

doi: 10.12452/j.fxcsxb.26021901

中药大品种二次开发关键技术研究进展及相关思考:以血府逐瘀制剂为例

沙鑫^{1,2}, 常昊^{1,2}, 宋纹³, 余河水^{1,2,4}, 李正^{1,2,4}, 李文龙^{1,2,4*}

(1. 天津中医药大学 中药制药工程学院, 天津 301617; 2. 现代中医药海河实验室, 天津 301617; 3. 天津宏仁堂药业有限公司, 天津 300380; 4. 天津市中药智能制药与绿色制药重点实验室, 天津 301617)

摘要: 传统中药制剂由于成分复杂、药效物质基础模糊、质量可控性不足及作用机制不明确, 存在潜在安全隐患, 影响其普及化及国际化。为应对上述问题, 中药领域逐步形成了以“老药新用、经典焕新”为核心理念的系统化再开发思路, 推动中药大品种的深入挖掘与再评价。随着人工智能、过程分析技术、网络药理学、质谱联用技术以及质量源于设计理念在中药研究中的深入应用, 中药大品种的现代化与科学化发展迎来新机遇。该文以血府逐瘀制剂这一典型活血化瘀类中药大品种为研究对象, 首次系统梳理其二次开发涉及的关键技术体系, 包括质量控制、机制解析、药效明确、疗效提升与国际认可5个维度。同时, 结合人工智能及大语言模型的应用实例, 优化相关技术路径并提炼共性经验, 探讨中药大品种未来的发展方向, 为同类品种的现代化升级提供参考范式。

关键词: 中药大品种; 血府逐瘀制剂; 二次开发; 过程分析技术; 人工智能

中图分类号: O657.6; R284 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-4957(2026)06-1174-14

Research Progress and Related Thoughts on Key Technologies for the Secondary Development of Large Varieties of Traditional Chinese Medicine: A Case Study of Xuefu Zhuyu Preparations

SHA Xin^{1,2}, CHANG Hao^{1,2}, SONG Wen³, YU He-shui^{1,2,4}, LI Zheng^{1,2,4}, LI Wen-long^{1,2,4*}

(1. College of Pharmaceutical Engineering of Traditional Chinese Medicine, Tianjin University of Traditional Chinese Medicine, Tianjin 301617, China; 2. Haihe Laboratory of Modern Chinese Medicine, Tianjin 301617, China; 3. Tianjin HongRenTang Pharmaceutical Co., Ltd., Tianjin 300380, China; 4. Tianjin Key Laboratory of Intelligent and Green Pharmaceuticals for Traditional Chinese Medicine, Tianjin 301617, China)

Abstract: Traditional Chinese medicine preparations still have potential safety hazards due to complex components, vague pharmacodynamic material basis, insufficient quality controllability and unclear mechanism of action, which affect their popularization and internationalization. In response to the above problems, the field of traditional Chinese medicine has gradually formed a systematic redevelopment idea with the core concept of “new use of old drugs and renewal of classics”, and promoted the in-depth excavation and re-evaluation of large varieties of traditional Chinese medicine. With the in-depth application of artificial intelligence, process analysis technology, network pharmacology, mass spectrometry technology and quality by design concept in the research of traditional Chinese medicine, the modernization and scientific development of large varieties of traditional Chinese medicine ushered in new opportunities. In this paper, Xuefu Zhuyu preparation, a typical large variety of traditional Chinese medicine for promoting blood circulation and removing blood stasis, was taken as the research object. For the first time, the key technical system involved in its secondary development was systematically sorted out, including five dimensions: quality control, mechanism analysis, clear efficacy, efficacy improvement and international recognition. At the same time, combined with the application examples of artificial intelligence and large language model, the relevant technical paths were optimized and the common experience was refined to explore the future de-

收稿日期: 2026-02-19; 修回日期: 2026-04-10

基金项目: 国家重点研发计划(2023YFC3504502); 现代中医药海河实验室-天津宏仁堂药业有限公司合作项目(XMH2022004)资助

* 通讯作者: 李文龙, 博士, 研究员, 研究方向: 中药质量控制技术研究, E-mail: wshlwl@tjutcm.edu.cn

网络首发日期: 2026-04-16

velopment direction of large varieties of traditional Chinese medicine, so as to provide a reference paradigm for the modernization and upgrading of similar varieties.

Key words: large varieties of traditional Chinese medicine; Xuefu Zhuyu preparations; secondary development; process analytical technology; artificial intelligence

近年来,全球公共卫生事件频繁发生,从新冠疫情的大流行到季节性呼吸道疾病的反复暴发,均对人类健康提出新的挑战。在此背景下,中医药凭借其“整体调节、辨证施治”的理论体系和独特实践优势,在防治感染性疾病和慢性疾病方面展现出不可替代的重要价值,国际影响力显著提升^[1]。传统中医药遵循“临床-理论-临床”的螺旋式发展路径,众多经典复方源自长期临床实践的总结与代际传承。例如,血府逐瘀制剂等典型中药大品种通常具备疗效显著、使用人群广泛、产业基础雄厚等特点,是推动中医药高质量发展的重要支撑。

然而,当前能够满足现代国际药品标准(如ICH、FDA、EMA等)的中药大品种仍占少数。以血府逐瘀制剂为例,该方源于清代王清任《医林改错》,由桃仁、红花、当归、川芎、赤芍等十一味药材组成,具有活血化瘀、行气止痛之功,临床应用广泛且疗效明确,属于典型的中药大品种^[2]。但其现代化进程仍受限于药效物质基础不清、科学内涵阐释不足、生产工艺标准化程度低、质量控制体系不完善、难以实现全流程可追溯等问题,导致其在临床认可度、市场竞争力及国际准入能力方面受到明显制约,部分品种甚至面临淘汰风险。同时,新药研发周期漫长、投入巨大,也难以满足临床对“药等病”的现实需求。

为此,国家在《中医药发展战略规划纲要(2016-2030年)》中明确指出,要“着力推进中医药创新,鼓励基于经典名方、医疗机构中药制剂等的中药新药研发”^[3]。血府逐瘀制剂作为具有代表性的经典名方,已被纳入重点二次开发对象。近年来,随着人工智能(AI)、大语言模型(LLM)、近红外/拉曼光谱、过程分析技术与化学计量学等前沿科技的迅猛发展,AI与智能质控技术正成为破解中药质量“黑箱”问题的核心引擎。通过将深度学习、多模态数据融合与数字孪生等技术嵌入药材溯源、提取工艺监控、中间体放行及成品放行等全链条环节,中药质量控制正从“终点检验”向“过程控制-智能预警-动态优化”转型,实现“批间一致、过程可控、风险可防”的现代化质控目标。如图1所示,中药大品种二次开发通常包括5大核心方向:质量可控、机制明确、药效清楚、疗效突出、国内外更认可^[4]。其中,“质量可控”是实现国际准入的基础,而AI则为质量提升提供了新的技术路径。例如,机器学习算法可用于挖掘工艺参数与关键质量属性的关联,提升生产过程稳定性;卷积神经网络可用于解析高维光谱信息以识别成分特征;LLM可整合文献、数据库与临床证据构建“成分-工艺-疗效”关联模型^[5]。上述技术的应用使中药质量从经验判断逐步转向数据驱动,为其进入国际主流医药体系奠定科学基础。

本文以血府逐瘀制剂为案例,首次系统总结中药大品种二次开发的关键技术体系,特别关注AI驱动的智能质控模式。通过梳理相关技术实践与应用成果,提炼可复制、可推广的技术路径,为中药大品种的标准化、智能化与国际化发展提供理论与实践支撑。

1 二次开发技术

中药大品种的生产贯穿“原药材种植与采购-炮制加工-提取分离-制剂成型-质量检验”等全链条,任何环节的波动均可能影响最终制剂质量与临床疗效。要实现二次开发提出的“质量可控、药效清楚、机制明确、疗效突出、国内外认可”等目标,需以系统思维整合现代分析技术、过程控制工具与智能算法,实现从源头到终端的精准化、标准化与可追溯化管理(如图2所示)。在此基础上,通过

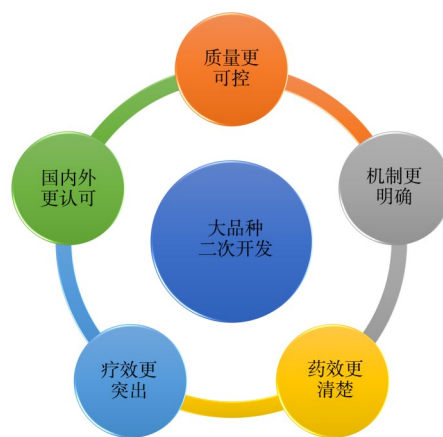


图1 中药大品种二次开发方向

Fig. 1 The direction of secondary development of large varieties of traditional Chinese medicine

