数字中医中药

DOI:10.13193/j.issn.1673-7717.2026.04.003

数智化技术在中药领域的应用进展及研究现状分析

吴梦悦[1],华新振[2],朱俊清[1],徐天任[1],康怀兴[1],高鹏[1]
(1.山东中医药大学药物研究院,山东 济南 250355;2.山东中医药大学药学院,山东 济南 250355)

摘要:中药是在中国传统医药理论指导下采集、炮制、制剂,说明药物作用机理,指导临床应用的药物,是中华民族流传几千年的智慧结晶。由于中药作用机制的复杂性,中药产业的发展仍处于相对保守阶段,数智化技术的兴起,为中药行业带来新的机遇,并取得显著进展。人工智能、大数据以及智能感官等数智化技术应用于中药鉴定、炮制、制剂、质量评价等多个方面,促进了中医药行业的蓬勃发展,带动中药产业发展。随着技术的不断进步和创新,中药的应用将会更加科学、高效、环保,更好地服务于人类健康,并为世界卫生事业做出新的贡献。在此基础上,将数智化技术在中药领域的应用以及发展前景进行了论述,以期为中药的现代化应用提供参考。

关键词:数智化;智能感官;中药鉴定;中药炮制;质量控制
中图分类号:R2-03 **文献标志码**:A **文章编号**:1673-7717(2026)04-0011-07

Application and Research Progress of Digital Intelligence Technology in Traditional Chinese Medicine and Current Research Status

WU Mengyue[1], HUA Xinzhen[2], ZHU Junqing[1], XU Tianren[1], KANG Huaixing[1], GAO Peng[1]
(1. Institute of Pharmaceutical Research, Shandong University of Traditional Chinese Medicine, Jinan 250355, Shandong, China;
2. College of Pharmacy, Shandong University of Traditional Chinese Medicine, Jinan 250355, Shandong, China)

Abstract: Chinese medicines are collected, concocted and prepared under the guidance of traditional Chinese medicine theory, which explains the mechanism of drug action and guides clinical application, and is the crystallisation of the wisdom of the Chinese nation handed down for thousands of years. Due to the complexity of the mechanism of action of Chinese medicines, the development of the Chinese medicine industry is still in a relatively conservative stage. The rise of digital intelligence technology has brought new opportunities for the Chinese medicine industry and made significant progress. Digital intelligence technologies such as artificial intelligence, big data and intelligent senses are applied to traditional Chinese medicine identification, concoctions, preparations and quality evaluation, which have contributed to the vigorous development of the traditional Chinese medicine industry and driven the development of the traditional Chinese medicine industry. With the continuous progress and innovation of technology, the application of traditional Chinese medicine will be more scientific, efficient and environmentally friendly to better serve human health and make new contributions to the world health. On this basis, this paper discussed the application of digital intelligence technology in the field of traditional Chinese medicine and its development prospects, with a view to providing reference for the modern application of traditional Chinese medicine.

Keywords: mathematical intelligence; intelligent senses; identification of Chinese medicines; processing of Chinese materia medica; quality control

基金项目:国家中医药管理局高水平中医药重点学科建设项目(人事教育司20230504);山东省重点研发计划项目(重大科技创新工程)(2020CXGC010505-06);山东省重大科技创新工程项目(2019JZZY020906)
作者简介:吴梦悦(1999-),女,河南商丘人,硕士在读,研究方向:中药制剂学。
通讯作者:康怀兴(1978-),男,山东济南人,副教授,硕士研究生导师,硕士,研究方向:中药新药与制剂技术。E-mail:kanghuaixing@126.com。
高鹏(1978-),男,山东青岛人,教授,博士研究生导师,博士,研究方向:中药创新药物现代化。E-mail:gaopeng@sdutcm.edu.cn。

中药是在中医药基本理论的指导下,用于防治疾病的天然药物及其加工品,是中华民族的瑰宝。在中医药发展的大背景下,中药数智化发展成为新趋势,是促进中药产业链现代化发展的必然需求。国家出台多项政策大力推动中药产业转型升级[1-3],并在此基础上进一步加强中医药与现代科技结合,促进中药产业的转型升级和现代化发展。“传承创新发展中医药”是现如今中医药发展的基本准则,纵观中药的生产过程,发现我国产业模式相对落后,现代化应用程度整体偏低,制药过程中相关信息没有充分利用,多种因素导致中药的质量和疗效不稳定,因此,中药的数智化发展成为当下迫切需要解决的问题。本文从数智化技术在中药鉴定、炮制、制剂以及质量控制等方面的应用进行综述,并探讨了数智中药的挑战以及发展

前景,以期为中药的可持续发展以及中医药的传承与创新提供新的思路与理论参考。

1 数智化技术

数智化即数字化和智能化,数字化是指将信息转化为数值数据,构建适当的数字模型,将其编码成二进制代码序列并输入计算机系统进行标准化数字处理的过程[4]。智能化是指用计算机、大数据、互联网、人工智能等科技手段,使事物能够满足需求的属性[5]。常见的数智化技术包括机器学习(其分类见表1),智能感官仪器,如电子鼻、电子舌和电子眼等。标准化、自动化的技术已经不适应数智化技术的发展,信息化技术革命正在加快蔓延,以计算机为主要特征的现代信息技术得到了广泛地运用,促使社会从传统工业向一个数字智能社会迈进。

