

## 张量技术推动中药质量标准现代化

耿朴玉<sup>1,2</sup>, 江星明<sup>1#</sup>, 申 蕾<sup>1,2</sup>, 汪舒琦<sup>1,2</sup>, 邱宁宁<sup>1,2</sup>, 刘文龙<sup>1,2,3\*</sup>, 张喜利<sup>1,2\*</sup>

1. 湖南中医药大学药学院, 湖南 长沙 410208

2. 中药成药性与制剂制备湖南省重点实验室, 湖南 长沙 410208

3. 湖南省衡阳市中医医院, 湖南 衡阳 421001

**摘要:** 中药质量标准的可控性与科学性是保障中药临床疗效的核心要素, 现阶段传统质量标准的核心局限在于中药整体性与还原性之间的矛盾, 这使得中药质量标准难以获得以还原论为主导的国际认可, 进而严重阻碍了中药的国际化进程。而张量作为一种可处理复杂高维数据的数理工具, 其在人工智能和大数据技术领域的应用, 能够显著提升计算效率, 推动复杂 AI 模型与应用的实现。此外, 张量在高维数据建模方面的理论和算法研究, 为解决实际问题提供了关键的数学工具。通过应用 2 阶张量校正法和 3 阶张量校正法, 可以对中药成分进行精确的分析, 从而建立宏观中药质量与微观成分之间的逻辑关联, 有效解决中药质量整体性与还原性之间的矛盾。因此张量技术有望为中药质量标准现代化提供新的理论支持和技术手段。

**关键词:** 张量; 整体性与还原性; 宏观药效; 微观成分; 质量标准

中图分类号: R283 文献标识码: A 文章编号: 0253-2670(2026)05-1995-14

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.05.034

## Tensor technology promotes the modernization of quality standards of Chinese medicine

GENG Puyu<sup>1,2</sup>, JIANG Xingming<sup>1</sup>, SHEN Lei<sup>1,2</sup>, WANG Shuqi<sup>1,2</sup>, QIU Ningning<sup>1,2</sup>, LIU Wenlong<sup>1,2,3</sup>, ZHANG Xili<sup>1,2</sup>

1. College of Pharmacy, Hunan University of Chinese Medicine, Changsha 410208, China

2. Hunan Key Laboratory of Druggability and Preparation Modification of TCM, Changsha 410208, China

3. Hengyang Traditional Chinese Medicine Hospital of Hunan Province, Hengyang 421001, China

**Abstract:** The controllability and scientific rigor of traditional Chinese medicine (TCM) quality standards are fundamental to ensuring their clinical efficacy. The core limitation of current TCM quality standards lies in the inherent conflict between holistic and reductionist approaches, which hinders their international recognition under reductionist frameworks and significantly impedes TCM's globalization. As a mathematical tool for processing complex high-dimensional data, tensor theory demonstrates exceptional computational efficiency when applied in artificial intelligence (AI) and big data technologies, thereby accelerating the development of sophisticated AI models and applications. Furthermore, tensor-based theoretical and algorithmic research in high-dimensional data modeling provides essential mathematical tools for practical problem-solving. By applying the second-order tensor correction method and the third-order tensor correction method, we can accurately analyze the components of TCM, thus establishing the logical relationship between the macro-quality of TCM and the micro-components, and effectively solving the contradiction between the integrity and reducibility of TCM quality. Therefore, tensor technology is expected to provide new theoretical support and technical means for the modernization of quality standards of TCM.

**Key words:** tensor; holism and reductionism; macroscopic pharmacological effects; microscopic components; quality standards

收稿日期: 2025-10-03

基金项目: 国家自然科学基金项目(81874344); 湖南省卫生健康高层次人才重大科研专项(R2023139); 湖南省自然科学基金项目(2023JJ60474); 长沙市自然科学基金项目(kq2208191); 湖南创新型省份建设专项(2024RC8110)

作者简介: 耿朴玉, 硕士研究生, 从事中药质量研究。E-mail: winwin10011123@163.com

#共同第一作者: 江星明, 硕士, 高级实验师, 从事中药制剂质量及药物分析研究。E-mail: jxm519@hnuem.edu.cn

\*通信作者: 张喜利, 硕士, 副教授, 从事中药质量研究。E-mail: xiaoli610@126.com

刘文龙, 博士, 教授, 从事中药质量研究。E-mail: dragon5240@126.com

中医药的理论体系与现代医学的科学逻辑存在差异：中医药秉持整体观，视人体为一个有机整体，疾病治疗需调节阴阳平衡；药材使用注重多种成分的协同作用，且依赖“君臣佐使”配伍形成的系统效应。然而，其概念较为抽象，临床诊治难以量化。现代医学则推崇还原论，通过分子水平机制解析疾病的根本原因。这致使中医与当代主流科学概念难以对接，难以融入世界统一的科学体系。许多经典中药方剂由多种药材组成，若将其拆分并单独分析各成分在分子水平上的作用及机制，则可能无法体现原方剂的整体疗效。钟南山院士<sup>[1]</sup>曾表示，中医西医的体系是不同的，应该各自发展，共同进取，取长补短，以提高临床疗效为目的，通过产生共同语言，从不同角度进行更全面深入的研究。而张量技术(Tensor)作为高阶多维数据分析工具，为解决该难题提供了强有力的技术支撑，推动质量标准从“单一指标控制”向“整体质量监控”转变，进而化解中药质量标准“整体性”与现代科学“还原性”之间的矛盾。

中药质量标准现代化研究已搭建起基本发展框架，但仍面临诸多难题。针对这些难题，多维数据分析工具成为关键破解手段，尤其是机器学习技术，它能模拟人类自主学习、处理目标任务，深入挖掘多维数据的本质规律，因此被广泛用于中药研究，在中药质量标准现代化进程中发挥了不可替代的作用。在成分分析与质量评价层面，Wei等<sup>[2]</sup>采用超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱联用技术(ultra-performance liquid chromatography tandem quadrupole time-of-flight mass spectrometry, UPLC-Q-TOF-MS)正负离子模式在刘伟志葛根-桑葚口服液中鉴定162种成分，筛选口服液的23个共有峰，且10批样品相似度达0.99~1.00，同时定量11种关键成分；Xu等<sup>[3]</sup>通过高效液相色谱-二极管阵列检测技术(high-performance liquid chromatography with diode array detection, HPLC-DAD)同步测定泻毒散10种成分，实现多成分精准定量；吴文玉等<sup>[4]</sup>指出利用红外光谱结合支持向量机，对4个产地269个白芷样本的产地鉴别准确率达92%~95%，较传统HPLC灵敏度提升10~100倍，满足微量活性成分的定量需求。在产地鉴别与活性预测层面，Chen等<sup>[5]</sup>通过高效液相色谱-二极管阵列-化学发光技术，同步获取何首乌化学指纹与抗氧化活性数据，推动质量标准向“多维综合”升级；鲁路<sup>[6]</sup>在肾衰

营养胶囊有效成分筛选的研究中，通过分子对接联合随机森林、支持向量机等4类算法模型，对分子-靶点活性进行分类判断，预测可能存在的有效组方活性成分，提高药物靶点预测特异性。在炮制与生产过程监测中，孙忠人等<sup>[7]</sup>指出利用卷积神经网络结合在线拉曼光谱，构建山羊角水解过程定量校准模型，预测误差<5%，实时调整炮制参数，解决了传统炮制“凭经验、难控温”的行业痛点。

尽管研究取得显著进展，但也有文献指出，数据、技术与标准体系层面仍存在短板待突破。王豫蹇等<sup>[8]</sup>指出，不同数据库对同一中药术语存在差异，如黄芪表述为蒙古黄芪、膜荚黄芪，导致跨库数据整合困难；王志杰等<sup>[9]</sup>指出，中医药“形、色、气、味”经验指标无法量化，炮制过程中“炒焦”“酒炙”等关键步骤无统一参数标准，导致传统经验与国际标准衔接不畅；此外，现阶段中医药研究多集中于传统机器学习方法，针对中医数据维数高、信息量大等特点，浅层学习难以找到深层关联，且部分研究存在样本量过小，研究时限较短的问题，易造成对数据过拟合<sup>[10]</sup>。针对数据标准化、经验指标量化以及深度学习不足等现存问题，亟须通过技术融合与体系完善来加以突破，从而为中药质量标准的现代化提供更为系统、全面的支撑。中药质量标准现代化未来应加强技术融合，如将UPLC-Q-TOF-MS与AI算法结合，构建“成分-活性-疗效”闭环模型；完善国家级中药质量数据库，统一中药术语标准，建立数据共享与质量审核机制，将“形、色、气、味”等传统经验指标转化为可量化的国际通用参数，解决跨库整合难题，推动国际标准协同，助力中医药产业高质量、国际化发展。