各环节技术目标与解决方案的协同耦合, 逐步推动中药大品种由“经验制造”走向“数据驱动制造”, 提升其科学内涵、临床信任度与国际竞争力。

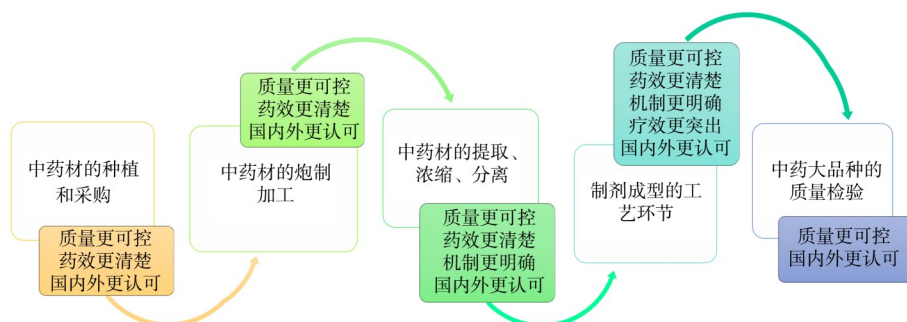


图2 中药大品种二次开发环节目标图

Fig. 2 Objective diagram of secondary development of large varieties of traditional Chinese medicine

1.1 质量更可控

质量可控是中药大品种二次开发的基础。针对从原药材到制剂全过程中存在的质量波动和批间差异, 需要融合过程分析技术(PAT)、质量源于设计理念、多维指纹图谱等工具, 构建全链条智能质控体系, 实现“源头可溯、过程可控、终点可判、全程可追溯”(图3)。

1.1.1 过程分析技术

PAT是一种以过程理解与实时控制为核心的质量管理与分析框架, 其通过在生产或制备过程中引入在线或原位分析手段, 对关键质量属性(CQA)和关键工艺参数(CPP)进行动态监测、建模与反馈调控, 从而实现产品质量的可预测、可控制与可重复^[6]。其核心在于由“事后检测”转向“过程内建质量”。对于成分复杂、来源多样且工艺变异显著的中药体系, 传统依赖终产品抽检和经验判断的模式难以全面反映过程信息, 也难以支撑规模化、标准化与国际化发展。而PAT的引入为中药制造提供了一种多维信息获取-数据建模-智能决策的技术路径, 可用于药材真伪鉴别、提取与浓缩过程监控、混合与成型均匀性评价、工艺终点判定及异常偏差预警等关键环节, 推动中药生产由“经验驱动”走向“数据驱动、过程可控”^[7-9]。在具体实施层面, PAT通常依托光谱、成像及机器视觉等多维感知手段, 并结合化学计量学和机器学习实现对复杂体系的系统解析。以下将从光谱技术与成像技术两个方面, 对PAT在中药领域, 尤其是血府逐瘀制剂二次开发中的应用进行阐述。

1.1.1.1 光谱技术 光谱技术是PAT框架下应用最为成熟、最具代表性的分析手段之一, 能够以快速、无损、无需或少量样品前处理的方式获取物质的整体化学信息, 在中药复杂体系中具有不可替代的优势。其中, 近红外光谱(NIR)与拉曼光谱因互补的分子响应特性, 在中药过程分析中得到广泛应用。

NIR光谱记录的是含氢基团的倍频和合频吸收峰, 可反映待测物整体信息, 具有快速、高效、无损的特点^[10]。相较于传统分析方法, NIR无需复杂前处理、不消耗试剂、可实现在线检测, 特别契合中药这类成分复杂、基质多变的天然产物体系。通过与化学计量学深度融合, NIR已发展成为PAT框架下的核心工具, 广泛应用于中药材真伪鉴别、活性成分定性定量分析、工艺过程监控及终点判定等关键环节, 推动中药制造由“经验判断”迈向“数据驱动、智能决策”。在血府逐瘀制剂的二次开发中, NIR的应用已展现出显著价值。例如王玺等^[11]针对血府逐瘀胶囊, 采用近红外光谱技术结合多元统计过程控制, 建立关键药材(如牛膝、红花)的提取过程轨迹图, 通过光谱数据实时分析提取液中活



图3 质量更可控的二次开发关键技术

Fig. 3 Key technologies of secondary development with more controllable quality

性成分含量变化，动态调整提取温度、溶剂体积及药材缺失，显著提升了生产效率与过程稳健性，实现了提取工艺的智能化闭环控制。此外，Wang等^[12]利用近红外光谱结合偏最小二乘回归(PLSR)实时监测血府逐瘀胶囊粉体的混合度，侵入式与非侵入式两种模式均表现出良好预测性能。通过移动块标准偏差算法(MBSD)确定最优混合时间为10 min，并发现粒径分布越窄混合效率越高，为粉体混合过程提供了可放大、绿色的质量控制依据。

拉曼光谱基于非弹性光散射效应，通过检测分子振动能级变化反映结构信息，对非极性键及分子骨架对称振动尤为敏感，且几乎不受水干扰，因此在含水体系中具有独特优势^[13]。与偏重整体宏观信息的NIR相比，拉曼可提供更精细的分子结构与相互作用信息。当前，显微拉曼、傅里叶变换拉曼和表面增强拉曼散射等技术已广泛用于中药原料鉴别、真伪判别、多组分分析及过程监测^[14]。陈伟炜等^[15]采用表面增强拉曼散射比较当归单味煎剂与复方煎剂光谱，发现复方中部分特征峰变化或消失，并出现新的峰，揭示了复方共煎引发的成分相互作用，对拉曼技术在复杂中药体系成分追踪、配伍机制解析及质量标志物发现方面的应用具有重要价值。但光谱技术在建模过程中高度依赖样品理化差异及仪器参数稳定性，模型在跨批次、跨设备与跨产线应用时易出现预测偏移，模型迁移与泛化能力仍受限制。未来需构建覆盖多产地、多炮制、多工艺条件的标准化样本库，并通过大样本、多场景及独立外部验证，持续提升其在中药工业在线监测与快速放行中的稳定性与适配性。

1.1.1.2 成像技术 成像技术是PAT对传统单点分析的重要拓展，其通过引入空间维度信息，实现样品组成分布与结构特征的可视化表征。其中，高光谱成像(HSI)融合空间成像与光谱分析，可在获取二维图像的同时，对每个像素点采集连续波段光谱，形成“空间-波长-强度”三维数据立方体，从而实现化学组分与物理特征的同步表征^[16]。相较于单点光谱或纯图像分析，HSI兼具“看得见形态、测得准成分”的优势，在道地性溯源、制剂一致性评价、异物识别及过程监控中具有独特潜力^[17]。目前主流系统主要包括红外、近红外及拉曼高光谱成像，其中近红外高光谱成像因穿透性强、设备成熟度高而更适用于中药原料鉴别及制剂表面均匀性评估。郑洁等^[18]利用NIR-HSI建立的桃仁快速鉴别模型，经偏最小二乘法判别分析(PLS-DA)建模后对不同产地桃仁与混伪品苦杏仁的分类准确率分别达96.19%与100%，曲线下面积(AUC)最高达0.999 6，展示了HSI在中药复方单味药材溯源中的高效性。不过，光谱成像存在数据维度高、冗余信息多、建模复杂度高和实时解析困难等问题；同时设备购置、维护及在线部署成本较高，检测结果亦易受光照波动、样品表面差异及噪声干扰影响。未来需结合深度学习等动态校正算法，构建低成本、强鲁棒、易部署的标准化光谱成像质控体系，以促进其在中药智能制造中的规模化应用。

1.1.1.3 机器视觉技术 机器视觉(MV)技术以可见光或工业相机为主要感知手段，通过图像采集、特征提取与模式识别算法，对物料或制剂的外观形态、结构特征及动态变化进行分析^[19]。与NIR、拉曼等光谱技术不同，MV并不直接反映化学组成，而侧重于宏观结构与过程状态的非接触式表征。在中药生产中，尤其是浸膏、颗粒及半固体中间体制备过程中，颜色均一性、表面形态及流变外观往往与黏度、固含量及粒径分布等关键物理属性密切相关。传统依赖人工经验判断的方法主观性强、重复性差，难以满足规模化生产对一致性与可控性的要求。MV凭借高通量、易在线集成等优势，可在不增加化学检测负担的条件下，对生产状态进行快速、客观的评估，为PAT提供重要补充。例如，沙鑫等^[20]以血府逐瘀浸膏为研究对象，基于MV技术提取浸膏图片的颜色、纹理与形态特征，并结合机器学习和LLM实现了对浸膏等级的快速判别与浓缩终点预测。但机器视觉只能捕捉外观、纹理与物理结构信息，难以直接判别组分含量及药效物质归属；同时，成像结果易受背景、光照、样品摆放姿态及个体差异干扰，存在误判风险。未来可将机器视觉与光谱、高光谱成像等技术协同融合，构建“化学组成-空间分布-结构状态”多维质量表征模式，从而提升对中药复杂制剂全过程质量演变的整体把控能力。

1.1.2 质量源于设计理念

在分析技术之外，现代制药理念也是确保质量的关键一环。质量源于设计(QbD)理念从根本上突破了“中药质量依赖终产品检验”的传统思路，强调质量始于设计、成于过程、控于体系。其核心在于明确关键质量属性、辨识关键原料属性、建立关键工艺单元数学模型并构建设计空间^[21]。通过将原

