

计算机在中药品质管理中的应用

中国药科大学药物分析研究室(南京 210009) 冯 艳* 张 亮 张正行

摘 要 介绍数据库在中药鉴定中的应用及计算机图像技术在中药品质管理中的应用,表明以计算机代替人脑进行中药品质管理可以使手续简化、管理正规,是今后的发展趋势。

关键词 计算机 中药 品质管理

我国中药品种繁多,应用历史悠久,产区广泛,在过去长期使用的人为管理中,常会遇到同名异物、同物异名的现象,给中药管理工作带来诸多不便。80年代以来,随着计算机技术的发展,越来越多的人意识到计算机可作为一个有效的工具用于中药的品质管理,计算机替代人的管理方式将成为今后的发展趋势。笔者将近10年来计算机在中药品质管理方面的应用作一简要综述。

1 数据库在中药鉴定中的应用

中药的品质管理主要在于对中药进行准确鉴别。传统的中药鉴定有4种方法:来源鉴定,性状鉴定,显微鉴定和理化鉴定。目前药材的采购、供应、使用等环节,单纯靠人的记忆力和经验很难达到中药材的准确识别。将计算机用于中药鉴定,建立各种数据库,对中药进行综合分析,能有效地提高鉴别的准确度。

1.1 来源鉴定:对中药药名进行科学分类,避免一药多名,一名多药的现象存在是保证临床正确使用、药材经营及生产的基础。目前国内专家利用计算机直接进行来源鉴定还未见报道。但它的前期工作——资源普查和文献管理的报道却有许多^[1],其中以《全国中草药名鉴》(下简称《名鉴》)^[2]为基础的电脑检索《名鉴》数据库是目前国内外收载中草药品种数量最多,名称收录最全的数据库。《名

鉴》收录了我国中草药13 268种(772科),其中植物药11 471种(369科),动物药1 634种(403科),矿物药163种,各按自然分类系统类科号及拉丁学名字母排序。种及种以下亚种、变种、变型等均按拉丁学名独立为专条,每条记录包括中草药的类科、拉丁学名、植(动、矿)物名、药材名、文献名、地方名、功效、备考8个基本信息著录项。该数据库通过国际通用的拉丁学名,沟通了古今中外对中草药基原的共识,体现了古为今用,中西结合,中为洋用的特色,为继承发扬我国医药传统,开发中草药宝库提供了有效工具。

1.2 性状鉴定:郭继鳌等^[3]采用汉字dBSAE数据库管理系统,对240味常用植物药通过23个性状进行微机性状特征管理。陈顺根等^[4]利用计算机将中药材性状特征具体化,以药材的形状、颜色、气味、断面、质地5个部分的特征为主要依据,与显微和理化特征相结合,成功地建立了125种中药材和数百种伪品的电脑鉴别系统。曾宪武等^[5]借助计算机以19个性状指标检索了41种常见花类药材,并能得到和待检药材完全相同或相似的标准药材性状特征的信息代码。丁秀芳等^[6]采用BASIC语言设计数字文件,将中药材的性状、来源等特征,以帐本的形式存入各自的“磁盘帐本”,不但可以减少因记忆疏忽造成的失误,而且为准确鉴别中药提供了理

* Address: Feng Yan, Department of Analysis Materia Medica, China Pharmaceutical University, Nanjing

冯 艳 女,23岁,1998年毕业于中国药科大学药物分析专业,同年被保送为98届药物分析研究生,导师为张亮副教授和张正行教授,主要的专业研究方向为人工神经网络在中药复方制剂质量综合评价中的应用。