表1 机器学习技术

方式	分类	方法	参考文献
有监督学习	回归分析	多元线性回归	[6]
		决策树	[7]
		逻辑回归	[8]
	分类分析	支持向量机	[9]
		卷积神经网络	[10]
		循环神经网络	[11]
		生成对抗网络	[12]
无监督学习	聚类分析	k均值聚类分析	[13]
		层次聚类分析	[14]
	降维分析	主成分分析	[15]
		t分布领域嵌入	[16]

2 数智化技术与中医药

数智化技术为中医药行业的发展带来了新的机遇,它将是中医药未来发展的一个重要的推动力,帮助中医药行业打破目前的发展瓶颈,走上数字化、智能化的道路[17]。将中药大数据与人工智能有效整合是实现数智中药发展的重要途径[18]。以数智化技术为驱动力,以中医药大数据为载体,对获取信息数字化分析,建立多个人工智能模型,是中医药现代化进入新阶段的一种新模式。

2.1 机器学习

机器学习是以计算机为工具来模仿人的学习行为,从而获得知识能力的方法,在中医药领域逐渐展现出独特的价值和潜力。通过机器学习算法,解析中药数据,模拟中药药效,分析药性成分,预测药物作用,推动传统中药现代化进程。张冰冰等[19]基于数据库的中药及化合物成分,构建图卷积网络(graph convolutional networks, GCN)、K-近邻(K-nearest neighbour, KNN)、决策树(decision tree, DT)、随机森林(random forest, RF)、支持向量机(support vector machine, SVM)算法,探究中药寒热药性模型及应用,为进一步研究中药"性-构"关系提供算法支持。赵书言等[20]使用机器学习算法构建药材主归经络判别模型,为中药归经判别提供新方法。石岩等[21]建立逻辑回归模型,对不同形态的浙贝母和湖北贝母进行预测判别。此外,机器学习不仅能够理解中药复杂药效成分,还辅助中医药现代化和标准化进程,促进中药在全球范围应用[22-23]。

2.2 人工智能感官仪器

人工智能感官是一种诞生于20世纪60年代,以人类感官为基础,融合人工智能分析其特征的仿生技术,包括电子舌、电子鼻和电子眼等,广泛应用于食品、中药以及农产品等领域。该技术通过对人类的感知过程进行数字化表征,实现样品的数智化信息[24],如图1所示。

2.2.1 电子舌 电子舌的设计思路是模仿生物的味觉机制,其检测过程是被测样品刺激传感器阵列,感应并产生信号,通过信号采集处理,输出结果[25-26]。其优势在于样品的前处理简单,仅需要称量,若为液体,则不需要任何形式的处理,其次是分析速度快,数据信息电子化、易描述、保存,具有客观、快速、简便、成本低、可用性好等优点,广泛应用于食品饮料和中药领域[27-28]。"五味"是中药的一大属性,与中药升降、四气、归经、毒性等密切相关,多通过口尝获取,但由于口尝的主观性及个体差异,且对有毒中药口尝风险大,因此,历代医家对中药味道的评价也各不相同,而电子舌可以克服主观因素的影响,实现对"酸、苦、甘、辛、咸"成分的快速、准确地评价。任延娜等[29]使用电子舌、电子鼻采集样本信息,利用主成分分析-判别分析(principal component analysis-discriminant analysis, PCA-DA)、最小二乘-支持向量机(least squares-support vector machine, LS-SVM)建立判别模型,用于中药五味药性的辨识,为中药药性评价提供新的方法借鉴。杨露萍等[30]通过电子舌技术,同时采用"谱味"相关性分析川芎辛味的物质基础。

2.2.2 电子鼻 电子鼻是以人的嗅觉系统为基础开发的智能电子设备[31-32],其工作原理是被测样品的气味信息与传感器的活性物质接触时会产生电信号并作出判断。具有准确度高、灵敏度高、检测速度快、无损伤和不使用有机溶剂等优点[33-36]。在环境控制、医疗诊断、食品工业和中药等领域具有重要的应用价值[37-40]。对于挥发性成分中药的鉴别,不同药材的鉴别,同药材不同品种的鉴别、同品种不同炮制品的鉴别具有重要意义。蓝振威等[41]利用电子鼻的仿生识别模式获取信号信息结合机器学习算法建立生、醋莪术判别模型。PENG L等[42]采用超快速气相色谱电子鼻对不同品种苍术的香气特征分析,为苍术的鉴别提供参考。

2.2.3 电子眼 电子眼是利用仿生学原理对视觉信息进行识别分析的智能感官设备,能分析样品的整体颜色。通常,电子眼传感器基于比色法、分光光度法或计算机视觉,旨在模拟人类的视觉感知,从样本中获取与颜色方面相关的信息,从而获得对物体颜色属性的客观评价[43]。张晓等[44]采用主成分及Pearson相关性分析考查电子眼对不同规格穿心莲的区分能力,为智能感官技术在中药材质量评估的应用奠定基础。陈鹏等[45]利用电子眼技术并构建函数模型实现了不同炮制程度薏苡仁及生品饮片的区分。CUI Y X等[46]使用电子眼建立基于山茱萸颜色分级的判别模型,构建科学客观的质量评价体系。

3 数智化技术在中药领域的应用

立足中药现代化、智能化的特点,运用现代科学技术对中药的系统性与复杂性进行解析,阐明中药安全高效、品质可控的数字化内涵。中药数字化则是通过对外表特征参数进行提取,从而将视觉信息和品质信息进行耦合,将无法直接表示的中药信号进行数字化处理,从而对模糊信息进行规范化,更方便地对中药材的质量进行控制[47]。数智技术应用于中药的各个环节,形成一个数字化、智能化、网络化的中药产业链,促进

