

· 方药研究 ·

DOI: 10.26946/j.cnki.1000-3649.sczy.2510090002

中药复方主效应指标体系预测模型的构建研究

尚静^{1,2,3}, 刘国秀^{1,2,4}, 刘朔^{1,2,3}, 谭佳琦^{1,2,3}, 南程⁴, 翟华强^{1,2,3,△}

(1. 北京中医药大学中药学院, 北京 100029; 2. 北京中医药大学中药调剂标准化研究中心, 北京 100029;
3. 北京中医药大学中药监管科学研究院, 北京 100029; 4. 北京东华原医疗设备有限责任公司, 北京 102299)

摘要: **目的** 对于中药汤剂质量控制体系中指标成分及关键评价标准尚未完善的现状, 本研究旨在探索中药复方主效应中药及其质控成分的快速预测方法, 为中药汤剂质量控制提供科学依据。**方法** 以2025版《中国药典》中示例中成药(含附子类、含苦杏仁类、口服液类)标准为参照, 通过结构化数据提取、整理与Python数据处理, 整合处方、中药饮片功能主治、饮片最大用量、饮片质控成分、中药化学成分、成分-靶点对应关系、靶点相互作用七大类数据, 构建“证候君药-剂量最大药-网络靶点核心药”三结合的中药复方主效应指标体系预测模型。**结果** 中药复方主效应指标体系预测数据库包含217个中成药处方(包含402药味)、775个饮片的功效主治与最大用量、396个药典质控成分、499个中药、10015个成分、312258个靶点、1209534条靶点相互作用关系。通过与药典指标中药匹配度分析, 网络靶点核心药匹配度55.8%, 剂量最大药匹配度27.6%, 证候君药匹配度18.9%, 三种方法结合之后的匹配度69.1%。**结论** 本研究构建的三结合中药复方主效应指标体系预测模型融合传统君药理论、现代靶点生物学及指标成分质控思想, 可实现复方主效应中药的高效预测, 快速筛选中药汤剂核心质控成分, 为中药汤剂有效性评价与质量控制体系提供创新模式。

关键词: 中药汤剂; 质量评价; 主效应; 指标体系; 网络药理学

中图分类号: R289 文献标志码: A 文章编号: 1000-3649(2026)02-0101-14

Research on the construction of a predictive model for the main effect index system of traditional Chinese medicine compound prescriptions

SHANG Jing^{1,2,3}, LIU Guoxiu^{1,2,4}, LIU Shuo^{1,2,3}, TAN Jiaqi^{1,2,3}, NAN Cheng⁴, ZHAI Huaqiang^{1,2,3,△}

(1. School of Traditional Chinese Medicine, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 100029, China;
2. Research Centre for Standardization of Chinese Medicine Dispensing, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 100029, China; 3. Research Institute of Chinese Medicine Regulation, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 100029, China; 4. Beijing Dong huayuan Medical Equipment Company Limited, Beijing 102299, China)

Abstract: Objective As to the current situation where the quality control system for Chinese medicine decoctions lacks comprehensive standards for key components and evaluation criteria, this study aims to explore rapid prediction methods for the main active ingredients and quality control components of Chinese medicine decoctions, thereby providing a scientific basis for the quality control of Chinese medicine decoctions. **Methods** Using the standard examples of Chinese patent medicines including Aconite preparations (Fuzi), bitter almonds preparations (Kuxingren) and oral liquid preparations from the *Chinese Pharmacopoeia* 2025 Edition as references, data extraction, structural organization, and Python coding were employed to integrate seven major categories of data related to Chinese medicine decoctions. These categories include prescriptions, functions and indications of Chinese herbal pieces, maximum dosages of Chinese herbal pieces, quality control components of Chinese herbal pieces, all components of traditional Chinese medicines, corresponding targets of Chinese medicine components, and interactions between targets. This integration was used to construct a predictive model for the main effect indicator system of traditional Chinese medicine compounds, combining syndrome monarch herb, maximum dosage herb, and network target core herb. **Results** The prediction knowledge base

基金项目: 科技部国家级外专项目(G2022110004L); 数字中医药试点项目(szyysd-2025-04)。

第一作者: 尚静, 硕士, 研究方向: 中药调剂标准化研究, E-mail: sj010907@163.com。

△通讯作者: 翟华强, 博士, 教授, 博士研究生导师, 主任医师, 研究方向: 中医药标准化与中药调剂, E-mail: jz711@qq.com。

引用格式: 尚静, 刘国秀, 刘朔, 等. 中药复方主效应指标体系预测模型的构建研究[J]. 四川中医, 2026, 44(2): 101-114.

for the main effect index components of Chinese medicine decoctions has brought together 217 Chinese patent medicine prescriptions (including 402 medicinal herbs), 775 Chinese herbal pieces with their efficacy, indications and maximum dosage, 396 pharmacopoeia quality control components, 499 traditional Chinese medicines, 10, 015 components, 312, 258 targets, and 1, 209, 534 target interactions. Through analyzing matching degree with Chinese pharmacopoeia index Chinese medicines, the matching degree of the core network target herb is 55.8%, the matching degree of core dosage herb is 27.6%, and the matching degree of core syndrome herb is 18.9%, with a combined matching degree of 69.1%.

Conclusion The three-in-one predictive model of the main effect index system for Chinese medicine decoctions constructed by the research integrates the traditional Jun Yao (Monarch medicinal) theory, the modern core role of biological target networks and quality control of index components principles, enabling swift and precise prediction of main effect Chinese medicines and rapid screening of core quality control components in the compound Chinese medicine decoctions, offering an innovative framework for efficacy evaluation and quality control of Chinese medicine decoctions.

Keywords: Chinese medicine decoctions; Quality evaluation; Main effect; Index system; Network pharmacology

中药复方通过多成分^[1]、多靶点、多途径的整体调节作用防治疾病。研究表明,人参-茯苓-白术复方通过激素信号传导、IL-17 信号通路以及 cAMP 信号通路多靶点抑制胃癌进展^[2], 还有诸多中药复方从多个分子机制: 包括诱导大肠癌细胞的凋亡坏死, 抑制大肠癌细胞的增殖, 减轻化疗药物的损伤, 诱导调节大肠癌的体内微环境, 以及减缓癌组织的发展等治疗肠癌^[3], 亦或是中药复方药物作用于如病毒侵入、病毒增殖、系统免疫反应、过度炎症反应、肺组织细胞凋亡等多个流感的病理环节^[4], 均体现了中药复方对复杂疾病网络进行协同干预的整体治疗优势。然而, 中药复方化学成分极其复杂, 药效物质基础与作用机制尚未完全阐明, 其整体效应的^[5]科学评价一直是制约中药现代化、标准化和国际化的关键瓶颈。现有中药汤剂质量大部分指标依赖于经验判别, 指标未能体现汤剂作为“药品”的有效性、安全性以及稳定性。且由于中药饮片来源、加工、储存等环节质量控制环节多, 个性化煎煮容易导致传统汤剂的质量均一性差、药效不稳定。

有学者对中药汤剂的颜色、气味、煎液量等性状指标, pH 值、出膏率、转移率等物性参数, 指标成分含量等进行表征^[6-9]。但受中药组方随机化的影响, 患者个人代煎的中药汤剂不能使用统一的检测条件进行质量评价。构建快速确定汤剂主效应指标成分的预测工具^[10], 有望缩小中药汤剂的检测目标。

