

数智化技术在中药“谱-效”相关研究中的应用进展

赵渤年

(山东中医药大学药物研究院, 国家中医药管理局高水平重点学科, 山东省数字中药重点实验室,
黄河流域特色中药生态保护和高质量发展协同创新中心, 济南 250355)

摘要: 中药“谱-效”相关研究通过化学成分指纹图谱(谱)与药效学数据(效)的相关性分析, 对中药药效物质进行数智化解析, 构建以功效为导向的中药评价、研发体系。近年来, 随着数智化技术的快速发展, 该领域在方法学创新、应用拓展及临床转化方面取得显著进展, 结合数智化技术揭示中药多成分体系的协同作用, 成为推动中医药现代化的重要方向。目前, 中药“谱-效”相关研究已广泛应用于中药质量控制、药效物质精准解析、配伍规律研究、新药研发等领域。本文系统综述了数智化技术在中药“谱-效”相关研究中的应用场景、技术挑战、未来方向, 以期为中药现代化研究提供理论和实践支持。

关键词: 数智化技术; 中药“谱-效”相关; 中药现代化

中图分类号: R 921.2 文献标识码: A 文章编号: 1009-3656(2026)01-0043-06

doi: 10.19778/j.chp.2026.01.007

Advances in the application of digital intelligence technology in the research on the “spectrum-efficacy” correlation of traditional Chinese medicine

ZHAO Bonian

(Institute of Pharmacy, Shandong University of Traditional Chinese Medicine, High Level Traditional Chinese Medicine Key Disciplines of the State Administration of Traditional Chinese Medicine, Shandong Key Laboratory of Digital Traditional Chinese Medicine, Shandong University of Traditional Chinese Medicine, Collaborative Innovation Center for Ecological Protection and High Quality Development of Characteristic Traditional Chinese Medicine in the Yellow River Basin, Jinan 250355, China)

Abstract: Research on the “Spectrum-Efficacy” correlation of Traditional Chinese Medicine (TCM) involves analyzing the relationship between chemical component fingerprinting (“spectrum”) and pharmacodynamic data (“efficacy”) to digitally and intelligently interpret the bioactive substances in TCM. This approach aims to establish an efficacy-oriented evaluation and research system for TCM. In recent years, with the rapid development of digital intelligence technologies, significant advances have been made in methodological innovation, application expansion, and clinical translation within this field. The integration of digital intelligence technologies has facilitated the elucidation of synergistic effects in TCM multi-component systems, becoming a key driver for the modernization of traditional Chinese medicine. Currently, research on the “Spectrum-Efficacy” correlation of TCM has been widely applied in areas such as quality control of TCM, precise analysis of bioactive substances, compatibility rule studies, and new drug development. This article systematically reviews the application scenarios, technical challenges,

第一作者简介: 赵渤年, 教授; 研究方向: 中药质量控制。Tel: 0531-89628342; E-mail: bonianzh@163.com

ges, and future directions of digital intelligence technologies in “Spectrum-Efficacy” research, aiming to provide theoretical and practical support for the modernization of TCM.

Key words: digital intelligence technology; “spectrum-efficacy” relationship of traditional Chinese medicine; modernization of traditional Chinese medicine

中药已有数千年的历史,其所具功效是多组分、多靶点、多通路共同协同作用的结果^[1]。但是中药药效物质基础不明,缺乏科学的质量控制方法,制约了中药的临床应用和创新发展。为精准解析中药药效物质基础,挖掘中药关键活性组分,完善中药质量控制,推动中药现代化发展,中药谱效学应运而生^[2]。自2002年首次提出中药谱效学理论以来,“谱-效”相关技术已经广泛应用于中药质量控制和评价的研究中,将化学成分信息与药效值通过恰当的数学模型构建真正意义上的彰显临床价值的中药质量评价系统,充分体现中医药整体观的理念。随着现代检测技术和数据分析方法的进步,中药“谱-效”相关研究中引入了多种现代化、数智化技术,如回归分析、广义回归神经网络、BP神经网络、卡尔曼滤波算法、随机森林、径向基函数神经网络和最小二乘支持向量机等,构建中药数智化质量评价模型,精准解析中药化学成分信息与药效信息间的动态变化规律。

