中药指纹图谱信息化构建及其在质量控制中的应用研究

李明姣
湖南省中西医结合医院 湖南 长沙 410006

摘 要 中药质量稳定性与可控性是中医药现代化发展的核心命题。传统质量控制方法存在主观性强、指标单一等局限，难以满足复杂体系的质量评价需求。本文聚焦中药指纹图谱信息化构建技术，系统探究色谱质谱联用技术、数据标准化处理、数据库优化及平台功能设计等关键环节，构建涵盖数据采集、处理、存储、分析的全流程信息化体系。通过原药材准入、生产过程监控、成品质量评价及全程追溯等应用场景验证，该体系可实现中药质量的多维度精准把控。研究结果表明，信息化指纹图谱技术能有效提升中药质量控制的科学性与高效性，为中医药产业的标准化、规范化发展提供技术支撑，具有重要的实践价值与应用前景。

关键词 中药指纹图谱；信息化构建；质量控制；应用策略；数据标准化

Informatized Construction of Traditional Chinese Medicine Fingerprint and Its Application in Quality Control Research

Li Ming-jiao
Hunan Provincial Hospital of Integrated Traditional Chinese and Western Medicine, Changsha 410006, Hunan Province, China

Abstract The stability and controllability of traditional Chinese medicine (TCM) quality are core issues in the modernization of TCM. Traditional quality control methods, characterized by strong subjectivity and single indicators, struggle to meet the evaluation needs of complex systems. This paper focuses on the informatized construction technology of TCM fingerprints, systematically exploring key aspects such as chromatographic-mass spectrometry coupling technology, data standardization processing, database optimization, and platform functional design. A comprehensive informatized system covering data collection, processing, storage, and analysis is constructed. Validated through application scenarios including raw material admission, production process monitoring, finished product quality evaluation, and full-process traceability, this system enables multidimensional and precise control of TCM quality. The research results indicate that informatized fingerprint technology can effectively enhance the scientificity and efficiency of TCM quality control, providing technical support for the standardized and regulated development of the TCM industry, with significant practical value and application prospects.

Key words Traditional Chinese Medicine Fingerprint; Informatized Construction; Quality Control; Application Strategy; Data Standardization

中医药作为我国传统文化的瑰宝，其疗效确切且毒副作用小，在全球医药领域越来越受关注。但是，中药成分复杂，产地、加工工艺、存储条件这些因素都会影响它的质量稳定性，这可给质量控制工作带来了巨大挑战。

中药指纹图谱技术凭借整体性和特征性的优势，成为中药质量评价的重要手段。随着信息技术发展得越来越快，指纹图谱信息化构建就成为突破传统技术瓶颈的关键路径，能实现数据的高效、共享和深度分析[1]。本文就围绕中药指纹图谱信息化构建的核心技术和应用策略展开研究，想给中药质量控制提供更科学、系统的技术方案，推动中医药产业高质量发展。

1 中药指纹图谱信息化构建

1.1 核心技术支撑体系

中药指纹图谱信息化构建的实现离不开多学科技术的协同支撑。如表1所示，色谱与质谱联用技术是获取指纹图谱基础数据的核心手段，如高效液相色谱、气相色谱等技术，分离效率高，检测灵敏度也高，能把中药里复杂的成分有效分离出来。质谱技术能提供精准的成分结构信息，为指纹图谱特征峰的识别提供依据。数据采集技术也很关键，改进样品前处理方法，优化色谱、质谱检测参数，能减少实验误差，提高数据的重现性和准确性。传感器技术的应用，能实时监测样品检测过程中的温度、压

力、流速等关键参数，保障数据采集的标准化[2]。信息技术和分析化学技术的深度融合，为指纹图谱信息化构建打下坚实的技术基础，使后续的数据处理和分析工作能顺利开展。

表1 中药指纹图谱信息化构建核心技术对比

技术类型	技术特点	应用场景	优势
色谱－质谱联用技术	分离效率高，检测灵敏度强	成分分离与结构鉴定	能全面捕获中药成分特征
化学计量学方法	数据降维，特征提取	数据处理与分析	简化数据复杂度，突出关键信息
分布式存储技术	存储容量大，访问速度快	数据存储与管理	保障海量数据安全高效存储
云计算技术	资源共享，弹性扩展	平台部署与运行	降低运行成本，提高服务稳定性