张量是多路数组，可以看作是向量和矩阵向更高阶的推广，其元素所在位置需要3个或3个以上的变量来表示<sup>[11]</sup>。简单来说，标量为零阶张量，向量是1阶张量，矩阵为2阶张量，3阶及以上的被称为高阶张量<sup>[12]</sup>。在许多情况下，数据以张量的形式出现。例如，荧光光谱和联用色谱-质谱涉及张量格式的数据集的收集<sup>[13]</sup>。张量建模是化学计量学以及许多其他领域的新兴话题，包括信号处理<sup>[14]</sup>、生物学信息学<sup>[15]</sup>、机器学习<sup>[16]</sup>、环境分析<sup>[17]</sup>等。通过将多路数组分解为一组高阶分量，张量模型能够从复杂的多路数据中提取潜在信息和结构<sup>[18]</sup>。张量分解是处理大规模数据的一种方法，它能有效地对数据进行降阶，由于高阶张量具有唯一性、不破坏

原数据的空间结构和内部潜在信息等优点，被广泛应用于神经科学、信号处理、图像分析、计算机视觉等领域<sup>[19]</sup>。通过张量分解，可以提取关键特征，用于分类和聚类分析。2个最著名的张量分解是CANDECOMP/PARAFAC (CP)分解和 Tucker 分解<sup>[20]</sup>。CP分解是将一张量分解成一组秩1张量的总和<sup>[21]</sup>。CP分解能够提取复张量中的主要成分，揭示数据的潜在结构。Tucker分解又称为高阶奇异值分解，是把张量 $\mathcal{T}$ 分解为一个核心张量G与N个矩阵的乘积<sup>[22]</sup>。Tucker分解可以对复张量进行降维处理，同时保留数据的主要特征。

张量算法的核心价值是从多维数据中提取有效信息，其中，2阶张量算法，如交替三线性分解、自加权交替三线性分解等，凭借“2阶优势”和实用性，能够解决传统方法无法应对的谱峰重叠、未知干扰、多组分同时定量等问题。3阶张量算法，例如交替四线性分解等，为多因素质量差异解析开辟了新路径，不过仍需进一步完善数据标准和验证体系。未来，随着中药多维数据的不断积累，张量算法将朝着高阶化、智能化方向发展，进一步推动中药质量标准走向精准化。

张量技术是指基于张量的理论和方法，对数据进行处理、分析和建模的一系列技术手段。它涉及到张量的表示、运算、分解等多个方面，旨在利用张量的特性来解决实际问题。张量技术可以直接处理高维数据，无需进行复杂的降维操作，能够保留

数据的结构信息。例如，在图像处理中，图像数据可以表示为3阶张量，每个维度对应一个实际物理意义，张量技术可以直接对其进行处理，提取图像的特征，用于图像识别和分类。

### 1 中药质量标准的整体性与还原性矛盾与张量解决此问题的可能性

中医中药强调整体作用，多种成分协同起效，而现代质量标准通常采用还原论方法，将药材分解为单一成分进行分析（图1）。这种还原论方法或许难以全面捕捉整体药效，致使国际社会认为中药成分繁复、作用机制模糊，难以通过严谨的科学验证。这种差异的本质，源于中西方医学哲学基础的不同，进而引发了整体性与还原性的认知冲突。中药治病的理论基础，在于中医的“天人相应”“阴阳五行”整体观，以及“寒、热、温、凉、湿”“虚、实、沉、浮”等模糊诊断标准，这些均需医生进行主观判断。在缺乏实际实验室指标辅助的诊断情境下，医生凭借主观辨证论治，依据药物五行与人体五行的相生相克之性，运用汗、吐、下、和、温、清、补、消等法，并辅以针灸等通畅经络气血之术，以祛邪扶正，使机体恢复平衡，疾病得以痊愈。而西医的理论则立足于人体解剖学与分子生物学，将人体划分为分子、细胞、组织、器官进行分级研究，通过探究药物单一或多个成分在人体内的吸收、分布、代谢、排泄过程，来开展机制研究，以达成治病目标。

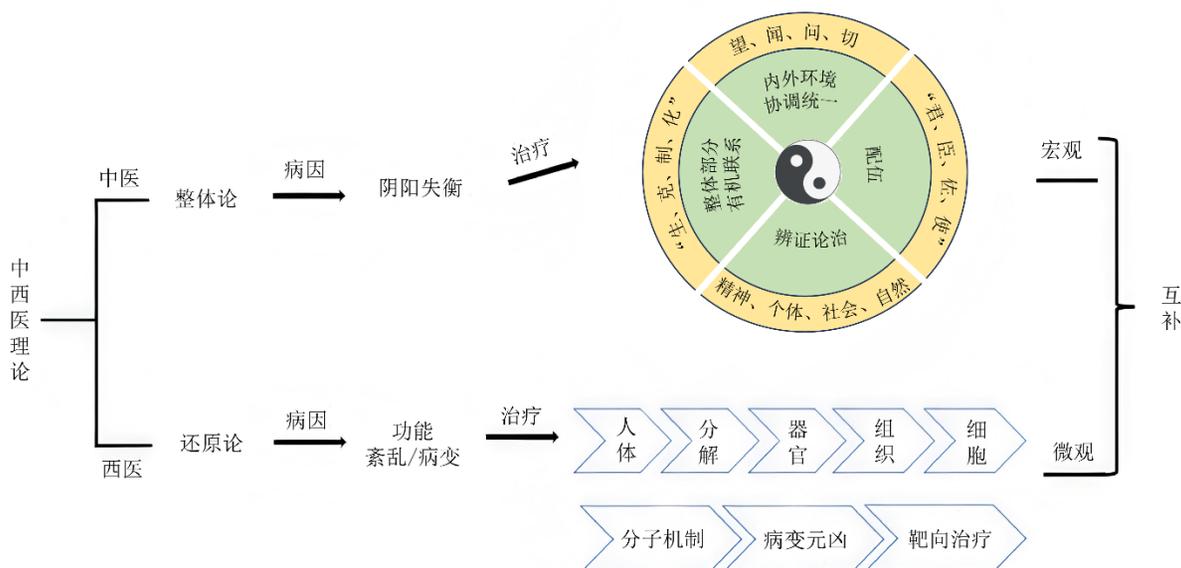


图1 中药整体性与还原性的冲突

Fig. 1 Conflict between holism and reductionism of traditional Chinese medicine

现阶段,张量可通过高维数据建模,整合宏观中药的整体协同效应数据、微观成分分析数据及主观感官评价数据,构建高维张量模型。借助一系列张量分解方法,如CP分解、Tucker分解,实现高维张量的降维,提取核心逻辑关系,揭示微观成分对宏观质量的贡献,从而有望解决中药质量的整体性与还原性问题。现代中药质量控制要求精确测定特定成分含量,而中医药理论则注重多成分协同作用的整体功效。张量利用其多维数据结构,将每个中药样本的完整化学指纹构建为包含样本、保留时间、波长等多维度的数据立方体。同时,借助张量分解算法,精确提取单个成分的纯信号与浓度,并通过多维度关联分析,揭示成分间、成分与药效间的协同拮抗网络,从而在整体系统背景下识别出关键的质量标志物。张量成为连接宏观质量表现与微观物质基础的理想桥梁,为建立符合中医药特点的质量标准提供了新的可能。

## 2 现阶段中药质量标准的具体问题

### 2.1 中药质量标准中成分选择的片面性

**2.1.1 过度关注主要成分导致质量评价不全面**  
中药或者中药复方通常含有多种成分,比如生物碱、黄酮类、挥发油等。但传统标准过度关注其中一种或几种主要成分,例如,用某一标志性成分的含量来衡量质量。这可能忽略了其他协同作用的成分,导致质量评价不全面。例如,当归补血汤中的黄芪(君药)的黄芪甲苷可以激活造血干细胞,而当归(臣药)中的阿魏酸能使其效应达到3倍<sup>[23]</sup>。而《中国药典》2025年版当归补血口服液只进行了君药中黄芪甲苷的含量检测。

驴胶补血颗粒配方中阿胶(君药)含多种氨基酸,刺激促红细胞生成素的分泌<sup>[24]</sup>,熟地黄(臣药)含有地黄多糖激活Wnt/ $\beta$ -catenin通路促进造血<sup>[25]</sup>,黄芪(臣药)中黄芪甲苷既可以上调转铁蛋白受体表达又可以激活造血干细胞<sup>[26]</sup>,党参(佐药)中党参多糖促进肠道铁转运蛋白活化,白术(佐药)中白术内酯III增强胃肠蠕动<sup>[27]</sup>,当归(佐药)中的阿魏酸能使黄芪甲苷的效应增强到3倍,同时,挥发油中的藁本内酯能扩张微血管协同补血作用<sup>[28]</sup>。阿胶的主要成分包括氨基酸、胶原蛋白和胶原肽等大分子物质,这些成分的复杂性使得传统分析方法难以直接分析。然而,通过采用色谱技术如高效液相色谱法(HPLC)和光谱技术如红外光谱(IR)、紫外光谱(UV)和核磁共振(NMR),可以更准确地

分析这些复杂混合物,从而提高阿胶的质量控制水平。张量技术可扩展至更高维数据,通过四线性模型解析蛋白质和多肽的裂解碎片信息。中药复方的质量评价不能仅依赖少数主要成分或指标成分,而应综合考虑多种成分的协同效应和整体药效,否则会导致评价结果片面、不准确。

