



人工智能量化表征中医诊疗原则并促进其 与现代生物医学的整合

李昊然^{1#}, 程兴业^{1#}, 黄子扬¹, 罗景元^{2,3,4}, 许乾茜^{2,3}, 赵启光², 郭恬辰², 张宇萌², 钟丽丹⁵, 卞兆祥^{3,4,6},
汤雷翰^{7*}, 吕爱平^{2,3,8,9*}, 田亮^{1,9,10*}

1 香港浸会大学物理系, 中国香港特别行政区

2 香港浸会大学中医药学院, 中国香港特别行政区

3 香港浸会大学吴文政中医药临床研究所, 中国香港特别行政区

4 香港浸会大学中药创新研发中心, 中国香港特别行政区

5 南洋理工大学生物科学学院, 新加坡 637551

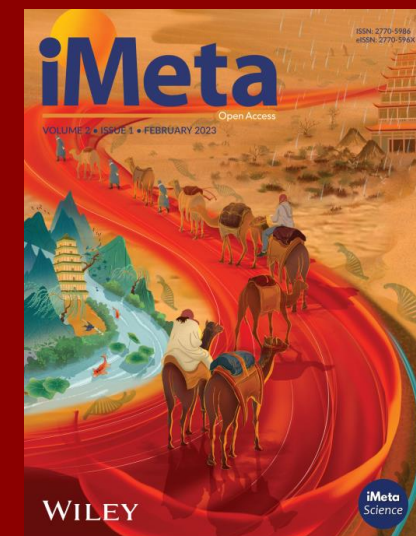
6 香港中医医院, 中国香港特别行政区

7 西湖大学理学院交叉科学中心, 中国浙江省杭州市

8 江西中医药大学经典名方现代中药创制全国重点实验室, 中国江西省南昌市 330004

9 香港浸会大学系统医学与健康科学研究院, 中国香港特别行政区

10 香港浸会大学计算及理论研究所, 中国香港特别行政区

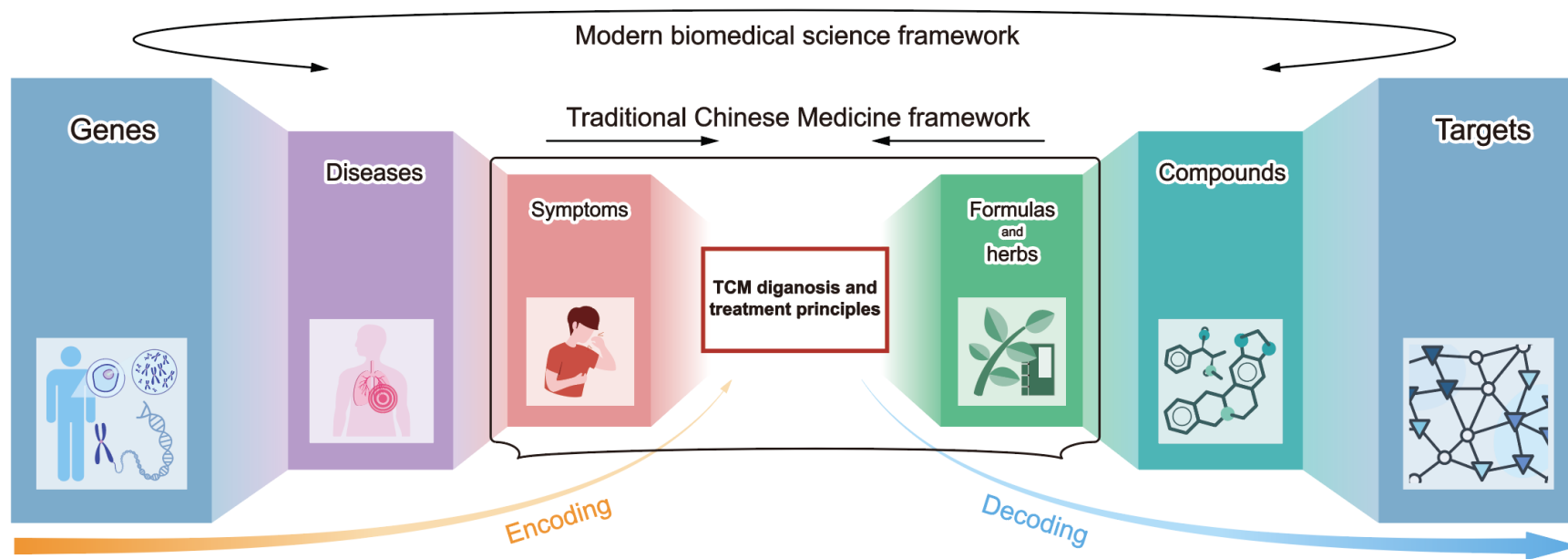


Haoran Li, Xingye Cheng, Ziyang Huang, Jingyuan Luo, Qianqian Xu, Qiguang Zhao, Tianchen Guo, et al. 2026.
Artificial intelligence models Traditional Chinese Medicine principles to integrate with biomedicine. *iMeta* 5: e70185.
<https://doi.org/10.1002/imt2.70185>