在大数据背景下,数智化技术为医药行业带来了深刻的变革。利用数智化技术,表征海量的化学成分、药效等数据信息,并应用现代数据分析手段解析中药化学成分与药效间的关系,基于对中药临床功效的贡献程度科学揭示中药药效物质基础,精准解析真正发挥药效活性的关键组分,是中医药现代化发展的新质生产力。基于此,本文对数智化技术在中药“谱-效”相关研究中的应用进展进行系统综述,探讨其应用价值、现状及策略,旨在为数智化助力中药“谱-效”相关研究的进一步发展提供科学参考。

1 数智化在中药“谱-效”相关研究中的应用

1.1 精准解析关键药效物质

中药具有多成分、多靶点的特征,复杂的化学成分组成和繁多的功能主治使得中药药效物质基础解析较为困难,严重制约中药现代化发展。大数据云计算时代,在中药“谱-效”相关研究理论的指导下,以数智化为导向,整合海量的临床评价、药效表征、成分检测等数据信息,利用先进的大数据分析技术,建立中药全成分定量指纹图谱和多层次药效评价体系,并应用多种数学方法将成分与药效相关联,明晰各成分药效贡献度,获得真正的关键药效物质,提高

中药质量控制的精准度。

在中药“谱-效”相关研究中,“谱”即指纹图谱,是赋予了定量功能的指纹图谱,抛开了传统指纹图谱用自身所含成分的色谱峰作为参照峰的模式,在样品中加入一定浓度的内标物,以内标物的峰面积与浓度为基准,利用HPLC、LC-MS、GC-MS等现代分析技术对化学成分进行定量表征^[3-4]。“效”即能够反映中药临床功效的药效评价,重点在于筛选适当、量化、稳定、敏感、综合的药效学评价指标。基于“效”的研究特点,模式生物斑马鱼是“谱-效”相关研究最适宜的动物模型,其个体小,发育快速,繁殖力强,并且斑马鱼胚胎体外发育且透明,幼鱼期可以直接通过显微镜观察器官的变化,药效评价直观、精确,便于中药药效的数字化表征^[5-6]。中药临床功效有时难以用单一药效学指标进行评价,往往需要多个指标综合评价,因此如何应用数据分析技术对多个药效值进行整合处理尤为关键,熵值法可通过加权分析,对多个药效指标进行赋分,计算综合药效得分^[7]。当“谱”和“效”数据信息准备完成后,利用随机森林、广义回归神经网络、BP神经网络、径向基函数神经网络和最小二乘支持向量机等算法将两部分数据进行关联分析,构建数学模型,提取有效信息揭示中药化学成分与药效之间的动态变化规律,建立以药效为导向的中药数智化质量评价系统^[8-10]。并且基于Spearman相关性分析、Pearson相关性分析和灰色关联度分析(GRA)等方法解析中药化学成分与药效活性之间的关联度,基于偏最小二乘回归分析(PLSR)、正交偏最小二乘法-判别分析(OPLS-DA)等方法计算中药化学成分对药效活性的贡献度,数智化解析中药关键药效物质^[11-13]。

1.2 追踪质控中药生产全过程

中药全产业链涵盖种植、炮制、生产、流通到临床应用的复杂流程,其质量控制面临多环节数据割裂、成分复杂性与经验依赖性等挑战。数据挖掘技术通过整合环境参数、化学指纹、工艺数据及临床疗效等多源信息,中药“谱-效”相关研究通过建立化学成分与药效指标的动态关联,为全产业链质量控制提供了从“成分定性”到“功效定量”的科学依据。该技术贯穿种植、炮制、生产到临床使用环节,推动