中药复方的主要效应指标确认, 传统理论认为复方中“君药”是发挥主要疗效的药物^[11-13]; 现代网络药理学理论认为, 复方中作用于疾病核心靶点的核心中药是发挥主要疗效的中药^[14-16]; 中药标准均以《中国药典》^[17]为参照, 将中药的指标性成

分作为中药效应的质量控制代表。且随着人工智能 (Artificial intelligence, AI) 技术的飞速发展, 基于大数据和机器学习的预测模型^[18,19]在药物发现、活性预测等领域展现出强大潜力, 将这类预测模型引入中药复方研究, 可为复方作用机制阐释提供新工具。

本研究提出“证候君药-剂量最大药-网络靶点核心药”三结合的中药汤剂主效应指标体系预测模型, 利用中药复方大数据, 快速标定中药汤剂发挥主要效应的指标体系, 为临床中药汤剂质量快速检测提供科学依据。

1 知识库数据来源

研究选择示例饮片附子 (先煎代表)、苦杏仁 (后下代表) 相关中成药与所有口服液 (与汤剂相近的剂型) 中成药的处方作为预测处方集合。选择 2025 版《中国药典》^[20]作为中药功效、主治、最大剂量、质控成分的提取资料。中药的成分、靶点信息提取自开源数据平台 TCMSP (Traditional Chinese medicine systems pharmacology database and analysis platform, <http://tcmospw.com/tcmosp.php>)。人类靶点之间相互作用数据 (PPIs) 提取自开源数据平台 IID (Integrated interactions database, <https://ophid.utoronto.ca/iid/>)^[21]。

2 知识库数据训练过程与方法

2.1 训练数据集结构与数据规范化加工

2.1.1 中药示例处方库数据集 使用 Excel 表, 从 2025 版《中国药典》中提取符合以下任一条件的成药标准内容: ①处方含附子或苦杏仁; ②剂型为口服液。需提取的核心信息项包括: 功能、主治、处方组成及质控成分。将提取后的数据进行以下规范化处理: ①饮片炮制规格整理成药材名称; ②中药提取物、中药单体成分按照饮片含量换算为等效剂

量的饮片量；③中成药功能与主治拆分为功能、主治两列；④处方组成拆分成中药名、剂量、单位并在 Excel 表中逐列分布。

2.1.2 中药饮片信息库数据集 采用 Excel 表，对 2025 版《中国药典》中收录的饮片标准按照功效、主治、规定最大剂量、质控成分提取信息。将提取后的数据进行规范化处理：①规范药材名称与饮片名称；②规范饮片的功效、主治内容。

2.1.3 中药成分、靶点作用库数据集 采用 Excel 表，在 TCMSP 平台，按照平台建议的“OB ≥20%，DL ≥0.1”^[22] 条件筛选平台上收录中药的化学成分，并提取成分对应的作用靶点信息。利用 Uniprot 开源信息，将 TCMSP 平台靶点名称转换为对应的基因名称。

2.1.4 靶点-靶点相互作用关系 (PPIs) 数据集 在 IID 数据平台下载人类 human (H. sapiens) 物种的 PPIs，提取其中 symbol1、symbol2 两列数据。

2.2 中药汤剂主成分群效应预测知识库 python 实现

2.2.1 处方证候君药判定

2.2.1.1 判别根据 方内针对复方证候最匹配的药。

2.2.1.2 判别方法 通过分词与相似度算法计算，匹配饮片的功效与中成药的功能，匹配饮片的主治与中成药的主治，赋予功能、主治各一半权重，整理处方中与方剂相似度最大的中药。

2.2.1.3 算法选择 饮片功效及主治与中成药功效及主治的相似度评价需要采用针对中文语义的相关算法进行处理。在自然语言处理中，文本相似度计算用于度量不同文本之间所表达的语义的相似程度，处理过程包括分词处理、文本相似度模型与相似度计算。

(1) 分词处理技术：在自然语言处理技术中，分词是理解语义的第一步，目前分词方法包括词典字符串匹配分词法、基于语义理解的分词法、基于统计的分词方法等^[23]。通过集成以上三种分词策略，可以有效提升分词工具的准确性与适应性。Python 中的分词工具为结巴 (jieba) 分词，是将词典和统计分词方法结合起来的分词工具，基于隐马尔可夫模型算法 (Hidden Markov Model, HMM)，可实现中文的分词、关键词提取、词位置查询等^[24]。

(2) 文本相似度模型：文本相似度模型是将文本数据嵌入向量空间中，度量不同文本之间向量距离进而体现自然语言所表达语义的相似程

度。常用的文本相似度模型包括词频-逆文档频率 (Term frequency-inverse document frequency, TF-IDF) 模型、产生词向量的相关模型 (Word to vector, Word2Vec) 等^[25]。TF-IDF 是 Salton 等^[26] 人于 1973 年提出。其核心思想是在一段文字中，若该词出现的次数较多，但在整个语料库中出现的次数较低，则该词语的 TF-IDF 值也会较大，同时在区分该词所在的文本和文本集合中的其他文本的能力也较强。Word2Vec 算法是 google 公司 Tomas Mikolov 团队^[27] 开发的语言相似度模型，通过 Skip-gram 模型计算，通过组合单词向量来表示句子意义，捕获了大量精确的语法和语义词关系。有研究者根据文本复杂特征，优化了跨语言文本相似度模型^[28]、多模型加权组合的文本相似度计算模型^[29] 等，增加了相似度模型适用性。

(3) 相似度计算方法：在实现分词预处理、模型选择后，需要对向量进行相似度计算，常用的相似度计算方法包括向量点乘法、Jaccard 系数法、Dice 系数法、余弦系数法等^[30]。本研究参考以往中文文本相似度计算方法^[31]，选择余弦系数法，计算向量之间夹角的余弦值，余弦值与文本之间的相似度呈正相关。

2.2.1.4 权重分配 在中医方剂学“理法方药”一体的理论框架下，方剂的“功效”与“主治”是其核心作用的两个密不可分、互为表里的维度，共同构成“方证对应”的完整表达。功能阐述其治疗方向与作用机制，主治则明确其具体的适应症候，二者缺一不可。因此，在通过自然语言处理技术匹配单味药与复方整体的相似度时，为使计算模型更符合中医整体观念与辨证论治的逻辑，本研究采用功能与主治并重的评价策略，将二者在综合相似度计算中的权重均设定为 50%。