料属性、处方配比及关键工艺参数纳入前端设计, QbD 不仅界定了参数的可接受变化范围, 还嵌入了前瞻性风险管理机制, 从而显著提升中药生产的可重复性、可控性与合规性。

响应曲面法作为 QbD 理念的核心方法, 通过构建输入变量与输出响应之间的函数关系, 高效预测最优工艺条件^[22]。李燕燕等^[23]基于 QbD 理念, 以含血府逐瘀复方组分之一川芎的都梁方为对象, 优化其渗漉提取工艺。采用鱼骨图及失效模式与效应分析(FMEA)确定关键工艺参数(CPPs), 依据 Q-Marker 原则选取阿魏酸等成分为关键质量属性(CQAs), 再利用 Box-Behnken 设计构建设计空间, 结果表明工艺稳定可靠。该工作不仅为含川芎复方提供了 QbD 驱动的工艺优化范式, 也为血府逐瘀制剂的系统性二次开发提供了可迁移的方法论参考。

1.1.3 整体质量控制技术

整体质量控制技术以多维特征的系统表征与综合评价为核心, 突破了传统依赖单一成分或单一指标进行质量判定的局限, 是中药复方制剂实现质量一致性、可控性与可追溯性的关键技术路径。其中, 指纹图谱技术能够整体反映制剂内在特征与批次稳定性, 已成为中药现代化质量标准体系的重要组成部分。

根据表征维度不同, 指纹图谱可分为化学指纹图谱与物理指纹图谱(表 1): 前者聚焦分子组成, 后者关注宏观物性, 二者互补构成“内外兼修”的质量评价体系。化学指纹图谱主要依托 HPLC 等技术, 对复方中多组分进行整体定性与半定量分析。在血府逐瘀制剂研究中, 王玺等^[24]针对血府逐瘀胶囊的批次一致性问题, 建立了 24 个共有峰的 HPLC 指纹图谱, 指认 6 种质量标志物, 10 批样品的指纹图谱相似度均大于 0.990, 证实了其化学组成的批间稳定性, 为中药大品种指纹图谱的实际应用提供了典型范式。相较之下, 物理指纹图谱更侧重于从宏观物性层面对中药中间体或制剂的整体状态进行表征, 能够直接关联下游加工适应性与工艺稳定性。沙鑫等^[20]针对血府逐瘀浸膏生产中依赖单一指标或经验判断浓缩终点的局限, 筛选 7 项核心物理指标构建物理指纹图谱, 并结合相关系数热图与主成分分析进行批次一致性评估, 既验证了多数批次的高度一致性, 也识别出工艺控制不当或数据采集误差导致的异常批次, 从宏观物性层面保障了制剂中间体的质量可靠性。总体而言, 化学与物理指纹图谱的协同推动了中药质量评价由“单一成分控制”走向“整体特征表征”。但需注意, 当前基于理化表征的指纹图谱一致性评价, 本质上仍主要反映样品轮廓与组分相似性, 难以直接判别整体生物效应与临床功效一致性。因此, 如何构建“多维指纹-关键质量属性-体内外生物效应”之间稳健、可量化、可验证的关联体系, 仍是提升中药整体质量控制科学性的关键问题。

表 1 物理指纹图谱和化学指纹图谱的区别

Table 1 Difference between physical fingerprint and chemical fingerprint

Technology	Principle	Common method	Advantage	Limitation	Application scenario
物理指纹图谱	基于样品的宏观物理特性(如形态、粒径、密度、微镜和扫描电镜); 物理常数测定(折光率、旋光度、粘度、热行为等)进行物理检测, 提取稳定的外在属性特征, 形成指纹图谱	显微技术(光学显微镜、电子显微镜); 物理常数测定(折光率、旋光度、粘度、密度、平均粒径、固含量); 热分析技术(DSC、TGA)	信息直观易理解; 测量快速便捷; 成本低、原料消耗少	主要反映外在物性; 对化学成分变化不敏感; 受环境、样品处理影响较大, 稳定性较弱	中药材真伪及性状鉴别; 物理性质一致性评价; 部分工艺过程监控
化学指纹图谱	基于样品中化学成分的种类与含量, 通过分离、鉴定与定量分析获得化学成分特征并构建指纹图谱	色谱技术(HPLC, GC, TLC); 光谱技术(IR, NIR, Raman, UV-Vis, NMR, MS); 质谱联用技术(如 LC-MS, GC-MS)	与化学成分直接关联; 信息量大、特异性与灵敏度高; 可反映药材质量的本质属性	仪器成本高、技术要求高; 实验及数据处理过程复杂; 成分分析方法建立耗时较长	中药材基源鉴别; 化学质量一致性评价; 药效关联研究

1.1.4 人工智能与大语言模型

AI 与 LLM 正推动中药大品种质控从“经验依赖”向“数据驱动、智能决策”跃迁^[25]。血府逐瘀制剂的系列实践, 为这一转型提供了可复用的技术范式。

在多模态数据融合与质量预测方面, 针对中药生产数据高维、异构、海量的特性, 研究者通过构建“工艺-光谱-成分”关联模型, 实现关键质量属性的高精度预测。Hao 等^[26]融合 NIR 与中红外光谱, 利用集成学习将金银花产地判别准确率提升至 95.5%; 并基于 PLSR 构建“虚拟色谱”模型, 将多模态光谱映射为 HPLC 图谱, 余弦相似度达 0.996, 为无损、快速成分推断提供了新路径。上述策略虽实现了成分预测, 但尚未与药效直接关联。而 Gao 等^[27]以血府逐瘀口服液为模型, 构建 AI 驱动的“谱-效-

质”一体化评价体系，通过融合HPLC多波长指纹与斑马鱼模型筛选出7个活性成分，并基于卷积神经网络-双向长短期记忆网络-多头自注意力机制(CNN-BiLSTM-MHSA)建立NIR快速检测模型，实现了活性成分无损预测及过期样品识别。类似地，Nie等^[28]提出“压缩指纹图谱”策略，利用1D-CNN将HPLC分析时间缩短2/3，溶剂消耗减少60%以上，特征峰识别准确率仍达98%，显著提升了分析效率与绿色化水平。在中间体智能质控领域，沙鑫等^[20]针对血府逐瘀浸膏依赖单一指标判定浓缩终点等问题，构建“物理指纹图谱+机器视觉+LLM”三位一体体系：基于7项物理指标，结合XGBoost模型，使判别准确率达93.33%，并借助LLM将AI结果转化为自然语言建议，可在10s内完成“感知-决策-建议”闭环，弥合了“黑箱模型”与“工艺认知”的鸿沟。针对Q-Marker实时监测，Liu等^[29]提出多源NIRS融合策略，在血府逐瘀口服液同步采集两台光谱仪数据，构建MSCAF-Net网络，提升工业场景下Q-Marker预测的鲁棒性与准确性。在风险预警与处方优化方面，赵培文等^[30]结合SERS与深度残差网络(ResNet-CNN)，实现了微生物限度的100%预判；李万忠等^[31]利用支持向量机(SVM)优化血府逐瘀片提取物抗吸湿处方，预测误差仅2.126%，显著提升了制剂稳定性。需要指出的是，AI模型性能的提升高度依赖高质量、标准化的大数据支撑，而这恰恰是当前中药实际生产中的薄弱环节。生产数据往往来源于原料检测、在线监测、实验室分析、设备参数及人工记录等多个环节，存在采集频率不一致、标签定义模糊及异常批次样本稀缺等问题，导致数据可用性、可比性与可追溯性不足。尤其在企业、产线或设备之间，数据格式与质量标准的差异更为明显，限制了模型的迁移与泛化能力。与此同时，多模态数据融合虽然可显著提升质量预测与风险识别能力，但其实现过程涉及仪器同步、算法适配及后期维护等较高技术门槛，也带来额外投入与实施成本，短期内在中小型中药企业中的推广仍面临现实阻力。

综上，AI与LLM已显著拓展了中药质量控制的技术边界，并在“数据感知-智能判别-风险预警-工艺优化”链条中展现出重要应用潜力；但其由示范应用走向广泛落地，仍需建立高质量数据基础，提升模型跨场景鲁棒性，并在成本、标准与工程适配等方面持续推进，方能更稳定地服务于中药大品种的现代化、标准化与国际化。

1.2 机制更明确

中药大品种具有“整体调节、辨证施治”的临床优势，其本质是多成分作用于多靶点、多通路的协同网络。然而，传统“单靶点”药理研究难以系统揭示复方的复杂机制，导致“疗效明确但机制模糊”的问题长期存在。近年来，网络药理学、多组学技术(转录组、代谢组、蛋白组)与人工智能的结合，使中药作用机制研究从经验推测迈向系统解析与机制确证的新阶段。血府逐瘀制剂作为代表性活血化瘀方，从抗动脉粥样硬化、抗脂肪肝到神经保护等多维机制研究，为中药大品种建立了“预测-验证-确证”一体化的机制研究范式。

