

中药信息数据系统构建*

□薛兴亚 徐 青 章飞芳 梁鑫森** (中国科学院大连化学物理研究所 大连 116023)

摘 要:针对组分中药的系统研究需要和目前中药数据库的不足,本文设计构建了既包含中药基本信息、又包含化学及生物学表征等现代研究数据,以及对海量数据进行存储、管理和知识挖掘的中药信息数据系统,阐述了中药信息数据系统的构建步骤、中药信息数据库的结构与关系图、中药信息数据管理系统和中药信息数据处理系统的功能等,为中医药现代化开发强有力的信息工具提供了理论指导。

关键词:中药 信息 数据库 化学表征 生物学表征

中药是我国的传统用药,为人类健康已经发挥而且还将继续发挥巨大作用。随着我国加入 WTO,国外医药公司纷纷争抢中国市场。如何应对挑战,利用我国在中药应用方面的优势,在中医药理论的指导下,加速中医药现代化,研制“高效、安全、稳定、可靠”的现代中药成为我国药物研究与开发的重要方向^[1]。

组分中药的系统研究为中医药现代化开创了一条既基本符合中医理论、又与国际市场接轨的研究思路:从方剂、中成药、药材等原材料入手,发展高效高选择性分离材料,采用系统分离方法制备大量的中药标准组分,通过系统化学表征和系统生物学表征剖析其化学物质基础和作用原理,筛选功能组分,开发现代中成药、现代中药和组分中药^[2]。

组分中药的系统研究将产生海量的数据信息,

包括方剂、中成药、药材等的基本信息,以及分离材料的合成信息,系统化学和生物学表征方法及表征数据。而且,组分中药的系统研究是一个长期过程,涉及的中药对象也逐渐积少成多,因此,研究过程中的数据积累甚为必要。目前,虽然已有一些中药方面的数据库^[3-6],但由于缺乏系统设计,功能大多比较单一,尚不能完全满足组分中药的系统研究需要。

鉴于此,我们拟构建中药信息数据系统,收集和管理组分中药系统研究与开发过程中产生的大量数据信息,以化学计量学方法对中药化学和生物信息进行分析和表征,为制定药材和标准组分质量控制提供依据,为高效、深入研究中药药效物质基础、进行组分中药开发提供信息支撑平台。

一、总体设计

中药信息数据系统既包含丰富的自然信息和历

组稿日期:2006-01-08

修回日期:2006-04-16

* 中国科学院知识创新工程重要方向项目(KGCX2-SW-213):基于现代理论和技术的复方中药系统研究,负责人:梁鑫森;国家自然科学基金重点项目(20235020):中药药效组分的指纹图谱分析的方法研究,负责人:梁逸曾。

** 联系人:梁鑫森,本刊编委,博士,研究员,主要从事组分中药的研究,Tel:0411-84379519,Email:liangxm@dicp.ac.cn。

[World Science and Technology/Modernization of Traditional Chinese Medicine and Materia Medica] 91

史研究数据等基本信息,还包括化学及生物学表征等现代研究数据,以及对海量数据分别进行存储、管理和知识挖掘的中药信息数据库、中药信息数据管理系统和中药信息数据处理系统,通过对海量信息的收集与加工,最终形成有价值的新信息和新知识,基本的构建步骤如图1所示。

二、中药信息数据库

中药信息数据库是整个中药信息系统的基础,它是中药信息数据管理系统的主要操作对象,是中药信息数据处理系统的数据来源,是中药质量控制系统的评判依据,其结构如图2所示。中药信息数据库包括组分中药系统研究所涉及的各方面数据,如方剂、中成药、药材的基本信息,分离材料合成方法、系统分离方法、系统化学表征方法,以及相应的系统化学表征,如质谱、紫外(UV)、色谱、核磁、傅里叶红外(FTIR)光谱等现代信息,和系统生物学表征数据,也包括中药数据处理系统所产生的有价值数据,如黄酮、生物碱、……、有机酸等同系组分的色谱规律和质谱规律等。

