网络药理学在中药领域的应用和展望*

张代峰[1]　胡晨骏[1]　胡孔法[1,2]

（[1] 南京中医药大学人工智能与信息技术学院　南京 210023
[2]江苏省中医药防治肿瘤协同创新中心　南京 210023）

〔摘要〕　**目的/意义** 总结近年中药领域网络药理学研究成果，提出人工智能时代大规模生物医学数据解析方法，为中药网络药理学的发展趋势和未来应用提供思路与参考。**方法/过程** 基于文献分析，阐述网络药理学研究流程及其在中药药效物质基础、中药药效作用机制、疾病分子作用机制分析等方面的研究进展。探讨以图神经网络为代表的人工智能方法在中药网络药理学中的应用与趋势。**结果/结论** 将图神经网络引入中药网络药理学研究，借助人工智能模型，进一步丰富网络药理学研究方法，深度解析中药作用机制，为构建现代中药基础理论体系提供技术支撑。

〔关键词〕　中医药；网络药理学；复杂网络；人工智能；图神经网络

〔中图分类号〕R－058　　〔文献标识码〕A　　〔DOI〕10.3969/j.issn.1673－6036.2024.06.006

Application and Prospect of Network Pharmacology in the Field of Traditional Chinese Medicine

ZHANG Daifeng[1], *HU Chenjun*[1], *HU Kongfa*[1,2]

[1] *College of Artificial Intelligence and Information Technology, Nanjing University of Chinese Medicine, Nanjing 210023, China*; [2] *Jiangsu Collaborative Innovation Center of Traditional Chinese Medicine in Prevention and Treatment of Tumor, Nanjing 210023, China*

〔**Abstract**〕　**Purpose/Significance** To summarize the research results of network pharmacology in traditional Chinese medicine (TCM) in recent years, and to propose a large－scale biomedical data analysis method in the era of artificial intelligence (AI), so as to provide ideas and references for the development trend and future application of network pharmacology in TCM. **Method/Process** Based on literature analysis, the research process of network pharmacology and its research progress in the material basis of TCM efficacy, mechanism of TCM efficacy and analysis of molecular mechanism of disease are reviewed. The application and trend of AI represented by graph neural network in TCM network pharmacology are discussed. **Result/Conclusion** The graph neural network is introduced into the research of TCM network pharmacology, and the AI model is used to further enrich the research methods of network pharmacology, analyze the mechanism of TCM in depth, and provide technical support for the construction of modern TCM basic theoretical system.

〔**Keywords**〕　traditional Chinese medicine (TCM); network pharmacology; complex network; artificial intelligence (AI); graph neural network

〔修回日期〕　2023－12－27

〔作者简介〕　张代峰，硕士研究生；通信作者：胡晨骏，博士，副教授。

〔基金项目〕　国家自然科学基金面上项目重点专项基金项目（项目编号：82074580）；江苏省研究生科研创新计划（项目编号：KYCX23_2079）。

1 引言

中医药在长期临床实践中形成了整体观和辨证论治的理论体系。中药是中医防病治病的物质基础[1]，遵循“君臣佐使”的用药规律，注重药物配伍联合使用，这与网络药理学研究的整体性、统一性特点相吻合。近年来，在中医药传承创新发展过程中，已有研究者将复杂网络、系统生物学研究思路与方法融入中药药效物质基础、中药药效作用机制探究并取得一定研究成果，推动了网络药理学在中药领域的发展。同时，在人工智能蓬勃发展的时代背景下，以图神经网络为代表的深度学习技术在具有复杂关系的数据集共性探究、分类及预测等方面均表现出良好性能。目前网络药理学结合图神经网络分析的技术手段，可以充分发挥人工智能方法在大数据处理方面的优越性能，将海量中医药数据汇总、整理并加以分析，有效弥补人工分析海量文本数据及探寻事物关联规则的局限性，为辅助临床诊疗和疾病机理的深入探究奠定坚实基础[2]。同时计算化学、分子动力学的发展，使计算机模拟辅助药物设计方法不断完善和成熟，有助于降低实验验证的药物和人力成本，提高新药开发、设计、再利用的效率[3]。

本文从多方面介绍网络药理学在中药领域的研究现状和应用，结合生命科学领域人工智能应用研究成果，阐述网络药理学在中药药效作用机制分析、中药药效物质基础探究、药物分子与疾病靶点结合等方面的未来研究方向，以期为推动网络药理学在中药领域的应用和发展提供参考。

