

基于多源智能感官信息融合技术的中药寒热药性分类辨识方法研究

薛 潭^{1,2}, 王盼盼², 李消蒙^{1,3}, 张盼盼^{1,2}, 孙嘉宁^{1,2}, 施钧瀚², 王艳丽², 桂新景^{2*}, 刘瑞新^{1,2,4,5,6*}

1. 河南中医药大学药学院, 河南 郑州 450046

2. 河南中医药大学第一附属医院 药学部, 河南 郑州 450003

3. 河南中一医药经营有限公司, 河南 郑州 450000

4. 河南省中药临床应用、评价与转化工程研究中心, 河南 郑州 450000

5. 河南中医药大学 呼吸疾病中医药防治省部共建协同创新中心, 河南 郑州 450046

6. 中药制剂与新药开发教育部工程研究中心, 北京 100029

摘要: 目的 利用多源智能感官信息融合技术建立中药寒热预测模型, 为中药寒热药性评价提供新的方法学参考。方法 根据《中国药典》2020 年版一部中性味与归经筛选出 97 种具有寒热属性(寒、微寒、凉为寒; 温、微温、热为热)的中药, 以所选样品寒热药性作为标签信息(Y); 通过 PEN3 型电子鼻、SA402B 型电子舌、ASTREE 型电子舌采集上述样品的传感器数据矩阵为自变量(X); 分别利用判别分析(discriminant analysis, DA)、主成分分析-判别分析(principal component analysis-discriminant analysis, PCA-DA)、偏最小二乘-判别分析(partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA)、支持向量机(support vector machine, SVM)、最小二乘支持向量机(least square support vector machine, LS-SVM) 5 种算法建立 $Y=F(X)$ 关系的单源、多源分类辨识模型, 以正判率为指标优选模型。结果 经留一法交互验证, 寒热二分类基于单源信息融合最优模型正判率为 81.44% (PEN3/PLS-DA), 基于多源信息融合辨识最优模型正判率为 85.57% (ASTREE+SA402B/LS-SVM), 多源信息融合后模型的正判率有所提高。结论 该研究利用多源智能感官信息融合技术可以在一定程度上提高中药寒热药性分类的辨识, 为进一步将其应用于中药药性现代化的研究提供新的参考。

关键词: 多源信息融合; 人工智能感官; 中药四气; 寒热药性; 辨识模型

中图分类号: R283.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2670(2025)15-5407-12

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2025.15.008

Classification and identification of cold and hot medicinal properties of traditional Chinese medicine based on multi-source intelligent sensory information fusion

XUE Tan^{1,2}, WANG Panpan², LI Xiaomeng^{1,3}, ZHANG Panpan^{1,2}, SUN Jianing^{1,2}, SHI Junhan², WANG Yanli², GUI Xinjing², LIU Ruixin^{1,2,4,5,6}

1. College of Pharmacy, Henan University of Chinese Medicine, Zhengzhou 450046, China

2. Pharmaceutics Department of the First Affiliated Hospital of Henan University of Chinese Medicine, Zhengzhou 450003, China

3. Henan Zhongyi Pharmaceutical Co., Ltd., Zhengzhou 450000, China

4. Henan Traditional Chinese Medicine Clinical Application, Evaluation and Transformation Engineering Research Center, Zhengzhou 450000, China

5. Collaborative Innovation Center for Chinese Medicine and Respiratory Disease Co-constructed by Henan Province & Ministry of Education of P. R. China, Henan University of Chinese Medicine, Zhengzhou 450046, China

6. Traditional Chinese Medicine Preparation and New Drug Development Engineering Research Center of Ministry of Education,

收稿日期: 2025-03-02

基金项目: 河南省自然科学基金杰出青年科学基金项目(242300421023); 河南省卫生健康中青年学科带头人专项(HNSWJW-2020014); 2022 年青年岐黄学者培养项目([2022]256); 河南省卫生健康委员会国家中医临床研究基地科研专项课题(2021JDZY106); 河南省卫生健康委国家中医临床研究基地科研专项(2021JDZY014)

作者简介: 薛 潭(2000—), 男, 硕士研究生, 从事中药临床应用现代化关键技术研究。E-mail: 164782318@qq.com

***通信作者:** 刘瑞新(1980—), 男, 主任药师, 博士生导师, 博士, 从事中药临床现代化关键技术研究。E-mail: liuruixin7@163.com

桂新景(1991—), 男, 主管药师, 博士, 从事中药新制剂研发及质量控制与评价研究。E-mail: guixinjing1991@126.com

Beijing 100029, China

Abstract: Objective To establish a cold and heat prediction model of traditional Chinese medicine by using multi-source intelligent sensory information fusion technology, and provide a new methodological reference for the evaluation of cold and heat properties of traditional Chinese medicine. **Methods** According to the neutral flavor and meridian tropism of the 2020 edition of the *Pharmacopoeia of the People's Republic of China*, 97 kinds of traditional Chinese medicines with cold and hot properties (cold, slightly cold, and cool is classified as cold; warm, slightly warm, and hot is classified as hot) were selected, the cold and hot medicinal properties of the selected samples were used as label information (Y). The sensor data matrix of the above samples collected by PEN3 electronic nose, SA402 B electronic tongue and ASTREE electronic tongue was the independent variable (X). Discriminant analysis (DA), principal component analysis-discriminant analysis (PCA-DA), partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA), support vector machine (SVM) and least squares support vector machine (LS-SVM) were used to establish the single-source and multi-source classification identification models of $Y = F(X)$ relationship, and the model was optimized with the positive discrimination rate as the index. **Results** Through the leave-one-out cross-validation method, the correct rate of the optimal model based on single-source information fusion is 81.44% (PEN3/PLS-DA), and the correct rate of the optimal model based on multi-source information fusion is 85.57% (ASTREE + SA402B/LS-SVM). The correct rate of the model after multi-source information fusion is improved. **Conclusion** In this study, multi-source intelligent sensory information fusion technology can improve the identification of cold and heat property classification of traditional Chinese medicine to a certain extent, and provide a new reference for further application in the modernization of traditional Chinese medicine.

Key words: multi-source information fusion; artificial intelligence senses; four *Qi* of Chinese medicine; cold and heat medicinal properties; identification model

“药性”一词最早见于《神农本草经》之中，书中有云“药性有宜散者，宜丸者，宜水煮者，宜酒渍者……并随药性，不得违约”，狭义的药性即寒、热、温、凉、平的不同属性，统称为“四气”，其中温与热、寒与凉只体现在量变，尚未达到质变，只是一种逐级划分的概念，而平性药具有寒热双向特点，介于二者之间，因此，四气亦可归纳为寒热两性^[1-3]。寒热药性辨识一直是中医药人关注的重点和难点，也是中医临床需要解决的热点问题。传统的药性辨识方法中口尝法主观性强且具有一定的局限性^[4-5]；取象比类法具有特殊性及典型性^[6-7]，不能被广泛应用；临床功效反推法虽准确性高，但时效性较差^[8]，不能很好的适应现代化需求。

因此，许多学者尝试从现代角度进行研究，如周韶华等^[9]从生物热力学角度出发，提出“中医药热力学观”建立了基于生物热力学表达的中药寒热药性评价方法；顾浩等^[10]通过对药性特征进行量化，建立中药药性特征数据库，利用统计学分析和模型识别方法将量化数据进行了较深入的数据挖掘和整理；王振国团队提出中药四性“性-效-物质三元论”假说^[11]，指出中药寒热药性的主要依据是药效，中药的物质基础决定药效。随着科技的不断发展，人工智能感官 (artificial intelligence sense, AIS) 技术应运而生，它是模拟人体感官 (眼、舌、鼻等)