2.2.2 处方剂量最大药判定

2.2.2.1 判别根据 方内相对有效药量最大之药。

2.2.2.2 判别方法公式 参考文献中“最大值相对药量最大选择法”^[32]，设 X 为任一成方或临证处方，由一组药物 x_i ($i=1, 2, \dots, n$) 构成。方中每药的最大药量为 d_{mi} ，即《中国药典》中所标定该药内服最大用量；用 d_{ai} 表示实际药量，即成方所用药量。引入相对有效药量概念，用 d_{di} 表示，按照公式 (1) 定义：

$$d_{di} = \frac{d_{ai}}{d_{mi}} \quad (1)$$

设 X_k 为 X_i 中任一药物, d_{dk} 为 X_k ($k=i=1, 2, \dots, n$) 之相对有效药量, 若有公式 (2) 成立, 则 X_k 为剂量最大药, 记为 $A=X_k$ 。

$$d_{dk} = \max_{i=1}^n d_{di} \quad (2)$$

2.2.3 复方药物核心靶点作用药判定

2.2.3.1 判别依据 处方内核心作用靶点关联数前 3 的中药 (按关联数量排序)。

2.2.3.2 实现步骤 ①读取示例中成药处方, 查找其中的药名; ②利用第一步查找到的每一个药名, 汇集所有成分; ③利用成分汇集所有靶点集合; ④利用靶点相互作用数据库, 输出目标集合靶点的相互作用; ⑤对靶点的相互作用进行中心性计算, 提取中心性前 100 的 PPI, 得到新的靶点集合; ⑥利用核心靶点返回“成分-靶点库”中找对应的成分; ⑦返回在处方所有中药中, 找到核心作用中药; ⑧输出排序前 3 的核心作用中药。

2.3 主效应中药预测结果与《中国药典》标准对比分析

将 2.2.1~2.2.3 步骤所预测的结果与示例中成药的药典指标中药标准进行对比, 分析主效应中药预测方法的最优组合。

3 模型训练结果

3.1 知识库的基本数据集情况

研究构建了中成药处方-中药饮片库、中药饮片-功效主治库、中药饮片-最大用量库、中药饮片-质控成分库、中药-所有成分库、成分-靶点库、靶点-靶点相互作用 (PPIs) 库共 7 个数据关系库, 关联 7 类数据关系。药典中成药与饮片数据删除重复名称后包含 217 个中成药处方 (药味包含 402 味)、775 个饮片 (含药典不同炮制品) 的功效主治与最大用量、396 个药典质控成分。中药所有成分库包含 499 个中药、10015 个成分、312258 个靶点。人类 PPIs 库包含 1209534 条靶点相互作用。

3.2 知识库中复方主效应中药预测模型训练结果

3.2.1 处方中证候君药判定结果评价 研究对比了 TF-IDF 模型最大正则优化与不优化条件下输出证候最匹配君药与药典指标中药, 结果表明不优化条件下的匹配性 (41/217, 18.9%, 结果见表 1) 高于最大正则模式下的 TF-IDF 模型 (27/217, 12.4%)。对比了 TF-IDF 模型与 Word2Vec 模型输出证候最匹配君药与药典指标中药, 结果表明 TF-IDF 模型

(41/217, 18.9%) 筛选中药与药典指标的匹配性高于 Word2Vec 模型 (29/217, 13.4%)。

3.2.2 处方中剂量最大药判定结果评价 通过方内相对有效药量计算 (见表 2), 217 个中成药中, 有 60 个中成药的剂量最大药预测结果与药典指标中药一致, 占比 27.6%。在筛选结果中也发现, 含有贵细料药如朱砂 (再造丸)、轻粉 (九圣散)、人工牛黄 (清肺消炎丸)、白矾 (橘红化痰丸) 的中成药处方中, 这些药典用量较小的贵细料药容易被计算为处方相对有效量最大的中药。

3.2.3 处方中网络靶点核心作用药判定结果评价 在复方核心靶点作用中心性计算过程中, 不同的中心性算法会导致中药复方核心中药有所差异, 常用的中心性计算方法包括点度中心性 (Degree centrality)、特征向量中心性 (Eigenvector centrality)、中介中心性 (Betweenness centrality)、接近中心性 (Closeness centrality) 等。在网络药理学研究中, 利用 Cytoscape 等工具构建靶点相互作用网络, 并综合考察节点的度中心性与介数中心性以筛选核心靶点, 是广泛采用的分析策略^[33]。特征向量中心性不仅考虑一个节点的连接数量, 还考虑连接节点的重要性。研究对比了几种中心性计算方法, 结果表明特征向量中心性筛选结果中与药典指标的匹配性 (121/217, 55.8%, 结果见表 3) 高于 degree 与 betweenness 结合模式筛选方法 (104/217, 47.9%)。

3.3 处方中三结合主效应中药预测结果评价

通过复方证候君药、剂量最大药与核心靶点作用药筛选结合, 217 个处方中, 共 150 个处方 (69.1%) 预测结果覆盖药典指标中药。分析预测结果未覆盖药典指标中药的示例中成药处方发现, 11 个处方 (5.1%) 在药典中没有检测指标中药 (结果见表 4), 56 个处方 (25.8%) 在药典中的指标中药与预测结果不一致 (结果见表 5)。

从表 4 可见, 在 (2025 版)《中国药典》中, 尚有部分处方 (以丸剂、散剂、膏剂和酒剂为主) 未建立基于具体质控成分的质量标准, 主效应中药预测结果中多为矿物药、动物药, 由于药味组成复杂或药味难以检测, 质量控制难以实现。三个口服液在中国药典中没有含量检测指标, 但是有薄层定性检验指标, 止嗽定喘口服液的薄层定性检验对照品为麻黄碱、甘草次酸; 化积口服液的薄层定性检验对照品为茯苓、红花、鹤虱对照药材; 柴胡口服液对照品为柴胡对照药材, 以上三个口服液对照品

表1 示例中成药中相似度最大的中药与药典指标中药对比

ID	PID	中成药名称	相似度最大的中药	相似度	药典指标中药
1	3	天麻丸	羌活	0.345	羌活、独活
2	6	乌梅丸	黄连	0.267	黄柏、黄连
3	20	肾康宁胶囊	黄芪	0.342	丹参、黄芪
4	21	肾康宁颗粒	黄芪	0.529	丹参、黄芪
5	25	参附强心丸	大黄	0.171	大黄
6	26	春血安胶囊	黄连	0.229	黄连
7	43	三拗片	苦杏仁	0.199	麻黄、苦杏仁
8	53	止喘灵注射液	洋金花	0.386	麻黄、洋金花
9	57	风寒咳嗽丸	麻黄	0.364	麻黄
10	58	风寒咳嗽颗粒	麻黄	0.341	麻黄
11	66	芪黄通秘软胶囊	何首乌	0.289	何首乌、黄芪
12	84	复方蛤青片	黄芪	0.391	黄芪
13	109	葶贝胶囊	苦杏仁	0.344	黄芩、苦杏仁
14	113	感冒止咳颗粒	黄芩	0.447	黄芩
15	114	感冒止咳糖浆	黄芩	0.253	黄芩
16	128	大川芎口服液	天麻	0.068	天麻
17	133	小儿退热合剂(小儿退热口服液)	栀子	0.217	栀子、黄芩
18	134	小儿柴桂退热口服液	葛根	0.482	葛根
19	135	小儿热速清口服液	黄芩	0.255	黄芩
20	147	双丹口服液	丹参	0.268	丹参
21	148	双黄连口服液	金银花	0.260	金银花、连翘
22	153	西汉养生口服液(滋肾健脑液)	女贞子	0.419	淫羊藿、女贞子
23	157	血康口服液	肿节风	0.212	肿节风
24	161	克感利咽口服液	黄芩	0.486	栀子、黄芩、连翘
25	167	补心气口服液	黄芪	0.123	黄芪
26	173	参芪口服液	黄芪	0.219	黄芪
27	174	茵栀黄口服液	栀子	0.227	黄芩、栀子
28	176	复方双花口服液	穿心莲	0.507	穿心莲
29	179	养心定悸口服液	桂枝	0.390	桂枝
30	180	养血饮口服液	黄芪	0.347	黄芪
31	186	夏枯草口服	夏枯草	0.283	夏枯草
32	189	柴黄口服液	黄芩	0.129	黄芩
33	195	益母草口服液	益母草	0.182	益母草
34	198	通脉养心口服液	甘草	0.301	甘草
35	199	银杏叶口服液	银杏叶	0.134	银杏叶
36	200	银黄口服液	黄芩	0.217	金银花、黄芩
37	206	舒心口服液	黄芪	0.249	黄芪
38	207	滋心阴口服液	赤芍	0.160	赤芍
39	210	微达康口服液	刺五加	0.332	刺五加
40	212	鼻渊舒口服液	栀子	0.162	栀子
41	216	镇咳宁口服液	甘草	0.332	甘草、麻黄