2 网络药理学

2.1 网络药理学概念

传统西医的理想情况是将一种药物用于一种靶标、对应一种基因或某种单一病症。随着系统生物学和药理学研究不断深入，现代医学技术体系及研究方法不断完善。英国药物学家 Hopkins A L[4] 于 2007 年最先提出“网络药理学”概念，将其定义为运用网络方法分析药物与疾病和靶点之间“多成分、多靶点、多途径”协同作用关系的药理学分支学科。发展至今，网络药理学已逐步发展为成熟的交叉学科，其基于系统生物学与基因组学、蛋白组学等多组学学科理论，运用高通量组学数据分析、计算机模拟及公开数据库检索等技术，揭示药物－基因－靶点－疾病相互作用的网络关系[5-7]。网络药理学在系统生物学的数据基础上，综合靶标、药物和疾病 3 个方面，通过生物复杂网络分析获取有价值信息，并进行实验结果验证，科学合理地将其应用于中药研究，有利于丰富传统中医药内涵，推动中医药现代化发展。

2.2 网络药理学研究流程

2.2.1 生物网络构建 20 世纪末 Watts D J 等[8] 与 Barabási A L 等[9] 先后提出复杂网络的相关概念。复杂网络起源于图论，逐步在生物医学领域的数据挖掘中发挥作用，并产生基于生物网络构建的研究方法。生物网络构建以多组学数据为主，结合高通量组学技术和生物信息学分析技术，以药物靶点数据、文献数据等进行补充和验证。多组学整合分析方法[10] 包括基因组学、表观基因组学、转录组学、蛋白质组学及代谢组学，其在生物网络构建的数据收集阶段，可以有效处理分析存储于公开数据平台的海量药物靶点及基因蛋白数据。目前，主流的公开数据平台包括开放基因数据平台、中医药靶点数据平台、药物关联分析数据库、组合药物靶点数据库、文献数据库等，见表 1。通过关联各类数据库，完成生物－疾病－靶点网络与基因－蛋白网络构建，为之后的靶标预测及分析提供数据基础。中药成分多、作用靶点多、作用途径复杂，不易查找关键因子，利用多组学生物网络构建方法可在短时间内获得大量差异性表达基因，构建基因－蛋白关联关系，进而筛选出起效的中药活性成分和作用靶标。王晓艳等[11] 利用高通量测序技术结合多组学分析方法筛选得到 28 个黄酮类活性成分、97 个潜在靶点和 61 条相关通路，涉及抗肿瘤、抗炎、内分泌调节和氨基酸代谢等环节，构建蛋白质靶点互作网络，推进了甘草黄酮类成分药物药效研究。通过

构建多组学生物网络可以有效发现中药关键作用成分，解读中药不同成分间的相互作用关系，在生物网络层次上，建立药物与疾病的机制性关联，为生物疾病复杂网络分析和药物蛋白分子互作机制深入探究奠定基础。

表 1 不同数据库类型及对应主流数据库

数据库类型	数据库名称
开放基因数据平台	国际人类基因组织数据库[12]（HUGO gene nomenclature committee，HGNC）
	整合循环细胞游离基因组图谱[13]（circulating cell - free genome atlas，CCGA）
	癌症基因组图谱[14]（the cancer genome atlas，TCGA）
	高通量基因表达数据库[15]（gene expression omnibus database，GEO）
中医药靶点数据平台	中医药百科全书[16]（the encyclopedia of traditional Chinese medicine，ETCM）
	中药系统药理学数据库与分析平台[17]（traditional Chinese medicine systems pharmacology database and analysis platform，TCMSP）
	中医药综合数据库[18]（traditional Chinese medicine integrated database，TCMID）
药物关联分析数据库	STITCH[19]
	CHEMBL[20]
组合药物靶点数据库	STRING[21]
	PubChem[22]
文献数据库	PubMed[23]
	Elsevier[24]
	SciFinder[25]

2.2.2 网络靶标分析 网络靶标分析是在生物网络构建的基础上，对其进行相关动态特征分析和关键静态结构解析[26]。在中药分析领域，网络靶标分析利用计算机高性能、高精度的特点，整合中药各类成分、基因等有效信息构建药物 - 靶点 - 疾病网络，并依托复杂网络，进行中药关键成分识别及作用机制分析。Pan L 等[27]构建成分 - 靶点 - 疾病网络，发现黄连汤可以通过提高葡萄糖转运蛋白 4、胰岛素受体和丝裂原活化蛋白激酶 1 的基因和蛋白表达水平来干扰乙醛酸盐和二羧酸盐的代谢，对 2 型糖尿病具有治疗作用。应用网络靶标分析方法可以有效融合现代医学研究数据和中医临床医案数据，从网络角度理解复杂生物系统，把握药物整体干预作用，在分析中药作用机制、发现药物作用通路及新药新方研发等方面发挥推动作用。目前网络靶标分析主要应用于中药作用过程、中药关键起效成分、药物疾病作用机制研究等方面并取得一定进展。

2.2.3 分析结果验证 网络药理学基于复杂网络分析得到结果，为进一步验证其方法的可行性与结果的可靠性，需进行结果验证。目前主要验证方法包括文献推测、分子对接验证和实验验证[28]，其中实验验证具有高证据力、系统性的特点，具体包括蛋白水平实验验证、细胞模型实验验证、动物模型实验验证和临床实验验证等方法。实验验证作为主流验证方法，可应用于网络药理学结果验证。逻辑严密的计算机模型推算结合实验验证，共同组成完整的网络药理学研究方法。