1.2.1 网络药理学及分子对接技术

网络药理学通过整合化学成分、疾病靶点及信号通路数据，构建“成分-靶点-通路-疾病”网络，实现中药复方多成分协同机制的系统性推演，为活性成分筛选、配伍合理性评价及Q-Marker识别提供了有力工具^[32]。分子对接作为其重要补充，能够基于蛋白质三维结构层面评估候选成分与关键靶点的亲和力，从而对网络预测得到的“核心成分-核心靶点”关系进行虚拟验证与优先级排序，增强机制推断的分子证据链^[33]。贺木兰等^[34]基于中药质量标志物核心理论，以血府逐瘀胶囊为对象，通过成分收集、靶点预测、PPI网络构建及基因本体/京都基因与基因组百科全书(GO/KEGG)分析，筛选出5个核心Q-Marker(如芍药苷、阿魏酸)，并揭示其通过调控PI3K-Akt等通路发挥抗动脉硬化作用，形成“化学-药理-网络药理”一体化的Q-Marker筛选范式。此外，Qian等^[35]采用网络药理学结合分子对接的方法，系统解析了血府逐瘀胶囊治疗冠心病的潜在分子机制(图4)。研究通过构建“成分-靶点-通路-疾病”网络并结合蛋白互作分析，筛选出多个在网络中具有关键调控作用的核心靶点，分子对接结果进一步支持了关键成分与核心靶点之间的潜在相互作用，从分子层面为血府逐瘀胶囊通过多通路协同发挥抗冠心病作用提供了理论依据。总体而言，网络药理学及分子对接为血府逐瘀制剂的“多成分-多靶点-多通路”机制解析提供了可视化、可推演的研究框架，并在假设生成与关键节点筛选方面展现出重要的方法学价值。但其结果在一定程度上仍依赖数据库信息的完整性与注释质量，不同平台

间数据更新频率、筛选标准及参数设定的差异，均可能影响结果的稳定性与可重复性；分子对接所得结合模式亦属于计算预测，仍需体内外实验进一步验证。因此，未来更应强调“预测-验证-整合”的研究路径，在网络推演基础上结合多组学数据、功能实验及临床样本分析进行交叉印证，同时推动数据库标准化与算法透明化建设，使中药复方机制研究由静态网络模型迈向动态、可验证的系统生物学框架。

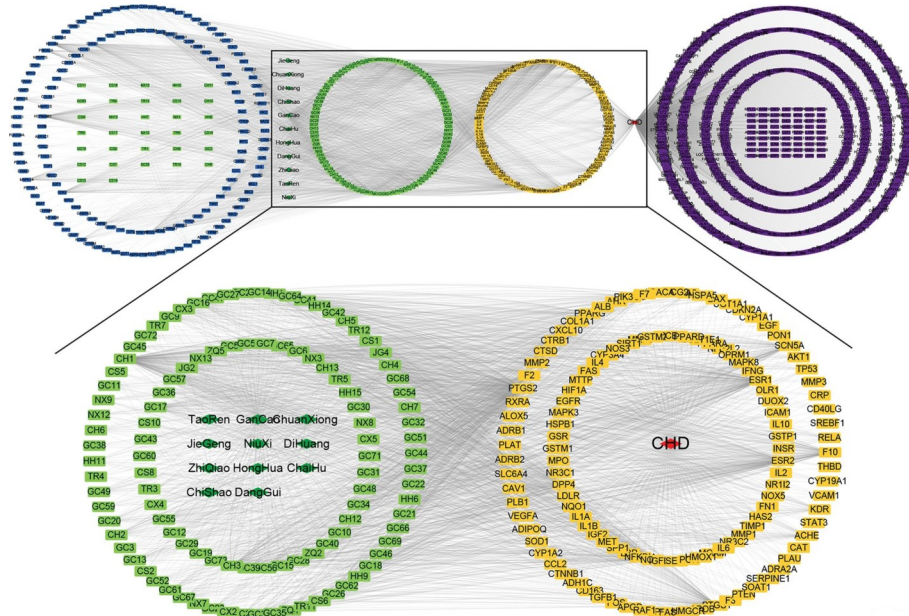


图 4 血府逐瘀胶囊的药物-化合物-靶点-疾病网络^[35]

Fig. 4 Drug-compound-target-disease network of Xuefu Zhuyu capsule^[35]

1.2.2 转录组学

转录组学是指从全基因组表达层面揭示药物对基因转录调控的动态影响，是解析中药“多靶点、多通路”干预机制的核心工具^[36]。通过RNA-seq或基因芯片技术，可系统识别药效相关的差异表达基因(DEGs)，进而映射至功能通路，实现从“表型改善”到“基因调控”的机制跃迁。王旭^[37]从转录组学层面探讨了血府逐瘀胶囊治疗冠心病心绞痛的潜在分子机制。研究基于临床样本开展RNA-seq分析，系统识别药物干预前后的差异表达基因，并对其功能通路进行富集解析。结果显示，血府逐瘀胶囊可显著调控与炎症反应、免疫调节及血管功能相关的多条信号通路，从整体转录表达层面揭示其改善心肌缺血状态、缓解心绞痛症状的分子基础，为血府逐瘀制剂“多靶点、多通路”协同干预心血管疾病提供了直接证据。因此，转录组学通过在全基因组尺度上捕捉药物干预引发的转录重塑过程，为中药复方作用机制由“经验推断”向“分子证据支持”转变提供了关键技术支撑。但转录水平变化并不必然对应蛋白功能改变，且样本的异质性与时间依赖性较强，因此仍需与蛋白质组学、功能实验及临床终点联合验证。

1.2.3 代谢组学

代谢组学聚焦于内源性小分子代谢物的动态变化，能够直接反映药物干预下机体的生理与病理状态转变，是连接“药效表型”与“生化机制”的桥梁，结合HPLC-MS或NMR技术，可实现对代谢产物的精准分析^[38]。马梅^[39]结合尿液代谢组学与肠道菌群分析，从临床层面探讨了血府逐瘀胶囊治疗冠心病心绞痛(气滞血瘀证)的作用机制。研究发现，血府逐瘀胶囊的干预可显著重塑患者代谢谱，并调节与能量、脂质及氨基酸代谢相关的关键代谢物，同时伴随肠道菌群结构的协同变化。该研究从“肠道菌群-代谢重编程”角度，为血府逐瘀胶囊改善心绞痛症状及其心血管保护作用提供了具有临床相关性的代谢组学证据。不过代谢组学结果易受饮食、肠道菌群及生理状态等多因素干扰，且部分差异代谢物的结构注释与生物学归属仍存在不确定性，其机制解释仍需结合靶向验证。

1.2.4 蛋白质组学

蛋白质组学是指通过高通量检测药物对蛋白质表达、修饰与互作的影响，直接反映药效的执行终

端——功能蛋白的动态变化，是机制研究从“基因”走向“功能”的关键环节^[40]。刘梦华等^[41]证明血府逐瘀胶囊可显著抑制主动脉组织中M1型巨噬细胞相关蛋白(iNOS、Notch1/Jagged1/Hes1)表达，并上调M2型标志蛋白Arg-1。结合免疫组化结果，最终确认该方通过调控巨噬细胞极化平衡、抑制炎症反应，进而改善斑块形成与脂质沉积。这为“活血化瘀”功效提供了直观、可重复的蛋白水平证据，凸显了蛋白质组学在机制确证中的不可替代性。

1.2.5 人工智能辅助机制解析

AI正推动中药机制研究从“相关性”走向“确证性”。传统机制研究依赖网络药理学进行高通量靶点预测，而AI驱动的计算模拟技术(如分子对接、分子动力学模拟)、器官芯片技术等则进一步在原子尺度上验证“成分-靶点”相互作用的可靠性与稳定性，为“多成分-多靶点”协同机制提供微观证据。Tian等^[42]结合网络药理学与分子模拟，系统解析了血府逐瘀方在心室重构中的作用机制。研究筛选出1 089个类药性成分，鉴定出AKT1、STAT3等核心节点，并通过京都基因与基因组百科全书(KEGG)富集确认了其作用通路。分子对接显示活性成分与靶点具有较强结合力，动力学模拟进一步验证了复合物构象稳定性，形成“预测-对接-模拟-确证”的高阶机制研究模式。该研究不仅揭示了血府逐瘀方“活血化瘀”改善心室重构的现代药理基础，也体现了AI与计算模拟在中药多靶点机制研究中的应用潜力。此外，分子对接、分子动力学模拟等计算机辅助药物设计(CADD)方法也已广泛应用于制剂配方设计。通过CADD，可模拟药物与辅料之间的形成轨迹、相互作用及稳定性，为后续实验提供前期筛选依据。这类方法不仅能够节约实验资源，还可从微观层面解释配方中的物理和形态变化，为传统宏观实验难以获取的信息提供补充^[43-44]。尽管AI与计算模拟显著提升了机制研究的深度与效率，但其结果的准确性仍高度依赖数据库质量、模型参数设定及算法假设。一方面，分子对接与分子动力学模拟本质上仍属于计算预测，其结果受初始构象、力场选择、模拟时间尺度及溶剂环境简化等因素影响，尚不能完全等同于真实体内生物学效应；另一方面，中药复方成分复杂、体内代谢转化显著，现有模型对多成分协同作用、代谢产物活性及动态生理环境的模拟能力仍有限。对于器官芯片等新型仿生验证平台而言，虽然其仿生性优于传统体外模型，但仍面临标准化不足、成本较高及推广门槛较高等现实问题。因此，AI在中药机制研究中的应用更适合作为“机制假设生成与强化工具”，需与细胞、动物及临床样本研究相结合，方能形成更高等级的证据链。

