基于网络药理学的中药成分分析平台

# 摘要

网络药理学在预测和辨识中药活性成分群及作用靶点上有重要应用。基于网络药理学的中药研究,其一般研究步骤为：中药成分准备，疾病靶点准备，使用工具进行分子对接，网络构建分析。其中，前三者得到的数据可以拿来稍作选择从而进行最后的网络构建分析。现阶段有中药系统药理学分析平台（TCMSP）等网站可以提供中药成分，NCBI-Gene等网站可以获取疾病的靶点，System Dock等网站可以进行在线的分子对接。但是现阶段还没有一个集成的，可以从成分获取、靶点获取到分子对接的平台。我们提供了一个基于网络药理学的在线中药分析系统，系统集成中药成分的准备、疾病靶点的准备、在线对接三大模块。第一个模块根据中草药的名称自动搜索其对应的小分子名称、3D结构文件，对于非草药成分，系统允许本地成分文件上传，再自动完成3D结构文件的获取。第二个模块会根据提供的疾病名称，自动搜索相关数据库完成疾病靶点、靶点蛋白的获取。第三个模块根据前述得到的中药成分、疾病靶点结果进行在线批量分子对接，并提供对接结果。本文提供了一个研究案例，演示了本系统如何获取中药成分的活性成分、疾病的关键靶点以及中药成分和靶点之间的作用关系。

