5$+0.3203$x_6$-0.18486$x_7$

$v_1$=-0.0332$y_1$-0.26233$y_2$+0.02572$y_3$-0.08497$y_4$+0.02954$y_5$-0.0785$y_6$-0.04282$y_7$-0.01083$y_8$-0.02063$y_9$-0.15673$y_{10}$-0.07291$y_{11}$+0.08505$y_{12}$+0.04256$y_{13}$-0.09672$y_{14}$+0.31969$y_{15}$-0.01848$y_{16}$+0.05785$y_{17}$-0.05413$y_{18}$-0.0534$y_{19}$-0.12881$y_{20}$+0.02541$y_{21}$-0.0064$y_{22}$+0.25388$y_{23}$+0.07963$y_{24}$+0.00418$y_{25}$-0.01056$y_{26}$+0.23591$y_{27}$-0.09371$y_{28}$-0.08141$y_{29}$-0.0506$y_{30}$-0.05715$y_{31}$+0.03276$y_{32}$-0.15818$y_{33}$-0.00685$y_{34}$-0.02566$y_{35}$-0.01038$y_{36}$-0.15766$y_{37}$+0.02167$y_{38}$+0.0509$y_{39}$+0.07519$y_{40}$-0.11402$y_{41}$+0.15375$y_{42}$-0.20422$y_{43}$-0.03689$y_{44}$-0.05402$y_{45}$+0.00558$y_{46}$+0.01445$y_{47}$+0.09042$y_{48}$+0.15415$y_{49}$-0.1823$y_{50}$-0.03832$y_{51}$+0.12012$y_{52}$+0.04054$y_{53}$-0.20563$y_{54}$-0.08429$y_{55}$-0.04256$y_{56}$-0.00105$y_{57}$-0.04563$y_{58}$-0.05054$y_{59}$-0.05401$y_{60}$+0.18851$y_{61}$+0.03768$y_{62}$+0.06017$y_{63}$+0.07242$y_{64}$-0.01704$y_{65}$-0.16795$y_{66}$+0.19228$y_{67}$+0.11497$y_{68}$-0.20792$y_{69}$-0.04998$y_{70}$+0.07441$y_{71}$+0.01772$y_{72}$+0.07639$y_{73}$+0.0836$y_{74}$+0.19523$y_{75}$+0.27443$y_{76}$+0.0243$y_{77}$

线性回归 $u_1$ - $v_1$

$u_1$=1.761*$10^{-18}$-0.21171*$v_1$

线性回归 $v_1$ - $u_1$

$v_1$=-2.1662*$10^{-17}$-1.8971*$u_1$

Pearson $r$=-0.63375, $p$≈0

第 2 对典范相关: 0.5504

$u_2$=0.18308$x_1$-0.1924$x_2$-0.18029$x_3$+0.21799$x_4$-0.44698$x_5$-0.7372$x_6$+0.32587$x_7$

$v_2$=-0.01159$y_1$-0.00954$y_2$+0.07119$y_3$-0.13492$y_4$-0.03786$y_5$+0.00955$y_6$+0.0577$y_7$-0.04274$y_8$+0.01538$y_9$-0.04336$y_{10}$-0.01726$y_{11}$-0.02446$y_{12}$+0.08333$y_{13}$-0.02469$y_{14}$-0.0213$y_{15}$+0.03696$y_{16}$-0.08658$y_{17}$-0.05291$y_{18}$-0.04127$y_{19}$-0.09463$y_{20}$-0.04701$y_{21}$-0.05572$y_{22}$-0.15381$y_{23}$+0.05231$y_{24}$+0.05945$y_{25}$+0.02736$y_{26}$+0.04318$y_{27}$+0.05327$y_{28}$+0.02528$y_{29}$-0.08415$y_{30}$-0.57102$y_{31}$+0.0857$y_{32}$-0.16753$y_{33}$-0.25775$y_{34}$+0.00926$y_{35}$-0.09308$y_{36}$-0.1204$y_{37}$+0.03288$y_{38}$-0.04416$y_{39}$-0.00316$y_{40}$-0.12331$y_{41}$+0.08424$y_{42}$+0.04922$y_{43}$+0.08336$y_{44}$-0.00195$y_{45}$+0.12733$y_{46}$-0.12671$y_{47}$+0.02716$y_{48}$-0.00848$y_{49}$+0.2424$y_{50}$+0.05544$y_{51}$-0.01649$y_{52}$+0.0441$y_{53}$-0.05354$y_{54}$+0.09121$y$