的一类仿生学技术^[12]，因其灵敏度高、可靠性强、重复性好、整体性等特点^[13]，广泛应用于医学、食品等多个领域^[14]，在鉴别中药材的种类、产地、储存年限以及药物的掩味^[15]、质量评价等方面也有良好成效。与普通的化学仪器分析不同，它可将传统的评价指标“气味、颜色、质地”等特征进行客观量化，得到的结果是基于样品的整体信息^[16-19]。因此，AIS 为中药寒热药性的辨识研究提供了一种新的可能。本研究拟基于多源智能感官信息融合技术，获取 97 种中药的智能感官信息，利用相关化学计量方法构建寒热二分类模型，旨在探讨智能感官技术和多源信息融合技术用于中药寒热二分类辨识研究中的可行性。

1 仪器与材料

1.1 仪器

LCD-A200 型电子天平，福州华志科学仪器有限公司；BSA224S-CW 型万分之一电子天平，瑞士 Sartorius 有限公司；FW-100 型高速万能粉碎机，北京科伟永兴仪器有限公司；药典筛，四号筛，浙江上虞市道墟五四仪器厂；多功能养生壶，深圳市正云科技有限公司；HK250 型科导台式超声清洗器，上海科导超声仪器有限公司；HHS 型电热恒温水浴锅、TD5M 型高速离心机，上海卢湘仪离心机仪器有限公司；PEN3 型电子鼻 (表 1)，德国 Airsense

公司; SA402B 型电子舌 (表 2), 日本 Insent 公司; Matlab2020b 软件及 classification_toolbox_5.0、LS-ASTREE 型电子舌 (表 3), 法国 Alpha M.O.S. 公司; SVMlabv1_8_R2009b_R2011a 工具箱。

表 1 PEN3 电子鼻传感器敏感物质
Table 1 Sensitive substances of PEN3 electronic nose sensor

传感器编号	传感器代码	敏感物质	传感器编号	传感器代码	敏感物质
1	W1C	芳烃化合物	6	W1S	烷类
2	W5S	氮氧化合物	7	W1W	硫化合物
3	W3C	氨、芳香分子	8	W2S	醇、部分芳香族化合物
4	W6S	氢化物	9	W2W	芳烃化合物、硫的有机化合物
5	W5C	烯烃、芳族, 极性分子	10	W3S	烷类和脂肪族

表 2 日本 SA402B 型电子舌 8 根传感器与 11 种味觉值的匹配信息
Table 2 Matching information between eight sensors of Japanese SA402B electronic tongue and 11 taste values

传感器	对应的味觉	味觉信息		传感器	对应的味觉	味觉信息	
		先味	回味			先味	回味
C00	酸性苦味	苦味 (bitterness)	酸性苦味回味 (aftertaste-B)	GL1	甜味	甜味 (sweetness)	×
AN0	碱性苦味	×	碱性苦味回味 (B-bitterness2)	CA0	酸味	酸味 (sourness)	×
BT0	碱基盐类苦味	×	碱基盐类苦味回味 (H-bitterness)	CT0	咸味	咸味 (saltness)	×
AE1	涩味	涩味 (astringency)	涩味回味 (aftertaste-A)	AAE	鲜味	鲜味 (umami)	丰富度 (richness)

“×”表示无味觉信息值。
“×” indicates no taste information value.

表 3 法国 ASTREE 型电子舌传感器代表的味觉信息值
Table 3 Taste information value represented by french ASTREE electronic tongue sensor

序号	传感器名称	味觉信息	序号	传感器名称	味觉信息
1	SRS	酸味	5	SPS	—
2	GPS	—	6	SWS	甜味
3	STS	咸味	7	BRS	苦味
4	UMS	鲜味			

1.2 材料

从《中国药典》2020 年版中选取 97 种中药饮片, 由河南中医药大学第一附属医院在中药鉴定方向工作多年有丰富经验的施钧瀚副主任医师对所购买的中药饮片进行初步筛选, 根据结果将存在争议的饮片筛选出, 按照《中国药典》2020 年版项下性状鉴别、显微鉴别、薄层鉴别等方法对其进行检验与验证, 若不符合要求, 仍需购买新的样本作为补充, 最终确定所有样本均为正品且符合《中国药典》2020 年版规定, 样品信息详见表 4。

2 方法

2.1 标签信息 (Y) 的获取

参照《中国药典》2020 年版一部项下外观性状描述及检查方法依次对 97 种样品进行性状、显微、薄层等鉴别。建模自变量为 97 种样品的不同传感器信息矩阵, 标签信息 Y 为依据药典项下性味分类结

果。其中, 将凉、微寒、寒分为寒性, 将温、微温、热分为热性, 1~65 号为寒性; 66~97 号为热性。

2.2 智能感官信息 (X) 的获取

2.2.1 基于 PEN3 电子鼻获取 X 值 取适量样品, 置万能粉碎机打碎, 过 4 号筛, 取样本粉末 2 g, 每个样本各取 3 份, 标记后置于 25 mL 的烧杯中, 双层保鲜膜封口, 放置 30 min 测试。采用直接顶空吸气法直接将进样针头插入含样品的密封样品杯中, 电子鼻进行测定。采样时间为 1 s/组; 传感器自清洗时间为 80 s; 传感器归零时间为 5 s; 样品准备时间为 5 s; 进样流量为 400 mL/min; 分析采样时间为 60 s。每个样品采集 3 次, 取平均值, 得到 10 根传感器嗅觉信息矩阵 X (97×10)。

2.2.2 基于 SA402B 型电子舌获取 X 值 根据《中国药典》2020 年版一部规定用药量范围平均值 (如苦参用量为 4.5~9.0 g, 则取 6.75 g) 的 10 倍量制备药品, 将其置于煎药壶中, 浸泡 30 min 进行煎煮, 一煎、二煎完成后合并滤液, 混匀, 冷却至室温后 4 000 r/min 离心 15 min, 取上清液, 定容至 1 000 mL, 取 100 mL 灌装、压盖、高温蒸汽灭菌后备用 (煎药所用水均为纯水)。活化、校准 SA402B 型电子舌传感器后进行测试。取待测样品每个 35 mL, 采样时间为 120 s, 清洗 2 次, 每次 10 s, 每个样品重复测量 5 次, 取后 3 次测试结果的平均值作为测