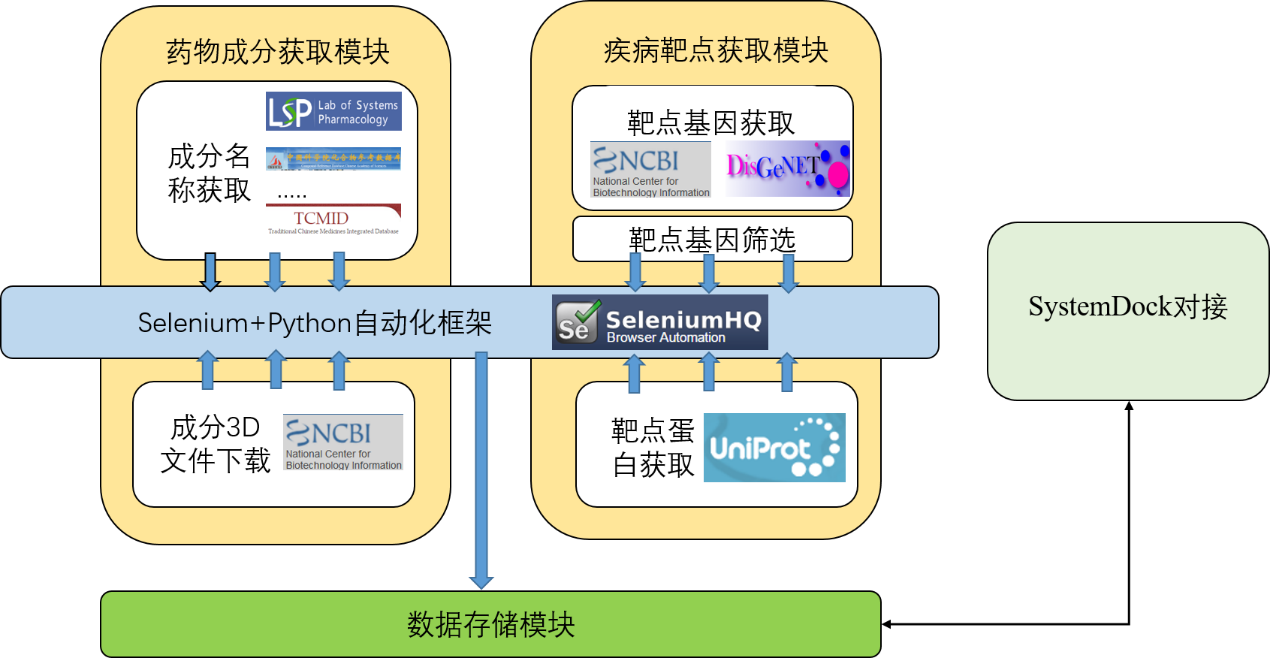
# 背景

网络药理学是建立在疾病-基因-药物的多层次网络基础上，用于从整体上预测药物靶点、提高药物发现效率的新兴学科。网络药理学技术在中药研究的综合分析中得到了越来越多的应用，并且实践证明，网络药理学技术对中药复杂体系的整体性、系统性分析有独特优势。网络药理学在中药研究中的关键步骤，包括中药成分的准备，中药所治疗疾病靶点的获取，中药成分和靶点之间的相互作用-分子对接。对接得到的结果可以为后续网络分析提供重要的数据支撑。现阶段基于网络药理学的中药研究，需要从公开的数据库中尽可能完整地获取到中药成分信息，靶点的获取也要根据疾病的关键字进行搜寻，最后使用相关的对接工具进行分子对接。中药成分数据库,如中药系统药理学分析平台（TCMSP）、中药综合数据库（TCMID）等被广大研究者所采用，这些数据库可以提供较为全面的中药成分信息，但是需要研究者手动查找并准备。另外，后续分子对接需要使用到化合物成分的结构信息，需要逐条下载，这使得研究者在成分的准备上需要花费大量的时间。疾病靶点的准备需要从NCBI-Gene等网站手动选择并逐条下载，同样过程耗时复杂。分子对接技术按照几何互补、能量互补以及化学环境互补的原则，进行中药成分化合物小分析和靶点蛋白大分子作用识别，并预测2个分子之间的最佳结合模式。现阶段DOCK、AutoDock、Discovery Studio、AutoDock Vina等软件可以进行分子对接，但是这些软件是C-S架构，同时每次对接仅能进行一个成分-一个靶点蛋白。另外，他们的打分函数不能直接反应对接的程度。Systems Dock是一个B-S架构的在线分子对接平台，该平台基于AutoDock Vina的，重新设计了打分函数，同时可以根据打分评价分子和靶点结合的好坏。但是该平台限制了每次对接的成分个数。现阶段的成分准备、靶点准备、分子对接均处于独立的状态。本文基于网络药理学的基本原理，打通三者之间的关系，集成了多个数据库和工具，开发了一个在线的中药分析平台，实现从中药成分准备，疾病靶点准备，分子对接一体化的操作。本文会从网络药理学研究的基本步骤，所开发系统的基本功能，系统的实现情况以及案例研究等几个部分介绍相关工作。

