

• 综 述 •

中药谱效研究过程中存在的问题

江雨梅¹, 苟馨月^{1,2}, 廖清惠^{1,2}, 刘 涛^{3*}, 李正文^{1*}

1. 成都大学药学院, 四川 成都 610100

2. 成都大学张澜学院, 四川 成都 610100

3. 成都大学食品与生物工程学院, 四川 成都 610100

摘 要: 中药谱效关系研究是连接中药传统疗效与现代科学的核心技术桥梁之一, 它可以通过构建中药化学图谱与药效指标的内在关联, 精准筛选药效物质基础、阐明作用机制, 为中药质量科学控制提供了创新性解决方案。然而, 受中药自身特性与研究技术限制, 中药谱效研究仍面临诸多瓶颈。以“谱-效-谱效关系-成果转化”为主线, 系统梳理了中药谱效研究存在的突出问题, 剖析问题源头, 为后续研究提供参考, 助力中药谱效研究向更科学、更系统、更具实用价值的方向发展。

关键词: 中药; 谱效关系; 化学图谱; 药效评价; 成果转化

中图分类号: R283

文献标志码: A

文章编号: 0253-2670(2026)15-6096-12

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.15.026

Problems existing in process of spectrum-effect research on traditional Chinese medicine

JIANG Yumei¹, GOU Xinyue^{1,2}, LIAO Qinghui^{1,2}, LIU Tao³, LI Zhengwen¹

1. College of Pharmacy, Chengdu University, Chengdu 610100, China

2. Zhanglan College, Chengdu University, Chengdu 610100, China

3. College of Food and Bioengineering, Chengdu University, Chengdu 610100, China

Abstract: Spectrum-effect relationship research in traditional Chinese medicine (TCM) serves as a crucial technical bridge between traditional therapeutic efficacy and modern scientific research. By elucidating the intrinsic correlations between the chemical spectra of TCM and their pharmacological activities, this approach enables accurate identification of pharmacodynamically active substances and elucidation of their mechanisms of action. It thereby provides an innovative foundation for scientific quality control of TCM. However, inherent characteristics of TCM and current research limitations present significant challenges in this field. Centered on framework of “spectrum-efficacy, spectrum-effect relationships and achievement transformation”, this review systematically summarizes the key challenges facing spectrum-effect research in TCM, analyzes their underlying causes, and offers recommendations for standardizing future studies and industrializing research outcomes. This work aims to advance spectrum-effect research toward greater scientific rigor, systematicity, and practical value.

Key words: traditional Chinese medicine; spectrum-effect relationship; chemical spectra; pharmacodynamic evaluation; achievement transformation

中药具有多成分、多靶点、多通路的特点, 在整体调节、辨证论治、降低毒副作用等方面具有独特优势, 但其作用机制交叉复杂, 化学成分与药效

之间的关联无法明确, 是中药现代化进程中的一大难题^[1]。中药谱效关系 (spectrum-effect relationship of traditional Chinese medicine, TCM-SER) 是通过

收稿日期: 2026-03-24

基金项目: 四川省中医药管理局科学技术研究专项 (25CGZHZX069); 成都大学 2026 年省级大学生创新训练计划项目 (S202611079029)

作者简介: 江雨梅, 本科生, 研究方向为中成药质量再评价。E-mail: 3217135115@qq.com

*通信作者: 刘 涛, 博士, 研究员级高级工程师, 从事中成药新药开发及再评价研究。E-mail: liutao0578@sina.com

李正文, 博士, 讲师, 研究方向为计算化学、中药药理、天然产物。E-mail: lizhengwen@cdu.edu.cn

现代分析检测技术建立中药化学图谱，结合药理学实验获取药效评价指标，运用化学计量学等数据处理方法，建立的化学成分谱图信息与药效活性之间的对应关系^[2]。自该概念提出以来，其研究对象已覆盖单味中药、中药复方，分析技术从高效液相色谱法（high performance liquid chromatography, HPLC）、气相色谱-质谱联用法（gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS）扩展至超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱联用法（ultra high performance liquid chromatography-quadrupole time-of-flight mass spectrometry, UPLC-Q-TOF-MS）、近红外光谱等精度更高的检测手段^[3-5]，数据处理方法主要使用灰色关联度分析法（grey relational degree analysis, GRA）、偏最小二乘回归（partial least squares regression, PLSR）、人工神经网络等化学计量学技术^[6-7]。中药谱效研究的出现，大幅度扩大了有科学依据、可供参考的物质-效应关联信息库。同时，其突破传统研究中只能一次性关注单一成分的

局限，能同时分析多种成分与药效的关联，契合中医治疗的整体性理念^[8]。

然而，大量研究表明其仍面临不少现实难题。中药本身化学成分复杂，单味药就含数十甚至上百种成分，复方配伍后还会出现协同、拮抗或转化作用，使核心药效成分的确定难度极大^[9]。同时，中药发挥药效时具有多靶点特性，单一的谱效关联评价方法无法全面反映其整体疗效。更关键的是，目前研究缺乏统一规范，不同的样品处理、检测技术、数据处理方法，所得结果也有所不同，研究结果可信度、精准度大幅度下降。中药谱-效关系研究流程及各环节误差见图 1。上述问题导致大量研究结果的重复性不佳，部分关联结论缺乏因果验证支撑，筛选出的药效成分也难以转化为实用的质量标准，导致研究成果的推广应用受到限制。本文通过检索 2021—2026 年中国知网、Web of Science 数据库相关文献，系统总结当前中药谱效研究存在的主要问题，为该领域的规范化发展提供借鉴。

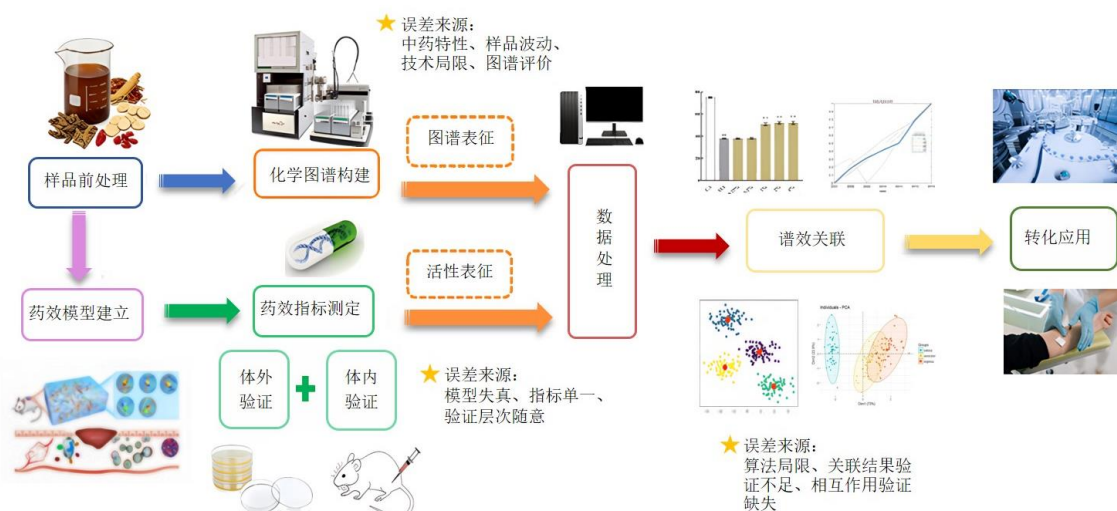


图 1 TCM-SER 研究流程及各环节误差来源示意图

Fig. 1 Schematic diagram of research workflow for TCM-SER and potential error sources at each stage

