

• 专 论 •

人工智能推动经典名方研发范式重塑的进展与应用展望

韩星星¹, 朱华旭^{1*}, 唐志书^{2*}, 赵冉冉³, 刘妍如⁴, 朱宝杰¹, 付廷明¹, 张悦¹, 肖青青¹, 李博¹, 刘红波⁴

1. 南京中医药大学, 江苏省植物药深加工工程研究中心, 江苏省中药资源产业化过程协同创新中心, 江苏 南京 210023

2. 北京中医药大学, 北京 102488

3. 中国中医科学院研究生院, 北京 100700

4. 陕西中医药大学, 陕西中药资源产业化部省共建协同创新中心, 陕西 咸阳 712046

摘要: 经典名方作为中医药理论体系的核心载体, 在慢性疾病及重大疾病的防治中具有重要作用。然而, 其二次开发面临着诸多挑战, 如数据标准化、循证医学证据链不足等, 制约了其从临床到产业转化的步伐。人工智能推动传统经验医学转向“算法-模型-数据-场景-应用”的研究新范式, 为经典名方的数据挖掘、处方优化与新药研发提供了崭新的视野, 赋能中医药现代化发展。系统探讨人工智能推动经典名方研究范式重塑的技术路径, 提出“智能挖掘-机制解析-精准评价”三位一体的研究范式。首先, 阐述机器学习等关键技术基础及其适配场景; 其次, 从候选方剂智能筛选、药效物质基础解析及作用机制深度挖掘等应用维度, 总结人工智能与经典名方融合的研究进展及应用前景; 最后, 剖析数据异构化、标准缺失及模型与中医药理论适配性差等挑战, 并提出针对性解决策略, 为构建人工智能赋能经典名方二次开发的研究新范式提供参考。

关键词: 人工智能; 经典名方; 二次开发; 研发范式; 应用展望

中图分类号: R283 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2670(2026)04-1209-12

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.04.001

Progress and application prospects of artificial intelligence promoting reshaping of research and development paradigms for classic famous prescriptions

HAN Xingxing¹, ZHU Huaxu¹, TANG Zhishu², ZHAO Ranran³, LIU Yanru⁴, ZHU Baojie¹, FU Tingming¹, ZHANG Yue¹, XIAO Qingqing¹, LI Bo¹, LIU Hongbo⁴

1. Jiangsu Collaborative Innovation Center of Traditional Chinese Medicine Resources Industrialization, Jiangsu Botanical Medicine Refinement Engineering Research Center, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing 210023, China

2. Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 102488, China

3. China Academy of Chinese Medical Sciences, Beijing 100700, China

4. Shaanxi Provincial Collaborative Innovation Center of Traditional Chinese Medicine Resources Industrialization, Shaanxi University of Traditional Chinese Medicine, Xianyang 712046, China

Abstract: As the core carrier of the theoretical system of traditional Chinese medicine (TCM), classic famous prescriptions play a vital role in the prevention and treatment of chronic diseases and major diseases. However, their secondary development still faces numerous technical bottlenecks, such as limitations caused by insufficient data standardization and inadequate evidence chains in evidence-based medicine, which restrict the transformation process from clinical practice to industrialization. Artificial intelligence (AI) has promoted the shift of traditional empirical medicine to a new research paradigm of “algorithm-model-data-scenario-application”, providing a

收稿日期: 2025-10-20

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(82274222); 国家自然科学基金面上项目(82274107); 2021年岐黄学者支持项目(国中医药人教函[2022]6号)

作者简介: 韩星星, 博士, 研究方向为经典名方的智能解析。E-mail: hxx0307@163.com

*通信作者: 朱华旭, 研究员, 博士生导师, 从事中药分离技术与中药资源循环利用研究。E-mail: Huaxu72@126.com

唐志书, 教授, 博士生导师, 从事中药质量评价与中药资源开发利用研究。E-mail: tzs6565@163.com

brand-new perspective for data mining, prescription optimization, and new drug research and development of classic famous prescriptions, and empowering the modernization of TCM. This article systematically investigates how AI is reshaping the research paradigm of classic famous prescriptions, proposing an integrated framework centered on intelligent data mining, in-depth mechanism analysis, and precise efficacy evaluation. Firstly, it elaborates on the foundational basis of key technologies such as machine learning and their applicable scenarios. Secondly, from application dimensions including intelligent screening of candidate prescriptions, analysis of the material basis for efficacy, and in-depth exploration of mechanisms of action, it summarizes the research progress and application prospects of the integration of AI and classic famous prescriptions. Finally, it analyzes challenges such as data heterogeneity, lack of standards, and poor adaptability between models and TCM theories, and proposes targeted solutions, aiming to provide references for AI empowering the secondary development of classic famous prescriptions.

Key words: artificial intelligence; classic famous prescriptions; secondary development; research and development paradigm; application prospects

经典名方指源于中医药经典著作,具有确切疗效、完整组方理论,且为医学界普遍认同的方剂体系^[1]。此类方剂是中医药“理法方药”理论体系的具象化载体,不仅构建了中医诊疗范式,其临床价值也得到了循证医学体系的广泛验证。近年来的临床实践证明,经典名方在心脑血管、代谢性、神经退行性等病程长、治疗费用高、需长期管理的重大慢性疾病治疗方面展现出独特的优势,如六味地黄丸可治疗2型糖尿病、慢性肾炎、高血压及高血脂等^[2-3],桃红四物汤被广泛用于抗血栓、骨伤科疾病、皮肤疾病等^[4-5]。

为深度挖掘古代经典名方的应用潜力,2018年起,《古代经典名方目录(第一批)》《古代经典名方目录(第二批儿科部分)》《古代经典名方目录(第二批)》先后发布,共计324首方剂,为经典名方的二次开发提供了组方、药味剂量等依据。早在2005年,于智敏等^[6]提出中药复方的二次开发是指在中医药理论指导下,利用现代科学的新方法、新技术对代表性、防治疾病有优势疗效的中药品种进行研究。2020年,国家药品监督管理局在《关于促进中药传承创新发展的实施意见》中明确提出“中医药理论、人用经验、临床试验相结合”的中药注册审评证据体系;随后发布的《中药注册分类及申报资料要求》进一步将该体系落地,针对符合条件的中药新药(如古代经典名方制剂、基于人用经验的复方制剂等)优化了注册路径,通过合理减免部分非临床或临床研究要求,为缩短研发周期提供了技术支撑,也为经典名方的二次开发构建了兼具传承与创新的审评框架。然而,截至2024年底,经典名方仅上市8个品种,其二次开发依然面临着诸多技术瓶颈,如数据标准化、循证医学证据链不足等,上述问题带来的局限制约了从临床到产业转化

的步伐^[7]。当前,人工智能技术在复杂系统建模、多模态数据融合、非线性关系挖掘等研究领域展现出的独特优势,已为中药复方的数据挖掘、处方优化与新药研发提供了新技术新方法,推动传统经验医学转向“算法-模型-数据-场景-应用”的研究新范式。

人工智能的算法、模型、场景、应用等关键技术与经典名方的复杂系统特性具有高度适配性,本文系统探讨人工智能赋能经典名方二次开发的技术路径。首先,阐述机器学习等关键技术基础及其适配场景;其次,从候选方剂智能筛选、药效物质基础解析及作用机制深度挖掘等应用维度,总结人工智能与经典名方融合的研究进展及应用前景;最后,剖析数据异构化、标准缺失及模型与中医药理论适配性差等挑战,并提出针对性解决策略,为人工智能赋能经典名方二次开发提供参考。