在想是不是要新增网络药理学相关的模块。

# 系统设计

本系统基于网络药理学的思路，设计的本系统主要有三个部分，包括（1）中药成分的准备，包括草药的名称和非草药的数据excel格式上传2）输入疾病的名称，也可以根据用户的需要上传靶点蛋白3)进行对接，并查看对接结果，下载结果可以供用户下载使用。下面是本文的结构图，结构图展示了整个数据的处理流程。



## 中药成分模块

现阶段的中药物成分的获取使用开源的数据库，例如中医系统药理学数据库TCMSP（ http://lsp.nwsuaf.edu.cn/tcmsp.php）、中药综合数据库TCMID（http://www.megabionet.org/tcmid/）、中药化学成分数据库（http://202.127.145.134/scdb/）等中药信息数据库。但是药学研究人员在进行药物信息查找的时候仍旧面临药物成分众多，不同数据库之间存在成分信息异构等诸多问题。同时，中药复方成分往往由多种草药构成，这给中药成分化合物的获取带来很大麻烦。另外，不同的草药可能有相同的成分，这也需要进行后期的去重等相关操作。种种因素导致中药成分的准备过程复杂。另外，文献[]中提出，可以根据药物的口服利用度（OB）和药物相似性（DL）来预筛选药物的活性成分，但这会导致某些已经被验证的关键活性成分缺失。

为了解决这些问题，采用了三种中药数据库融合的方式，即把从这三种数据库中获取到的数据进行整合，首先TCMID和TCMSP数据库查询到的中药成分可以直接获取到PubChemCID,虽然这两个数据库中的成分存在着名称不一致的问题，这是由于同一种成分可能会有很多的同名，但是PubChemCID是唯一的，以此为标准进行数据合并，对于非草药数据，系统提供文本(excel)上传。