中医药产业的升级和发展，如图 2 所示。

3.1 数智化技术在中药鉴定中的应用

传统中药性状鉴别是在历代医药学家对中药真伪优劣鉴别经验的基础上概括总结而成，存在主观性，在实践应用与推广中受到限制。数智化技术是将图像处理技术与传统中药产业相融合，利用计算机对所获得的中药进行分割、增强、提取特征等处理，实现对中药饮片的快速鉴别，促进中药鉴定的信息化和智能化发展。MA Y Y 等[48]构建中药粉末的显微图像数据集结合卷积神经网络，利用高维特征对药材进行识别，对相似药材及易混淆中药的鉴别提供新的思路。周炳文等[49]构建中药多元多息指纹图谱结合人工智能的中药鉴定新方法，克服了传统的中药材品种鉴定方法中的主观性，评价结果更为准确、客观。电子鼻、电子眼、电子舌等数智化技术在中药鉴定研究见表 2。

3.2 数智化技术在中药炮制中的应用

气味是药材化学成分的直接体现，是中药及其炮制品品质评价的一个重要特征。数智化技术能客观反映中药本质，识别样品中挥发性物质的整体信息，达到智能分析中药成分、炮制前后成分监测、质量控制的目的。刘涛涛等[59]使用电子鼻对九蒸九晒大黄气味分析，明确了炮制过程的气味以及物质基础的动态变化，为大黄传统炮制方法的现代应用及创新发展提供参考。刘晓梅等[60]采用电子鼻、顶空 - 气质谱联用法对地龙及其炮制品气味进行全面分析，为地龙及其炮制品的成分研究奠定了基础。

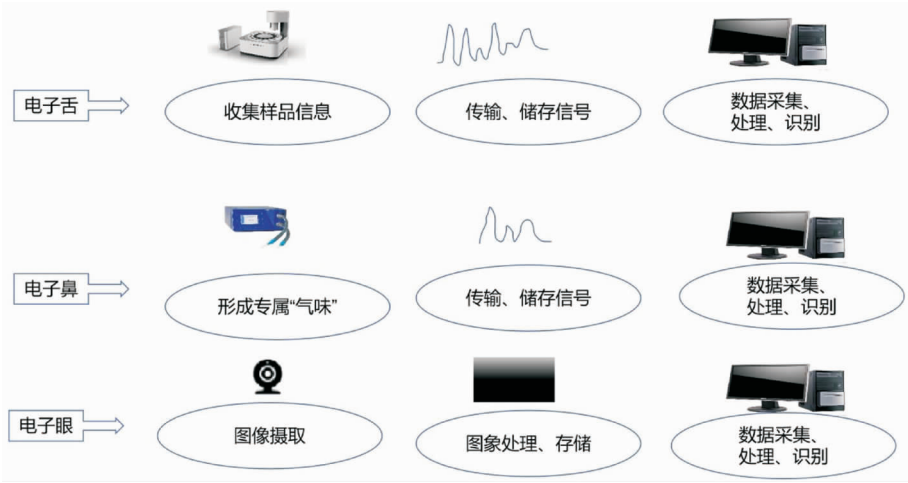


图 1 电子舌、电子鼻、电子眼的数智化处理流程

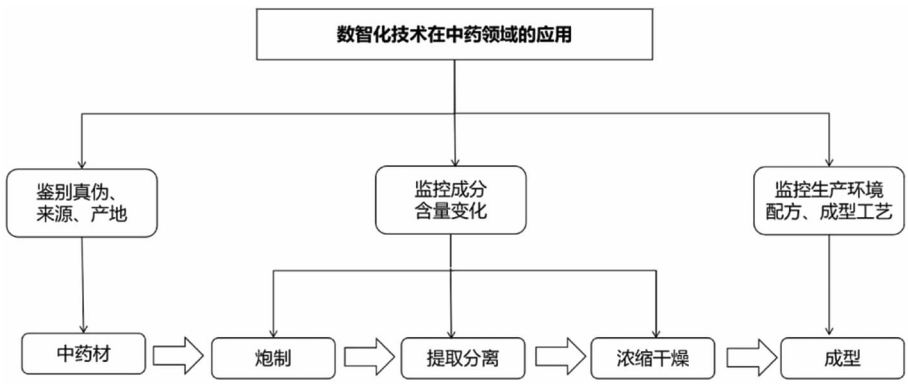


图 2 数智化技术在中药领域的应用

表 2 电子鼻、电子眼、电子舌技术在中药鉴定中的应用

研究对象	智能感官类型	研究内容	参考文献
电子鼻	广藿香	获取气味信息，结合数据库，建立化学计量学模型鉴别	[50]
	三七	气味活性成分进行多元统计和神经网络分析鉴定	[51]
	金银花	仿生识别测定数据并建立分析判别模型	[52]
电子眼	川贝母	采集光学数据建立辨识模型与传统经验辨识和现代药典检测对比分析	[53]
	白及	获取白及样品的智能视觉信息，建立判别模型	[54]
	龙舌兰	结合主成分分析聚类，建立线性判别模型	[55]
电子舌	南、北五味子	PCA、DFA 结合电子舌构建南北五味子的判别模型	[56]
	黄连及其炮制品	结合机器学习对黄连及其炮制品的味觉特征客观化，进行鉴别区分	[57]
	枸杞子	建立不同产地的判别模型，与人口尝评价进行对比分析	[58]

