



当前位置: 首页 » 学术点击

我校中药学院折改梅研究员团队在机器学习辅助中药复方多过程提取方面取得进展

发布时间: 2023-04-26

中药提取工艺是中药制备中的关键环节, 稳定高效的提取工艺是保证中药临床效果的重要前提。中药学院折改梅研究员团队以中药复方提取工艺参数为优化对象, 以次生代谢产物和多糖的定量核磁、指纹图谱和分子量等多类型数据为目标, 以NSGA-II为框架构建了一个机器学习辅助下数据驱动的多目标优化模型, 该模型预测了设定工艺参数范围内的所有工艺参数最优解组合并通过实验验证了所建立模型的高效和稳健性。该项研究在机器学习辅助下建立了一个可用于多种不同类型指标、多过程优化过程的模型, 利用来自经典正交试验方法的少量试验数据完成预测参数空间范围内的所有可行组合, 突破了优化工艺中只能考察少量指标却需要大量反复实验测定的瓶颈, 为多类型指标的高效中药提取及其智能工业化生产提供了新的方法和模式。

相关研究结果以“Machine learning-assisted data-driven optimization and understanding of the multiple stage process for extraction of polysaccharides and secondary metabolites from natural products”为题发表在中科院一区TOP期刊Green Chemistry (<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2023/gc/d2gc04574e>)。论文被选做该期刊封底文章及2023年热门文章刊出。中药学院硕士研究生马嘉慕为论文第一作者, 中药学院折改梅研究员和袁瑞娟副教授为该论文的通讯作者。

1682579511562016572.jpg

