

均方根误差最小准则的偏最小二乘筛选中药药效物质方法*

聂斌^{1,2} 杜建强^{1,2} 余日跃¹ 陈银芳¹

(¹ 江西中医药大学 南昌 330004 ² 江西省中医人工智能重点实验室 南昌 330004)

[摘要] **目的/意义** 研究一种均方根误差最小准则的偏最小二乘筛选中药药效物质方法, 以便全面地观察和分析中药的作用机理。**方法/过程** 以均方根误差 (root mean square error, RMSE) 最小为主要准则, 通过偏最小二乘法获得特征的变量投影重要性指标 (variable importance in the projection, VIP) 值, 再以 VIP 值的大小对特征重要性排序, 最后通过偏最小回归法与前向搜索法, 以 RMSE 最小、交叉性验证结果最好为标准, 确定特征子集。采用大承气汤配比治疗急性胰腺炎实验数据, 以及麻杏石甘汤治咳、平喘、退热实验数据进行验证。**结果/结论** 该方法能得到回归性能最好时的最小 RMSE 和药效物质子集。VIP 值大于 1 的特征是相对重要的, VIP 值小于 1 的特征也可能对模型性能有影响。

[关键词] 偏最小二乘; 变量投影重要性; 均方根误差; 特征选择; 物质筛选

[中图分类号] R-058 **[文献标识码]** A **[DOI]** 10.3969/j.issn.1673-6036.2024.12.005

A Partial Least Squares Screening Method for Pharmacological Substances of Traditional Chinese Medicine Based on the Criterion of Minimum Root Mean Square Error

NIE Bin^{1,2}, DU Jianqiang^{1,2}, YU Riyue¹, CHEN Yinfang¹

¹Jiangxi University of Chinese Medicine, Nanchang 330004, China; ²Jiangxi Provincial Key Laboratory of Chinese Medicine Artificial Intelligence, Nanchang 330004, China

[Abstract] **Purpose/Significance** To study a partial least squares (PLS) screening method for traditional Chinese medicine (TCM) pharmacological substances based on the minimum root mean square error (RMSE) criterion, in order to observe and analyze the action mechanism of traditional Chinese medicine comprehensively. **Method/Process** The main objective is to obtain the variable importance in the projection (VIP) values of features using the PLS method with the minimum RMSE as the main criteria. Then the importance of features is ranked based on the VIP values. Finally, by using PLS regression and forward search methods, the feature subset is determined based on the criteria of the minimum RMSE and obtaining the best cross validation results. Experimental data on the treatment of acute pancreatitis with the combination of DaChengQi Tang and MaXingShiGan Tang for cough, asthma, and fever are verified. **Result/Conclusion** This method can obtain the minimum residual and subset of pharmacological substances with the best regression performance. Features with a VIP value greater than 1 are relatively important, and features with a VIP value less than 1 may also have an impact on the model performance.

[Keywords] partial least squares (PLS); variable importance in the projection (VIP); root mean square error (RMSE); feature selection; substance screening

[修回日期] 2024-07-28

[作者简介] 聂斌, 教授, 发表论文 50 余篇; 通信作者: 杜建强, 教授。

[基金项目] 国家自然科学基金资助项目 (项目编号: 82260849); 江西中医药大学校级科技创新团队发展计划项目 (项目编号: CXTD22015)。

1 引言

肖培根等^[1]认为, 中药复方研究的核心在于药效物质, 而研究应以临床疗效为依据, 药效学为引导, 采用现代分离与分析技术, 研究复方物质的组成, 并阐明药效物质的形态、结构、构象等化学信息。在此基础上, 建立一系列适用于中药药效物质或物质群化学分离检测的规范化技术, 并构建比较完善的中药药理模型和方法。