背景与研究问题

还原论 / 自下而上的范式：从疾病和临床表现出发，寻找分子机制及相应治疗靶点



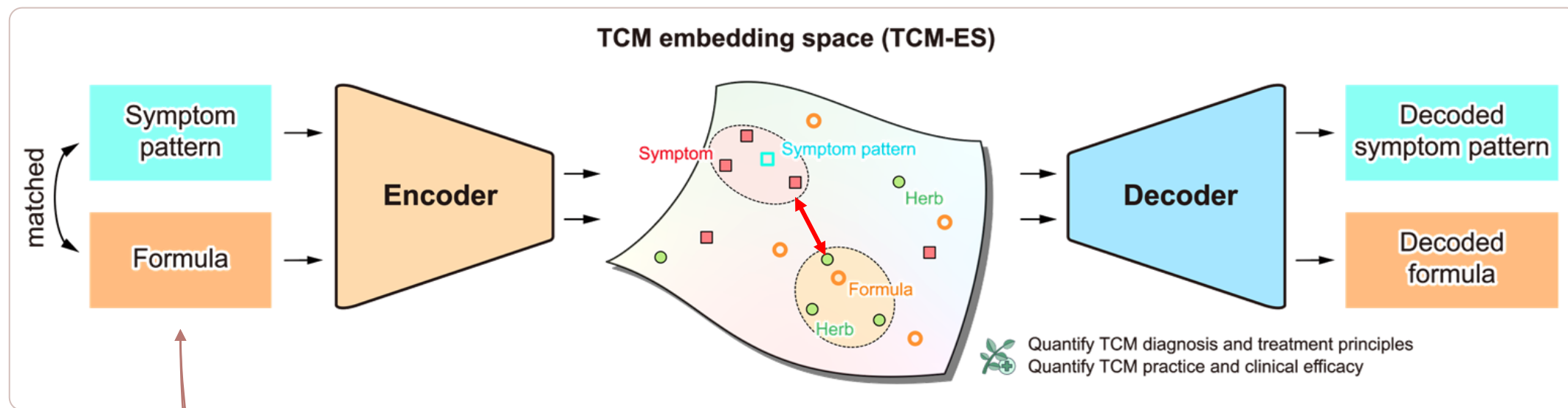
- 中医为复杂且个性化的患者症状组合提供了一种现代医学范式互补的整体性的、自上而下的视角。
- 然而，这一诊疗逻辑大多是定性的，限制了其系统性、定量化的研究及其与现代生物医学的整合。

研究问题：能否将经验性的症状组合-方剂关系转化为一种定量且可解释的表征？



量化中医实践的数据驱动编码-解码框架

一个用于统一表征症状、中药、症状组合和方剂的共享低维坐标系



历史中医方剂记录：

84,491 条整理后的记录



26,339 条符合模型纳入条件的记录

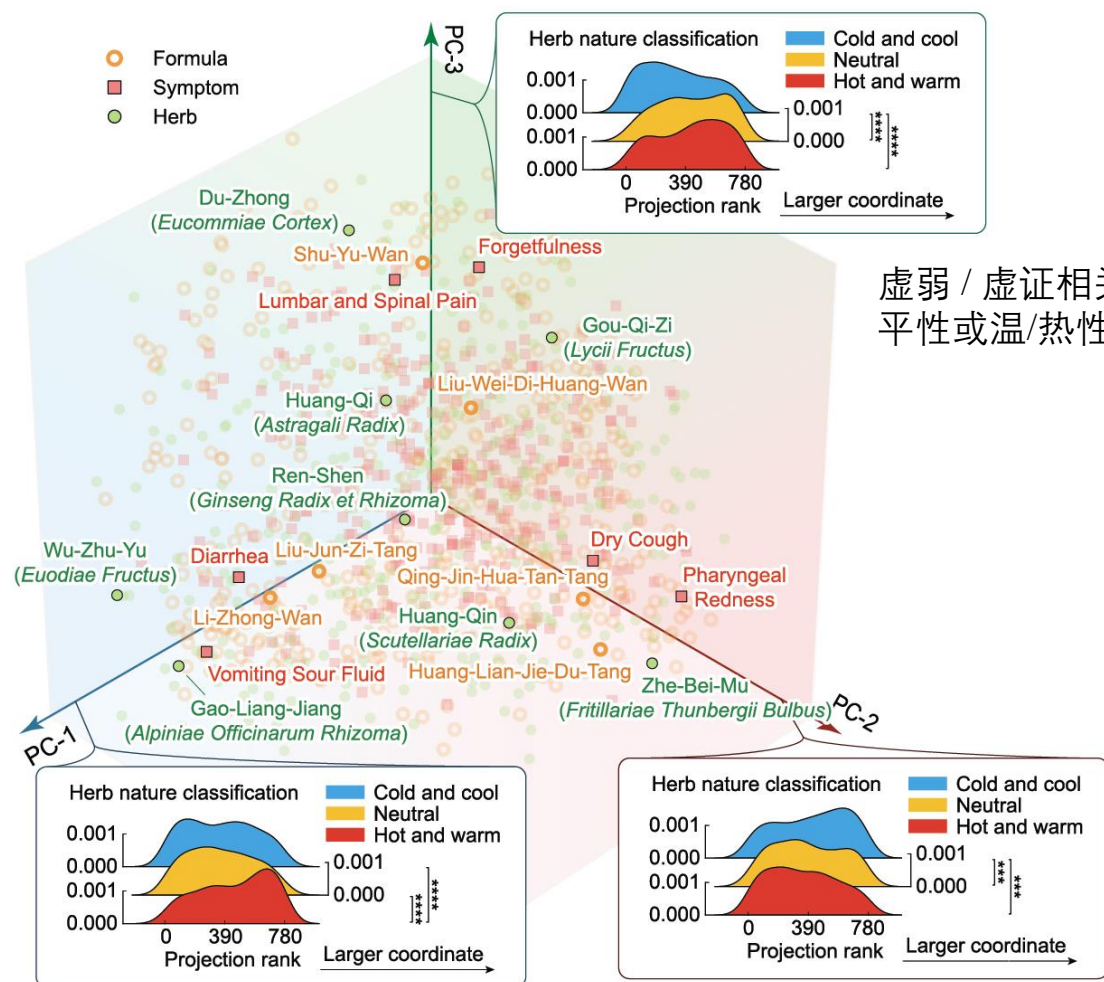
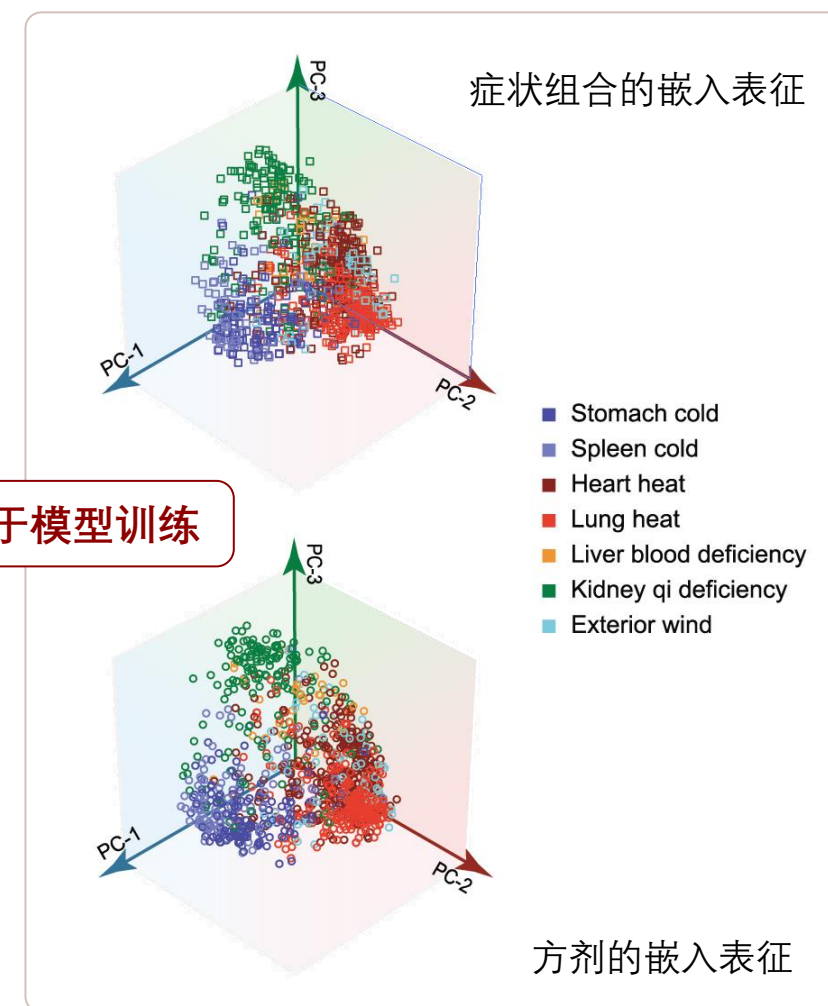
中医方剂记录示例