1 经典名方二次开发面临的关键瓶颈问题

已有文字记载的古代经典方剂近10万个,按照《新药注册管理办法》要求,经典名方制剂属于中药复方制剂中的特殊类别,依据《中药注册分类及申报资料要求》实施简化审批程序。2023年,《中药注册管理专门规定》明确,经典名方制剂可豁免部分非临床研究,但需强化人用经验证据链。因此,经典名方的二次开发重在明确物质基础、阐释作用靶点或机制、发现新适应证或不良反应、提出质量控制规范,及将适宜的新技术、新方法用于新药开发全过程^[8-9]。

基于此,近年来,经典名方的二次开发已取得部分进展。物质基础研究方面,以方证代谢组学为核心研究策略,结合UPLC-Q-TOF-MS/MS技术,确定了泽泻萜醇F、泽泻醇C、白术内酯III等为泽泻汤治疗眩晕症的主要药效物质基础^[10]。作用机制

阐释方面,补中益气汤被发现可通过抑制多聚胞嘧啶结合蛋白1激活铁蛋白自噬介导的铁死亡途径,改善非小细胞肺癌的顺铂耐药性^[11];当归补血汤被发现可通过抑制Z-DNA结合蛋白1介导的体内外PANoptosis减轻阿霉素诱导的心脏毒性^[12]。新适应证拓展方面,基于安宫牛黄丸的临床使用归纳,发现该方还可显著动脉粥样硬化^[13]。制剂现代化方面,基于变异系数法结合Box-Behnken设计-响应面法优化了经典名方苓甘五味姜辛汤的提取工艺,为其工业化生产提供理论依据^[14]。

然而,传统开发模式对于其二次开发的固有局限却日益凸显。(1)研发效率瓶颈,依赖人工对海量数据进行梳理或对不同工艺进行试错,会存在效率不足、实验量庞大且优化周期长的问题。并且碎片化及非结构化的人用经验证据链难以满足新药审批的采信要求及系统性回应审评方的深入问询。(2)药材和饮片的质量不确定性使得标准汤剂的制备存在时间长、质量参差不齐的矛盾。新药审评要求经典名方制备参比制剂,该制剂要求质量稳定、关键质量属性明确,而传统质量控制方法存在误差较大和检测维度单一无法反映多成分协同作用的局限。(3)系统解析深度不足。经典名方的核心优势在于通过多成分协同作用于机体复杂网络,而“单成分-单靶点”的研究模式无法科学阐释经典名方“多成分-多靶点-多通路”的整体调节特征。(4)适应证拓展具有偶然性。新适应证挖掘是经典名方二次开发的重要方向,但传统研究多依赖临床经验偶然发现,缺乏基于数据驱动的预测体系。这些关键瓶颈问题限制了经典名方的进一步开发与临床价值的转化。

2 人工智能赋能经典名方二次开发的关键技术基础

人工智能作为计算机科学领域的重要分支,其核心目标是使机器或软件系统具备执行需人类智能参与的任务的能力,覆盖从基础流程自动化到复杂决策制定的全范围认知活动^[15]。人工智能与经典名方二次开发领域的深度融合,需依托多维度技术体系的协同支撑。目前,人工智能在中医药领域的应用技术主要涵盖机器学习、自然语言处理(natural language processing, NLP)及计算机视觉(computer vision, CV)等子领域。

2.1 机器学习模型的适配性与应用

机器学习包括传统机器学习与深度学习,是一种通过数据训练模型,使计算机系统不依赖于明确

的编程指令,而是通过算法从数据中提取模式,自动学习规律并做出预测或决策的技术。

2.1.1 传统机器学习 传统机器学习包含监督学习、无监督学习及强化学习(reinforcement learning, RL)3类。其中,机器学习在中医药研究中的主要模型有支持向量机(support vector machine, SVM)、随机森林(random forest, RF)、K近邻(K-nearest neighbor, KNN)及RL等。机器学习模型的常规使用流程包括数据的清洗与标准化;特征选择与编码;模型选择与训练^[16-17]。

(1) SVM: SVM属于监督学习中的二分类模型,在小样本、高维特征场景中具有显著优势,其核函数对非线性数据的映射能力,与中医药研究中光谱分析、成分检测等维度高、样本量有限的特征高度适配,被广泛用于中药鉴别、成分分析及配伍规律解析等方面^[18]。Liu等^[19]基于近红外光谱法,采用SVM构建当归与丹参2种药材的地理来源判别模型,结果表明模型的判别准确度可达92%,可为药材质量控制提供精准快速的鉴别方法。SVM在处理中药高维、小规模数据(如光谱、色谱数据)时适配性较好,但其性能高度依赖于核函数与参数的选择,未来需探索更适配中医药数据特征的自动化参数优化方案。

(2) RF: RF属于监督学习中的集成学习回归与分类模型,通过构建多棵决策树,以多数投票或均值方式输出结果,可有效降低过拟合风险并提升模型稳健性,可处理中药多源异构数据(如指纹图谱中的多峰、多成分关系),并提供特征重要性排序,常用于中药质量评价及成分价预测等方面。夏伯候等^[20]基于高效液相色谱法采集的83批不同品牌的夏桑菊颗粒指纹图谱,通过RF等多种算法构建不同品牌夏桑菊颗粒的分类模型,结果表明RF模型的性能较优,可为多指标的复杂指纹图谱的鉴别提供有效参考。

(3) KNN: KNN是常用且基础的无监督学习分类模型,其核心原理是通过计算待预测样本与训练集中所有样本的距离,选取距离最近的K个样本,以这K个样本的多数类别(分类任务)或均值(回归任务)作为预测结果,被广泛用于中药属性分类及相似方剂检索等方面。王小鹏等^[21]以近红外光谱数据为自变量,以《中国药典》2020年版一部饮片性状项下味觉描述为标签,结合KNN等算法初步建立了中药味觉的分类辨识模型。该算法较为简

单,适用于小规模样本的快速分类,但对特征尺度和数据规模较为敏感,若处理大规模样本数据则需与降维技术结合起来。

(4) RL: RL 基于马尔科夫决策过程的原则,其核心是通过反复的尝试和错误修正过程逐渐获得最优决策能力^[22]。Yang 等^[23]以糖尿病的高质量数据集为基础,基于 RL 构建了用于该病治疗的中药处方推荐模型,结果表明该模型在处方预测方面优于基准方法,证明了其可有效提高中医临床智能诊疗的质量。RL 适用于处理辨证-立法-选方这类动态诊疗数据,可从复杂模糊的诊断用药数据中得出显性关系,但其预测结果严重依赖于高质量、规范化的临床数据。

2.1.2 深度学习 深度学习是机器学习的子领域,核心是利用多层神经网络自动学习复杂特征,模仿人脑的分层信息处理机制。目前,深度学习在中医药研究中的主要模型有卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)、循环神经网络(recurrent neural network, RNN)、图神经网络(graph neural network, GNN)、Transformer 及生成式模型等。

(1) CNN: CNN 通常由输入层、隐藏层和输出层组成,通过卷积层的局部感受野(CNN 识别特征时的区域范围)与权值(CNN 的可学习参数)共享机制提取空间特征,经全连接层映射到最终分类或回归结果,主要用于饮片的质量评价、中药鉴别分类及方剂推荐等^[24]。Zhou 等^[25]基于名老中医的医案,通过 CNN 提取诊断描述特征,通过网络嵌入提取中药公式特征,将二者信息进行融合后构建智能配方推荐系统,结果表明模型预测性能优于基线方法,具有提升临床诊疗的潜力。CNN 在处理中药饮片图像、光谱图像等具有明显空间结构的数据时更具优势,未来可考虑如何将视觉特征与药味内涵建立可解释性的关联。