火候是中药炮制过程中饮片的外观、形状、色泽合格的评判标准，只有“形”与“神”俱佳的饮片才能达到炮制的要求[61]。但药材炮制过程中存在火候判断模糊，全凭人工经验把控火候终点，易受到主观因素的影响而难以把握[62]。电子眼能量化样品颜色，分析色泽与成分相关性，通过成像模型建立数据库对比提供一种科学、客观、可比的评价模式。张婧秋等[63]使用电子眼结合化学计量学对不同蜜制程度甘草进行成分分析为蜜制甘草质量评价体系提供参考。陈晓旭等[64]利用电子眼技术从视觉角度测定陈皮与蒸陈皮的颜色，为陈皮质量标准的建立及生品与蒸制品的快速鉴定奠定基础。

3.3 数智化技术在中药制剂过程中的应用

中药制剂包括提取、浓缩、干燥、成型等多过程。目前，制药效率低、成本高、智能化水平不高等限制了中药制剂的发展，以数智化为纽带，以生产大数据为支持，对中药制剂进行有效管控，提升药物安全水平，促进中药行业迈入智能制造时代[65]。

杨越等[66]通过对金银花多变量控制模型进行主成分分析，建立金银花提取过程轨迹图，提高了中药的提取过程。LI X R等[67]采用响应面法和最小二乘支持向量机的机器学习对远志的活性成分超声辅助提取进行建模和优化。数智化技术能够实现中药提取工艺的精准控制，优化提取条件。邓莉莉等[68]建立了“物性模型”以探讨红花提取液浓缩过程的质量智能控制。LIU R H等[69]采用不同的机器学习算法对中药参枝苓口服液浓缩过程含量变化建模。宁文楷等[70]通过建立单源和多源极限学习机模型，对干燥过程中β-胡萝卜素含量进行预测。借助数智化技术实现对浓缩、干燥过程中关键参数的实时监控和精准控制。

刘冰等[71]对乳块消糖衣片的光谱数据分类，采用机器学习算法建立模型，预测包衣厚度，用于中药生产过程中包衣的在线检测。张东亮等[72]设计了一套高速压片机在线检测设备，解决了压片过程的技术问题。白雁等[73]通过对银黄颗粒剂的近红外光谱建立机器学习模型，实现不同生产厂家银黄颗粒剂的鉴别。数智化技术在中药制剂方面的应用不仅能提高制药过程的效率和质量，还能促进中医药行业的可持续发展，并为中药现代化提供强有力的技术支持。

3.4 数智化技术在中药质量控制中的应用

中药质量标准化是我国医药行业待解决的重要问题，中药质量控制是中药研发、生产和应用的关键环节，也是中药现代化发展的重要基础和关键。任智宇[74]使用判别因子分析等12种机器学习结合电子鼻技术对菊花的质量建立评价判别模型。张一凡等[75]采用机器学习对不同炮制程度姜炭建立判别模型，为姜炭饮片的质量控制提供参考。叶青松[76]在前期研究的基础上提出了基于机器视觉的丸剂外观质量的评价方法，探索出了一套规范化、实时性的丸剂加工工艺及质量评价的模型，为其他剂型的质量评价提供了参考。ZHAO J等[77]采用偏最小二乘法等不同的机器学习算法对中药配方颗粒的质量控制进行了评价，为中药品质的评估提供了新思路。

4 数智化技术与药物研发

人工智能的发展给药物研发的方式带来巨大的变革，极大地改变了药物研发的模式。目前已发展出一套以人工智能为基础的模式，已被应用于药物研发的不同阶段，加速了药物研发进程[78]。人工智能技术应用于药物研发过程需要使用广泛的数据库，如：ChEMBL、DGIdb、SIDER、STITCH[79-82]等等，将数据转换成计算机可读的格式应用于各种算法[83]，如插页Ⅰ图3所示。LI M Y等[84]集成中医药相关大数据创建的中医药库，简化了基于人工智能的药物发现过程，促进了中药的创新发展。此外，人工智能在药物设计、靶标结构预测、药物-靶标相互作用预测、药物-靶点亲和度预测等药物发现领域有着广阔的应用前景。

5 数智化技术在中药领域中的挑战与发展

虽然数智化技术为中医药的发展带来了新的机遇和突破，但我们必须意识到其在中医药现代应用中的局限性和挑战。目前大部分中药数据库都存在着数据量有限、类型单一、更新缓慢等问题，中药数据库方剂、药理等研究的空白，削弱了数智化研究的准确性。且传统建模方法在处理大规模数据方面存在不足，尤其在中药成分、药效物质复杂的基础上，研究的不确定性提高。此外，中药材的质量监控和评估指标也不够完善，需建立全过程的质量可追溯体系，加强药材“源-品-效”之间的关联。

中药数智化转型是数字化与智能化要素（如人工智能、智能感官等技术）的结合，使传统中药信息、生产加工和质量控制转变成数字化智能控制处理。此外，利用数据挖掘技术对中医古籍进行数智化处理，有助于分析中药复方配伍及应用规律，预测核心药对。中药行业将实现从制造到营销的全方位数智化，准确了解市场需要，对产品的配方、工艺进行优化；运用人工智能辅助药物研发，加快新药研发进程；另外，通过构建智能物流体系，保证中药材和成品药在流通中的质量、安全和时效，降低损失，提高生产效率。数智化技术在中药领域取得了巨大进展，弥合了传统智慧与现代技术的鸿沟，为进一步探索数智化技术在中医药产业研究与应用中的新方向、策略提供指导。

参考文献

[1] 国务院. 国务院关于印发中医药发展战略规划纲要（2016—2030年）的通知：国发〔2016〕15号[EB/OL]. (2016-02-26)[2024-06-06]https://www.gov.cn/zhengce/content/2016-02/26/content_5046678.htm.