中药复方因其化学成分的高度复杂性, 确定哪些成分对药效起作用成为基础且关键的问题。从数学方法的角度来看, 药效物质的筛选过程可以视为特征选择问题, 或称变量选择、变量筛选、属性选择、属性约简、降维。偏最小二乘 (partial least squares, PLS) 法^[2-3] 回归建模的主要优点可以归纳为: 一是集主成分分析、典型相关分析和多元线性回归分析的基本功能为一体; 二是可以处理多因变量对多自变量的回归建模; 三是可以在样本点个数相对变量个数 (特征维数) 明显过少时进行回归建模; 四是在自变量之间存在高度冗余时进行回归建模; 五是偏最小二乘模型中, 每个自变量的回归系数容易解释, 回归系数是原始自变量的线性组合。偏最小二乘常用变量投影重要性指标 (variable importance in projection, VIP) 来衡量变量 (特征) 的重要性程度, 通常认为 $VIP > 1$ 的特征较为重要, VIP 值越大, 该特征的重要性越高。在其他学科领域相关研究中, Zhou R 等^[4] 探索酱香型白酒年份标签追溯, 使用随机森林变量重要性、VIP 等识别老式标签的候选特征子集。An L 等^[5] 对小麦冠层白粉病评估的研究中, 分别采用 VIP、最大信息系数 (maximum information coefficient, MIC) 和基于随机森林的变量重要性度量方法对选定区间内的特征波长进行优化, 最后采用偏最小二乘回归 (partial least squares regression, PLSR) 估算模型, 并通过比较各模型性能选出最佳模型。Peng L 等^[6] 在筛选不同品种苍术挥发性有机物的研究中, 采用正交偏最小二乘判别分析模型筛选潜在生物标志物, 并根据 $VIP \geq 1.2$ 确定 24 种 VOCs 为关键差异化合物。

然而, VIP 值为 1 实际上只是均值, 是相对重要的选择参考点, $VIP < 1$ 的特征也可能对模型性能有影响。Li M 等^[7] 提出多种特征选择策略, 最后用最小的均方根误差 (minimum root mean square error, minRMSE) 和最大的决定系数 (R^2) 讨论预测性能。

因此, 本文以最低的均方根误差 (root mean square error, RMSE)^[8-9] 为主要准则, 通过偏最小二乘法获得特征的 VIP 值, 再以 VIP 值对特征重要性排序, 最后通过偏最小回归法、前向搜索法, 确定特征子集。该方法不仅考虑了特征对模型性能的影响, 还优先选择 VIP 值较高的特征, 并将其用于中药复方药效物质的筛选中, 能够进一步缩小研究范围, 有利于深入探索中药复方的量效关系。

2 基于均方根误差最小准则的偏最小二乘法

偏最小二乘法^[2-3] 技术成熟、优势明显。本文以均方根误差最小为主要准则, 通过偏最小二乘法获得特征 VIP 值, 再以 VIP 值对特征重要性排序, 最后通过偏最小二乘回归法、前向搜索法, 以均方根误差最小, 交叉性验证 (cross validation, CV) 及调整交叉性验证 (adjust cross validation, adjCV) 最好为标准, 确定特征子集。

基于模型性能的偏最小二乘法特征选择算法步骤如下。第 1 步: 读取数据。第 2 步: 数据标准化。第 3 步: 计算特征的 VIP 值。偏最小二乘法回归, 获得回归模型的最小均方根误差时的主成分个数、特征 VIP 值。第 4 步: 重新组织数据。按照特征 VIP 值从大到小, 重新组织原始数据, 建立偏最小二乘回归模型, 得到回归均方根误差, 为后面设置最小均方根误差作参考。第 5 步: 设置初始最小均方根误差。第 6 步: 偏最小二乘法回归, 获得回归的最小均方根误差和最佳特征子集。循环迭代, 每次引入一个特征, 偏最小二乘法回归, 计算回归的最小均方根误差, 将最小均方根误差及此时的特征数保存起来, 直到所有特征引入完, 记录最小均方根误差时的特征子集。第 7 步: 交叉验证。用最小特征子集, 再次建立偏最小二乘法回归模型。算法

流程, 见图 1。

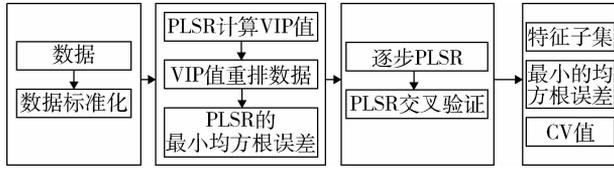


图 1 算法流程

3 实验

3.1 实验数据

选取 4 份中药复方药效实验数据集, 其中, 大承气汤配比治疗急性胰腺炎^[10-11]有 9 个药效成分, 8 个药效指标, 共 13 个样本。麻杏石甘汤^[12-15]治咳有 8 个药效成分, 1 个药效指标, 共 12 个样本。麻杏石甘汤平喘有 8 个药效成分, 2 个药效指标, 共 13 个样本。麻杏石甘汤退热有 8 个药效成分, 3 个药效指标, 共 13 个样本。