中药质量评价从经验判断向数据驱动的范式转变,解决中药质量均一性差、难以追踪溯源等关键问题。

由于药材的种植地区不同,气候、土质等条件存在较大差异,并且种植技术对药材质量也起到重要作用,这些因素均会导致药材质量参差不齐^[14-18],在源头上增加了中药质量控制的难度。在种植阶段,基于指纹图谱与药效数据的关联分析,可筛选道地药材核心成分簇。例如,三七研究发现,云南文山产区药材中人参皂苷 Rg1、Rb1 与抗凝血活性的 Pearson 相关系数分别达 0.89 和 0.78,据此建立种植环境参数(海拔 1 600 ~ 2 000 m、土壤有机质 > 2.5%)优化模型,使皂苷含量提升 15% ~ 20%^[19-20]。另外在大黄质量控制研究中,通过傅里叶变换红外光谱(FTIR)建立 FT-IR 光谱图,结合其抗炎药活性筛选,构建的真伪及种属预测模型,可快速鉴别唐古特大黄来源,并制定基于“谱-效”关系的多成分含量测定标准,显著提升了药材质量控制的精准性^[21]。“谱-效”相关研究同样可应用于现代炮制工艺的优化上,杨武杰等建立诃子生品及六种炮制品(单炒品、麸煨品、砂烫品、塘灰火煨品、炒炭品、酒蒸品)的 HPLC 指纹图谱,结合 DPPH 自由基清除法评估抗氧化活性,构建“谱-效”相关研究模型,挖掘出诃子酸、诃黎勒酸、没食子酸、鞣花酸为炮制差异标示成分,诃子酸、诃黎勒酸、没食子酸和柯里拉京为抗氧化核心药效成分,最终证实单炒法在保留经典塘灰火煨法特征的同时,更高效维持活性成分(没食子酸含量提升 12% ~ 18%),可作为替代古法的现代优选炮制工艺^[22]。在制剂生产中,近红外光谱(NIRS)结合随机森林算法构建的谱效快速检测系统,可实时监控六味地黄丸中马钱苷、莫诺苷等成分含量,其预测药效(如血糖调节)的均方根误差低至 0.12^[23]。因此中药“谱-效”相关技术在中药全产业链环节的质量控制中均可发挥重要作用。赵瀚年团队首次建立了适用于药材-饮片-中间体-中药成品整个生产链条关键环节的质量评价体系,可追踪各环节中活性成分的量质传递,精准解析药效物质基础,筛选关键活性组分。并依靠谱-效相关质量评价体系,数字化表征不同生产环节的药效变化,保障中药全生命周期的质量监管。高燕、赵瀚年等对银黄颗粒的生产全过程中单味药、中间体及成品颗粒的化学成分和药效进行数字化表征,并采用 LS-SVM 方法,建立银黄颗粒体外抑菌谱-效相关质量评价系统,再采用有监督的偏最小二乘判别分析(PLS-DA)方法,对黄芩药材、金银花药材、黄芩提取物、金银花提取物、银黄颗粒谱-效相关抑菌药效评价结果进行评判,

阐明银黄颗粒抑菌与原药材、中间体的内在量效关系,深层次精准解析银黄颗粒生产全过程的关键药效物质,建立银黄颗粒中药材-中间体-成方制剂抑菌谱-效相关质量评价系统^[24],完美实现中药生产关键环节的质量控制。