[2] 新华社. 中共中央 国务院关于促进中医药传承创新发展的意见[EB/OL]. (2019-10-26)[2024-06-06]. https://www.gov.cn/zhengce/2019-10/26/content_5445336.htm.

[3] 国务院办公厅. 国务院办公厅关于印发“十四五”中医药发展规划的通知：国办发〔2022〕5号[EB/OL]. (2022-03-29)[2024-06-06]. https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/2022-03/29/content_5682255.htm.

[4] 于洋，苗坤宏，李正. 基于数字孪生的中药智能制药关键技术[J]. 中国中药杂志，2021，46(9)：2350-2355.

[5] HAMET P，TREMBLAY J. Artificial intelligence in medicine[J]. Metabolism，2017，69：S36-S40.

[6] KRZYWINSKI M，ALTMAN N. Multiple linear regression[J]. Nat Methods，2015，12(12)：1103-1104.

[7] SCHÖNING V，HAMMANN F. How far have decision tree models come for data mining in drug discovery?[J]. Expert Opin Drug Discov，2018，13(12)：1067-1069.

[8] SONG X, LIU X Y, LIU F, et al. Comparison of machine learning and logistic regression models in predicting acute kidney injury: a systematic review and meta - analysis[J]. Int J Med Inform, 2021, 151: 104484.
[9] RODRÍGUEZ - PÉREZ R, BAJORATH J. Evolution of support vector machine and regression modeling in chemoinformatics and drug discovery[J]. J Comput Aided Mol Des, 2022, 36(5): 355 - 362.
[10] ZHAO T Y, HU Y, VALSDOTTIR L R, et al. Identifying drug - target interactions based on graph convolutional network and deep neural network[J]. Brief Bioinform, 2021, 22(2): 2141 - 2150.
[11] KRIEGESKORTE N, GOLAN T. Neural network models and deep learning[J]. Curr Biol, 2019, 29(7): R231 - R236.
[12] BLANCHARD A E, STANLEY C, BHOWMIK D. Using GANs with adaptive training data to search for new molecules[J]. J Cheminf, 2021, 13(1): 14.
[13] CHEN L, WANG W N, ZHAI Y Y, et al. Single - cell transcriptome data clustering *via* multinomial modeling and adaptive fuzzy K - means algorithm[J]. Front Genet, 2020, 11: 295.
[14] PETEGROSSO R, LI Z L, KUANG R. Machine learning and statistical methods for clustering single - cell RNA - sequencing data[J]. Brief Bioinform, 2020, 21(4): 1209 - 1223.
[15] GIULIANI A. The application of principal component analysis to drug discovery and biomedical data[J]. Drug Discov Today, 2017, 22(7): 1069 - 1076.
[16] BINSON V A, THOMAS S, SUBRAMONIAM M, et al. A review of machine learning algorithms for biomedical applications[J]. Ann Biomed Eng, 2024, 52(5): 1159 - 1183.
[17] 商洪才, 张晓维. 数智融合促进中医药传承创新发展[J]. 北京中医药, 2023, 42(5): 464 - 466.
[18] 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[J]. 中草药, 2024, 55(1): 1 - 11.
[19] 张冰冰, 朱琦, 张晶新, 等. 基于深度学习的中药寒热属性预测研究[J]. 世界中医药, 2023, 18(21): 3047 - 3052, 3059.
[20] 赵书言, 王书睿, 申镇华, 等. 基于机器学习方法的中药归经判别模型构建与优化[J]. 中国药理学与毒理学杂志, 2023, 37(S1): 38.
[21] 石岩, 李宁, 魏锋. 机器学习算法在不同形态浙贝母与湖北贝母的干法 REIMS 指纹图谱鉴别分析中的应用研究[J]. 药物分析杂志, 2024, 44(1): 134 - 143.
[22] 林文杰, 吴慧萍. 基于加权基因共表达网络分析和机器学习筛选脓毒症免疫抑制特征基因及其靶向中药活性成分预测[J]. 创伤与急诊电子杂志, 2024, 12(1): 40 - 52.
[23] 赵珊, 张文青, 张欣悦, 等. 基于药物靶标识别中药活性成分的研究方法及应用[J]. 药物评价研究, 2023, 46(7): 1578 - 1586.