表 4 97 种样品来源信息
Table 4 Source information of 97 samples

编号	名称	类别	购买单位	编号	名称	类别	购买单位	编号	名称	类别	购买单位	编号	名称	类别	购买单位
1	白矾	寒	A	26	莲子心	寒	A	51	篇蓄	微寒	A	76	大枣	温	A
2	白蒺	寒	A	27	龙胆	寒	A	52	赤芍	微寒	A	77	丁香	温	A
3	白茅根	寒	A	28	漏芦	寒	A	53	丹参	微寒	A	78	豆蔻	温	A
4	百合	寒	A	29	芦根	寒	A	54	槐花	微寒	A	79	藁本	温	A
5	板蓝根	寒	A	30	马齿苋	寒	A	55	连翘	微寒	A	80	红花	温	A
6	北刘寄奴	寒	A	31	密蒙花	寒	A	56	射干	微寒	A	81	花椒	温	C
7	车前草	寒	A	32	牡蛎	寒	A	57	石斛	微寒	A	82	黄芪	温	A
8	川木通	寒	A	33	胖大海	寒	A	58	鱼腥草	微寒	A	83	龙眼肉	温	A
9	大黄	寒	A	34	千里光	寒	B	59	玉竹	微寒	A	84	木瓜	温	A
10	大青盐	寒	A	35	茜草	寒	A	60	薄荷	凉	A	85	闹羊花	温	B
11	大青叶	寒	A	36	瞿麦	寒	A	61	布渣叶	凉	B	86	千金子	温	B
12	淡竹叶	寒	A	37	忍冬藤	寒	A	62	冬瓜皮	凉	A	87	肉豆蔻	温	A
13	地骨皮	寒	A	38	桑白皮	寒	A	63	钩藤	凉	A	88	沙棘	温	B
14	地黄	寒	A	39	山豆根	寒	A	64	马鞭草	凉	A	89	石榴皮	温	A
15	地龙	寒	A	40	石决明	寒	B	65	薏苡仁	凉	A	90	细辛	温	A
16	防己	寒	A	41	通草	寒	A	66	大腹皮	微温	A	91	小茴香	温	C
17	浮萍	寒	A	42	五倍子	寒	A	67	广藿香	微温	A	92	辛夷	温	A
18	胡黄连	寒	A	43	预知子	寒	A	68	荆芥	微温	A	93	徐长卿	温	A
19	虎杖	寒	A	44	泽泻	寒	A	69	山茱萸	微温	A	94	月季花	温	B
20	黄柏	寒	A	45	浙贝母	寒	A	70	生姜	微温	C	95	荜茇	热	A
21	黄连	寒	A	46	珍珠母	寒	A	71	香薷	微温	A	96	干姜	热	C
22	黄芩	寒	A	47	栀子	寒	A	72	八角茴香	温	C	97	高良姜	热	A
23	金银花	寒	A	48	竹茹	寒	A	73	白芷	温	A				
24	苦参	寒	A	49	杠板归	微寒	B	74	川芎	温	A				
25	昆布	寒	A	50	北豆根	微寒	B	75	大蒜	温	C				

A 为河南中医药大学第一附属医院；B 为河南中一医药经营有限公司；C 为河南中医药大学第三附属医院。
A is the First Affiliated Hospital of Henan University of Chinese Medicine; B is Henan Zhongyi Pharmaceutical Management Co., Ltd.; C is the Third Affiliated Hospital of Henan University of Chinese Medicine.

试结果，得到 8 根传感器输出的 11 种味觉值的信息矩阵 X (97×11)。

2.2.3 基于 ASTREE 型电子舌 X 值 样品处理同“2.2.2”项，活化、校准 ASTREE 型电子舌传感器后进行测试。取待测样品每个 35 mL，放置于电子舌仪器自带的检测杯中，设置自动进样器以实现连续采样的过程。采样时间 120 s，清洗时间 $10 \text{ s} \times 2$ 次，每个样品重复测量 5 次，取后 3 次测试结果的平均值作为测试结果。通过整理数据发现 USM 对所有样品输出值为-9 997.21，该变量对模型构建或分类无意义，故剔除该传感器信息，留下 6 根传感器，得到 6 根传感器味觉信息矩阵 X (97×6)。

2.3 辨识模型建立与优化

基于单源和多源智能感官数据辨识模型的构建参照文献^[20]。以 3 种感官采集的 97 种样本信息矩

阵为自变量 X ，以药典项下性味描述为标签信息 Y ，建立感官信号矩阵 X 和 Y 之间的关系数学模型 $Y = F(X)$ 。由于中药的特殊属性以及多种智能感官仪器采集的数据量较大，在此基础上还要节约时间成本，因此，本研究选择判别分析 (discriminant analysis, DA)、主成分分析-判别分析 (principal component analysis-discriminant analysis, PCA-DA)、偏最小二乘 - 判别分析 (partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA)、支持向量机 (support vector machine, SVM) 和最小二乘支持向量机 (least square support vector machine, LS-SVM) 5 种化学计量学方法建立感官数据的寒热二分类辨识模型，以交互验证的正判率作为模型优选指标。其中，PCA-DA 算法是一种基于主成分分析的方法，通过最大化类间方差的比率和最小化类内方差的比率来进一步

压缩高维数据，从而探索能够解释数据集主要趋势的变量的组合^[21]。LS-SVM 是 SVM 在二次损失函数形式下的一种扩展，通过求解一组线性方程代替支持向量机中复杂的二次优化问题的非线性建模方法，其保留了 SVM 处理小样本、高维、非线性问题的能力^[22]。因此，本研究利用 Matlab 2021a 进行寒热二分类建模， X 设定为以 3 种智能感官采集的 97 中样本信息矩阵， Y 值设定为“1”寒性，“2”热性，分别建立 97 个样本的 5 种化学计量学方法的二分类辨识模型，采用留一法交互验证，以模型正判率为辨识结果。

3 结果

3.1 智能感官单源辨识模型结果

3.1.1 PEN3 电子鼻结果

(1) DA 辨识结果：DA 多元正态分布检验图呈线性分布，横坐标为平方广义距离，纵坐标为卡方上侧分位数对应的检验值，约 78% 的距离小于卡方分布分位数表 0.5 对应的检验值，表明检验值在卡方分布分位数表 0.5 对应的检验值区域内分布集中（图 1），样品判别结果如表 5 所示：65 个寒性样品有 7 个被错判为热性，32 个热性样品有 15 个被判定为寒性，留一法模型交互验证正判率为 77.32%，辨识结果中无未分类样本。“class 1”代指标杆信息为 1 的分组，即寒性样品组；“class 2”代指标杆信息为 2 的分组，即热性样品组；下同。

(2) PCA-DA 辨识结果：当主成分选择 9 时，PCA-DA 模型性能达到最优，前 9 个主成分可解释样本 99% 以上变异信息。样品判别结果如表 5 所示，65 个寒性样品有 3 个被错判为热性，32 个热性样品有 21 个被判定为寒性，留一法模型交互验证正判率为

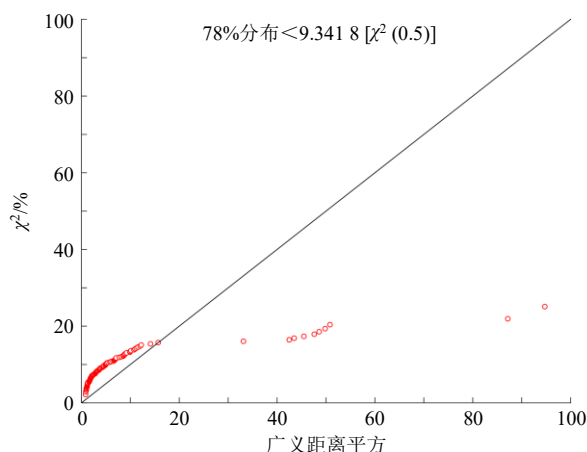


图 1 多元正态分布

Fig. 1 Multivariate normal distribution

表 5 不同模型判别结果

Table 5 Discrimination results of different models

模型	真实/预测	寒性	热性	未分类	正判率/%
DA	寒性	58	7	0	77.32
	热性	15	17	0	
PCA-DA	寒性	62	3	0	75.26
	热性	21	11	0	
PLS-DA	寒性	56	9	0	81.44
	热性	9	23	0	
SVM	寒性	58	7	0	72.16
	热性	20	12	0	
LS-SVM	寒性	59	6	0	78.35
	热性	15	17	0	

75.26%。模型主成分得分图（2-A），2 类样本在二维空间有重叠，但模型区分度相对较高，辨识结果中无未分类样品，因此基本可将寒热药性二分类样品区分开。

(3) PLS-DA 辨识结果：当潜变量个数为 9 个时模型错判率最低，所选 9 个潜变量可以解释样本 99% 以上的变异信息。PLS-DA 判别结果如表 5 所

