

以质量标志物为核心的中药质量数智评价体系的构建：从技术集成到科学监管

侯媛媛¹, 王江涛¹, 侯小涛², 郝二伟², 姜 民¹, 白 钢^{1*}

1. 南开大学药学院, 药物化学生物学全国重点实验室, 天津 300353

2. 广西中医药大学, 广西中药药效研究重点实验室, 广西 南宁 530200

摘要: 中药质量控制是保障中药安全、有效、稳定与可控的核心环节。随着“中药质量标志物(Q-Marker)”理论的提出, 以及生物分析、组学技术与人工智能(artificial intelligence, AI)的快速发展, 中药质量控制正经历从“经验+科学”向“科学+智能”的跃升。Q-Marker理论为中药质量控制从“单指标成分”向“多维度、系统化、临床导向”的综合评价体系转型提供了理论支撑。系统梳理了近10年的相关研究进展, 重点分析了AI在近红外光谱(near-infrared spectroscopy, NIR)快检、质量标志物发现、多源数据融合建模及全链条智能监管中的关键作用。AI通过自动特征提取、多模态融合、深度学习建模与可解释性分析, 能显著提升复杂中药体系中“成分-药效-临床”相关联的解析能力, 推动NIR在线检测技术的智能化升级。基于此提出了构建以Q-Marker为核心、AI为驱动、数据为纽带的中药质量数智评价体系, 为实现“成分清晰、效应可测、过程可视、信息共享”的智能监管范式提供了借鉴, 为中药质量控制迈向标准化、国际化和高质量发展提供了参考路径。

关键词: 中药; 质量标志物; 人工智能; 数智评价体系; 近红外光谱; 智能监管

中图分类号: R28; TP18 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2026)20-7981-08

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.20.005

Construction of digital and intelligent quality evaluation system for traditional Chinese medicine centered on quality markers: From technology integration to scientific regulation

HOU Yuanyuan¹, WANG Jiangtao¹, HOU Xiaotao², HAO Erwei², JIANG Min¹, BAI Gang¹

1. State Key Laboratory of Medicinal Chemical Biology, College of Pharmacy, Nankai University, Tianjin 300353, China

2. Guangxi Key Laboratory of Efficacy Study on Chinese Materia Medica, Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530200, China

Abstract: Quality control is a core link in ensuring the safety, efficacy, consistency, and controllability of traditional Chinese medicine (TCM). Over the past decade, with the proposal of the “quality marker (Q-Marker)” concept and the rapid advancement of bioanalytical techniques, omics technologies, and artificial intelligence (AI), TCM quality control is undergoing a transition from an “experience-plus-science” paradigm to a “science-plus-intelligence” paradigm. The Q-Marker theory provides theoretical support for the transformation of TCM quality control from a “single-index component” approach to a multi-dimensional, systematic, and clinically oriented comprehensive evaluation system. This paper systematically reviews the research progress over the last decade, with a focus on analyzing the key roles of AI in near-infrared (NIR) spectroscopy rapid detection, Q-Marker discovery, multi-source data fusion modeling, and whole-chain intelligent regulation. The research demonstrates that AI, through automated feature extraction, multimodal fusion, deep learning-based modeling, and interpretability analysis, significantly enhances the ability to decode the “component-efficacy-clinical outcome” relationships within complex TCM systems, thereby driving the intelligent upgrading of online analytical technologies such as NIR. On this basis, we propose a digital and intelligent TCM quality evaluation system with Q-Markers as the core, AI as the driving force, and data as the bridge. This system achieves an intelligent regulatory paradigm characterized by “clear

收稿日期: 2026-05-18

基金项目: “带土移植”人才引进计划项目(桂科AA23026008)

作者简介: 侯媛媛, 女, 教授, 研究方向为中药分析。E-mail: houyy@nankai.edu.cn

*通信作者: 白 钢, 男, 教授, 研究方向为中药系统生物学与化学生物学。E-mail: gangbai@nankai.edu.cn

components, measurable efficacy, visible processes, and shared information”, and represents a key pathway for advancing TCM quality control toward standardization, internationalization, and high-quality development.

Key words: traditional Chinese medicine; quality markers; artificial intelligence; digital intelligence evaluation system; near-infrared spectroscopy; intelligent supervision

质量控制是保障中药安全性、有效性与一致性的核心环节，直接关系到其临床疗效与产业高质量发展。然而，中药化学成分复杂、多靶点协同作用机制不明、传统“单指标成分”评价难以全面反映药效与安全性，加之生产过程中的基原差异、工艺波动及数据孤岛等问题，导致质量控制长期面临着药效关联弱，过程控制数智化监管困难等瓶颈。近年来，中药质量标志物（quality markers, Q-Marker）理论的提出为建立“成分-药效-临床”关联的多维度评价体系提供了理论支撑。同时，随着近红外光谱（near-infrared spectroscopy, NIR）等光谱技术在线快检技术与人工智能（artificial intelligence, AI）的深度融合，为突破高维数据分析、模型泛化与可解释性难题提供了解决路径。然而，当前仍面临多源数据融合不足、智能评价缺乏统一标准、监管科学与技术集成脱节等挑战。为此，本文系统梳理了以 Q-Marker 为核心的基于传统药性、化学信息、生物数据、临床疗效等方面中药质量的数字化与智能化多维“数智评价”综合体系研究进展，重点探讨 AI 在 NIR 快检、质量标志物发现、多模态数据融合及全链条智能监管中的赋能作用，提出构建“数据驱动-标志物导向-闭环调控”的智能化质量评价新范式，旨在为中药质量控制向标准化、数字化与国际化转型提供理论依据与技术路径。