**2.1.2 忽视微量非目标成分** 忽视含量很微小的非目标成分,比如微量元素、挥发油、脂溶性生物碱、萜类等等,它们的含量虽然低,但是往往具有关键的药理活性。由于传统水煎法工艺存在局限性,检测方法中的提取分离技术陈旧,且进样检验样品未进行深度纯化,导致这些成分很容易被忽略,比如黄芪药材的质量标准通常只检测黄芪甲苷,但黄芪多糖对免疫调节的作用不可忽视。当归药材的标准关注阿魏酸,但其挥发油成分(如藁本内酯)对活血化瘀的作用同样关键<sup>[29]</sup>。附子中的士的宁几乎不溶于水,附子的国家标准中也未关注到,但其镇痛、抗心律失常的作用不容小觑。

**2.1.3 忽略成分间比例关系** 中药的药理作用主要依赖于多种成分之间的协同增效作用,这种协同增效作用不仅与成分的含量相关,更与成分间的比例关系密切相关,然而现行的质量标准仅规定单一或少数几个成分的含量下限,却忽视了成分间的比例关系。比如,现行的人参标准通常测定人参皂苷R<sub>g1</sub>、R<sub>e</sub>、R<sub>b1</sub>的总量限度下限,但是人参皂苷R<sub>g1</sub>主要起兴奋中枢神经系统的作用,与人参皂苷R<sub>b1</sub>的镇静神经系统的作用刚好相反<sup>[30]</sup>,如果比例失衡,将会影响相关药效,如失眠或者是疲劳。同时,不同皂苷的比例,如人参皂苷R<sub>g1</sub>、人参皂苷R<sub>b1</sub>也会影响其补气作用。

在中药配伍与现代药物制剂中,配比差异导致药效不同是常见现象。中药配伍遵循“君臣佐使”理论,各成分配比是决定药效方向与强度的关键,同一组方不同配比可能导致药效差异显著。例如,全世建等<sup>[31]</sup>实验研究不同黄连、肉桂比例治疗失眠的效果,研究发现黄连:肉桂=10:1时,大脑中缝核5-羟色胺含量升高,对失眠有显著治疗效果,但当黄连:肉桂=1:10时,5-羟色胺含量不仅没升高反而下降,加重失眠症。再如,汤金波等<sup>[32]</sup>对黄连、吴茱萸配伍的研究,文中描述黄连:吴茱萸=6:1,为左金丸,主治胃实热证,黄连:吴茱萸=1:6,为反左金丸,主治胃寒证。左金丸与反左金丸由于药物配比差异使功效重心发生偏移。可见,忽略成分间比例关系会影响药效。

**2.1.4 静态检测无法反映动态变化** 中药在炮制、储存、煎煮过程中，成分会发生变化，比如高温可能破坏某些成分，或者产生新的化合物，或者储存环境的温、湿度会改变中药材的水分含量。传统质量标准通常基于某一静态时间点的化学成分检测结果。例如，黄芩中的黄芩苷，属于黄酮类弱酸性化合物，对热不稳定。在煎煮过程中，黄芩苷可能通过生物酶或化学反应转化为黄芩素，这一转化过程可能影响药效。由于标准检测可能仅关注黄芩苷的含量，它无法完全体现黄芩苷转化为黄芩素这一变化对药效的影响。又如，储存过程中的药材水分含量检测只在药材出厂检验时进行，但其运输、储存过程中都会有明显的变化，同时水分的变化也会影响药材是否霉变的情况，故单一静态的检测无法反映实际使用时的动态变化。

**2.1.5 中药质量检测的空间单一性问题** 中药材的检测样品通常被视为均质性样品，但实际上中药材本身并非均质性。无论是根茎类还是全草类，同一株植物不同部位的成分含量存在显著差异，不同株植物同一部位的成分含量也有一定差异。例如，人参主根与须根的皂苷比例存在差异，但质量检测中并未详细规定取样的正确配比，同一植物不同株的取样量也未明确。因此，在中药质量标准中，还需根据样品单株质量来规定不同部位的取样量比率以及不同株之间的比率。

《中国药典》中规范取样的设计逻辑是服务于批次质量判定，强调代表性和多部位取样，而非追

求全空间无死角覆盖，是当前平衡成本与效率之后最具可行性的方案。这能缓解中药质量检测空间单一性的问题，但无法覆盖同一植株不同部位的差异。对每株药用植物的每个部分进行检测分析，可全方位了解药用植物，但由于受技术成本与效率的多重制约，可行性比较低。中药质量控制的核心目标是保证药用部位的安全性及有效性，因此对药用部位进行全方位的检测是必要的。在技术与成本允许的情况下，可增加对药用植物各部位的取样检测，以发现更多入药部位，方便药物使用。

**2.2 中药质量标准化学检测与生物检测关联性弱，多维数据整合的能力较弱**

中药质量标准成分选择缺乏药效关联性，由于历史原因，现行药典中大部分中药质量标准所选指标性质稳定、易于检测，然而，这些指标与中药实际药效并无强正向关联，尤其是一些中药复方的部颁标准，致使部分中药有标准却无疗效。比如，补血生乳颗粒的质量标准以黄芪甲苷作为指标，尽管黄芪甲苷是黄芪中的主要成分，但黄芪并非该复方中的主药。然而，根据临床应用分析，黄芪甲苷可能对补血生乳颗粒的催乳效果有积极影响。而且，中药质量标准中对多维数据、化学成分、药效活性、代谢组学、地理生态等数据的分析较为片面，缺乏整合性研究。特别是对于不同化学成分与药效活性、药物代谢之间的相互影响关系，以及地理生态对不同化学成分与药效活性之间的影响，尚缺乏系统、整体的研究。

现阶段中药质量标准的具体问题总结见表 1。

表 1 现阶段中药质量标准的具体问题

Table 1 Specific issues of traditional Chinese medicine quality standards at current stage

片面性问题	具体表现	潜在影响
过度关注主要成分	仅以少数活性成分或特征成分为指标	忽视多成分协同作用，评价不全面
忽视微量成分	未评估协同成分、拮抗成分及有害物质	药效不稳定，可能存在安全隐患
忽略比例关系	只规定单个成分含量，忽视成分间比例	影响药效发挥，可能导致毒副作用
静态检测局限	仅检测某个时间点的成分含量	无法反映生产、贮存过程中的动态变化
空间单一性	忽视不同部位、产地、生长年限的差异	标准适用性受限，难以评价道地药材
生物效益关联弱	仅检测性质稳定，易于检测的指标。	中药有标准，无疗效

**3 张量在中药质量标准中的应用**

张量是一个极其强大的数学概念，它能处理高阶、多维数据。在数学和计算科学中可以很好地表示与计算多维度、多来源、异构数据之间的复杂逻辑关系。针对中药质量标准缺陷，张量能够整合多维、多源、异构的中药质量数据，通过数学建模揭

示复杂关联性问题，从而有效地解决传统质量标准中片面性与整体性问题。张量在中药质量标准中的应用总结见表 2。

**3.1 张量在中药质量标准的片面性中的应用**

**3.1.1 中药核心成分评价缺陷** 张量的 2 阶校正方法，能够在中药复杂基质干扰下，无需复杂分离步

表 2 张量在中药质量标准中的应用

Table 2 Application of tensors in TCM quality standards

中药质量检测具体问题	具体表现	张量技术解决方案
色谱法	①成分覆盖少（仅定量限以上）； ②批次间数据割裂（保留时间漂移）； ③多成分分离效果欠佳	多检测器数据张量融合：构建（保留时间×波长×检测器类型）3阶张量，Tucker分解提取跨检测器特征；跨批次成分溯源张量：构建（成分×保留时间×批次）3阶张量，PARAFAC2分解容忍保留时间漂移；多维条件张量优化：构建（成分峰×pH×梯度×柱温）4阶张量，张量补全预测最优分离条件
质谱法	①数据碎片化（二维矩阵存储，多模式数据割裂）；②基质效应与离子化效率差异；③未知物鉴定能力弱（依赖标准品）；④数据缺	“主观-客观”关联张量：整合评分、生化指标、微生物指标等，构建多阶张量表征逻辑关系；高阶效应张量：构建（成分×浓度×效应×通路×时间）张量，Tucker分解加入“君臣佐使”约束；稀疏张量分解算法：结合L1正则化，提升泛化能力，解决数据稀疏问题；体外-体内关联张量：整合多源数据，通过分解、回归、图网络建立逻辑关系
光谱法	①缺乏特异性，对纯度要求高；②易受多组分重叠峰干扰；③相似结构化合物难以区分；④灵敏度低，微量成分难检测；⑤数据库标准不统一	CP/PARAFAC分解：提取光谱中的纯组分特征峰，解决重叠峰干扰；Tucker分解：建立低维特征空间，区分结构相似成分，表达复杂多维数据
生物效益关联弱	①整体模糊性，主观一经验为主；②成分-效应关系不明确（多靶点、弱作用、平行通路）；③数据稀疏（成分-靶点覆盖<0~1%）；④体外-体内关联弱	“主观-客观”关联张量：整合评分、生化指标、微生物指标等，构建多阶张量表征逻辑关系；高阶效应张量：构建（成分×浓度×效应×通路×时间）张量，Tucker分解加入“君臣佐使”约束；稀疏张量分解算法：结合L1正则化，提升泛化能力，解决数据稀疏问题；体外-体内关联张量：整合多源数据，通过分解、回归、图网络建立逻辑关系

