团　　体　　标　　准

T/CACM ****－20**

道地药材图谱检测数据处理标准流程

Standard Processing Workflow for Spectroscopic Profiling Data of Daodi Medicinal Materials

20**-**-**发布　　20**-**-**实施

XXX　发 布

目　　次

1　范围 2
2　术语和定义 2
3　道地药材图谱检测数据处理标准流程图 2
附录 A 系统架构的参考设计 ..... **Error! Bookmark not defined.**

前　　言

《道地药材图谱检测数据处理标准流程》（以下简称“本标准”） 按照 GB/ T1.1-2009《标准化工作导则第 1 部分：标准的结构和编写》给出的规则起草。

本标准由 xxx 提出。

本标准起草单位：xxx。

本标准主要起草人：xxx、xxx、xxx...。

道地药材图谱检测数据处理标准流程

1 范围

本标准确立了道地药材图谱检测数据处理标准流程，用于指导实现基于机器学习的各类图谱数据分析应用和产地鉴别等决策支持服务。

2 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

2.1

道地药材 Genuine medicinal material

道地药材是指经过中医临床长期应用优选出来的，产在特定地域，与其他地区所产同种中药材相比，品质和疗效更好，且质量稳定，具有较高知名度的中药材。

2.2

图谱检测 Spectroscopic Profiling

包括质谱（及其联用）、振动光谱（如拉曼、红外、紫外光谱）及核磁共振谱等检测方式。是道地药材检测的重要技术手段。

3 道地药材图谱检测数据处理标准流程图

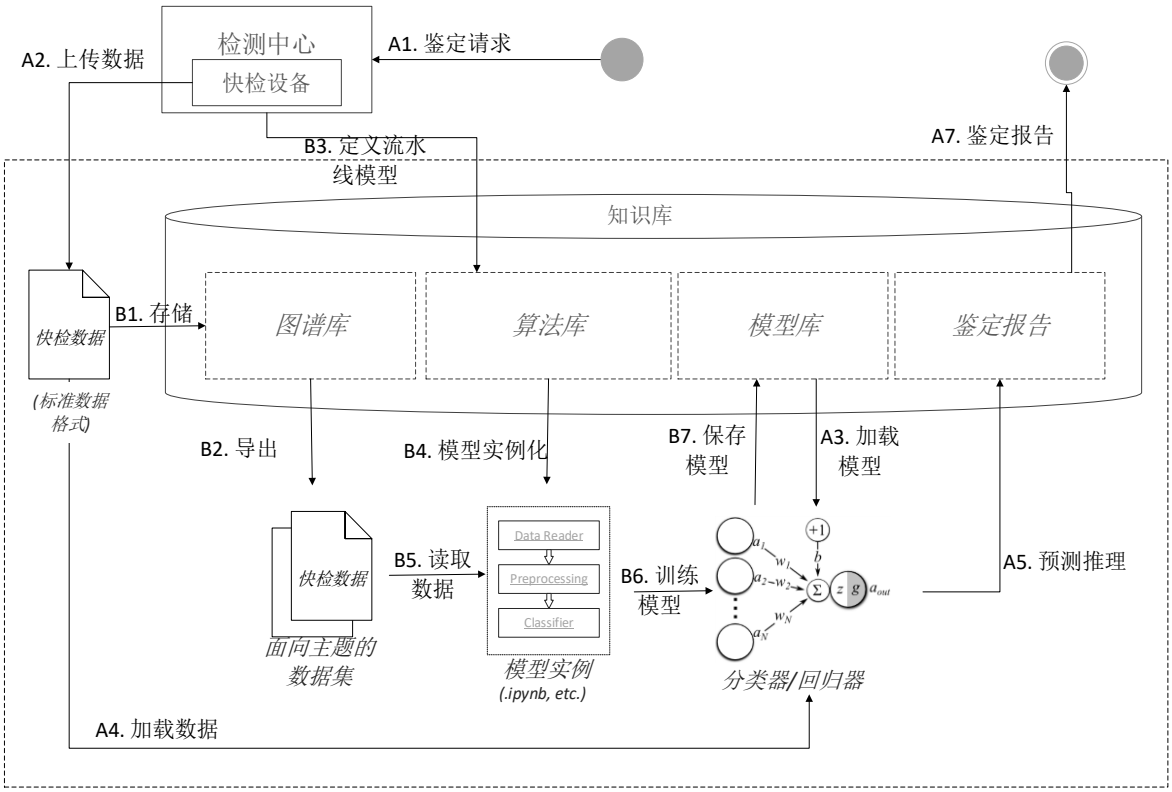

图 1 道地药材图谱检测数据处理标准流程图

3.1 模型推理流程：

A1.客户向测试中心或实验室发送测试请求。

A2.用图谱设备对目标样品进行测试。生成的图谱数据以公共数据格式上传到信息系统，如 mzML 或 JCAMP-DX。

A3.将相应的训练模型从知识库加载到运行时。

A4.将图谱数据作为模型的输入。

A5.经过模型推理后生成分析报告。

A6.报告发送回客户。

A7.监管部门可定期或按需要求提供分析报告，以此来监管道地药材的质量。

3.2 模型训练流程：

B1.每个图谱数据被转换为符合标准《有机仿生道地药材图谱检测数据处理基础信息模型》的内部格式，然后存储到知识库。

B2.图谱数据首先按对象类型（如婴儿配方奶粉或草药）、目的（如分类奶粉品牌或识别特定的真正地草药）、检测模态（拉曼或 MALDI-TOF- MS）进行分类。然后，数据集被导出为矩阵或表格数据格式（如 csv, npy, mat），这是大多数主流数据科学平台认可的格式。

B3.算法工程师维护算法单元，并为目标数据集设计图谱数据分析流水线模板。

B4.流水线模板实例化。

B5.数据集被加载到运行时中。

B6.算法工程师执行训练过程。理想情况下，实例化的流水线是交互式的，以便用户可以现场优化模型训练代码。

B7.最终的模型保存在模型库中，可以为未来的模型推理过程服务。