基于自动化技术的网络药理数据准备

网络药理学研究需要准备大量的生物大分子和化合物小分子，但是当前进行这方面研究的时候，很多进行中药药理学方面的研究者需要进行大量的手动作业，导致数据获取进度缓慢，研究进展缓慢。针对这个痛点，本文提出了一种基于自动化技术的分子药理数据的准备方法。在给出中药药方以及其对应的病症的情况下，可以完成中药成分数据的获取同时构建对应的成分数据库。另外，同样还能完成病症靶点数据库的准备。该成功可以大大方便进行分子药理学的前期数据的准备，加速药理学的研究进展。

功能模块

成分的准备主要分为两个模块，分别是生物大分子的模块和药品小分子的模块。这里，对这两个模块进行相关的设计与分析。

药品小分子

药品小分子的获取，首先使用到的数据库是TCMSP/TCMID这两个数据库，从这两个数据库获取到对应的小分子的名称数据，将这些名称数据存储在对应的文本中，然后分别访问这些小分子的名称，从对应的数据库中查找到对对应的SMILES格式的数据并且存储到对应的文件夹中，这就完成了对应的小分子的所有准备。

存在的问题，现在在进行软件设计的时候，数据存在不一致性的问题，这个不一致性体现在，如果一种化学成分存在多种命名的方式，这种情况就会导致数据不一致性的问题。对于这种数据不一致，本文需要对这些数据进行相当的处理。

TCMID数据库的数据的获取是根据