数据合并后，后台会根据得到的数据自动建立分别存储药物名称-药物成分，药物成分-药物的PubChemCID等两张表。

筛选获取到中药成分后，需要使用到化合物成分的3D结构数据，每种成分的3D结构文件需要从NCBI(<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pccompound/>)数据库中查找并下载。

## 疾病靶点模块

疾病靶点选择是分子对接中的重要一环，文献中介绍了从GenBank、GeneCards、Swiss Target Prediction、NCBI-Gene等数据库可以获取到特定疾病对应的靶点。其中，NCBI-Gene数据库为较多的研究者所使用以获取基因靶点。在NCBI-Gene数据库中，输入疾病的英文名称，然后限定物种为人类，获取相应的靶点基因名称/ID。根据基因名称/ID，从UniProtKB数据库中获取到对应的UniprotID和靶蛋白PDB信息。根据成分的名称信息在UniProtKB数据库中进行查找的时候，可能出现对应靶点蛋白不存在的情况，这种数据会被筛掉；对于存在多个靶点蛋白的数据，由于数据量比较大，为了选择较为合理的靶点蛋白，会根据靶点蛋白的分辨率的大小进行排序，选择分辨率较小的蛋白质作为备用的靶点蛋白。

系统同时提供文件上传的方式进行疾病靶点的上传，这是为了解决特定靶点的分析而设计的。数据上传后可以自动进行数据的疾病的靶点蛋白,UniProtID以及相关的数据的准备。

## 在线对接模块

分子对接是网络药理学分析中关键的一个步骤。传统的对接工具有Dock,

Autodock,Discovery Studio,Autoduck Vina等，用于进行化合物小分子和靶点蛋白之间的对接，并根据对接打分来判断小分子和蛋白质大分子之间的结合程度。上述的对接工具都是基于B-S架构，数据需要在本地进行处理。虽然这些对接软件的打分反应了分子之间的结合程度，但是这些软件给出的打分都是自己制定的，分子对接的打分跨度很大，不能很好地从打分上看出对接的好坏。另外文献中提出了一些在线的工具，例如PharmMapper,可以依据反向药效团匹配方法预测活性成分的作用靶点。

这些工具有的是从反向对接的方式来做，反向对接是从药物成分小分子出发反向分子对接技术是对分子对接的逆向思考,它以小分子化合物为探针,在具有三维结构的靶点数据库内进行分子对接,通过空间和能量匹配评价搜寻可能与之结合的生物大分子,进而预测理论上药物潜在的作用靶点，INVDOCK 平台、 PharmMapper反向对接工具都是基于这种方式进行对接的，对接结果会给出按照打分给出可能的作用靶点排名。

另外，这些方法也能够进行化合物与靶点蛋白的结合程度的判定。

System Dock是一款在线的分子对接平台，该平台可以根据用户提供的化合物成分，疾病的靶点蛋白进行在线分子对接，同时还可以给出对接的结果，并提供了对接后的文件供用户进行后续的分析。

本系统集成了Systems Dock，根据准备好的中药化合物活性成分和靶点蛋白的PDB，自动导入该系统进行对接，最终提供对接结果提供。但是该系统提供的数据仅仅包含靶点蛋白的PDBID、对接成分的PubChemCID等信息，在进行网络药理学分析的时候，往往需要更丰富的数据，例如疾病靶点基因、UniProtID、Protein 等信息。系统在进行处理的时候会在System Dock的基础上进行进一步的把前述相关信息提供给用户。

# 设计细节

## 中药成分模块

中药成分的获取是该系统较为复杂的部分，现阶段由于中药成分数据库很多，但是这些中药成分数据之间存在异构性，不同数据来源于不同的数据库，同时这里根据不同的模块的数据处理设计了不同的方法。中药成分的获取，数据需要从TCMSP、TCMID或者是上海有机所的数据库中查找。但是TCMSP和TCMID以及上海有机所的数据库中都不能获取到成分的3D结构信息，该信息只能从PubChem等数据库中下载，所以前三者的数据需要进行统一。由于系统需要的数据关键的是药物的名称、成分名称、成分的PubChemCID,成分的3D结构，所以每个数据库都需要获取到该部分数据，对于获取不到全部的，程序会有所取舍。但是实际上这三个部分获取数据的方式在基本模式设计上是一致的。