1 中药 Q-Marker 研究进展与发展趋势

1.1 Q-Marker 的理论体系正逐步向多维度综合评价转变

近 10 年来，Q-Marker 概念已经逐渐成为中药质量评价的理论核心。Q-Marker 理论主张中药的质量控制要从“多成分-多靶点-多机制”系统出发，筛选出能代表药材/方剂药效且可测定、可溯源、可量化与安全性/功效密切相关的化学成分，作为质量评价和标准化的核心指标^[1-2]。Zhang 等^[3]通过构建“性-效-物”三元理论，系统关联中药药性、药效与化学成分，突破单一指标和模糊指纹图谱的局限，并融合系统生物学、化学生物学与网络药理学，提出“有效性表达、特有性分析、质量传递监测”三维研究路径，覆盖种植、采收、炮制、提取及体

内过程，强化质量传递与溯源，推动质量评价从单一成分指标升级为多维度综合体系，支撑全产业链质量控制落地。随着多组学、生物信息学、网络药理学等技术快速融入中药质量控制研究体系中，中药质量评价方法更关注“组学-网络-效应”的集成^[4-5]，通过“组学-效应-成分”的三位一体策略，实现了 Q-Marker 科学筛选与生物功能的关联，建立了更贴近临床疗效与安全评价的质量标准^[6-7]。

1.2 化学信息与生物数据的融合推动了与临床疗效的关联

化学指纹图谱结合化学模式识别以及多指标成分定量已成为中药质量评价的行业共识^[8-9]，融合光谱、质谱、色谱等多模态分析的数据极大提升了多成分共存、复杂组分间相互检验的能力与效率^[10]。例如，Ma 等^[11]将薄层色谱和液相色谱-高分辨质谱等多维指纹图谱信息与随机森林等机器学习以及加权分析相结合，成功从复方阿胶浆中确证了党参炔苷和人参皂苷 Rf 为关键 Q-Marker，有效解决了色谱信号重叠干扰等问题，为多模态数据融合提供了高效且可扩展的计算框架。此外，通过 AI 对传统功效与基础或临床研究的梳理，结合高通量筛选、体内分布/ADME [吸收（absorption）、分布（distribution）、代谢（metabolism）和排泄（excretion）] 分析、药效评价等，将“药效-成分-指纹谱”的关联关系与生物活性相结合，强化了质量控制与临床疗效之间的逻辑关联^[12-13]。

1.3 中药质量控制理念持续迈向全生命周期管理

随着中药监管科学的发展，围绕中药全链条、全生命周期的数字化与智能化监管，中药 Q-Marker 将推动中药卓越监管体系的构建，强化基础学科向监管应用的转化^[14-15]。多学科交叉与深度融合，不仅拓展了技术边界与应用场景^[16-17]，也推动了智能制造、数字化车间、过程分析技术（process analytical technology, PAT）及标准作业程序（standard operating procedure, SOP）数据化等，推动了生产环节个性化、精准测控与产业数字化转型与智能化升级^[18]。例如，张磊等^[19]提出了基于数据驱动的中药制药过程 Q-Marker 监测方法，涵盖了

监测指标识别、工业质量数据挖掘与 PAT 体系建立等关键步骤,并以注射用益气复脉(冻干)的超滤工序为例,验证了该方法在中药工业质量监测中的适用性。同时基于质量源于设计(quality by design, QbD)与 PAT 管理理念的推进,也在逐步强调中药 Q-Marker 标准的落地和更新^[20]。如针对白芷,通过构建药材、饮片、标准汤剂、流浸膏剂和血清样本的 HPLC 特征图谱,依据质量传递过程中各成分含量及转移率的变化,筛选出水合氧化前胡素和白当归素作为白芷的 Q-Marker,为全链条质量标准的确立提供了实证^[21]。此外,安全性 Q-Marker 的识别与限度的确立也有助于补足对药材安全性评价的缺失,推动建立一个能全面反映其整体质量的科学评估框架^[22-23]。

2 AI 在中药 NIR 快检技术中的作用与未来

2.1 中药 NIR 分析技术面临的主要挑战

基于 NIR 技术的中药检测技术在快速无损检测、在线监控以及智能制造等领域已取得显著进展,但仍面临着一些挑战。(1) 中药基原不统一、组分复杂、基体干扰强、成分比例波动大。加之原药材、饮片、复方制剂等样本在来源、加工工艺和批次上差异显著, NIR 信号易受水分含量、粒径等物理因素干扰,导致谱图重复性与代表性下降,严重制约定性和定量分析的模型泛化能力^[24-25]。(2) NIR 高维数据依赖化学计量学或 AI 建模,但模型易受批次、仪器及温湿度变化等因素影响,导致外推性能下降、稳定性与可迁移性差,平台的转移应用困难^[26-27]。(3) NIR 原始光谱干扰多、特征带宽重叠,当前光谱特征选择与建模仍高度依赖专家经验^[28-29]。基团的振动信号难以直接区分低含量成分,甚至难以全面反映生物活性和临床功效,“药效-成分-功效”的逻辑链条有待增强^[30-31]。(4) 目前中药 NIR 缺乏统一的标准操作方案,阻碍了大规模、跨企业、跨生产线的推广应用^[32]。上述中药 NIR 检测领域的困境均需要借助 AI 与大数据分析来解决。

