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

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

# 研究内容

## 一、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.

解析：该部分已经使用python对应的程序实现了，从TSMCP、TCMID、上海有机所数据库爬取到对应的数据。

#### 1.2 龙血竭的化学成分通过CNKI文献挖掘搜集。

龙血竭的化学成分，使用CNKI这部分，使用手动查询的方式已经获取到，这部分的数据已经通过手动处理的方式获取到，该部分的数据是通过手动提交的方式得到。在对应的EXCEL文件中。

#### 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）

解析：该部分的数据与前述1.1、1.2两部分结合起来得到，前两部分数据获取到后，该部分的数据就能够得到。

### 2. 疾病靶点数据库：NCBI

#### 2.1 输入关键词adenomyosis，endometriosis 。

解析：该部分的使用设计的软件的靶点获取模块可以得到。从NCBI数据库中可以得到。

#### 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。

解析:该部分的数据在前述2.1的基础上，在软件的靶点获取模块也是实现的，具体是从UniProt这个数据库中获取的数据。

## 二、筛选潜在成分和靶点:

### 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？

解析：该部分并没有进行对应的筛选，本系统在进行设计的时候，直接将全部的数据给展示出来，因为并非全部的数据都存在。

### 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

解析：该部分同样是用使用对应的数据库中的数据来做的。该部分使用程序来做。

### 验证12种成分（实例分析）是否在该潜在活性成分群中。

解析：该部分需要查看是不是具体需要，这部分的数据使用的是全部的数据来处理的。

## 三、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

解析：靶点使用的是NCBI数据库，集成在开发的系统里得到的。

### 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

解析：该部分使用SystemDock在线对接平台，使用该平台提供的对接工具和算法进行分子的对接，对接之前会提前将重复的数据去除，所以不存在对接重复的部分。

## 四、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.

解析：该部分已经通过STRING数据库进行了实现，实现的结果在对应的PPT中进行了展示。另外，在文件夹中也进行了保存。富集的方式在对应的文档中也是存在的。

### 4.2 结果可视化：cytoscape工具实现

解析：该部分已经通过可视化软件cytoscape实现，对应的图表在相应的图表。另外，相关的图片在对应的文件夹中也进行了存储。

### 4.3 重点分析12种成分的“成分-靶点-通路”图

解析：该部分的数据并未指定是具体的12种成分，而是对一些打分比较高的成分进行了可视化的分析。给出了相关的“成分-靶点-通路”图像。该部分的数据