基于信息智能技术的龙胆化学成分预测分析

钟子健
广州医科大学附属妇女儿童医疗中心 广东 广州 510180

摘 要 龙胆为龙胆科多年生草本植物，其也是我国传统常用中药材，本身所具有的清热燥湿、泻肝胆火等功效较为突出。本文主要基于信息智能技术，对龙胆的化学成分、药理作用及质量标志物预测予以综合分析，明确龙胆主要含有环烯醚萜类、黄酮类、三萜类等化学成分，有着一定的抗炎、保肝、抗肿瘤、抗氧化、神经保护等多种药理活性，预测龙胆苦苷、獐牙菜苦苷、獐牙菜苷、异牡荆素等成分可作为龙胆的潜在质量标志物，最终形成以数据为支撑的龙胆质量综合评价体系，充分发挥龙胆的临床应用价值。

关键词 龙胆；化学成分；药理作用；质量标志物；预测分析

Predictive Analysis of the Chemical Components of Gentiana Based on Information Intelligent Technology

Zhong Zi-jian
Women and Children's Medical Center Affiliated to Guangzhou Medical University, Guangzhou 510180, Guangdong Province, China

Abstract Gentiana, a perennial herb of the Gentianaceae family, is also a commonly used traditional Chinese medicinal material with prominent effects such as clearing heat, drying dampness, and purging liver-gallbladder fire. This paper primarily conducts a comprehensive analysis, based on information intelligent technology, of the chemical components, pharmacological effects, and quality marker prediction of Gentiana. It clarifies that Gentiana mainly contains chemical components such as iridoids, flavonoids, and triterpenoids, exhibiting various pharmacological activities including anti-inflammatory, hepatoprotective, anti-tumor, antioxidant, and neuroprotective effects. Components such as gentiopicroside, swertiamarin, sweroside, and isovitexin are predicted as potential quality markers of Gentiana. Ultimately, a data-supported comprehensive quality evaluation system for Gentiana is formed to fully realize its clinical application value.

Key words Gentian; Chemical Constituents; Pharmacological Action; Quality Markers; Predictive Analysis

龙胆始载于《神农本草经》，其有着悠久的中药应用历史，龙胆性寒，味苦，归肝、胆经，功效主要为清热燥湿、泻肝胆火，常用于治疗湿热黄疸、阴肿阴痒、带下、湿疹瘙痒、肝火目赤、耳鸣耳聋、胁痛口苦等症。中药质量标志物作为近年来提出的概念，主要是指存在于中药材、中药饮片、中药提取物、中药制剂中固有或加工制备过程中形成的与中药功能属性相关的化学物质，可有效体现中药安全性和有效性的标志性物质，并由此对其完成相应质量控制评价。本研究本质即通过系统梳理龙胆化学成分和药理作用研究进展，同时借助相应大数据技术与人工技术的发展优势，运用信息化思维与智能化理念实现对质量标志物更精准的预测分析，以期建立健全的龙胆质量综合评价体系。

1 龙胆化学成分研究进展

1.1 环烯醚萜类成分

现阶段针对龙胆的相关专业临床研究发现，其化学成分较为复杂多样，目前已分离鉴定的化合物有环烯醚萜类、黄酮类、三萜类、有机酸类等，这些成分也是龙胆药理作用的重要组成内容。其中，环烯醚萜类属于龙胆中含量最丰富、活性最明显的化学成分，其主要以苷的形式存在，苦味特性突出，这也是龙胆味苦的由来，而龙胆苦苷作为龙胆中含量最高的环烯醚萜苷，在《中国药典》中，更是体现龙胆质量评价的指标成分之一。此外，除龙胆苦苷外，还有獐牙菜苦苷、獐牙菜苷、龙胆酯苷、龙胆吡喃苷等，这些环烯醚萜类成分在龙胆根及根茎中分布不均，在不同种属的龙胆植物中含量亦存在差异；但龙胆苦苷在龙胆中的含量往往高于在三花龙胆、条叶龙胆中的含量，这与不同种属龙胆药材质量差异有紧密关联。因此通过整合不同种属、产地龙胆的环烯醚萜含量谱数据库，利用机器学习算法予以分析，便可更加精准高效的建立物种鉴别及相应质量等级预测模型[1]。

1.2 黄酮类成分

龙胆中含有多种黄酮类化合物，如黄酮、黄酮醇及其苷类，已知的有异牡荆素、异荭草素、芹菜素、木犀草素、槲皮素

等。这些黄酮类成分具有一定的抗氧化活性，与龙胆的清热、抗炎作用紧密相关。其中，异牡荆素是龙胆中含量相对丰富的黄酮类成分，其具有明显的抗炎和肝保护作用；黄酮类成分在龙胆不同药用部位分布不均，除了在花叶中，传统药用部位根及根茎中也具有较高含量。而运用高分辨率质谱等现代分析技术，结合信息化数据系统平台，便可实现对龙蛋中黄酮类成分的有效识别与快速定量分析，形成更加精细全面的化学图谱。