表2 示例中成药中相对有效剂量最大的中药与药典指标中药对比

ID	PID	中成药名称	中药名称	相对最大有效剂量	药典指标中药
1	1	人参再造丸	黄连	20.00	黄连
2	3	天麻丸	羌活	10.00	羌活、独活
3	8	四逆汤	甘草	30.00	甘草
4	9	生白合剂(生白口服液)	淫羊藿	24.00	淫羊藿
5	16	附桂骨痛片	制川乌	37.00	制川乌、芍药
6	17	附桂骨痛胶囊	制川乌	37.00	制川乌、芍药
7	18	附桂骨痛颗粒	制川乌	44.33	制川乌、芍药
8	22	固本统血颗粒	淫羊藿	18.70	淫羊藿
9	23	固肾定喘丸	补骨脂	15.60	盐补骨脂
10	29	桂附地黄丸	山茱萸	6.67	山茱萸、牡丹皮
11	30	桂附地黄胶囊	山茱萸	7.33	山茱萸、牡丹皮
12	43	三拗片	麻黄	83.30	麻黄、苦杏仁
13	52	止咳橘红丸	化橘红	66.00	化橘红
14	53	止喘灵注射液	洋金花	50.00	麻黄、洋金花
15	66	芪黄通秘软胶囊	何首乌	25.00	何首乌、黄芪
16	67	克咳片	麻黄	36.00	麻黄、罂粟壳
17	70	连花清瘟片	连翘	42.50	连翘
18	71	连花清瘟胶囊	连翘	42.50	连翘
19	72	连花清瘟颗粒	连翘	28.33	连翘
20	75	苦甘颗粒	黄芩	50.00	黄芩、金银花、麻黄
21	77	金贝痰咳清颗粒	浙贝母	47.50	浙贝母
22	80	金嗓开音颗粒	连翘	27.17	金银花、连翘
23	90	通幽润燥丸	枳壳	8.00	麸炒枳壳
24	95	桑菊感冒丸	连翘	56.00	连翘
25	96	桑菊感冒片	连翘	46.67	连翘
26	100	麻仁润肠丸	陈皮	12.00	大黄、陈皮
27	101	麻仁滋脾丸	大黄	10.67	大黄
28	105	清肺化痰丸	黄芩	6.00	黄芩
29	105	橘红丸	化橘红	12.50	化橘红
30	119	橘红片	化橘红	29.00	化橘红
31	120	橘红胶囊	化橘红	27.67	化橘红、陈皮
32	121	橘红颗粒	化橘红	11.67	化橘红
33	122	橘红痰咳液	化橘红	50.00	化橘红
34	124	止咳橘红口服液	化橘红	11.00	化橘红
35	140	丹红化瘀口服液	丹参	38.67	丹参
36	143	风热清口服液	山银花	56.67	山银花
37	144	心荣口服液	赤芍	15.08	赤芍
38	145	心通口服液	葛根	9.80	葛根

续表

ID	PID	中成药名称	中药名称	相对最大有效剂量	药典指标中药
39	146	双丹口服液	丹参	40.00	丹参
40	147	双黄连口服液	连翘	125.00	金银花、连翘
41	148	生白合剂(生白口服液)	淫羊藿	24.00	淫羊藿
42	150	血康口服液	肿节风	4.17	肿节风
43	157	苓暴红止咳口服液	黄芩	20.00	黄芩、满山红
44	159	克感利咽口服液	连翘	12.00	栀子、黄芩、连翘
45	161	杞菊地黄口服液	山茱萸	5.42	酒萸肉、牡丹皮
46	163	抗感口服液	赤芍	21.83	赤芍
47	165	茵栀黄口服液	黄芩	4.00	黄芩、栀子
48	174	咳喘宁口服液	麻黄	13.40	麻黄
49	175	复方苓兰口服液	连翘	166.67	黄芩、金银花、连翘
50	177	冠心生脉口服液	丹参	5.00	赤芍、丹参
51	183	桂附地黄口服液	山茱萸	6.67	酒萸肉、牡丹皮
52	185	夏枯草口服	夏枯草	53.33	夏枯草
53	187	柴连口服液	连翘	100.00	麻黄、连翘
54	195	益母草口服液	益母草	16.67	益母草
55	196	消栓口服液	黄芪	66.67	黄芪
56	200	银黄口服液	黄芩	2.40	金银花、黄芩
57	208	蒲地蓝消炎口服液	蒲公英	33.33	黄芩、蒲公英
58	211	豨红通络口服液	酒豨莶草	50.00	豨莶草
59	214	精制冠心口服液	丹参	30.40	丹参、赤芍
60	216	镇咳宁口服液	麻黄	10.00	甘草、麻黄

表3 示例中成药中靶点作用核心排名前3的中药与药典指标中药对比

ID	PID	名称	中心性核心中药前3	指标中药
1	3	天麻丸	杜仲、独活、羌活	羌活、独活
2	5	止血复脉合剂	大黄、川芎、附子	大黄
3	6	乌梅丸	黄连、花椒、细辛	黄柏、黄连
4	8	四逆汤	干姜、甘草	甘草
5	12	尪痹片	淫羊藿、骨碎补、桂枝	淫羊藿
6	13	尪痹颗粒	淫羊藿、骨碎补、桂枝	淫羊藿
7	14	附子理中丸	附子、甘草、党参	甘草
8	15	附子理中片	附子、甘草、党参	甘草
9	16	附桂骨痛片	党参、淫羊藿、白芍	制川乌、芍药
10	17	附桂骨痛胶囊	党参、淫羊藿、白芍	制川乌、芍药
11	18	附桂骨痛颗粒	党参、淫羊藿、白芍	制川乌、芍药
12	19	肾康宁片	益母草、山药、黄芪	黄芪
13	20	肾康宁胶囊	益母草、山药、黄芪	丹参、黄芪
14	21	肾康宁颗粒	益母草、山药、黄芪	丹参、黄芪