(2) RNN: RNN 及其变体长短期记忆网络和门控循环单元(gated recurrent unit, GRU)适用于处理时序数据,可通过门控机制处理序列中的前后文信息^[26]。该模型当前主要用于中药制备过程中的质量控制及生长过程中的含量变化预测等方面,能有效捕捉中药生产与生长过程中的时间依赖性。Peng 等^[27]以龙胆为研究对象,结合近红外光谱、CNN 及 GRU 构建有效成分龙胆酸和龙胆苷的定量分析模型,结果表明预测精度较高,可快速准确分析中药

提取物的有效成分。

(3) GNN: GNN 通过消息传递机制聚合邻居节点特征,可专门处理“节点-边”结构的图数据,适用于捕捉中医药复杂系统中的“方-药-病-靶”的关联关系。针对不同需求,GNN 可细分为图卷积网络(convolutional neural network, GCN)、图注意力网络(graph attention network, GAT)及图循环网络等模型^[28]。目前,GNN 主要用于药-病之间的关系建模、方剂推荐及新用途挖掘等方面。周鹏^[29]基于异构图神经网络构建中药靶点的发现模型,结合注意力机制捕捉远距离依赖关系,最后通过动态融合模块自适应整合全局与局部信息,得到用于中药靶点关系发现的高质量表示。GNN 是目前最能体现中医药整体观与关联性思想的人工智能模型,未来改进方向在于如何将中医理论(如“君、臣、佐、使”)作为先验知识嵌入到图结构中从而生成更具中医药内涵的网络表示。

2.2 NLP 技术的适配性与应用

NLP 是人工智能领域的另一重要研究方向,其研究核心包括语言建模、词法分析、句法分析和语义分析^[30]。中医药学是我国独有的优势科技资源,拥有丰富的语料数据,应用 NLP 能够高效地挖掘、整合、分析这些大量复杂的语料,有利于推动中医药现代化,促进传承与创新^[31]。Transformer 架构、知识图谱技术及生成式模型作为 NLP 领域的核心研究方向,分别在语义表征建模、领域知识结构化沉淀、自然语言内容生成等维度发挥关键作用。侯校^[32]基于 Transformer 架构提出了一种中草药推荐模型,将病证文本的全局特征与局部特征进行融合,再将融合后的特征输入解码器解码,生成与病证对应的中草药,结果表明模型生成效果较好。该架构可适用于处理中医复杂语境,但拥有高质量、大规模标注语料是其性能表现良好的前提。张一卓等^[33]基于经方分类体系构建了《伤寒论》类方知识图谱,为以经方方剂为主线的《伤寒论》知识表示及类方研究提供参考。知识图谱是实现中医药领域知识系统化、可计算的核心技术,其构建质量高度依赖于实体与关系抽取的准确性,如何将隐晦的中医理论关系显式化、标准化是需要关注的问题。陈祺焘等^[34]利用 GPT-4 及基于 GPT-4 开发的实时联网模型对《中国药典》2020 年版等语料进行深度学习,再让模型针对真实世界的临床病案生成处方,最后由专家对模型生成处方与专家共识处方进行

打分,结果表明二者处方评分无显著差异,表明模型生成效果较高。生成式模型在辅助临床决策与传承创新上展现出巨大潜力,但需严格审视其输出的可靠性,防止“幻觉”现象。

2.3 CV的适配性与应用

CV技术通过摄像头、图像传感器等设备获取图像或视频数据,借助深度学习等算法提取目标特征,实现对物体的识别、分类、跟踪等任务。中药饮片的质量直接关乎疗效与安全,而传统评价方法以人工评判为主,其主观性较强,且难以传承。为保障中药饮片检测的客观性与准确性,CV技术被逐渐用于中药饮片的“辨色”识别研究^[35]。周明等^[36]基于CV技术,对中药饮片的表面斑点、大小、片形及色泽特征进行处理分析,构建了大黄饮片性状智能

检测模式,实现了饮片质量的快捷准确判别。钱丹丹等^[37]通过CV技术提取中药饮片的面积、颜色和缺陷面积百分比作为中药饮片的品质分级,发现该系统可对大枣进行较准确的分级。CV技术能够将传统经验判断进行量化,可实现饮片质量的快速高效筛选,但外部形态需考虑产地、加工方式等因素带来的额外影响,建立形貌与质量的可靠关联。

为保证研究结果的可靠性,实际研究中往往集合多种机器学习模型进行分析。这种多模型融合策略既能发挥不同算法的优势互补,又能通过结果交叉验证降低单一模型的偏差风险,尤其适用于中医药数据复杂、多模态的特性。表1为以上模型的适用场景及优缺点,需根据不同的基础数据及需求选择合适准确的算法模型。

表1 常用机器学习模型在中医药研究中的适用场景及优缺点

Table 1 Applicable scenarios, advantages and disadvantages of common machine learning models in TCM research

模型	适用场景	优点	缺点
SVM	中药鉴别与分类、成分分类、证型分类等 ^[18-19]	小样本表现优异、稳定性好	参数调优敏感、大规模数据不适用
RF	中药鉴别与分类、成分价预测等 ^[20,38]	抗过拟合能力强、对缺失值不敏感	易忽略稀有类别
KNN	中药属性分类、方剂相似性检索、证型分类等 ^[21,39]	操作简单、可解释性强	计算效率低、高维数据处理效果差
RL	处理辨证论治用方的动态诊疗数据等 ^[23,40]	序贯决策能力强	训练过程不稳定、数据依赖性大
CNN	中药图像识别、舌诊/面诊图像分类等 ^[24-25]	自动提取空间特征、处理效率高	需大量标注数据、文本数据不适用
RNN	中药含量变化预测、制备工艺优化、疾病时序建模等 ^[27,41]	处理时序数据	易梯度消失
GNN	药-病关系建模、方剂配伍分析、处方推荐等 ^[29,42]	处理非欧数据、捕捉实体间关联	训练复杂、可解释性差
Transformer	中医药术语识别、文献深度解析等 ^[31-32]	捕捉全局语义关联	训练数据需求量大、算力需求高
KG	中医药知识整合、处方推荐等 ^[33,43]	支持知识推理与可视化	依赖高质量数据、动态更新困难
生成式模型	中药新分子生成、方剂创新设计等 ^[34]	生成新样本	质量不稳定、训练难度大
CV	中药饮片性状检测、药材分级等 ^[36-37]	实现客观量化评价	对图像采集设备要求高、需大量标注数据

3 人工智能赋能经典名方二次开发的研究

人工智能凭借对中医药数据的深度解析与模式挖掘能力,为经典名方二次开发的多个环节提供了智能化解决方案,其研究主要聚焦于方剂筛选、物质基础解析、作用机制挖掘、质量控制优化及新适应证预测等环节,见图1。

3.1 方剂的智能筛选与评估

候选方剂的智能化筛选与评估依赖机器学习与NLP技术的协同运用,旨在构建一个融合经典名方知识与现代临床证据的量化筛选体系,从而突破人工筛选过程中存在的效率低下及主观性强的瓶颈。通常采用的数据来源是中医古籍文本及现代已报道文献等。

