

团 体 标 准

T/CACM ****-20**

道地药材图谱检测参考术语集汇编

Compilation of Reference Terminologies for Spectroscopic Profiling of Daodi
Medicinal Materials

20**-**-**发布

20**-**-**实施

XXX 发布

目 次

前 言.....	I
1 范围.....	1
2 术语和定义.....	1
3 道地药材图谱检测参考术语集.....	1
附录 A.....	4

前 言

《道地药材图谱检测参考术语集汇编》（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 XX 提出。

本标准由 XX 学会归口。

本标准起草单位：

本标准主要起草人：

道地药材图谱检测参考术语集汇编

1 范围

本标准确立了道地药材图谱检测中涉及的各类信息及其适用的公共术语集。相关设备和信息系统供应商应采用本标准推荐的术语集对相关信息进行编码，以便于系统间数据共享、信息交换和系统集成。

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 Dodi Medicinal Materials

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（及其色谱联用）、振动光谱（如拉曼、红外、紫外光谱）及核磁共振谱等检测方式。

3 道地药材图谱检测参考术语集

根据图谱检测数据及其元数据所涉及各类相关信息，推荐以下公共术语集。

3.1 检测对象

3.1.1 食品类

对于具有食用及药膳用途的道地药材，推荐采用 FOODON¹ 对其进行编码。FOODON 对可以为承担食物角色的动物、植物和真菌进行编码，还包括了衍生食品及其制作过程涉及的相关术语。

3.1.2 植物类

对于常规植物类中草药及其药用部位，推荐采用 Plant Ontology (PO)² 进行编码。PO 包含了植物解剖学、形态学、生长发育及植物基因组学的相关概念和术语。

3.1.3 动物类

对于动物类药材，推荐采用 Uberon³ 进行编码。Uberon 是一个综合的跨物种本体，由 6,500 多个代表各种解剖实体的类组成，根据传统的解剖分类标准进行组织，对于表型分析至关重要。

3.1.4 其它

对于上述术语集未涉及的其他形态的中药材（如微生物），推荐采用 NCBITaxon⁴ 进行编码。NCBITaxon 由美国国家生物技术信息中心（NCBI）提供，涵盖了国际核苷酸序列数据库和蛋白质序列

数据库所对应的所有生物名称及分类。

3.2 环境

对于道地药材的土壤等环境要素，推荐采用 Environment Ontology (ENVO) 进行编码。ENVO⁵ 覆盖了生物群落、环境特征和环境材料的相关术语。

3.3 农艺及种植

对于道地药材的种植类信息，推荐采用 AgrO (Agronomy Ontology)⁶ 进行编码。AgrO 包含了“田地”、“土壤”、“作物生产”等与农艺学及种植相关的术语。

3.4 化学物质

3.4.1 化学式

对于药材化学成分、农残等化学物质，推荐采用国际通用的 CAS 注册码 (CAS Registry Number)⁷ 进行编码。CAS 物质收集是全球科学家、制造商、监管机构用来获取有关化学物质的准确信息的首要来源。

3.3.2 药物分子

从药材中提取的具有药用价值的化学物质，除了 CAS，也推荐采用 KEGG MEDICUS DRUG 进行编码⁸。KEGG MEDICUS DRUG 是综合的药物术语集，基于活性成分的化学结构进行组织。

3.3.3 营养物质

涉及中药材的营养学描述，应采用 CDNO (Compositional Dietary Nutrition Ontology)⁹ 进行编码。CDNO 提供结构化术语来描述人类饮食中的营养物质及其属性。

3.3.4 小分子物质

对于中药材中的小分子成分，推荐采用 CHEBI (Chemical Entities of Biological Interest) 进行编码¹⁰。生物学感兴趣的化学实体 (ChEBI) 是一个数据库和分子实体 (如原子、分子、离子、离子对、自由基、自由基离子、络合物、构象异构体)，专注于“小”化合物。

3.5 基因组学

对于药材种质以及临床试验涉及的的基因和组学数据，推荐采用 GO (Gene Ontology) 进行编码¹¹。GO 是世界上最大的基因知识库。这些知识既是人类可读的，也是机器可读的，是生物医学研究中大规模分子生物学和遗传学实验的计算分析的基础。

3.6 检测技术

对于质谱及其联用检测技术，推荐采用 HUPO PSI-MS¹² 进行编码。定义了蛋白质组学研究中用于表征质谱数据的受控词汇。对于振动图谱 (vibrational spectroscopy, 如拉曼、近红外等)，推荐采用附录 A 所示的编码系统。