[24] 吴杭莎, 杜伟锋, 吕悦, 等. 感官技术在中药饮片质量识别中的研究进展[J]. 中华中医药杂志, 2023, 38(4): 1702 - 1705.
[25] 白杰, 高利利, 张志勤, 等. 电子舌技术的原理及在中药领域的应用[J]. 中南药学, 2021, 19(1): 78 - 84.
[26] 王闽予, 朱德全, 邓淙友, 等. 电子舌技术在中药行业的应用现状[J]. 湖南中医杂志, 2015, 31(2): 169 - 171.
[27] IMAM M, NAGPAL K. The electronic tongue: an advanced taste - sensing multichannel sensory tool with global selectivity for application in the pharmaceutical and food industry[J]. Pharm Dev Technol, 2023, 28(3 - 4): 318 - 332.
[28] 付智慧, 李淑军, 刘鹏, 等. 电子舌在中药研究中的应用现状及前景展望[J]. 中成药, 2016, 38(11): 2454 - 2457.
[29] 任延娜, 冯文豪, 李涵, 等. 基于人工智能感官与多源信息融合技术的五味药性二分类辨识方法探讨[J]. 中草药, 2023, 54(10): 3080 - 3092.
[30] 杨露萍, 倪妮, 洪燕龙, 等. 基于电子舌表征和化学成分的"谱味"相关性探究川芎辛味物质基础[J]. 中成药, 2021, 43(7): 1805 - 1811.
[31] SANKARAN S, KHOT L R, PANIGRAHI S. Biology and applications of olfactory sensing system: a review[J]. Sens Actuat B Chem, 2012, 171 - 172: 1 - 17.
[32] CHIU S W, TANG K T. Towards a chemiresistive sensor - integrated electronic nose: a review[J]. Sensors, 2013, 13(10): 14214 - 14247.
[33] 邹慧琴, 韩玉, 邢姝, 等. 电子鼻技术及其在中药领域中的应用[J]. 世界科学技术(中医药现代化), 2012, 14(6): 2120 - 2125.
[34] 冷晓红, 陈海燕, 郭鸿雁. 电子鼻技术在中药领域的应用[J]. 西北药学杂志, 2019, 34(3): 426 - 428.
[35] 费程浩, 戴辉, 苏杭, 等. 电子鼻技术的研究进展及其在中药行业中的应用[J]. 世界中医药, 2019, 14(2): 257 - 262.
[36] 杜瑞超, 冯怡, 徐德生, 等. 电子鼻技术及其在中药行业中的应用前景[J]. 中国实验方剂学杂志, 2013, 19(5): 348 - 351.
[37] DOMÈNECH - GIL G, DUC N T, WIKNER J J, et al. Electronic nose for improved environmental methane monitoring[J]. Environ Sci Technol, 2024, 58(1): 352 - 361.
[38] SHI H, ZHANG M, ADHIKARI B. Advances of electronic nose and its application in fresh foods: a review[J]. Crit Rev Food Sci Nutr, 2018, 58(16): 2700 - 2710.
[39] WOJNOWSKI W, DYMERSKI T, GĘBICKI J, et al. Electronic noses in medical diagnostics[J]. Curr Med Chem, 2019, 26(1): 197 - 215.
[40] 徐东, 陶欧, 林兆洲, 等. 基于机器学习方法中草药电子鼻智能鉴别分类器的优化[J]. 中华中医药学刊, 2017, 35(9): 2323 - 2325.
[41] 蓝振威, 季德, 王淑美, 等. 电子鼻融合 BP 神经网络鉴别生、醋广西莪术及姜黄素类成分的含量预测[J]. 中国中药杂志, 2020, 45(16): 3863 - 3870.
[42] PENG L, WANG X, HE M L, et al. Discrimination and screening of volatile metabolites in atractylodis rhizoma from different varieties using headspace solid - phase microextraction - gas chromatography - mass spectrometry and headspace gas chromatography - ion mobility spectrometry, and ultra - fast gas chromatography electronic nose[J]. J Chromatogr A, 2024, 1725: 464931.
[43] 冯绘敏, 侯一哲, 黄天赐, 等. 电子传感技术在中药材及农产品分析领域的应用研究进展[J]. 分析测试技术与仪器, 2020, 26(4): 239 - 248.
[44] 张晓, 吴宏伟, 于现阔, 等. 基于电子眼技术的穿心莲质量评价[J]. 中国实验方剂学杂志, 2019, 25(1): 189 - 195.
[45] 陈鹏, 肖晓燕, 梅茜, 等. 基于仿生技术对薏苡仁麸炒过程中色泽气味变化研究[J]. 中草药, 2022, 53(14): 4285 - 4297.
[46] CUI Y X, LIU R X, LIN Z Z, et al. Quality evaluation based on color grading: quality discrimination of the Chinese medicine Corni Fructus by an E - eye[J]. Sci Rep, 2019, 9: 17006.
[47] 朱国雪, 吴纯伟, 梁生旺, 等. 中药质量控制的数字化研究进展