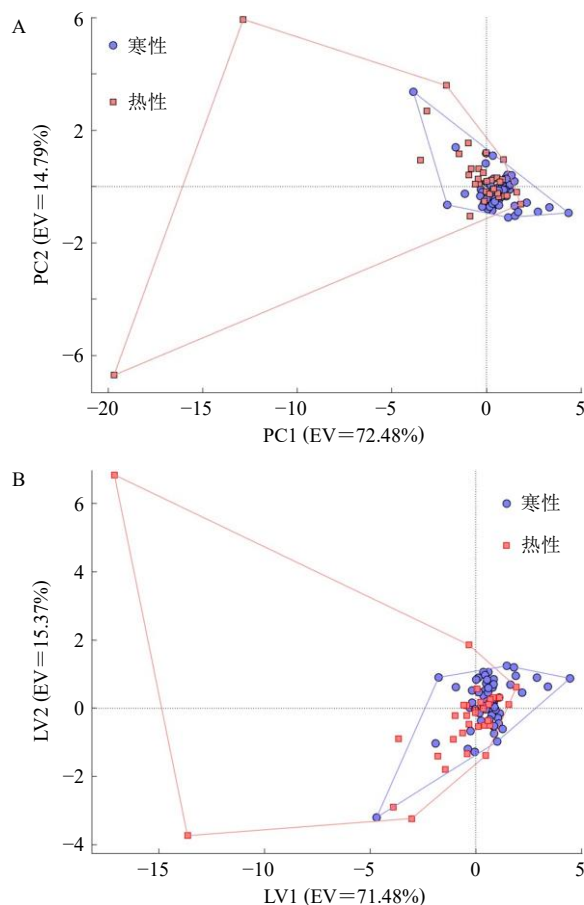


图 2 PCA-DA (A) 和 PLS-DA (B) 模型得分图

Fig. 2 Model score plots of PCA-DA (A) and PLS-DA (B)

示, 65 个寒性样品有 9 个被错判为热性, 32 个热性样品有 9 个被判定为寒性, 留一法模型交互验证正判率为 81.44%。

模型潜变量得分图 2-B, 2 类样本在二维空间内有重叠, 通过分析, 发现误判样品跨度主要在温-微温, 寒-微寒。图 3 左侧为对 2 类样本分类的受试者工作特征曲线(receiver operating characteristic curve,

ROC), 其 ROC 曲线下面积(area under the ROC curve, AUC)为 0.91, 图 3 右侧为灵敏度(sensitivity, Se)和特异性(specificity, Sp)随预测概率阈值而变化的情况, Sp 值在接近 0 时上升, Se 在接近 1 时下降, 且红蓝曲线包围的面积也较大, 二者皆表明该模型区分度较好, 辨识结果无未分类样品, 因此可作为寒热二分类药性的辨识。

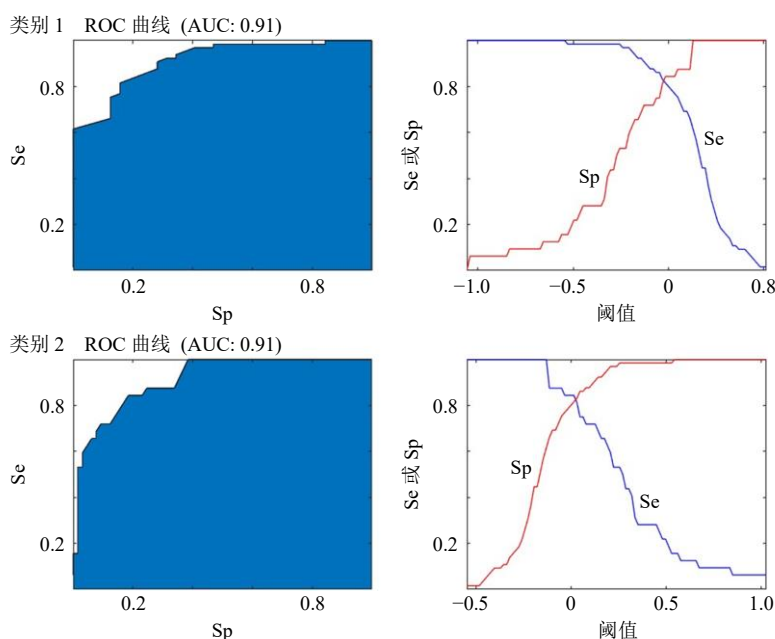


图 3 受试者操作曲线

Fig. 3 Receiver operating curve

(4)SVM 辨识结果: 在建模之前对数据进行“标准正态变换(standard normal variation, SNV)”的预处理, 列预处理方法选择“autoscaling”, 核函数选择径向基核函数(radial basis function, RBF), 预试后核参数初始值设为 0.05, cost values 初始值设为 0.1, 主成分个数应用选择“automatic(自动)”, 然后按照此参数设置优选核参数及 cost values 值, 优选结果见图 4。由参数优选的等高线图(图 4)可知, 当 cost values 值为 1, 核参数为 1.6 时, 模型错误率最小, 为 0.38。模型判别结果(表 5)模型交互验证正判率为 72.16%, 其中 65 个寒性样品 7 个被错判为热性, 32 个热性样品 20 个被判定为寒性。

(5) LS-SVM 辨识结果: 样品判别结果如表 5 所示: 经留一法交互验证对 LS-SVM 的核函数类型等参数进行优化后 LS-SVM 判别结果验证模型最优正判率为 78.35%。

3.1.2 SA402B 型电子舌结果 样品约 67%的距离小于卡方分布分位数表 0.5 对应的检验值, 满足正

态分布。按照上述建模方法对其进行分类辨识, 经留一法交互验证各模型正判率 DA、PCA-DA、PLS-DA、SVM、LS-SVM 依次为 62.89%、67.01%、57.73%、69.07%、72.16%。

3.1.3 ASTREE 型电子舌结果 样品约 61%的距离小于卡方分布分位数表 0.5 对应的检验值, 满足正态分布。按照上述建模方法对其进行分类辨识, 经留一法交互验证各模型正判率 DA、PCA-DA、PLS-DA、SVM、LS-SVM 依次为 64.95%、67.01%、68.04%、72.16%、76.29%。

3.2 智能感官多源辨识模型结果

3.2.1 SA402B 型电子舌和 ASTREE 型电子舌结果

(1) DA 辨识结果: 如图 5-A 所示, DA 多元正态分布检验图呈线性分布, 横坐标为平方广义距离, 纵坐标为卡方上侧分位数对应的检验值, 约 58%的距离小于卡方分布分位数表 0.5 对应的检验值, 表明检验值在卡方分布分位数表 0.5 对应的检验值区域内分布略集中。根据变量 Wilks' lambda 值优选,