症状组合	便溏；食欲减退；消瘦；神疲；气短
证候（不纳入训练）	肺气虚证；脾气虚证
方剂	人参；茯苓；白术；甘草

核心模型训练中未使用

- 证候标签
- 显式中医诊疗原则注释
- 临床结局
- 生物学信息

学习得到的TCM-ES呈现出与未用于训练的中医原则一致的组织结构



证候标签未用于模型训练

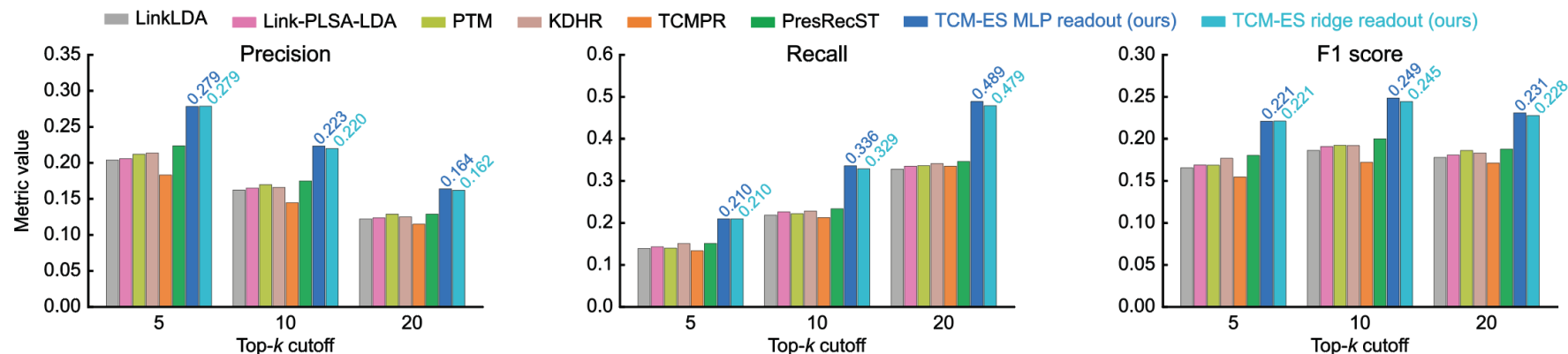
基于症状组合-方剂的映射关系学习得到的TCM-ES，其空间结构与传统中医诊疗原则呈系统性一致。



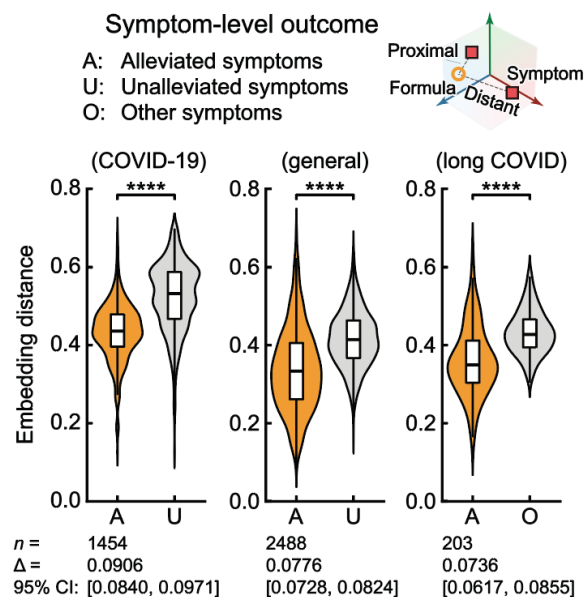
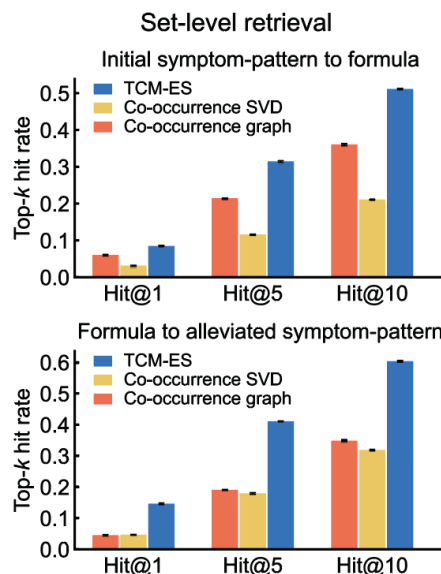
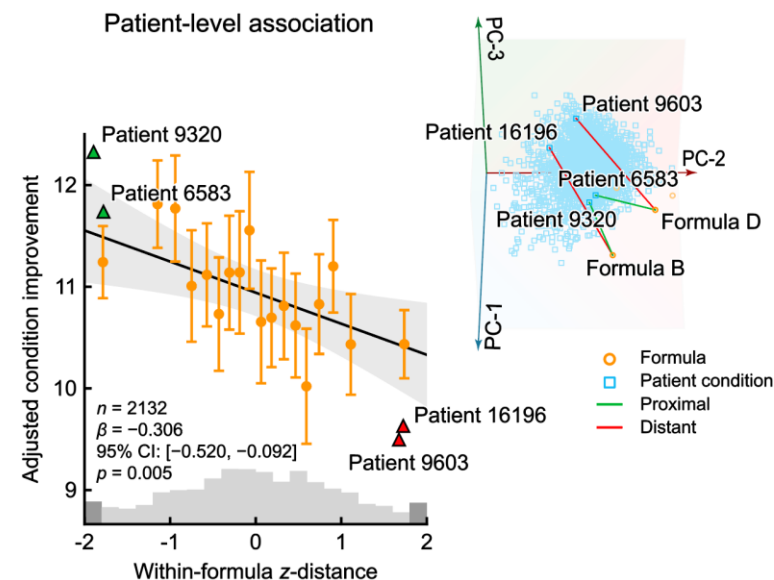
TCM-ES有助于开展下游方剂预测和临床分析