1.3 三萜类成分

龙胆中的三萜类成分是以齐墩果烷型、乌苏烷型五环三萜及其苷类来体现，目前已分离鉴定的有齐墩果酸、熊果酸、龙胆三萜苷等。这些三萜类成分有着抗炎、保肝、抗肿瘤等多种生物活性。其中，齐墩果酸和熊果酸属于龙胆中较为常见的三萜类成分，两者在龙胆中的含量虽然相对不是很高，但其药理活性突出，对龙胆整体药效的发挥具有关键作用。

1.4 其他成分

龙胆还含有其他多种有机酸类成分，如咖啡酸、绿原酸、阿魏酸等，这些酚酸类成分有着抗氧化、抗炎作用。此外，龙胆中还含有少量生物碱、甾醇、挥发油等成分；而值得注意的是，不同产地、不同采收期、不同炮制方法的龙胆药材，自身化学成分组成及含量也有着一定差异，这也成为影响龙胆质量实效性的主要因素。所以系统采集涵盖这些多维变量的化学数据，再用大数据完成关联性分析，便可明确影响龙胆质量的主要因素，达到有效管控其成分质量的目的。

2 龙胆药理作用研究

现代临床药理学研究，不只是关注药物单一成分，更要从系统层面理解药物的多靶点作用机制；在实践期间需围绕网络药理学、生物信息学等大数据方法，系统构建“龙胆活性成分—作用靶点—疾病通路”的相互作用网络，实现从整体性、高通量层面阐释其抗炎、保肝等多重药理活性的协同机制，为其药效具体性、有效性提供专业解释。

2.1 抗炎作用

龙胆提取物及其活性成分对多种炎症均表现出明显的抗炎效果，如龙胆苦苷可通过抑制核因子κB信号通路，减少肿瘤坏死因子α、白细胞介素等炎症因子的产生及释放；而獐牙菜苦苷则能通过调节丝裂原活化蛋白激酶信号通路发挥抗炎作用；此外，龙胆中的黄酮类成分，如异牡荆素也能有效抑制炎症介质产生；这无疑为龙胆治疗炎症相关疾病提供了一定的临床指导依据。

2.2 保肝作用

龙胆提取物对多种肝损伤均有一定的保护作用，具体保护机制则是以抗氧化、抑制炎症反应、调节肝细胞凋亡等来体现。其中，龙胆苦苷是通过增强肝脏抗氧化酶活性，减轻自由基对肝细胞的损伤来达到保肝的目的；獐牙菜苦苷则是通过抑制肝星状细胞活化，延缓肝纤维化进程来实现保肝；而龙胆中的三萜类成分，如齐墩果酸、熊果酸本身便有一定的保肝活性，两者能经多种途径发挥肝保护功效。

2.3 抗肿瘤作用

龙胆提取物能够抑制多种肿瘤细胞增殖，诱导肿瘤细胞凋亡。具体作用机制涵盖调节细胞周期、激活凋亡信号通路、抑制肿瘤血管生成等。其中，龙胆苦苷可经诱导线粒体途径的凋亡实现抗肿瘤效果；獐牙菜苦苷则是抑制肿瘤细胞的侵袭转移；龙胆中的黄酮类成分同样有明显的抗肿瘤活性；这些研究为龙胆在抗肿瘤辅助治疗中的应用奠定了基础。

2.4 抗氧化作用

龙胆的抗氧化作用，则与其黄酮类、酚酸类成分有关，其提取物能够有效清除自由基能力，从而减轻氧化应激引起的细胞损伤。如异牡荆素、异荭草素等黄酮类成分可直接清除活性氧、增强抗氧化酶活性等发挥抗氧化作用；绿原酸、咖啡酸等酚酸类成分也是龙胆中重要的抗氧化物质；本质上龙胆的抗氧化作用与其抗炎、保肝等药理活性有着紧密关联。

2.5 神经保护作用

龙胆提取物及其活性成分还有着较好的神经保护作用，龙胆苦苷能通过抑制神经炎症反应、减轻氧化应激损伤等途径保护神经细胞。如在阿尔茨海默病、帕金森病等神经退行性疾病中，龙胆提取物能够改善患者认知功能、保护多巴胺能神经元，达到延缓病情进展的目的。这些研究为丰富龙胆在神经系统疾病临床治疗中的应用指明了方向[2]。

3 龙胆质量标志物预测分析

3.1 基于大数据挖掘与有效性关联的质量标志物预测

针对龙胆质量标志物预测分析，从其化学成分来看，龙胆的苦味成分环烯醚萜苷类是其能够有效区别于其他药材的特征性成分，且龙胆苦苷是龙胆特有的环烯醚萜苷，在龙胆属植物中含量丰富，因此可将之作为龙胆药材的质控指标之一。而獐牙菜苦苷、獐牙菜苷也是龙胆中较为特有的环烯醚萜类成分，其各自共同构成龙胆苦味特征的物质基础，这些特有成分可准确反映龙胆的真假性。从药理作用相关性层面分析，龙胆苦苷有抗炎、保肝、抗肿瘤等多种药理活性，与龙胆的传统功效紧密相关；獐牙菜苦苷在保肝、抗炎方面作用同样明显，而异牡