[J]. 中国实验方剂学杂志,2016,22(11):225 - 229.
[48] MA Y Y, ZHONG Y M, SU Q, et al. Study on identification algorithm of traditional Chinese medicinals microscopic image based on convolutional neural network [J]. Medicine, 2023, 102(25):e34085.
[49] 周炳文,朱丽丽,朱林,等. 基于人工智能 - 多元多息指纹图谱探索中药一法通识品种鉴定新方法[J]. 分析测试学报,2021,40(1):106 - 111.
[50] 朱广飞,王静,钱怡洁,等. 基于 Heracles Neo 超快速气相电子鼻对广藿香饮片的快速鉴别及气味指纹图谱研究[J]. 中草药,2022,53(5):1320 - 1327.
[51] 闫莎莎,李雪,洪晶,等. 基于气味信息和活性成分的三七产地溯源研究[J]. 中成药,2024,46(5):1740 - 1745.
[52] 姚月保,杨晓芸,彭莲,等. 基于仿生识别系统对金银花颜色与"气"的鉴别研究[J]. 世界科学技术 - 中医药现代化,2020,22(4):1270 - 1277.
[53] 刘瑞新,郝小佳,张慧杰,等. 基于电子眼技术的中药川贝母真伪及规格的快速辨识研究[J]. 中国中药杂志,2020,45(14):3441 - 3451.
[54] 侯富国,桂新景,王艳丽,等. 基于智能视觉技术的白及饮片真伪快速辨识方法研究[J]. 中草药,2023,54(2):509 - 519.
[55] GÓMEZ A, BUENO D, GUTIÉRREZ J M. Electronic eye based on RGB analysis for the identification of tequilas[J]. Biosensors,2021,11(3):68.
[56] 吴浩善,张冬月,康廷国,等. 基于电子舌技术的南、北五味子及其产地的鉴别研究[J]. 中药材,2018,41(4): 822 - 828.
[57] 周霞,杨诗龙,胥敏,等. 电子舌技术鉴别黄连及其炮制品[J]. 中成药,2015,37(9):1993 - 1997.
[58] 陈栋杰,郭盛,卢有媛,等. 基于电子舌技术的不同产地枸杞子鉴别研究[J]. 南京中医药大学学报,2020,36(5): 615 - 622.
[59] 刘涛涛,代悦,于淼,等. 基于智能感官分析技术的九蒸九晒大黄饮片气味表征[J]. 中国实验方剂学杂志,2022,28(20):116 - 121.
[60] 刘晓梅,张存艳,刘红梅,等. 基于电子鼻和 HS - GC - MS 研究地龙腥味物质基础和炮制矫味原理[J]. 中国实验方剂学杂志,2020,26(12): 154 - 161.
[61] CHEN Z, YE S Y, ZHU R G. The extraordinary transformation of traditional Chinese medicine: processing with liquid excipients[J]. Pharm Biol,2020,58(1):561 - 573.
[62] 曹萱,张雨恬,伍振峰,等. 基于"辨状论质"理论对中药炮制火候的科学内涵研究[J]. 中国中药杂志,2024,49(5):1196 - 1205.
[63] 张婧秋,姜明瑞,岳珠珠,等. 基于蜜炙甘草性状特征与内在成分含量的相关性研究[J]. 中华中医药学刊,2022,40(10):16 - 19,259.
[64] 陈晓旭,刘聪,王丽霞,等. 基于电子眼技术和化学指纹图谱的陈皮与蒸陈皮质量差异分析[J]. 中国实验方剂学杂志,2023,29(10): 202 - 208.
[65] 伍振峰,杨书洁,杨怡琴,等. 数字中药药剂学的现状与发展趋势分析[J]. 中国中药杂志,2024,49(2):285 - 293.
[66] 杨越,王磊,刘雪松,等. 近红外光谱结合多变量统计过程控制(MSPC)技术在金银花提取过程在线实时监控中的应用研究[J]. 中草药,2017,48(17):3497 - 3504.
[67] LI X R, CHEN S M, ZHANG J H, et al. Optimization of ultrasonic - assisted extraction of active components and antioxidant activity from polygala tenuifolia: a comparative study of the response surface methodology and least squares support vector machine[J]. Molecules,2022,27(10): 3069.
[68] 邓莉莉,陈柽,王永洁,等. 基于 QbD 理念的红花提取液浓缩工艺及物性参数模型的建立[J]. 中国中药杂志,2020,45(19):4633 - 4642.
[69] LIU R H, SUN Q F, HU T, et al. Multi - parameters monitoring during traditional Chinese medicine concentration process with near infrared spectroscopy and chemometrics[J]. Spectrochim Acta Part A Mol Biomol Spectrosc,2018,192:75 - 81.
[70] 宁文楷,李静,沈晓东,等. 南瓜干燥过程中 β - 胡萝卜素的多源融合预测[J]. 浙江农业学报,2023,35(8):1876 - 1887.
[71] 刘冰,陈晓辉,史新元,等. 近红外光谱法快速测定乳块消糖衣片的包衣厚度[J]. 药物分析杂志,2009,29(9):1435 - 1439.
[72] 张东亮,陈珊,张苹. 一种在线检测技术应用研究[J]. 航空精密制造技术,2020,56(1):48 - 51.
[73] 白雁,张威,王星,等. 银黄颗粒剂的近红外光谱鉴别分析[J]. 实验室研究与探索,2010,29(6):21 - 23.
[74] 任智宇. 电子鼻在菊花质量评价中的应用[D]. 北京:北京中医药大学,2016.
[75] 张一凡,周苏娟,孟江,等. 基于机器视觉系统的姜炭炮制程度判别及颜色 - 成分相关性分析[J]. 中国药房,2022,33(22):2712 - 2718.
[76] 叶青松. 基于机器视觉的工业检测研究——实时药丸检测系统[D]. 无锡:江南大学,2009.
[77] 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.
[78] CHEN W, LIU X S, ZHANG S Y, et al. Artificial intelligence for drug discovery: Resources, methods, and applications[J]. Mol Ther Nucleic Acids,2023,31:691 - 702.
[79] MENDEZ D, GAULTON A, BENTO A P, et al. ChEMBL: towards direct deposition of bioassay data[J]. Nucleic Acids Res,2019,47(D1):D930 - D940.
[80] GRIFFITH M, GRIFFITH O L, COFFMAN A C, et al. DGIdb: mining the druggable genome[J]. Nat Methods, 2013, 10(12): 1209 - 1210.
[81] CAMPILLOS M, KUHN M, GAVIN A C, et al. Drug target identification using side - effect similarity[J]. Science,2008,321(5886): 263 - 266.
[82] SZKLARCZYK D, GABLE A L, NASTOU K C, et al. The STRING database in 2021: customizable protein - protein networks, and functional characterization of user - uploaded gene/measurement sets[J]. Nucleic Acids Res,2021,49(D1):D605 - D612.
[83] ZHOU E, SHEN Q, HOU Y. Integrating artificial intelligence into the modernization of traditional Chinese medicine industry: a review[J]. Front Pharmacol,2024,15:1181183.
[84] LI M Y, ZHANG J. A focus on harnessing big data and artificial intelligence: revolutionizing drug discovery from traditional Chinese medicine sources[J]. Chem Sci,2023,14(39):10628 - 10630.