1.3 数字化解析组方配伍结构

中药组方配伍的“君臣佐使”理论强调多成分协同作用,而“谱-效”相关研究通过化学成分与药效数据的动态关联,为解析复方配伍的科学内涵提供了关键技术支持。“谱-效”相关研究为数字化解析中药组方配伍规律,优化组方配伍结构提供了科学依据。姜婕等通过 UPLC 指纹图谱结合小肠炭末推进及冰醋酸扭体实验,系统分析香果健消方药味配伍(蜘蛛香-草果-木香)与理气止痛作用的“谱-效”关联性,通过 GRA 分析与 Pearson 相关性分析证实该方理气止痛作用源于三味药材协同效应,其中双咖啡酰奎宁酸类成分为关键药效物质^[25]。另外在双黄连的组方配伍结构研究中,孙启慧等首次以“谱-效”相关研究模式为核心,通过活性成分药效贡献度大小,对双黄连组方配伍规律进行了数字化解析。通过对双黄连组方进行拆方处理获得各单味药化学成分对药效指标的贡献度信息,发现在抑菌活性方面连翘为方中君药,在抗病毒活性方面金银花为方中君药,为中药复方配伍机理数字化解析提供了新的思路和模式^[26]。此外,通过构建数据模型,用于预测治疗特定疾病的中药配伍组成,也为新药研发和临床用药提供理论支持。孙洋洋等基于谱效关系,研究了不同配伍比例黄芩-黄连促进狄氏副拟杆菌增殖作用,结果显示,黄芩-黄连药对存在配伍增效作用,最佳配伍比例为 3:1^[27]。杨鸿等基于 LARS 回归算法和综合权重分析方法,按照均匀试验设计-药效试验-数学建模-综合药效评价程序,进行甘草总黄酮、银杏叶提取物、淫羊藿总黄酮和黄芪总苷 4 个中药组分不同配伍剂量体外清除 DPPH 和多环芳烃的研究,最终确定最佳配伍组合及剂量:甘草总黄酮:银杏叶提取物:淫羊藿总黄酮:黄芪总苷 = 1:0.254 5:0.007 6:0.011 5^[28]。

2 数智化在中药“谱-效”相关研究应用中面临的挑战

2.1 数据多源异构性与标准化缺失

中药“谱-效”相关研究涉及化学成分、药效活性、临床疗效等多维度数据,但这些数据常因实验方法、仪器类型或研究机构的差异呈现异构性,导致跨

数据库整合困难。例如,不同实验室对同一种药材进行化学成分检测时所用仪器不同,实验室环境不同,操作人员不同,均有可能导致所得数据差异,影响后续数据分析的可靠性。另外中药传统功效术语(如“清热解毒、活血化瘀”)难以与现代药理学研究相对应,造模方法与药效评价指标缺乏量化标准。在现有数据的挖掘整合上,如古代文献典籍、名医医案、秘方、偏方以及现代化学成分和药理药效研究数据等,这些信息资源不仅数量庞大,而且形式多样、结构无序,从中筛选出有价值的信息并进行系统性整合和归纳,是一项极具挑战性的工作;特别是针对中医证候尚无标准化评价体系,导致数据挖掘结果难以复现;并且由于区域差异、方言差异以及命名方式的不同,中药存在大量的同物异名现象。例如,山药在不同地区被称为“怀山”或“淮山”,这也会导致数据收集及整合时出现异常现象。

2.2 数据信息的质量及完整性难以保证

中药化学成分复杂,在进行指纹图谱建立表征中药化学成分时,往往难以真正实现全化学成分检测,目前以多糖、肽类为代表的大分子成分表征仍然存在诸多技术壁垒,但众多实验表明,中药的大分子成分通常具有丰富的药理活性,因此在中药“谱-效”相关研究中,化学成分的完整性是数智化解析中药关键药效物质亟待突破的难题。另外 LC-MS 或 GC-MS 图谱常包含数百个峰,目前通过数据库比对、标准品对照仅有部分峰可被指认为有效成分,剩余成分仅能通过裂解规律、离子碎片等信息进行预测,预测时所选参数不同会影响化学成分的鉴定,这就导致成分数据信息的准确性难以保证。并且中药中存在较多低丰度的关键活性成分(如稀有皂苷),常常因仪器检测灵敏度不足被遗漏,化学成分数据信息出现缺失,导致“谱-效”相关模型无法针对中药全成分进行数据分析。另外在“效”的数据信息获取过程中,诸多高质量药效数据获取成本较高,现有研究多依赖小样本实验,通常被用于建模的实验数据不超过 50 批,这将大大增加出现因样本偏倚导致的模型泛化能力不足问题的可能性。目前以斑马鱼、线虫为代表的新型模式生物的出现,一定程度上解决了药效数据获取困难的问题,但是利用模式生物进行药效评价能否完全模拟中药传统功效,仍然需要进一步深入探讨。