荆素有较强的抗氧化、抗炎活性，齐墩果酸在保肝、抗炎方面也有一定功效；这些成分的药理活性与龙胆清热燥湿、泻肝胆火的功效紧密相关，能够切实反映龙胆的有效性，可将之看作龙胆成分有效性的质量标志物[3]。

因此实践期间，可先整合龙胆化学成分数据库、药理活性数据库及临床病证信息，建立可计算知识图谱，再借助人工智能算法对各类数据予以深度挖掘，由此识别出与龙胆“清热燥湿、泻肝胆火”核心功效关联度最高的化学成分群；如龙胆苦苷、獐牙菜苦苷的抗炎保肝活性数据，异牡荆素的抗氧化数据等，均可作为算法训练的特征，得出既具特有性（如环烯醚萜类），又与传统功效高度相关的潜在质量标志物结论[4]。

3.2 基于全过程数据追溯与信息融合的质量标志物传递规律分析

在龙胆的种植、采收、加工、炮制及制剂生产过程中，龙胆苦苷、獐牙菜苦苷等主要活性成分的变化规律经较多研究已有明确结论，如这些成分在龙胆不同生长时期的积累规律、不同产地环境下的含量变化、不同炮制方法下的转化规律等方面均有相对完善的研究数据支持，可实现从药材到成品的全过程质量管控，因此传递溯源过程管控也是组成龙胆质量标志物的重要内容。龙胆的传统药用部位为根及根茎，而现代相关专业医学研究表明，龙胆苦苷、獐牙菜苦苷等主要活性成分在根及根茎中含量最高，其次是地上部分；这种分布规律与传统用药经验相符，支持将这些成分作为质量标志物[5]。

这个过程，便可借助物联网传感器、区块链等技术，实时采集龙胆从种植环境，如区域土壤、气候数据等，明确采收加工到制剂生产全过程的参数；再通过分析这些数据和龙胆苦苷等关键成分含量变化之间的动态关联性，以此精确绘制质量标志物的“传递规律”，最终实现从“事后检测”到“过程预测与智能调控”的转变。

3.3 基于多指标融合与整体质量评价体系的构建

龙胆的药理作用是其多成分协同作用的结果，环烯醚萜类、黄酮类、三萜类等成分在抗炎、保肝等作用中能表现出良好的协同效应。因此龙胆的质量标志物不应局限于单一成分，而应是一组能够反映龙胆整体药效的化学成分，后续可将龙胆苦苷、獐牙菜苦苷、獐牙菜苷、异牡荆素、齐墩果酸等组成质量标志物予以组合，形成更全面完善的龙胆质量评价体系。

例如，借助深度学习模型或者聚类分析等技术方法，对龙胆苦苷、獐牙菜苦苷、异牡荆素、齐墩果酸等候选质量标志物的含量谱做系统整体梳理，得出能综合反映龙胆整体质量特征的变量指标，由此形成更科学全面的整体质量评价标准[6]。

4 结束语

综上所述，龙胆作为我国传统常用中药材，本文通过对龙胆化学成分、药理作用及质量标志物预测的全面分析，旨在为建立更加科学合理的龙胆质量评价标准提供有力参考依据，以此确保龙胆药材及其制剂的质量安全性水平能够得以进一步提升，提高龙胆资源的开发利用效率，推动中药质量研究从指标成分定量向整体质量评价发展，这也是我国中药产业得以形成可持续性发展的必经之路。

参考文献

[1]罗诗雨,米雅慧,崔佳敏,等.蓝玉簪龙胆化学成分LC-MSn定性分析及HPLC-UV法多成分含量测定[J].中国药科大学学报,2025,56(6):710-718.

[2]刘娟,张剑.中药龙胆的本草考证、化学成分、药理作用及临床应用研究进展[J].辽宁中医药大学学报,2025,27(8):210-214.

[3]杨静容,翁丽丽,姜雨昕,等.基于UPLC-Q-TOF-MS/MS的龙胆关键成分解析及保肝利胆共病机制[J].中国老年学杂志,2025,45(16):4016-4021.

[4]付晓琪,张悦,徐紫晨,等.龙胆化学成分、药理作用研究进展及质量标志物预测分析[J].中国新药杂志,2025,34(15):1608-1614.

[5]刘娟,张剑.中药龙胆本草考证、化学成分、药理作用及临床应用研究进展[J].辽宁中医药大学学报,2025,27(8):210-214.

[6]李生浩,李俊义,武昆利,等.龙胆苦苷的药理作用及分子机制研究进展[J].昆明医科大学学报,2020,41(1):158-162.

（本文编辑　王　冬）