方剂预测

基于冻结的TCM-ES表征，在公开的TCM-PD基准数据集上评估TCM-ES表征的方剂预测性能。



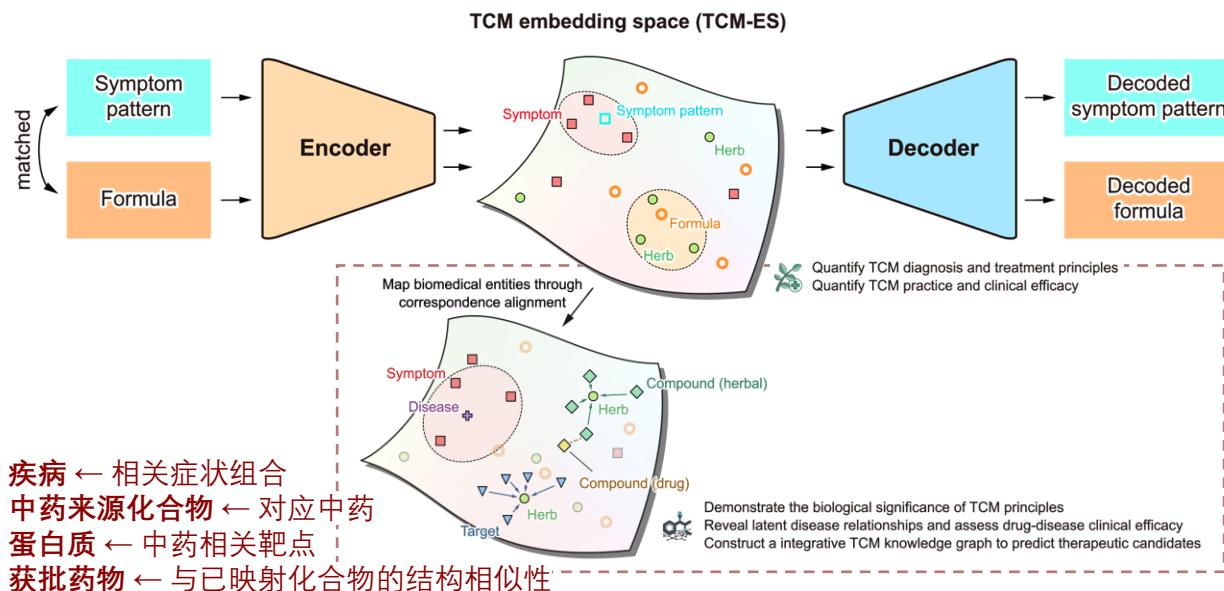
临床结局的定量分析



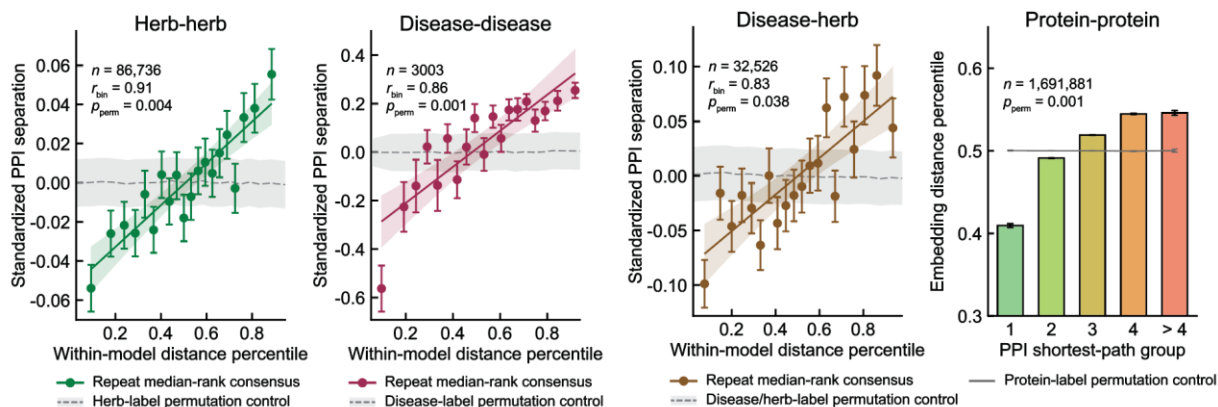
TCM-ES的空间关系可从多个层面反映患者病情与处方方剂的匹配程度，并与后续临床结局相关。