虞红蕾等^[44]基于《伤寒论》《金匱要略》等9部经典著作,通过Neo4j图数据库构建知识图谱,可

实现多维度知识检索与发现,从“症状-病机-方剂-药物”路径挖掘可用的推荐方剂。张思琪^[45]以胸痹类经典名方为研究对象,通过整合人工智能技术构建了病证结合的临床定位分析方法,实现对经典名方潜在最优适应疾病的预测。Dai等^[46]以中医药教材、国家标准、医学文献及ETCM等权威数据库构建的大规模语料为基础,基于Baichuan2-7B-Chat模型构建了TCMChat大语言模型,能够实现对方剂的智能筛选与推荐,并在多项评估中显著优于现有模型,有效提升了方剂推荐的准确性与实用性。Zeng等^[47]构建了涵盖中成药、中医术语、饮片及疾病等的中医药多维知识图谱,开发融合了可解释GNN与注意力机制的中药方剂功效预测与配伍关系量化模型,并以215个防治新冠肺炎的处方为例进行验证。

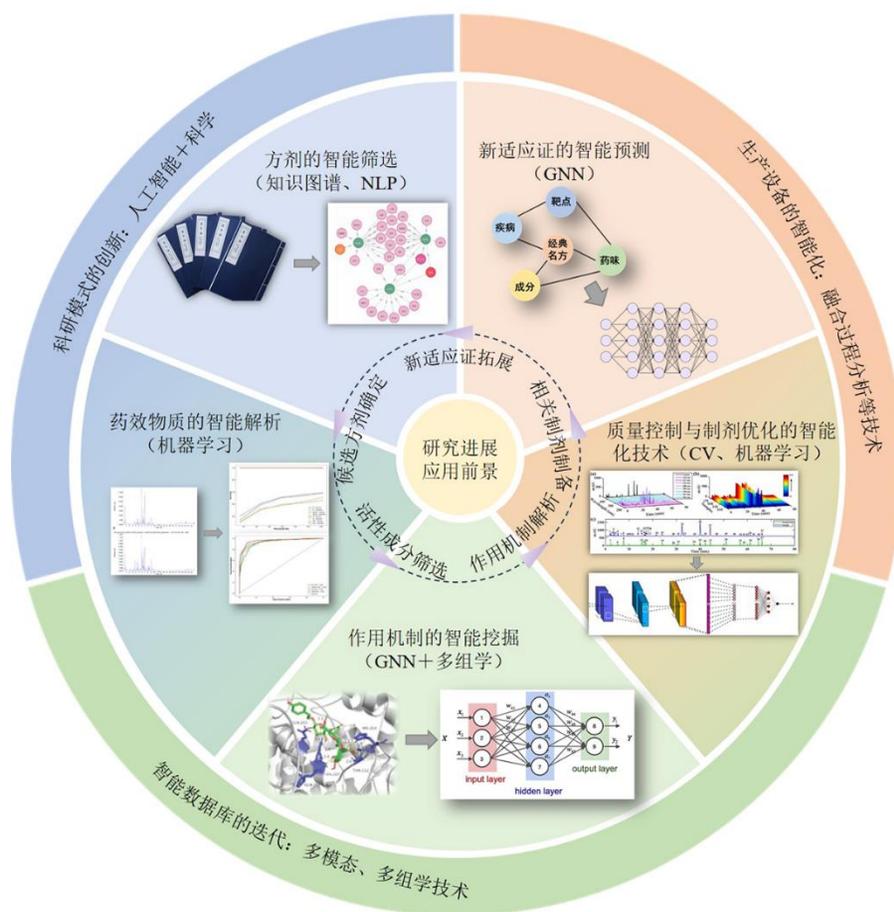


图 1 人工智能赋能经典名方二次开发的研究进展及应用前景

Fig. 1 Research progress and application prospects of artificial intelligence-enabled secondary development of classical famous prescriptions

利用人工智能技术对经典名方进行知识挖掘与临床精准定位，可以高效智能筛选出具有深入研究价值和意义的候选经典名方，为经典名方的二次开发提供可参考的数据基础。此外，该过程还有助于智能梳理方剂的古籍源流、历代沿革和主治证候，可为注册申报提供坚实、可溯源的证据支撑，显著提升申报效率。

3.2 药效物质基础的智能解析

药效物质基础的智能解析借助人工智能对中药成分、药理药效等数据的计算挖掘，致力于实现对经典名方中活性成分群的高效识别。Yang 等^[48]以柴胡桂枝汤为研究对象，通过超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱识别出该方剂中的 55 种化学成分，再采用 RF、SVM 等多种机器学习算法筛选出 19 种抗过敏性鼻炎的药效成分，提升了经典名方药效物质基础筛选的精准性和科学性。Guo 等^[49]以小儿扶脾颗粒为研究对象，基于层次聚类比较该方与美国食品药品监督管理局批准药物在成分、靶

点及细胞功能等多模块之间的相似性，最终预测出香草酸等活性成分，并经实验进行验证。Wu 等^[50]构建了 4 个深度神经网络模型，针对经典名方开心散治疗阿尔茨海默病的有效成分进行筛选，最终锁定 12 个高潜力候选化合物。Zheng 等^[51]在解毒三根汤治疗结直肠癌的研究中，基于无监督机器学习层次分析法-自组织映射聚类算法从 26 个入血成分中进一步筛选出白藜芦醇、阿福豆昔等最具潜力的活性成分。

人工智能驱动的药效物质基础解析，通过整合实验检测数据与算法模型，可有效地从复杂方剂体系中定向挖掘关键活性成分。并且，其输出结果可直接服务于新药注册审评中对药效物质基础的要求，能够系统性地阐明复方的化学内涵，为建立与药效关联的质量控制标准提供关键依据。实际研究中，针对不同经典名方，借助多维度数据关联与实验验证，不仅明确了药效成分的具体种类，更有助于构建从确切成分到机制阐释的研究路径。

3.3 作用机制的智能挖掘

作用机制的智能挖掘通过整合基因组学、转录组学等多组学数据,运用图论、复杂网络分析等网络建模技术,构建药物-基因-蛋白-通路相互作用网络,旨在揭示经典名方的复杂调控网络,从分子水平阐明作用机制。Huang等^[52]聚焦于经典名方益气养阴汤治疗糖尿病视网膜病变的机制研究,通过加权基因共表达网络分析预测治疗疾病的可能靶点和关键路径,再通过随机游走重启算法评估该方对疾病的疗效,并采用分子对接及化合物相似性分析鉴定出该方治疗糖尿病视网膜病变的物质基础,最后通过实验加以验证。成家禧^[53]以丹栀逍遥散抗乳腺癌为研究对象,基于大规模生物医学数据与人工智能预测技术,建立基于化合物-蛋白相互作用的预测模型和多成分组合协同抗肿瘤作用的预测模型,解析了丹栀逍遥散抗乳腺癌协同作用成分及协同作用机制。王艳菁等^[54]以温经汤为例,构建基于知识图谱和注意力机制的深度学习模型预测中医经典名方中药效成分与靶点的相互作用,结果表明其性能较好,可推广用于预测中药经典名方复杂网络体系中成分与靶点的相互作用。Wang等^[55]以苏黄止咳胶囊为例,基于网络热扩散算法构建了Herb-CMap多模态融合框架,精准筛选出槲皮素、木犀草素等关键活性成分及其作用的白细胞介素-17、磷脂酰肌醇3-激酶/蛋白激酶B等信号通路,能够系统解析该经典名方的作用机制。

当前基于人工智能技术解析单味药或单体成分治疗某一疾病的机制研究较多,涉及机器学习等多种算法,但经典名方作用机制的研究尚处发展阶段,这可能归因于复方多维数据与现有人工智能模型间的适配困境。同时,复方的“整体效应≠成分效应叠加”的涌现性特征(多个要素组成系统后,在系统层面表现出的单个要素所不具备的新性质),导致模型输出的机制解析结果常局限于成分层面的孤立关联,无法阐释方剂整体药效的协同调控逻辑,进一步制约了经典名方作用机制人工智能解析的深度与可靠性。