$_{55}$+0.0561$y_{56}$-0.02928$y_{57}$+0.18367$y_{58}$-0.14679$y_{59}$-0.01526$y_{60}$-0.05496$y_{61}$+0.00059$y_{62}$-0.01864$y_{63}$-0.05203$y_{64}$-0.03578$y_{65}$-0.06965$y_{66}$-0.04654$y_{67}$-0.02516$y_{68}$-0.43329$y_{69}$+0.03302$y_{70}$-0.04909$y_{71}$+0.06264$y_{72}$+0.07615$y_{73}$-0.08262$y_{74}$-0.0565$y_{75}$-0.03334$y_{76}$+0.08524$y_{77}$

线性回归 $u_2$ - $v_2$

$u_2$=-1.0851*10$^{-18}$+0.28397*$v_2$

线性回归 $v_2$ - $u_2$

$v_2$=-1.1615*10$^{-18}$+1.0668*$u_2$

Pearson $r$=0.5504, $p$≈0

第 3 对典范相关: -0.4956

$u_3$=0.28106$x_1$-0.03992$x_2$-0.52959$x_3$+0.35233$x_4$+0.50751$x_5$+0.44897$x_6$+0.23594$x_7$

$v_3$=-0.01795$y_1$-0.17773$y_2$-0.03254$y_3$+0.43084$y_4$+0.058$y_5$+0.0825$y_6$-0.02927$y_7$+0.08337$y_8$-0.02811$y_9$+0.15236$y_{10}$+0.08615$y_{11}$+0.03257$y_{12}$-0.03044$y_{13}$-0.03063$y_{14}$-0.01008$y_{15}$+0.11275$y_{16}$+0.03494$y_{17}$+0.16997$y_{18}$+0.01069$y_{19}$+0.03256$y_{20}$-0.12734$y_{21}$-0.02827$y_{22}$+0.0982$y_{23}$+0.05541$y_{24}$-0.01359$y_{25}$+0.05573$y_{26}$-0.07746$y_{27}$+0.03008$y_{28}$+0.11028$y_{29}$+0.20428$y_{30}$-0.34813$y_{31}$+0.02019$y_{32}$-0.09972$y_{33}$-0.12497$y_{34}$-0.0139$y_{35}$+0.00632$y_{36}$+0.01415$y_{37}$-0.00601$y_{38}$-0.03162$y_{39}$-0.0257$y_{40}$+0.26903$y_{41}$-0.18881$y_{42}$+0.02997$y_{43}$+0.1309$y_{44}$+0.00696$y_{45}$+0.15326$y_{46}$+0.10719$y_{47}$-0.00191$y_{48}$+0.01541$y_{49}$+0.17711$y_{50}$-0.05167$y_{51}$+0.05782$y_{52}$-0.05412$y_{53}$+0.10498$y_{54}$+0.00151$y_{55}$-0.00779$y_{56}$-0.02377$y_{57}$-0.09778$y_{58}$+0.00166$y_{59}$+0.09903$y_{60}$+0.05303$y_{61}$-0.0019$y_{62}$+0.03244$y_{63}$+0.04623$y_{64}$-0.13736$y_{65}$-0.1187$y_{66}$-0.00533$y_{67}$-0.00853$y_{68}$-0.2286$y_{69}$-0.05422$y_{70}$-0.16049$y_{71}$-0.03008$y_{72}$+0.01754$y_{73}$+0.21378$y_{74}$+0.14244$y_{75}$-0.13231$y_{76}$+0.06702$y_{77}$

线性回归 $u_3$ - $v_3$

$u_3$=-2.1028*10$^{-17}$-0.17214*$v_3$

线性回归 $v_3$ - $u_3$

$v_3$=-5.4882*10$^{-18}$-1.4269*$u_3$

Pearson $r$=-0.4956, $p$≈0

各典范相关及线性特征模型经统计检验，为极显著，$p$≤10$^{-15}$。

### 3.7 属性类典范相关网络

类似以前的研究(Zhang，2017b)，本研究构造出属性类典范相关网络，如图 1 所示。图中只标出值最大的 Pearson 相关系数，对应的典范相关函数如前所列。各典范相关统计检验极显著，$p$≤10$^{-5}$。与以前研究(Zhang，2017b)不同的是，该典范相关网络以属性类为节点，反映的是属性类之间的直接关系。