骤，直接实现主要成分与微量成分的同步定量。以丹红注射液<sup>[34]</sup>为例，传统质量标准仅关注丹参素、羟基红花黄色素A 2种主要成分，采用2阶张量校正法<sup>[35]</sup>，构建“样品-波长-保留时间”三维数据张量，可在注射液复杂基质中同时定量丹参素、丹酚酸C、迷迭香酸等8种酚酸类成分，其中丹酚酸C含量仅为丹参素的1/10，却对注射液的抗炎活性有重要贡献。再结合多维色谱技术<sup>[36]</sup>进一步验证，最终将丹红注射液质量评价指标从2项扩展至8项，实现了从“单一成分控制”到“全成分覆盖”的转变，使质量评价更全面。

**3.1.2 传统中药质量标准对微量非目标成分的忽视** 张量的多向校正方法凭借“2阶优势”，在存在未知干扰时仍能精准定量非目标成分，且无需繁琐前处理步骤，显著提升检测效率与灵敏度<sup>[37-38]</sup>。以三七饮片<sup>[39]</sup>为例，传统标准未对非目标成分进行管控，采用“化学计量学+高分辨质谱”技术<sup>[40]</sup>，构建“样品-保留时间-质荷比-碰撞能量”4阶张量，数据来源于分析仪器，每次实验生成1个三维数据块（保留时间×质荷比×碰撞能量），多个样本的数

据沿样品轴堆叠，形成4阶张量。例如，对于K个样本，每个样本在L个碰撞能量下获得J×K的质谱矩阵，最终形成I×J×K×L的张量。通过3阶校正算法解析，在三七饮片中检测到微量农药丙溴磷（含量0.012 mg/kg，低于国家标准限值0.05 mg/kg）及2种未知降解产物。将这些非目标成分纳入质量标准的“杂质检查”项，补充了风险控制维度，进一步保障了三七饮片的使用安全性。

**3.1.3 中药成分动态变化与传统静态检测的矛盾** 张量在处理以黄芩饮片（易降解）储存质量监测为例，传统标准仅检测出厂时黄芩苷含量，而张量在处理这类问题的时候采用动态张量设计<sup>[23]</sup>，如“3.1.2”项构建“储存时间-成分-环境湿度”三维张量，通过非负张量CP分解<sup>[41]</sup>，提取时间特征因子，发现黄芩苷降解速率与湿度呈正相关，在湿度60%条件下，第4个月黄芩苷含量降至标准下限（8%），同时结合Xception模型<sup>[42]</sup>，监测到饮片色泽从黄色变为棕黄色，且色泽变化程度与黄芩苷降解率的相关系数达0.92。基于此建立“储存时间-湿度-黄芩苷含量-色泽”四节张量动态模型，通过主成分分析

结合指纹图谱共有模式技术,建立黄芩饮片的质量综合评价方法,补充动态质量要求,替代传统静态检测。

**3.1.4 传统单一检测模式无法覆盖中药部位与产地的质量差异** 张量技术能够整合丹参的“保留时间×波长×产地×年限×部位”多维数据,利用 ATLD 等算法的高阶特性,量化各因素对丹参质量的影响,输出产地贡献因子、年限影响系数及部位权重。此外,该技术还可通过残差张量分解排除未知干扰,分析“产地×年限×部位”的交互效应,并通过构建综合评分模型,筛选出最优丹参组合,为丹参质量标准从“单成分控制”向“多因素量化控制”的升级提供科学依据。

张量技术收集传统标准统一要求丹参根中丹参酮II<sub>A</sub>含量 $\geq 0.2\%$ ,采用空间分析思路<sup>[43]</sup>,结合基质辅助激光解析电离质谱成像,构建“丹参根-空间位置-成分”高阶张量,发现主根皮层中丹参酮II<sub>A</sub>质量分数最高,为 $0.35\% \sim 0.40\%$ ,木质部最低,为 $0.10\% \sim 0.15\%$ ,须根质量分数为 $0.20\% \sim 0.25\%$ ;再结合多维色谱技术<sup>[36]</sup>对比陕西、四川产地丹参,发现四川产丹参的丹酚酸B含量比陕西产高15%。据此补充质量标准,实现了空间差异化质量控制,解决了传统标准空间单一性的问题。

**3.1.5 化学与生物检测脱节导致中药质量疗效关联难体现** 传统标准仅设定了丹参素含量需 $\geq 1.5 \text{ mg/mL}$ 、羟基红花黄色素A含量需 $\geq 0.8 \text{ mg/mL}$ 的化学指标,但未将这些指标与生物活性相关联。张量技术采用多模态张量设计,构建“注射液样品-化学成分-生物活性-临床疗效”四维张量,通过非负 Tucker 分解提取核心张量,发现“丹参素+羟基红花黄色素A+丹酚酸B”模块与抗炎活性、临床疗效均强关联;再采用 Group Lasso 算法<sup>[34]</sup>筛选,确定该模块的“化学-生物”关联阈值:丹参素 $\geq 1.5 \text{ mg/mL}$ 、羟基红花黄色素A $\geq 0.8 \text{ mg/mL}$ 、丹酚酸B $\geq 0.3 \text{ mg/mL}$ ,且肿瘤坏死因子- $\alpha$  (tumor necrosis factor- $\alpha$ , TNF- $\alpha$ )抑制率 $\geq 50\%$ 。在质量标准中增加生物活性要求,形成“成分含量+生物活性”的多维质量标准,实现了化学检测与生物检测的有机整合。

### 3.2 张量技术对中药质量标准检测技术提升中的应用

导致中药质量标准片面性的主要瓶颈在于中药检测方法在灵敏度、检测能力以及数据整合与关

联方面存在一定局限性。现阶段中药成分检测主要分为色谱法、质谱法、光谱法、生物活性检测技术这4大方面。

**3.2.1 张量在色谱法检测技术上的应用** 色谱法的主要缺陷:①色谱峰定量限以上成分覆盖较少;②不同色谱仪及不同时间段进样时,保留时间差异大,导致批次间数据割裂;③多成分分离效果欠佳。对于以上问题,张量有很好的解决策略。对于成分覆盖少的问题,可以使用多检测器的数据张量融合技术,首先同步采集同一色谱峰的紫外检测器的全波段扫描数据、蒸发光散射检测数据,然后构建3阶张量,保留时间波长检测器类型张量数据模型,使用 Tucker 分解提取跨检测器特征,例如在丹参质量分析中,紫外分光光度检测不到的三萜类化合物通过蒸发光散射与质谱的联合张量融合检出率提升47%<sup>[44-45]</sup>。针对批次间数据割裂问题,可采用跨批次成分溯源张量模型。具体步骤为:收集不同产地/批次药材的色谱数据,构建3阶批次张量,并应用 PARAFAC2 分解以允许保留时间漂移。通过该建模方法,可有效识别不同保留时间漂移下的同一物质,从而统一批次间数据。最后,多成分分离效果欠佳的问题,可以采用多维色谱条件的张量优化,通过对流动相pH值、流动相的梯度、柱温3个因素,5个水平设计正交试验,得到3因素5水平的色谱图,根据色谱图上色谱峰,构建成分峰,pH值,洗脱程序,柱温4阶条件张量,最后通过张量补全法预测最优分离条件。如黄芪色谱分离分析中,原方法检出12个峰,通过张量优化后稳定检出28个峰<sup>[46-47]</sup>。

在色谱分析中,张量技术被广泛应用于处理联用仪器产生的高维数据,以有效解决峰重叠和基质干扰问题,例如通过优化色谱条件,选择合适的载气和流速,调整柱温和色谱柱,以及控制进样时间和量。如胡勇<sup>[48]</sup>将2阶校正与液相色谱-质谱联用技术结合,构建三维张量,针对能量饮料中9种B族维生素共洗脱与基质干扰问题,通过交替三线性分解和交替惩罚三线性分解算法实现张量分解,提取各维生素的色谱轮廓,定量结果与液相色谱-串联质谱联用技术一致,验证了张量在色谱数据“数学分离”中的优势。

**3.2.2 张量在质谱法检测技术中的应用** 质谱分析法的局限,①质谱数据碎片化,质谱数据通常以保留时间与质荷比的二维矩阵的形式存储,不同批

次、条件或检测模式,如正/负离子模式的数据相互割裂,导致信息利用率低<sup>[49]</sup>。②质谱的“基质效应”与“离子化效率差异”明显,在复杂的药提取物中,许多类型的化合物共同存在,干扰目标物离子化,导致定量偏差<sup>[50]</sup>;③对未知物鉴定能力弱,传统质谱依赖标准品数据库,难以鉴定新的天然产物;④质谱仪的质谱数据因样品制备的过度纯化或仪器故障,容易出现缺失值或者噪声<sup>[51-53]</sup>。