1.2 标准化数据处理流程

数据处理标准化是中药指纹图谱信息化构建的核心环节，直接影响指纹图谱的准确性和可比性。首先要进行数据预处理，原始检测数据可能存在基线漂移、噪声干扰、峰形畸变等问题，需要用平滑滤波、基线校正、峰识别与匹配等技术，把无效信息去掉，提取有效特征峰。在峰匹配的时候，用保留时间和相对峰面积结合的方法，建立特征峰匹配规则，确保不同批次、不同样品的指纹图谱能有效比对[3]。特征提取环节用主成分分析、偏最小二乘判别分析等化学计量学方法，从复杂数据里筛选出有效的特征变量，简化数据维度，还能保留关键质量信息。

1.3 数据库构建与优化

数据库是中药指纹图谱信息化体系的核心载体，其结构设计与数据质量直接影响信息化平台的应用效果。数据库的构建需涵盖中药基础信息、指纹图谱数据、质量标准数据等核心内容。中药基础信息包括药材名称、产地、科属、加工方法等，指纹图谱数据包含原始检测数据、预处理后的数据、特征峰数据等，质量标准数据则涵盖国家药典、行业标准及企业内控标准等相关信息。在数据存储方面，采用分布式存储技术，实现海量数据的安全存储与高效访问，同时建立数据备份与恢复机制，确保数据的完整性与安全性。数据共享机制的设计遵循分级授权原则，为科研机构、企业、监管部门等不同用户提供差异化的数据访问权限，促进数据资源的合理利用。

1.4 信息化平台功能设计

信息化平台是实现中药指纹图谱数据管理与应用的关键载体，其功能设计需满足不同用户的实际需求。如图1所示，查询功能模块能让用户通过药材名称、产地、批次等多维度检索指纹图谱数据，还能查看详细的检测参数和质量评价结果。分析功能模块集成指纹图谱相似度评价、特征峰对比、多维统计分析等工具，用户可以根据自己的需求进行数据深度分析，挖掘中药质量变化规律。预警功能模块会基于预设的质量控制阈值，对检测数据进行实时监测，一旦数据超出阈值范围，就会自动发出预警信号，提醒相关人员赶紧采取干预措施。此外，平台还有数据统计、报表生成、数据导出等功能，方便用户汇总数据和展示成果。平台界面设计遵循简洁易用的原则，采用模块化布局，让用户操作起来很便捷，还支持多终端访问，提高了平台使用的灵活性。

