

中药信息系统建立初探

国家药品监督管理局药品审评中心(北京 100050) 陈 峰*
中国中医研究院中医药信息研究所 崔 蒙

摘 要 在对国内外与中药研究相关的信息数据库进行调研的基础上,提出通过异质异构多数据库融合构造技术方法,初步建立中药信息系统,以推动我国中药现代化的发展。

关键词 中药 信息系统 数据库 人工智能

21世纪是知识经济的时代。在知识经济时代,信息的传播、更新速度对于学科的发展将具有极其重要的意义,在某种意义上,谁能够以更快的速度获得信息、更新信息,谁就能够取得学科的领导地位。

为了促进我国中药领域的发展,使其在世界上继续保持领先的地位,就必须实现中药现代化。实现中药现代化的一条重要途径,就是加快中药信息、知识的传播和更新速度。而建立中药信息系统,利用国际互联网进一步扩大中药电子信息数据的使用范围,则是实现中药知识传播和更新速度加快的重要途径^[1]。

1 国内外现状

目前,在世界范围内已经建立了大量的中药信息系统数据库及其相关的天然产物数据库。在国内如南京中医药大学编写《中华本草》的数据;中国医学科学院药用植物研究所的760味中药数据库;中国中医研究院中医药信息研究所的中医文献库、中医药成果数据库;中国中医研究院中药研究所的中草药数据库;中国药材公司的全国中药材资源普查资料数据库;国家医药管理局的中国药学文摘数据库;天津医学情报所的中草药数据库;天津药物研究院的中药化学结构数据库;北京中医药大学建立的中医方剂数据库;南京中医药大学编写的《中医方剂大辞典》的电子数据库等。在国外如美国化学文摘数据库;香港中文大学中药研究中心的中药毒副作用数据库;韩国汉城大学天然药物研究所的天然药物数据库;美国伊利诺斯大学天然药物研究所的植物药化学库等^[2]。这些数据库中的一部分已经放置在国际互联网上提供全球范围的数据检索服务。

1998年2月,美国哥伦比亚大学利用在印度召

开“国际药用植物保护、利用、贸易和文化传统大会”的机会,组织了有关国际传统医学信息系统数据库资源共享问题的专题讨论会。参加者包括美国、中国、日本、英国、法国、韩国、印度及一些非洲国家进行传统医药信息系统数据库研制的机构。美国哥伦比亚大学组织该项目的长期目的是将全球范围内的传统医学信息系统数据库联合起来,建立一个共享平台,使全球对此感兴趣的人能够同时使用所有的传统医学信息系统数据库;短期目的是尝试不同类型的信息系统数据库是否能在同一个平台上运行。1999年10月,上述与会者将在韩国召开第二次会议,以检验这一年多以来此项研究的进展。

在此基础之上,我国“九·五”期间启动了攀登项目“中药复方人工智能信息系统的研究”,为中药信息系统的建立奠定了坚实的基础^[3]。本文作者为此项目课题负责人之一。

2 中药信息系统的主要内容

2.1 建立与完善中药基本数据库系统

2.1.1 在对国内外现有中药研究开发信息数据库进行充分调研和评价的基础上,根据我国国情,遵照“有所为,有所不为”的原则,集中建立与完善部分社会效益和经济效益最佳的数据库,对现有电子数据资料进行资源重组、加工整理;推广统一的建库标准原则,提高新建中药数据库的共享程度。

2.1.2 充分利用“九·五”国家攀登项目“中药复方人工智能信息系统的研究”的成果,对新建中药数据库的总体构架进行设计和论证,并制定统一的技术规范,包括资料采集范围和规范、用词术语规范、编码规则规范、词表规范、数据结构规范等。

2.2 完善与建立中药研究开发信息系统

* Address: Chen Feng, Center for Drug Evaluation, State Drug Administration, People's Republic of China, Beijing

陈峰,女,华中师范大学化学系毕业,后为浙江大学科研管理专业研究生,多年从事药用植物化学、资源及信息系统管理的研究,曾任中国医学科学院药用植物研究所副研究员、科研处处长,现任国家药品监督管理局药品审评中心副研究员、处长。先后主持与参加了国家级、省部级科研项目近20项,发表学术论文30余篇,作为主编与主要人员正式出版学术专著3部。作为主要完成者获国家级、部级科技进步二等奖各1项,并获全国卫生系统杰出青年岗位能手。目前作为负责人之一承担国家攀登计划项目课题、国家“九·五”科技攻关课题各1项。为国家中药现代化管理办公室成员、中国药学会高级会员。

2.2.1 建立新的中药单味药数据库: 中药单味药是组成中药复方的基础,其本身亦是由多种成分组成的,具有极高的开发价值。应在已有中药单味药数据库的基础之上,建立含有约 10 000种单味中药,并具有较全面著录项目(包括传统研究和现代研究著录项目)、能适用于 KDD(知识挖掘)等人工智能分析软件的大型中药单味药数据库。