续表

ID	PID	名称	中心性核心中药前3	指标中药
15	22	固本统血颗粒	菟丝子、枸杞子、淫羊藿	淫羊藿
16	27	前列舒丸	牡丹皮、淫羊藿、桂枝	牡丹皮
17	28	济生肾气丸	牡丹皮、车前子、山茱萸	山茱萸、牡丹皮
18	29	桂附地黄丸	牡丹皮、山茱萸、附子	山茱萸、牡丹皮
19	30	桂附地黄胶囊	牡丹皮、山茱萸、附子	山茱萸、牡丹皮
20	32	益心丸	红花、三七、附子	蟾酥、红参、三七
21	38	痰饮丸	苍术、甘草、莱菔子	炙甘草
22	40	二母安嗽丸	款冬花、罂粟壳、苦杏仁	罂粟壳
23	43	三拗片	苦杏仁、生姜、麻黄	麻黄、苦杏仁
24	46	小儿止嗽糖浆	桔梗、川贝母、甘草	甘草
25	50	小儿清热止咳合剂(小儿清热止咳口服液)	麻黄、甘草、黄芩	麻黄
26	53	止喘灵注射液	苦杏仁、洋金花、连翘	麻黄、洋金花
27	57	风寒咳嗽丸	青皮、半夏、麻黄	麻黄
28	58	风寒咳嗽颗粒	青皮、半夏、麻黄	麻黄
29	60	四方胃片	黄连、吴茱萸、沉香	黄连
30	61	四方胃胶囊	黄连、吴茱萸、沉香	黄连
31	62	外感风寒颗粒	白芷、桂枝、葛根	葛根
32	65	如意定喘片	洋金花、枸杞子、天冬	洋金花
33	67	克咳片	桔梗、罂粟壳、麻黄	麻黄、罂粟壳
34	70	连花清瘟片	连翘、鱼腥草、麻黄	连翘
35	71	连花清瘟胶囊	连翘、鱼腥草、麻黄	连翘
36	72	连花清瘟颗粒	连翘、鱼腥草、麻黄	连翘
37	74	表虚感冒颗粒	葛根、白芍、桂枝	白芍
38	75	苦甘颗粒	桔梗、麻黄、甘草	黄芩、金银花、麻黄
39	78	金莲清热颗粒	苦杏仁、金莲花、知母	金莲花
40	80	金嗓开音颗粒	连翘、菊花、前胡	金银花、连翘
41	81	宝咳宁颗粒	甘草、前胡、黄芩	黄芩
42	84	复方蛤青片	白果、前胡、黄芪	黄芪
43	88	益肺清化膏	川贝母、仙鹤草、黄芪	黄芪
44	90	通幽润燥丸	红花、枳壳、甘草	麸炒枳壳
45	92	通宣理肺胶囊	桔梗、枳壳、麻黄	麻黄
46	94	桑姜感冒片	连翘、菊花、苦杏仁	连翘
47	95	桑菊感冒丸	桔梗、连翘、菊花	连翘
48	96	桑菊感冒片	桔梗、连翘、菊花	连翘
49	97	桑菊感冒合剂	桔梗、连翘、菊花	连翘
50	99	麻仁丸	枳实、白芍、大黄	大黄
51	100	麻仁润肠丸	白芍、大黄、苦杏仁	大黄、陈皮

续表

ID	PID	名称	中心性核心中药前3	指标中药
52	101	麻仁滋脾丸	枳实、白芍、大黄	大黄
53	104	清气化痰丸	半夏、枳实、黄芩	黄芩
54	106	清肺消炎丸	苦杏仁、牛蒡子、麻黄	麻黄
55	109	葶贝胶囊	川贝母、甘草、黄芩	黄芩、苦杏仁
56	110	暑湿感冒颗粒	佩兰、白芷、防风	防风
57	111	蛤蚧定喘丸	黄连、麻黄、甘草	黄芩、麻黄
58	112	蛤蚧定喘胶囊	黄连、麻黄、甘草	黄芩、麻黄
59	118	解肌宁嗽丸	桔梗、枳壳、半夏	枳壳
60	123	橘红化痰丸	罂粟壳、锦灯笼、川贝母	罂粟壳
61	125	鹭鸶咯丸	芥子、栀子、射干	栀子
62	129	小儿七星茶口服液	薏苡仁、钩藤、甘草	甘草
63	130	小儿化食口服液	大黄、麦芽、牵牛子	大黄
64	131	小儿肺热咳喘口服液	连翘、鱼腥草、麻黄	麻黄
65	132	小儿咳喘灵口服液	麻黄、甘草、苦杏仁	麻黄
66	133	小儿退热合剂(小儿退热口服液)	牡丹皮、连翘、栀子	栀子、黄芩
67	134	小儿柴桂退热口服液	浮萍、葛根、白芍	葛根
68	137	小儿清肺化痰口服液	麻黄、前胡、黄芩	黄芩
69	145	心荣口服液	黄芪、赤芍、桂枝	赤芍
70	147	双丹口服液	牡丹皮、丹参	丹参
71	148	双黄连口服液	黄芩、连翘、金银花	金银花、连翘
72	149	古汉养生精口服液	麦芽、枸杞子、淫羊藿	淫羊藿
73	150	生白合剂(生白口服液)	鸡血藤、枸杞子、淫羊藿	淫羊藿
74	151	加味逍遥口服液(合剂)	牡丹皮、栀子、白芍	白芍、牡丹皮
75	153	西汉养生口服液(滋肾健脑液)	枸杞子、淫羊藿、甘草	淫羊藿、女贞子
76	154	百合固金口服液	桔梗、白芍、川贝母	白芍
77	155	当归补血口服液	黄芪	黄芪
78	157	血康口服液	肿节风	肿节风
79	158	妇康宝口服液(妇康宝合剂)	川芎、艾叶、白芍	川芎、当归、白芍
80	159	苓暴红止咳口服液	黄芩、满山红	黄芩、满山红
81	161	克感利咽口服液	连翘、栀子、射干	栀子、黄芩、连翘
82	163	杞菊地黄口服液	牡丹皮、枸杞子、菊花	山茱萸、牡丹皮
83	164	抗病毒口服液	连翘、石菖蒲、芦根	连翘
84	165	抗感口服液	金银花、赤芍	赤芍
85	166	启脾口服液	麦芽、人参、甘草	人参
86	167	补心气口服液	黄芪、薤白、石菖蒲	黄芪
87	168	阿胶补血口服液	黄芪、枸杞子、党参	黄芪
88	169	坤宁口服液	枳壳、益母草、茜草	益母草、赤芍
89	171	金莲花口服液	金莲花	金莲花