2.3 算法对复杂非线性关系的适应性局限

现阶段应用较广的大数据数智化分析方法(如关联分析、回归分析、聚类分析等)多数基于化学药物靶点逻辑设计,虽然能够通过计算关联度、贡献度

等数据,进行中药“谱-效”相关分析,但是在数据量指数性增长时,针对中药多成分协同/拮抗的复杂非线性效应分析容易出现偏差。例如,Apriori 算法在分析复方配伍规律时,可能忽略“君臣佐使”中非高频成分的协同作用,导致中药组方配伍规律的科学阐释方法仍然尚未完善^[29-30]。并且中药复方常存在多成分间的复杂交互网络,以随机森林(RF)和决策树(DT)等为代表的大数据分析模型虽能同时处理多维数据,但对成分间动态平衡关系的表征能力有限,例如在煎煮、代谢等过程中成分的动态变化(如黄酮类水解、生物碱氧化),要求模型具备时序数据处理能力,但传统数据分析模型因缺乏时间维度嵌入,无法反映成分动态变化对药效的影响,因此在对复杂非线性关系的阐释上存在一定的局限性。

2.4 跨学科人才与技术协同缺口

中药“谱-效”相关的数智化应用研究涉及的学科范围较广,包括中药学、中药药理学、中药方剂学、临床医学、信息科学、统计学、计算机科学、人工智能等多个领域。这种跨学科的研究模式要求各领域的专业知识深度融合,而数据库建设的准确性、科学性和合理性在很大程度上取决于参与人员对相关专业的理解与应用水平。因此,个人的专业程度对数据分析结果的可靠性和实用性具有重要影响。此外,中药“谱-效”相关研究资料涉及的范围广泛,数据量庞大,统计与计算任务复杂,不仅需要大量的经费支持,还需要高素质的人才资源和先进的计算机资源作为保障。除此之外,数智化技术与中药研发流程尚未深度融合。例如,当前多种 AI 辅助组方优化平台、数智化药物筛选平台多基于化学药物及现代医学疾病靶点数据库,缺乏中医证候-方剂关联数据库,限制了其在中医辨证论治诊疗中的应用。另外目前 AI 大模型平台多数是基于已有文献数据的整理或开放数据库信息的割裂信息挖掘进行预测,预测结果的可信度较低,后续需要建立基于真实实验数据的 AI 大模型。

3 中药“谱-效”相关研究在中药数智化评价中的应用策略

3.1 构建基于“谱-效”相关的多维质量评价体系

构建基于“谱-效”相关的多维质量评价体系是中药质量评价模式革新的核心策略,其关键在于通过整合中药指纹图谱的化学特征与药效活性数据,建立中药化学成分群与整体药效的数据分析模型。首先,中药指纹图谱的标准化是多维质量评价体系的基础,需借助 HPLC、LC-MS、GC-MS 等高分辨分