基于以上缺陷,张量能够很好地进行弥补。首先,针对质谱数据碎片化的问题,张量技术通过构建高阶数据张量(如3阶张量,包含质荷比、保留时间及实验批次)或更高阶张量(整合离子化模式、药材产地等维度),实现数据的全面整合。通过高阶张量的构建与 Tucker 分解,提取跨批次的质谱稳定信息,有效减少仪器波动的影响。缓解质谱的“基质效应”与“离子化效率差异”是通过张量中的多模态张量建模整合质谱数据与相关辅助信息实现的<sup>[54-55]</sup>,如超高效液相紫外检测、近红外光谱检测,构建质荷比、保留时间、检测方法的3阶张量,通过耦合矩阵分解关联不同数据源,从而校正离子化效率的差异。为提升对未知物的鉴定能力,需认识到质谱技术目前严重依赖标准品和标准品数据库进行化合物的鉴定与定量,而对于新化合物则缺乏有效的定性定量方法。张量技术凭借其强大的数据处理能力,可建立多维度质谱张量(涵盖质荷比、保留时间、碰撞能量及电离模式),通过高阶关联挖掘与动态建模,解决传统质谱无法预测未知物的难题,实现从“数据库匹配”向“智能匹配”、从“单一成分”分析向“系统关联”研究的质的飞跃。关于补充缺失值或者降低噪声的张量处理策略,使用低秩张量补全从部分观测数据重建完整张量,通过保留时间-质荷比-批次高阶张量补全完整张量,这样恢复的结构张量保留高阶关联性<sup>[56-58]</sup>。

张量在质谱分析中主要用于数据格式优化与深度分析,如周海洋等<sup>[59]</sup>设计基于 PyQt 的计算软件,处理数据非依赖采集张量格式的质谱数据,将原始数据非依赖采集质谱数据转化为3阶张量,实现数据格式转换、可视化和深度学习模型训练等功能,用于甲状腺结节的表型分类,提高了分析效率和准确性。

**3.2.3 张量在光谱法检测技术中的应用** 用于中药质量检测的光谱有红外、紫外、核磁、荧光、原子吸收法,它们共同的缺点是缺乏特异性,对检测

物质的纯度要求较高,在测定混合物时易受多组分重叠峰干扰,相似结构的化合物光谱特征高度相似,灵敏度较低,许多中药中的微量成分无法被检测。中药光谱数据库缺乏统一的光谱采集标准(如分辨率、扫描次数)。一些高精度光谱设备使用维护保养技术成本较高,难以推广使用。张量中的 CP/PARAFAC 分解,主要是将高维的张量分解成多个核的和,每个核是由向量的外积组成,通过这样的分解,我们可以大大降低参数的维度,提取光谱中的纯组分特征峰,完美解决组分重叠峰的干扰<sup>[60-63]</sup>。张量中的 Tucker 分解的目标是找到最接近原始张量的核心张量和模式矩阵,同时保证这些低秩矩阵能够有效地重构原始数据。建立低维的特征空间,将结构相似、灵敏度较低的成分以及复杂多维的数据简单的区分与表达出来,从而解决光谱在中药质量中的限制问题<sup>[64]</sup>。

在光谱分析领域,张量技术常用于平衡数据噪声与结构保留问题,同时应对复杂体系中的光谱干扰。如马谋等<sup>[65]</sup>在研究中提出 LRTDKGLR 算法,将高光谱图像这一3阶张量通过 Tucker 分解提取核心张量与因子矩阵,结合克罗内克积构建乘积图,在模拟和真实数据集去噪实验中,平均峰值信噪比、平均结构相似性均优于传统方法,有效保留空间细节与光谱连续性。

**3.2.4 张量在生物效应检测技术中的应用** 中药的多靶点多成分的特异性,导致生物效应具有整体模糊性,判断标准多以主观经验为主,无法直接量化为张量数据,同时由于中药复杂体系,如煎剂,难以精确操控,导致中药生物效应与成分关联性弱-通过构建“主观-客观”关联张量,将主观指标进行评分分级,结合一些客观的生化指标与微生物多样性指标,构建多阶张量数据表,通过张量数据表示主观指标与客观指标之间的逻辑关系。或者加入时间维度,将患者前后的症候演变与干预措施、血压、血常规指标等生化常规指标进行高阶张量分析,从而得到用药后主观指标与客观指标之间的关联性。

多个成分可能通过弱结合作用在同一靶点产生显著效应,从而极大削弱了单一成分贡献。此外,不同成分激活平行通路,导致剂量与效应关系难以明确。通过构建高阶张量,比如成分组合、浓度梯度、效应指标、通路活性,同时考虑时间、剂量、配比、效应、机制之间的逻辑关系,然后通过 Tucker 分解,加入中医理论中的“君、臣、佐、使”

的约束条件,给君药更多权重,实现成分效应的精确对应。尽管中药成分与人类靶点的组合数量庞大,但通过高通量筛选(high-throughput screening, HTS)技术、网络化研究和计算机辅助靶点预测等方法,可以有效识别中药活性成分的靶点,并缩小潜在靶点范围,从而提高实验数据的覆盖性,减少数据稀疏性,为有效的数据分析提供可能。张量中需要开发稀疏张量分解算法,可以结合 L1 正则化用来防止过拟合<sup>[66]</sup>,通过向损失函数添加权重,促使模型权重稀疏化,使部分无关数据的权重为零,提升泛化数据的处理能力,解决数据稀疏化的问题。体外与体内的生物效应缺乏逻辑性的关联分析工具,体外模型无法预测体内的生物效应,通过体内体外的数据整合,通过成分浓度、体外模型、体外生物指标、体内生物标志物、时间轴构建高维的张量数据,通过分解、回归、图网络等张量分析手段,建立生物效应的体外-体内逻辑关系。

**3.2.5 张量技术推动中药质量检测技术的具体路径** 中药质量检测的张量模型建立,涵盖了从多源数据采集→数据预处理→张量构建→模型训练→质量评估的全流程关键技术环节。第1步是采集中药质量多源数据,光谱数据、图像数据、环境数据和化学成分数据等。第2步开始进行数据的预处理工作。多源数据清洗与校正,这包括通过色谱、光谱等技术获得的化学成分数据;通过生物活性实验获得的生物效价数据;记录产地的气候、土壤等环境因子数据;以及利用电子眼、电子鼻等智能感官技术捕获的外观性状数据(如颜色、纹理、气味图谱),这些原始数据通常含有大量“杂质”而且还难以统一计量,必须进行清洗与校正。缺失值处理:对于缺失较少的字段,可采用删除法;若缺失较多,则需根据数据分布特征,使用均值、中位数或插值法进行填补,以维持数据完整性。异常值处理:可通过箱线图或统计方法识别异常值,并根据其性质决定进行截尾处理或直接剔除;噪声滤波:对于光谱或序列数据,采用 Savitzky-Golay 滤波或中值滤波等方法平滑随机噪声,提升信噪比。然后是数据转换与融合,将不同来源的数据(如化学数据、环境数据、生物效价数据等)进行集成。第3步张量构建,定义统一张量维度,根据样本数、成分、环境、效应、性状、时间等数据构建多维张量:每个元素  $T(s, c, e, x, b, t)$  表示在特定样本  $s$ 、时间  $t$  下,成分  $c$ 、环境  $e$ 、性状  $x$  与效价  $b$  的数值。

缺失值通过张量补全算法(如 Tucker 分解结合交替最小二乘法)填充。在处理高维张量数据时, Tucker 分解作为一种有效的降维技术,能够保留 90%以上的方差,从而在降低计算复杂度的同时,保留数据的关键信息,以提高数据的完整性和可用性。然后张量分解与特征提取,对于显式因子(如“成分-效价”关联模式)的提取,用 CP 分解。对于提取潜在特征(如环境-性状-代谢的等跨尺度关联)张量分解方法一般选择 Tucker 分解。而对于特别高维的张量选择张量环分解,将高阶张量表示为多个 3 阶核心张量的链式乘积(张量环)。这种方法在参数效率方面表现出色,尤其适用于处理非常高维的张量。对分解后的因子矩阵进行载荷分析,筛选方差贡献率 > 85% 的维度进行特征重构,将筛选后的特征(如核心张量的部分维度、重要因子向量的组合或关键秩一分量)重构为新的、更低维但更精华的特征表示。最终得到的特征表示可以是一个低维向量、一个精简后的张量,或者一组具有明确物理或生物意义的特征符号,为后续的中药质量评价、预测等任务提供支持。第4步模型训练阶段,张量构建成功后,必须进行数据模型的训练,进行科学的数据划分,这是保证模型泛化能力的基础。因为一个好的模型最终要服务于实际应用,用于新样本的预测、工艺优化、质量的溯源与预警。针对中药数据的复杂特性,通常需要采用多种模型或将它们组合使用。线性关系(如成分-含量预测),采用岭回归(L2 正则化防止过拟合);非线性关系(如环境-药效关联),采用多项式回归或支持向量机(support vector machine, SVM);复杂模式识别(如指纹图谱分类):使用卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)或多层感知机(MLP);模型融合与优化,使用堆叠法融合多个模型,以元学习器动态加权回归、SVM、CNN 的预测结果。中药生产是一个动态过程,环境、原料可能变化,因此模型需要持续学习和优化。应定期收集新的生产数据,对模型进行微调或再训练,使其能够适应新的变化,保持预测的准确性。第五步质量评估应用,对中药道地性鉴别可使用分类模型(如 SVM)区分产地,准确率 > 90%。通过张量回归预测未知样本的成分含量( $R^2 > 0.85$ );使用 FineBI 或 Python Matplotlib 生成热图、聚类图,展示成分-环境-效价关联模式。对不同产地的中药材的质量与生物效应做前瞻性的预测。中药生产过程中,通过实时采集近红外光谱(NIRS)数据填充张量,动态预测当