续表

ID	PID	名称	中心性核心中药前3	指标中药
90	172	金振口服液	大黄、黄芩、平贝母	黄芩
91	173	参芪口服液	党参、黄芪	黄芪
92	174	茵栀黄口服液	黄芩、栀子、茵陈	黄芩、栀子
93	175	咳喘宁口服液	桔梗、罂粟壳、麻黄	麻黄
94	176	复方双花口服液	连翘、穿心莲、板蓝根	穿心莲
95	177	复方苓兰口服液	连翘、黄芩、板蓝根	黄芩、金银花、连翘
96	178	保济口服液	菊花、白芷、葛根	葛根
97	179	养心定悸口服液	桂枝、甘草、生姜	桂枝
98	180	养血饮口服液	黄芪、大枣	黄芪
99	181	养阴清肺口服液	牡丹皮、白芍、川贝母	白芍、牡丹皮
100	182	活力苏口服液	枸杞子、淫羊藿、黄芪	淫羊藿
101	183	冠心生脉口服液	三七、人参、赤芍	赤芍、丹参
102	185	桂附地黄口服液	牡丹皮、山茱萸、附子	山茱萸、牡丹皮
103	186	夏枯草口服	夏枯草	夏枯草
104	187	柴连口服液	桔梗、连翘、麻黄	麻黄、连翘
105	189	柴黄口服液	黄芩、柴胡	黄芩
106	192	射麻口服液	射干、麻黄、黄芩	麻黄
107	193	健儿消食口服液	黄芪、黄芩、莱菔子	黄芩
108	194	益气养血口服液	淫羊藿、人参、黄芪	淫羊藿
109	195	益母草口服液	益母草	益母草
110	196	消栓口服液	红花、黄芪、赤芍	黄芪
111	198	通脉养心口服液	鸡血藤、桂枝、甘草	甘草
112	200	银黄口服液	黄芩、金银花	金银花、黄芩
113	201	甜梦口服液(甜梦合剂)	桑椹、枸杞子、淫羊藿	淫羊藿
114	202	清开灵口服液	栀子、黄芩、板蓝根	胆酸、栀子、黄芩
115	203	清肝利胆口服液	栀子、防己、厚朴	栀子
116	207	滋心阴口服液	赤芍、三七、北沙参	赤芍
117	208	蒲地蓝消炎口服液	黄芩、苦地丁、板蓝根	黄芩、蒲公英
118	212	鼻渊舒口服液	栀子、白芷、柴胡	栀子
119	215	镇心痛口服液	薤白、薄荷、三七	三七
120	216	镇咳宁口服液	桔梗、麻黄、甘草	甘草、麻黄

选择也与本研究预测结果相一致，表明本研究构建的预测模型具有一定合理性。

从表5可见，仍存在部分中成药处方主效应中药预测结果与中国药典中收录的指标中药不一致。其中大部分仍是颗粒剂、丸剂与胶囊剂处方，有17个口服液处方预测结果与药典指标不一致。检索这些口服液在中国药典中的标准指标

发现，大部分主效应中药也被用于薄层鉴别定性检测，表明本研究构建的预测模型具有一定合理性。

4 总结与讨论

4.1 基于大数据与模型整合

本研究以大数据为基础，通过《中国药典》2025版、TCMSP数据库及IID靶点相互作用等多源

表4 药典中没有指标中药的中成药处方主效应中药预测结果

ID	PID	名称	证候君药	剂量最大药	靶点中心性核心中药前3
1	10	再造丸	天麻	朱砂	白芷、骨碎补、葛根
2	11	阳和解凝膏	白芷	地龙	川芎、白芷、防风
3	24	定喘膏	制天南星	血余炭	附子、干姜
4	42	九圣散	黄柏	轻粉	苍术、黄柏、苦杏仁
5	54	止嗽化痰丸	川贝母	桔梗	款冬花、天冬、半夏
6	55	牛黄清心丸(局方)	朱砂	雄黄	蒲黄、人参、柴胡
7	63	冯了性风湿跌打药酒	川芎	丁公藤	牡丹皮、白芷、桂枝
8	85	洋参保肺丸	甘草	西洋参	罂粟壳、西洋参、枳实
9	141	止嗽定喘口服液	甘草	麻黄	苦杏仁、麻黄、甘草
10	142	化积口服液	茯苓	茯苓	红花
11	188	柴胡口服液	柴胡	柴胡	柴胡

表5 药典中指标中药与预测结果不一致的中成药处方主效应中药预测结果

ID	PID	名称	证候君药	剂量最大药	靶点中心性核心中药前3	药典指标中药
1	2	小儿肺咳颗粒	黄芪	北沙参	枸杞子、款冬花、人参	陈皮
2	4	天麻祛风补片	羌活	当归	杜仲、独活、羌活	天麻
3	7	右归丸	菟丝子	鹿角胶	杜仲、菟丝子、枸杞子	酒萸肉
4	31	桂附理中丸	附片	炮姜	党参、白术、甘草	肉桂
5	33	益肾灵颗粒	沙苑子	女贞子	桑椹、枸杞子、车前子	淫羊藿
6	34	通痹片	黄芪	当归	王不留行、北刘寄奴、黄芪	制马钱子
7	35	通痹胶囊	北刘寄奴	金钱白花蛇	王不留行、北刘寄奴、黄芪	制马钱子
8	36	温胃舒胶囊	肉桂	乌梅	乌梅、附子、山药	补骨脂
9	37	强力天麻杜仲丸	当归	杜仲	杜仲、槲寄生、独活	天麻
10	39	通宣理肺丸	紫苏叶	紫苏叶	桔梗、枳壳、半夏	麻黄
11	41	儿童清肺丸	甘草	黄芩	石菖蒲、半夏、前胡	麻黄
12	44	大黄蛰虫丸	水蛭	水蛭	黄芩、苦杏仁、白芍	大黄
13	45	万灵五香膏	马钱子	黄连	红花、川芎、白芷	人工麝香
14	47	小儿百部止咳糖浆	甘草	百部	桔梗、枳壳、甘草	黄芩
15	48	小儿咳喘颗粒	天竺黄	僵蚕	桔梗、细辛、鱼腥草	麻黄
16	49	小儿清肺止咳片	前胡	人工牛黄	菊花、栀子、葛根	黄芩
17	51	小儿感冒宁糖浆	金银花	薄荷	连翘、栀子、白芷	黄芩
18	56	化癥回生片	烫水蛭	烫水蛭	两头尖、益母草、人参	丁香
19	59	石斛夜光丸	熟地黄	茯苓	枸杞子、菊花、天冬	黄连
20	64	百咳静糖浆	炒紫苏子	陈皮	天南星、黄柏、前胡	黄芩
21	68	杏苏止咳颗粒	桔梗	苦杏仁	桔梗、前胡、苦杏仁	陈皮
22	69	杏苏止咳糖浆	紫苏叶	苦杏仁	桔梗、前胡、苦杏仁	陈皮
23	73	表实感冒颗粒	白芷	紫苏叶	白芷、葛根、桂枝	麻黄
24	76	肾炎解热片	蝉蜕	连翘	连翘、车前子、桂枝	陈皮