2.2 AI 与 NIR 技术的融合推动建模与多变量数据分析的突破

随着 AI 的不断进步,其已逐步用于中药 NIR 检测领域的各个方面。化学计量结合 AI 智能算法可助力 NIR 高维数据的处理,降低信噪比。伴随深度学习方法长短期记忆网络(long short-term memory, LSTM)、双卷积神经网络注意力机制(dual

convolutional neural network with attention, Dual-CNN-Attention)、迁移学习等算法的引入, NIR 与 AI 的联用可以提升特征提取、异常检测与模型的泛化能力,更准确地实现药材溯源、含量预测与复杂配伍的识别能力^[33-35]。例如, Gao 等^[36]通过构建双分支深度网络 Dual-TCNet,融合卷积神经网络与多头注意力机制,对 5 个产地共 588 份黄芪样本的 NIR 光谱进行产地溯源,准确率、精确率和召回率分别达到 98.31%、98.39%和 98.32%,性能远优于传统机器学习模型。在变量选择与光谱预处理方面,标准正态变量变换(standard normal variate, SNV)、多元散射校正(multiplicative scatter correction, MSC)、萨维茨基-戈莱平滑(Savitzky-Golay smoothing, SG)及竞争性自适应重加权采样(competitive adaptive reweighted sampling, CARS)等方法可进一步优化模型性能,最大限度挖掘光谱特征,同时提高光谱的专属性与可解释性^[37-38]。如针对延胡索,通过筛选 MSC 结合二阶导数等最优预处理方式,分别建立了其生品与炮制品的 NIR 定性鉴别和 7 种生物碱的定量模型,所有成分的相关系数均高于 0.99,实现了快速无损的质量判别与含量预测^[39]。尽管 AI 驱动的 NIR 模型提升了预测与归类能力,但受限于训练数据样本的代表性和数据分布,也存在过拟合、多源数据融合不当、模型可解释性有限等问题,其在大数据/真实复杂生产情况下的泛化性仍有待提升^[40-41]。

2.3 AI 驱动 NIR 技术与其他技术的融合推动了中药数智化发展

目前仅采用 NIR 技术难以满足复杂中药成分的监管需求,通过与光谱-色谱/高分辨质谱等数据的融合,将中红外光谱(mid-infrared spectroscopy, MIR)、激光诱导击穿光谱(laser-induced breakdown spectroscopy, LIBS)、色谱、高分辨质谱(high-resolution mass spectrometry, HRMS)、质谱(mass spectrometry, MS)、电子鼻(electronic nose, E-nose)、图像等多源数据与 NIR 技术协同,以融合与嵌入式决策为核心构筑强大的中药数智质控体系,形成高通量、全息式评价范式,可以显著提升中药溯源和定量的精度^[42]。如针对川乌、草乌、附子等有毒乌头类药材,单一数据源模型难以对其正确分类,而将 NIR、电子鼻和高分辨质谱进行多源特征融合后,再结合主成分分析-线性判别分析(principal component analysis-linear discriminant

analysis, PCA-LDA) 和偏最小二乘判别分析 (partial least squares discriminant analysis, PLS-DA) 聚类可显著提升鉴别的准确度^[43]。如果进一步引入 Q-Marker 理念结合生物活性, NIR 不仅能关注成分检测, 更能直接预测药物活性或药效水平, 实现“组分-活性”的一体化评价^[44-45]。如果能加快方法标准化、数据共享、模型互认与批量应用落地, 将有力支撑中药的工业化、数智化发展^[46]。作为高通量、无损、多目标预测的质控工具, NIR 将为 Q-Marker 在线筛选、活性追踪、定点质控等提供关键落地支撑, 为推动中药智能化、个性化、实时监管铺平技术路径^[47-48]。

3 AI 赋能中药 Q-Marker 的发现与智能监管

3.1 AI 赋能高通量数据挖掘与高维数据特征提取

AI 通过自动特征学习与非线性映射可高效应对高维、非结构化和海量数据。其能自动提取层次化特征, 捕捉传统方法难以发现的复杂模式。同时, 借助正则化和降维技术有效缓解“维度灾难”, 可以在并行计算下快速处理大规模数据。此外, AI 还支持多模态融合与时序分析, 结合可解释性工具增强结果的透明度。这一技术路径不仅是传统方法的补充, 更是应对现代高维复杂数据挑战的解决方案。例如, 利用自然语言处理 (natural language processing, NLP) 文本挖掘、AI 知识图谱对国内外文献与大数据进行全自动整理, 助力 Q-Marker 及其相关检测指标的发现, 提升 Q-Marker 评价的体系化研究水平^[49]。此外, 基于大规模色谱数据与智能解析的策略同样富有成效, 如通过整合“一对多”色谱方法和中药专用质谱数据库, 对 100 种常用中成药的 645 批样品进行质量一致性分析, 结合层次聚类与相似度热图分析提示有 19% 的处方存在化学成分不一致, 并通过具体案例解析成功追溯至大黄的不同的基原, 为 Q-Marker 的规模化发现提供了高效路径^[50]。