析技术构建多维度全成分化学特征图谱,并且可利用深度学习(如卷积神经网络、图神经网络)处理高维谱图数据,以全面解析中药复杂成分的化学信息。其次,药效评价模型的建立需结合中医基础理论,特别是针对中医证候模型,需要结合证候临床表现,选择恰当的实验动物、适宜的造模方式,进行证候模型的构建,并且需要根据中医临床检测标准选择特异性强、敏感性高、可稳定重复的药效指标,通过深度学习算法整合生物活性检测数据、多组学生物标志物等多源数据,解决传统单一指标难以反映中药整体药效的局限获取中药复杂药效数据。数学建模与数智化分析是实现谱效关系量化的关键,当前已被证实运用 GRA 分析、PLSR 分析、Spearman 分析、Pearson 分析可以筛选与药效显著相关的色谱峰群,明确关键活性成分对药效的贡献度,精准解析关键药效物质^[11-12]。此外,支持向量机、人工神经网络等方法也可应用于构建中药成分-药效关联模型,特别是因果推断、贝叶斯网络等技术,建立化学成分群与药效指标的动态关联模型,揭示中药关键药效物质的协同作用机制,推动中药药效物质的数智化解析进程^[31]。在精准解析出关键药效物质后,基于生成对抗网络(GAN)或 Transformer 架构,可模拟不同成分组合对药效的影响,预测未知成分分配比后的药效变化。未来需要人工智能技术的引入进一步优化数据挖掘与预测精度,构建基于 AI 的多维质量指数(如化学均一性指数、药效活性指数、安全性指数),替代传统单一成分含量标准,推动中药质量评价从传统模糊定性描述向现代数智化定量分析的跨越。综上,基于“谱-效”相关的中药多维质量评价体系通过技术融合与数据驱动,突破了中药由传统单一成分进行质量控制的局限,实现以药效与成分双向的中药质量评价体系,为中药质量标准化和疗效导向的数智化质控模式提供了科学依据。

3.2 中药全产业链质量标准溯源体系构建

中药全产业链质量标准溯源体系构建在中药产业高质量发展中发挥着关键作用,其核心目标是通过整合产业链各环节的技术升级与数智化评价体系构建,实现从药材种植到临床应用的全链条质量可控与效率提升。中药“谱-效”相关研究与中药全产业链质量标准溯源体系构建之间存在紧密的协同互促关系,前者通过数学模型及数据分析技术数值化解析中药化学成分与药效的关联性,为中药产业链各环节的质量控制提供理论依据,而后者则通过数智化技术革新与规范化生产为“谱-效”相关研究创

造标准化数据基础。具体而言,“谱-效”相关研究依赖全产业链的源头质量控制与数智化生产体系,例如中药材规范化种植和生态栽培技术确保了药材的均一性与道地性,为指中药指纹图谱的构建提供稳定的数据来源。同时,全产业链的数智化转型通过物联网、区块链等技术构建的中药全产业链追溯平台,实时采集种植、加工、流通等环节的数据,为“谱-效”相关研究提供多维度动态信息。利用强化学习算法,根据历史数据优化生产工艺参数(如提取温度、时间),确保不同批次产品的化学谱与药效一致性,减少“谱-效”相关数学模型的数据偏差。并且“谱-效”研究依赖高维数据分析,与人工智能、区块链等技术的融合显著提升了产业链效率,区块链技术用于构建中药材全流程追溯体系,通过化学特征谱与种植、加工数据的链上存储,确保质量信息透明可溯,解决中药来源不清、难以溯源的质量控制痛点。

3.3 助力中药质量控制在临床转化的应用策略

中药“谱-效”相关研究通过整合化学特征谱与药效数据信息,构建以“成分-功效”为导向的数智化质量控制体系,可显著提升中药临床转化的精准性和可靠性。在临床应用中,通过“谱-效”相关研究与大数据数字化分析技术相结合,构建“化学特征-生物效应-临床疗效”多维映射模型,实现中药复杂成分群与临床疗效的精准关联,优化质量控制体系,精准解析关键药效物质,并基于知识图谱和生成式 AI,模拟中医辨证逻辑,结合患者多维数据生成个性化中药组方,指导临床个性化用药。当前中药“谱-效”相关研究多数通过回归分析、关联分析及人工神经网络等数智化技术对中药指纹图谱与药效数据进行分析,精准解析关键药效物质,未来可引入真实的临床疗效数据,探讨关键药效物质与临床疗效的动态关联性。并且可结合数据融合技术对多源异构信息(如代谢组学、转录组学及临床数据)进行多维度数据挖掘与特征提取,突破单一维度数据分析的局限性,建立更精准的“谱-效-证”数智化预测模型。该模型可应用于中药种植、生产、临床全过程,在种植端通过关联环境因子与化学成分丰度指导道地药材培育,在生产端基于化学成分稳定性阈值辅助优化炮制、制剂工艺,在临床端通过整合 PK-PD 模型与实时疗效反馈数据动态调整个性化给药治疗方案。最终通过 AI 大模型平台,将多模态数据挖掘成果转化为可量化的质控标准及智能化决策支持系统,推动中药从经验性用药向基于循证医学的精准治疗范式转型。AI 数智化技术将助力中药创新研