获取数据库中数据设计的总体思路如下所示，首先需要根据名称获取到成分的主页面url，然后解析得到每个成分对应的url，获取靶点后还需要在PubChem数据库中按照搜索到的PubChemCID获取到对应的3D结构并下载。

|  |
| --- |
| D:\MarinaJacks\project\reptilian\medicine\docs\研究文档\分子对接数据\TCMID.png |
| 中药信息数据获取流程设计 |

在最终获取到成分3D结构的同时，需要把药物名称、化合物名称、PubChemCID等信息存储到数据库中，这里3D结构的命名与PubChemCID保持一致。

对于比较特别的非草药成分，系统需要根据上传文件的成分名称信息从NCBI Compound数据库中查找成分的PubChemCID,并下载对应的成分的3D文件。然后存储到数据库中。

最后，完成中药成分的准备。完成准备后的数据是包括中药成分数据库，中药3D结构数据。

## 靶点成分模块

该模块可以根据给定的疾病名称实现从NCBI数据库获取到靶点基因,然后需要在UniProtKB数据库查询对应的UniProtID,顺便获取到对应的靶点蛋白名称，最后获取到对应的PDBID数据。在进行PDBID获取的时候，根据靶点蛋白的结构分辨率进行排序，然后筛选出小分辨率的靶点蛋白PDBID，系统最后会按照这个方式把靶点的名称、靶点蛋白名称、UniProtID、PDB ID都存储到对应的数据库中。完成疾病靶点的准备。对于该部分需要用户自己提供上述靶点名称、靶点蛋白名称、UniProtID、PDB ID等信息。

## 在线对接模块

在线对接的后台使用的是Systems Dock在线分子对接平台，该模块底层使用的是AutoDock Vina分子对接工具，同时该平台在AutoDock Vina的打分基础上，使用docK-IN打分算法，对原始的打分进行了重新计算，使得打分结果能直接描述结合强度。一般打分值在4.25 以上认为是有一定的结合活性，大于5.0 的说明分子与靶点有较好的结合活性，大于7.0 则说明分子与靶点的结合构型具有强烈的活性。

本系统封装了该在线模块，可以直接在前面成分获取的基础上，给出对接结果。原始在线软件每次仅能提供5个化合物成分对接，本系统可以一次性完成所有成分的对接。另外，原始对接结果仅仅给出了对接的化合物成分的编号和靶点的PDBID信息，本系统在该功能的基础上，化合物成分名称，所属中药，靶点的其余信息，例如UniprotID，Protein name，Gene name等也一并给出，提供给用户下载。

系统封装的4个步骤，分别是Systems Dock的靶点PDBID上传，中药成分的化合物3D结构上传，对接以及对接结果的下载。

对接完成后，系统提供了化合物成分信息，靶点成分信息，对接结果信息等3个部分的下载。

# 案例研究

基于本系统，笔者做了一个案例研究，该案例研究散结镇痛胶囊对子宫肌腺症的治疗，分析中药成分对疾病对应的靶点的作用情况。

首先，使用中药成分模块，首先根据资料查阅到散结镇痛胶囊的成分为龙血竭、三七、浙贝母、薏苡仁，其中三七、浙贝母、薏苡仁都是草药，这个可以直接使用系统的关键字查找功能来获取化合物成分，龙血竭不是草药，这种药物的成分就需要从文献中查找，然后使用系统的文本上传功能来查找成分。

然后根据治疗的疾病，子宫肌腺症，其对应的英文为adenomyosis endometriosis,在系统的疾病靶点模块输入这种疾病对应的疾病名称。

前两步完成后，执行对应的对接操作，等待对接完成。下载对接数据后，分析下载数据。下载系统提供的3张数据表，分别是中药成分数据表，靶点信息表和对接结果信息表。根据下载的3个表，可以得到对应的中药成分信息，靶点信息以及对接结果信息。