论依据,避免了采购、使用中的争议,同时也省去了查对资料的麻烦,成为中药工作者的得力助手。

1.3 显微鉴定:显微鉴定常用于单凭性状不易识别的生药。它可用于粉末生药、破碎生药及中药成方制剂的鉴别,是药材鉴别常用的方法。早期人们曾采用计算机对药材粉末进行真伪鉴别,通过把真伪品的显微特征设计转化为编码信息,输入并存储在计算机数据区作为资料库,通过对样品的编码信息和资料库中的真伪信息比较判断其真伪^[7]。高陆等^[8]对360种中药粉末建立了标准特征信息资料库微机分析系统,它具有单相特征检索功能和信息反馈功能。郭寅龙等^[9]利用“中西文专家系统开发工具CM.1”在IBM-PC/XT微机上开发研制了24种中药贝母类咨询系统,该系统可对15种显微特征进行鉴别,推导出结论。之后,又有人建立了中药金银花分类咨询系统^[10]。随着计算机的普及,这种方法有可能成为药用植物和药材检识的通路,并会更有效地发挥显微鉴别的优越性。

1.4 理化鉴别:理化鉴别常用于同名异物的生药鉴定,特别适用于含有不同化学成分的生药,其方法有显微化学分析、物理常数、荧光分析、光谱鉴定等。对于性状相似及粉末特征难于鉴别的药材,常需借助红外、紫外光谱等现代化仪器分析予以鉴别,目前四大光谱中只有红外和紫外光谱用于中药鉴定。何洪涛等^[11,12]从紫外光谱的尖峰、峰谷、峰位、谷位等提取药材特征数据,将待检品的紫外光谱特征数据输入计算机并与标准图谱数据比较,采用模糊综合评判法对中药材进行鉴别。郭建平^[13]设想从药材紫外光谱的全息图中采集出更多的具有鉴别意义或表达个体差异的信息来充实各个样品的特征记录,并建立了139种药材的紫外光谱数据库,实现数据库的微机管理,之后他们又研制了该系统的管理软件^[12]。田进国等^[14]借助3600型专用计算机和红外分光光度仪,研究了60种植物药和15种矿物药,共测得700张红外光谱

图。该法重现性好,仅凭红外光谱就可准确鉴别75类药材。苏薇薇等^[15]以《药品红外光谱集》收录的582种药品的红外光谱为标准模式,建立了常用药品红外光谱数据库,并设计了对未知药品快速识别的程序系统。用红外光谱对药品进行鉴别是药品检验中最准确、最可靠的方法,其优点是高度的专属性,使这种研究有较好的应用前景。

2 计算机图像技术在中药品质管理中的应用

计算机图像技术是近20年来国际上新兴的计算机技术,是人工智能领域中的一个极为重要的方面。秦路平等^[16]采用计算机图像分析技术和体视学原理测定蛇床子属4种果实横截面积和油管总横截面积,并发现二者的比值与挥发油含量正相关^[16]。为探索扩大图像分析技术在生药领域的应用,他们^[17]又采用了体视学方法和计算机图像分析技术对中药蛇床子属4种植物的果实、花粉粒以及维管束、气孔和内胚乳细胞等进行分析,测定其面积、周长、直径、形状因子、体积等指标,还采用该技术对22种花类生药的花粉^[18]和15种叶类生药气孔^[19]进行分析测定。在配有CCD摄影机的显微镜下观察,用CCD摄影机对花粉标本和叶类药材标本采样,将采样图像输入Apollo DN 3500图像分析系统,待图像完成格式转化后,用特定的图像分析程序进行分析测定。董国明等^[20]将仙茅属7种植物花粉置于Apollo Domain Series 3500型电子计算机图像分析仪上观察,通过对花粉定量研究,发现该属植物花粉体积相差很大,种间两两比较均有显著差异,可作为鉴定和分类的依据。凌云等^[21]利用录像机作为计算机外设,建立了一套中药图象和文字数据库。该数据库不同于传统意义上的图像数据库,它是建立在非传统计算机外部设备上,即建立在常规的录像机、监视器上,其费用大大低于直接在计算机上建立图像库。数据库收录了100余味果实种子类中药的扫描电镜图、原植物和药材彩色图像及有

关研究文献。从以上的研究发现,计算机图像技术与常规形态测量相比有如下优点:(1)测量精确可靠,重复性好。(2)可以测量不规则几何学的形态学参数,并可得到立体的参数,使其在生药学研究中具有广阔的应用前景。同时,微机与扫描电镜、图像系统的结合为中药鉴定学的研究建立了一个新方法,为全面控制中药和中成药的质量,以及粉末、秘方和验方的解析提供了技术基础,但同时我们面临一个共同问题是:在中药研究中如何对形态描述标准化?这有待于在今后的研究中得以解决。