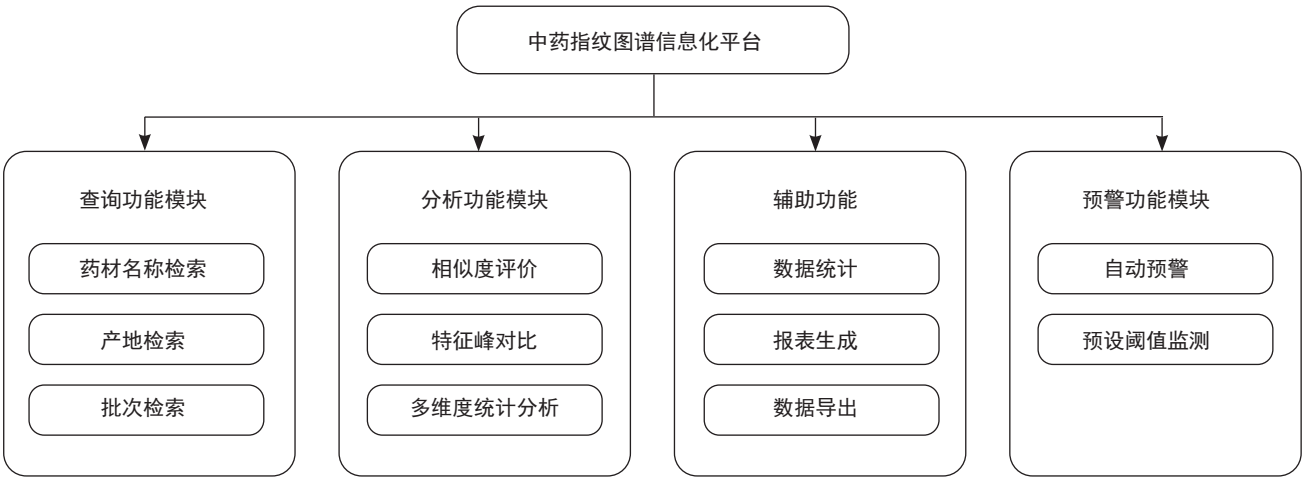

图1 中药指纹图谱信息化平台

2 中药指纹图谱信息化构建在质量控制中的应用策略

2.1 原药材准入环节的质量控制

原药材质量是中药产品质量的源头，建立基于信息化指纹图谱的原药材准入机制，能从根本上保障中药质量。在原药材采购时，要求供应商提供对应的指纹图谱数据，然后通过信息化平台和标准指纹图谱进行相似度比对[4]。平台根据预设的相似度阈值，自动判断原药材质量合不合格，相似度符合要求的原药材才能入库，不符合要求的则拒收。同时，结合数据库里存储的产地、加工工艺等信息，对原药材进行溯源管理，建立原药材质量档案。

2.2 生产过程的实时质量监控

中药生产过程非常复杂，很多环节都会影响产品质量，所以实时质量监控对保障生产过程的稳定性十分关键。在提取、分离、纯化等关键生产环节，设置在线检测点，用传感器技术实时采集样品指纹图谱数据，再传输到信息化平台。平台对采集到的数据进行实时分析，和预设的过程质量标准比对，如果发现数据偏离标准范围，立即发出预警信号，生产管理人员就能根据预警信息及时调整工艺参数，保证生产过程稳定可控[5]。

2.3 成品质量评价与放行

成品评价是中药质量控制的最后一道关卡，信息化指纹图谱技术能为成品质量评价提供科学、全面的依据。在成品检测环节，用标准化的检测方法获取指纹图谱数据，然后上传到信息化平台。平台会和标准指纹图谱进行相似度分析，结合特征峰的相对峰面积、相对保留时间等指标，对成品质量进行综合评价。同时，整合生产过程中的质量数据，形成成品质量追溯报告，包括原药材信息、生产工艺参数、过程检测数据等内容。只有当成品指纹图谱相似度符合要求，各项质量指标都达到标准时，才能准予放行。

2.4 全程质量追溯体系构建

构建全程质量追溯体系是保障中药质量安全的重要手段，中药指纹图谱信息化构建为追溯体系的建立提供了核心技术支撑。把原药材采购、生产过程、成品检测等各个环节的指纹图谱数据和相关信息关联存储起来，形成完整的质量追溯链条。消费者、监管部门、企业等可以通过扫描产品二维码等方式，登录信息化平台，查询产品的质量追溯信息，如原药材产地、加工工艺、检测结果等都能查到[6]。一旦发现质量问题，就能快速定位问题出在哪一环节，找到责任主体，及时采取召回等措施，降低质量风险。

3 结束语

本文围绕中药指纹图谱信息化构建及其在质量控制中的应用做了系统研究，构建了包括核心技术支撑、标准化数据处理、数据库优化和信息化平台设计的完整技术体系，还提出了原药材准入、生产过程监控、成品质量评价和全程追溯的应用策略。研究表明，中药指纹图谱信息化构建能突破传统质量控制方法的局限，实现中药质量的全面、精准、高效控制，为中医药产业的标准化、规范化发展提供有力的技术支撑。

参考文献

[1]王慎兴,曹玲,黄青,等.基于MALDI-TOFMS肽指纹图谱技术的中药鹿血晶掺伪鉴别研究[J].质谱学报,2025,46(1):115-122.

[2]朱浩宇,顾荣领,杜士杰,等.评价中药指纹图谱批次相似性的h多重相似性指数[J].分析测试学报,2025,44(6):1202-1207.

[3]周炳文,朱丽丽,朱林,等.基于人工智能-多元多息指纹图谱探索中药一法通识品种鉴定新方法[J].分析测试学报,2021,40(1):106-111.

[4]龚佳佳,黄春跃,胡晓,等.关节克痹丸UPLC指纹图谱的建立及6种乌头类生物碱含量测定[J].中国医药工业杂志,2025,56(8):1036-1043.

[5]李秋萍,李倩,谭柳萍,等.基于指纹图谱和网络药理学的通脉乐口服液质量标志物预测[J].中国药业,2025,34(11):54-60.

[6]纪忠娟,司佳,董聪,等.元和正胃片HPLC指纹图谱建立及相关性研究[J].特产研究,2025,47(2):144-149,154.

（本文编辑 王 冬）