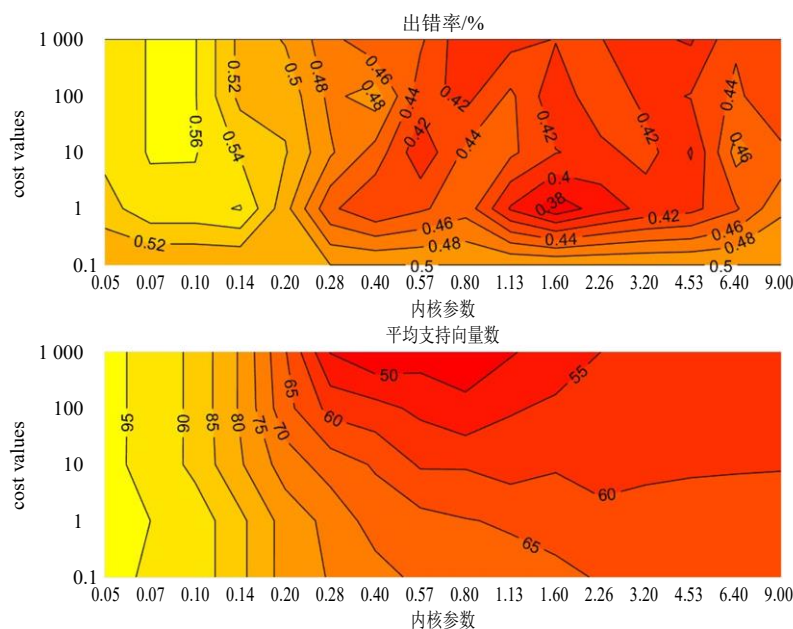
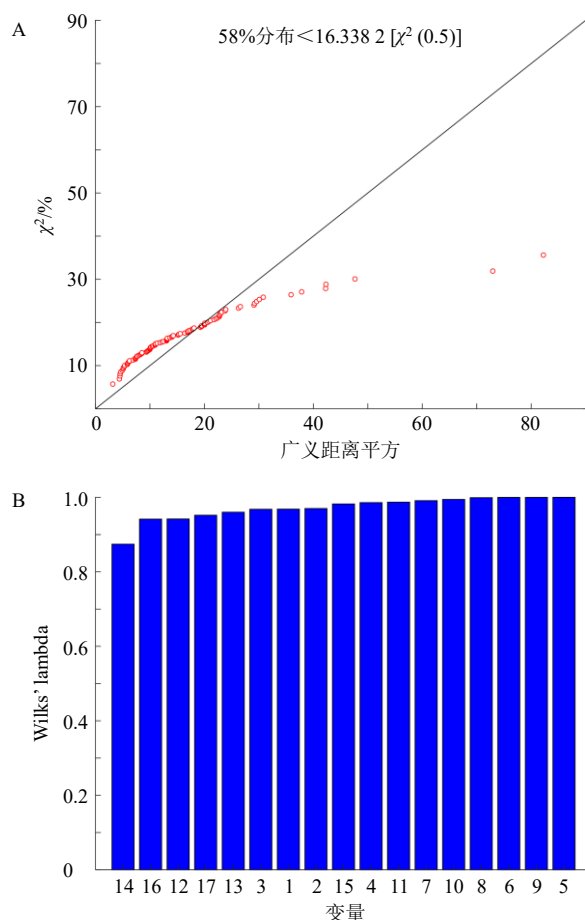


图 4 SVM 二分类辨识模型参数优选

Fig. 4 Parameter optimization of SVM binary classification identification model



A-多源正态分布; B-Wilks' lambda 柱状图。

A-multi-source normal distribution; B-Wilks' lambda bar chart.

图 5 DA 判别模型图

Fig. 5 DA discrimination model diagram

经留一法交互验证结果见表 6, 65 个寒性样品有 12 个被误分类为热性, 32 个热性样品有 14 个被误分类为寒性, 模型交互验证正判率为 73.20%。辨识结果中无未分类样本, 基本可完成寒热样品的区分。

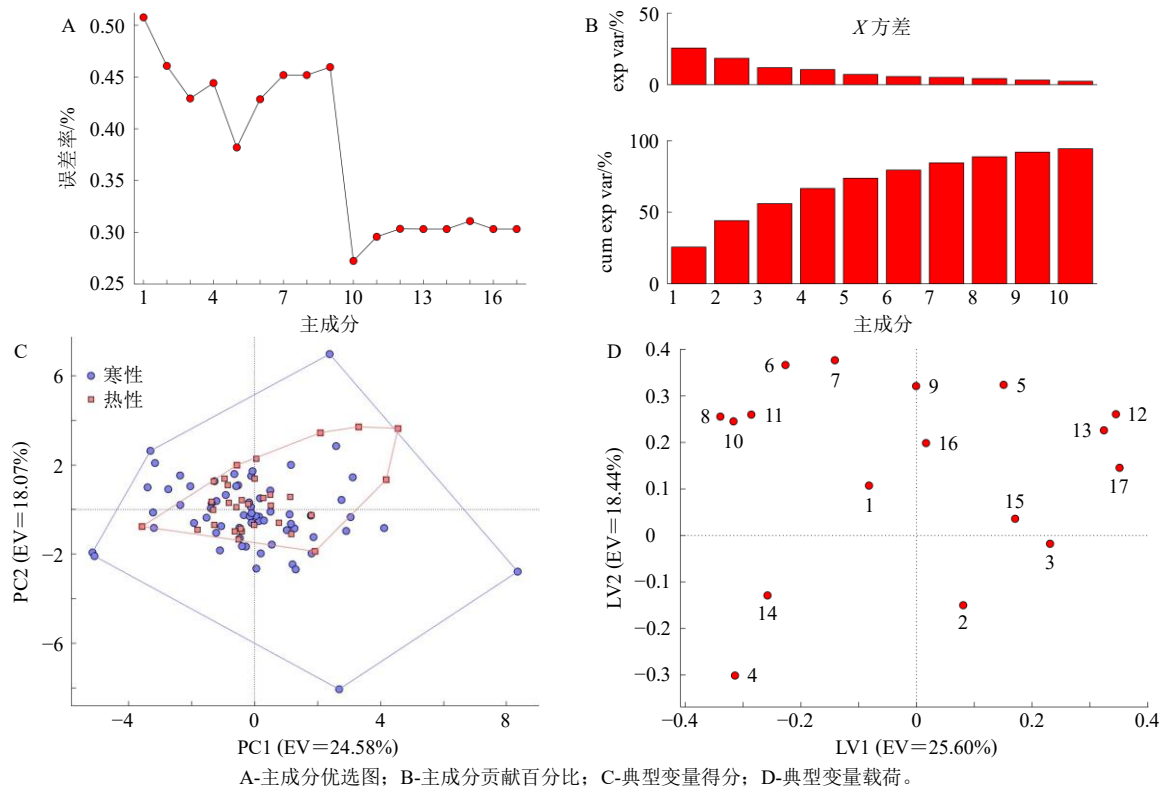
表 6 不同模型判别结果

Table 6 Discrimination results of different models

模型	真实/预测	寒性	热性	未分类	正判率/%
DA	寒性	53	12	0	73.20
	热性	14	18	0	
PCA-DA	寒性	56	9	0	77.32
	热性	13	19	0	
PLS-DA	寒性	53	12	0	70.10
	热性	17	15	0	
SVM	寒性	50	15	0	72.16
	热性	12	20	0	
LS-SVM	寒性	62	3	0	85.57
	热性	11	21	0	

(2) PCA-DA 辨识结果: 如图 6 所示, 当主成分选择 10 个时, PCA-DA 模型性能达到最优, 前 10 个主成分可解释样本 99%以上变异信息。样品判别结果如表 6 所示, 65 个寒性样品中有 9 个被错判为热性, 32 个热性样品中有 13 个被判定为寒性, 模型交互验证正判率为 77.32%。