未来，随着LLM与知识图谱的融合，AI有望进一步提升机制研究的可解释性与整合能力，例如自动生成“成分-通路-疾病”关联报告，辅助实验设计与结果解读，从而弥合计算推演与实验验证之间的认知鸿沟，推动中药机制研究向智能化、动态化与标准化方向发展。

1.3 药效更清楚

中药大品种的临床价值建立在其明确的药效物质基础与可验证的作用机制之上。传统“经验用药”模式难以回答“哪些成分起效”“如何发挥作用”等关键问题，限制了中药的精准化与国际化发展。近年来，随着色谱-质谱联用技术的成熟，中药复方化学成分的“全景解析”得以实现，为药效物质基础的精准辨识提供了分子层面的证据。同时，AI与LLM的应用进一步推动了“成分-靶点-通路-疗效”链条的系统解析，使药效研究逐步向“成分明确、靶点清晰、机制可解释”的方向发展。

1.3.1 色谱-质谱联用技术

色谱-质谱联用技术凭借色谱的高分离能力与质谱的高灵敏度实现对复杂复方中微量、多类型成分的快速鉴定，是中药药效物质研究的核心手段。其中，液相色谱-质谱联用(LC-MS)适用于极性、热不稳定或大分子成分(如皂苷、黄酮、生物碱)，而气相色谱-质谱联用(GC-MS)则更适用于挥发性小分子(如挥发油、脂肪酸)。二者互补，能够构建复方成分的完整化学谱图。在血府逐瘀制剂研究中，LC-MS与化学-生物关联分析的结合已显著推动了其药效物质解析。例如，Guo等^[45]通过LC-MS快速鉴定血府逐瘀丸中18种主要成分，并结合网络药理学和分子对接筛选出GAPDH等核心靶点。其中甘草素、异甘草醇、InophyllumE、芍药内酯苷等成分表现出较强结合亲和力(结合能 ≤ -5.0 kcal/mol)，可作为潜在质量标志物，为其治疗术后认知功能障碍提供了直接的化学与分子互作证据。另一项研究中，Du等^[46]则利用UHPLC-Q-TOF-MS/MS结合GNPS分子网络平台，从血府逐瘀丸中系统鉴定出213种化合物(其中208种为潜在活性成分)，并基于靶点预测与疾病基因比对，获得622个活性成分潜在靶点及

242 个高泌乳素血症相关靶基因, 分子对接进一步证实其结合亲和力优异, 为该方治疗抗精神病药物所致高泌乳素血症的药效机制提供了关键化学支撑, 为复方药效物质研究提供了高通量、结构化的技术路径。

1.3.2 人工智能与药效评价

尽管色谱-质谱联用技术在成分鉴定方面已十分成熟, 但其与药效终点(如临床指标、生物活性)的关联仍高度依赖研究者的人工整合, 存在效率低、主观性强等问题。人工智能与 LLM 为此提供了新的解决方案。一方面, 借助机器学习、神经网络等深度学习算法, 人工智能可高效整合 HPLC-MS 图谱、多组学数据及药效指标等多源异构信息, 自动识别并锁定驱动药效的关键成分群, 从而实现成分与生物效应的精准映射^[47]。另一方面, 随着药效评价模型从传统体外细胞模型, 逐步向类器官、模式生物等更具系统性与整体性的平台升级, 类器官/器官芯片凭借其高度仿生人体器官微结构、细胞互作及代谢微环境的优势, 大幅提升了中药活性评价的真实性与可靠性, 而类器官/器官芯片技术与人工智能的深度融合, 更可进一步赋能中药药效物质的快速、高通量筛选^[48]。未来, 若能将 AI 驱动的成分筛选、多组学关联建模与 LLM 输出的可解释机制报告整合进药效研究流程, 中药“多成分-多靶点-多通路”的协同机制即可由静态网络图谱进化为可预测、可计算、可解释的动态系统, 从而真正实现药效物质基础的现代化表达与国际化认知。

1.4 疗效更突出

中药大品种的疗效优势不仅来源于经典理论与长期临床积累, 更取决于其有效物质在体内“释得出、吸收得进、到位得准、作用得稳”的全过程。传统剂型(如汤剂、丸剂)虽应用历史悠久, 但在现代精准用药背景下仍面临有效成分释放不足、生物利用度偏低、起效差异大、剂量不易精准及依从性有限等共性问题。以血府逐瘀制剂为例, 阿魏酸、羟基红花黄色素 A 等关键成分体内暴露不足, 将在一定程度上限制其抗血栓、抗炎等药理作用的临床转化。因此, 疗效提升首先应回到药学层面的基础问题, 即现代剂型能否在体外尽可能再现传统汤剂的有效释放谱, 实现关键成分“溶得出、溶得全、溶得稳”, 并尽量保持复方体系的共溶出结构。为此, 王玺等^[24]以血府逐瘀胶囊为研究对象, 围绕关键成分(如阿魏酸、芍药苷等)与整体 HPLC 指纹特征建立多指标溶出评价框架, 为中药大品种二次开发中还原古方汤剂溶出特性、提升制剂疗效提供了重要技术支撑。

1.4.1 临床疗效再评价

在释放层面的“可还原”之外, 疗效的真正突出还需临床层面的“可验证”。血府逐瘀制剂传统功效以活血化瘀、行气止痛为核心, 但现代研究提示其作用可能涉及炎症调控、内皮保护、凝血-纤溶平衡调节及代谢相关通路重塑等多个维度, 这为其在经典功效基础上的临床再评价与新定位提供了依据。所谓临床新疗效或新定位, 更强调围绕具体临床问题识别优势人群与优势终点, 而非简单扩大适应证范围。以临床共病人群为例, Wang 等^[49]在回顾性研究中比较了血府逐瘀汤与西药方案用于慢性心力衰竭合并抑郁患者的干预效果, 结果显示血府逐瘀汤组在总有效率方面更优, 同时可改善心功能指标, 并降低抑郁量表评分及炎症因子水平等多维终点, 为其在“心血管疾病+情绪障碍”交叉场景中的临床定位提供了直接证据。因此, 未来可通过真实世界研究与前瞻性试验并行, 围绕症状改善、复发风险、炎症及影像或功能学终点建立多维评价体系, 并结合网络药理学与多组学证据对关键通路进行反向支撑, 使“临床表型-机制证据-人群分层”形成闭环, 从而将传统经验优势转化为更具可复制性的循证证据。

1.4.2 纳米化技术

当释放结构与临床定位逐步明确后, 制剂创新的重点便由“形式更新”转向“递送增益”, 即围绕关键成分的体内暴露与病灶富集提升生物利用度与靶向作用。近年来, 纳米化技术为提升药物体内暴露量与靶向递送提供了新策略。该技术通过物理粉碎、载体包埋或分子自组装等方式, 将药物加工至 1~1 000 nm 尺度, 从而改善其理化性质与药代动力学行为。该技术主要包括两种: 一种是自身的纳米化, 如纳米混悬液、纳米共晶和超分子水凝胶; 另一种是载体的形式, 如脂质体、纳米颗粒和胶束等^[50]。纳米化不仅可提高溶出度和生物利用度, 还可增强靶向性、调控释放行为并改善制剂稳定性。目前, 中药纳米化研究主要集中于单一活性成分或半合成衍生物(如阿魏酸、丹参酮、黄芩素等), 这

是由于其化学结构明确、理化性质可控，更易形成稳定体系。例如，Padhy等^[51]将水溶性较差的托吡酯-阿魏酸共轭物制备为纳米晶体，不仅显著提高了体外溶出率，还在高脂饮食小鼠模型中表现出优于奥利司他的降脂与抗肥胖效果，表明纳米化可有效增强活性成分的药效输出，为中药单体的精准递送提供了代表性范例。

1.4.3 人工智能辅助药物递送

尽管单体药物纳米化已取得大量进展，但对于血府逐瘀这类多成分复方制剂而言，整体纳米化仍受限于成分复杂、相互作用不明和体系稳定性不足等挑战。随着其关键药效成分(如阿魏酸、芍药苷、羟基红花黄色素A)逐步明确，AI将在纳米制剂开发中发挥更重要的作用。一方面，纳米制剂性能依赖粒径、Zeta电位、载药量等多参数协同优化，传统“试错法”效率较低；AI与分子动力学模拟可用于精准预测最佳处方组合。例如，Zhang等^[52]以难溶性药物纳米混悬剂为模型，通过分子动力学模拟动态解析药物与稳定剂间的微观相互作用，精准预测最优处方组合，并经实验证实了其在粒径控制、储存稳定性及溶出性能上的显著优势。该工作为AI(如机器学习结合多尺度模拟)进一步应用于复方多成分共载纳米系统的研发奠定了方法学基础。另一方面，结合患者特征与药代数据构建个性化递送模型，以及设计“多靶点-多载体”协同递送体系(如阿魏酸脂质体+芍药苷缓释纳米粒)，有望在保持复方协同优势的同时，实现增效、控释与减毒的现代化递送目标。