大承气汤^[10-11]血清的药物成分: 大黄素 (aloe emodin, AE), 大黄酸 (emodin), 大黄酚 (rhein), 芦荟大黄素 (chrysophanol), 大黄素甲醚 (emodin methyl ether, EME), 厚朴酚 (magnolol), 和厚朴酚 (honokiol), 橙皮苷 (hesperidin), 橙皮素 (hesperetin)。药效指标: 血清钙离子 (calciumion, Ca²⁺), 血清淀粉酶 (amylase, AMY), 白介素-6 (interleukin-6, IL-6), 白介素-10 (interleukin-10, IL-10), 淋巴细胞功能关联抗原 1a (lymphocyte function associated antigen 1 alpha, LFA1a), 胰脂肪酶 (pancreatic lipase, PL), 肺脏指数 (organ indicators, OI), 生存率 (survival rate, SR)。

麻杏石甘汤^[13-15]血清的药物成分: 麻黄碱 (ephedrine), 伪麻黄碱 (pseudoephedrine), 甲基麻黄碱 (methylephedrine), 苦杏仁苷 (amygdalin), 野黑樱苷 (prunasin), 甘草苷 (liquiritin), 甘草素 (liquiritigenin), 甘草次酸 (glycyrrhetic acid)。药效指标: 咳嗽次数 (cough frequency, CF), 引喘潜伏期 (latent period of inducing asthma, LPIA), 持续时间 (duration), 前列腺素 E2 (prostaglandin E2, PGE2), 体温反应指数 (temperature response

index, TRI), 6 小时发热抑制率 (6-hour fever suppression rate, ShFSR)。

3.2 实验过程 (算法代码)

采用国际公认且开放共享的 R 语言编程实现。软硬件环境为: R version 4.1.0 (2021-05-18) -- "Camp Pontanezen", Copyright (C) 2021 The R Foundation for Statistical Computing, Platform: x86_64-w64-mingw32/x64 (64-bit), 程辑包 'pls' 使用 R 版本 4.1.3 建造。种子数设置为 set.seed (555), 以及使用 plsVarSel、plot、barplot、vip、validationplot 等软件包。以药效指标 LFA1a 为例, 算法主要代码为:

```

set.seed (555)
library (pls)
library (plsVarSel)
DCQTAPLFA1a <- read.csv ("D:/DCQT/LFA1a.csv")
//读取数据
DCQTAPLFA1a <- scale (DCQTAPLFA1a) //数据标准化
DCQTAPLFA1a <- as.data.frame (DCQTAPLFA1a)
//数据格式转换
plsLFA1a <- pls (LFA1a ~ ., data = DCQTAPLFA1a,
validation = "LOO", jackknife = TRUE, method = "widekernel-
pls") //偏最小二乘回归建模
ncomp = which.min (plsLFA1aMYMvalidation-MYM-
PRESS) //均方根误差最小时的主成分个数
plsLFA1a <- pls (LFA1a ~ ., data = DCQTAPLFA1a,
ncomp, validation = "LOO", jackknife = TRUE, method = "
widekernelpls")
//均方根误差最小时的主成分个数, 建立偏最小二乘回归模型
vip <- vip (plsLFA1a, ncomp) //计算 VIP 值
ordervip <- sort (vip, decreasing = TRUE)
//按 VIP 值大小对特征排序
print (ordervip) //输出排序好的特征
barplot (ordervip, main = "LFA1a", names = names (or-
dervip), xlab = "Attributes", ylab = "Importance", col = c (2,
3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 1), las = 0, cex.axis = 0.7)
//图形化展示排序好的特征
na <- names (ordervip) //取出排序好的特征名
newdata <- DCQTAPLFA1a [na]
//排序好的特征形成新的数据集
Y <- subset (DCQTAPLFA1a, select = c (LFA1a))
//取出指定的因变量
  