3.4 质量控制与制剂优化的智能化技术

药材及饮片研究是做好经典名方研究的基础,也是还原古代经典名方物质基础和安全有效性的重要保障,其质量直接影响制剂的安全性与有效性^[56]。质量控制与制剂优化的智能化技术依托人工智能构建从原料到成品全流程质量管控体系与

工艺优化模型,旨在突破传统中药质量评价主观性强、制剂工艺依赖经验的局限,实现经典名方生产过程的标准化与精准化。

质量控制方面,关欢欢^[57]以复方丹参颗粒为研究对象,通过多源数据融合与人工智能算法构建了贯穿原料到制剂的质量评价体系,为经典名方二次开发中的质量控制提供了技术范式。具体而言,对于原料端,结合决策树、SVM、人工神经网络等算法处理近红外数据,建立道地与非道地饮片的快速判别模型;对于制剂端,同样结合多种机器学习算法处理含量测定数据,建立由道地与非道地原料所制备的颗粒快速判别模型。结果表明,模型的分类准确率较高,有助于提高复方丹参颗粒的质量均一性与稳定性。Gao等^[58]基于反向传播神经网络、CNN等算法构建了血府逐瘀汤7种活性成分的谱效应关系模型,并结合实验进行了验证,最后通过CNN、双向长短期记忆和多头自注意网络的整合准确预测了上述活性成分的含量。制剂优化方面,王晶晶等^[59]结合Box-Behnken设计-响应面法结合反向传播神经网络法优化泻白颗粒成型工艺,并建立物理指纹图谱来评价不同批次间颗粒质量的一致性,结果表明,经优化得到的泻白颗粒成型工艺稳定可行,可为泻白颗粒的开发及工业化放大生产提供参考。此外,还可对药味的产地、品种及类别等影响质量的关键因素进行建模挖掘。Wu等^[60]利用7种机器学习算法,针对6个产地366批黄芪样本筛选出了一系列潜在标志物,结果表明该模型能够准确识别黄芪的产地、生长模式、种类和等级。Yu等^[61]集成RF、梯度提升决策树、极限梯度提升等算法构建高效准确的芡实产地分类模型,并可识别出纳、钒、钡等10个关键判断因子。

融合深度学习等人工智能技术处理中药多源数据,不仅能够显著提升道地药材判别精度与成分含量预测可靠性,还有可能突破传统检测与经验依赖的瓶颈,有助于构建从原料鉴别到工艺优化的全链条智能控制系统。

3.5 新适应证的智能预测

为已批准或正在研究的药物确定新用途是一种节约、高效的药物发现策略,能够显著减少新药开发成本,降低后期临床实验的失败风险,被称为解决新药开发高投入低回报困境的有效方法之一^[62]。传统的新适应证挖掘多依赖于偶然发现,而人工智能技术凭借其高效的计算能力能够定量化药物与

疾病之间的关联关系，有助于加速经典名方新用途的发现。

朱润^[63]通过整合相关中医药数据库和文献资料构建中药异质信息网络，将异质网络表示学习与链接预测方法相结合，提出了基于异质网络表示学习的中药方剂重定位的端到端方法，并基于所提出的方法设计实现了一个中药方剂重定位预测工具。Han 等^[64]以《伤寒论》《金匱要略》里的方剂为研究对象，基于相似药物治疗相似疾病的假说，通过 GCN 计算处方之间的相似度，为拓展方剂的新适应证提供参考。

基于计算生物学证据的新适应证预测，能够为“老药新用”的注册申报提供全新的立项依据和初步科学证据，拓展经典名方的临床价值和应用范围，符合药品审评鼓励药物重定位的理念。现有研究大都基于异质信息网络的构建，结合 GCN 算法进行关联性计算，为方剂新适应证的拓展提供了系统性的研究方法与技术工具。

值得注意的是，人工智能预测虽可提供高价值的假说，但仅为开发的初始环节，仍需再经历严格规范的体内外实验验证流程才能从“计算假说”走向“临床确证”。因此，未来研究应着力构建“人工智能预测-实验验证-临床评价”的系统研究路径，既能发挥人工智能的高效筛选价值，又可经多阶段验证保障临床应用的可靠性，进一步推动经典名方的二次开发。

4 人工智能赋能经典名方二次开发的应用前景

人工智能技术与经典名方二次开发的深度融合正推动中医药领域从传统经验驱动向现代数据智能驱动转型，在科研模式、生产设备及数据资源整合等方面具有突破性价值。

4.1 科研模式的创新

科研范式经历了从“经验科学”“理论科学”“计算科学”向“数据密集型科学”的演化，目前正在向“第五范式：人工智能+科学”发展^[65]。人工智能驱动的第五科研范式为经典名方二次开发提供了方法论革命，可通过复杂系统解析、经验知识重构与研发流程再造三重机制改善传统研究的局限。具体而言，针对经典名方多维数据之间的非线性关联问题，GNN 等人工智能技术能够高效量化方-药-靶-病之间的关联关系，实现对复方整体效应的系统阐释；针对古籍文献海量碎片化的问题，NLP 等人工智能技术能够通过语义解析将文献中

的传统经验知识转化为可计算、可验证的科学依据；针对传统的“文献挖掘-实验验证”的线性研发流程，人工智能驱动的“数据输入-模型预测-实验验证-模型迭代”的闭环体系更能够形成研发全流程的效能跃迁。

4.2 生产设备的智能化

生产过程的质量控制是保障药品质量稳定均一的重要手段。人工智能赋能的生产设备智能化，通过融合过程分析技术及自主决策算法等人工智能技术，有助于构建从原料质控到成品产出的全流程智能化管控体系，保障生产过程的标准化与精准化。如针对传统质控方式不足的问题，天士力医药集团股份有限公司将生成式人工智能、信息系统、操作人员三者优势相结合，由信息系统承担数据实时监控与分析任务，生成式人工智能承担信息收集、信息检索、人机交互任务，操作人员则负责纠偏实施与效果反馈，形成三者协同的智慧生产质控模式^[66]。该公司以复方丹参滴丸生产车间为例，基于数字化关键技术构建了过程检测与分析系统、数据采集与监控系统、制造执行系统及数据挖掘分析系统，通过智能制造来实现药品供应的高质量、精准化与柔性化^[67]。

4.3 智能数据库的迭代

人工智能驱动的数据库平台建设，通过整合中医药多源数据、建立标准化规范与共享机制，为经典名方二次开发提供高质量的数据资源，形成覆盖经典名方全生命周期的数据生态。现有中医药数据库已形成“证候-方剂-中药-成分-靶点-通路-功能-疾病”的核心链，而随着计算机科学和高通量实验技术的发展，逐渐呈现与人工智能、多模态多组学技术有机结合的发展趋势^[68]。这种融合不仅提升知识发现能力，更推动经典名方二次开发向数据智能驱动转型。

4.4 经典名方制剂注册申报的智能辅助

2018 年至今，国家发布了《古代经典名方中药复方制剂简化注册审批管理规定》等一系列相关政策文件，旨在通过探索符合中药特点的新工具、新方法和新标准来助推经典名方中药复方制剂的转化上市。结合经典名方制剂新药注册中的基准样品研究、药材饮片质量控制、“三结合”证据体系构建、临床价值评估及疗效评价等核心需求，人工智能技术可在注册关键技术环节提供深度支撑，为注册申报提供智能化辅助。