根据中药成分信息表可知，这四种中药材对应的成分去重之后得到种103种成分，其中 浙贝母有9种，三七有61种，薏苡仁有21种，龙血竭有20种。下表是该胶囊的成分表

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **molecule** | **pubchemcid** | **drug** |
| dracaenogenins A | 101389811 | 龙血竭 |
| Cadalin | 10225 | 三七 |
| Daturic acid | 10465 | 三七 |
| oleanolic acid | 10494 | 三七 |
| MBOA | 10772 | 薏苡仁 |
| Heptadekan | 10887 | 三七 |
| myristic acid | 11005 | 三七,薏苡仁 |
| protopanoxadiol | 11213350 | 三七 |
| DFV | 114829 | 三七 |
| Oktadekan | 11635 | 三七 |
| vanillin | 1183 | 薏苡仁 |
| ginsenoside rh2 | 119307 | 三七 |
| tachioside | 11962143 | 龙血竭 |
| 1-Hydroxycumene | 12053 | 三七 |
| 5-METHYLFURFURAL | 12097 | 三七 |
| Ditertbutyl phthalate | 121712 | 三七 |
| Î±-copaene | 12303902 | 三七 |
| isoarborinol | 12305182 | 薏苡仁 |
| Î±-cyperene | 12308843 | 三七 |
| Verticine | 131900 | 浙贝母 |
| trans-feruloylcampesterol | 13786591 | 薏苡仁 |
| 2-ACETYLPYRROLE | 14079 | 三七 |
| ()-beta-Pinene | 14896 | 三七 |
| 2-methoxy-4,4'-dihydroxychalcone | 14977366 | 龙血竭 |
| Peimisine | 161294 | 浙贝母 |
| 2,6-dimethyl-cyclohexanol | 164822 | 三七 |
| WLN | 16627 | 三七 |
| Peiminine | 167691 | 浙贝母 |
| campesterol | 173183 | 薏苡仁 |
| Zhebeiresinol | 192547 | 浙贝母 |
| METHYL ISOPALMITATE | 21205 | 三七 |
| 7-hydroxy-3'-methoxy-4'-butoxyflavone | 21597638 | 龙血竭 |
| Omaine | 220401 | 薏苡仁 |
| sitosterol | 222284 | 三七,浙贝母,薏苡仁 |
| cochinchinenin B | 23634523 | 龙血竭 |
| 7,4'-dihydroxy-3'-methoxyflavan | 25232840 | 龙血竭 |
| Ziebeimine | 3083151 | 浙贝母 |
| butylated hydroxytoluene | 31404 | 三七 |
| isopulegone | 34645 | 三七 |
| 2-ethyl-3-hydroxyhexyl butyrate | 347867 | 薏苡仁 |
| caprylic acid | 379 | 三七,薏苡仁 |
| lauric acid | 3893 | 三七 |
| Diop | 395120 | 三七 |
| NSC 308879 | 4212 | 三七 |
| 7-hydroxy-4'-methoxyflavan | 442277 | 龙血竭 |
| 4'-methoxy-3',7-dihydroxyflavone | 44259961 | 龙血竭 |
| syringaresinol | 443023 | 浙贝母 |
| ergosterol | 444679 | 薏苡仁 |
| farnesol | 445070 | 三七 |
| resveratrol | 445154 | 龙血竭 |
| zoomaric acid | 445638 | 三七 |
| 7,4'-dihydroxyflavone | 45116976 | 龙血竭 |
| 4-Hydroxybenzoic acid | 4649 | 龙血竭 |
| EIC | 5280450 | 薏苡仁 |
| Stigmasterol | 5280794 | 三七,薏苡仁 |
| quercetin | 5280804 | 三七 |
| Hexenal | 5281168 | 三七 |
| Gaidic acid | 5282743 | 薏苡仁 |
| 10Z,13Z-nonadecadienoic acid | 5282804 | 三七 |
| panaxydol | 5283280 | 三七 |
| METHYL LINOLEATE | 5284421 | 薏苡仁 |
| cochinchinenin A | 5315988 | 龙血竭 |
| Germacrene D | 5317570 | 三七 |
| 5,7,4'-trihydroxyflavone | 5322064 | 龙血竭 |
| 2'-methoxy-4,4'-dihydroxychalcone | 5355594 | 龙血竭 |
| Butylcyclobutane | 544591 | 三七 |
| NSC692928 | 5469789 | 三七 |
| hexanoic acid | 564 | 三七,薏苡仁 |
| Sitogluside | 5742590 | 三七 |
| PEL | 5858445 | 三七 |
| hexanal | 6184 | 三七,薏苡仁 |
| 4-methyl-7-encholyl alcohol | 637516 | 龙血竭 |
| 2-Coumarate | 637540 | 三七 |
| Glycosides | 637579 | 龙血竭 |
| (-)-alpha-cedrene | 6431015 | 三七 |
| Linolenyl alcohol | 6436081 | 三七 |
| Solatubin | 65727 | 浙贝母 |
| 2,4,4'-trihydroxydihydrochalcone | 68146761 | 龙血竭 |
| OSI-2040 | 6918328 | 浙贝母 |
| beta-elemene | 6918391 | 三七 |
| Octadecyne | 69425 | 三七 |
| 7,4'-dihydroxydihydroflavone | 7 | 龙血竭 |
| 3,4-dichloroaniline | 71413934 | 三七 |
| Hypnon | 71750952 | 三七 |
| DICHLOROANILINE | 7257 | 三七 |
| panaxatriol | 73599 | 三七 |
| Piceol | 7469 | 三七 |
| hydroquinone | 785 | 龙血竭 |
| PTL | 8063 | 三七 |
| Hepanal | 8130 | 三七 |
| nonanoic acid | 8158 | 薏苡仁 |
| methyl palmitate | 8181 | 三七 |
| Cyclooctadiene | 82916 | 三七 |
| Protocatechuic aldehyde | 8438 | 龙血竭 |
| MEHQ | 9015 | 三七 |
| Friedelin | 91472 | 薏苡仁 |
| Picein | 92123 | 三七 |
| panaxytriol | 93484 | 三七 |
| 3691-11-0 | 94275 | 三七 |
| Sitosterol alpha1 | 9548595 | 薏苡仁 |
| 3,5-Dimethoxyacetophenone | 95997 | 三七 |
| palmitic acid | 985 | 三七,薏苡仁 |
| ginsenoside f2 | 9852086 | 三七 |