1.5 国内外更认可

中药大品种的国际化的本质是将传统中医药经验体系转译为符合ICH、FDA、EMA等国际标准的现代证据体系，其核心在于质量、机制、药效与疗效四位一体的科学表达。近年来，我国围绕中药大品种国际更认可，持续推进国际标准制定、全过程质量控制、临床证据积累、境外注册探索及上市后风险管理，为中药由区域性经验应用向全球注册体系转化奠定了基础。部分中药品种已在境外注册方面取得阶段性突破，如化湿败毒颗粒获阿联酋批准，板蓝根颗粒获英国药品和健康产品管理局正式审评批准，清肺排毒颗粒在加拿大获批作为非处方药上市并新增流感相关适应症，速效救心丸、清咽滴丸等产品亦获新加坡卫生科学局注册批准。这表明我国中药产品境外注册正由理念推动逐步走向品种落地，而其背后离不开质量标准、临床循证等关键环节的系统支撑。

1.5.1 AI辅助质量新标准

在质量标准方面，应以QbD为基础确定CQAs，并借助AI与PAT构建全过程智能化质控体系，如利用近红外与拉曼光谱在线监测关键工序，结合深度学习模型提升Q-Marker预测准确性，以及通过“物理指纹图谱+机器视觉+LLM”实现传统经验到数据驱动的快速质量判定。上述策略有助于形成“质量设计-过程监控-科学放行”的国际标准化路径，提高批间一致性，并满足国际GMP对数据完整性、可追溯性与透明化的要求。与此同时，我国持续推进中药质量标准体系、全过程质量追溯体系及国际标准转化工作，通过药典标准提升、国际标准申报及智能制造示范等方式，推动中药质量评价由经验型控制向标准化、国际化表达转变。其中《中国药典》英文版的编制与出版，进一步提升了中药质量标准的国际可读性与传播性。此外，通过整合网络药理学、多组学与AI建模技术，还可系统阐明复方“多成分-多靶点-多通路”作用机制，提升相关成果在国际期刊平台上的认可度。

1.5.2 临床评价与药物警戒

在临床循证方面，应开展符合ICHE8、E9要求的多中心、随机、双盲临床试验，并采用国际通用终点指标，构建现代化疗效证据链。近年来，我国持续完善中药临床评价体系，在真实世界研究、多中心临床试验及中西医结合终点评价等方面积累了基础经验，并探索将中医证候分层、人用经验与国际通行统计框架相衔接的证据路径。由中国中医科学院等机构主导建设的国际传统医学临床试验注册平台于2023年2月正式通过世界卫生组织国际临床试验注册平台认证，成为全球首个跨国家和地区的传统医学主题一级注册平台，为中医药临床研究与国际注册规范的衔接提供了重要支撑。在此基础上，可通过分层随机、预设亚组或富集设计，将证候信息纳入国际可接受的统计框架，使中药大品种由“经验有效”走向“循证可证”。而在安全性与药物警戒方面，国际注册更强调全生命周期风险管理。除临床试验中系统收集不良事件外，还应建立与国际一致的编码与报告体系，并形成中药制剂上市后的风险管理计划-持续获益-风险评估机制。对于潜在不良反应或长期用药风险，可通过注册后研究与

真实世界数据补充证据，建立全球化的信号检测与风险沟通机制。AI 在此更多被视为提升数据整合与研究效率的辅助工具，而非证据本身，其价值主要体现在临床与质量数据的结构化管理、文献证据整合及信号识别等方面。总体而言，中药大品种的国际ization正由单一标准对接转向基于 ICH 原则的系统化证据构建路径；唯有在质量一致性、机制阐释、临床验证与风险管理等方面形成完整且可复核的证据闭环，方能实现由区域经验体系向全球注册体系的平稳过渡，这一体系中 AI 对各环节的赋能逻辑如图 5 所示。

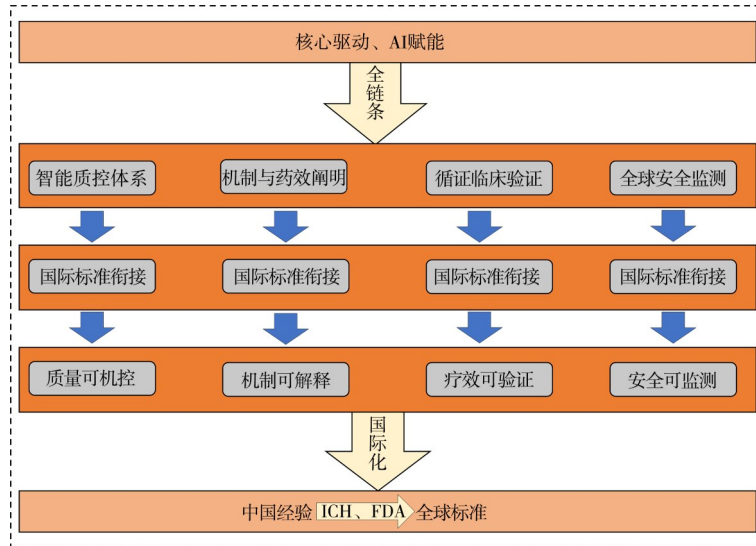


图 5 基于 AI 赋能的中药大品种国际化全链条质量升级实施路径

Fig. 5 Implementation path of quality upgrading of the whole chain of internationalization of large varieties of traditional Chinese medicine based on AI empowerment

2 相关思考

中药制剂的质量形成并非由单一环节决定，而是贯穿原料获取、生产过程控制与终产品评价的系统性结果。相较于仅聚焦某一技术或单一阶段的质量管理模式，构建覆盖“原料-过程-产品”的全程质量体系，更有助于应对中药复方成分复杂、工艺波动显著及质量一致性保障困难等问题。如图 6 所示，原料端通过多维表征实现真伪识别与质量评价，过程端通过在线感知与建模实现动态调控，产品端通过多维质量特征实现一致性评价，三者共同构成从源头到终点的质量控制闭环。

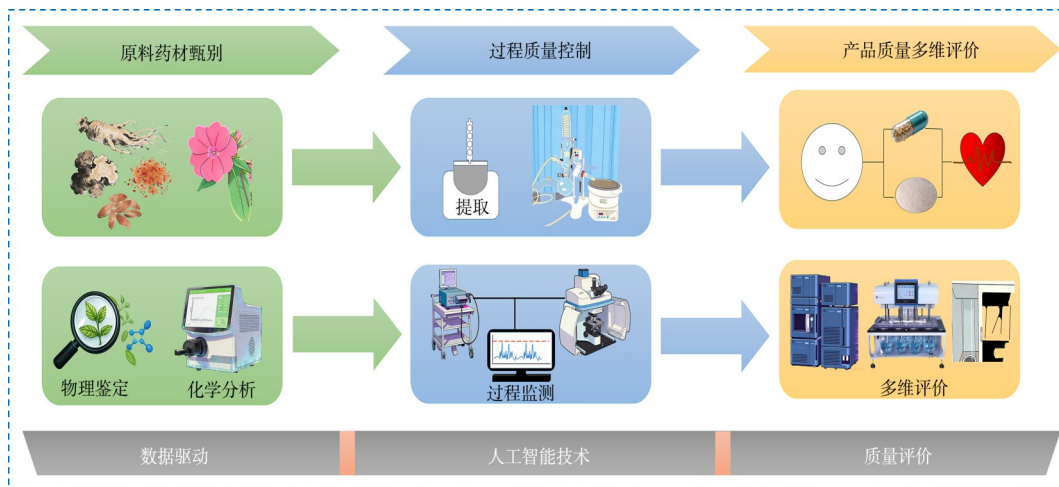


图 6 中药制剂“原料-过程-产品”全程质量体系

Fig. 6 Chinese medicine preparation “raw material-process-product” whole process quality system

2.1 原料药材甄选：从经验判别到多维可量化表征

原料药材是中药制剂质量形成的起点，其质量差异直接影响后续工艺稳定性与制剂批间一致性。

然而，受产地、品种、采收季节及加工方式等因素影响，中药材天然变异显著，传统依赖性状鉴别或单一成分限量的评价方式，难以全面反映其内在质量。未来的原料药材甄选应由“经验驱动”转向“多维数据支撑”，通过整合化学成分特征、物理属性指标及生物效应信息，构建可量化、可比较的原料质量画像。一方面，可借助指纹图谱、光谱技术等手段表征原料整体化学特征，降低对单一指标的依赖；另一方面，可结合多批次数据分析与统计建模，识别影响制剂质量的关键原料属性，为原料分级使用与工艺参数匹配提供依据。由此，原料药材甄选不再局限于“合格与否”的判断，而成为全程质量体系中的前移控制环节。

