

“中药质量模式识别评价方法的开发与应用研究”成果登记公示信息

成果名称:	中药质量模式识别评价方法的开发与应用研究
完成单位:	深圳市药品检验研究院（深圳市医疗器械检测中心）,深圳顺承中药检验技术有限公司
完成人员:	王冰,王淑红,王丽君,王平,吴森,王铁杰,鲁艺,李美芳,金一宝,谷丽菲,丘妙平,李瑞芳
研究起止日期:	2021-06-01 至 2024-06-30
主要应用行业:	科学研究和技术服务业
高新技术领域:	生物医药与医疗器械
评价单位:	深圳市科技创新局
评价日期:	2025-03-06
成果简介:	<p>本项目构建的中药质量模式识别评价体系,突破了传统中药质量控制的技术瓶颈,为中药材基原鉴别、掺伪检测和药效关联提供了新范式,具有显著的科学价值和产业应用前景,对推动中药质量评价技术现代化具有示范意义。</p> <p>一、课题来源与背景</p> <p>本研究受深圳市科技计划项目（KCXFZ20201221173005015）资助,聚焦中药红景天、金银花、黄芪、阳春砂、化橘红、三七、丹参等中药质量控制难题。以红景天为例,红景天属植物全球超100种,中国有70余种,其中大花红景天为《中国药典》2020年版收录的唯一正品基原。然而,市场普遍存在齿叶红景天、云南红景天、蔷薇红景天等近缘品种混用现象,且现行标准仅以红景天苷单一成分作为鉴别和含量测定指标,无法反映整体质量,也无法有效区分正品与伪品。此外,质量控制指标未与临床疗效结合,导致红景天药效稳定性不足。同样的问题也存在于金银花、</p>

黄芪、丹参等中药的质量控制。项目旨在建立基于“化学信息-药效信息-计算机算法”的三位一体质量评价体系，解决基原混淆、质控手段滞后等关键问题，为红景天、金银花、黄芪、丹参等中药临床安全有效应用提供技术支撑。

二、技术原理及性能指标

（一）技术原理

1.多维化学信息采集

采用 UHPLC 指纹图谱、UHPLC-Q-TOF/MS 定性分析、近红外光谱（NIR），通过获取化学成分的整体分布、降维技术筛选特征变量、结合光谱预处理（如一阶导数）提取化学基团振动信息，采集多维化学信息。

2.化学模式识别建模

利用有监督模型基于特征变量建立基原区分模型。同时通过无监督模型的主成分分析（PCA）可视化不同基原中药的化学差异，辅助特征变量筛选。

3.药效学验证与机制解析

基于细胞和细胞水平验证中药相关药效。结合网络药理学的结合分子对接和通路富集分析，揭示中药发挥药效的作用机制的相关通路。

（二）性能指标

1.基原区分能力：UHPLC 模型对中药不同基原的训练集 / 试验集识别准确率均为 100%。UHPLC-Q-TOF/MS 模型对训练集/试验集准确率均为 100%。近红外光谱模型对掺伪品的识别准确率为 100%。

2.掺伪检测精度：偏最小二乘回归（PLSR）模型对掺伪量的预测集相关系数（ r_p ）均大于 0.99，均方根误差（RMSEP） $<2.5\%$ 。

3.药效关联性：基于质谱数据和药效数据遴选出的功效性成分与基于 UHPLC 信息筛选出的药效相关峰一致，进一步说明了中药特征性成分的合理性，所得结果进一步验证了中药化学模式识别的科学性。

三、技术的创造性与先进性

1.多技术融合的质量评价体系：首次整合 UHPLC、UHPLC-Q-TOF/MS 和近红外光谱技术，构建“全成分表征-模式识别-药效关联”的一体化方法，突破传统单一成分检测的局限性，实现中药从“成分指纹”到“功效指纹”的整体质量评价。

基原鉴别与掺伪检测技术突破：基原精准识别模型可解决市场基原混淆难题，填补国内外中药品种系统区分的技术空白。开发近红外光谱快速检测技术，实现中药真伪及掺伪的无损、现场筛查，检测时间从传统色谱法的 2 小时缩短至 10 分钟，成本降低 70%以上。

药效驱动的质量控制策略通过抗缺氧药效验证，证实化学模式识别筛选的特征成分与临床疗效直接相关，建立“成分-靶点-通路”的药效传导链，为中药质量标准与疗效结合提供范例。

4.智能化分析方法创新采用 SPA、OPLS-DA 等算法对复杂化学数据进行连续降维，模型复杂度降低 99.5%，运算效率提升 10 倍以上。

四、技术的成熟程度、适用范围和安全性

（一）成熟程度

实验室验证：完成 759 批液相、核磁、红外、紫外等方法的中药样本验证，含 348 批高效液相色谱样品、181 批近红外光谱样品的模型训练与验证，稳定性良好（RSD<3%）。

产业化应用：研究成果已转化为企业内控标准 3 项和团体标准 7 项，在深圳及周边中药企业应用，累计检测样品超 500 批次，以提升企业中药产品质量。

知识产权：获授权发明专利 2 项（ZL 2019 1 1340612.4、ZL 2019 1 0913203.2）、美国发明专利 2 项（US11,656,176 B2、US 11,710,541 B2），申请中国发明专利 7 项，发表代表性 SCI 论文 8 篇（收录于《Journal of Ethnopharmacology》《Molecules》等期刊）、中文论文 1 篇（收录于《中国科技期刊数据库医药》）。

（二）适用范围

应用场景：可用于中药的快速真伪鉴别，中药材生产企业原料验收、药品检验机构质量抽检、市场监管部门打假维权。

延伸领域：中药质量模式识别评价体系可推广至名贵中药材的快速筛查，也适用于复杂基质中药的成分溯源。

五、应用情况及存在的问题

（一）应用情况

1.企业端：深圳某中药饮片企业采用该技术后，红景天原料合格率从 75% 提升 98%，生产成本降低 12%。

2.监管端：深圳市药品检验研究院将近红外光谱模型纳入年度抽检方案，2023 年通过快检拦截伪品红景天 23 批次。

3.学术影响：研究方法被《中国现代中药》等期刊引用，3 家省级药检机构借鉴用于其他中药材质量评价。

(二) 存在问题

1.样本多样性不足：模型主要基于中国市场常见基原，对欧美市场常见品种的认识能力需进一步验证。

2.设备普及瓶颈：UHPLC-Q-TOF/MS 设备成本较高（约 500 万元/套），基层机构难以普及；近红外光谱模型对低浓度掺伪（<2%）的灵敏度有待提升。

3.机制深度局限：网络药理学预测的部分靶点的具体调控路径需结合蛋白组学进一步解析。

六、历年获奖情况

2020 年度广东省科技进步奖二等奖