将生物医学实体映射至TCM-ES，并评估其与现代生物医学的一致性

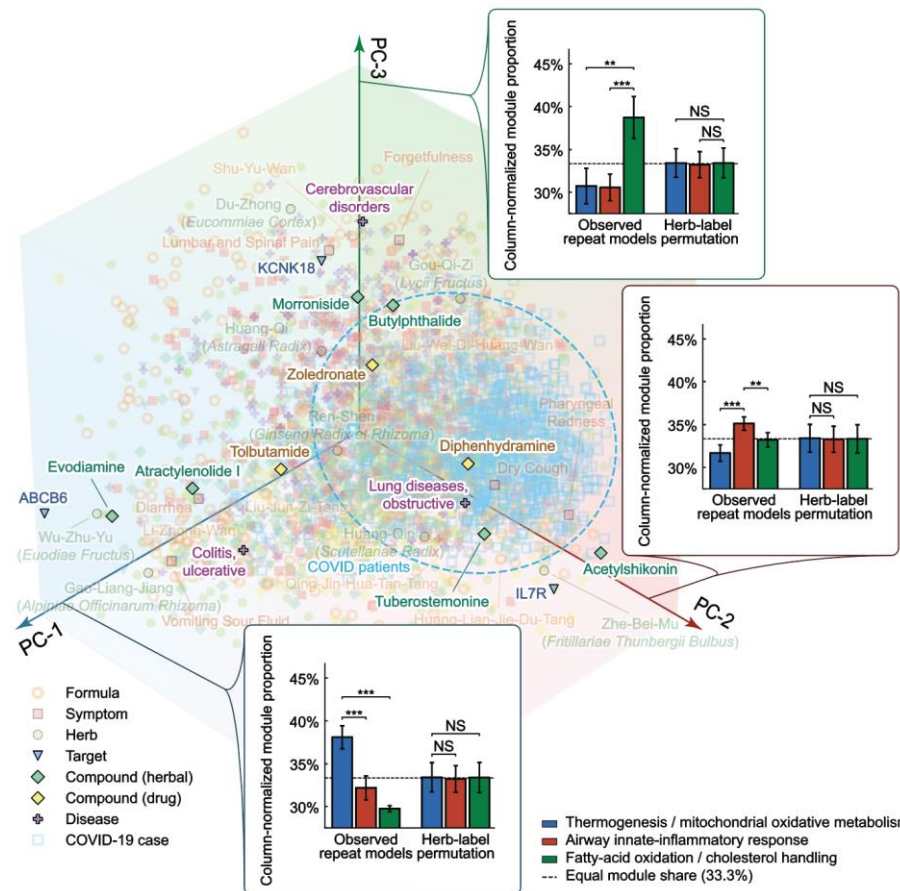
在核心TCM-ES固定后，再将生物医学实体映射至该空间



在TCM-ES中空间位置越接近的实体，其在人类PPI网络中的分子关系也越接近



TCM-ES主要方向与关键生物过程的关联

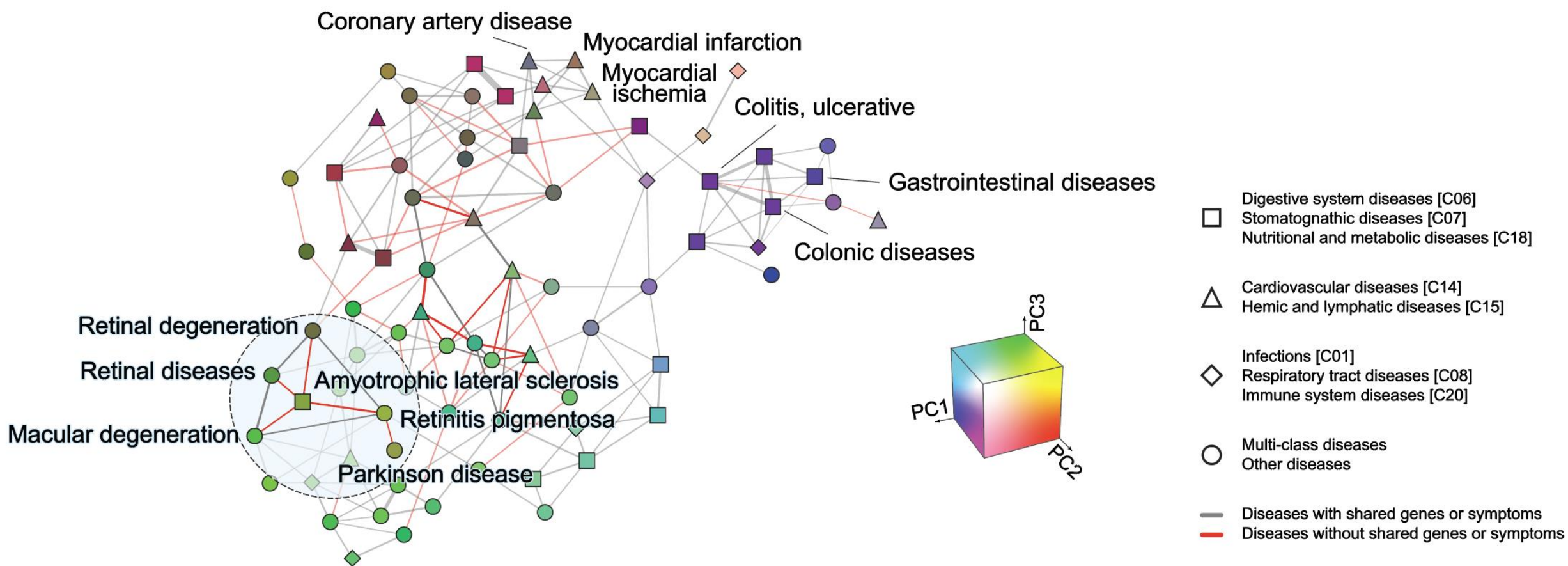


尽管未使用生物医学信息训练核心TCM-ES，该空间结构仍与已知生物过程和分子关系呈现一致性。