前批次皂苷含量，进而优化提取工艺。通过上述具体流程，张量技术使中药检测从“黑箱”概念转变为可操作的标准化质量检测方法成为可能，为道地

性鉴别、工艺优化及新药研发提供强大的数学技术支撑。张量技术推动中药质量检测技术的具体路径，见图2。

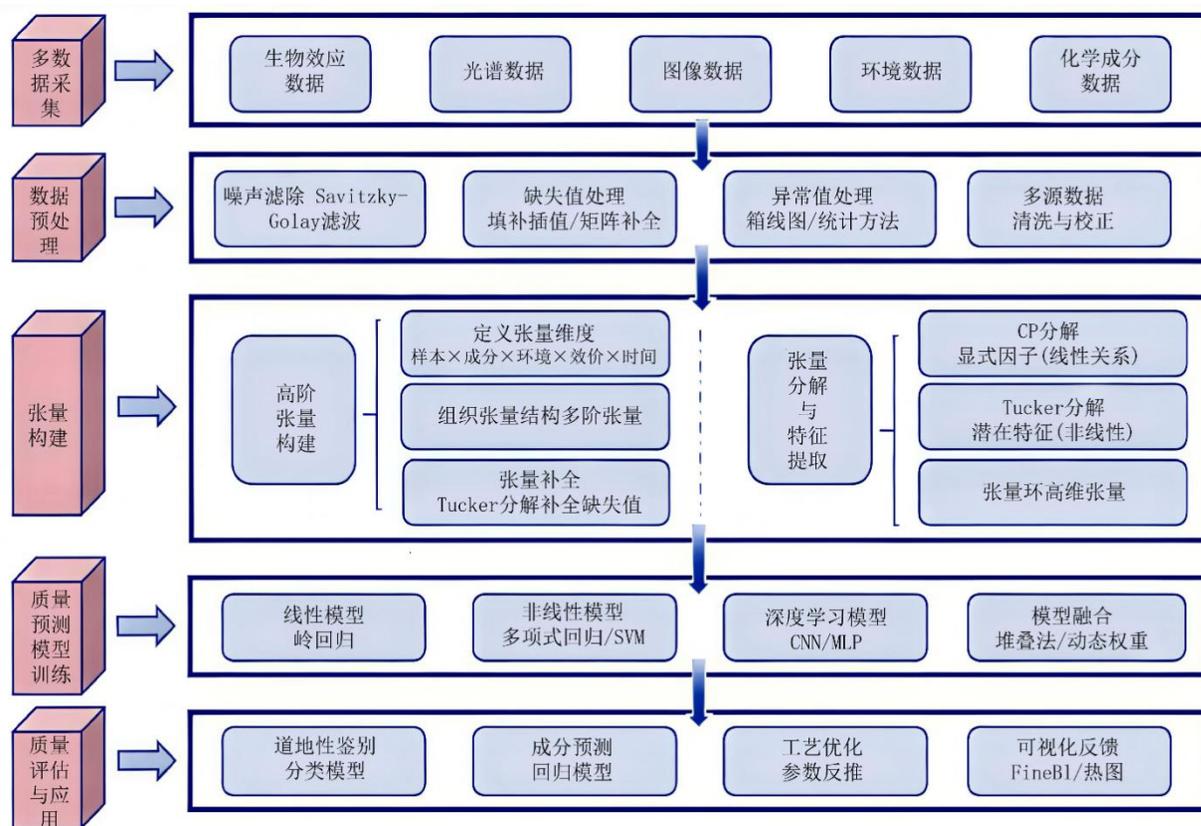


图2 张量技术在中药质量检测中的具体应用流程图

Fig. 2 Flowchart of tensor technology applications in traditional Chinese medicine quality detection

现阶段张量技术在中药质量控制方面已经取得了一些成绩，许慧等<sup>[35]</sup>通过高效液相色谱-二极管阵列检测（HPLC-DAD）结合交替三线性分解（ATLD）算法，实现了中药葛根提取物中葛根素、大豆苷和大豆苷元3种主要有效成分的同时快速定量分析。该方法基于三线性成分模型，将HPLC-DAD产生的三维数据阵（保留时间×波长×样本）进行数学分解，利用ATLD算法提取纯组分的相对色谱、光谱和浓度信息，无需复杂的色谱基线分离或繁琐样品预处理。实验采用C<sub>18</sub>反相柱和乙腈-水梯度洗脱，在短时间洗脱且色谱峰严重重叠的情况下，通过算法解析成功克服了背景干扰和共流出问题。结果显示，与传统高效液相色谱方法相比，分析效率显著提高，且有机溶剂使用量减少。选用这种方法凸显了张量校正的“2阶优势”，在未知干扰共存的情况下，可直接定量目标成分。还有通过方证代谢组学与靶向蛋白分析与液质联用数据构建的多维张量数据分析的新策略，研究人员成功鉴定

出痹痛宁胶囊中的主要有效成分，如异甘草苷、香橙素及5,3',4'-三羟基黄酮等，这些成分符合Q-Marker的“五原则”，并具有较强的生物学活性。这表明，通过张量科学的数据驱动方法，可以有效地提升中药产品的质量水平。而且当面对成分极其复杂、难以逐一阐明的体系时，模型会输出一个量化的综合分数，这个分数代表了该样品与经过大量优质样本训练得到的标准品质指纹图谱之间的匹配度或相似度。在实际质量控制中，就可以规定此相似度评分不得低于某一数值来进行评价。张量技术并非创造全新的质量指标类型，而是通过多维数据解析能力，让质量指标的成分选择更精准、量化依据更充分、综合评价更科学。核心化学成分组合满足质量标准成分明确的硬性要求，综合性质量评分则实现中药多因素影响的全局评价，二者协同推动中药质量标准从经验性描述向量化科学转型。为中药质控提供了一种绿色、高效的解决方案，支持多成分协同作用的整体评价，推动了中药质量

标准向智能化和全面化发展。

引入张量算法后,中药质控领域实现了多方面的显著提升。首先,算法通过“数学分离”替代繁琐的物理化学分离,极大简化了样品预处理流程,减少了处理时间和有机溶剂使用,体现了绿色分析理念。其次,凭借“2阶优势”,该算法可在未知干扰共存的情况下直接定量目标成分,显著提高选择性与准确性,降低假阳性/阴性风险。同时,多维数据的整合增强了分析的全面性和整体性,支持多活性成分协同监控,更契合中药复方特点。此外,高通量技术的引入显著提升了算法的处理效率,实现了对大量样本的快速分析,从而便于进行实时质控。最后,其灵活适应性强,对组分数不敏感,在复杂体系中仍能保持稳定输出,降低了方法开发门槛。这些进步共同推动中药质量标准朝着智能化、精准化和高效化的方向迈进。

张量技术能完整保留数据固有的多维结构和相互作用。它将中药视为一个由多种成分、多个影响因素构成的复杂系统,从而能够从整体上捕捉其质量特征,更符合中医药的整体观哲学。此外,结合2阶张量校正方法,实现了“数学分离”技术,该技术能够处理色谱峰重叠和未知干扰问题,通过算法直接解析出目标成分的纯信号并进行定量分析。这不仅简化了前处理步骤,缩短了分析时间,还提高了分析的准确性。通过张量分解,能提取出隐藏在原始数据深处的潜在因子。这些因子是高度凝练、具有明确物理意义,如代表生长年限的特征,用于质量评价、溯源和分类时,比传统指标更稳定、更灵敏、更具区分度。基于张量的模型,如TDMT\_INV方法,利用Pnl全波列进行反演,不需要精确量取震相,甚至不需要大量的观测数据,有利于快速产出。这些模型在非线性系统稳定性分析中表现出更好的稳定性和重现性,如张量特征值的应用所示。此外,张量型Expectile回归模型在处理高维、非线性和结构复杂的数据时,通过张量分解技术捕捉变量间的非线性关系和复杂依赖关系,展现了在不同仪器、不同实验室间的通用潜力。例如,在中药成分分析中,2阶张量校正法被广泛应用于中药成分分析中,通过对光学旋光和荧光强度的多元回归分析,可以获得更为精确和准确的成分浓度信息。此外,多元统计分析方法在中药质量评价中的应用,如聚类分析和判别分析,也展示了通过数学方法提取特征并进行质量评价的有效性。基于张

量的模型因其强大的数据表示和降维能力,能够挖掘高维数据中的潜在关系,因此在处理复杂数据时表现出对随机误差和微小波动的鲁棒性。例如,Tucker张量因子模型的稳健估计方法已被应用于金融、生物医疗和社会科学等领域,显示出在不同仪器和实验室间具有更强的通用潜力和稳定性。

#### 4 结果与展望

中药质量标准的整体性与还原性问题,其实本质上是中西方哲学思想的碰撞,是中医药的传统“系统思维”与现代科学研究方法“分析思维”之间的碰撞。本文通过总结现阶段中药质量标准的具体问题,分析张量在这些具体问题中展现的数据建模分析与分解降维能力,或可以解决中药质量标准的整体性与还原性的矛盾。但二者的本质是互补而非对立,应当以整体指导还原,以还原支撑整体,形成一种相互交融、密不可分的模式。张量通过高阶数据融合全面提升中药的整体性数据,整合微观成分、生物效应、感官观察等多维数据,避免传统中药质量标准中“只见树木、不见森林”的局限。同时,张量通过智能建模解析微观成分含量与生物整体效应之间的贡献度,进一步明确“整体宏观药效—还原微观成分”之间的逻辑关联以及“树木”与“森林”的关系。