2.2.2 完善中药复方数据库: 目前国内已有一些较成形的中药复方数据库,建议在以往工作的基础之上,加以补充完善,补充近代经验方及其现代研究成果的著录项目,尤其是增加那些适用于人工智能分析的数据,以便能够对中药复方数据进行二次开发和深入挖掘。

2.2.3 建立专门的中药化学成分数据库: 国内外现有中药化学成数据库或相关天然产物化学成分数据库的数据尚不能适应目前中药研究的需要,而我国尚缺乏具有较大规模的此类数据库。建议建立含有中药化学成分名称、分子式、二维图像及部分三维图像的中药化学成分数据库,以满足国内外研究的需要。

2.2.4 完善中医药科研成果数据库: 中医药科研成果是国家各级政府部门投资支持的研究项目,其中相当一部分成果尚未得到推广应用,而且由于信息缺乏沟通,低水平重复研究的问题相当严重。建议组织全国与中医药相关的科技信息单位,在各级政府部门的支持下,完善现有的中医药科技成果数据库,使现有成果得以发挥作用,并最大限度地避免重复投资。

2.2.5 完善中医药期刊文献数据库: 目前国内已有多个建国后的期刊文献数据库,其中最大的是中国中医研究院中医药信息研究所的中国中医药期刊文献数据库,该数据库收录了 1949年至今的国内公开出版发行的生物医药期刊中有关中医药的文献,现有记录近 50万条,覆盖了该阶段国内相关文献的 90%以上。其缺陷是:(1)文摘量不够;(2)未收录国外相关期刊的相关文献。建议补充国内部分文摘及国外相关期刊中的有关文献,将该数据库建设成为全球最具权威性的中医药期刊文献数据库。

2.2.6 建立中医药术语中外文译释数据库: 中医药术语的中外文译释工作已成为中医药国际化发展的障碍。尽管在此方面,国内外学者已经作了大量的工作,但至今尚未形成能够推广应用的信息数据库。建议建立中医药术语中外文译释信息数据库,以促进中医药国际交流的发展。

2.3 完善与建立中药市场信息系统

2.3.1 建立中医药法规数据库: 目前,国内外尚无完善的中医药法规数据库,尤其是国外与中医药相关的法规数据库工作基本处于空白状态。在国内现有的工作基础之上,建立中医药相关法规数据库,可为促进中医药的产业化、国际化提供服务。

2.3.2 建立中成药产品信息数据库: 收集目前国家已批准上市的中成药产品信息数据,建立中成药产品数据库与中药保护品种信息数据库,为促进中成药的市场开发提供服务。

2.3.3 完善中药材市场数据库: 建议充分利用已建立的、国家承认的中药材交易市场数据库,形成全国中药材交易市场联网,为用户提供动态中药材市场数据。

2.3.4 完善中药生产企业数据库: 建议在已有同类数据库的基础上进行完善,在不损害厂家利益的前提下,为市场提供尽可能多的数据,以促进中药生产的发展。

2.3.5 建立国外中药投资环境、市场需求、经营程序数据库: 目前国内尚无此类数据库。建议充分利用已掌握的有关资料,多渠道、多途径收集相关信息,建立国外中药投资环境、市场需求、经营程序数据库,以促进中药国际化的进程。

2.4 建立联邦制分布式中药数据库平台: “九·五”国家攀登项目“中药复方人工智能信息系统的研究”已研制出一种联邦分布式数据库体系结构。在这种体系结构中,各数据库对称分布、地位等同;数据库之间在合作前或合作中的通信过程视为各数据库间的协商,通过协商挖掘出有效规律,解决数据库之间的冲突,促进数据库之间的合作,提高多数据库系统的一致性。数据库之间的协商应符合简单性原则,即低通讯代价及低计算复杂度。建议在此研究成果的基础上,建立联邦制分布式中药数据库平台,提供基于异构多数据库融合技术建立的数据仓库检索服务。并通过多种途径与美国哥伦比亚大学研制的全球范围内传统医学数据库共享平台建立联系,以便为用户提供更大范围的中药数据服务^[3]。

3 结论

在已有的工作基础之上,充分利用全国中医药及相关领域现有中药数据库以及国外相关天然产物数据库,并根据需要新建一批必要的中药数据库,形成含有中药市场信息系统和中药研究开发信息系统在内的中药信息系统。并将此系统置于通过异构多数据库融合构造技术方法研制的多功能、分布

式、联邦制中药复方数据库的平台上,以适用于国内外现有各类中药复方及天然药物数据库,通过互联网,分层次向不同用户提供不同服务。在此基础上,进一步利用以 KDD方法为主建立起来的中药复方人工智能分析软件,对该数据仓库进行二次开发,建立我国特有的大型中药复方新药开发研究信息分析中心。因此,中药信息系统的建立将为我国中药数据库的发展创造良好的条件,将从根本上改善