TCM-ES从症状组合的角度为疾病关系提供补充视角

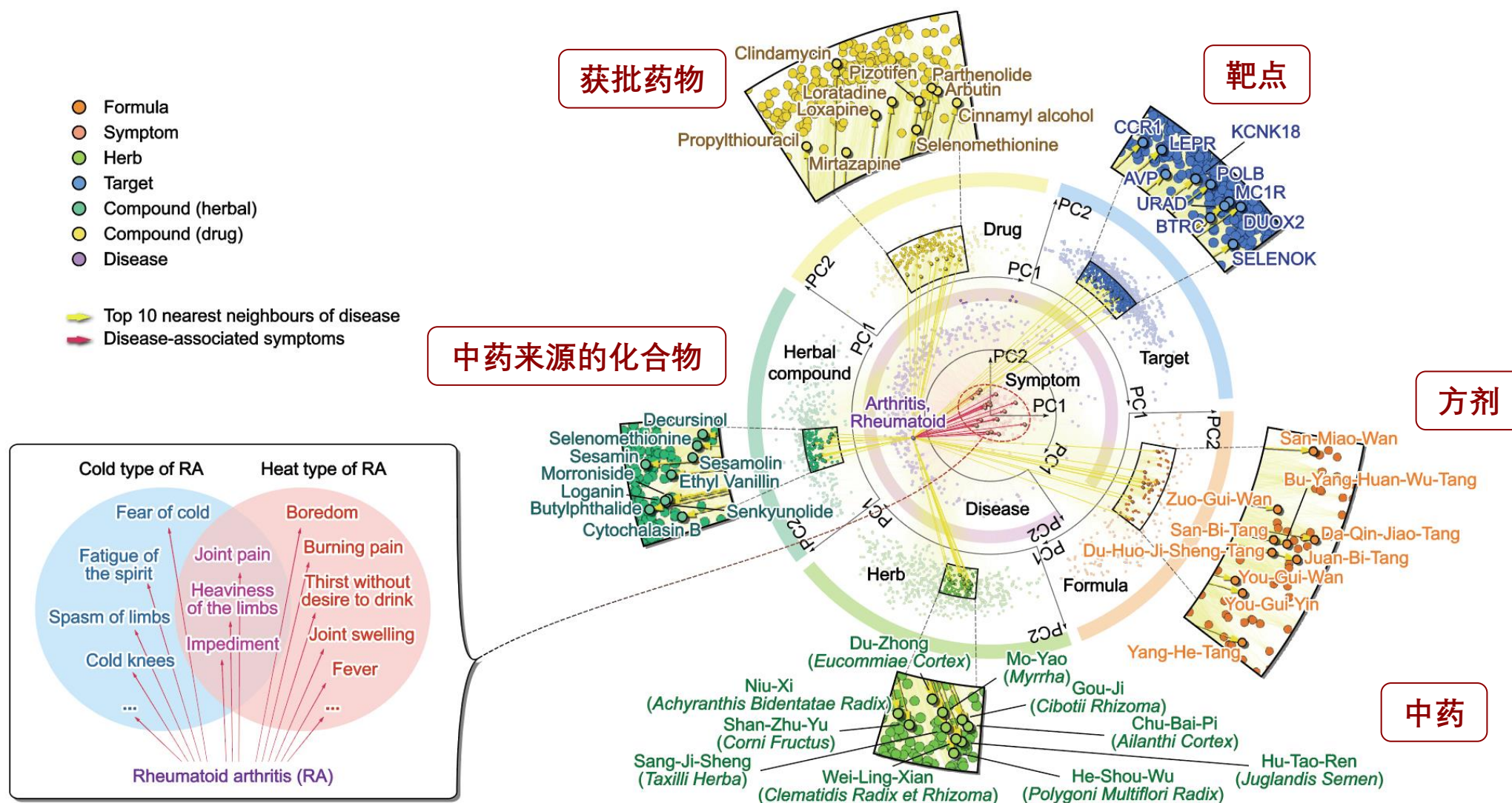
- 基于疾病在整合后的TCM-ES中的空间邻近性，构建疾病近邻网络。
- 红边表示既不共享已知相关基因、也不共享症状的近邻疾病对。





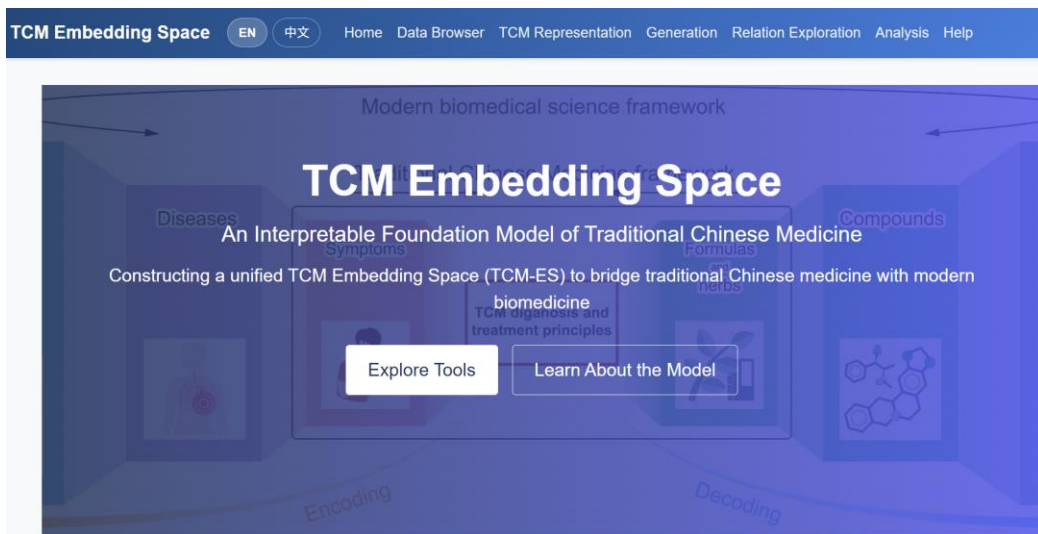
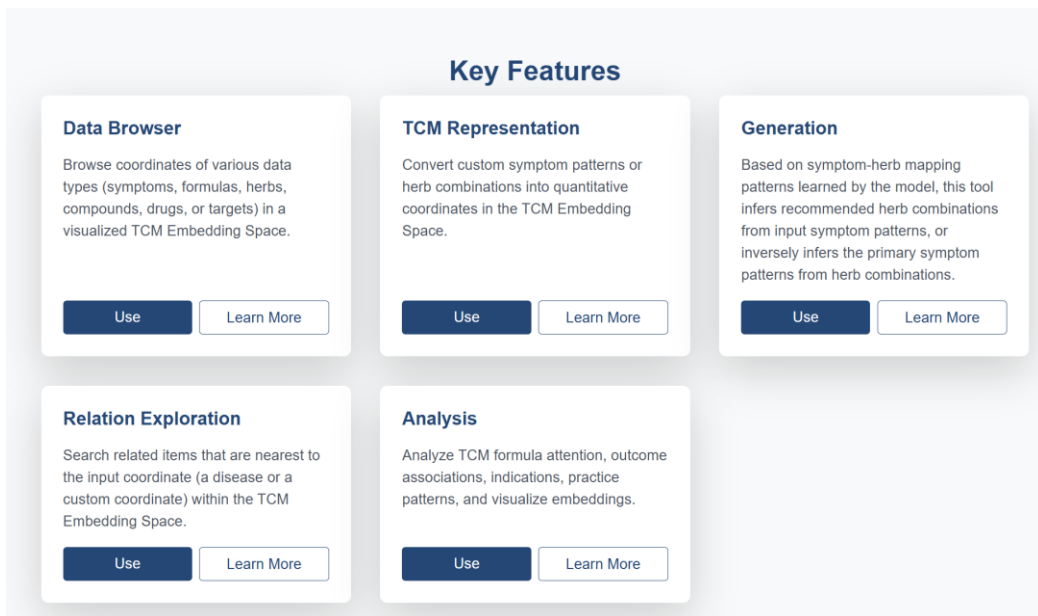
基于TCM-ES的疾病相关靶点和治疗候选优先排序