```

```
total <- cbind (Y, newdata) //特征与因变量合并的数据集
minRMSEP <- 100.0
// minRMSEP 取一个初始值, 可根据实际需要调整
for (i in 2: 10) {
totalLFA1a <- total [, 1: i]
set. seed (555)
plsmin <- pls (LFA1a ~., data = totalLFA1a, validation = "LOO", jackknife = TRUE, method = "widekernelpls")
ncomp = which. min (plsminMYMvalidationMYMPRESS)
plsmin <- pls (LFA1a ~., data = totalLFA1a, ncomp, validation = "LOO", jackknife = TRUE, method = "widekernelpls")
if ( minRMSEP > min ( plsminMYMvalidationMYMPRESS))
{minRMSEP <- min ( plsminMYMvalidationMYMPRESS)
letter <- i
```

```
}
} //循环是对排序好的特征与因变量合并的数据集, 按前面方法重新建模, 前向搜索特征子集
print (minRMSEP) //输出最佳结果时的均方根误差最小值
print (i - 1) //输出特征子集个数
```

3.3 筛选中药复方实验数据药效物质

3.3.1 大承气汤治疗急性胰腺炎实验结果 大承气汤治疗急性胰腺炎部分药效指标的药效物质筛选情况, 见图2。(A)、(C)、(E)分别为药效指标淋巴细胞功能关联抗原1a、白介素-6、白介素-10对应的药物成分VIP值结果; (B)、(D)、(F)分别为各药效指标回归均方根误差最小时, 主成分数、CV及adjCV结果。

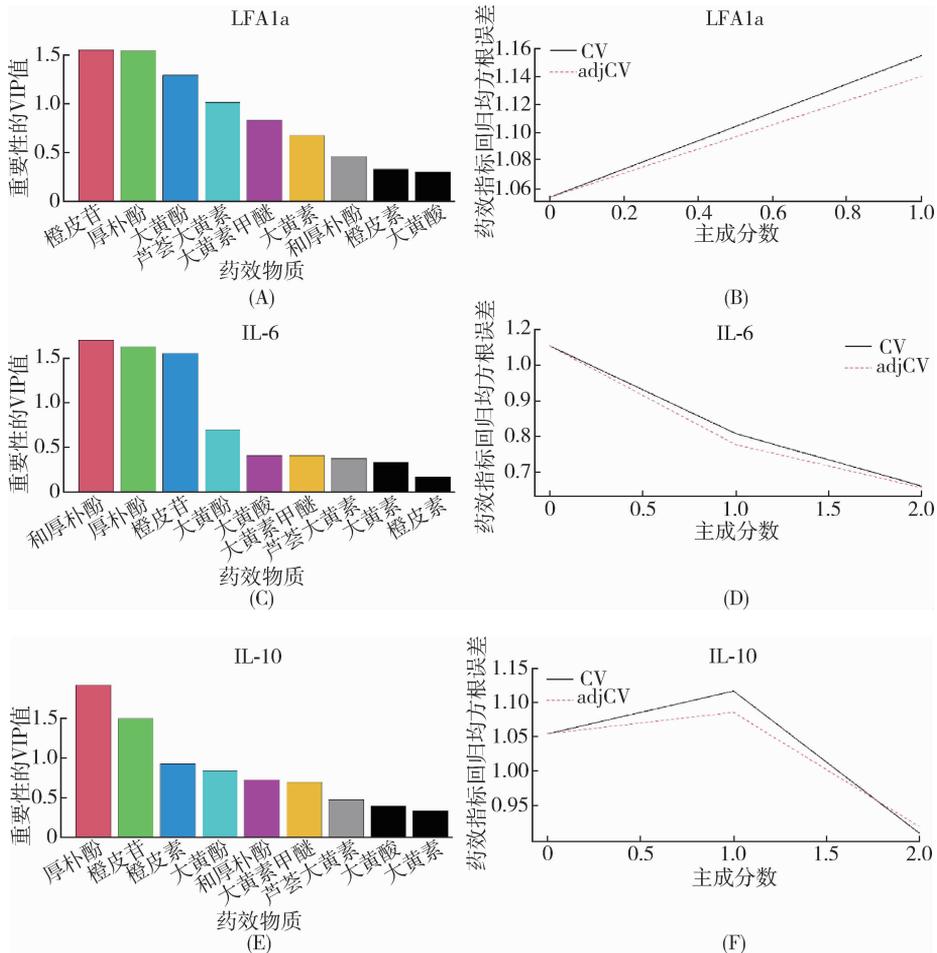


图2 大承气汤治疗急性胰腺炎实验数据的药效物质筛选结果(部分)