1 化学图谱构建存在的问题

1.1 特殊成分难以表征

当前对谱效关系研究进行化学图谱表征时，研究对象主要集中于已知的、含量高的化学成分，如黄酮类、皂苷类成分，而对于含量较低但药效显著的微量成分、易降解成分及尚未被鉴定的未知活性成分，则因难以被现有技术稳定表征，往往被排除在研究范围之外。这种“不完全表征”，使谱效研究的结论可能仅反映了药材中易测成分的药效，而与药材真实的药效物质基础存在偏差。惠博平等^[10]

初步探究栀子炮制前后的抗氧化谱效关系时，发现栀子中有良好抗氧化活性的环烯醚萜类、二萜类成分，因为化学性质活泼易发生降解，难以通过 HPLC 获得化学图谱表征。孟齐悦^[11]对茉莉花挥发油进行谱效研究，用灰色关联度法筛选出了 10 个峰，偏最小二乘法（partial least squares, PLS）明确了 12 个峰，但将二者结果综合验证后发现，仅筛选出 2 个满足关联度高且抗菌活性好的成分。该研究鉴别出茉莉挥发油中含有香叶醇成分，已有文献证明香叶醇有良好的抑菌活性^[12]，但因其色谱

峰分离度较差、含量低难以稳定表征,在后续进行抗菌活性的谱效关联分析时被舍去。上述问题的根源在于中药化学成分的复杂性,不同成分在种类、含量及化学稳定性上存在天然差异。一方面,不同成分的含量可相差数个数量级,而常规色谱检测的动态范围有限,难以同时兼顾高含量成分与痕量成分的稳定表征;另一方面,部分活性成分本身化学性质活泼,对光、热、氧及溶剂环境敏感,在样品制备与分析过程中易发生降解或转化,进一步增加了表征难度。

1.2 样品代表性不足

目前,谱效关系研究并没有对供试样品种类、采集、处理等规定统一标准,导致来源于不同产地与批次的中药材样品间,化学成分存在显著波动,代表性不强。一项关于不同产地黄芪的谱效研究发现,各批次样品的指纹图谱整体相似度较高,表明其化学组成基本一致,但是共有峰峰面积相对标准偏差(relative standard deviation, RSD)值波动明显(26.71%~115.76%),说明不同产地样品的活性成分含量存在显著差异^[13];不同产地罗布麻叶的谱效研究结果显示,有 3 组样品与共有模式图谱的相似度<0.9,认为可能是生长环境、加工处理等的不同,使其化学成分在种类和含量上存在差异^[14]。后续研究者开展同种中药材谱效关联分析时,样品产地、批次的差异可能导致不同研究所得谱效关联结论不完全一致。由此可见,样品代表性不足,则基于特定批次样品得出的谱效关联结论,很可能会高度依赖于该批次样品的特性,极大地减弱了研究结论的普适性和科学性。

此外,样品质量不均一也会阻碍谱效研究的创新转型与发展。目前已知的谱效关系研究几乎都是使用中药干品,即新鲜中药材经干燥脱水等工艺处理后得到的便于储存、运输的药材^[15]。已有研究对白花蛇舌草鲜品与干品的谱效关系进行对比,发现二者抗炎药效物质基础存在差异,且鲜品水提液抗炎效应更佳^[16]。这一研究提示,对于某些中药材,鲜品入药可能具有区别于传统干品的独特药效优势,为新药研发提供了新的思路。然而,目前并没有对新鲜中药的相关环节制订统一标准,不同批次鲜品的采集时间、处理方式、储存条件及保鲜周期等存在差异,导致其批次间的化学成分存在显著波动,质量极不稳定,使得中药鲜品与干品的谱效对比研究难以开展。

1.3 图谱构建技术的局限

谱效关系研究的基础在于“谱”的获取,即通过分析检测技术对中药复杂化学成分体系进行表征。检测技术的覆盖范围、灵敏度和分辨率,直接决定了后续“效”关联分析的全面性和准确性。然而,当前各类图谱构建技术存在不同程度的应用局限。

高效液相色谱-二极管阵列检测法(high performance liquid chromatography with diode array detector, HPLC-DAD)是目前谱效研究中最常用的分析技术之一,其仅对含共轭体系、有较强紫外吸收的化合物敏感,而对于无紫外吸收或弱紫外吸收的成分响应较差。陶思雨等^[17]在甘草地上部分的谱效关系研究中指出,皂苷类成分缺乏显著的紫外吸收,其在 HPLC 指纹图谱中未能被有效指认,导致这部分潜在活性成分无法纳入后续的谱效关联分析,影响了抗氧化谱效关系的建立。此外, HPLC 构建的指纹图谱,只能表征化学成分在某一特定波长下有吸收,使得最终的关联结论可能遗漏在该波长无吸收但药效好的物质。GC 主要用于检测有挥发性、热稳定性好的物质,无法直接用于分析多糖、皂苷等难挥发、高沸点、稳定性差的成分,使得 GC 在谱效研究中的应用范围受到极大限制。

近年来为克服传统检测技术的局限,谱效研究引入了 UPLC-Q-TOF-MS 等高精度技术。其具有分析灵敏、快速的特点,在低含量、难分离、紫外吸收弱的物质分析中有明显优势^[18]。然而,新技术的引入也带来了新的挑战:该分析技术的原始数据无法直接被现有的中药色谱指纹图谱相似度评价软件识别和分析,研究者往往需要借助第三方软件,通过人工进行复杂的数据处理,不仅增加了操作难度和时间成本,也对研究者的数据分析能力提出了更高要求。

图谱构建技术的局限主要源于单一分析技术对中药成分响应存在选择性。现存科技手段不足以开发出能检测自然界中所有中药成分的分析仪器和分析方法,意味着“技术能力”与“成分复杂性”之间的不匹配,是构建图谱时难以避免的局限。

1.4 指纹图谱评价存在一定争议

指纹图谱的评价是谱效研究的关键环节,直接影响后续关联分析的可靠性。近 5 年主流的评价方法,是将图谱导入“中药色谱指纹图谱相似度评价系统(2012 版)”,通过计算相似度来判断^[19]。然而,相似度范围缺乏统一标准,不同研究对合格

相似度的界定存在明显差异。有的研究将相似度 > 0.9 作为图谱质量良好的标准^[20]，而另一些研究中相似度仅 > 0.8 也被认为可以接受^[21]。这种范围设定的随意性，使得不同研究间的谱图质量难以比较，谱效关联结论的可比性也随之降低。在指纹图谱方法学考察中，各研究对相对保留时间和相对峰面积的允许波动范围评价各异。大黄的谱效研究构建指纹图谱时，各共有峰相对保留时间的 RSD 值 < 0.5%、相对峰面积的 RSD 值 < 3%，被认为方法学考察合格^[22]。而三七指纹图谱研究中，各相对保留时间的 RSD 值 < 2.5%、相对峰面积的 RSD 值 < 3%，也被认为符合要求^[23]。在不同实验室、不同仪器条件下，这些参数的允许波动范围、参照峰的选择依据，目前尚无统一标准。同时，当前多数谱效研究构建图谱前缺乏系统适用性检验。其仅在方法建立时进行精密密度、重复性、稳定性考察，确认色谱条件和仪

器状态有效后便开展样品测定。然而随着时间推移，仪器老化、色谱柱性能下降，最初建立标准色谱条件时的仪器状态能否长期维持，缺乏实时监测。这些仪器偏差是否会影响谱效关联结论的可靠性，是目前谱效研究中的关注空缺。指纹图谱评价的标准化面临诸多阻碍，如相似度计算对照图谱的建立缺乏客观依据，相似度评价图谱质量存在片面性等。同时仪器精密状态的维持需要耗费大量人力财力，对大部分实验室来说难以维持最初的标准色谱条件。