中医辨证的核心在于整体观,而张量的高阶关联特性可将辨证要素转化为可计算的数学维度。未来可探索构建“证候-中药-成分-效应”张量网络,将诊断得到的舌象、脉象等症候通过卷积神经网络提取特征后整合为证候特征张量;根据高效液相色谱等分离方法等得到的化学成分数据,构建中药—成分张量;通过细胞实验,动物实验以及临床疗效等多维校验数据,形成效应张量;通过整合成分理化特征与生物效应数据形成成分-效应张量。利用CP或Tucker分解,对多维张量进行高级关联分析,挖掘症候与中药、成分与效应的潜在关系,通过细胞实验验证关键成分对靶点通路的调控作用,结合动物实验与临床数据闭环验证,最终量化揭示“证候-中药-成分-效应”的关联,直接证明中药多成分协同起效的物质基础及整体调节的作用机制。通过中医诊断的结果与张量方法进行融合,可将中医辨证从主观经验转化为基于张量特征的客观分类,推动辨证标准的国际化共识。在国际认可中,现行中药标准面临“成分复杂性”与“作用机制模糊”的挑战。然而,通过张量分析,如构建图网络等张量

处理方式，可以关联标准，有助于克服这些挑战。例如，中国在中医药标准化建设方面取得了显著进展，国家中医药管理局发布的《中医药标准化行动计划（2024—2026年）》旨在建立适应中医药高质量发展需要的标准体系，包括180项国内标准和30项国际标准的制定。此外，通过创新中药复杂体系的“化学-代谢-生物”系统分析方法，可以为标准制定和精准检测奠定坚实基础。

张量分析为中药质量评价与标准构建开辟了从依赖经验到数据驱动的转型路径，其价值不仅体现在技术层面的突破，更体现在推动中医药理论的量化表达与国际化传播。未来，随着张量算法不断迭代以及中医理论实现量化表达，中药质量控制有望达成从局部成分控制到整体效应调控的跃升，为中医药在复杂疾病防治、大健康产业中的创新应用筑牢科学基础，最终推动中医思维与现代科技深度融合，形成具有中国特色的医药学新体系。

张量技术能有效缓解中药质量标准成分选择的片面性但并非万能解。传统标准常以单一或少数成分作为质控指标，既未关联药效，也未考虑产地、年限等因素对成分的影响，而张量技术通过整合“成分-活性-产地-年限”等多维数据，可分离出与药效相关的多个活性成分，并借助“高阶优势”排除未知干扰，让成分选择更贴合中药“多成分协同作用”特点。

在全面性化学成分的选择方面，张量技术可提供关键的量化依据，辅助拓展质控指标的范围。该方法基于多维数据分解技术，例如三线模型，能够自动提取数据阵中的纯组分光谱和浓度信息，进而识别未被校准的未知成分。人工智能识别方法，例如深层残差网络，可结合多维谱数据，如反相色谱、亲水作用色谱等，对药材的种属和产地进行分类，并输出未知类别预警，提示可能存在的新成分。这意味着张量技术不仅能量化已知成分，还可通过模式识别，如聚类分析，筛选出与药效相关的隐含标志物，为全面性质控标准提供数据驱动依据。

尽管张量技术具有独特优势，但其全面解决问题和绝对普适性仍受到一些因素的限制。首先，张量模型依赖于高质量、多维度、标准化的原始数据。中药数据常因不同来源的检测方法差异而存在数据异质性，部分成分检测灵敏度不足，缺失值或噪声会影响张量分解的准确性，生物活性、临床疗效数据的获取成本高，样本量小，难以支撑高阶张量

建模。其次，张量分析需要专业的数据科学家和相应的计算资源，这对许多中药企业和研究机构而言是一个较高的门槛。目前，张量方法在中药领域的应用多为研究性工作，缺乏统一标准和广泛验证，距离大规模工业应用和质量标准的制定仍有差距。

张量技术是解决中药质量控制中复杂问题的极具潜力的前沿工具，但它并非能全面解决各种问题的万能方法。它应被视为一个强大的补充和分析工具，而不是取代现有所有方法的革命性技术。它需与中药学理论、现代分析化学、药理学、统计学等学科紧密融合。在数据驱动的中药研究范式下，伴随中药大数据平台的建设与数据标准化程度的提升，张量技术有望在复杂质量评价体系构建、制药过程智能控制、中药作用机制阐释等核心难点问题上发挥愈发重要的作用。

**利益冲突** 所有作者均声明不存在利益冲突

#### 参考文献

- [1] 钟南山. 用现代科技实现中医从经验向循证转化 [J]. 中医临床研究, 2024, 16(18): 7.
- [2] Wei S L, Jiang Y, Li M X, *et al.* Chemical profiling and quality evaluation of Liuweizhiji Gegen-Sangshen oral liquid by UPLC-Q-TOF-MS and HPLC-diode array detector fingerprinting [J]. *Phytochem Anal*, 2024, 35(4): 860-872.
- [3] Xu Y, Wang Y, Yue X, *et al.* Application of a new validated HPLC-DAD method for simultaneous determination of ten active components in xiedusan [J]. *Pakistan J Pharm Sci*, 2022, 34(6): 2235-2245.
- [4] 吴文玉, 詹少锋, 焦欣, 等. 中医药领域机器学习研究的现状与发展趋势探讨 [J]. 中华中医药学刊, 2025, 56: 56.
- [5] Chen H F, Chen Y H, Liu C H, *et al.* Integrated chemometric fingerprints of antioxidant activities and HPLC-DAD-CL for assessing the quality of the processed roots of *Polygonum multiflorum* Thunb. (Heshouwu) [J]. *Chin Med*, 2016, 11: 18.
- [6] 鲁路. 基于机器学习优化分子对接筛选肾衰营养胶囊有效成分 [D]. 广州: 南方医科大学, 2017.
- [7] 孙忠人, 游小晴, 韩其琛, 等. 人工智能在中医药领域的应用进展及现状思考 [J]. 世界科学技术—中医药现代化, 2021, 23(6): 1803-1811.
- [8] 王豫骞, 樊薛津, 金博文, 等. 中医药生物信息学数据库: 从数据整合到知识发现 [J]. 中草药, 2025, 56(17): 6450-6462.
- [9] 王志杰, 樊薛津, 王豫骞, 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.
- [10] 关菀, 马志龙, 徐春, 等. 深度学习技术在中医领域中的应用 [J]. 中国卫生信息管理杂志, 2022, 19(2): 281-285.
- [11] 白敏茹, 黄孝龙, 顾广泽, 等. 基于张量秩校正的图像恢复方法? [J]. 湖南大学学报: 自然科学版, 2016, 43(10): 148-154.
- [12] 杨燕. 复张量的特征值分解算法 [D]. 长沙: 湖南大学, 2020.
- [13] Yu H W, Larsen K G, Christiansen O. Optimization methods for tensor decomposition: A comparison of new algorithms for fitting the CP(CANDECOMP/PARAFAC) model [J]. *Chemom Intell Lab Syst*, 2025, 257: 105290.
- [14] Sidiropoulos N D, De Lathauwer L, Fu X, *et al.* Tensor decomposition for signal processing and machine learning [J]. *IEEE Trans Signal Process*, 2017, 65(13): 3551-3582.
- [15] Yan K, Lv H W, Guo Y C, *et al.* TPpred-ATMV: Therapeutic peptide prediction by adaptive multi-view tensor learning model [J]. *Bioinformatics*, 2022, 38(10): 2712-2718.
- [16] Sun Z Z, Peng C, Liu D, *et al.* Generative tensor network classification model for supervised machine learning [J]. *Phys Rev B*, 2020, 101(7): 075135.
- [17] Rajesh G, Chaturvedi A. Data reconstruction in heterogeneous environmental wireless sensor networks using robust tensor principal component analysis [J]. *IEEE Trans Signal Inf Process Netw*, 2021, 7: 539-550.
- [18] Guo L L, Yu H W, Li Y, *et al.* Tensor methods in data analysis of chromatography/mass spectroscopy-based plant metabolomics [J]. *Plant Meth*, 2023, 19(1): 130.
- [19] 熊李艳, 何雄, 黄晓辉, 等. 张量分解算法研究与应用综述 [J]. 华东交通大学学报, 2018, 35(2): 120-128.
- [20] Qi L Q, Chen Y N, Bakshi M, *et al.* Triple decomposition and tensor recovery of third order tensors [J]. 2021, 42(1): 299-329.
- [21] Pandey D, Decurninge A, Leib H. An introduction to complex random tensors [J]. *IEEE Access*, 2024, 12: 157901-157923.
- [22] 史加荣, 张安银. 概率张量分解综述 [J]. 陕西理工大学学报: 自然科学版, 2018, 34(4): 70-79.
- [23] Zhao K J, Dong T, Lo C K, *et al.* Synergistic hematopoietic effect of Astragaloside IV and Ferulic acid from Danggui Buxue Decoction: Role of Nrf2-mediated oxidativestress response [J]. *J Ethnopharmacol*, 2018, 226: 101-110.
- [24] Wang Y, Zhang L, Zhang Y, *et al.* Donkey-hide gelatin (Ejiao) activates EPO synthesis via amino acid-mediated HIF signaling in chronic anemia model [J]. *Phytomedicine*, 2024, 128: 155432.
- [25] 王颖, 吴群, 欧阳思露, 等. 国医大师刘尚义教授临证治疗恶性肿瘤常用药对研究 [J]. 中华中医药学刊, 2021, 39(12): 42-45.
- [26] Zhao Y, Liu Y, Chen X, *et al.* Astragaloside IV promotes hematopoiesis by enhancing transferrin receptor expression and activating stem cell factor/c-Kit signaling [J]. *Phytother Res*, 2024, 38(5): 1145-1153.
- [27] 沈怡, 马萍, 董邦健, 等. 四君子汤非多糖功效组分的体外人源肠、肝微粒体代谢研究 [J]. 中草药, 2023, 54(15): 4905-4919.
- [28] Chen L, Wang R, Xu J, *et al.* Ferulic acid enhances the anti-fibrotic effects of astragaloside IV on pulmonary fibrosis via TGF- $\beta$ 1/Smad3 signaling [J]. *J Cell Physiol*, 2024, 239(3): e31245.
- [29] 李春玉, 马晓霞, 刘小莉. 当归“辨状论质”品质评价及道地性品质形成研究进展 [J]. 中草药, 2025, 56(3): 1104-1114.
- [30] 钟佳君, 刘妍, 刘兴阳, 等. 人参皂苷调节配体门控离子通道研究进展 [J]. 中国药理学与毒理学杂志, 2024, 38(12): 932-944.
- [31] 全世建, 林杏娥, 刘妮. 交泰丸不同配伍比例的药效学研究 [J]. 中药材, 2006, 29(2): 164-166.
- [32] 汤金波, 陈冠林, 许仕杰, 等. 探讨药物的不同剂量配比对方剂功效的影响 [J]. 辽宁中医杂志, 2011, 38(6): 1171-1172.
- [33] 余伯阳, 何正大, 戚进. 一种基于人工智能的中药识别方法: 中国, CN201911095497.9 [P]. 2020-02-28.
- [34] 宋祺. 基于模块化张量分解的丹红注射液心脑血管同治动态模块识别及共治机制研究 [D]. 北京: 中国中医科学院, 2024.
- [35] 许慧. 2阶张量校正方法在中药与人体液中药物分析方面的应用 [D]. 长沙: 湖南大学, 2012.
- [36] 侯旭晖, 尹健, 杨松柏. 多维色谱技术在中药复杂成分分析中的应用进展 [J]. 特产研究, 2024, 46(6): 165-172.
- [37] Wu H L, Wang T, Yu R Q. Recent advances in chemical multi-way calibration with second-order or higher-order advantages: Multilinear models, algorithms, related issues and applications [J]. *Trac Trends Anal Chem*, 2020, 130: 115954.
- [38] Wu H L, Long W J, Wang T, *et al.* Recent applications of multiway calibration methods in environmental analytical chemistry: A review [J]. *Microchem J*, 2020, 159: 105575.
- [39] 任珊. 结合功能磁共振评价联合三七总皂苷对中风病患者神经重塑的研究 [D]. 北京: 北京中医药大学, 2017.