2.2 过程质量控制：构建可感知、可预测的生产过程

中药制剂生产过程工艺环节多、参数耦合复杂，是质量波动与风险累积的主要阶段。传统以终产品检验为核心的控制模式，往往难以及时发现过程偏差，也难以满足连续化、规模化生产需求。面向全程质量体系，过程质量控制应强调关键过程信息的实时感知与动态调控。通过在提取、浓缩、混合、成型等关键节点引入PAT与数据建模方法，实现对关键质量属性的在线或近线监测，使质量控制由“事后纠偏”转向“过程内建”。更重要的是，过程控制不应孤立开展，而应与原料质量信息联动：通过建立“原料属性-工艺参数-质量结果”关联模型，使工艺条件能够根据原料差异进行自适应调整，从而提升生产过程的稳健性与可复制性。

2.3 产品质量多维评价：由单一合格判定迈向整体质量综合评价

制剂的质量评价是全程质量体系的落脚点，也是中药制剂实现国际认可的重要环节。面对中药复方成分复杂、作用整体性的特点，单一成分限量或传统质量指标难以全面反映产品真实质量水平。制剂质量评价需由“单维指标”向“多维特征刻画”转变，通过综合考量化学组成特征、物理属性状态、安全性与稳定性表现，构建能够反映整体质量的评价体系。多维质量评价不仅关注“是否合格”，更强调不同批次、不同工艺条件下产品质量的一致性与可比性。通过对多维质量数据的系统整合与分析，可实现产品质量的分级管理与风险识别，为临床使用、安全监管及国际交流提供更具说服力的质量证据。

3 结论与展望

本文以血府逐瘀制剂为典型范式，围绕质量可控、机制明确、药效清楚、疗效突出、国际认可5大核心维度展开中药大品种二次开发技术体系构建。质量控制上，融合过程分析技术、质量源于设计理念与多维指纹图谱，结合人工智能与LLM打造全链条智能质控体系；机制解析依托网络药理学、多组学技术与AI计算模拟，实现“成分-靶点-通路-疾病”的系统阐释；药效研究通过色谱-质谱联用技术解析物质基础，结合AI完成成分与药效的精准映射；疗效提升聚焦制剂溶出特性还原、临床循证验证与纳米化等递送技术创新；国际认可则通过对接ICH、FDA等国际标准，构建质量、机制、药效、疗效四位一体的科学证据体系，实现传统经验向现代标准的转译。

未来中药大品种二次开发将以人工智能为核心牵引，重点突破3大方向：一是构建覆盖“成分-组学-工艺-质量-临床”的统一中药大模型与数据库，提升AI在机制推演、智能质控中的维度与精度；二是深化过程分析技术、质量源于设计理念与AI的协同创新，开发低成本、可推广的智能检测设备，实现生产全链条的数字化与可视化；三是强化真实世界数据驱动的循证体系建设，进一步对接国际药品监管标准，同时探索类器官、器官芯片与AI融合的药效评价技术，推动中药大品种从“经验药”向“精准药、国际化药”跨越，实现中医药传统优势与现代科学表达的深度融合。

参考文献：

- [1] China Association of Chinese Medicine. *J. Tradit. Chin. Med.* (中华中医药学会. 中医杂志), 2022, 63(14): 1301-1312.
- [2] Wu Y B, Xie H, Wang J Y, Xiao K P, Pan X Y, Yang H J, Zhao H L, Qu J L. *Chin. J. Ethnomed. Ethnopharm.* (武运邦, 谢红, 王金义, 肖开苹, 潘欣阳, 杨郁捷, 赵惠亮, 渠景连. 中国民族民间医药), 2020, 29(17): 11-16.

- [3] The State Council of the People's Republic of China. Notice of the State Council on Issuing the Outline of the Strategic Plan for the Development of Traditional Chinese Medicine (2016–2030). (中华人民共和国国务院. 国务院关于印发中医药发展战略规划纲要(2016–2030年)的通知). [2026–01–08]. https://www.gov.cn/zhengce/content/2016-02/26/content_5046678.htm.
- [4] China Traditional Chinese Medicine Network. Tianjin Issued a Document to Promote the High-quality Development of the Traditional Chinese Medicine Industry—Start the Implementation of the Second Development of Large Varieties of Traditional Chinese Medicine Version 2.0. (中国中医药网. 天津发文推动中医药产业高质量发展—启动实施中药大品种二次开发2.0版). [2026–01–28]. <https://www.cntcm.com.cn/content/202401/10/c240672.html>.
- [5] Guo Q, Li M X, Dou H, Zhu W H, Zheng Y Y, Yu H R, Dong W H, Nie X R, Liang Y H, Li L Q, Wan X, Mei X, Li Y, Ji D, Lu T L. *China J. Chin. Mater. Med.* (郭强, 李铭轩, 窦慧, 朱文虹, 郑阳阳, 余荷蓉, 董文浩, 聂心如, 梁云昊, 李良全, 万欣, 梅茜, 李昱, 季德, 陆兔林. 中国中药杂志), **2025**, 50(21): 5905–5914.
- [6] Guan Y M, Liu L L, Yang M, Zheng Q, Wu Z F, Wang D F, Wu Y M, Zhong G D, Zang Z Z. *Chin. Tradit. Herb. Drugs*(管咏梅, 刘乐灵, 杨明, 郑琴, 伍振峰, 王丹凤, 吴样明, 钟光德, 臧振中. 中草药), **2026**, 57(2): 767–777.
- [7] Wu S J, Zhang X Y, Guo S B, Zhou G F, Chen W, Li W L. *J. Instrum. Anal.* (吴思俊, 张晓阳, 郭抒博, 周桂芳, 陈伟, 李文龙. 分析测试学报), **2023**, 42(8): 1012–1025.
- [8] Liang X J, Wang Y N, Ma J F, Sun P, Guo T, Yan S K, Xiao X. *J. Instrum. Anal.* (梁小娟, 王娅妮, 马晋芳, 孙鹏, 郭拓, 严诗楷, 肖雪. 分析测试学报), **2023**, 42(3): 307–314.
- [9] Zhu W F, Shen Y, Deng P, Fei Y C, Xiao Z Q, Zhong Z J. *China J. Chin. Mater. Med.* (朱卫丰, 沈玉, 邓攀, 费翼城, 肖志强, 钟志坚. 中国中药杂志), **2024**, 49(9): 2299–2307.
- [10] Jiang X G, Ge K, Liu Z, Chen N, Ouyang A G, Liu Y D, Huang Y Y, Li J H, Hu M M. *Chem. Biol. Technol. Agric.*, **2024**, 11(1): 63.
- [11] Wang X, Yang Y L, Sha X, Song W, Zhang Y, Yu H S, Li Z, Li W L. *J. Instrum. Anal.* (王玺, 杨应莲, 沙鑫, 宋纹, 张营, 余河水, 李正, 李文龙. 分析测试学报), **2024**, 43(11): 1821–1828.
- [12] Wang X, Fang G P, Qian J H, Zhang S L, Song W, Zhang Y, Li Z, Wang Y, Li W L. *New J. Chem.*, **2025**, 49(6): 2116–2128.
- [13] Xiang L, Jia J J, Mao X T, Liu X T, Niu M S, Tu T Y, Wu M X, She Y B, Wang S T, Shen C H. *J. Instrum. Anal.* (向玲, 贾俊杰, 毛雪婷, 刘晓彤, 牛曼思, 屠婷瑶, 吴美霞, 余远斌, 王松涛, 沈才洪. 分析测试学报), **2026**, 45(1): 77–87.
- [14] Ren X D, Luo X, Feng H, Zhong Y Q, Yin X Y. *Chin. J. New Drugs*(任小丹, 罗香, 冯会, 衷友泉, 尹小英. 中国新药杂志), **2015**, 24(16): 1851–1855.
- [15] Chen W W, Lin J, Chen R, Feng S Y, Yu Y, Lin D, Shi H, Huang H. *Spectrosc. Spectral Anal.* (陈伟炜, 林佳, 陈荣, 冯尚源, 俞允, 林多, 施红, 黄浩. 光谱学与光谱分析), **2016**, 36(12): 3963–3967.
- [16] Li M, Li J, Zhang X B. *West. J. Tradit. Chin. Med.* (李梦, 李静, 张小波. 西部中医药), **2021**, 34(10): 149–153.
- [17] Xiao D, Yu P, Guo X, Luan M Q, Li F Y, Yang J, Zhou J H. *J. Instrum. Anal.* (肖丹, 于苹, 郭雪, 栾美琪, 李飞羽, 杨健, 周骏辉. 分析测试学报), **2026**, 45(3): 591–599.
- [18] Zheng J, Ru C L, Zhang L, Yin W J, Zhang H, Yan J Z. *China J. Chin. Mater. Med.* (郑洁, 茹晨雷, 张璐, 殷文俊, 张慧, 颜继忠. 中国中药杂志), **2021**, 46(10): 2571–2577.
- [19] Xiao Z F, Wang J L, Han L, Guo S B, Cui Q H. *Fronti. Nutr.*, **2022**, 9: 888245.
- [20] Sha X, Chang H, Song W, Yu H S, Li Z, Li W L. *J. Instrum. Anal.* (沙鑫, 常溟, 宋纹, 余河水, 李正, 李文龙. 分析测试学报), **2026**, 45(6): 1212–1220.
- [21] Liu Y J, Wang Y J, Deng L L, Zhao X Y, Guo Z Y, Wu Q. *Mod. Chin. Med.* (刘玉娟, 王永洁, 邓莉莉, 赵馨雨, 郭子右, 吴清. 中国现代中药), **2022**, 24(3): 523–528.
- [22] Wang L, Yang Y L, Yan Z X, Fan M M, Wu W G, Chen W, Zhou G F, Li W L. *J. Instrum. Anal.* (王龙, 杨应莲, 闫子轩, 范荫荫, 吴卫刚, 陈伟, 周桂芳, 李文龙. 分析测试学报), **2024**, 43(11): 1675–1686.
- [23] Li Y Y, Zhou W L, Hou Y S, Zhao L X, Xu C Y, Ma C, Liu B, Dai W D, He Y, Hu H L. *Chin. Tradit. Herb. Drugs*(李燕燕, 周玮玲, 侯寓森, 赵淋仙, 徐纯艺, 马川, 刘兵, 代文东, 何瑶, 胡慧玲. 中草药), **2023**, 54(11): 3489–3500.
- [24] Wang X, He M L, He C Z, Yu H S, Song W, Zhang Y, Wang Y F, Li Z, Li W L. *Chin. Tradit. Herb. Drugs*(王玺, 贺木兰, 何成峙, 余河水, 宋纹, 张营, 王跃飞, 李正, 李文龙. 中草药), **2024**, 55(8): 2571–2578.
- [25] Li Z, Cheng N T, Zhao X P, Tao Y, Xue Q L, Gong X C, Yu Y, Zhu J Q, Wang Y. *China J. Chin. Mater. Med.* (李正, 程宁涛, 赵筱萍, 陶益, 薛启隆, 龚行楚, 于洋, 朱捷强, 王毅. 中国中药杂志), **2025**, 50(12): 3197–3203.
- [26] Hao N, Ping J C, Wang X, Sha X, Wang Y S, Miao P Q, Liu C Q, Li W L. *Spectrochim. Acta A*, **2024**, 320: 124590.
- [27] Gao L, Zhong L, Feng T T, Yue J N, Lu Q Q, Li L, Wu A L, Lin G M, He Q X, Liu K C, Cao G Y, Meng Z Q, Nie L, Zang H C. *Talanta*, **2025**, 287: 127627.