此外, 整合代谢组、转录组、蛋白组等多维组学数据, 借助 AI 可打通分子因果链条, 可弥补单一维度数据存在的盲区。同时, 通过深度学习自动进行降维处理、筛选关键特征, 发现驱动生物过程的核心枢纽节点, 从而应对数据高维及异构的挑战。通过嵌入先验知识构建可解释的 AI 模型, 运用多模态大模型处理异构数据, 基于迁移学习解决小样本难题, 以及整合时空维度构建动态网络。目前, 基于 AI 辅助的整合分析已从相关性分析迈向

因果推断, 极大地提高了标志物发现的效率^[51]。He 等^[52]系统阐述了网络药理学如何构建“药材-化合物-靶点-疾病”网络, 通过机器学习优化活性成分筛选与 ADME/T [毒性 (toxicity)] 预测, 借助深度学习解码光谱数据与复杂互作网络的关联, 形成“计算预测-实验验证”的整合模式, 将中医的宏观表述转化为可量化的科学语言。基于 AI/机器学习的多模态特征融合、特征选择, 如基于熵权的 Q-Marker 筛选、PCA、卷积神经网络等, 极大提升复杂体系中 Q-Marker 的识别与主效应成分相关性发现的效率^[53-54]。此外, AI+光谱/质谱/色谱/图像等多源数据融合实时监控、异常检测、溯源判别, 极大提高了检测的准确性、生产安全性与反馈及时性^[55]。例如, Pan 等^[56]总结了高光谱成像技术与机器学习相结合, 通过数据集划分、光谱预处理、降维及定性/定量建模, 提升中药质量快速无损分析精准度的可行性。总之, AI 驱动的“指纹-效应”建模、预测药效关联、药理网络的融合共同促进了“化学-生物-临床”一体化质量评价^[57-58]。此外, 区块链与 AI 结合实现用药全程数据追溯, 结合危害分析与关键控制点 (hazard analysis and critical control points, HACCP) 关键点分析、生产过程监控与异常预警, 持续推进了中药溯源与过程质量智能决策^[59]。

3.2 基于 Q-Marker 的 AI+中药质量控制的发展趋势

将 AI 与多源信息融合技术相结合, 通过挖掘“成分-靶点-药效”的全局网络, 实现 Q-Marker 的全自动筛选、权重赋值以及多属性融合, 基于 AI 融合赋能的中药质量控制正向系统化、智能化的动态监管模式转变^[60-61]。通过 AI 驱动, 考虑化合物的生物利用度, 对疗效相关效应标志物、风险/毒性指标以及中医理论综合性 Q-Marker 进行精准预测与溯源评价, 构建可解释的 AI 模型实现化学信息与生物效应的深度对齐, 从而有效破解中药质量控制中“药效表征不明确”的核心难题^[62]。以帕金森病为例, 针对天麻钩藤饮等方剂开展评估, 借助 TCMNet 策略, 将大语言模型辅助的加权蛋白相互作用网络与深度学习预测进行整合, 确定了银杏中的黄酮类物质为关键药效成分^[63]。构建 AI 主导的在线检测、溯源追踪、闭环调控与过程生产管控体系, 可以推进智能制造/数字中药工厂加速落地^[64]。通过聚焦过程建模、状态评估与决策优化, 实现“检测-建模-决策-执行”闭环技术体系, 可以为培育新质生产力开辟新的技术路

径^[65]。此外,如果将模型算法与云端进行协同,推进系统化、规模化的全链条监管,构建“成分清晰、效应可测、过程可视、信息共享”的数智监管新范式,最终实现与智慧医疗的深度融合^[66-67]。

4 基于 AI 与 NIR 的中药 Q-Marker 发现与综合评价策略

基于 AI 在高维数据的特征提取、模式识别及关联推理方面已展现出显著优势,其已被广泛应用于中药材鉴别、溯源、加工、监管等多个环节,并且贯穿于 Q-Marker 研发与应用的全链条。因此,本文以 Q-Marker 为核心、AI 为驱动、数据为纽带,提出中药质量 NIR 数智评价体系研究策略,具体步骤如下。(1) 多维数据获取与数据集构建:借助 AI 技术开展文献与临床数据挖掘工作,进而构建知识图谱。与此同时,采集中药样本的色谱、光谱、成分含量以及生物活性等方面的数据,从而形成多维数据集。(2) Q-Marker 筛选与确认:采用无监督机器学习等方法提取化学指纹特征,并与高维数据进行多源数据融合。例如,基于指纹图谱或特征图谱提取色谱共有峰,并筛选与生物活性密切相关的色谱峰,进而通过结构鉴定确认其化学成分,并开展活性验证筛选潜在的 Q-Marker。(3) 构建与解析 NIR 评价模型:构建多任务 AI 模型,以 NIR 光谱、