3.7 临床试验

针对中药材的药效开展的临床试验数据，推荐采用 Clinical Data Interchange Standards Consortium

(CDISC, 临床数据交换标准联盟) 进行编码^{13,14}。CDISC 定义了临床试验数据的存储和交换标准。

附录 A
图谱检测术语及代码

代码 Code	编码系统 Coding System	术语 Term	解释 Explanation
E0065.A0007.V0001	SPACS	Raman	拉曼光谱。
E0065.A0007.V0002	SPACS	MS	质谱。
E0065.A0007.V0003	SPACS	MALDI_TOF_MS	基质辅助激光解吸/电离化飞行时间质谱。
E0065.A0007.V0004	SPACS	SELDI_TOF_MS	表面增强型激光解吸/电离化时间飞行质谱。
E0065.A0007.V0005	SPACS	IMS	离子迁移率光谱法。
E0065.A0007.V0006	SPACS	NIRS	近红外光谱法。
E0065.A0007.V0007	SPACS	FIRS	远红外光谱法。
E0065.A0007.V0008	SPACS	SPI_MS	单光子电离质谱。
E0065.A0007.V0009	SPACS	ENOSE	电子鼻。
E0065.A0007.V0010	SPACS	ETONGUE	电子舌。

SPACS = Spectroscopic Profiling Data Achieving and Communication System. DOI:

10.1080/17517575.2019.1684567

参考文献

1. Dooley DM, Griffiths EJ, Gosal GS, et al. FoodOn: a harmonized food ontology to increase global food traceability, quality control and data integration. *npj Science of Food*. 2018;2(1). doi:10.1038/s41538-018-0032-6
2. Cooper L, Jaiswal P. The plant ontology: a tool for plant genomics. In: *Plant Bioinformatics*. Second Edition. Springer; 2016:89-114.
3. Mungall CJ, Torniai C, Gkoutos GV, Lewis SE, Haendel MA. Uberon, an integrative multi-species anatomy ontology. *Genome Biology*. 2012;13(1):R5. doi:10.1186/gb-2012-13-1-r5
4. Schoch CL, Ciufo S, Domrachev M, et al. NCBI Taxonomy: a comprehensive update on curation, resources and tools. *Database*. 2020;2020:baaa062. doi:10.1093/database/baaa062
5. Buttigieg PL, Pafilis E, Lewis SE, Schildhauer MP, Walls RL, Mungall CJ. The environment ontology in 2016: bridging domains with increased scope, semantic density, and interoperation. *J Biomed Semant*. 2016;7(1):57. doi:10.1186/s13326-016-0097-6
6. Jonquet C, Toulet A, Arnaud E, et al. AgroPortal: A vocabulary and ontology repository for agronomy. *Computers and Electronics in Agriculture*. 2018;144:126-143. doi:10.1016/j.compag.2017.10.012
7. CAS REGISTRY. CAS. Accessed December 1, 2021. <https://www.cas.org/cas-data/cas-registry>
8. Kanehisa M, Furumichi M, Tanabe M, Sato Y, Morishima K. KEGG: new perspectives on genomes, pathways, diseases and drugs. *Nucleic Acids Res*. 2017;45(D1):D353-D361. doi:10.1093/nar/gkw1092
9. Andrés-Hernández L, Baten A, Azman Halimi R, Walls R, King GJ. Knowledge representation and data sharing to unlock crop variation for nutritional food security. *Crop Sci*. 2020;60(2):516-529. doi:10.1002/csc2.20092
10. Hastings J, de Matos P, Dekker A, et al. The ChEBI reference database and ontology for biologically relevant chemistry: enhancements for 2013. *Nucleic Acids Research*. 2012;41(D1):D456-D463.
11. Gene Ontology Consortium. Expansion of the Gene Ontology knowledgebase and resources. *Nucleic Acids Research*. 2017;45(D1):D331-D338.
12. Mayer G, Montecchi-Palazzi L, Ovelleiro D, et al. The HUPO proteomics standards initiative- mass spectrometry controlled vocabulary. *Database*. 2013;2013:bat009-bat009. doi:10.1093/database/bat009
13. Huser V, Sastry C, Breymaier M, Idriss A, Cimino JJ. Standardizing data exchange for clinical research protocols and case report forms: An assessment of the suitability of the Clinical Data Interchange Standards Consortium (CDISC) Operational Data Model (ODM). *Journal of Biomedical Informatics*. 2015;57:88-99. doi:10.1016/j.jbi.2015.06.023
14. Haber MW, Kisler BW, Lenzen M, Wright LW. Controlled Terminology for Clinical Research: A Collaboration between CDISC and NCI Enterprise Vocabulary Services. *Drug Information J*. 2007;41(3):405-412. doi:10.1177/009286150704100314