3 其它方面的应用

中草药化学成分的晶体结构图谱库系统是我国建立的第一个单晶结构数据库^[22],汇集了近 250 个中草药化学成分晶体结构,其功能远远超出了中药鉴定而将成为从事揭示药物分子结构与活性关系的多学科研究中共享的第一个图谱库。它以现代分析方法(波谱分析和 X-射线分析)与现代计算机手段(微机乃至工作站)窥视药物结构与活性,并在分子水平上深入研究其机制,以期创造出源于自然又超于自然的新药。

由断层图像序列重建物体三维模型及其可见表面显示是当今国际科学计算机可视化领域中十分活跃的研究课题之一。吕扬等^[23]开发建立了主要川产道地药及其对照品的计算机三维重建模型图鉴系统。该技术突破了传统组织学和形态学表达二维形态资料的局限性,能为生药学研究和教材提供形象、直观、立体感强的三维动态图像资料及其形态学参数。

综上所述,电子计算机在中药品质管理

中发挥着越来越重要的作用。它为综合评价中药材优劣、替代品的寻找^[24]等开辟了新手段,并且随着图像技术的发展,大大提高了中药品质管理的合理、科学、有效性。另外计算机图像分析处理和显微技术 CT、核磁共振等技术的融合将不断完善中药材鉴定、成分分析的方法和技术^[25]。随着计算机与中药管理更紧密融合,可以展望在不久的将来,我们的中医药产品必将进入国际市场并占有相当地位。

致谢:本论文是在导师张亮副教授和张正行教授的悉心指导下完成的,在此,谨向他们表示由衷的敬意和深深的感谢!

参考文献

- 1 熊卫国,等. 中国中药杂志,1998,23(2):124
- 2 余友芹,等. 中国中药杂志,1993,18(9):562
- 3 郭继鳌,等. 辽宁中医药杂志,1987,11(7):45
- 4 陈顺根,等. 中药材,1994,17(4):14
- 5 曾宪武,等. 浙江医科大学学报,1989,18(2):53
- 6 丁秀芳,等. 基层中药杂志,1990,2:46
- 7 张贵君,等. 中医药信息,1987,3:43
- 8 高 陆,等. 中成药,1992,14(4):44
- 9 郭寅龙,等. 中国药科大学学报,1989,20(5):294
- 10 安登魁,等. 西北药学杂志,1992,7(2):36
- 11 宋 红,等. 中国中医药信息杂志,1997,4(1):37
- 12 何洪涛,等. 中国中药杂志,1993,18(5):313
- 13 郭建平,等. 中药材,1992,15(5):19
- 14 田进国,等. 中草药,1989,20(5):29
- 15 苏薇薇,等. 广东医学院学报,1994,10(3):162
- 16 秦路平,等. 中国中药杂志,1993,18(7):395
- 17 秦路平,等. 中国中药杂志,1996,21(1):9
- 18 秦路平,等. 第二军医大学学报,1996,17(1):76
- 19 秦路平,等. 第二军医大学学报,1996,17(5):481
- 20 董国明,等. 第二军医大学学报,1994,15(3):233
- 21 凌 云,等. 中国中药杂志,1995,20(10):58
- 22 郑启泰,等. 药学报,1993,28(6):442
- 23 吕 扬,等. 生物医学工程学杂志,1997,14(2):131
- 24 苏薇薇,等. 广东医学院学报,1994,10(1):40
- 25 刘新明,等. 中草药,1998,29(4):283

(1999-03-12 收稿)

1999-04-21 修回)

敬告读者

本刊编辑部尚存部 过刊精装合订本,包括:1991~1994年(50元/年);1995~1997年(102元/年);1998年(120元);1996年增刊(50元);1997年增刊(45元);1998年增刊(55元);1999年增刊(70元)。欢迎来函来电订购。