2 药效评价存在的问题

2.1 药效模型存在验证偏差

当化学图谱建立好后，谱效研究进入下一阶段，即中药特定药效评价。然而，即使是针对同一药效类别，不同研究采用的药效模型也存在显著差异（表 1）。在抗炎谱效研究中，脂多糖诱导的

表 1 TCM-SER 研究常用的药效指标和模型

Table 1 Commonly used efficacy indicators and models in TCM-SER research

功效	中药/复方	药效模型	药效指标	文献
抗炎	通关藤	脂多糖诱导的小鼠单核巨噬细胞白血病 RAW264.7 细胞模型	一氧化氮、TNF- α 、IL-6 水平	24
	十一方药酒	二甲苯致小鼠耳肿胀模型，角叉菜胶致小鼠足肿胀模型	耳肿胀度，角叉菜胶致足肿胀度	25
	唐古特大黄	脂多糖诱导的 RAW264.7 细胞模型	一氧化氮抑制率	26
	金母颗粒	盆腔炎性疾病后遗症大鼠模型	TNF- α 、IL-10 水平	27
	六月寒	脂多糖诱导的人正常肺上皮 BEAS-2B 细胞模型	一氧化氮、IL-6、IL-8 水平	28
	金茵利胆胶囊	脂多糖诱导的 RAW264.7 细胞模型	一氧化氮、TNF- α 、IL-6 水平	29
	紫锥菊	葡聚糖硫酸钠诱导的结肠炎小鼠模型	巨噬细胞极化表型	30
	重楼	脂多糖诱导的斑马鱼模型	炎症因子水平	31
	华菱	高糖致大鼠胰岛细胞瘤 INS-1 细胞氧化损伤模型	活性氧水平	32
	肉苁蓉	H ₂ O ₂ 诱导的人胚胎肾 HEK293 细胞氧化损伤模型	活性氧、SOD、过氧化氢酶水平	33
抗氧化	开心散	人神经母细胞瘤 SH-SY5Y 细胞模型	细胞存活率	34
	桑叶	/	DPPH 清除率	35
	枇杷叶	/	DPPH 清除率	36
	杜仲	/	DPPH、ABTS 清除率	37
	黄精	/	DPPH、ABTS 清除率	38
	甘松	皮质酮诱导的大鼠肾上腺髓质嗜铬细胞瘤 PC12 细胞损伤模型	细胞存活率	39
	酸枣仁	皮质酮诱导的 PC12 细胞损伤模型	细胞存活率	40
抗抑郁	参益安神片	慢性不可预知性温和应激小鼠模型	行为学指标	41
	柴胡疏肝散	利血平诱导的斑马鱼抑郁模型	行为学指标	42
	柴胡-白芍药对	慢性束缚小鼠模型	强迫游泳及悬尾不动时间	43
	大黄	脂多糖诱导人脐静脉内皮细胞损伤模型	一氧化氮、丙二醛、SOD 水平	44
止血	三七	大鼠脾虚胃出血模型	TT、PT、APTT	45
	蒲黄炭	子宫出血大鼠模型	TT、PT、APTT	46
	白及	/	小鼠凝血和出血时间	47
	地苈	/	小鼠凝血和出血时间	48

TNF- α -肿瘤坏死因子- α ; IL-6-白细胞介素-6; SOD-超氧化物歧化酶; DPPH-1,1-二苯基-2-三硝基苯肼; ABTS-2,2'-联氮-双-3-乙基苯并噻唑啉-6-磺酸; TT-凝血酶时间; PT-凝血酶原时间; APTT-活化部分凝血活酶时间。

TNF- α -tumor necrosis factor- α ; IL-6-interleukin-6; SOD-superoxide dismutase; DPPH-1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl; ABTS-2,2'-azino-bis (3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonic acid); TT-thrombin time; PT-prothrombin time; APTT-activated partial thromboplastin time.

RAW264.7 细胞模型出现频率最高。该模型具有操作简便、通量高、炎症通路清晰等优势,但其局限性同样明显。巨噬细胞的炎症反应只是中药抗炎效应的一小面,难以反映中药对免疫系统、血管内皮、神经内分泌等多系统的整体调节作用^[49]。目前绝大多数研究在使用体外细胞模型后,并未在讨论中对其局限性进行充分说明,也鲜有尝试采用多模型交叉验证的策略,所得结果与中药整体药效存在差异。此外,同一功效的模型选择缺乏统一标准,研究间的可比性不足。以抗炎为例,除 RAW264.7 细胞模型外,某些研究还用到小鼠耳肿胀模型、葡聚糖硫酸钠诱导结肠炎模型、脂多糖诱导斑马鱼模型等。不同模型体现抗炎功效的水平各不相同,细胞模型反映的是分子水平的炎症通路干预,动物模型则涉及吸收、分布、代谢、排泄等体内过程,斑马鱼模型虽兼具一定的整体性但又不同于哺乳动物。这些模型之间的结果无法直接比较,导致针对同一味中药的不同谱效研究,可能出现结论不一致的情况。现有谱效研究的药效评价大多采用细胞或化学诱导模型,是因为二者操作简便、周期短、成本低、通量高,适合谱效研究对大批量样品分析的需求。同时,谱效分析要求药效数据具备连续、可量化的特征,体外模型的因子水平高低、抑制率等数据易于标准化和定量分析。值得注意的是,部分谱效研究已尝试采用动物模型进行药效评价,其通过选择可量化的检测指标(耳片质量差、生化指标等),将动物实验数据转化为满足谱效分析要求的连续变量。然而,与细胞模型相比,动物模型在数据波动性、样本量需求和操作标准化程度方面仍面临更高的技术门槛,这可能是其在谱效研究中的应用频次低于体外模型的原因之一。

2.2 药效评价指标单一

中药多成分、多靶点的特点决定了其药效评价应涵盖多指标、多通路,但目前大部分谱效研究采用的药效指标数量偏少。在抗炎谱效研究中,仅采用 1~3 种药效指标进行评价。炎症反应是一个涉及数 10 种细胞因子、趋化因子及炎症介质的复杂网络,仅凭少量指标的变化,既无法全面反映中药的整体抗炎活性,也难以区分不同成分的抗炎机制差异。由此可见,当谱效关联建立在单一指标基础上时,其结果反映的是药物成分对该指标促进或抑制的作用,而非对整体药效的解析。在抑菌活性谱效研究中,多数研究仅将药物作用于 1~2 种致病

菌,如只作用于革兰阳性菌^[50-51],缺乏对革兰阴性菌的药效验证。中药的抑菌作用机制复杂,对不同菌种的抑制活性可能源于不同的成分群,仅针对单一菌种建立的谱效关联,难以反映中药的广谱抑菌特点。这种选择性评价可能导致某些对其他类别菌种有特殊作用的活性成分被遗漏。多数研究团队选用指标时,多从操作简便、成本低、结果稳定方面考虑,谱效研究的本质是“成分-活性”关联分析,引入多指标评价意味着需要处理更多维度的药效数据,增加了数据整合与分析的复杂性。

2.3 药效物质验证层次不统一

在建立化学图谱、验证药材药效后,研究者结合色谱图和药效验证数据,借助 GRA、PLS、聚类分析(cluster analysis, CA)等方法,就能进行谱效关联分析筛选出潜在活性物质。目前,大部分谱效研究止步于用数据处理方法分析出各成分的相关程度,根据“关联度高,活性越好”来评价药效物质活性高低^[52-53]。少数研究又在得出关联度的基础上进行了体外验证,如 Li 等^[54]识别出芪附饮中的 6 种抗氧化成分后,全部在体外验证了抗氧化活性。部分最新的谱效研究对潜在活性物质开展了体内验证。一项关于水提竹沥的谱效研究利用成分敲除技术验证了对香豆酸在体内的抗咽喉炎药效^[55],Cheng 等^[56]运用成分敲除法验证了菊花中潜在药效物质的心血管保护作用,Chen 等^[57]研究养阴通脑颗粒时将筛选出的 5 种主要成分在大鼠大脑中动脉阻塞模型进行验证。由此可见,当前研究在药效物质基础验证上呈现出梯度分化,容易导致研究质量参差不齐。上述问题的根源在于,谱效研究领域目前尚未建立药效物质验证的标准,也未对不同验证层次对应的结论表述进行规范,研究者多凭个人主观经验进行选择。