成分含量及生物活性数据为输入层,共享特征学习与任务特定输出层相结合,揭示成分含量、生物活性与光谱指纹特征之间的关联。采用决定系数(R^2)、均方根误差(root mean square error, RMSE)、平均绝对误差(mean absolute error, MAE)等指标评估模型稳健性,引入 NIR 光谱注意力机制解析关键特征区域,提升模型的可解释性。(4) 开展多维评价与质量评估:建立涵盖化学成分和生物活性在内的多维 NIR 评价指标体系,采用基于指标间相关性的客观赋权法(criteria importance through intercriteria correlation, CRITIC)进行客观赋权,结合逼近理想解排序法(technique for order preference by similarity to an ideal solution, TOPSIS)等方法计算综合得分,据此对样品进行质量品质的综合评估,基于大数据分析实现中药质量的科学监管。最终形成 AI 驱动的“数据获取-质量标志物确认-数据融合-NIR 综合评价”闭环的“数智评价”体系,为中药质量控制研究提供一条智能化、可解释、可推广的技术路径(图 1)。

5 结语与展望

目前以 Q-Marker 为核心的中药质量评价体系在理论构建、技术集成与监管应用方面取得了显著进展。中药质量控制正从传统的经验判别及“经验-

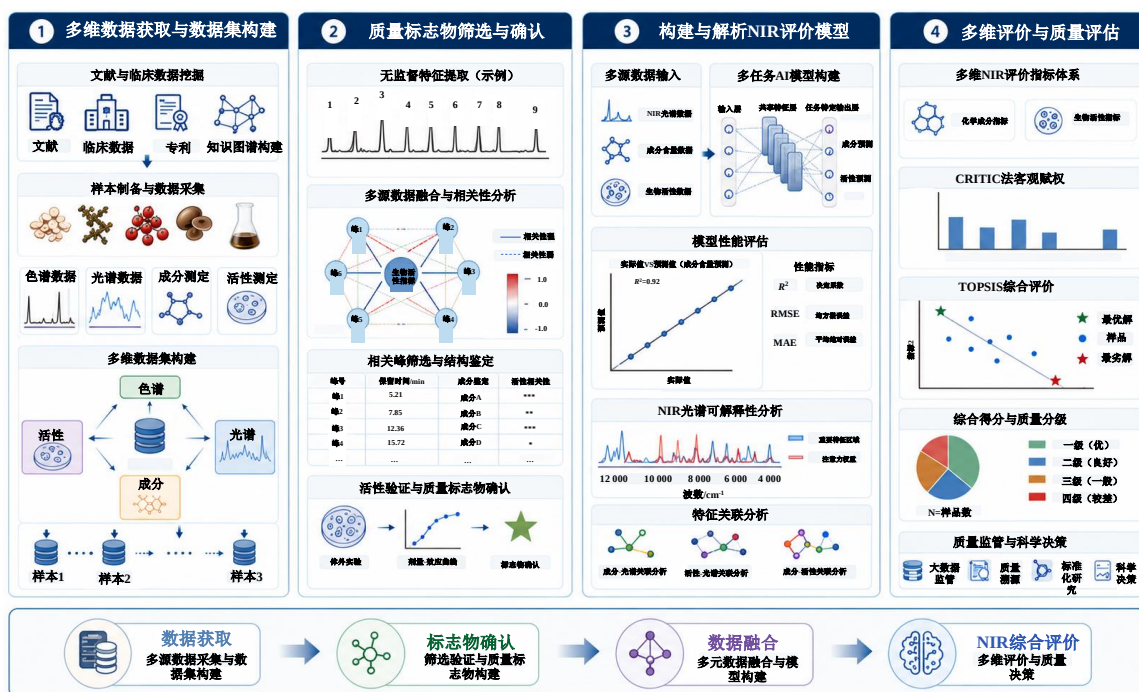


图 1 中药质量标志物 AI 驱动的多源数据融合与综合评价技术策略

Fig. 1 Technical strategy for AI-driven multi-source data fusion and comprehensive evaluation of quality markers of traditional Chinese medicine