根据得到的靶点成分信息，得到该疾病对应的靶点有56个，如下所示。

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **UniProtID** | **Protein** | **Gene** | **PDBID** |
| P08253 | 72 kDa type IV collagenase | MMP2 | 3AYU |
| P15692 | Vascular endothelial growth factor A | VEGFA | 1MKK |
| P03372 | Estrogen receptor | ESR1 | 3CBP |
| P35222 | Catenin beta-1 | CTNNB1 | 3FQN |
| P06401 | Progesterone receptor | PGR | 1SQN |
| P14780 | Matrix metalloproteinase-9 | MMP9 | 6ESM |
| P10451 | Osteopontin | SPP1 | 3CXD |
| P01138 | Beta-nerve growth factor | NGF | 1WWW |
| Q13651 | Interleukin-10 receptor subunit alpha | IL10RA | 1Y6K |
| P35354 | Prostaglandin G/H synthase 2 | PTGS2 | 5F19 |
| P21964 | Catechol O-methyltransferase | COMT | 3BWY |
| Q92731 | Estrogen receptor beta | ESR2 | 3OLL |
| P05106 | Integrin beta-3 | ITGB3 | 1MIZ |
| P03956 | Interstitial collagenase | MMP1 | 1HFC |
| P16035 | Metalloproteinase inhibitor 2 | TIMP2 | 1BR9 |
| P04629 | High affinity nerve growth factor receptor | NTRK1 | 5JFW |
| P08138 | Tumor necrosis factor receptor superfamily member 16 | NGFR | 3EWV |
| P08887 | Interleukin-6 receptor subunit alpha | IL6R | 1N26 |
| Q16665 | Hypoxia-inducible factor 1-alpha | HIF1A | 4H6J |
| P19838 | Nuclear factor NF-kappa-B p105 subunit | NFKB1 | 1SVC |
| P42771 | Cyclin-dependent kinase inhibitor 2A | CDKN2A | 1BI7 |
| P29474 | Nitric oxide synthase, endothelial | NOS3 | 4D1P |
| O00206 | Toll-like receptor 4 | TLR4 | 2Z62 |
| P60484 | Phosphatidylinositol 3,4,5-trisphosphate 3-phosphatase and dual-specificity protein phosphatase PTEN | PTEN | 4O1V |
| P10145 | Interleukin-8 | CXCL8 | 4XDX |
| P37231 | Peroxisome proliferator-activated receptor gamma | PPARG | 3U9Q |
| P09488 | Glutathione S-transferase Mu 1 | GSTM1 | 1XW6 |
| P42345 | Serine/threonine-protein kinase mTOR | MTOR | 4DRI |
| P24385 | G1/S-specific cyclin-D1 | CCND1 | 2W96 |
| P38936 | Cyclin-dependent kinase inhibitor 1 | CDKN1A | 5E0U |
| P13500 | C-C motif chemokine 2 | CCL2 | 1DOK |
| O15392 | Baculoviral IAP repeat-containing protein 5 | BIRC5 | 2QFA |
| P46531 | Neurogenic locus notch homolog protein 1 | NOTCH1 | 5L0R |
| O95256 | Interleukin-18 receptor accessory protein | IL18RAP | 3WO4 |
| P17693 | HLA class I histocompatibility antigen, alpha chain G | HLA-G | 3KYO |
| P06400 | Retinoblastoma-associated protein | RB1 | 2R7G |
| Q15109 | Advanced glycosylation end product-specific receptor | AGER | 5D7F |
| P04798 | Cytochrome P450 1A1 | CYP1A1 | 4I8V |
| P09038 | Fibroblast growth factor 2 | FGF2 | 4OEE |
| P08254 | Stromelysin-1 | MMP3 | 1HY7 |
| P01033 | Metalloproteinase inhibitor 1 | TIMP1 | 3V96 |
| P05093 | Steroid 17-alpha-hydroxylase/17,20 lyase | CYP17A1 | 5IRQ |
| P09237 | Matrilysin | MMP7 | 2Y6D |
| O95863 | Zinc finger protein SNAI1 | SNAI1 | 4QLI |
| Q99497 | Protein/nucleic acid deglycase DJ-1 | PARK7 | 2RK3 |
| Q9Y6K1 | DNA (cytosine-5)-methyltransferase 3A | DNMT3A | 4QBS |
| P13591 | Neural cell adhesion molecule 1 | NCAM1 | 2HAZ |
| Q13464 | Rho-associated protein kinase 1 | ROCK1 | 3V8S |
| Q9UBC3 | DNA (cytosine-5)-methyltransferase 3B | DNMT3B | 5NRR |
| Q969J5 | Interleukin-22 receptor subunit alpha-2 | IL22RA2 | 3G9V |
| O00622 | Protein CYR61 | CYR61 | 4D0Z |
| P05230 | Fibroblast growth factor 1 | FGF1 | 1RG8 |
| P42702 | Leukemia inhibitory factor receptor | LIFR | 3E0G |
| Q9NZH6 | Interleukin-37 | IL37 | 5HN1 |
| O96013 | Serine/threonine-protein kinase PAK 4 | PAK4 | 2J0I |
| P49757 | Protein numb homolog | NUMB | 5NJJ |

根据所有的打分结果，一般Score 值在4.25 以上认为是有一定的结合活性，大于5.0 的说明分子与靶点有较好的结合活性，大于7.0 则说明分子与靶点的结合构型具有强烈的活性

根据数据，得到打分在7分以上的有566个，打分在5-7分之间的2566个，打分在4.25到5分之间的755个。从而得到了该种药物的成分、靶点打分信息。根据打分在7分之上的进行维度排名，得到degree排名前六的靶点数据。

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 排序 | degree | 靶点名称 | PDBID |
| 1 | 30 | PGR | 1SQN |
| 2 | 26 | PPARG | 3U9Q |
| 3 | 26 | ESR2' | 3OLL |
| 4 | 26 | NOTCH1 | 5L0R |
| 5 | 24 | PTGS2 | 5F19 |
| 6 | 24 | ROCK1 | 3V8S |