3 谱效关联存在的问题

3.1 数据处理方法的局限

随着谱效研究发展,涌现出大量解析化学图谱的数据处理方法,包括 GRA、PLS、主成分分析(principal component analysis, PCA)、CA 等。表 2 系统总结了中药谱效研究中常用的分析技术和方法。不同算法虽呈现一定局限,但对某些类型数据的分析具有良好适用性。GRA 只能得出成分与药效关联是否紧密,无法判断与药效呈正相关还是负相关,也无法说明对药效的贡献度如何,适用于分析非线性数据^[73]。PLSR、PCC 面对复杂的中药成分,

表 2 TCM-SER 研究常用的分析技术和方法

Table 2 Commonly used analytical techniques and methods in TCM-SER research

类型	名称	分析技术	数据处理方法	药理作用	文献
单味药	续断	HPLC-DAD	GRA、PCC、熵值法	抗骨损伤、神经保护	58
	五味子	HPLC	GRA、PLS	镇静、保肝、抗氧化	59
	甘松	UPLC、GC-MS	GRA、PLS	抗炎、抗心律失常	60
	两面针	HPLC、UPLC-Q-TOF-MS	GRA、PLS、SCC	抗炎、抗氧化	61
	菊花	UPLC-Q-TOF-MS	AHP、GRA	平肝、抗炎、抗氧化	62
	雄黄	ICP-MS	PCA、GRA、CA、PLSR	抗肿瘤、抗病毒	63
复方及药对	复方铁苋	UPLC-DAD、UPLC-Q-TOF-MS	SPSS	抑菌	64
	黄芩-白芍	HPLC	CA、PCA	抗炎	65
	红参-制何首乌	UHPLC	GRA、PLS	神经保护	66
	黄芩汤	HPLC	PCC	抗真菌	67
	银翘散	HPLC、GC-MS	PCA、PCC、OPLS	抑菌	68
	桑白皮汤	HPLC	GRA	抗炎	69
	小儿消积止咳口服液	UHPLC	GRA	抑菌、抗炎	70
	固本延龄丸	GC-MS	OPLS-DA	补肾阴	71
	参枝苓口服液	HPLC-MS/MS	GRA、CCM、OPLS	调节中枢神经功能	72

PCC-Pearson 相关系数; SCC-Spearman 等级相关系数; AHP-层次分析法; SPSS-SPSS 相关性分析; OPLS-正交偏最小二乘法; OPLS-DA-正交偏最小二乘判别分析法; CCM-相关系数法。

PCC-Pearson correlation coefficient; SCC-Spearman rank correlation coefficient; AHP-analytic hierarchy process; SPSS-statistical product and service solutions correlation analysis; OPLS-orthogonal partial least squares; OPLS-DA-orthogonal partial least squares-discriminant analysis; CCM-correlation coefficient method.

只能通过线性关系进行谱效关联,而不能处理非线性、多重线性关系的数据^[74-75]。PCA 仅用于数据聚类、样本区分、特征筛选,不能直接建立谱效关联模型。CA 适合按产地、批次对中药样本分组,只能做样本分类、特征归组,无谱效定量关联能力^[76]。实际研究中,单一算法往往难以兼顾共线性、非线性与建模需求。目前部分研究采用不同算法组合的方式进行数据解析,如 PCA+PLSR、GRA+PLSR 等,更适配中药多成分、多靶点、非线性的谱效研究特征。近年来,一些热门的人工智能学习逐渐用于谱效关联分析。人工神经网络具有处理非线性数据的天然优势,并从整体视角处理多维度数据^[77];在多源数据融合方面,机器学习结合光谱数据已实现化学成分与生物活性的同步快速预测^[78];图神经网络在中药-靶点相互作用预测中也展现出高精度建模能力^[79]。然而,人工智能方法在谱效研究中的应用仍面临挑战。深度学习模型的“黑箱”特性使其过程缺乏可解释性,难以体现这些数学关联背后所对应的生物学意义;AI 模型通常需要大规模训练数据,而谱效研究的样本量远未达到深度学习的要求;不同实验室的数据采集标准不统一,导致模型在不同数据间的通用性下降。

3.2 谱效关联因果验证不足

谱效关系研究的核心在于通过多元统计分析方法,建立化学成分与药理活性之间的数学关联。然而,这种关联本质上是统计学意义上的相关性,而非生物学意义上的因果性。筛选出的“高关联峰”仅表明其含量变化与药效指标之间存在联系,但其是否为真正的药效物质基础,仍需通过独立的药理实验进行因果验证。从现有文献来看,谱效关联后的因果验证普遍缺失。大量研究在完成 GRA 或 PLSR 后,直接根据关联度大小判定药效物质基础,而未对筛选出的高关联成分进行任何形式的活性验证^[80-82]。此外,验证缺失易导致“假性关联”难以识别,即高关联成分的真实活性可能低于算法预测值。统计关联过程受多重因素影响,包括成分间的互作关系、数据预处理方式的选择、样本批次间的偶然波动,甚至色谱峰积分误差。在未经实验验证的情况下,关联结果只能说明筛选出的是潜在活性成分,无法体现真实药效贡献。由此可见,若直接用数学谱效关联结果作为中药质量评价依据,其结果真实性、可靠性将大幅度降低。这也表明,当前谱效研究在从“统计关联”迈向“因果验证”的关键环节上存在明显短板,限制了其在中药质量评

价中的实际应用价值。

3.3 多种化学成分间的相互作用不明确

谱效关系研究的核心优势在于将多种中药化学成分与其药理活性进行关联分析,从而筛选潜在的药效物质基础。然而,该方法本质上只能建立单一成分与整体药效之间的数学关联,无法阐释各成分间的相互作用机制,更无法说明相互作用是否影响整体药效强弱。

从方法学角度看,当前谱效关联分析普遍采用如下范式:以中药整体药效为因变量,以各成分含量为自变量,通过回归或关联算法计算各成分对药效的贡献度^[83]。这种分析逻辑隐含了一个前提,各成分对药效的贡献是相互独立的、可加和的。然而,中药的药效恰恰来源于成分间的协同或拮抗作用,某成分可能本身活性不高,但能增强另一成分的药效;或某成分单独作用时效果显著,但在混合物中反而被抑制。常规谱效分析无法捕捉这类非线性、非加和的相互作用关系,这使得算法在分配“贡献度”时,可能将协同成分产生的功效误判给高含量成分,或将拮抗成分的真实活性掩盖,导致真正的药效物质基础可能被低估或误判。

相较于单味药,中药复方的成分相互作用更为复杂。复方由多味药材按特定比例配伍而成,其药效并非各成分药效的简单加和,而是通过“君、臣、佐、使”的配伍原则实现的整合效应^[84]。然而,当前谱效研究对复方的处理方式与单味药无差别,即将复方视为一个整体进行成分分析和药效关联。这种方法虽然筛选出与药效相关的成分,却无法解释为何复方配伍后的药效优于单味药、各药味之间协同作用机制等核心问题。部分研究尝试通过“多部位成分表征”等方式增加化学信息的覆盖面,但只能解决“谱”的全面性问题,无法阐明成分间互作关系及配伍后产生的“1+1>2”的协同增效原理^[85]。