中药信息数据库采用大型面向对象的关系数据库进行设计,其数据库关系如图3所示,按照组分中药的研究路线,依次创建由方剂、药材、中成药构成的基本信息库,分离材料方法库和系统分离方法库,标准组分库和功能组分库,包含分析方法库、化学表征库、生物学表征库、临床评价库的系列表征库,以及现代中成药库、现代中药库、组分中药库组成的产品库。

三、中药信息数据管理系统

中药信息数据管理系统主要承担中药信息数据库的数据维护任务,其功能如图4所示。

1. 完成信息数据的获取管理

确定信息数据的来源,并

获取方剂、中成药、药材的基本信息,系统分离和系统化学表征等现代信息数据,以及分离材料合成方法、系统分离方法、系统化学表征方法等方法信息数据。

2. 完成信息数据的质量管理

构建信息数据的质量标准,对基本信息数据、现代信息数据、方法信息数据的进行质量评价。

3. 完成数据存储管理

选择适当的信息数据存储方式,设计方便、高效、准确的信息数据存储接口,实现基本信息数据、

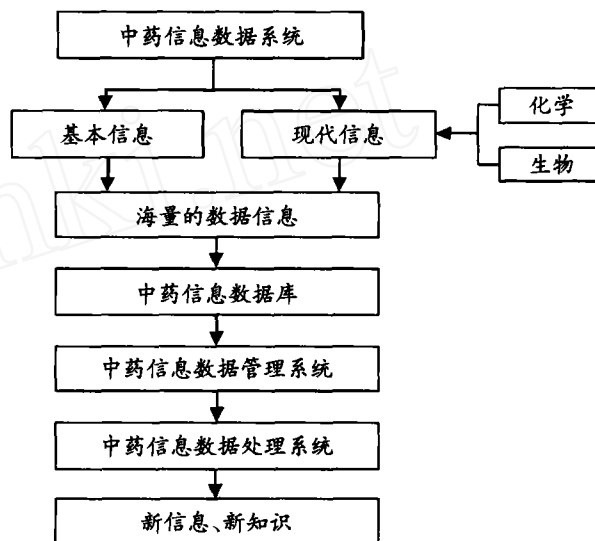


图1 中药信息数据系统构建步骤

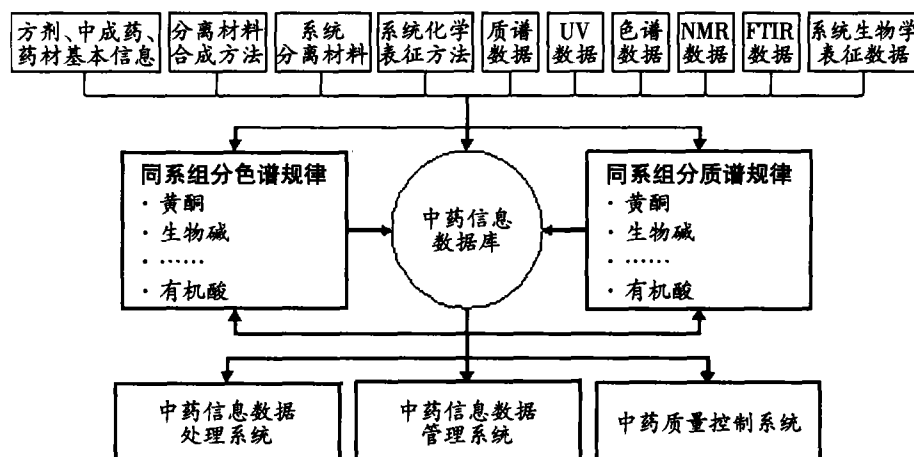


图2 中药信息数据库结构

现代信息数据、方法信息数据的存储。

4. 完成信息数据库维护与管理

实现信息数据库的数据备份、更新和系统维护功能。

5. 完成信息数据处理系统维护与管理

实现对信息数据的处理方法以及处理后所得到信息数据的管理和系统维护功能；

6. 完成质量控制系统维护与管理

实现对质量控制系统的标准和方法管理和系统维护功能。

四、中药信息数据处理系统

中药信息数据处理系统在于对海量中药信息数据的深层次挖掘,为科学、准确地阐释组分中药的物质基础和作用原理提供强有力的分析工具,所设计该系统的六大功能示于图 5。

1. 完成色谱信息数据处理

实现色谱保留参数计算、保留值预测、重叠峰解析、峰形规律回归等数据处理,并采用相关结果进行色谱条件的仿真优化、结构与保留的相关性研究。

2. 完成中药信息数据比较

实现色谱、质谱、核磁、红外、紫外等谱图的比较功能,为中药的指纹谱质量控制、未知成分的结构鉴定提供支持。

3. 完成质谱数据处理

根据测定质谱数据,优化质谱分析条件,剖析已知成分的质谱裂解规律,预测可能结构的中药同系成分的质谱裂解方式。

4. 完成光谱信息数据处理

对氢谱、碳谱、红外和紫外光谱数据进行处理,从中提取特征表征数据。

5. 完成化学/生物信息数据关联

将中药标准组分的组成或谱图信息与其生物活性数据进行关联,考察组分中药的药效物质基础和生物作用原理。

6. 完成多维数据处理