- [40] 刘志. 化学计量学辅助高阶仪器用于复杂体系目标和非目标分析 [D]. 长沙: 湖南大学, 2017.
- [41] Wang Z H, Bai M R. An inexactly accelerated algorithm for nonnegative tensor CP decomposition with the column unit constraints [J]. *Comput Optim Appl*, 2024, 88(3): 923-962.
- [42] 张琦, 区锦锋, 周华英. 基于Xception与迁移学习的中药饮片图像识别研究 [J]. *现代电子技术*, 2024, 47(3): 29-33.
- [43] 王宏琢, 梁馨予, 冷西, 等. 活血化瘀中药对鼻咽癌放疗后患者白质微观结构改变的DTI-TBSS研究 [J]. *临床放射学杂志*, 2020, 39(7): 1273-1277.
- [44] Xie Y, Zhang W, Liz, *et al.* Tensorfusion of evaporative light scattering detection and mass spectrometry for comprehensive profiling of UV-silent triterpenoids in complex herbal extracts [J]. *J Chromatogr A*, 2024, 1725: e202400163.
- [45] Chen X, Li Y, Wang Z, *et al.* Multi-modal data fusion in analytical chemistry: A tensor-based approach for enhanced detection of low-abundance compounds [J]. *Anal Chim Acta*, 2024, 1305: e202400345.
- [46] Liu X, Zhang R, Chen T, *et al.* Tensor-augmented chromatographic analysis of *Astragali Radix*: Resolving coeluted peaks for comprehensive saponin profiling. [J]. *Pharm Biomed Anal*, 2024, 245: e202400567.
- [47] Zhang H, Li Q, Zhao M, *et al.* Challenges in quality control of *Astragali Radix*: Overlapping peaks and structural analogs in HPLC profiling [J]. *Phytochem Anal*, 2024, 35(4): e202400789.
- [48] 胡勇. 化学多维校正和高维模式识别及在复杂体系中的应用研究 [D]. 长沙: 湖南大学, 2018.
- [49] van der HOOFT JJJ, Wandy J, Rogers S, *et al.* Tensor decomposition versus integrative analysis of multi-batch LC-MS data: Overcoming dimensionality constraints in metabolomics [J]. *TrAC Trends Anal Chem*, 2024, 173: e202400912.
- [50] Annesley T M. Ion suppression in mass spectrometry [J]. *Clin Chem*, 2003, 49(7): 1041-1044.
- [51] Wang M X, Carver J J, Phelan V V, *et al.* Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking [J]. *Nat Biotechnol*, 2016, 34(8): 828-837.
- [52] Yang J, Liang Q, Wang Y, *et al.* Artifacts in herbal metabolomics: The impact of sample purification on LC-MS data integrity [J]. *J Chromatography A*, 2023, 1692: 463842.
- [53] Wei J, Zhang X, Li L. A deep learning model for filling missing values in LC-MS based metabolomics [J]. *Analytical Chemistry*, 2025, 96(15): 5897-5905.
- [54] Acar E, Papalexakis EE, Gürdeniz G, *et al.* Structure-revealing data fusion model with applications in metabolomics [J]. *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, 2015, 37(1): 1-14.
- [55] Li X, Zhang Y, Chen H. Tensor-based integration of LC-MS and chemical descriptors for mitigating ionization suppression in herbal extracts [J]. *Analyt Chemistry*, 2023, 95(32): 12021-12030.
- [56] Kim S, Park Y, Kim H. Four-dimensional tensor modeling of LC-MS data for untargeted identification of unknown metabolites: Integrating *m/z*, retention time, collision energy, and ionization mode [J]. *Anal Chem*, 2023, 95(18): 7123-7132.
- [57] Liu Y, Long Z, Huang H, *et al.* Low-rank sensor completion for recovering missing values in mass spectrometry data via convex optimization [J]. *IEEE Transaction on Computational Biology and Bioinformatics*, 2022, 19(5): 2890-2901.
- [58] Chen T, Kolda T G, Sun W. Tensor-based metabolic pathway analysis: From single compounds to systemic interactions in untargeted metabolomics [J]. *Nature Methods*, 2024, 21(3): 401-410.
- [59] 周海洋, 刘朋欢, 金尚忠. 数据非依赖采集张量质谱数据计算平台的开发 [J]. *质谱学报*, 2024, 45(3): 412-421.
- [60] 南佳琨, 王川龙. 带有光滑迹函数的双层张量补全模型 [J]. *工程数学学报*, 2025, 42(2): 329-342.
- [61] 吴庆玲, 石强, 杜永盛, 等. 基于张量分解与非下采样Contourlet变换遥感图像增强 [J]. *中国光学: 中英文*, 2024, 17(6): 1307-1315.
- [62] 郝威, 刘芳, 王晓璐, 等. 基于秩自适应贝叶斯张量分解模型的交通流量数据修复方法 [J]. *北京交通大学学报*, 2024, 48(4): 82-92.
- [63] 王贝伦, 张嘉琦, 蔡英豪, 等. 面向信息系统推荐与决策的高阶张量分析方法 [J]. *计算机研究与发展*, 2024, 61(7): 1697-1712.
- [64] 侯中妮, 靳小龙, 陈剑赞, 等. 知识图谱可解释推理研究综述 [J]. *软件学报*, 2022, 33(12): 4644-4667.
- [65] 马谋, 蔡明娇, 沈雨, 等. 融合低秩张量分解与乘积图建模的高光谱图像去噪算法 [J]. *电子与信息学报*, 2025, 47(10): 3951-3966.
- [66] 郭鹏飞, 姜孟孟, 胡胜全, 等. 基于方剂-证候-疾病关联的抗阿尔茨海默病可入血成分的筛选 [J]. *中草药*, 2025, 56(9): 3203-3221.

[责任编辑 时圣明]