科学”融合阶段,迈向以 AI 为核心驱动力的数智化新范式。AI 在 NIR 建模、多源数据融合、Q-Marker 智能筛选及全过程动态监管中的赋能作用,不仅显著提升了复杂中药体系中“化学信息-生物效应-临床疗效”关联性的解析能力,也为实现“在线检测-数据驱动-闭环调控”的智能生产过程控制提供了可行路径。尽管如此,当前 AI 在中药质量控制中的应用仍面临数据标准化不足、模型可解释性有限、多源异构信息融合困难等挑战。未来,在持续推进 AI 助力 Q-Marker 发现的同时,应重点发展以下几个方向:(1)构建开放共享的中药质量大数据平台,推动多源数据标准化与模型互认;(2)发展强可解释性的 AI 模型,增强质量控制与临床疗效之间的逻辑一致性;(3)推动 Q-Marker 理论与 AI 驱动的数字孪生、区块链溯源、智能制造系统深度融合;(4)加强面向中药特色的监管科学研究,构建适用于中药复杂体系的科学监管体系。总之,以 Q-Marker 为核心、AI 为引擎的数智评价体系,将成为推动中药质量全程可控、产业智能升级及国际认可的核心支撑。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] Zhang T J, Bai G, Han Y Q, *et al.* The method of quality marker research and quality evaluation of traditional Chinese medicine based on drug properties and effect characteristics [J]. *Phytomedicine*, 2018, 44: 204-211.
- [2] 中华中医药学会《中药质量标志物研究技术指南》编写组. 中药质量标志物研究技术指南 [J]. *中草药*, 2025, 56(7): 2249-2252.
- [3] Zhang T J, Bai G, Liu C X. Innovation theory, technical methods and industrial application of quality marker of traditional Chinese medicine [J]. *Chin Herb Med*, 2025, 17(1): 84-86.
- [4] Lu X Y, Jin Y Y, Wang Y Z, *et al.* Multimodal integrated strategy for the discovery and identification of quality markers in traditional Chinese medicine [J]. *J Pharm Anal*, 2022, 12(5): 701-710.
- [5] Ren J L, Zhang A H, Kong L, *et al.* Analytical strategies for the discovery and validation of quality-markers of traditional Chinese medicine [J]. *Phytomedicine*, 2020, 67: 153165.
- [6] Chen L, Huang X B, Wang H, *et al.* Integrated metabolomics and network pharmacology strategy for ascertaining the quality marker of flavonoids for *Sophora flavescens* [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2020, 186: 113297.
- [7] Wang Y, Yang L, Zhang X W, *et al.* Quality marker discovery of Danggui Jianzhong Decoction for treating primary dysmenorrhoea based on chinmedomics strategy [J]. *Phytomedicine*, 2023, 115: 154724.
- [8] Zhou L T, Ma X S, Zhang Z B, *et al.* Study on quality markers for hypoglycemic effects of *Moringa oleifera* leaves by the integration of network pharmacology, fingerprint, and multi-index quantitative analysis [J]. *Biomed Chromatogr*, 2026, 40(6): e70460.
- [9] Xue T, Wang Q, Zhang P P, *et al.* Consistency between stir-frying *Bombyx Batryticatus* formula granules and traditional decoctions based on multi-component qualitative and quantitative analysis combined with GC-IMS and chemometrics [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2025, 264: 116971.
- [10] Zhou T T. Unveiling secrets of traditional Chinese medicine: Cutting-edge techniques in component analysis [J]. *Chin Herb Med*, 2025, 17(3): 484-487.
- [11] Ma J M, Lv F, Ying L T, *et al.* Multidimensional chromatographic fingerprint fusion with machine learning: Entropy-based feature evaluation for TCM quality marker discovery [J]. *Talanta*, 2026, 303: 129500.
- [12] Wang Y F, Li Y W, Qu S H, *et al.* A rapid method for quantitative analysis of traditional Chinese medicine activity: A case study on antioxidant activity of *Gastrodia elata* [J]. *J Ethnopharmacol*, 2026, 360: 121173.
- [13] Wang Q, Chen G T, Chen X T, *et al.* Development of a three-step-based novel strategy integrating DMPK with network pharmacology and bioactivity evaluation for the discovery of Q-markers of traditional Chinese medicine prescriptions: Danlou tablet as an example [J]. *Phytomedicine*, 2023, 108: 154511.
- [14] 赵军宁. 中药卓越监管体系的构建策略与前景展望 [J]. *中国食品药品监管*, 2024(2): 4-15.
- [15] 黄哲, 赵祥瑞, 林学怡, 等. 基于药品全生命周期的中药监管模型的构建研究 [J]. *中草药*, 2021, 52(17): 5465-5474.
- [16] Jiang Y H, Chen M Y, Gang H C, *et al.* A funnel-type stepwise filtering strategy for identification of potential Q-markers of traditional Chinese medicine formulas [J]. *Front Pharmacol*, 2023, 14: 1143768.
- [17] Li J B, Sun C, Hou A J, *et al.* Exploring wine-processing: A distinctive classic technique in TCM [J]. *RSC Adv*, 2025, 15(53): 45157-45176.
- [18] 马欣荣, 王璧璇, 赵万顺, 等. 数据驱动技术在中药提取智能制造中的应用进展 [J]. *中国中药杂志*, 2023, 48(21): 5701-5706.
- [19] 张磊, 林梅, 陈雪艳, 等. 基于数据驱动的中药制药过程质量标志物 (Q-Marker) 监测方法研究及实践 [J]. *中草药*, 2024, 55(7): 2452-2462.
- [20] 李苗, 王滢悦, 张娜, 等. 基于量值传递-多元统计-亲和作用的护肝片关键质量标志物筛选 [J]. *中南药学*, 2025, 23(5): 1262-1269.
- [21] 火统鹏, 王辰玥, 李泽昱, 等. 基于药材-饮片-标准汤剂-流浸膏剂-血清样本质量传递过程的白芷质量标志