将每个疾病与其在TCM-ES中邻近的靶蛋白、化合物、中药、方剂和高置信度的现代药物相连接，构建一个知识图谱。





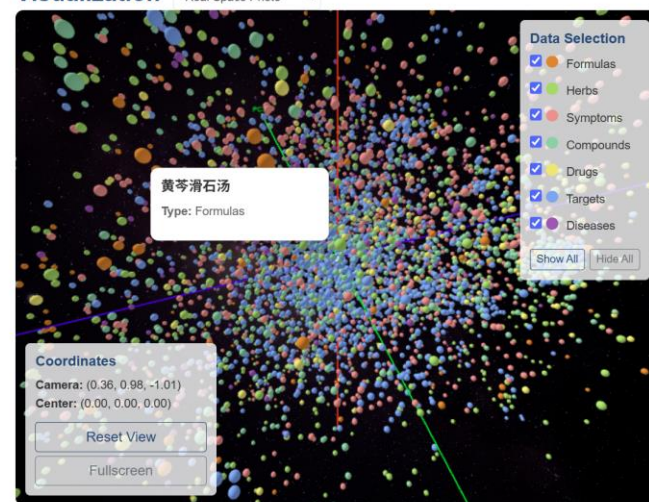
可复用的TCM-ES工具箱



Relation Exploration

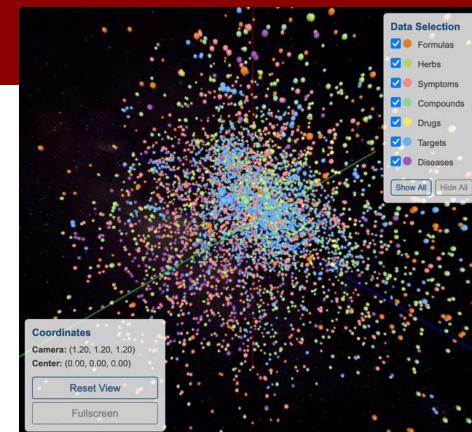
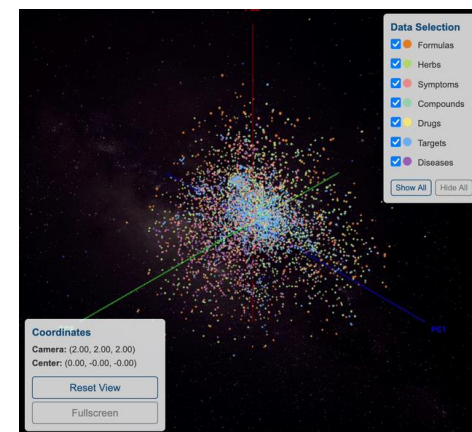
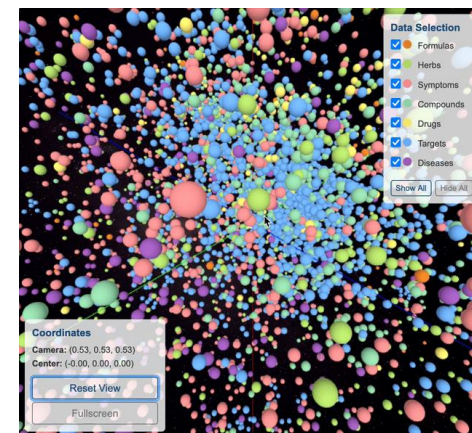
Search related items that are nearest to the input coordinate (a disease or a custom coordinate) within the TCM Embedding Space. This helps identify potentially effective formulas, herbs, compounds, drug-repurposing candidates, or disease-target relationships with shared biological mechanisms, enabling new insights from an integrative Chinese-Western medicine perspective. Click entries in the results to open the association view in the visualization space and intuitively inspect distances to the target coordinate.