实现对二维高效液相色谱、二维毛细管电

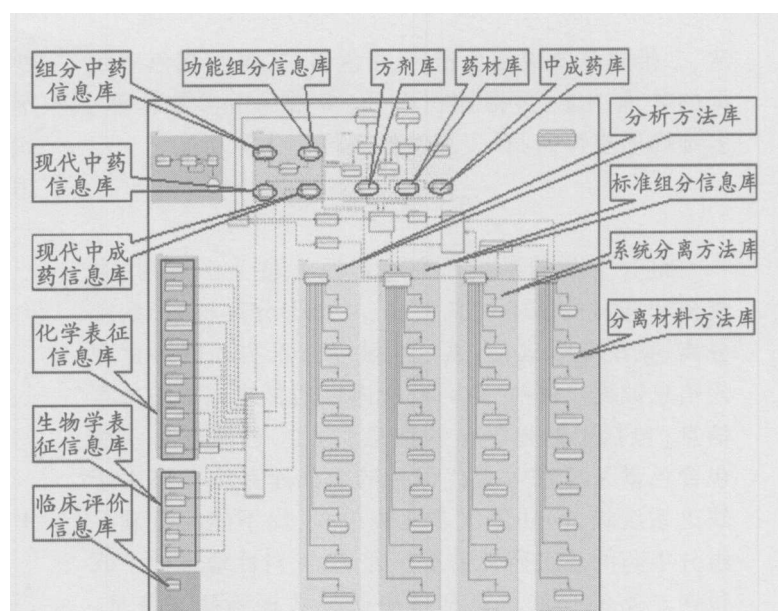


图3 中药信息数据库关系图

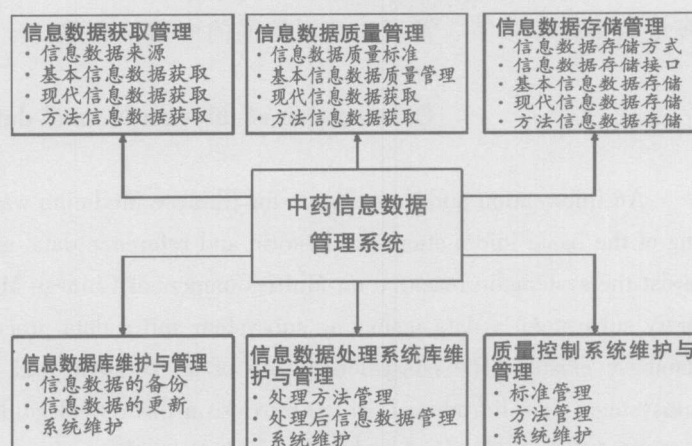


图4 中药信息管理系统功能

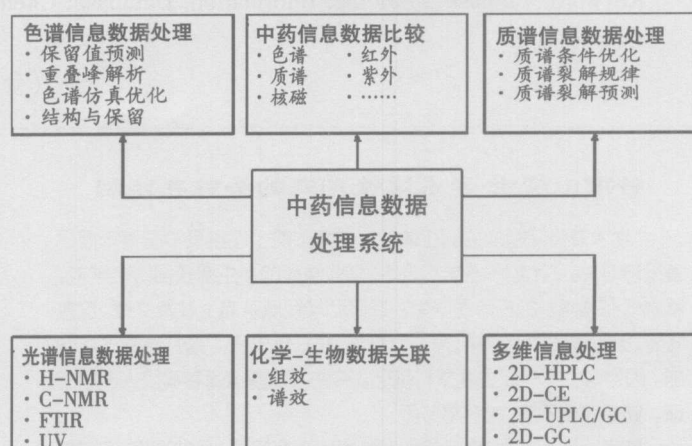


图5 中药信息管理系统功能

泳、二维超高效液相色谱/气相色谱、二维气相色谱数据的处理功能,包括体积积分、多维保留参数计算、多维峰形规律回归、多维操作条件优化等功能。

五、结 语

组分中药的系统研究将涉及大量关于方剂、中成药和药材的基本信息数据,并产生分离材料、系统分离、系统化学表征、系统生物学表征方面的海量现代信息数据。目前,中药数据库以药材或方剂的基本信息(包括中药化学结构信息)为主,也涌现出一些包含色谱及质谱等现代信息的数据库系统,但由于缺乏系统设计,功能大多比较单一,尚不能完全满足组分中药的系统研究需要。因此,针对性地设计了既包含丰富的自然信息和历史研究数据等基本信息、又包含化学及生物学表征等现代研究数据,以及对海量数据进行存储、管理和知识挖掘的中药信息数

据系统,该系统包含中药信息数据库、中药信息数据管理系统和中药信息数据处理系统等部分,通过对海量信息的收集与加工,最终形成有价值的新信息和新知识。

参考文献

- 1 甘师俊,李振吉,邹健强.中药现代化发展战略,科学技术文献出版社,北京:1998.
- 2 梁鑫淼,徐青,章飞芳.中药现代化研究几点思考,中国科学院院刊,2004, 19(3): 218~220.
- 3 刘训红,虞舜,蔡宝昌,等.中药指纹图谱数据库的研究,中成药,2005, 27(10): 1117~1119.
- 4 王龙星,肖红斌,梁鑫淼.中药材全息指纹图谱库的建立,色谱,2002, 20(1): 78~80.
- 5 方晓阳,朱江,梅军,等.中药信息系统的设计与实现,中草药,2001, 32(9): 860~861.
- 6 何敏,沈敏,周家驹.中药数据库的设计与建立,计算机与应用化学,1999, 16(5): 363~364.

Construction of information and data system for Chinese Medicine