大承气汤治疗急性胰腺炎药效指标的药效物质筛选结果汇总, 见表1。经过计算, 药效物质大黄素、

大黄酸、大黄酚、芦荟大黄素、大黄素甲醚、厚朴酚、和厚朴酚、橙皮苷、橙皮素对药效指标血清淀粉粉

酶、胰脂肪酶、淋巴细胞功能关联抗原 1a、白介素 -6、白介素 -10、血清钙离子、肺脏指数、生存率

均有贡献, 最小均方根误差分别为 8. 632、12. 095、8. 793、3. 117、6. 637、7. 737、12. 791、4. 937。

表 1 PLS 计算药效指标对应的药效物质 VIP 值

药效物质	血清淀粉酶	胰脂肪酶	淋巴细胞功能关联抗原 1a	白介素 -6	白介素 -10	血清钙离子	肺脏指数	生存率
大黄素	0. 038	0. 456	0. 674	0. 330	0. 332	0. 284	0. 206	0. 865
大黄酸	0. 152	0. 567	0. 300	0. 406	0. 392	0. 879	0. 725	0. 798
大黄酚	0. 883	0. 077	1. 289	0. 694	0. 839	0. 519	0. 338	0. 595
芦荟大黄素	0. 035	0. 428	1. 012	0. 373	0. 473	0. 498	0. 983	0. 803
大黄素甲醚	0. 508	0. 366	0. 829	0. 405	0. 697	0. 443	1. 248	0. 809
厚朴酚	2. 010	1. 430	1. 539	1. 623	1. 920	1. 565	0. 943	1. 392
和厚朴酚	0. 138	1. 740	0. 457	1. 697	0. 725	1. 069	2. 094	0. 698
橙皮苷	1. 807	1. 401	1. 547	1. 549	1. 500	1. 637	0. 127	1. 557
橙皮素	0. 781	1. 056	0. 330	0. 164	0. 929	1. 078	0. 708	1. 054