Visualization



该工具箱使 TCM-ES 可被直接访问和复用，为多种中医相关研究以及中医与现代生物医学的交叉研究提供量化表征基础。

网址：www.tcmes.net





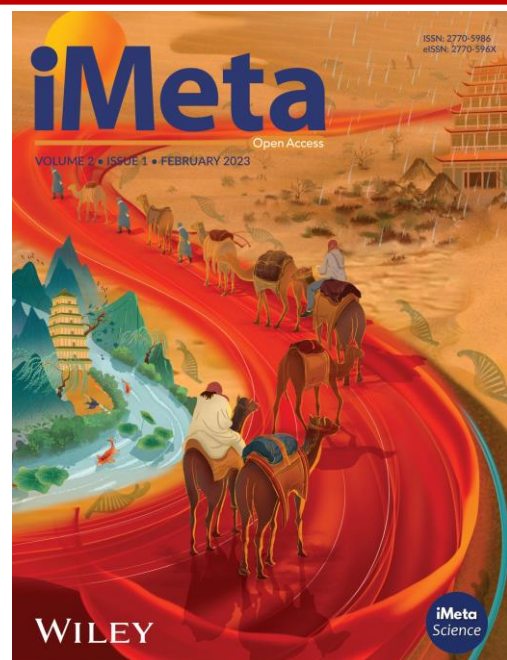
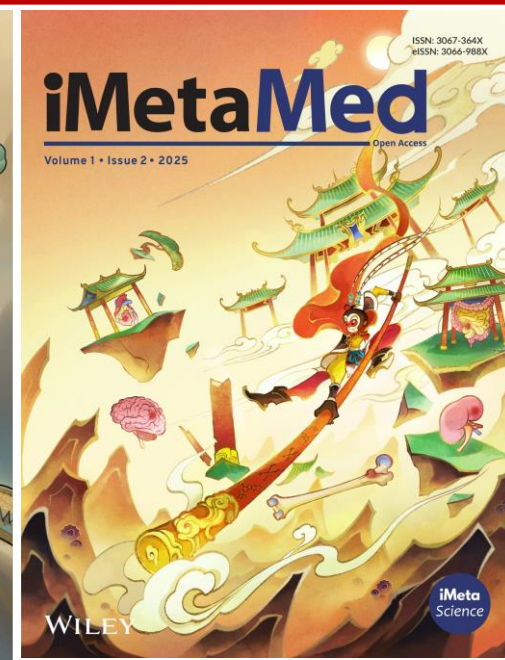
总结

- ❑ 本研究构建了中医嵌入空间（TCM-ES），为传统上以定性方式描述的中医诊疗原则提供了定量表征，并将症状、中药、症状组合和方剂纳入统一的低维坐标系。
- ❑ TCM-ES在未使用证候标签和显式中医原则注释训练的情况下，仍呈现与传统中医原则一致的空间结构，并可用于方剂预测和回顾性临床分析。
- ❑ 在核心TCM-ES固定后引入生物学实体，其空间关系与已知生物过程及人类 PPI 网络中的分子关系呈现一致性。
- ❑ TCM-ES进一步为疾病关系分析和探索性治疗候选优先排序提供了定量基础，并可通过网页工具箱应用于更广泛的中医相关及中医与现代生物学交叉研究。

Li, Haoran, Xingye Cheng, Ziyang Huang, Jingyuan Luo, Qianqian Xu, Qiguang Zhao, Tianchen Guo, et al. 2026.
“Artificial intelligence models Traditional Chinese Medicine principles to integrate with biomedicine.” *iMeta* 5: e70185.
<https://doi.org/10.1002/imt2.70185>

论文相关领域专家名单

序号	姓名	所属单位	电子邮箱	序号	姓名	所属单位	电子邮箱
1	李梢	清华大学中医药交叉研究所	shaoli@mail.tsinghua.edu.cn	16	樊台平	福耀科技大学	tpf1000@icloud.com
2	周雪忠	北京交通大学 计算机科学与技术学院	xzzhou@bjtu.edu.cn	17	冯奕斌	香港大学 中医药学院	yfeng@hku.hk
3	陈士林	成都中医药大学	slchen@cdutcm.edu.cn	18	温成平	浙江中医药大学	wengcp@163.com
4	刘建平	北京中医药大学	liujp@bucm.edu.cn	19	王永华	西北大学 生命科学学院	yh_wang1973@163.com
5	刘保延	中国中医科学院	liuby5505@139.com	20	许海玉	中国中医科学院 中药研究所	hyxu@icmm.ac.cn
6	杨扩	北京交通大学 计算机科学与技术学院	kuoyang@bjtu.edu.cn	21	范骁辉	浙江大学	fanxh@zju.edu.cn
7	曹东升	中南大学 湘雅药学院	oriental-cds@163.com	22	张彦琼	中国中医科学院 中药研究所	yqzhang@icmm.ac.cn
8	成路	中国中医科学院 中医临床基础医学研究所	lv_cheng0816@163.com	23	许国旺	中国科学院 大连化学物理研究所	xugw@dicp.ac.cn
9	姜淼	中国中医科学院 中医临床基础医学研究所	miao_jm@vip.126.com	24	林志秀	香港中文大学 中医学院	linzx@cuhk.edu.hk
10	甘晓	南京信息工程大学 人工智能学院	xiao.gan@nuist.edu.cn	25	张卫东	海军军医大学	wdzhangy@hotmail.com
11	许田	西湖大学 生命科学学院	xutian@westlake.edu.cn	26	林国强	上海中医药大学 创新中药研究院	lingq@sioc.ac.cn
12	路嘉宏	澳门大学 中华医药研究院	jiahonglu@um.edu.mo	27	王琦	北京中医药大学	wangqi710@126.com
13	张伯礼	天津中医药大学	zhangbolipr@163.com	28	徐宏喜	上海中医药大学	xuhongxi88@gmail.com
14	魏佳	香港大学 药理及药剂学系	weijia2@hku.hk	29	秦岭	香港中文大学 医学院	lingqin@cuhk.edu.hk
15	苏式兵	上海中医药大学	shibingsu07@163.com	30	肖伟	江苏康缘药业股份有限公司	kanionlunwen@163.com



iMeta(宏)期刊由宏科学创办，对标**Cell**的生物/医学综合期刊，**SCIE**、**PubMed**收录，影响因子(IF)44.4，位列全球第47，中国第4，**分区表生物学1区Top**，外审平均21天，投稿至发表中位数87天(比同水平期刊快3倍)，欢迎高影响力的研究、方法和综述投稿，CNS外审稿件可带意见和回复转投。

iMetaOmics (宏组学)，定位IF>15对标**NC/SA**的生物/医学综合期刊，已被**ESCI**、**PubMed**等收录。

iMetaMed (宏医学)定位IF>15的医学综合期刊，欢迎投稿！



主页: <http://www.imeta.science>

出版社: <https://wileyonlinelibrary.com/journal/imeta>



iMeta: <https://wiley.atyponrex.com/journal/IMT2>

投稿: iMetaOmics: <https://wiley.atyponrex.com/journal/IMO2>

iMetaMed: <https://wiley.atyponrex.com/journal/IMM3>



office@imeta.science

imetaomics@imeta.science



宣传片



[iMeta](https://www.imeta.science)



更新日期
2026/6/17