我国中医药领域信息工作的基础条件,将极大地促进我国中医药事业的发展。

参考文献

- 1 陈 峰.世界科学技术——中药现代化,1999,1(2): 28
- 2 甘师俊,李振吉,邹健强.中药现代化发展战略.北京:科学技术文献出版社,1998 214
- 3 崔 蒙.世界科学技术——中药现代化,1999,1(1): 61

(2000-06-15收稿)

枳椇属植物研究进展

中国医学科学院 药物研究所(北京 100050) 马 林* 宋万志
中国协和医科大学

摘 要 枳椇属植物含皂苷、黄酮、生物碱等成分,皂苷是其主要活性成分,具有镇静、镇痛、保肝等多方面药理活性。本属植物有可能成为抗衰老和治肝病的药物,由于发现有极好的抗致突变活性,可用于治疗癌症。应对枳椇属植物综合开发、利用。

关键词 枳椇属 皂苷 药理作用

枳椇为鼠李科拐枣属(*Hovenia* Thunb.)植物,全世界有3种3变种,分布于中国、日本、朝鲜和印度等国。我国有3种2变种。即北枳椇 *H. duleis* Thunb., 枳椇 *H. acerba* Lindl., 毛果枳椇 *H. trichocarpa* Chun et Tsiang 倭江枳椇 *H. acerba* Lindl. var *kiukiangensis* (Hu et Tsiang) C. Y. Wu ex Y. L. Chen., 光叶毛果枳椇 *H. trichocarpa* Chun et Tsiang var. *robusta* (Nakai et Y. Kimura) Y. L. Chou et P. K. Chou 枳椇子始载于《唐本草》,记有“味甘、平,无毒。主头风、小腹拘急”。枳椇子有解酒毒、止渴除烦、止呕、利大小便的功能。笔者就枳椇属植物的化学成分、药理作用综述如下。

1 化学成分

1.1 皂苷:1974年 Kawai 等从北枳椇根皮和叶中分得枳椇皂苷(saponin) G₁ G₂ D G₃ H和酸枣皂苷 B(ujuboside B)^[1]。1996年又从种子中分得北枳椇皂苷(hovenidulcioside) A₁ A₂ B₁ B₂和北拐枣皂苷Ⅲ(hodulosideⅢ)。1992年 Yashikawa 等从北枳椇和日本产的绒毛枳椇 *Hovenia dulcis* Thunb. var. *tomentella* Makino 叶中又分得北拐枣皂苷I

~ X,以及北枳椇皂苷I(hovenisaponin I),均为抗甜味成分^[2]。梁侨丽等从枳椇叶中分得枳椇皂苷(hoveacerboside) A₁ A₂和枳椇皂苷(hovenia saponin) C₂^[3]。近年 Yoshikawa 等从毛果枳椇中分得毛果枳椇皂苷(hovetrichoside) G D E F G等5种皂苷^[4]。

1.2 生物碱:1973年 Takai 等从北枳椇根皮中分得肽类生物碱:异欧鼠李碱(frangulanine)和枳椇碱(hovenin) A B,枳椇碱 A即为去-N-甲基异欧鼠李碱(des-N-methylfrangulanine)^[5]。1994年金宝渊等从其种子中分得β-carboine系生物碱化合物黑麦草碱(perololyrine)和异欧鼠李碱^[6]。

1.3 黄酮:1996~1997年梁侨丽等人报道,从枳椇叶和北枳椇种子中分得山柰酚、槲皮素、异槲皮素、山柰酚-3-O-α-吡喃鼠李糖(1→6)-β-D-吡喃半乳糖苷、槲皮素-3-O-α-L-吡喃鼠李糖、山柰酚-3-O-云香糖和芦丁;双氢山柰酚(dihydrokaemferol), (+)-3,3',5,5',7-五羟基双氢黄酮和(+)-双氢杨梅素〔(+)-dihydromyricetin〕等^[7,8]。

1.4 脂肪:1997年李光明报道北枳椇子种子含脂肪约7%,5个不饱和脂肪酸,22个饱和脂肪酸,含

* Address: Ma Lin, Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Medical Sciences, Peking Union Medical College, Beijing

马 林 男,1987年7月毕业于吉林农业大学特产系药用植物专业,获农学学士。同年分配到中国医学科学院药物研究所工作,现为助理研究员。多年来主要从事药用植物分类鉴定及资源调查,同时承担一些中药材样品有效成分分析工作,先后参加过“中药五味子类木脂素资源利用的研究”,“常用药材品种整理和质量研究——五味子、黄芩、射干、藁本专题”等国家攻关课题,先后多次荣获部级一、二、三等科技进步成果奖。