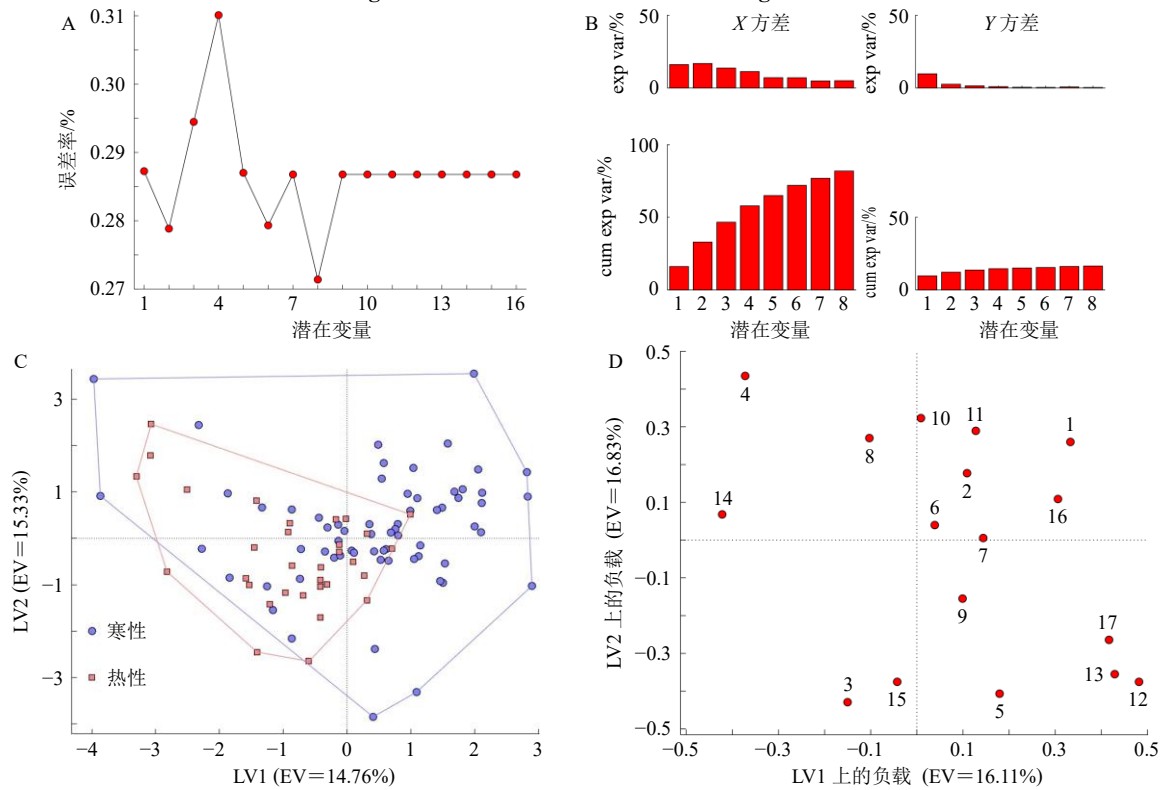
(3) PLS-DA 辨识结果: 如图 7 所示, 当潜变量个数为 8 个时模型错判率最低, 所选 8 个潜变量可以解释样本 99%以上的变异信息。PLS-DA 判别



A-principal component optimization diagram; B-percentage of principal component contribution; C-typical variable score; D-typical variable load.

图6 PCA-DA 判别模型图

Fig. 6 PCA-DA discriminant model diagram



A-principal component optimization diagram; B-percentage of principal component contribution; C-typical variable score; D-typical variable load.

图7 PLS-DA 模型得分图

Fig. 7 PLS-DA discriminant model diagram

结果如表 6 所示, 65 个寒性样品中有 12 个被错判为热性, 32 个热性样品中有 17 个被判定为寒性, 模型交互验证正判率为 70.10%。

(4) SVM 辨识结果: 如图 8 所示, 在建模之前对数据进行“标准正态变换 SNV”的行预处理, 列预处理方法选择“autoscaling”, 核函数选择径向基核函数, RBF, 预试后核参数初始值设为 0.05, cost values 初始值设为 0.1, 主成分个数应用则选择

“automatic”, 然后, 按照此参数设置优选核参数及 cost values 值, 优选结果见图 8。由参数优选的等高线图可知: 当 cost values 值为 100, 核参数为 4.53 时, 模型错误率最小, 为 0.3。模型判别结果如表 6 所示, 交互验证正判率为 72.16%。其中 65 个寒性样品 15 个被错判为热性, 32 个热性样品 12 个被判定为寒性。

(5) LS-SVM 辨识结果: 经留一法交互验证对

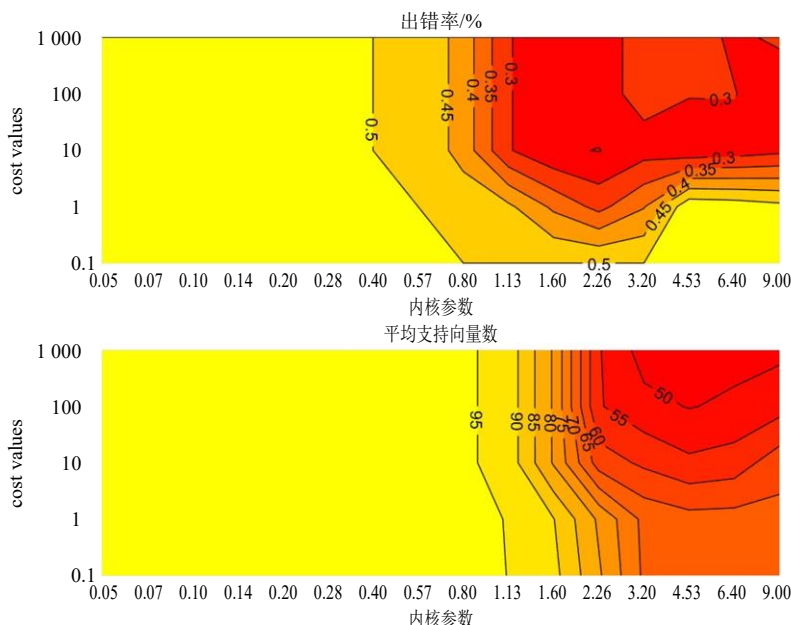


图 8 SVM 寒热二分类辨识模型优选

Fig. 8 SVM cold and heat binary classification identification model optimization

LS-SVM 的核函数类型等参数进行优化后 LS-SVM 判别结果验证模型最优正判率为 85.57%。样品判别结果见表 6, 经留一法交互验证, 65 个寒性药中有 3 个被误判为热性, 32 个热性样品中有 11 个被误判为寒性, 具体误判情况图 9: 寒性样品中 17 号浮萍、52 号赤芍、58 号鱼腥草被误判为热性药; 热性样品中 66 号大腹皮、70 号生姜、72 号八角茴香、77 号丁香、80 号红花、81 号黄芪、82 号花椒、86 号千金子、89 号石榴皮、94 号月季花、97 号高良姜被误判定为寒性。

3.2.2 PEN3 电子鼻和 SA402B 型电子舌结果 将 PEN3 电子鼻和 SA402B 型电子舌传感器信息整合后建立矩阵并建模, 各模型正判率如表 7 可知, DA、PCA-DA、PLS-DA、SVM、LS-SVM 依次为 79.38%、73.20%、78.35%、76.29%、72.16%。

3.2.3 PEN3 电子鼻和 ASTREE 型电子舌结果 将 PEN3 电子鼻和 ASTREE 型电子舌传感器信息整合后建立矩阵并建模, 各模型正判率表 7 可知, DA、

PCA-DA、PLS-DA、SVM、LS-SVM 依次为 79.38%、74.23%、81.44%、73.20%、77.32%。

3.2.4 PEN3 电子鼻、SA402B 型电子舌和 ASTREE 型电子舌结果 PEN3 电子鼻、SA402B 型电子舌和 ASTREE 电子舌传感器信息整合后建立矩阵并建模, 各模型正判率表 7 可知, DA、PCA-DA、PLS-DA、SVM、LS-SVM 依次为 74.24%、67.01%、71.13%、74.23%、72.16%。

4 讨论

4.1 样品的选择

首先, 通过中药鉴定专家施钧瀚副主任药师, 对所购买的中药饮片进行初筛, 根据结果将存在争议的饮片筛选出来, 依据药典项下性状、显微、薄层鉴别等方法对其进行检验与验证, 若不符合要求, 购买新的样品作为补充, 最终确定所有样品均为正品。