3.3.2 麻杏石甘汤实验结果 麻杏石甘汤治咳实验数据结果, 见图 3。左侧为止咳次数对应的药物

成分 VIP 值结果; 右侧为止咳次数回归均方根误差最小时, 主成分数、CV 及 adjCV 结果。

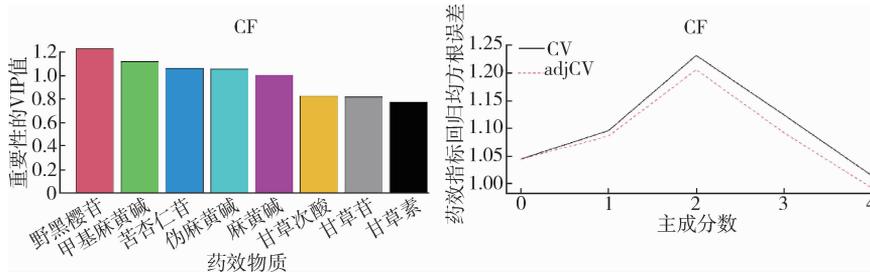


图 3 麻杏石甘汤治咳实验数据的药效物质筛选结果

麻杏石甘汤平喘实验数据结果, 见图 4。(A)、(C) 分别为药效指标持续时间、引喘潜伏期对应的药物成分 VIP 值结果; (B)、(D) 分别为药效指标

持续时间、引喘潜伏期回归均方根误差最小时, 主成分数、CV 及 adjCV 结果。

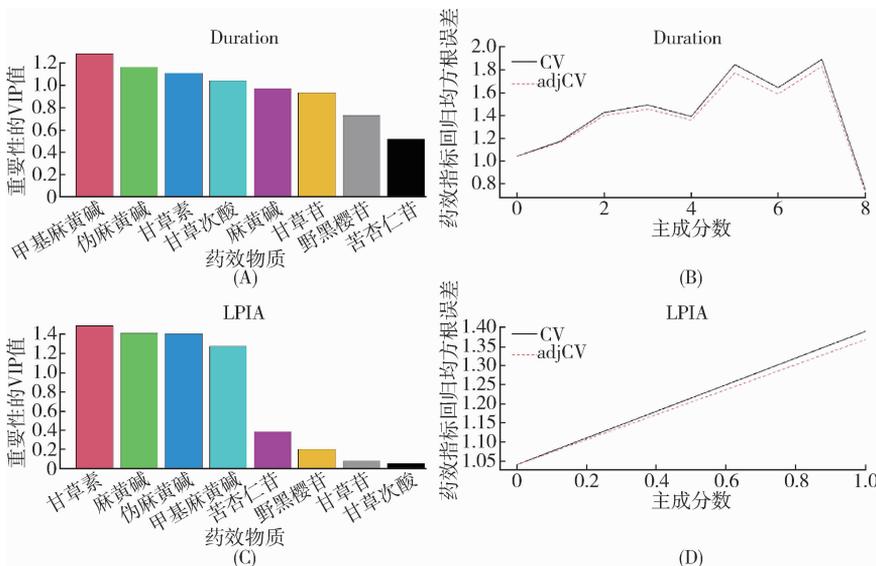


图 4 麻杏石甘汤平喘实验数据的药效物质筛选结果

麻杏石甘汤退热实验数据结果，见图 5。左侧为药效指标前列腺素 E2 对应的药物成分 VIP 值结

果；右侧为前列腺素 E2 回归均方根误差最小时，主成分数、CV 及 adjCV 结果。

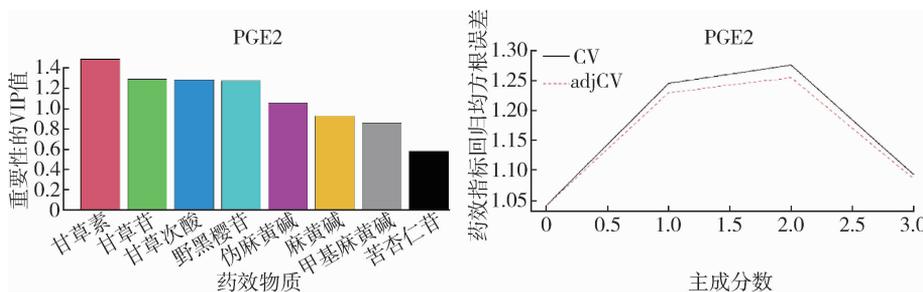


图 5 麻杏石甘汤退热实验数据的药效物质筛选结果（部分）

麻杏石甘汤实验数据药效指标的药效物质筛选结果汇总，见表 2。经过计算，药效物质麻黄碱、伪麻黄碱、甲基麻黄碱、苦杏仁苷、野黑樱苷、甘草苷、甘草素、甘草次酸对药效指标咳嗽

次数、引喘潜伏期、持续时间、前列腺素 E2、体温反应指数、6 小时发热抑制率均有贡献，最小均方根误差分别为 8.587、4.587、15.738、14.656、5.163、6.237。

表 2 PLS 计算药效指标对应的药效物质 VIP 值

药效物质	治咳（咳嗽次数）	平喘		退热		
		引喘潜伏期	持续时间	前列腺素 E2	体温反应指数	6 小时发热抑制率
麻黄碱	1.009	1.411	0.976	0.822	1.494	1.497
伪麻黄碱	1.058	1.406	1.172	0.932	1.428	1.397
甲基麻黄碱	1.123	1.275	1.288	0.759	1.447	1.397
苦杏仁苷	1.063	0.383	0.517	0.515	0.703	0.717
野黑樱苷	1.231	0.201	0.731	1.130	0.425	0.585
甘草苷	0.819	0.077	0.936	1.143	0.561	0.534
甘草素	0.775	1.486	1.115	1.317	0.560	0.495
甘草次酸	0.827	0.051	1.047	1.139	0.577	0.686

4 讨论

4.1 大承气汤治疗急性胰腺炎实验数据分析

分析前文图 2、表 1 可发现以下现象。药效指标血清淀粉酶：有 2 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 1 时的回归均方根误差最小。药效指标淋巴细胞功能抗原 1a：有 4 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 1 时的回归均方根误差最小。药效指标胰脂肪酶：有 4 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 1 时的回归均方根误差最小。