发,加速中医药现代化进程,预计未来5~10年,基于AI的“谱-效”相关智慧评价系统将成为中药智能制造和精准医疗的核心。

4 结语与展望

在大数据背景下,促进数智化技术与中药“谱-效”相关研究的深度融合应用,对于精准解析中药药效物质,完善中药质量控制体系,推动中医药现代化发展具有深远意义。数智化技术在中药“谱-效”相关研究中的应用通过精准解析中药药效物质、追踪质控中药生产全链条以及数智化阐释组方配伍结构,显著提升了中药质量评价的科学性与临床疗效的预测能力。然而,当前应用仍面临多源异构数据标准化缺失、数据质量与完整性不足、算法对复杂非线性关系建模能力有限以及跨学科技术协同不足等挑战,制约了“谱-效”相关研究的深度数智化进程。未来需进一步整合数智化数据分析技术,开发适配中药复杂系统的智能模型,促进中药学、人工智能及临床医学的跨领域协作,突破“谱-效”相关研究的瓶颈,推动中药数智化研究模式从实验室向智能制造与精准医疗场景延伸。

参考文献

- [1] 霍梦琪,彭莎,任越,等.基于系统中药学的中药功效标志物发现与应用[J].中国中药杂志,2020,45(14):3245.
- [2] 李戎,闫智勇,李文军,等.创建中药谱效关系学[J].中医教育,2002,1(2):62.
- [3] 吕婧,高燕,赵瀚年.基于LC-QTOF-MS/MS的西洋参皂苷类成分表征及其增强免疫力作用谱效关系研究[J].中华中医药杂志,2020,35(5):2298.
- [4] 高燕,吕凌,翟阳,等.网络药理学联合灰色关联分析黄芩抗呼吸道合胞病毒小鼠肺炎的药效物质基础研究[J].中国现代应用药学,2023,40(15):2056.
- [5] 王成,龚莉虹,郭朝成,等.模式生物斑马鱼在中药药效物质筛选中的应用进展[J].中草药,2019,50(24):6125.
- [6] 刘悦,丁晓彦,王娜,等.基于UPLC-Q-Exactive Plus-Orbitrap MS的丹参提取物成分表征及其抗血栓作用谱效相关药效物质基础解析[J].中草药,2024,55(5):1609.
- [7] 高燕,丁晓彦,刘璐,等.Spearman与GRA法联合熵值法解析双黄连口服液解热抗炎药效物质基础[J].中华中医药杂志,2024,39(4):1985.
- [8] 高樱,牛水蛟,于海英,等.基于谱-效相关金银花提取物抑菌作用质量评价系统的研究[J].药物分析杂,2024,44(6):1031.
- [9] 俎龙辉,王变利,高樱,等.基于谱-效相关黄芩提取物抑菌药效物质基础及质量评价系统的研究[J].中国医院药学杂志,2020,40(20):2095.
- [10] 杨龙飞,高燕,赵瀚年.丹红注射液指纹图谱的灰色关联度分析及谱效相关数学模型研究[J].中华中医药杂志,2018,33(3):878.
- [11] 柳明君,刘璐,张冠群,等.基于谱-效相关斑马鱼肺癌细胞异种移植模型西洋参抑制肺癌作用的物质基础研究[J].药理学研究,2024,43(7):639.
- [12] 马露兰,高燕,韩利文,等.基于谱-效相关及网络药理学的西洋参不同部位增强免疫药效物质基础研究和作用靶点分析[J].中国医院药学杂志,2023,43(15):1673.