- [28] Nie W N, Qian J H, Li C H, Zhang S L, Li W L. *J. Chromatogr. A*, **2025**, 1748: 465874.
- [29] Liu D L, Gao L L, Cui Z H, Zhou J, Zang H C, Huang P L. *Spectrochim. Acta A*, **2025**, 339: 126293.
- [30] Zhao Y W, Li Z Y, Liu Y D, Li Z, Wang H X. *J. Instrum. Anal.* (赵增文, 李芷瑶, 刘艺丹, 李正, 王海霞. 分析测试学报), **2024**, 43(11): 1725-1734.
- [31] Li W Z, Li W C, Zheng Z J, Song S S. *Chin. Tradit. Pat. Med.* (李万忠, 李望晨, 郑增娟, 宋双双. 中成药), **2011**, 33(9): 1623-1625.
- [32] Wan X, Bao R, Mao H L, Wang Z F, Yan H L. *J. Instrum. Anal.* (万萧, 保瑞, 毛海龙, 王泽峰, 闫鸿丽. 分析测试学报), **2026**, 45(2): 390-397.
- [33] Cao W X, Zhang X, Yang H, Li X X, Li W, Chi X Y, Zhao Y X, Du G H, Wang J H. *Acta Pharm. Sin.* (曹婉昕, 张旭, 杨红, 李晓雪, 李婉, 迟湘胤, 赵宇轩, 杜冠华, 王金华. 药学学报), **2026**, 61(2): 356-364.
- [34] He M L, Wang X, He C Z, Yu H S, Song W, Zhang Y, Wang Y F, Li Z, Li W L. *Chin. Tradit. Herb. Drugs* (贺木兰, 王玺, 何成峙, 余河水, 宋纹, 张营, 王跃飞, 李正, 李文龙. 中草药), **2024**, 55(11): 3886-3897.
- [35] Qian H, Chen B B, Zhang M, Zeng S J, Jia Z Z, Wang S, Gao S, Shi A H, Xie J. *Medicine*, **2025**, 104(1): e41154.
- [36] Han C, Wang F L, Zhang X J, Zhao Y S, Jiang Y X, Dai X D. *North. Hortic.* (韩闯, 王凤利, 张晓佳, 赵彦妹, 姜雨欣, 戴肖东. 北方园艺), **2026**, (4): 162-168.
- [37] Wang X. *Clinical and Mechanism Research of Xuefu Zhuyu Capsule in the Treatment of Qi Stagnation and Blood Stasis Syndrome of Coronary Heart Disease with Angina Pectoris Based on Transcriptomics*. Tianjin: Tianjin University of Traditional Chinese Medicine (王旭. 从转录组学角度探讨血府逐瘀胶囊治疗冠心病心绞痛气滞血瘀证的临床和机制研究. 天津: 天津中医药大学), **2022**.
- [38] Yao Y L, Nan D H, Kang R F, Yang F D. *Nat. Prod. Res. Dev.* (姚昱吏, 南丹慧, 康荣峰, 杨扶德. 天然产物研究与开发), **2025**. <https://link.cnki.net/urlid/51.1335.Q.20251009.1001.002>.
- [39] Ma M. *Mechanism of Xuefu Zhuyu Capsule on Patients with Coronary Heart Disease with Angina Pectoris of Qi Stagnation and Blood Stasis Syndrome Based on Gut Microbiota and Urine Metabolo*. Tianjin: Tianjin University of Traditional Chinese Medicine (马梅. 基于肠道菌群和尿液代谢组学探讨血府逐瘀胶囊治疗冠心病心绞痛气滞血瘀证患者的作用机制研究. 天津: 天津中医药大学), **2023**.
- [40] Niu Y Q, Jiang T, Qin X M, Wang B B, Tian J S, Gao Y. *Chin. Tradit. Herb. Drugs* (牛永强, 江涛, 秦雪梅, 王波波, 田俊生, 高耀. 中草药), **2025**, 56(23): 8816-8824.
- [41] Liu M H, Cheng X, Zhao M Z, Wei Q, Zhang D M. *Chin. J. Exp. Tradit. Med. Formulae* (刘梦华, 程序, 赵梦竹, 魏琼, 张冬梅. 中国实验方剂学杂志), **2024**, 30(12): 54-61.
- [42] Tian X C, Chi H Y, Liu X Y, Zhang Z H, Li Z M, Yi S Q, Qiu Q. *Curr. Pharm. Des.*, **2025**, 32(6): 467-486.
- [43] Abdollahi S, Raissi H, Farzad F. *Sci. Rep.*, **2024**, 14(1): 17386.
- [44] Latham A P, Levy E S, Sellers B D, Leung D H. *Pharmaceutics*, **2024**, 16(1): 50.
- [45] Guo M X, Zeng J Q, Xu S, Wu X, Hu Z Q, Wang X P, Wang L L. *Biom. Chromatogr. BMC*, **2025**, 39(8): e70160.
- [46] Du L L, Zhang Z H, Liu M Y, Zhu X F, Su G L, Chen S S, Li C Y, Wang J X. *Curr. Comput.-Aided Drug Des.*, **2025**, 22(4): 282-302.
- [47] Xie X R, Yang X X, Shen H L, Lin L. *J. Chin. Mass Spectrom. Soc.* (谢欣然, 杨晓霞, 中华莉, 林灵. 质谱学报), **2025**, 47(3): 361-379.
- [48] Xu X M, Gan Z Q, Li R Q, Xu T, Fan G, Ai Y J, Meng X L, Liang Q L, Zhang Y. *Chin. Tradit. Herb. Drugs* (徐鑫梅, 干志强, 李睿琪, 徐僮, 范刚, 艾永建, 孟宪丽, 梁琼麟, 张艺. 中草药), **2026**, 57(1): 1-12.
- [49] Wang Y, Wang J, Lv W, Chen H, Yang Q, Zhang Y, Guo R, Ma X L, Zhang Q Y. *World J. Psychiatry*, **2024**, 14(6): 857.
- [50] Zang Z Y, Zhang Y Z, Zhao Y H, Tan X R, Wei J C, Xu A Q, Duan H F, Zhang H Y, Wang P L, Huang X M, Lei H M. *Acta Pharm. Sin.* (臧子叶, 张瑶芝, 赵一航, 谭心如, 魏吉昌, 徐安琪, 段鸿飞, 张红妍, 王鹏龙, 黄雪梅, 雷海民. 药学学报), **2024**, 59(4): 908-917.
- [51] Padhy I, Banerjee B, Kar B, Mohapatra S, Sharma T. *J. Pharm. Sci.*, **2025**, 114(12): 104022.
- [52] Zhang X Y, Zhang Y, Jia C L, Li C H, Li W L. *Int. J. Pharm.*, **2025**, 681: 125860.

(责任编辑: 盛文彦)