药效指标白介素 -6：有 3 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 2 时的回归均方根误差最小。药效指标白介素 -10：有 2 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 2 时的回归均方根误差最小。药效指标血清钙离子：有 4 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 2 时的回归均方根误差最小。药效指标肺脏指数：有 4 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 2 时的回归均方根误差最小。药效指标生存率：有 3 个药物成分的 VIP 值大于 1，药物成分数为 9 时回归效果最好，主成分数为 2 时的回归均方根误差最

小。综上,在大承气汤治疗急性胰腺炎实验数据中,药物成分作用不同的药效指标重要性有所差异;VIP值大于1的药物成分,只是相对重要的,VIP值小于1的药物成分也提高回归性能。

4.2 麻杏石甘汤实验数据分析

分析前文图3—图5、表2可发现以下现象。药效指标咳嗽次数:有5个药物成分的VIP值大于1,药物成分数为8时回归效果最好,主成分数为4时的回归均方根误差最小。药效指标持续时间:有4个药物成分的VIP值大于1,药物成分数为8时回归效果最好,主成分数为8时的回归均方根误差最小。药效指标引喘潜伏期:有4个药物成分的VIP值大于1,药物成分数为8时回归效果最好,主成分数为1时的回归均方根误差最小。药效指标前列腺素E2:有4个药物成分的VIP值大于1,药物成分数为8时回归效果最好,主成分数为3时的回归均方根误差最小。药效指标体温反应指数:有3个药物成分的VIP值大于1,药物成分数为8时回归效果最好,主成分数为3时的回归均方根误差最小。药效指标6小时发热抑制率:有3个药物成分的VIP值大于1,药物成分数为8时回归效果最好,主成分数为3时的回归均方根误差最小。综上,在麻杏石甘汤实验数据中,药物成分作用不同的药效指标重要性有所差异;VIP值大于1的药物成分,只是相对重要的,VIP值小于1的药物成分也提高回归性能。

通过以上分析,传统的偏最小二乘法通过VIP值大于1的方法筛选药效物质,适用于选出较重要的药效物质,而本文提出的以均方根误差最小为主要准则的偏最小二乘法筛选药效物质,不仅能选择出较重要的药效物质,而且能把对药效有贡献的药效物质保留下来,有利于更全面地观察和分析中药的作用机理。

5 结语

偏最小二乘法具有独特优势,其采用VIP值大于1作为选择特征的标准,在某些实际应用中,可

以选出较重要的特征,然而,VIP值为1实际上只是所有特征重要性的均值,是相对重要的选择参考点,VIP值小于1的特征也可能对模型性能有影响。

针对该问题,本文以均方根误差最小为主要目标,通过偏最小二乘法获得特征VIP值,再以VIP值对特征重要性排序,最后通过偏最小二乘回归法、前向搜索法,以均方根误差最小,交叉性验证结果最好为标准,确定特征子集。这种方法既考虑了特征对模型性能的影响,又优先考虑VIP值大的特征,并将其用于中药复方药效物质的筛选,目的是将那些对药效有贡献的药物成分筛选出来,作为后续研究的药效物质。实验结果表明,通过偏最小二乘法的回归前向搜索法(均方根误差最小)分析,VIP值大于1的特征,只是相对比较重要。所以,只凭VIP值大于1作为特征选择的标准,还不足以全面表观药物成分对药效的作用,也不利于量效关系分析。在实际研究中,如果试图寻找较重要的药效物质,建议可以采用VIP值大于1的准则;如果试图较全面地反映药效物质对药效的作用,可以采用均方根误差最小准则。

作者贡献: 聂斌负责研究设计、数据分析、论文撰写与修订;杜建强负责研究设计与指导;余日跃、陈银芳负责中药实验数据提供。

利益声明: 所有作者均声明不存在利益冲突。

参考文献

- 1 肖培根,肖小河. 21世纪与中药现代化 [J]. 中国中药杂志, 2000 (2): 3-6.
- 2 王惠文,吴载斌,孟洁. 偏最小二乘回归的线性与非线性方法 [M]. 北京:国防工业出版社, 2006.
- 3 杜建强,聂斌,熊旺平. 偏最小二乘法优化及其在中医药领域的应用研究 [M]. 北京:清华大学出版社, 2021.
- 4 ZHOU R, CHEN X, XU D, et al. Hybrid wavelength selection strategy combined with ATR-FTIR spectroscopy for preliminary exploration of vintage labeling traceability of sauce-flavor baijiu [J]. Spectrochimica acta part A - molecular and biomolecular spectroscopy, 2024, 321: 124691.
- 5 AN L, LIU Y, LIU G, et al. Estimation on powdery mildew of wheat canopy based on in-situ hyperspectral responses