不论是单味药还是中药复方,谱效研究无法明确成分间相互作用的根源在于谱效分析的数据模型本质上是“加法模型”,而中药的药效机制本质上是“网络模型”。用加法模型去简单拟合网络效应,导致信息损失。这也表明,单纯依靠现有的谱效分析框架,难以完整阐释中药整体药效的物质基础与作用机制。

4 研究成果应用中的问题

4.1 成果转化困难,指导性差

谱效关系研究的重要目标之一,是通过发现药

效物质基础,为中药质量标准提供科学依据。然而,尽管近年来谱效研究成果丰硕,筛选出的潜在药效成分层出不穷,真正被法定标采纳为质量控制指标的成分却寥寥无几。这一反差体现出谱效研究在质量标准转化中面临的困境。基于 UPLC 指纹图谱对枸杞子进行抗氧化谱效关系研究,综合分析得到的活性成分有 4 种,《中国药典》2025 年版仅收录枸杞多糖和甜菜碱 2 种成分进行含量测定^[86];建立紫苏叶的 HPLC 指纹图谱进行抗病毒谱效研究,咖啡酸、木犀草素、阿魏酸被证实为抗病毒贡献度较大的活性成分,但《中国药典》2025 年版紫苏叶项下的含量测定项,仍未收录上述成分^[87]。《中国药典》收录的质控成分,需要具备稳定性好、专属性强、检测灵敏的特点,大部分中药谱效研究得到的成分虽能代表其药理活性,但存在成分不稳定、检测技术复杂等问题。由此可见,目前谱效研究的主要成果局限于实验室研究和论文发表,离确定为质控标准存在一定差距,难以指导临床用药。

4.2 研究成果可推广性不足

当前谱效研究在技术路线上呈现以下特征:化学分析逐渐倾向于采用 UPLC-Q-TOF-MS 等高分辨率质谱技术,药效评价则多以细胞模型或动物模型为主^[88-90]。这一技术组合虽能提升研究的精度和深度,但也增加了谱效研究作为质控手段推广至生产线的难度。高分辨率质谱设备价格昂贵、维护成本高、对操作人员的专业技术要求严格,一般药品检验机构和基层生产企业难以承担。相关文献指出,现代高精度指纹图谱技术能够有效提高谱效关系研究的数据准确度,但设备普及率偏低的客观问题限制了该技术的大范围应用,导致基于高端设备的谱效研究方法难以用于质量控制一线。此外,药效评价方法的成本与周期门槛过高。细胞和动物模型虽能提供可靠的药效数据,但实验操作复杂、周期较长、成本较高。对于基层质检机构而言,建立和维护细胞房、动物房的条件有限,专业技术人员也相对缺乏,难以作为常规质控手段推广。上述问题表明,谱效研究的技术路线正朝着“高精尖”方向快速发展,而中药质量控制的实际应用场景却受限于低成本、易操作、可推广的现实需求。二者之间的差距日益扩大,导致大量谱效研究成果停留在学术论文层面,难以转化为行业通用的质控方法。如何在研究精度与应用便捷之间寻找平衡点,是谱效研究成果从实验室走向生产线亟需解决的关键问题。

4.3 成果缺乏多方验证

多数谱效研究在筛选出高关联度成分后,由原研究团队自行开展活性验证,全过程缺乏独立于第三方的重复检验。这种自行验证模式带来的核心风险在于,在该实验室特定条件下得出的关联结论,更换实验室、样品或仪器后,很可能无法复现。从现有文献来看,谱效研究在成果验证方面主要存在以下两种问题。一是验证主体过于单一,缺乏跨实验室的可重复性检验。谱效研究涉及样品前处理、色谱条件、细胞培养、动物模型等技术环节,每个环节的操作差异都可能影响最终结论。目前,绝大多数研究由单一团队完成从“谱”到“效”的全过程,并未引入独立的第三方实验室进行重复验证。这意味着,谱效关联结论在不同实验室条件下是否成立尚未得到系统评估。二是验证场景局限,缺乏产业端和临床端的应用检验。谱效研究的最终目

标是服务于中药质量控制和临床合理用药。然而,目前研究成果多停留在学术交流层面,极少进入药企的生产质控体系或临床机构的实际应用场景进行检验。少数较为完整的验证也只是在研究层面增强了结论的可信度^[91-92],并未完成从研究结论到应用工具的转化。

5 讨论

TCM-SER 研究经过 20 余年的发展,已从最初的方法探索逐步走向成熟,在中药质量标志物筛选、炮制机制研究、复方配伍规律揭示等方面取得了显著进展。然而,本文通过对 2021—2026 年相关文献的系统梳理,发现谱效研究在化学图谱构建、药效评价、谱效关联、成果应用 4 个环节仍存在突出问题。针对上述问题,文章深入剖析了相关原因,现提出相应的优化策略与建议,图 2 为中药谱效研究的问题-原因-解决策略框架图。

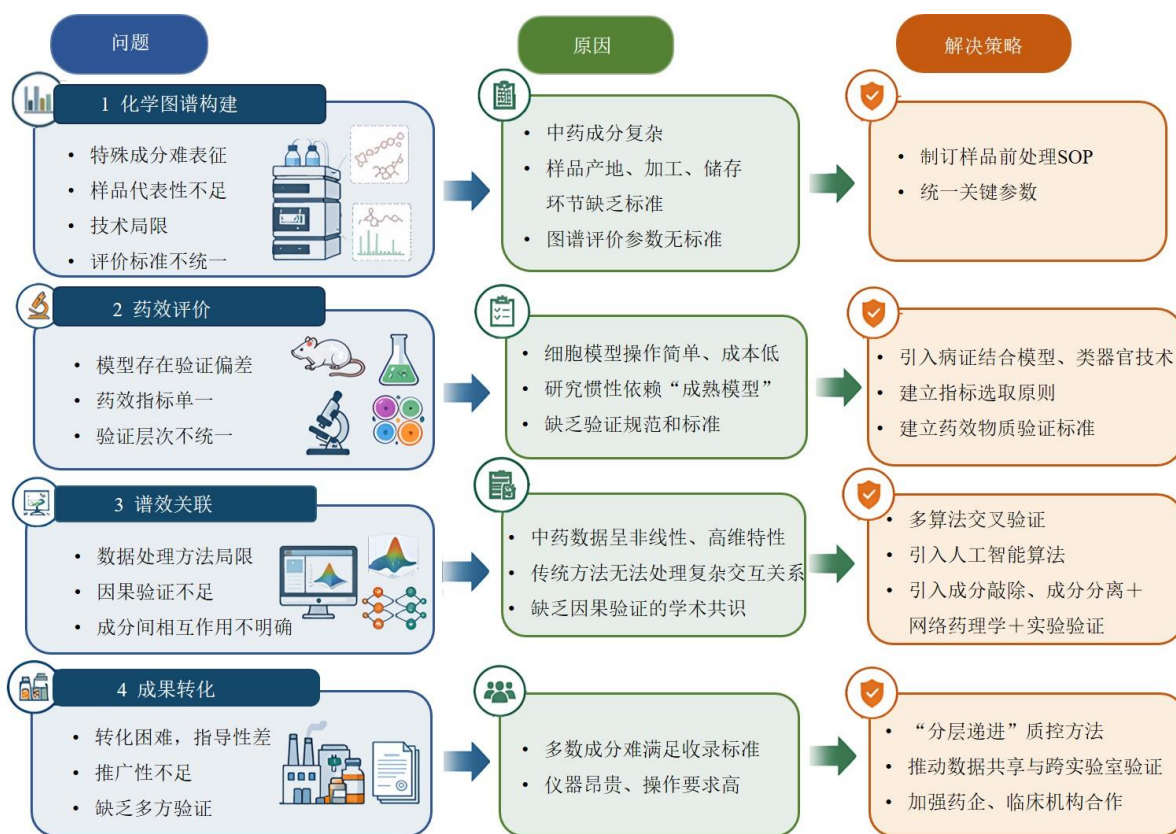


图 2 TCM-SER 研究问题-原因-解决策略框架图

Fig. 2 Framework of problems, causes and solution strategies for TCM-SER research