数智化技术在中药领域的应用进展及研究现状分析

（正文见 11－16 页）

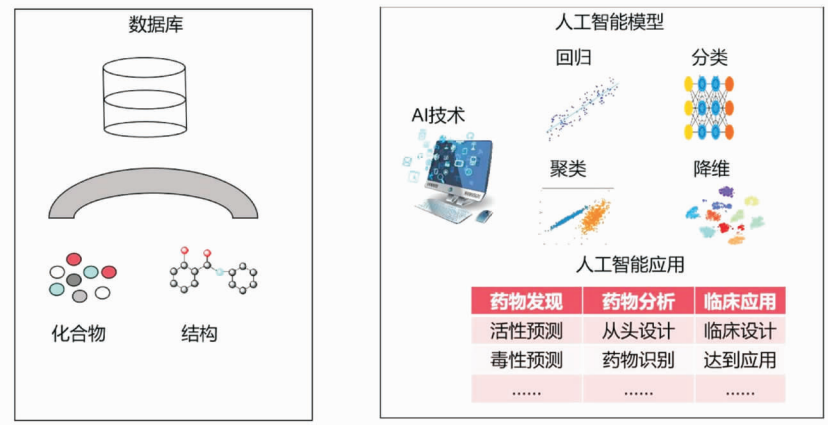


图 3　人工智能与药物研发过程

槲皮素抗急性髓系白血病作用机制研究进展

（正文见 143－148 页）

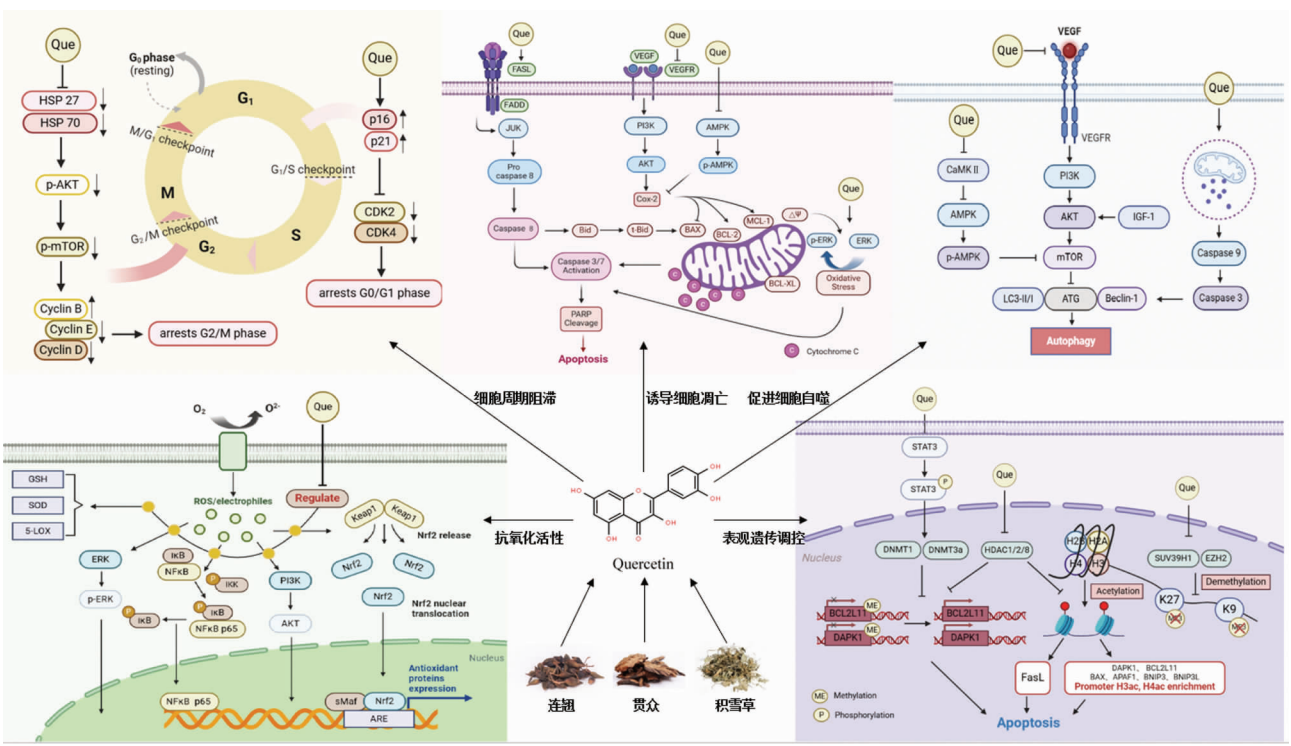


图 1　槲皮素治疗急性髓系白血病作用机制