本研究寒热药性二分类是在课题组五味研究的基础上展开的, 在前期进行五味的研究中^[23], 选

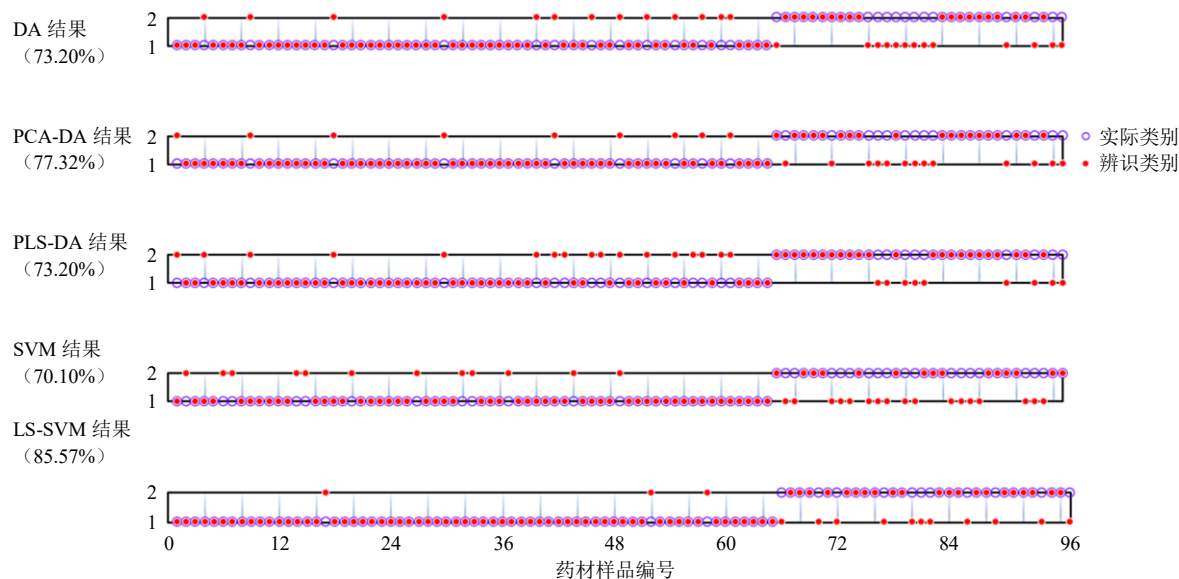


图 9 模型辨识结果

Fig. 9 Model identification results

表 7 中药寒、热二分类单源、多源分类辨识汇总表

Table 7 Summary of cold and heat single source and multi-source classification identification results of traditional Chinese medicine

分类 模型	单源辨识模型结果正判率/%			多源辨识模型结果正判率/%			
	A	B	C	A+B	A+C	B+C	A+B+C
DA	77.32	62.89	64.95	79.38	79.38	73.20	74.23
PCA-DA	75.26	67.01	67.01	73.20	74.23	77.32	67.01
PLS-DA	81.44	57.73	68.04	78.35	81.44	70.10	71.13
SVM	72.16	69.07	72.16	76.29	73.20	72.16	74.23
LS-SVM	78.35	72.16	76.29	72.16	77.32	85.57	72.16

A 为 PEN3 电子鼻；B 为 SA402B 型电子舌；C 为 ASTREE 电子舌。
A is PEN3 electronic nose; B is SA402B electronic tongue; C stands for ASTREE electronic tongue.

择了 136 种样品（筛选单一味不含兼味药且顾及四气分类属性的样品），其中包括 14 种食品类样品，25 种平性中药样品，而在本研究中：①食品药性较弱，寒热药性不明显^[24]，因此选择在建模时剔除 14 种食品类样品；②平性药具有寒热双向性特点，寒热偏性不显著、作用相对和缓且周期过长，而本研究在寒热二分类辨识中尽可能选择寒热属性显著的样品进行探索研究，因此选择在建模时进行剔除平性样品，在后续研究中会收集更多的平性中药样品单独对其进行辨识方法研究。因此，根据课题组前期五味研究的基础共筛选出了 97 种具有寒热属性的样品，进行初步分类建模探索。将筛选出的样品依据《药典》性味归经，将寒、微寒、凉归为寒，温、微温、热归为热，进行寒热二分类建模，也存在一些问题，如 97 种样本，其中热性药 32 种，寒性药 65 种，样本数据集存在不平衡情况，可能会影

响热性药的分类辨识结果，因此，在后续研究中会进一步扩大样本量进行弥补。

同时，本研究在进行寒、热、温、凉药性 4 分类判别时，发现其最优正判率较低，且判错样本出现了跨度较大的寒-热、热-寒错误分类，其原因可能为所选择的载体四气属性不明显，其中热性药仅有 3 种，对于模型分类数量过少，误差相对较大，因此未进行寒、热、温、凉药性四分类和寒、微寒、凉、温、微温、热 6 分类辨识研究，后续会选择更多的样品及更智能的传感器来进行深层次多维度研究探索。

4.2 多传感器信息融合建模分析与优选模型

多传感器信息融合技术通过利用多个传感器测得的信息，运用数据融合算法对数据进行分析整理，对冗余信息进行排序并整合互补信息，从而对目标作出准确预估，根据抽象程度的不同，可将多

其划分为像素层融合、特征层融合以及决策层融合 3 个层次,处理问题时,可以根据不同目标特性进行合理性选择^[25-26]。

四性,包含寒热温凉平的属性,各属性间只体现在量变尚未达到质的变化,单一智能感官辨识无法获取样本更全面的信息,因此,本研究基于通过 PEN3 型电子鼻、SA402B 型电子舌、ASTREE 型电子舌对 97 种饮片采集传感器信息矩阵,并基于 DA、PCA-DA、PLS-DA、SVM、LS-SVM 对样本进行辨识分析,以期达到更准确的辨识结果。在单源辨识模型中,以 PEN3 电子鼻 PLS-DA 为最优模型,模型正判率为 81.44%。在多源辨识模型中,以 SA402B+ASTREE 的 LS-SVM 为最优模型,模型正判率为 85.57%。由实验数据可知,单源、多源辨识模型中均无未分类情况,在单源与多源模型对比中,PLS-DA 模型正判率维持在 57%~82%,LS-SVM 模型正判率维持在 72%~86%,基本可完成寒热二分类辨识,因此优选 LS-SVM 为最优模型。

4.3 误分类样品分析

以多源 SA402B+ASTREE/LS-SVM 最优模型为例,进行分析。由研究结果表明,误分类样品相对集中,错判样本集中在温-微温,寒-微寒等寒热偏性不明显、气味、滋味特殊或自身化学成分复杂的样品中。①在传统药性辨识中对于其归属问题,因其划定标准不一,除寒热药性明显的药物外,对寒热不明显的药物属性归属亦是历代诸家一直存有争议^[27],如朱铁梁等^[28]通过不同标定依据、功效、配伍、量化标准细谈了寒热药性相对性问题,文中提及“古代医药学家有以药物的气味、毒性、燥性作为划定药性寒热的依据,其中气味芳香者虽以温热药为主,寒凉药亦可见的药性相对性”;②在近现代的药性研究中也提出了各种不同的假说,包括分子药性假说^[29]、药效团药性假说^[30]等,从中草药性化学角度分析寒热药性,“温热药化学成分多以挥发油为主,且热性药无机化学元素 Mn 含量较高,寒凉药多以生物碱、苷类为主,寒凉药无机化学元素 Fe⁺、Ca⁺、Mn 含量较高”^[31-32]。如“鱼腥草”在 3 种模型中均错判为热性药,可能是其鱼腥草素等挥发油类化合物是鱼腥草的主要活性成分^[33]而被误分热性样品;③误分类样品主要集中具有“辛味”且具有特殊气味的样品中,如“鱼腥草、高良姜、花椒等”,可能传感器对气味特殊的样品检测输出不敏感。因此,这些问题的出现需要我们更深层次