解决化学图谱构建中的问题,需建立规范化研究标准。一是建立样品前处理与图谱构建的标准操作规范,针对不同中药类型制定差异化的样品采集、炮制、提取流程,明确鲜品药材的保鲜周期与

储存条件,减少批次间差异。二是建立指纹图谱评价的关键参数参考标准。表 3 为谱效研究实验报告规范条目建议表。对于药效评价中的问题,建议引入中医证候结合动物模型,并采用综合评分法帮助

表 3 TCM-SER 研究实验报告规范条目建议表
Table 3 Recommended standard items for experimental reports of TCM-SER

规范类别	报告条目	建议参数
样品信息	样品批次	≥10 批
色谱条件	色谱柱理论塔板数	≥3 000
方法学考察	精密度	RSD≤3.0% (n=5 或 6)
	重复性	RSD≤3.0% (n=5 或 6)
	稳定性	RSD≤3.0% (24 h 内)
	相对保留时间	RSD≤2.0%
	相对保留峰面积	RSD≤5.0%
	相似度	≥0.9
	共有峰相对峰面积	RSD≤5.0%
指纹图谱评价	共有峰分离度	>1.0
	共有峰拖尾因子	0.8~1.8

量化证候评价, 在研究经费充足的情况下可以引入类器官模拟技术, 更加贴近人体真实药物动力学环境; 同时初步建立药效指标选取的指导原则: 至少选取可测定指标总数量的 60%作为指标个数, 抑菌研究至少覆盖革兰阳性菌和革兰阴性菌各 2~3 种代表性菌株; 药效物质的验证层次设立最低标准, 在谱效关联分析后建议至少进行体外验证。对于谱效关联中的问题, 建议在同一研究中至少采用 2~3 种不同原理的数据处理方法且仅保留共同识别的高关联度成分, 或引入适合小样本的随机森林等人工智能算法, 以提升非线性关系的拟合能力; 在关联结果验证中, 建议引入成分敲除/敲入实验进一步验证, 对于难敲除的成分可采用成分分离+单体活性验证, 同时引入网络药理学预测潜在靶点和通路, 并用分子对接技术进一步筛选, 对预测结果进行药理验证, 为成分间的互作机制提供证据支撑。对于成果转化中的问题, 可建立分层质控策略。研发阶段采用高分辨质谱进行成分筛选; 转化阶段将核心成分作为质量标志物, 将其检测方法转换为 HPLC-DAD 等普及度更高的技术; 应用阶段可进一步开发近红外光谱等快速检测方法, 用于生产过程的在线质控。同时, 推动有望用于质控的谱效结论进入药企中试生产线进行小规模验证, 并尝试将筛选出的活性成分与临床疗效指标进行关联分析。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突
参考文献

[1] 刘日慧, 刘晓凤, 伍晓乐, 等. 中药抗病毒作用机制的研究进展 [J]. 国外医药: 抗生素分册, 2024, 45(4): 226-238.
[2] 张强, 杨宇婷. 中药谱效关系研究现状概述 [J]. 时珍

国医国药, 2022, 33(3): 680-683.
[3] 杨耘, 卢雪蕊, 宋平顺, 等. 甘草 HPLC 指纹图谱及抗氧化活性的谱效关系 [J]. 药物分析杂志, 2022, 42(4): 607-617.
[4] Qiao X, Qu C, Luo Q M, et al. UHPLC-qMS spectrum-effect relationships for *Rhizoma Paridis* extracts [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2021, 194: 113770.
[5] Wang Q, Li H Q, You J L, et al. An integrated strategy of spectrum-effect relationship and near-infrared spectroscopy rapid evaluation based on back propagation neural network for quality control of *Paeoniae Radix Alba* [J]. *Anal Sci*, 2023, 39(8): 1233-1247.
[6] 吴笛, 蔺晓源, 刘凯, 等. 基于灰色关联度分析和偏最小二乘回归辨识款冬花止咳活性成分 [J]. 中南大学学报: 医学版, 2024, 49(3): 435-446.
[7] Verissimo G C, dos Santos Junior V S, Fernandes P O, et al. GCN-based structure-activity relationship and DFT studies of *Staphylococcus aureus* FabI inhibitors [J]. *Int J Quant Struct Prop Relatio*, 2022, 7(1): 1-16.
[8] 孙雪倩, 杨彬, 李遇伯. 多基原中药质量评价研究进展 [J]. 中草药, 2024, 55(12): 4214-4224.
[9] 严雪, 周文月, 周森林, 等. 中药调节细胞因子水平治疗失眠研究进展 [J]. 成都大学学报: 自然科学版, 2024, 43(2): 120-129.
[10] 惠博平, 肖菁, 唐婷, 等. 基于多元统计方法的栀子炮制前后抗氧化谱效关系研究 [J]. 药物分析杂志, 2025, 45(3): 426-439.
[11] 孟齐悦. 酶法辅助提取茉莉花挥发油及其抗菌活性谱效关系的研究 [D]. 福州: 福建中医药大学, 2023.
[12] 谢一嘉. 十二醛协同香叶醇对开心果中黄曲霉菌的抑菌作用及其抑菌机制 [D]. 广州: 华南理工大学, 2023.
[13] 杨子牧, 杨苗苗, 蒲筱斌, 等. 甘肃不同产地黄芪 HPLC 特征图谱的建立及其抗氧化谱效关系研究 [J].