在基准样品研究及药材饮片质量控制方面，当

前存在饮片取样代表性差、制备工艺难确定、质量研究难度大等问题^[69]。针对此类问题,人工智能可整合多维度数据快速筛选道地产区,并模拟不同取样方式对基准样品成分均一性的影响,解决小剂量基准样品与大饮片取样不匹配的问题;可模拟传统煎煮过程,输入多类参数量化其对煎液成分的影响,自动筛选与古籍记载匹配的最优工艺;并可构建“成分-光谱-指纹图谱”关联模型,实现降解成分的间接定量、无特征峰成分的指纹图谱替代表征,满足基准样品质量控制的注册指标要求,保障“一碗汤”物质基础还原与注册一致性。

在“三结合”证据体系构建方面,人用经验是中药复方制剂研究的基础和鲜明特点,而实际研究中往往忽视人用经验的深度挖掘^[70]。基于此,NLP等人工智能技术既能够基于古籍人用经验构建结构化数据库,挖掘医家诊疗思路与处方组方原则,为中药监管决策提供证据或指导进一步开展临床研究,也可以整合临床医案等真实世界研究数据,挖掘“经典名方-证候-疾病”关联规律,量化方剂在不同人群中的疗效差异,形成“文献研究-人用经验-临床试验”的证据链支撑。

对于临床价值评估及疗效评价,一方面,随着社会疾病谱的演变,需将经典名方与现代疾病对接,开展适应证再定位与临床价值重估。基于此,人工智能技术可依托NLP技术,整合人用经验、现代临床诊疗指南及真实世界数据,构建经典名方-现代疾病适配预测模型,实现其临床价值的智能化评估。另一方面,针对当前经典名方疗效评价仍面临“缺乏符合中药特性的评价模式”的困境^[71]。知识图谱、深度学习等人工智能技术可结合多组学等实验数据构建经典名方的多层关联网络,筛选可靠的疗效指标,并可基于分子层面构建中医证候量化模型,将传统证候的主观定性指标转化为客观指标、量化的疗效评价体系。

5 人工智能赋能经典名方二次开发的挑战与对策

尽管人工智能在经典名方开发乃至中医药的各研究环节已展现出显著的创新驱动能力和效能提升潜力,但在实际应用中,仍面临着数据及技术这两大现实挑战。厘清问题本质、思考对应策略,是推动人工智能技术深度赋能经典名方二次开发的关键前提。

5.1 数据瓶颈及解决思路

数据的质量和标准化程度是人工智能用于经

典名方二次开发的首要制约因素。目前经典名方相关数据主要存在三大问题:(1)数据异构化明显,表现为占比极大的非结构描述性文本、结构化的实验数值及影像并存,难以直接简单融合;(2)可依据的标准缺乏,古今描述、中西医术语差别较大,无可用的规范标准来保证数据的一致性;(3)标注数据供应不足,如当选用深度学习模型计算药-病关联时,往往需要大量的专业标注的关联数据进行学习,而高质量数据的缺乏会导致模型预测误差偏大。

为规避“垃圾进垃圾出”的困境,即保障后期人工智能模型训练的有效性,可从以下方面着手。(1)针对多源异构数据难题,可选用专为处理复杂关系设计的人工智能模型,并针对性优化其特征融合模块,以适应数据特点。(2)针对标准缺乏问题,需构建经典名方数据标准体系的专家共识,依托国家级等重点平台,凝聚领域专家共同制定数据元规范标准,明确核心词汇的定义、类型及编码规则,实现数据源头的标准化。(3)针对标注数据不足问题,需开发融合半监督学习与主动学习的自动标注算法,可利用少量已标注数据指导对海量未标注数据的自动标注,从而提升数据的利用效率。

5.2 技术适配性问题及创新方向

人工智能模型与中医药理论的适配性问题制约了其在经典名方二次开发中的应用深度,主要表现在(1)中医药理论的体现性不足,现有计算模型在表征中医药理论核心内涵方面仍然有所局限,难以精准且动态刻画“整体观”与“辨证论治”的理论精髓。(2)模型的可解释性缺乏,尽管深度学习为复杂关联计算提供了更高的效率和准确率,但是其固有的黑箱特性也阻碍了结果的进一步解析,导致“知其然不知其所以然”的困境。(3)人工智能模型使用的混杂,缺乏针对经典名方研发场景的模型选型与联用规范,这可能会导致技术应用效率低下以及结果的不可靠。

针对以上问题,人工智能在经典名方二次开发的融合可以从以下方面进行创新。(1)开发中医药理论驱动的先验知识模型,可将君臣佐使、性味归经等核心理论转化为可计算的知识图谱,通过约束模型训练过程,使模型输出更符合中医理论逻辑。例如,已有研究构建了涵盖中药术语、化合物、靶点与疾病的多维知识图谱,并基于GAT识别出关键药对,量化其“君-臣”配伍权重,并通过实验进行了验证,为知识图谱驱动方剂智能解析提供了可

参考案例^[72]。此外, Liu 等^[73]通过在海量经典文本、临床病历与知识图谱上的预训练与微调,将散在的理论经验转化为内在的参数化知识,训练出面向中医的专业化大语言模型(Tianyi),结果表明其在中医知识问答、处方生成、辨证分析和药效预测等多个任务中表现优异,显示出强大的中医临床辅助能力。(2)针对模型“黑盒子效应”导致的决策逻辑不透明问题,可从模型选择与理论融合上提升其可解释性及可靠性。一方面,优先选用具有内在解释性的模型(如决策树等),或者将其与深度学习模型联用,最大限度提升整个模型的决策透明性。此外,可再结合沙普利加性解释法等事后可解释性技术,对复杂模型预测结果进行特征重要性排序并可视化。另一方面,考虑到中医药理论的丰富内涵,可将其与人工智能的运算模式进行结合,如将证候归纳与特征提取逻辑进行映射,使抽象的算法决策转化为临床可理解的诊疗逻辑,如此可让使用人员易于掌握并检验模型的输出结果。最后,考虑到经典名方人工智能模型的推广应用与可持续发展,可建立覆盖数据质控、模型选型、适配性评估及结果的中医理论验证全流程规范,明确不同研发任务的最优模型,并为领域内的研究提供可复现的基准。

2018年,鄂维南院士提出“AI for Science”概念,强调利用人工智能解决科研实际问题^[65]。已有不少学者尝试将人工智能技术用于中医药领域的各环节中,如在原材料阶段,结合光谱成像等测量数据构建快速、无损、智能、准确的原料质量评估模型,为实现从原料源头开始的标准化控制提供了新方法;在炮制阶段,通过模拟复杂加工过程中发生的理化变化,对过程参数进行优化;在制剂成型阶段,结合分子动力学模拟等方法开发制剂成型平台,智能预测并生成最佳制剂,在质量控制阶段,结合多组学等数据,构建中药质量的智能评价模型及作用机制的挖掘模型等,实现跨批次与产地的质量一致性评价与药效智能预测,为疗效的稳定可靠提供量化依据。

人工智能正推动传统经验医学转向“算法-模型-数据-场景-应用”的研究新范式,而“智能挖掘-机制解析-精准评价”的研究体系已成为人工智能驱动中药研发的核心逻辑。从未来发展趋势看,一方面,大模型、多模态人工智能等技术的迭代将深化古籍文献挖掘与中药分子机制研究,更驱动大规模、结构化中医药知识图谱的构建,实现创新中