An information and data system for Chinese Medicine was designed for storage, management and knowledge-mining of the basic information like historic and reference data, and the modern research data on chemistry and biology to assist the systematic research on Multi-Component Chinese Medicine. This system includes an information and data library subsystem, a data managing subsystem and a data processing subsystem, which is more comprehensive than the database existed. The construction step of this system, and the related structure, relationship and function of three subsystems were introduced, which provides a theoretical guider for developing a powerful information tool for modernization of Chinese Medical and Chinese Medicine.

Keyword: Chinese Medicine; Information; Database; Chemical Characterization; Biological Characterization

(责任编辑:郭 屹,责任编审:张志华,责任译审:王 瑀)

钟南山院士:学术道德问题的关键在体制

“学术道德问题的关键在体制”,钟南山院士在接受中国青年报记者采访时说。“比如一些学院规定,某些学科的学生要获得博士学位,就必须在读博士的三年时间里在国际科学权威杂志上发表文章。这意味着,第一年就要有成果,第二年投稿,第三年发表。这几乎是不可能的。因为博士第一年主要是打基础。一些实验室也逼着科研人员出文章。逼急了做不到,就容易造假。”

钟南山院士认为,现在的评审制度也存在问题。各种评奖、评审都

由政府部门组织进行,比如国家科技进步奖由科技部来评。政府操作带有行政色彩,容易有人际关系等因素的干扰,影响评审的公正性和权威性。申请基金也存在这样的问题。他建议,专业评审应由专业学术委员会承担起来。

钟南山院士说,有关部门、地方政府应对科学研究宽容一些,因为科学研究可能失败。现在一些部门、地方将科研成果与政绩挂钩。逼着科研人员早出、快出成果。这是不正常的。过分拔高,不利于科技人才的成长。像韩国黄禹锡造假,就与政府过高的期望所形成的压力有关。

(文 摘)