续表

ID	PID	名称	证候君药	剂量最大药	靶点中心性核心中药前3	药典指标中药
25	79	金嗓开音丸	板蓝根	连翘	连翘、菊花、前胡	金银花
26	82	咳喘顺丸	紫苏子	鱼腥草	款冬花、半夏、前胡	陈皮
27	83	复方益肝丸	大黄	龙胆	山豆根、柴胡、茵陈	牡丹皮
28	86	桂龙咳喘宁胶囊	炒苦杏仁	半夏	黄连、半夏、白芍	桂枝
29	87	桂龙咳喘宁颗粒	炒苦杏仁	半夏	黄连、半夏、白芍	桂枝
30	89	润肺止咳丸	款冬花	紫菀	款冬花、天冬、前胡	黄芩
31	91	通宣理肺片	紫苏叶	紫苏叶	桔梗、枳壳、半夏	黄芩、麻黄
32	93	通宣理肺颗粒	紫苏叶	紫苏叶	桔梗、枳壳、半夏	麻黄
33	102	羚羊清肺丸	薄荷	石斛	牡丹皮、栀子、天冬	金银花
34	103	羚羊清肺颗粒	薄荷	石斛	牡丹皮、栀子、天冬	金银花
35	107	清宣止咳颗粒	薄荷	桑叶	甘草、苦杏仁、桑叶	白芍、陈皮
36	108	琥珀还睛丸	菟丝子	菊花	菊花、枸杞子、天冬	黄连
37	115	感冒清热咀嚼片	白芷	荆芥穗	桔梗、荆芥穗、白芷	葛根
38	116	感冒清热胶囊	白芷	荆芥穗	桔梗、荆芥穗、白芷	葛根
39	117	感冒清热颗粒	白芷	荆芥穗	桔梗、荆芥穗、白芷	葛根
40	126	儿感退热宁口服液	薄荷	连翘	桔梗、连翘、菊花	甘草
41	127	九味羌活口服液	羌活	苍术	苍术、川芎、白芷	黄芩
42	136	小儿消积止咳口服液	槟榔	连翘	桔梗、连翘、枇杷叶	枳实
43	138	小儿感冒口服液	地黄	连翘	连翘、菊花、大青叶	广藿香
44	139	元胡止痛口服液	白芷	白芷	白芷	醋延胡索
45	152	孕康合剂(孕康口服液)	白术	狗脊	乌梅、枸杞子、山茱萸	黄芩、白芍
46	160	芪冬颐心口服液	人参	淫羊藿	枳壳、淫羊藿、人参	黄芪
47	162	杏苏止咳口服液	桔梗	苦杏仁	桔梗、前胡、苦杏仁	陈皮
48	170	软脉灵口服液	远志	枸杞子	枸杞子、川芎、柏子仁	丹参
49	184	祛痰灵口服液	鱼腥草	鱼腥草	鱼腥草	鲜竹沥
50	190	柴银口服液	薄荷	连翘	连翘、葛根、柴胡	黄芩
51	197	通天口服液	甘草	薄荷	菊花、川芎、白芷	赤芍
52	204	清热解毒口服液	板蓝根	石膏	连翘、栀子、龙胆	黄芩
53	205	喉咽清口服液	车前草	车前草	车前草	土牛膝
54	209	感冒清热口服液	白芷	荆芥穗	桔梗、荆芥穗、白芷	葛根
55	213	鼻窦炎口服液	薄荷	薄荷	桔梗、苍耳子、川芎	黄芩
56	217	藿香正气口服液	紫苏叶	广藿香	苍术、白芷、甘草	厚朴、陈皮

权威数据，系统集成了 217 个中成药处方、775 个饮片功效主治及最大用量、396 个药典质控成分、499 味中药的 10015 个成分以及超过百万条靶点相互作用关系，构建起中药复方主效应指标体系预测的数据库。通过数据结构化提取、标准化整理与 Python 自动化处理，实现了从处方—药味—成分—

靶点—作用网络—质控成分等七个维度的数据关联，为模型预测和主效应药物甄别提供了坚实的数据基础和广阔的信息覆盖面。

4.2 三结合判别体系

本研究将传统“证候君药”理论、剂量最大药筛选、现代网络药理学的核心靶点中药判定三者有

机结合,形成“证候君药—剂量最大药—网络靶点核心药”三结合判别体系。结果显示,网络核心靶点分析的预测匹配度(55.8%)明显高于传统君药判定(18.9%)和剂量最大药分析(27.6%),三法结合后的匹配度进一步提升至69.1%,显著高于任一种单独判据。多维度、联合判别既提升了模型判断的科学性和准确性,又补足了不同方法的局限性,显著增强了主效应药物预测模型的适应性和实用性。

此外,与2025版《中国药典》指标中药的系统对比结果表明,模型不仅能有效覆盖大多数药典指标中药(150/217,69.1%),而且在部分药典未设含量质控中药的中成药处方中(如丸、散、酒剂等),也能给出合理预测,为补充和完善现行标准体系提供了科学依据。在模型预测与药典不一致的部分,亦反映出有质控标准的优化空间,体现出算法对药典检测逻辑和中药质控体系升级的前瞻价值。整体来看,大数据的全景整合与多元化预测模型的深度融合,为中药复方质量评价、标准制定和智能化检测提供了坚实的数据支撑和创新的技术路径,有助于推动中药现代化、标准化和国际化进程。

4.3 多维整合策略在中药复方主效应指标筛选中的应用

本研究主要通过建立中药汤剂主效应指标体系预测数据库与相关预测算法,从多维整合策略探索中药复方质量评价的方法。近年来,基于多维整合策略的中药复方制剂质量评价方法^[34-39]的探索逐渐增加,为中药汤剂质量控制提供新的思路。张铁军等^[40]提出中药复方质量标志物从质量传递与溯源、成分特有性、成分的有效性、成分可测性以及复方配伍环境五方面发现,为质控成分筛选提供了理论框架。陈佳等^[41]将Q-Marker“五原则”与“蜘蛛网”多维可视化模型相结合,基于传递与溯源、特有性、可测性、有效性和配伍原则的Q-Marker“五原则”,以肺热止咳颗粒为例,绘制“蛛网模式”图,成功筛选出8个主效应成分作为质控指标,实现了传统理论与现代技术的有机融合。

4.4 中药复方主效应指标预测模型的实践价值

研究发现,中成药质量控制标准中常选择1~3个核心作用中药作为其质量控制代表,因此选择的质量控制性中药的成分特有性与可检测性至关重要。从结果中也可以发现,中国药典中成药的检测指标仍有优化空间,如桂附理中丸的现行标准仅以肉桂为质控中药,更多的实验研究表明,桂附理中丸中附子^[42]、肉桂^[43]、炮姜^[44]、甘草^[45]等多药

材协同质量控制。又如四逆汤中预测的证候君药与剂量最大药均为淡附片,核心作用中药为干姜、甘草,对比其药典检测质控成分为甘草中的甘草酸,主要考虑组方中甘草酸成分含量最高、作用靶点最多^[46]。随着检测技术的发展,已有研究探索了四逆汤附子、干姜、甘草同时测定的HPLC方法^[47],表明现有的检测技术可以在药典现有标准的基础上进行完善,多指标检测促进复方质量科学控制。

本研究结果也表明,提出的预测模型对于药典未收录质控成分的复方制剂,可提供主效应中药筛选依据;对于已采用单味药质控的复方,其主效应中药预测结果可作为质量控制的参考。

参考文献

- [1] 肖佳妹,杨岩,贺福元,等.基于总量统计矩的中药多成分缓控释剂整体释放体内外评价研究[J].中草药,2021,52(4):909-916.
- [2] 寿潘洁,郭士贺,寿洋婷.基于网络药理学的人参-茯苓-白术复方调控胃癌发生发展的多靶点分子机制研究[J].生物化工,2025,11(3):22-27.
- [3] 邹铭斐,林锦春,刘丽丽.中药复方治疗肠癌的研究进展[J/OL].辽宁中医杂志,1-7[2026-01-22].<https://link.cnki.net/21.1128.R.20250718-1707.025>.
- [4] 明雨,王忠,王永炎.中药复方多靶点治疗流行性感胃的临床价值提升策略[J].成都中医药大学学报,2025,48(1):1-8.
- [5] Chen J, Li LF, Lin ZZ, et al. A quality-comprehensive-evaluation-index-based model for evaluating traditional Chinese medicine quality[J]. Chinese Medicine, 2023,18(1):89.
- [6] 郭晓帆,桂新景,王艳丽,等.中药汤剂成品质量控制方法回顾与探索[J].医药导报,2021,40(11):1556-1560.
- [7] 陈士林,刘昌孝,张铁军,等.基于中药质量标志物和传统用法的中药饮片标准汤剂传承发展研究思路与建议[J].中草药,2019,50(19):4519-4528.
- [8] 王小鹏,桂新景,王艳丽,等.中药汤剂煎煮加水量与得液量控制方法研究[J].医药导报,2021,40(11):1528-1533.
- [9] 张芳平,位翠杰,刘晓霞,等.基于UPLC指纹图谱和多指标成分定量的罗汉果标准汤剂质量评价[J].药学前沿,2024,28(11):397-405.
- [10] 李娜,王岩,王长福,等.基于指纹图谱和网络药理学的温胆汤质量标志物(Q-Marker)预测[J].中草药,2023,54(19):6241-6252.
- [11] 王焯燃.方剂组方法则研究[D].哈尔滨:黑龙江中医药大学,2010.
- [12] 苏宁.以黄芪为君药中药复方治疗糖尿病肾病有效性及安全性Meta研究[J].临床医药文献电子杂志,2020,7(16):82.
- [13] 赵静,刘剑锋,王燕平,等.中药复方分期治疗新冠肺炎的网络药理学分析[J].世界科学技术-中医药现代化,