地从样品的本身属性及传感器数据特征提取等各方面综合考虑分析。

对于误分类样品,改进的方法包含:①查询样品处理过程是否对于样品的特征造成了变化,如离心、高温灭菌的影响等,实验进行之初,应进行预实验,必要时可将这较易出现分错和未分类的样品单独重复制备,观察其分类结果,检查其中存在的问题;②考虑所定的标杆信息 Y 值的合理性。

综上,本研究通过构建寒热二分类辨识模型,结合 5 种化学计量学方法对传感器数据矩阵进行分析,以正判率为指标优选模型。所得最优模型 ASTREE+SA402B/LS-SVM 正判率为 85.57%,基本满足分类要求,初步实现了利用多源智能感官信息融合技术进行寒热药性辨识,为中药分类辨识提供了新思路。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 魏国辉,张丰聪,付先军,等. 中药成分相似性量化建模及寒热药性预测分析 [J]. 数据分析与知识发现, 2020, 4(5): 75-83.
- [2] 王莹,杨文华,梁艳,等. 《神农本草经》与《中国药典》2020 年版对中药四气五味表述异同分析 [J]. 中南药学, 2024, 22(8): 2201-2206.
- [3] 宋振光,颜冬梅,黄璐琦,等. 中药药性: 四气、五味、归经研究的方法学进展 [J]. 江西中医药大学学报, 2023, 35(3): 110-114.
- [4] 张迪,张耀,施钧瀚,等. 基于经典人群口尝法的中药伴侣抑苦规律及应用规律研究 [J]. 中草药, 2023, 54(20): 6603-6615.
- [5] 王盼盼,凌霄,马志欢,等. 基于中药药性研究的口尝法研究思路 [J]. 中医杂志, 2020, 23: 2069-2072.
- [6] 凌霄,王盼盼,马静,等. 临床功效反推法在中药药性研究中的作用 [J]. 中医杂志, 2020, 61(5): 396-399.
- [7] 杨森然,张嘉鸿,王浩宇,等. 取象比类模型在中医内科学病因病机教学中的运用 [J]. 时珍国医国药, 2024, 35(15): 3482-3485.
- [8] 马静,凌霄,王盼盼,等. 取象比类法在中药药性研究中的应用 [J]. 中医学报, 2020, 35(9): 1870-1874.
- [9] 周韶华,潘五九,肖小河,等. 中药四性的生物热动力学研究: 黄连不同炮制品药性的微量热学比较 [J]. 中草药, 2004, 35(11): 1230-1232.
- [10] 顾浩,王耘,肖斌,等. 中药功效-药性组合关联关系研究 [J]. 时珍国医国药, 2011, 22(7): 1568-1571.
- [11] 欧阳兵,王振国,李峰,等. 中药四性“性-效-物质三元论”假说及其论证 [J]. 山东中医药大学学报, 2008,

- 32(3): 182-183.
- [12] 李海洋, 桂新景, 侯富国, 等. 中药材和中药饮片快速鉴定技术研究进展 [J]. 分析测试学报, 2023, 42(8): 1026-1038.
- [13] 王文航, 崔梦君, 蔡文超, 等. 基于电子鼻和电子舌技术的红枣酒发酵过程中品质变化分析 [J]. 中国酿造, 2024, 43(11): 125-130.
- [14] 罗雨婷, 陈雪梅, 卢晓梅, 等. 基于智能感官技术及BP神经网络的制枳壳饮片发酵程度快速判别研究 [J]. 中草药, 2025, 56(4): 1159-1170.
- [15] 李晨旭, 姚静, 张璞, 等. 计算机模拟在中药汤剂掩味研究中的应用 [J]. 医药导报, 2024, 43(7): 1107-1111.
- [16] 丁羽, 戴慧莲, 姜德利, 等. 基于智能感官和近红外光谱技术结合化学计量学的酒当归炮制程度快速辨识研究 [J]. 中草药, 2025, 56(1): 68-78.
- [17] 曲珍妮, 吕畅, 毕钰, 等. 基于电子仿生感官技术的山楂不同炮制品颜色、味道变化研究 [J]. 中草药, 2024, 55(20): 6929-6939.
- [18] 王超超, 张先超, 谷正昌, 等. 中药材及饮片检测中人工智能应用探讨 [J]. 中国工程科学, 2024, 26(2): 245-254.
- [19] 吴怡, 余荷蓉, 聂心如, 等. 基于智能感官技术与多元统计分析的黄芪蜜炙程度快速辨识研究 [J]. 中国中药杂志, 2024, 49(20): 5451-5459.
- [20] 王艳丽, 陈鹏举, 桂新景, 等. 基于电子舌的天然药物的四类味觉分类辨识研究 [J]. 中华中医药杂志, 2021, 36(1): 423-433.
- [21] 王小鹏, 张璐, 陈鹏举, 等. 近红外光谱技术应用于中药四类味觉分类辨识的可行性分析 [J]. 中草药, 2023, 54(4): 1076-1086.
- [22] 贺智鹏, 吕莉, 陈娟, 等. Critic 特征加权的多核最小二乘孪生支持向量机 [J]. 信息与控制, 2025, 54(1): 123-136.
- [23] 任延娜, 冯文豪, 李涵, 等. 基于人工智能感官与多源信息融合技术的五味药性二分类辨识方法探讨 [J]. 中草药, 2023, 54(10): 3080-3092.
- [24] 纪徐维晟, 梁浩, 刘淑明, 等. 基于拉曼光谱的平性中药辨识研究 [J]. 中国现代中药, 2022, 24(12): 2364-2370.
- [25] 王茂森, 鲍久圣, 谢厚抗, 等. 隧道环境内无人驾驶车辆目标-决策两级信息融合感知策略 [J]. 中国机械工程, 2024, 35(3): 427-437.
- [26] 李涵, 谢梦迪, 桂新景, 等. 多源信息融合技术在中药质量评价中的应用研究进展 [J]. 药学报, 2023, 58(10): 2835-2852.
- [27] 夏元枢, 魏国辉, 王振国, 等. 中药寒热药性研究方法综述 [J]. 中华中医药杂志, 2021, 36(2): 990-992.
- [28] 朱铁梁, 孙蕾, 姬艳苏. 中药四气理论现代研究进展 [J]. 现代中西医结合杂志, 2021, 30(28): 3188-3192.
- [29] 张文晋, 曹也, 常丽坤, 等. 中药“药效基团-功效假说”及其应用 [J]. 中草药, 2021, 52(7): 1865-1871.
- [30] 张冰冰, 朱琦, 张晶新, 等. 基于深度学习的中药寒热属性预测研究 [J]. 世界中医药, 2023, 18(21): 3047-3052.
- [31] 张洪怡, 周靖惟, 刘佳雯, 等. 基于 AHP-CRITIC 复合加权法优选牡蛎的炮制工艺及其重金属元素健康风险评估 [J]. 中草药, 2025, 56(5): 1549-1563.
- [32] 寇仁博, 郭玫, 郭亚菲, 等. 中药药性化学研究进展 [J]. 中国中医药信息杂志, 2022, 29(3): 142-146.
- [33] 王连睿, 东红阳, 苗明三. 鱼腥草的研究进展及其质量标志物的预测分析 [J]. 中药新药与临床药理, 2024, 35(7): 1084-1092.

[责任编辑 郑礼胜]