药的高效研发;另一方面,跨机构数据共享平台的构建与中医药大模型评测标准的完善,将破解数据壁垒与算法可解释性难题。同时,“中医药+人工智能”交叉学科的建设将弥补人才缺口,推动产业全链条的数字化升级。随着人工智能技术自身的迭代革新及交叉人才建设体系的不断完善,不仅为经典名方的数据挖掘、处方优化与新药研发提供崭新的视野,还可通过数据驱动的研究范式与可验证的评价结果,有力推动中医药的现代化诠释与国际互认。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 曾瑾, 杨安东, 张爱军, 等. 古代经典名方中药复方制剂的注册管理及高质量转化要素分析 [J]. 中药药理与临床, 2020, 36(3): 242-254.
- [2] Zheng W J, Wang G F, Zhang Z, *et al.* Research progress on classical traditional Chinese medicine formula Liuwei Dihuang Pills in the treatment of type 2 diabetes [J]. *Biomed Pharmacother*, 2020, 121: 109564.
- [3] 闫雪, 马书鸽, 雷琼, 等. 六味地黄丸通过抑制 TGF- β 1/SMAD 信号通路对多囊卵巢综合征大鼠内分泌代谢的影响 [J]. 药物评价研究, 2022, 45(12): 2494-2500.
- [4] Shi Y Z, Wang S P, Deng D S, *et al.* Taohong Siwu Decoction: A classical Chinese prescription for treatment of orthopedic diseases [J]. *Chin J Nat Med*, 2024, 22(8): 711-723.
- [5] 吴彦欣, 李如萍, 杜克群, 等. 基于“成分群协同”与“生物过程网络”解析桃红四物汤抗血栓作用机制 [J]. 中草药, 2024, 55(21): 7365-7380.
- [6] 于智敏, 王燕平, 王永炎. 对中药二次研究开发(R&D)的认识与思考 [J]. 中国中药杂志, 2005, 30(18): 1409-1410.
- [7] 张星, 张臻, 林夏, 等. 经典名方制剂开发的主要环节关键技术问题探析 [J]. 中草药, 2021, 52(21): 6724-6731.
- [8] 孙昱, 徐敢, 汪祺. 中药二次开发的研究思路探讨 [J]. 中草药, 2021, 52(13): 4107-4113.
- [9] 吕昀, 程文倩, 牛可敬, 等. 基于多维整合策略的中药复方制剂质量评价研究 [J]. 中草药, 2024, 55(22): 7847-7856.
- [10] 康舒宇, 解瑶, 许田甜, 等. 基于方证代谢组学的泽泻汤治疗眩晕症的药效物质基础研究 [J]. 中草药, 2025, 56(8): 2687-2699.
- [11] Liu Y T, Cai H R, Li H, *et al.* Buzhong Yiqi Decoction improves cisplatin resistance in non-small cell lung cancer by inhibiting PCBP1 to activate the ferritinophagy-mediated ferroptosis pathway [J]. *J Ethnopharmacol*, 2025, 353(PtA): 120317.

- [12] Zhang L, Kong H W, Song X Y, *et al.* Danggui Buxue Decoction attenuates doxorubicin-induced cardiotoxicity by inhibiting ZBP1-mediated PANoptosis *in vivo* and *in vitro* [J]. *Phytomedicine*, 2025, 145: 157037.
- [13] 曾河坤, 聂红. 名优中成药二次开发的策略与实践: 以参芎葡萄糖注射液和安宫牛黄丸为例 [J]. 世界科学技术—中医药现代化, 2019, 21(9): 1896-1901.
- [14] 卞晓霞, 陈怡名, 佟玲, 等. 基于变异系数法结合 Box-Behnken 设计响应面法优化经典名方苓甘五味姜辛汤的提取工艺 [J]. 中药材, 2025, 48(7): 1774-1778.
- [15] Zeng J Q, Jia X B. Systems theory-driven framework for AI integration into the holistic material basis research of traditional Chinese medicine [J]. *Engineering*, 2024, 40: 28-50.
- [16] 解文欣, 张紫萱, 刘越, 等. 人工智能在中药质量中的应用及研究进展 [J]. 中草药, 2025, 56(15): 5616-5631.
- [17] 王志杰, 樊薛津, 王豫筹, 等. 机器学习方法在中医药研究中的应用进展 [J]. 药物评价研究, 2024, 47(8): 1906-1913.
- [18] 杨岩, 肖佳妹, 周晋, 等. 支持向量机法及其在中药研究中的应用 [J]. 中草药, 2020, 51(8): 2258-2266.
- [19] Liu S H, Zhang X G, Sun S Q. Discrimination and feature selection of geographic origins of traditional Chinese medicine herbs with NIR spectroscopy [J]. *Chin Sci Bull*, 2005, 50(2): 179-184.
- [20] 夏伯候, 胡玉珍, 熊苏慧, 等. 随机森林算法在中药指纹图谱中的应用: 以不同品牌夏桑菊颗粒指纹图谱分析为例 [J]. 中国中药杂志, 2017, 42(7): 1324-1330.
- [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] 朱家辰. 基于强化学习的模块化软硬结合的仿生象鼻抓取器设计与控制研究 [D]. 上海: 上海师范大学, 2025.
- [23] Yang K, Yu Z C, Su X, *et al.* PrescDRL: Deep reinforcement learning for herbal prescription planning in treatment of chronic diseases [J]. *Chin Med*, 2024, 19(1): 144.
- [24] 石军, 王天同, 朱子琦, 等. 基于深度学习的医学图像分割方法综述 [J]. 中国图象图形学报, 2025, 30(6): 2161-2186.
- [25] Zhou W A, Yang K, Zeng J Y, *et al.* FordNet: Recommending traditional Chinese medicine formula via deep neural network integrating phenotype and molecule [J]. *Pharmacol Res*, 2021, 173: 105752.
- [26] 张楠, 王晓云, 韩波, 等. 人工智能技术在中药药理学中的研究进展 [J]. 药学学报, 2025, 60(3): 550-558.
- [27] Peng C, Zhang M Y, Kong M D, *et al.* Integrating deep learning and near-infrared spectroscopy for quality control of traditional Chinese medicine extracts [J]. *Microchem J*, 2024, 205: 111310.
- [28] 祁嘉文, 刘毅. 图神经网络在中医药领域应用现状与前景展望 [J]. 中华中医药学刊, 2026, 44(1): 24-29.
- [29] 周鹏. 基于异构图神经网络的归纳式中药靶点关系发现研究 [D]. 南昌: 江西财经大学, 2025.
- [30] 鞠天杰, 刘功申, 张俸胜, 等. 自然语言处理中的探针可解释方法综述 [J]. 计算机学报, 2024, 47(4): 733-758.
- [31] 胡嘉元, 邱瑞瑾, 孙杨, 等. 自然语言处理及其在医学领域的应用 [J]. 中国循证医学杂志, 2024, 24(10): 1205-1211.
- [32] 侯校. 基于改进 Transformer 的中草药推荐方法研究 [D]. 太原: 太原理工大学, 2024.
- [33] 张一卓, 孙燕, 郑丰杰, 等. 《伤寒论》类方知识图谱构建及应用研究 [J]. 中国数字医学, 2025, 20(1): 89-96.
- [34] 陈祺焘, 倪璟雯, 徐君, 等. 生成式人工智能 GPT-4 驱动的中药处方生成研究 [J]. 中国药房, 2023, 34(23): 2825-2828.
- [35] 师飘, 郑祥明. 计算机视觉在中药饮片领域中的应用与展望 [J]. 德州学院学报, 2020, 36(6): 34-38.
- [36] 周明, 周金海, 张燕群, 等. 中药饮片性状质量智能检测关键技术研究 [J]. 世界科学技术—中医药现代化, 2023, 25(5): 1580-1589.
- [37] 钱丹丹, 周金海. 基于计算机视觉的中药饮片检测与分级研究 [J]. 时珍国医国药, 2019, 30(1): 203-205.
- [38] 赵汉卿. 随机森林算法在中药材产地溯源中的应用研究 [D]. 长沙: 中南林业科技大学, 2024.
- [39] 贾荣浩, 魏国辉, 赵文华, 等. 基于 K-近邻算法的中药化合物寒热平药性预测研究 [J]. 中华中医药杂志, 2023, 38(4): 1522-1525.
- [40] 高健翔. 基于深度强化学习的中医文本知识获取研究 [D]. 唐山: 华北理工大学, 2024.
- [41] Gu T Y, Yan Z Z, Jiang J H. Classifying Chinese medicine constitution using multimodal deep-learning model [J]. *Chin J Integr Med*, 2024, 30(2): 163-170.
- [42] Hong Y F, Zhu S S, Liu Y H, *et al.* The integration of machine learning into traditional Chinese medicine [J]. *J Pharm Anal*, 2025, 15(8): 101157.
- [43] Li X, Yuan Y, Yang Y, *et al.* Quality-Controllable automatic construction method of Chinese knowledge graph for medical decision-making applications [J]. *Inf Process Manag*, 2025, 62(4): 104148.
- [44] 虞红蕾, 曹灵勇, 瞿溢谦, 等. 消渴病经方知识图谱构建与知识发现 [J]. 浙江中医药大学学报, 2022, 46(2): 113-119.
- [45] 张思琪. 基于图卷积网络的经典名方病证结合临床定位方法研究 [D]. 北京: 中国中医科学院, 2024.
- [46] Dai Y Z, Shao X, Zhang J L, *et al.* TCMChat: A generative large language model for traditional Chinese medicine [J]. *Pharmacol Res*, 2024, 210: 107530.