- 中国药学杂志, 2025, 60(23): 2456-2468.
- [14] 王洋洋, 靳雅, 陈嘉媛, 等. 罗布麻叶 HPLC 指纹图谱及降脂活性的谱效关系研究 [J]. 中南药学, 2026, 24(1): 143-149.
- [15] 张金英, 茆志国, 郭琳, 等. 常用鲜干中药差异化学成分及药理作用研究特点分析 [J]. 中药药理与临床, 2025, 41(11): 116-120.
- [16] 李曼. 白花蛇舌草干品和鲜品抗炎效应及其物质基础的比较研究 [D]. 南京: 南京中医药大学, 2022.
- [17] 陶思雨, 云鹭, 彭一峰, 等. 不同来源甘草地上部分提取物 HPLC 指纹图谱和抗氧化活性谱效关系的研究 [J]. 西北药学杂志, 2025, 40(5): 47-54.
- [18] Qi J J, Zhang Q Q, Li L L, *et al.* Spectrum-effect relationship between UPLC-Q-TOF-MS fingerprint and anti-AUB effect of *Clinopodium chinense* (Benth.) O. Kuntze [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2022, 217: 114828.
- [19] 熊贤招, 祝瑶露, 汪新婵, 等. 中药质量分析方法研究进展 [J]. 中国医药科学, 2025, 15(1): 35-38.
- [20] 徐荣荣, 段天华, 李蕊, 等. 冀产野生青翘 UPLC 指纹图谱的建立及其抗氧化谱效关系研究 [J]. 中国药学杂志, 2025, 60(6): 579-588.
- [21] 祁昱彤, 彭勃, 孟硕, 等. 基于谱效关联分析及生物信息学的积雪草抗氧化质量标志物研究 [J]. 中国药学杂志, 2025, 60(7): 727-738.
- [22] 唐雨灵, 陈玲玲, 刘梦娇, 等. 基于谱效关系的不同海拔大黄泻下作用研究 [J]. 药物评价研究, 2025, 48(11): 3253-3263.
- [23] 童湘伟, 石坤连, 梁业婷, 等. 三七不同来源指纹图谱数字化研究 [J]. 医学信息, 2021, 34(14): 106-109.
- [24] 周天成, 张洪宝, 马盼盼, 等. 基于抗炎作用的“多谱-多效”关联筛选通关藤质量标志物 [J]. 中南药学, 2026, 24(3): 27-32.
- [25] 田慧, 卢雪雪, 毛德文, 等. 十一方药酒的抗炎作用、谱效关系及其安全性初步评价 [J]. 中国民族民间医药, 2025, 34(8): 29-39.
- [26] 郭亚菲, 曹强, 叶蕾蕾, 等. 唐古特大黄 FTIR 的双指标序列分析及抗炎谱效关系研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2024(1): 188-196.
- [27] 王志萍, 李林杰, 王昱涵, 等. 基于灰色关联度的金母颗粒抗炎作用的谱效关系研究 [J]. 中药新药与临床药理, 2023, 34(5): 675-683.
- [28] 陈晓蒙. 基于谱效关系对羌药六月寒的质量标准研究 [D]. 成都: 西南交通大学, 2023.
- [29] 曹凡, 宋忠兴, 陈琳, 等. 金茵利胆胶囊的体外抗炎活性评价及其谱效关系 [J]. 海军军医大学学报, 2023, 44(4): 418-426.
- [30] Jia H H, Lu G, Huang S, *et al.* Phytochemical optimization and anti-inflammatory mechanism of an aerial-part extract from *Echinacea purpurea* in DSS-induced colitis [J]. *Pharmaceutics*, 2026, 19(1): 109.
- [31] Qiu F N, Wang Q L, Li P, *et al.* Revealing the chemical and pharmacological individualities of two pharmacopoeial *Paris* species for the purpose of precise medication [J]. *J Ethnopharmacol*, 2025, 353: 120402.
- [32] 张弘, 张慧文, 张莎莎, 等. 基于灰色关联分析的葶苈体外抗氧化活性谱效关系研究 [J]. 食品与药品, 2023, 25(6): 494-499.
- [33] 李莹曼, 宋紫腾, 侯淇允, 等. 基于抗氧化谱效关系的肉苁蓉质量标志物研究 [J]. 中国现代中药, 2024, 26(2): 265-275.
- [34] Shan X X, Yang X, Li D W, *et al.* Research on the quality markers of antioxidant activity of Kai-Xin-San based on the spectrum-effect relationship [J]. *Front Pharmacol*, 2023, 14: 1270836.
- [35] 刘梦文, 邓巧玲, 沈静, 等. 桑叶抗氧化活性谱效关系研究 [J]. 医药导报, 2025, 44(3): 387-391.
- [36] 张元波, 李颂, 魏庆红, 等. 枇杷叶抗氧化谱效相关质量评价指标研究 [J]. 延边大学农学学报, 2024, 46(4): 47-53.
- [37] Zhang L W, Wang J, Ge Y, *et al.* HPLC fingerprint analysis with the antioxidant potential of *Polygonatum sibiricum* combined with the chemometric calculations [J]. *Separations*, 2025, 12(4): 81.
- [38] Satapathy T, Patel N, Sahu P, *et al.* Decoding inflammatory signaling networks: From molecular mechanisms to therapeutic targets [J]. *Adv Biomark Sci Technol*, 2025, 7: 204-221.
- [39] 杨苗苗, 雷乐乐, 蒲筱斌, 等. 基于谱效关系-入血成分验证的甘松醇提物抗抑郁药效物质基础研究 [J]. 中国中药杂志, 2026, 51(4): 1001-1015.
- [40] 王梓琴. 酸枣仁不同极性部位物质基础及体外抗抑郁活性研究 [D]. 兰州: 甘肃中医药大学, 2025.
- [41] 邹佳莉. 参益安神片抗抑郁作用评价研究 [D]. 长春: 长春中医药大学, 2023.
- [42] Ren H Q, Liu K L, Li J L, *et al.* Chaihu Shugan San exerts antidepressant effects by driving microglial M2 polarization via inhibition of the IL-1 β /JNK signaling pathway [J]. *J Ethnopharmacol*, 2026, 360: 121137.
- [43] 常星, 王露, 程江雪, 等. 基于偏最小二乘回归分析的逍遥软胶囊中柴胡-白芍药对抗抑郁作用谱-效关系研究 [J]. 中草药, 2023, 54(8): 2509-2515.
- [44] 翟婷, 卢利涛, 何江伟, 等. 基于谱效关系筛选大黄炭制前后改善人脐静脉内皮细胞损伤的物质基础 [J]. 中成药, 2025, 47(7): 2163-2171.
- [45] 李秋雨, 边丽华, 王晓玫, 等. 不同商品规格三七止血功效的谱效关系研究 [J]. 中国中药杂志, 2021, 46(16):