- [13] 林希光,陈昕,孟江,等.基于谱效关系筛选橘核抗氧化活性质量标志物[J].中药材,2023,46(1):130.
- [14] 高宇明,谢艳,张亚琴,等.不同产地丹参质量评价及指纹图谱研究[J].亚太传统医药,2020,16(9):77.
- [15] 刘晓蕾,高明.不同土壤水分含量对丹参生长及4种水溶性有效成分含量的影响[J].中国农业科技导报,2020,22(10):175.
- [16] 粟华生,罗轶,黄佳伟,等.不同产地与不同生产方式的丹参药材质量相似性评价研究[J].中兽医医药杂志,2024,43(2):14.
- [17] 张雪梅,张刘伟,左小容,等.丹参参鲜加工关键技术与质量影响研究[J].保鲜与加工,2021,21(7):45.
- [18] 彭九嫚,柴尧,潘旻,等.丹参中酚酸类成分在不同工艺条件下转化关系[J].中国实验方剂学杂志,2016,22(5):67.
- [19] 崔志莹,彭寿杰,赵艳丽,等.三七抗凝血量效关系研究[J].时珍国医国药,2021,32(11):2570.
- [20] 崔志莹.不同产地三七抗凝血作用的“谱-效”关系研究[D].云南中医药大学,2022.
- [21] 郭亚菲,曹强,叶蕾蕾,等.唐古特大黄FTIR的双指序列分析及抗炎谱效关系研究[J].光谱学与光谱分析,2024,44(1):188.
- [22] 杨武杰,郝季,鞠成国,等.基于指纹图谱、抗氧化谱效相关性及多成分含量的诃子炮制方法优选[J].中国药房,2023,34(19):2371.
- [23] 邱伊星.六味地黄丸及其相关制剂的指纹图谱质量控制方法研究[D].湖南中医药大学,2016.
- [24] 高燕,马山,杨龙飞,等.银黄颗粒中药材-中间体-成方制剂抑菌谱-效相关质量评价系统的建立[J].中草药,2020,51(17):4449.
- [25] 姜婕,王应萍,周益,等.香果健消方药味配伍及不同极性部位理气止痛作用的谱效关系[J].中国医院药学杂志,2024,44(1):59.
- [26] 孙启慧.双黄连制剂抑菌抗病毒药效物质基础和组方结构配伍及作用机理研究[D].山东中医药大学,2019.
- [27] 孙洋洋,高源,梁晓雪,等.基于黄芩-黄连不同配伍比例促进狄氏副拟杆菌增殖作用的谱效关系研究[J/OL].辽宁中医杂志,1-18[2025-05-20].<http://kns.cnki.net/kcms/detail/21.1128.R.20250123.1903.008.html>.
- [28] 杨鸿,吴彦,马琰岩,等.具抗氧化活性的中药有效组分的配伍研究[J].中国中药杂志,2012,37(12):1826.
- [29] 翟桐,杜佳璐,任雪阳,等.基于Apriori和MIE算法分析关节炎中药制剂用药规律及核心药对的潜在作用机制[J].中草药,2024,55(9):3027.
- [30] 聂慧芳,钟达源,徐文峰,等.基于Apriori关联规则探讨心肾综合征中药复方组方规律[J].湖南中医药大学学报,2021,41(1):129.
- [31] 王淑红,李君瑶,郭子瑜,等.传统中药标准的数字化新常态[J].中国药理学杂志,2024,59(24):2396.

(收稿日期:2025-04-15)