- 2020, 22(2): 278-288.
- [14] 刘昌孝, 陈士林, 肖小河, 等. 中药质量标志物(Q-Marker): 中药产品质量控制的新概念[J]. 中草药, 2016, 47(9): 1443-1457.
- [15] Guo WL, Jiang HJ, Li YR, *et al.* Medication rules of hub herb pairs for insomnia and mechanism of action: Results of data mining, network pharmacology, and molecular docking [J]. Chinese Medical Sciences Journal, 2024, 39(4): 249-260.
- [16] 田超, 杨晨光, 许鹏, 等. 基于数据挖掘和网络药理学分析中药复方专利治疗胃癌的用药规律及作用机制[J]. 药物评价研究, 2024, 47(11): 2499-2507.
- [17] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2015.
- [18] 吴文玉, 詹少锋, 焦欣, 等. 中医药领域机器学习研究的现状与发展趋势探讨[J/OL]. 中华中医药学刊, 1-16 [2025-11-12]. <https://link.cnki.net/urlid/21.1546.R.20250730.1634.002>.
- [19] 阮开霞, 李冰, 冉宇, 等. 多种机器学习与反向传播神经网络模型在中医补益类方剂分类中的对比研究[J]. 中医药导报, 2025, 31(7): 232-237.
- [20] 国家药监委员会. 中华人民共和国药典: 一部[S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2025.
- [21] Kotlyar M, Pastrello C, Malik Z, *et al.* IID 2018 update: Context-specific physical protein-protein interactions in human, model organisms and domesticated species[J]. Nucleic Acids Research, 2019, 47(D1): D581-D589.
- [22] Ru J, Li P, Wang J, *et al.* TCMSp: A database of systems pharmacology for drug discovery from herbal medicines[J]. Journal of Cheminformatics, 2014, 6: 13.
- [23] 史国举. 基于Python的中文分词技术探究[J]. 无线互联科技, 2021, 18(23): 110-111.
- [24] 邢玲, 程兵. 基于结巴分词的领域自适应分词方法研究[J]. 计算机仿真, 2023, 40(4): 310-316, 503.
- [25] 周圣凯, 富丽贞, 宋文爱. 基于深度学习的短文本语义相似度计算模型[J]. 广西师范大学学报(自然科学版), 2022, 40(3): 49-56.
- [26] Salton G, Worg A, Yang CS. A vector space model for automatic indexing[J]. Communications of the ACM, 1975, 18(11): 613-620.
- [27] Mikolov T, Sutskever I, Oolo CK, *et al.* Distributed representations of words and phrases and their compositionality [J]. CORR, 2013, 26: 1-9.
- [28] 王轶, 王坤宁, 刘铭. 基于交替语言数据重构方法的跨语言文本相似度模型[J]. 吉林大学学报(理学版), 2025, 63(2): 551-558.
- [29] 刘栋, 杨辉, 姬少培, 等. 基于多模型加权组合的文本相似度计算模型[J]. 计算机工程, 2023, 49(10): 97-104.
- [30] 刘茹. 基于语义融合的文本相似度算法研究与实现[D]. 南昌: 南昌大学, 2021.
- [31] 刘娇. 中药调剂知识库的构建与应用[D]. 北京: 北京中医药大学, 2022.
- [32] 王苗, 周铭心. 常用方剂君药的计量识别[J]. 西部中医药, 2014, 27(4): 60-63.
- [33] 周文霞, 王同兴, 程肖蕊, 等. 网络药理学研究中的网络分析技术[J]. 国际药学研究杂志, 2016, 43(3): 399-409.
- [34] 李海洋, 桂新景, 岳佑焱, 等. 中药汤剂煎煮工艺标准化与个性化结合方法探索[J]. 医药导报, 2021, 40(11): 1561-1567.
- [35] 邓淙友, 王闽予, 徐文辉, 等. 基于指纹图谱、化学计量学分析及含量测定的炒蔓荆子标准汤剂质量评价[J]. 天然产物研究与开发, 2025, 37(6): 1104-1113.
- [36] 刘慧. 龙胆泻肝丸等三种中药复方的质量控制研究[D]. 上海: 第二军医大学, 2011.
- [37] 王毅, 程翼宇. 中药组效关系辨识方法学计算理论研究思路与策略[J]. 中国天然药物, 2003, (3): 51-54.
- [38] Baber N. International conference on harmonisation of technical requirements for registration of pharmaceuticals for human use (ICH)[J]. British Journal of Clinical Pharmacology, 1994, 37(5): 401-404.
- [39] 王峥, 张春泽. 基于整体观念对中药治疗结直肠癌相关研究的多层次分析[J]. 药学学报, 2025, 60(3): 559-572.
- [40] 张铁军, 白钢, 陈常青, 等. 基于“五原则”的复方中药质量标志物(Q-marker)研究路径[J]. 中草药, 2018, 49(1): 1-13.
- [41] 陈佳, 李伟, 刘征, 等. 基于“五原则”结合蛛网模型辨析肺热止咳颗粒质量标志物[J]. 中国现代应用药学, 2023, 40(21): 2990-2997.
- [42] 王玉光, 张晓伟. 桂附理中丸中白术的薄层鉴别及乌头碱限量检查[J]. 包头医学院学报, 2004, (2): 100-101.
- [43] 黄辉庆, 李华, 陈馥, 等. 桂附理中丸的HPLC指纹图谱研究[J]. 中药新药与临床药理, 2017, 28(3): 351-354.
- [44] 戴玮, 常新全, 肖苏萍, 等. HPLC测定桂附理中丸中6-姜辣素的含量[J]. 中国现代中药, 2016, 18(12): 1646-1648.
- [45] 冯丽华, 梁淑娟. HPLC法测定桂附理中丸中甘草苷的含量[J]. 广东化工, 2020, 47(17): 178-179, 175.
- [46] 杨颜芳. 四逆汤回阳救逆药效组分与多元因素的相关性研究[D]. 北京: 北京中医药大学, 2017.
- [47] 阮玥, 林燕, 张晓燕, 等. 四逆汤高效液相指纹图谱的建立及含量测定[J]. 世界中医药, 2020, 15(20): 3020-3024.

(收稿日期: 2025-10-09; 本文编辑: 叶世英)