下面是打分前50的靶点-成分数据，

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **靶点** | PDB ID | **成分** | docking scores |
| NOTCH1 | 5L0R | Solatubin | 8.59 |
| NOTCH1 | 5L0R | campesterol | 8.58 |
| NOTCH1 | 5L0R | ergosterol | 8.56 |
| NOTCH1 | 5L0R | sitosterol | 8.55 |
| NOTCH1 | 5L0R | Ziebeimine | 8.54 |
| NOTCH1 | 5L0R | Friedelin | 8.51 |
| NOTCH1 | 5L0R | Sitosterol alpha1 | 8.51 |
| PGR | 1SQN | dracaenogenins A | 8.50 |
| NOTCH1 | 5L0R | panaxatriol | 8.50 |
| CYP1A1 | 4I8V | Friedelin | 8.49 |
| PPARG | 3U9Q | Friedelin | 8.49 |
| NOTCH1 | 5L0R | dracaenogenins A | 8.48 |
| NOTCH1 | 5L0R | Verticine | 8.48 |
| PGR | 1SQN | Friedelin | 8.47 |
| ESR2 | 3OLL | ergosterol | 8.47 |
| ESR2 | 3OLL | Friedelin | 8.47 |
| NOTCH1 | 5L0R | Stigmasterol | 8.46 |
| PTGS2 | 5F19 | isoarborinol | 8.451 |
| ESR2 | 3OLL | panaxatriol | 8.451 |
| NOTCH1 | 5L0R | Peiminine | 8.448 |
| CYR61 | 4D0Z | isoarborinol | 8.446 |
| PGR | 1SQN | panaxatriol | 8.445 |
| NOTCH1 | 5L0R | Peimisine | 8.444 |
| ESR2 | 3OLL | dracaenogenins A | 8.441 |
| ROCK1 | 3V8S | Friedelin | 8.44 |
| ESR2 | 3OLL | Stigmasterol | 8.439 |
| NOTCH1 | 5L0R | isoarborinol | 8.438 |
| PPARG | 3U9Q | isoarborinol | 8.437 |
| CYP1A1 | 4I8V | isoarborinol | 8.437 |
| CYP1A1 | 4I8V | panaxatriol | 8.434 |
| ESR2 | 3OLL | sitosterol | 8.421 |
| PGR | 1SQN | ergosterol | 8.42 |
| CYP1A1 | 4I8V | Ziebeimine | 8.416 |
| CYP1A1 | 4I8V | Stigmasterol | 8.416 |
| CYR61 | 4D0Z | Friedelin | 8.412 |
| ESR2 | 3OLL | campesterol | 8.411 |
| CYR61 | 4D0Z | panaxatriol | 8.409 |
| CYR61 | 4D0Z | Sitosterol alpha1 | 8.409 |
| NOTCH1 | 5L0R | protopanoxadiol | 8.408 |
| CYP1A1 | 4I8V | protopanoxadiol | 8.406 |
| ESR2 | 3OLL | isoarborinol | 8.405 |
| PPARG | 3U9Q | panaxatriol | 8.405 |
| CYP1A1 | 4I8V | Solatubin | 8.405 |
| NOS3 | 4D1P | isoarborinol | 8.401 |
| PGR | 1SQN | isoarborinol | 8.394 |
| COMT | 3BWY | Friedelin | 8.39 |
| CYP1A1 | 4I8V | sitosterol | 8.39 |
| PTGS2 | 5F19 | Sitogluside | 8.389 |
| ESR2 | 3OLL | trans-feruloylcampesterol | 8.388 |
| NTRK1 | 5JFW | isoarborinol | 8.388 |

上述的

# 结论和展望

本文基于网络药理学的原理，针对中药的分析，设计开发了一个在线的中药分析平台，可以完成从中药成分的获取，靶点成分的准备到在线分子对接整个流程的作业。最后展示了使用本系统的一个案例，解释了本系统的使用方式，并展示了相关的效果。

参考文献