- and characteristic wavelengths optimization [J]. Crop protection, 2024, 184: 106804.
- 6 PENG L, WANG X, HE M, et al. Discrimination and screening of volatile metabolites in atracylodus rhizoma from different varieties using headspace solid - phase microextraction - gas chromatography - mass spectrometry and headspace gas chromatography - ion mobility spectrometry, and ultra - fast gas chromatography electronic nose [J]. Journal of chromatography A, 2024, 1725: 464931.
 - 7 LI M, FENG Y, YU Y, et al. Quantitative analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons in soil by infrared spectroscopy combined with hybrid variable selection strategy and partial least squares [J]. Spectrochimica acta part A: molecular and biomolecular spectroscopy, 2021, 257: 119771.
 - 8 刘全民, 叶孝意, 宋立忠, 等. 基于迭代 RMSE 法的约束阻尼板动力特性分析 [J]. 西南交通大学学报, 2023, 58 (6): 1311 - 1317, 1431.
 - 9 LIU X, YAN C, AN D, et al. Rapid quantitative analysis of rare earth elements Lu and Y in rare earth ores by laser induced breakdown spectroscopy combined with iPLS - VIP and partial least squares [J]. RSC advances, 2023, 13 (22): 15347 - 15355.
 - 10 乔丹丹, 余日跃, 于小娟, 等. 大承气汤配伍治疗急性胰腺炎的实验研究 [J]. 辽宁中医杂志, 2017, 44 (1): 190 - 192.
 - 11 申峰云, 魏惠珍, 孙勇兵, 等. Uplc - Ms/Ms 同时测定大承气汤大鼠血浆中 9 种活性成分的含量 [J]. 中国中药杂志, 2014, 39 (12): 2345 - 2350.
 - 12 廖群, 徐国良, 李冰涛, 等. 代谢物组学整体效应探讨麻杏石甘汤对发热大鼠退热的量效关系研究 [J]. 中药药理与临床, 2015, 31 (3): 1 - 4.
 - 13 黄丽萍, 王条敏, 杨华永, 等. 均匀设计在筛选麻杏石甘汤有效成分及其配比研究中的应用 [J]. 辽宁中医杂志, 2015, 42 (1): 151 - 153.
 - 14 李文宏, 徐国良, 王跃生, 等. 麻杏石甘汤平喘量 - 效关系研究 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2014, 20 (9): 171 - 174.
 - 15 崔艳茹, 屈飞, 徐镜, 等. 配伍剂量变化对麻杏石甘汤解热作用的影响 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2014, 20 (6): 122 - 126.

《医学信息学杂志》编辑部严正声明

近期, 有不法人员冒充《医学信息学杂志》编辑部工作人员, 以核对收录信息、审核数据、发送录用通知等名义, 微信要求添加好友或发邮件, 进而收取稿件处理费等。以上行为严重侵害了广大作者、读者及本刊的权益, 编辑部保留追究其法律责任的权利。本刊特此严正声明: (1) 《医学信息学杂志》暂不通过微信进行正式沟通, 未委托任何个人或机构代理收稿、征稿等业务, 唯一投稿渠道为杂志官网 <http://www.yxxxx.ac.cn> 在线投稿, 点击“作者投稿”按钮注册后即可投稿。杂志官方邮箱为 yxxxx@imicams.ac.cn 和 yxxxxzz01@163.com, 不会通过其他邮箱发送通知或对外联系。(2) 《医学信息学杂志》是中国知网、万方数据、维普网全文收录期刊。期刊出版后 1 个月左右可在上述数据库查阅论文。(3) 《医学信息学杂志》编辑部目前收取版面费仅有对公转账一种方式。开户行: 中国建设银行北京雅宝路支行; 开户名称: 中国医学科学院医学信息研究所; 银行账号: 11001028400059856368。

敬请广大作者、读者提高警惕, 请勿向任何个人账户支付任何费用, 以免造成不必要的损失。必要时建议通过报警等方式维护正当权益。遇到任何问题可拨打联系电话 010 - 52328686, 52328687 与编辑部取得联系。

《医学信息学杂志》编辑部