

浙江省药品监督管理与产业发展研究会

关于公开征求《道地药材图谱检测数据处理标准 流程》团体标准意见的函

各有关单位和专家:

由浙江云鉴食药科技有限责任公司等单位起草的《道地药材图谱检测数据处理标准流程》团体标准已完成征求意见稿的编制,根据《浙江省药品监督管理与产业发展研究会团体标准管理办法(试行)》的相关规定,为保证标准的科学性、严谨性和适用性,现就该项团体标准公开征求意见。

请各有关单位和相关专家审阅标准全文并提出宝贵建议和意见,并于2023年9月15日前以邮件的形式将《团体标准征求意见稿》反馈至联系人,感谢您对我们工作的支持!

联系人:张寅升 邮箱:13675887491@163.com

联系电话:13675887491

附件:《团体标准征求意见稿》

浙江省药品监督管理与产业发展研究会

2023年8月15日



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

浙江省药品监督管理局与产业发展研究会 发布

目 次

道地药材图谱检测数据处理标准流程	2
1 范围	2
2 术语和定义	2
2.1	2
道地药材 Daodi Medicinal Materials	2
2.2	2
图谱检测 Spectroscopic Profiling.....	2
3 道地药材图谱检测数据处理标准流程图	2
3.1 模型推理流程:	3
附录 A 系统架构的参考设计	5

前 言

《浙产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/T 1.1-2009《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。

本标准由浙江云鉴食药科技有限责任公司提出。

本标准由浙江省药品监督管理局与产业发展研究会归口。

本标准起草单位：浙江云鉴食药科技有限责任公司、浙江工商大学、浙江中医药大学、南京财经大学、浙江济佰川药业有限公司、浙江大晟药业有限公司。

本标准主要起草人：王海燕、张寅升、蒋伟丽、曹剑、沈晓霞、沈宇峰、张正勇、侯瑞琪、郭芳婕、张燕新、赵亚菊、周亚、倪晓峰、秦贝贝。

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 Daodi Medicinal Materials

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

包括质谱及其联用检测、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

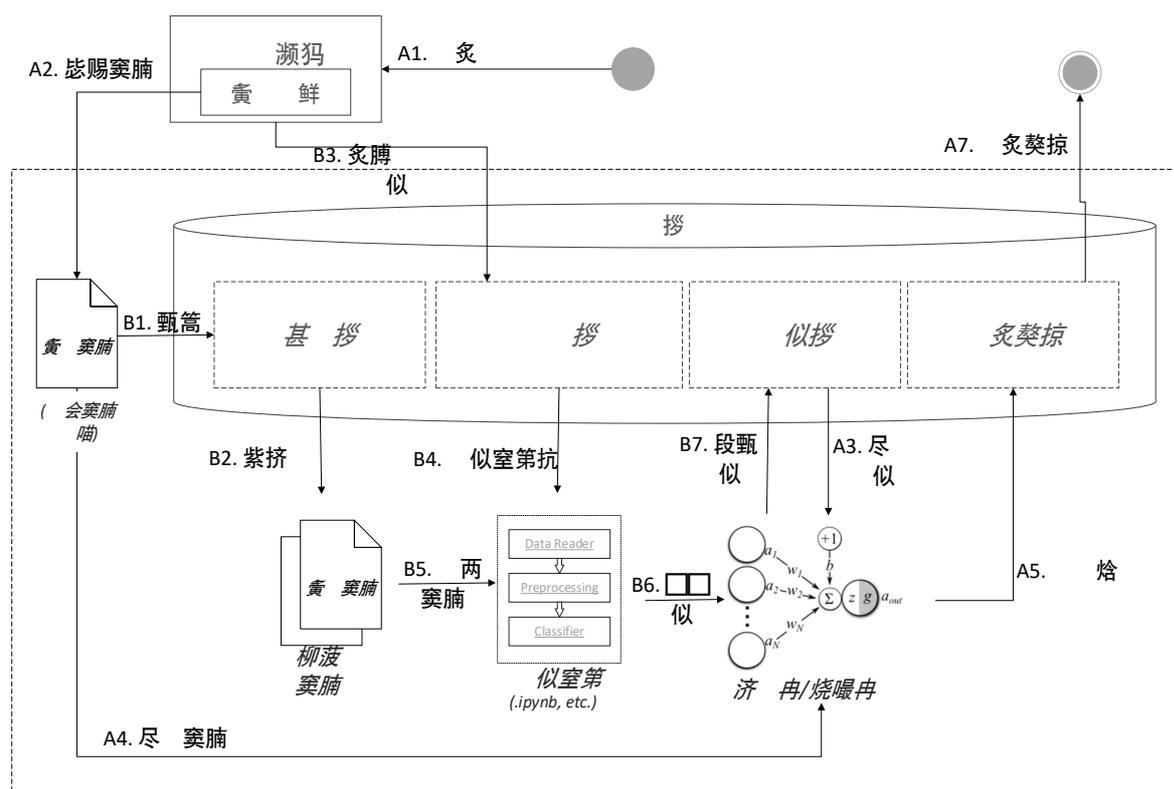


图 1 道地药材图谱检测数据处理标准流程图

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中央数据存储库加载到运行时。

A4.将图谱数据作为模型输入。

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，以此来作为道地药材质量的指标。

3.2 模型训练流程：

B1.每个图谱数据被转换为符合标准《浙产有机仿生道地药材图谱检测基础信息模型》的内部格式，然后存储到中央数据存储库。

B2.图谱数据首先按对象类型(例如婴儿配方奶粉或草药)、目的(例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组件，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，以使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。

3.3 系统架构

为实现上述的数据处理流程，附录 A 提供了相应系统架构的一个参考设计。

附录 A 系统架构的参考设计

包括表示层、服务层、计算层和数据层。表示层为用户提供 GUI(图形用户界面), 用于管理设备、数据和知识资产(模型)。服务层定义了一组 Web 服务接口, 支持与外部系统(如制造商和政府系统)进行数据交换和流程集成。计算层是服务器端数据科学运行时的容器, 负责模型训练和推理。数据层提供底层的数据库和文件操作。