- [47] Zeng J Q, Jia X B. Quantifying compatibility mechanisms in traditional Chinese medicine with interpretable graph neural networks [J]. *J Pharm Anal*, 2025, 15(8): 101342.
- [48] Yang Q, Guo J G, Lin H Q, et al. Machine learning-enhanced network pharmacology in traditional Chinese medicine: Mechanistic insights into Chai Hu Gui Zhi Tang for allergic rhinitis [J]. *Chem Biodivers*, 2025, 22(9): e202500214.
- [49] Guo F F, Tang X, Zhang W, et al. Exploration of the mechanism of traditional Chinese medicine by AI approach using unsupervised machine learning for cellular functional similarity of compounds in heterogeneous networks, XiaoErFuPi Granules as an example [J]. *Pharmacol Res*, 2020, 160: 105077.
- [50] Wu T, Lin R M, Cui P D, et al. Deep learning-based drug screening for the discovery of potential therapeutic agents for Alzheimer's disease [J]. *J Pharm Anal*, 2024, 14(10): 101022.
- [51] Zheng X E, Shi C, Xie Y, et al. Bioactive components of Jiedu Sangen decoction against colorectal cancer: A novel and comprehensive research strategy for natural drug development [J]. *Phytomedicine*, 2025, 142: 156795.
- [52] Huang D L, Wang S W, Gao Y, et al. Yi-qi-Yang-Yin Decoction ameliorates diabetic retinopathy: New and comprehensive evidence from network pharmacology, machine learning, molecular docking and molecular biology experiment [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2025, 260: 116794.
- [53] 成家禧. 基于人工智能的丹栀逍遥散协同抗乳腺癌疗效成分及其作用机制解析 [D]. 镇江: 江苏大学, 2024.
- [54] 王艳菁, 李治琦, 魏冬青, 等. 基于人工智能 SGRN-Trans 框架预测温胆汤中成分-靶点相互作用的研究 [J]. *重庆医科大学学报*, 2024, 49(8): 1002-1011.
- [55] Wang Y Y, Sui Y H, Yao J Q, et al. Herb-CMap: A multimodal fusion framework for deciphering the mechanisms of action in traditional Chinese medicine using Suhuang Antitussive Capsule as a case study [J]. *Brief Bioinform*, 2024, 25(5): bbae362.
- [56] 刘思焱, 宋菊, 唐溱, 等. 关于按古代经典名方目录管理的中药复方制剂药材和饮片研究的思考 [J]. *中国中药杂志*, 2025, 50(10): 2883-2887.
- [57] 关欢欢. 基于多源数据与人工智能算法的复方丹参颗粒质量评价研究 [D]. 南京: 南京中医药大学, 2025.
- [58] Gao L L, Zhong L, Feng T T, et al. An AI-driven strategy for active compounds discovery and non-destructive quality control in traditional Chinese medicine: A case of Xuefu Zhuyu Oral Liquid [J]. *Talanta*, 2025, 287: 127627.
- [59] 王晶晶, 徐忠坤, 付娟, 等. Box-Behnken 设计-响应面法结合 BP 神经网络法优化经典名方泻白颗粒成型工艺 [J]. *南京中医药大学学报*, 2025, 41(10): 1333-1343.
- [60] Wu J, Deng S Q, Yu X Y, et al. Identify production area, growth mode, species, and grade of *Astragali Radix* using metabolomics "big data" and machine learning [J]. *Phytomedicine*, 2024, 123: 155201.
- [61] Yu D X, Qu C, Nie J, et al. Interpretable AI-driven multidimensional chemical fingerprints for geographical authentication of *Euryales Semen* [J]. *NPJ Sci Food*, 2025, 9(1): 133.
- [62] Corbett A, Pickett J, Burns A, et al. Drug repositioning for Alzheimer's disease [J]. *Nat Rev Drug Discov*, 2012, 11(11): 833-846.
- [63] 朱润. 基于异质网络表示学习的中药药方重定位方法研究与实现 [D]. 南京: 东南大学, 2022.
- [64] Han X X, Xie X X, Zhao R R, et al. Calculating the similarity between prescriptions to find their new indications based on graph neural network [J]. *Chin Med*, 2024, 19(1): 124.
- [65] 余江, 张越, 周易. 人工智能驱动的科研新范式及学科应用研究 [J]. *中国科学院院刊*, 2025, 40(2): 362-370.
- [66] 熊皓舒, 王璧璇, 侯健, 等. 生成式人工智能 (AI) 在中药智能制造及供应链中的应用场景设计与展望 [J]. *中国中药杂志*, 2024, 49(14): 3963-3970.
- [67] 熊皓舒, 章顺楠, 朱永宏, 等. 中药智能制造质量数字化研究及复方丹参滴丸实践 [J]. *中国中药杂志*, 2020, 45(7): 1698-1706.
- [68] 张馨月, 孟鸿腾, 胡亚宣, 等. 中医药数据库构建的思路与方法研究进展 [J]. *药学学报*, 2025, 60(9): 2679-2689.
- [69] 李月, 吴斌, 高敏洁. 古代经典名方中药复方制剂的研发现状思考及建议 [J]. *中成药*, 2024, 46(7): 2488-2492.
- [70] 宋菊, 阳长明, 于江泳, 等. 古代经典名方中药复方制剂的转化研究与审评决策思路 [J]. *中药药理与临床*, 2024, 40(3): 2-7.
- [71] 郭敬, 陈琳, 李慧珍, 等. 整合医学背景下古代经典名方研发的关键问题探讨 [J]. *中国中医基础医学杂志*, 2025, 31(7): 1173-1176.
- [72] Zeng J Q, Jia X B. Quantifying compatibility mechanisms in traditional Chinese medicine with interpretable graph neural networks [J]. *J Pharm Anal*, 2025, 15(8): 101342.
- [73] Liu Z, Yang T, Wang J, et al. Tianyi: A traditional Chinese medicine all-rounder language model and its real-world clinical practice [J]. *Inf Fusion*, 2026, 126: 103663.

[责任编辑 赵慧亮]