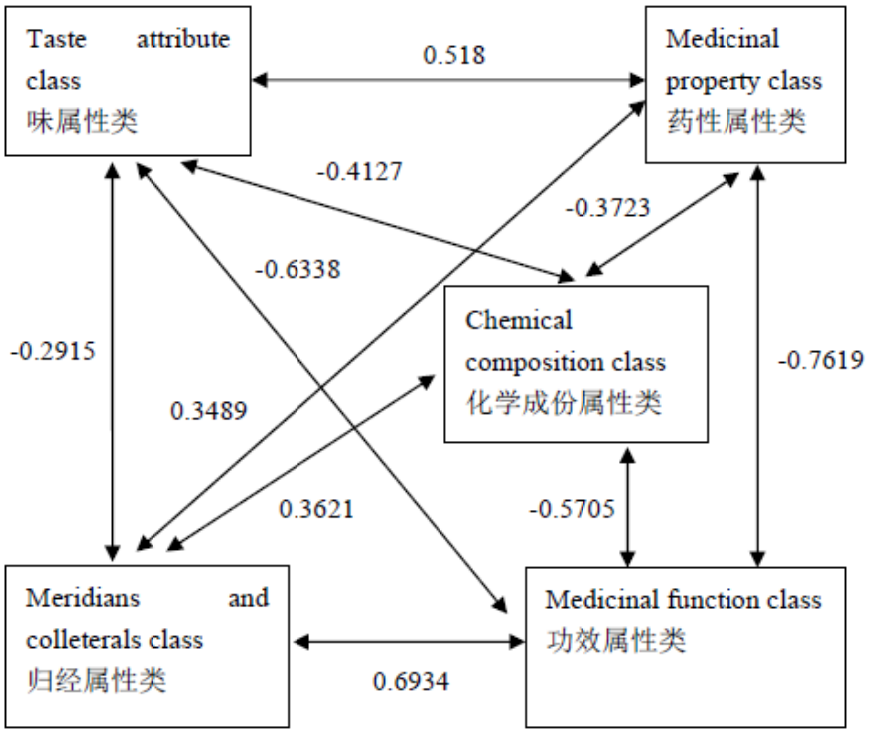


图 1 中草药属性类典范相关网络。

## 4 讨论

与属性之间的相关性相似，属性类之间的相关性，可能更多地表现为准线性相关、非线性相关等(Zhang，2012，2015)，正如前述线性相关程度所见。另一方面，考虑到中草药属性类间准线性相关、非线性相关的高度复杂性和未知性，线性相关作为准线性相关、非线性相关的线性近似，具有合理性和代表性。

需要注意的是，典范相关函数是一种最优线性组合，以使其拟合优度最大。因而，它们、以及由此导出的线性特征模型仅可作为经验模型，而不宜作为机理模型，其系数及正负亦不宜作为属性重要性或正负互作的依据。

在一定意义上，线性特征模型更多的作为中草药属性模式，而非预测模型。要预测中草药属性，可应用其它方法，如回归、判别分析等等(Qi，2006；Liu et al.，2014)。

## 参考文献

刘娜，李军，李保国. 2014. 多元统计分析在中药质量控制中的应用和思考. 中国中药杂志，39(21): 4268-4271

齐艳红. 2006. 情报信息的判别分析网络计算软件研究。情报杂志，11: 64-65

齐艳红，徐丽辉. 2009. 情报信息典范相关分析网络算法软件研发与应用. 现代情报，29(1): 134-139，143

张尧庭，方开泰. 多元统计分析引论. 科学出版社，北京，1982

Budovsky A，Fraifeld VE. 2012. Medicinal plants growing in the Judea region: network approach for searching potential therapeutic targets. Network Biology，2(3): 84-94

Hopkins AL. 2007. Network pharmacology. Nature Biotechnology，25(10): 1110-1111

Hopkins AL. 2008. Network pharmacology: the next paradigm in durg discovery. Nature Chemical Biology，4(11): 682-690

Zhang WJ. 2012. Computational Ecology: Graphs, Networks and Agent-based Modeling. World Scientific，Singapore

Zhang WJ. 2015. Calculation and statistic test of partial correlation of general correlation measures. Selforganizology，2(4): 65-77

Zhang WJ. 2016. Network pharmacology: A further description. Network Pharmacology，1(1): 1-14

Zhang WJ. 2017a. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines: (I) Basic statistics of medicinal attributes and functions for more than 1100 Chinese herbal medicines. Network Pharmacology，2(2): 17-37

Zhang WJ. 2017b. Network pharmacology of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines: (II) Relational networks and pharmacological mechanisms of medicinal attributes and functions of Chinese herbal medicines. Network Pharmacology，2(2): 38-66