网络药理内容修订-20181128

目的：

1. 技术手段的优势：实现半自动化进行单药、复方治疗疾病的成分-靶点网络预测
2. 散结镇痛胶囊为案例

3、探讨作用机制，为二次开发提供参考依据

方法：（需补充）

数据库建立-脚本-半自动对接-脚本-可视化-富集

结果：

1. 一套简化搜索、对接过程的计算机程序
2. 以散结镇痛胶囊治疗子宫肌腺症为例进行演示
3. 胶囊的成分-靶点-机制图
4. 分析胶囊产生治疗作用可能的不同路径
5. 应用：分析预测目前检测到的12种化学成分的作用机制通路及相关靶点蛋白，指导下一步药效机制实验。

意义：

1. 改进创新的成分-靶点预测分析技术，提高效率和广泛应用度。
2. 分析散结镇痛胶囊治疗子宫肌腺症的机制
3. 预测其质量标志物（12种检测成分）的作用靶点，指导实验研究

具体内容：

1. 数据库建立

1.化学成分数据库TCMSP、CNKI

1.1 由TCMSP搜索三种中药的化学成分及相关信息.

1.2 龙血竭的化学成分通过CNKI文献挖掘搜集。

1.3 建立化学成分数据库。

* 编写程序实现 “中药材-化合物-数据集” 的自动建立，不包括文献搜索成分（文献搜索使用）

2. 疾病靶点数据库：NCBI

2.1 输入关键词adenomyosis，endometriosis 。

2.2 搜索protain、gene选项，得到靶点PDB ID信息，去除重复（交集？与下一次交集的关系？）。建立 疾病-靶点 数据库。

* 编写程序实现 “疾病-靶点-数据集”的自动建立
* 综合以上两种数据库信息自动搜索，实现 “中药材、疾病→化合物、靶点数据集” 的自动搜索建立。

1. 筛选潜在成分和靶点:
   1. 关键点1潜在活性成分的筛选（TCMSP打分，文献中找的如何处理？）具体哪93个成分？
   2. 关键点2潜在靶点的筛选 需要ID对应的基因、蛋白信息

NCBI中搜到的靶点集合与TCMSP数据库中的化学成分靶点集合相同的部分（交集）作为潜在作用靶点

* 1. 验证12种成分（实例分析）是否在该潜在活性成分群中。

1. 成分靶点对接：

3.1 化合物、靶点的结构搜索（哪些数据库）

* 编写程序实现自动搜索、结果导出

3.2 Systemsdock在线对接平台：打分

不用DS软件，换用在线平台。导入成分及靶点相关信息，docking score值大于4.25说明分子与靶点有一定的结合活性，大于 5.0 说明分子与靶点有较好的结合活性，大于 7.0 则说明具有强烈的结合活性。

打分结果分类

对接结果重复部分如何处理的？结果的解读

1. 疾病通路富集分析：

4.1 为了对鉴别到的靶标进行解释，将这些靶标蛋白导入STRING 数据库（或者KEGG、GO）进行了基因功能富集分析，以得到靶标蛋白相关的分子功能、生物过程和细胞成分，此外还进行了通路富集分析和疾病富集分析。

或者Bio database (http://bioinfo .capitalbio.com/mas3/) 数据库 screened for pathways that met the criterion of 𝑃 < 0.01.

4.2 结果可视化：cytoscape工具实现

4.3 重点分析12种成分的“成分-靶点-通路”图