- 物研究 [J]. 中草药, 2025, 56(9): 3089-3098.
- [22] Zheng Y T, Zhang M Y, Wu X Q, *et al.* *Coptis chinensis* franch: Substance basis, mechanism of action and quality control standard revealed based on the Q-marker concept and new strategy of systemic pharmacology and biosynthesis research [J]. *Curr Top Med Chem*, 2024, 24(23): 2013-2032.
- [23] Zhou Y T, Wei Y S, Wu N N, *et al.* *Ziziphi Spinosae Semen*: A comprehensive review on quality marker prediction based on ethnopharmacology, phytochemistry, and pharmacology [J]. *J Ethnopharmacol*, 2026, 356: 120852.
- [24] Yin L H, Zhou J M, Chen D D, *et al.* A review of the application of near-infrared spectroscopy to rare traditional Chinese medicine [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2019, 221: 117208.
- [25] Zhang X Y, Yang P, Hao Y X, *et al.* NIR quantitative model trans-scale calibration from small scale to pilot scale via directed DOSC-SBC algorithm [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2023, 288: 122133.
- [26] Bai L, Zhang Z T, Guan H H, *et al.* Rapid and accurate quality evaluation of *Angelicae Sinensis Radix* based on near-infrared spectroscopy and Bayesian optimized LSTM network [J]. *Talanta*, 2024, 275: 126098.
- [27] 武艳菲, 徐慧, 王恺怡, 等. 融入近红外中药制造测量技术的软件研制与智能制造平台研究 [J]. 中国中药杂志, 2025, 50(9): 2324-2333.
- [28] Ma L J, Liu D H, Du C Z, *et al.* Novel NIR modeling design and assignment in process quality control of honeysuckle flower by QbD [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2020, 242: 118740.
- [29] Gao M L, Zhang Y, Cheng F F, *et al.* A gradient-based discriminant analysis method for process quality control of carbonized TCM via Fourier transform near infrared spectroscopy: A case study on carbonized *Typhae Pollen* [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2022, 265: 120363.
- [30] Ma H, Xiao L L, Xu D C, *et al.* Non-invasive detection of anti-inflammatory bioactivity and key chemical indicators of the commercial lanqin oral solution by near infrared spectroscopy [J]. *Molecules*, 2022, 27(9): 2955.
- [31] Bai G, Zhang T J, Hou Y Y, *et al.* From quality markers to data mining and intelligence assessment: A smart quality-evaluation strategy for traditional Chinese medicine based on quality markers [J]. *Phytomedicine*, 2018, 44: 109-116.
- [32] 胡丽萍, 黄生权, 田淑华, 等. 近红外光谱技术在中药药口服液在线质量监控中的模型建立和模型转移 [J]. 化工进展, 2020(8): 3263-3272.
- [33] Guo Q, Li M X, Fu R, *et al.* Rapid evaluation of *Curcuma* origin and quality based on E-eye, flash GC E-nose, and FT-NIR combined with machine learning technologies [J]. *Food Chem*, 2025, 481: 143953.
- [34] 王江涛, 刘至全, 庞晓凤, 等. 基于深度学习与近红外光谱技术对海洋中药马刀的数智评价研究 [J]. 中草药, 2026, 57(14): 5459-5469.
- [35] Mao S, Du Q Y, He M, *et al.* A strategy of Q-markers identification based on effect, property flavour material basis and rapid quantitative evaluation via near-infrared spectroscopy and chemometric methods for the quality control of *Flos Trollii* (FT) [J]. *J Ethnopharmacol*, 2025, 337: 118883.
- [36] Gao S M, Zhang H F, Yang Z Q, *et al.* A dual-branch CNN-encoder model for rapid geographic traceability of *Astragalus* using near-infrared spectroscopy [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2026, 346: 126851.
- [37] Ma X B, Hai P, Zhang M Q, *et al.* Nondestructive discrimination of *Potentilla anserina* L. from different production areas based on near-infrared spectroscopy [J]. *Phytochem Anal*, 2024, 35(4): 723-732.
- [38] Zhao J, Tian G, Qiu Y Y, *et al.* Rapid quantification of active pharmaceutical ingredient for sugar-free Yangwei Granules in commercial production using FT-NIR spectroscopy based on machine learning techniques [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2021, 245: 118878.
- [39] Zhu W H, Hong H, Hong Z H, *et al.* Rapid quality identification of decoction pieces of crude and processed *Corydalis Rhizoma* by near-infrared spectroscopy coupled with chemometrics [J]. *J Anal Meth Chem*, 2021, 2021(1): 1936057.
- [40] 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.
- [41] Hao N, Ping J C, Wang X, *et al.* Data fusion of near-infrared and mid-infrared spectroscopy for rapid origin identification and quality evaluation of *Lonicerae Japonicae Flos* [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2024, 320: 124590.
- [42] Ping J C, Hao N, Guo X T, *et al.* Rapid and accurate identification of *Panax ginseng* origins based on data fusion of near-infrared and laser-induced breakdown spectroscopy [J]. *Food Res Int*, 2025, 204: 115925.
- [43] Yang N, Dai S Y, Wu D X, *et al.* Data fusion and multivariate analysis based on near infrared spectroscopy, electronic noses, and high resolution mass spectrometry: A synergetic approach to boost performance on the authenticity analysis of toxic herbs for *Aconitum* [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2026, 270: 117312.
- [44] Zhang J B, Wang B, Zhang Y F, *et al.* E-eye and FT-NIR combined with multivariate algorithms to rapidly evaluate the dynamic changes in the quality of *Gastrodia elata* during steaming process [J]. *Food Chem*, 2024, 439:

- 138148.
- [45] Liu C L, Xu F R, Zuo Z T, *et al.* Network pharmacology and fingerprint for the integrated analysis of mechanism, identification and prediction in *Panax notoginseng* [J]. *Phytochem Anal*, 2023, 34(7): 772-787.
- [46] 胡蕴慧, 刘朋, 熊皓舒, 等. 数智中药: 现代中药数智化升级与创新发展的 [J]. 中草药, 2024, 55(1): 1-11.
- [47] Liu D L, Gao L L, Cui Z H, *et al.* Online detection of Q-marker concentrations in the Xuefu Zhuyu oral liquid extraction process using a multi-source cross-scale NIR attention fusion neural network [J]. *Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc*, 2025, 339: 126293.
- [48] Li M Y, Guo J L, Zhang Y H, *et al.* Joint multi-technology applications for establishing quality evaluation model of *Coptidis Rhizoma* [J]. *J Pharm Biomed Anal*, 2025, 264: 116952.
- [49] Zhang Y X, She L H, Ding H, *et al.* Comprehensive quality control of Qingjin Yiqi Granule based on UHPLC-Q-Orbitrap-MS and UPLC-QQQ-MS [J]. *Phytochem Anal*, 2024, 35(1): 184-197.
- [50] Ou H T, Liu C X, Ye S Y, *et al.* A novel approach to assessing quality issues and component annotation in TCM prescription: Insights from 100 common TCM products [J]. *J Pharm Anal*, 2025, 15(10): 101332.
- [51] Li M Y, Zhu J Q, Liu X N, *et al.* Application and research progress on artificial intelligence in the quality of traditional Chinese medicine [J]. *Front Pharmacol*, 2025, 16: 1687681.
- [52] He Y B, Wu S Y, Li J Y, *et al.* Artificial intelligence in traditional Chinese medicine: Unraveling herbal medicine's mechanisms [J]. *Research*, 2026, 9: 1224.
- [53] Lim J, Li J Y, Zhou M, *et al.* Machine learning research trends in traditional Chinese medicine: A bibliometric review [J]. *Int J Gen Med*, 2024, 17: 5397-5414.
- [54] Chen H Y, He Y. Machine learning approaches in traditional Chinese medicine: A systematic review [J]. *Am J Chin Med*, 2022, 50(1): 91-131.
- [55] Zhou X Z, Li C X, Su H, *et al.* Intelligent quality control of traditional Chinese medical tongue diagnosis images based on deep learning [J]. *Technol Health Care*, 2024, 32: 207-216.
- [56] Pan Y X, Zhang H X, Chen Y, *et al.* Applications of hyperspectral imaging technology combined with machine learning in quality control of traditional Chinese medicine from the perspective of artificial intelligence: A review [J]. *Crit Rev Anal Chem*, 2024, 54(8): 2850-2864.
- [57] 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.
- [58] Wu S J, Huang Q L, Sheng F Y, *et al.* Identification of potential quality markers of Zishen Yutai Pill based on spectrum-effect relationship analysis [J]. *Front Pharmacol*, 2023, 14: 1211304.
- [59] Yik M H, Wong V C T, Wong T H, *et al.* HerBChain, a blockchain-based informative platform for quality assurance and quality control of herbal products [J]. *J Tradit Complementary Med*, 2021, 11(6): 598-600.
- [60] Ding R, Yu L H, Wang C H, *et al.* Quality assessment of traditional Chinese medicine based on data fusion combined with machine learning: A review [J]. *Crit Rev Anal Chem*, 2024, 54(7): 2618-2635.
- [61] He X B, Sun M N, Battulga T, *et al.* Application of artificial intelligence in the development of traditional Chinese medicine [J]. *Basic Clin Pharmacol Toxicol*, 2025, 137(1): e70066.
- [62] Tran K N, Mac G L, Munni Y A, *et al.* Q-marker identification strategies in traditional Chinese medicines: A systematic review of research from 2020 to 2024 [J]. *Front Med*, 2026, 12: 1709969.
- [63] Tan S Y, Shao X, Zhang X T, *et al.* TCMNet: An AI-driven strategy for optimizing traditional Chinese medicine [J]. *Chin Med*, 2026, 21(1): 106.
- [64] 管咏梅, 刘乐灵, 杨明, 等. 基于过程分析技术的中药提取工艺放大的关键问题与应用进展 [J]. 中草药, 2026, 57(2): 767-777.
- [65] 李正, 程宁涛, 赵筱萍, 等. 人工智能驱动的中药最佳生产模式及其工程化应用研究 [J]. 中国中药杂志, 2025, 50(12): 3197-3203.
- [66] Yan D Y, Zheng Q G, Chang K, *et al.* Artificial intelligence in traditional Chinese medicine: From systems biological mechanism discovery, real-world clinical evidence inference to personalized clinical decision support [J]. *Chin J Nat Med*, 2025, 23(11): 1310-1328.
- [67] Wang J, Liu Y M, Li J, *et al.* Artificial intelligence in traditional Chinese medicine: Multimodal fusion and machine learning for enhanced diagnosis and treatment efficacy [J]. *Curr Med Sci*, 2025, 45(5): 1013-1022.

[责任编辑 潘明佳]