- 4157-4166.
- [46] Ouyang X J, Li J Q, Zhong Y Q, *et al.* Identifying the active ingredients of carbonized *Typhae Pollen* by spectrum-effect relationship combined with MBPLS, PLS, and SVM algorithms [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2023, 235: 115619.
- [47] 刘林莉, 麻秀萍, 徐剑, 等. 白及正丁醇提取物止血作用的谱效关系研究 [J]. 中药材, 2022, 45(11): 2664-2670.
- [48] 王文旭, 覃晓祎, 麻秀萍, 等. 地苾止血作用的谱效关系研究及体外凝血活性初探 [J]. 中药材, 2022, 45(1): 130-136.
- [49] Facchin B M, dos Reis G O, Vieira G N, *et al.* Inflammatory biomarkers on an LPS-induced RAW264.7 cell model: A systematic review and meta-analysis [J]. *Inflamm Res*, 2022, 71(7/8): 741-758.
- [50] 鲁婧, 赵玥, 邹桂欣, 等. 基于基线等比增减设计与谱效关系的黄芩射干汤药效物质基础研究 [J]. 药物评价研究, 2025, 48(12): 3652-3661.
- [51] 王执一, 曾珊, 罗勇, 等. 基于谱效关系的小儿肺热咳嗽颗粒抑菌作用研究 [J]. 中国抗生素杂志, 2024, 49(5): 560-567.
- [52] Ye X, Tan Q M, Yin P, *et al.* Spectrum-effect relationships guided discovery of antioxidant Q-Markers in two mature stages of *Chimonanthus salicifolius* leaves [J]. *Biomed Chromatogr*, 2026, 40(3): e70360.
- [53] 朱芊芊, 汪诗沁, 周旭香, 等. 熵权逼近理想排序法结合谱效分析辨识菊花抗氧化功能的物质基础 [J]. 医药导报, 2024, 43(6): 956-964.
- [54] Li H Y, Zhao H W, Chen L X, *et al.* Spectrum-effect relationship between HPLC fingerprints and antioxidant activity of Qi-Fu-Yin based on multiple statistical correlation analysis [J]. *Phytochem Anal*, 2024, 35(7): 1565-1576.
- [55] 邹沛洋, 杨仁明, 魏德洸, 等. 基于谱效关系及成分敲除的水提竹沥抗炎关键成分及其质量评价 [J]. 中国现代应用药学, 2026, 43(2): 254-263.
- [56] Cheng R R, Cheng X, Jiang D L, *et al.* Spectrum-effect relationship of the cardiovascular-protective effect of with *Chrysanthemi Flos* by UPLC-MS/MS and component knock-out method [J]. *Food Chem Toxicol*, 2025, 200: 115372.
- [57] Chen J J, Chen Q Q, Xiao P, *et al.* A novel framework for uncovering the coordinative spectrum-effect correlation of the effective components of Yangyin Tongnao Granules on cerebral ischemia-reperfusion injury in rats [J]. *J Ethnopharmacol*, 2025, 337: 118844.
- [58] 方可儿, 张海瑞, 竹炳, 等. 基于谱效关系的续断盐制前后对肾虚大鼠的物质基础研究 [J]. 中国中药杂志, 2024, 49(12): 3220-3228.
- [59] 葛宏霞, 李思琪, 梅景晨, 等. 基于中药炮制“醋制入肝”理论醋五味子对急性肝损伤作用谱效关系研究 [J]. 药物评价研究, 2023, 46(9): 1897-1907.
- [60] 薛变霞. 甘松舒张血管和抗神经炎症的谱效关系与甘松新酮的降解产物研究 [D]. 天津: 天津中医药大学, 2023.
- [61] 饶思危. 基于“谱效关系”挖掘两面针抗炎、抗氧化活性成分群及其绿色提取方法研究 [D]. 桂林: 广西师范大学, 2023.
- [62] 汪诗沁. 基于谱效关系的菊花平肝效应成分的辨识 [D]. 武汉: 湖北中医药大学, 2023.
- [63] 王迎, 马瑜璐, 杨文国, 等. 雄黄饮片 ICP-MS 无机元素分析及其抗结肠癌谱效关系研究 [J]. 中国医院药学杂志, 2023, 43(9): 983-989.
- [64] 陈紫莹, 黄姣丽, 廖映红, 等. 复方铁范工艺优化及抑菌成分研究 [J]. 现代中医药, 2024, 44(4): 100-108.
- [65] 朱瑶瑶. 黄芩-白芍抗骨关节炎谱效关系及质量评价研究 [D]. 杭州: 浙江中医药大学, 2024.
- [66] 刘晶晶, 戴忠, 杨建波, 等. 红参-制何首乌药对对神经细胞保护作用的谱效关系 [J]. 中国药物警戒, 2023, 20(6): 623-628.
- [67] 沈成英, 吴文明, 侯雄军, 等. 黄芩汤指纹图谱建立及不同相态抗皮肤癣菌活性谱效关系研究 [J]. 中国药房, 2023, 34(6): 687-692.
- [68] 刘月. 银翘散煮散与饮片煎煮过程化学成分变化规律及抑菌活性研究 [D]. 南昌: 江西中医药大学, 2022.
- [69] 王月洁. 桑白皮汤对 LPS 致急性肺损伤的药效物质基础及作用机制研究 [D]. 长春: 长春中医药大学, 2022.
- [70] 王林林. 小儿消积止咳口服液的质量分析方法研究 [D]. 济南: 山东大学, 2024.
- [71] 蔡子贤. 固本延龄丸挥发性成分 GC-MS 分析及其补肾阴谱效关系研究 [D]. 南昌: 南昌大学, 2023.
- [72] 庄晓琪. 参枝苓口服液质量标志物相关成分挖掘及质量快速评价方法研究 [D]. 济南: 山东大学, 2023.
- [73] 刘帅, 杨婷婷, 王欣竹, 等. 灰色关联分析在中药质量评价中的应用 [J]. 内蒙古医科大学学报, 2026, 48(1): 79-85.
- [74] 蒋盼云, 熊慧利, 林丽美, 等. 不同产地大叶千斤拔指纹图谱的建立及抑菌活性谱效关系研究 [J]. 中国药理学杂志, 2025, 60(6): 569-578.
- [75] Wang X D, Xu J, Zhang L H, *et al.* Global profiling of the antioxidant constituents in *Chebulae Fructus* based on an integrative strategy of UHPLC/IM-QTOF-MS, MS/MS molecular networking, and spectrum-effect correlation [J]. *Antioxidants*, 2023, 12(12): 2093.
- [76] 张建锋, 侯长周, 侯晓杰, 等. 基于谱效关联技术的中药质量控制研究进展 [J]. 中华中医药学刊, 2025,

- 43(3): 205-209.
- [77] 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.
- [78] Cao L, Zhao Y W, Chen X L, *et al.* Integrated quality evaluation of traditional Chinese medicine based on chemical composition and biological effects using high-level data fusion of near-infrared and ultraviolet spectroscopy combined with machine learning [J]. *Measurement*, 2026, 258: 118972.
- [79] Zhang L Z, Shi X M, Deng X H. MDL-HTI: A multimodal deep learning approach for predicting herb-target interactions [J]. *Interdiscip Sci Comput Life Sci*, 2025, doi: 10.1007/s12539-025-00772-w.
- [80] 陈晓璐. 基于化学计量学的肉桂质量评价及谱效关系研究 [D]. 南宁: 广西中医药大学, 2021.
- [81] 李欢, 翟秉涛, 范好, 等. 基于谱效关系的太白橐木质量评价研究 [J]. 中国中药杂志, 2021, 46(18): 4757-4764.
- [82] 张亚杰. 基于谱效关系的牛蒡根、苘蓼子、红药子质量标准研究 [D]. 兰州: 兰州大学, 2021.
- [83] He P Y, Zhang C L, Yang Y S, *et al.* Spectrum-effect relationships as an effective approach for quality control of natural products: A review [J]. *Molecules*, 2023, 28(20): 7011.
- [84] 曾珊, 伍晓乐, 徐杨, 等. 中药通过影响肠道菌群治疗 2 型糖尿病的研究进展 [J]. 中国抗生素杂志, 2024, 49(8): 860-866.
- [85] 胡超, 赵洪庆, 刘检, 等. 基于谱效关系及活性验证的百合地黄汤抗抑郁成分研究 [J]. 药学报, 2024, 59(5): 1364-1373.
- [86] 乔亚玲, 宋霞, 刘亚蓉, 等. 基于 UPLC 指纹图谱与抗氧化谱效关系的枸杞子质量标志物研究 [J]. 中国现代中药, 2024, 26(3): 471-478.
- [87] 刘振杰, 丘海芯, 甘金月, 等. 紫苏叶 HPLC 指纹图谱建立及其抗流感病毒活性谱效关系研究 [J]. 中草药, 2024, 55(1): 287-296.
- [88] Xia J, Li X Y, Lin M, *et al.* Screening out biomarkers of *Tetrastigma hemsleyanum* for anti-cancer and anti-inflammatory based on spectrum-effect relationship coupled with UPLC-Q-TOF-MS [J]. *Molecules*, 2023, 28(7): 3021.
- [89] Jiang M Y, Yang L L, Zou L, *et al.* A comprehensive quality evaluation for Huangqi Guizhi Wuwu Decoction by integrating UPLC-DAD/MS chemical profile and pharmacodynamics combined with chemometric analysis [J]. *J Ethnopharmacol*, 2024, 319: 117325.
- [90] Qian M Y, Cao L, Wang J, *et al.* A comprehensive quality evaluation strategy for Reduning Injection by integrating UPLC-Orbitrap MS/MS profile and biological potency combined with multivariate statistical analysis [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2024, 250: 116407.
- [91] Wang Y Q, Liu M M, Cao Y X, *et al.* Screening and verification of blood-activating effective component group of *Panax notoginseng* based on spectrum-effect relationships [J]. *Biomed Chromatogr*, 2025, 39(2): e6083.
- [92] Wu J F, Sun H, Zhao Y Y, *et al.* The spectrum-efficacy correlation of Kai-Xin-San for cognition of A β ₄₂ transgenic *Drosophila* and verification of its active ingredients [J]. *Front Pharmacol*, 2025, 16: 1538837.

[责任编辑 赵慧亮]