3 中药领域网络药理学应用进展

3.1 中药药效作用机制分析

中药药效作用机制为多靶点、多作用途径，其诊疗处方通常体现“辨证论治”“君臣佐使”的治疗理念。不同于传统西医单药物、单靶点治疗理念，网络药理学以复杂网络为核心，利用系统生物

学研究方法，结合公开生物医学数据，有效分析中药药效作用机制，为同类疾病诊治或同类药物治疗范围研究应用提供新的思路和方法。郝鹏飞等[29]构建成分－靶点－通路网络，经过一系列评估分析，筛选得到大黄附子汤治疗慢性肾衰竭的 5 个最具研究价值的信号通路，阐明大黄附子汤作用机制。Cai F F 等[30]在 TCMSP、TCM Database@Taiwan、TCMID、草药成分和靶标数据库（herbal ingredients' targets platform，HIT）等现代中医药公开数据库中，利用转录组学技术确定茵陈蒿汤抗肝纤维化的 45 种活性成分和 296 种潜在靶点。Song Y A 等[31]用网络药理学方法分析得到白花蛇舌草对前列腺癌的作用机制，发现其可能与细胞凋亡的多种信号通路协同调控有关。陈郁郁等[32]从信号通路、RNA 分子转录及相关蛋白酶的角度，充分预测葛根的活性成分和作用靶点，揭示葛根解酒的分子作用机制。Liu X 等[33]基于 GC－MS 的代谢组学，结合临床验证和实验验证，证明逍遥散可以显著调节乳酸、甘油、谷氨酰胺、谷氨酸、次黄嘌呤、肌醇和胆固醇的异常水平，参与调节多项蛋白酶和激活剂合成与信号传导，从而发挥出良好的抗抑郁作用。综上所述，系统生物学结合网络药理学可以在探究中药作用机制方面发挥重要作用，探明各类药物配对、药物互作机制对人体生物网络的影响。

3.2 中药药效物质基础研究

传统的医案数据及中医诊疗处方的中药成分复杂且往往遵循经验用药，缺少完备的科学理论体系支撑。传统的中药物质基础研究主要通过分离提取与活性试验明确中药的有效成分，耗时长、效率低、不能有效将化学成分与生物活性筛选密切结合，对药物作用过程中有效成分的阐明不足[34]。网络药理学利用 TCM database@Taiwan、TCMSP、TCMID 等公开数据库和网络分析平台数据进行“药物－靶点”“疾病－蛋白质－药物成分”等复杂网络构建，分析、预测网络中重要节点，结合分子对接等验证技术筛选核心蛋白质及药物组成成分，对发现已有中药有效活性成分和预测新药天然活性成分具有重要临床价值。杨帆等[35]利用 TCMSP 平台结合 UniProt 数据库探究瓜蒌活性成分，收集中药瓜蒌的 80 个已知化合物，经过一系列筛选，得到 27 个活性成分。施岚尔等[36]利用网络药理学方法，从丹参中筛选获得 65 个活性成分，有效挖掘丹参防治 2 型糖尿病的活性成分。Li Y 等[37]从冬虫夏草中筛选出 7 种活性成分，确定了 293 个推定靶基因，发现 85 个与糖尿病肾病匹配的潜在治疗靶点，为中药起效成分确定和糖尿病肾病治疗新方研发指明方向。将网络药理学应用于中药药效物质基础探究，可以有效弥补部分中药起效成分及原因不明的不足，有助于探明中药核心作用成分、预测药物组合作用，以及新复方构建。

3.3 中药新药设计研发

网络药理学可以在中药新药、新方研发中发挥积极作用。其通过现有的公开生物医药数据，对药物进行计算机虚拟筛选，构建已知疗效中药和对应疾病间的“靶标－疾病”网络；充分挖掘现有药物复杂网络中的关键信息，进行新型药物－靶点网络构建，探究候选药物分子和疾病靶点间的新组合；或者根据药物组方原则结合药物本身性质，探究候选药物间分子结合的可行性和结合模式，进而构建中药新复方。Fan J 等[38]构建可视化靶点－通路网络，可视化分子对接结果，使用 TCGA 数据库与基因集变异分析（gene set variation analysi，GSVA）算法，验证左金胶囊通过靶向候选基因抑制周期进展、迁移并诱导细胞凋亡，以达到抑制结直肠癌的目标。网络药理学可针对现有中医药经典方剂有效推断挖掘重要活性成分与药物、蛋白互作关系，明确生物分子作用信号通路，针对某类病症的特定靶点进行有针对性的中医复方构建和研发，为中药新药研发与新型复方设计提供理论基础与新思路。

3.4 网络药理学研究中存在的问题及解决途径预测

虽然当前网络药理学在中药领域具有良好应用发展前景，但在实际应用中仍存在一些问题有待解决。

传统的复杂网络分析方法，以随机游走、深度游走、PageRank 等复杂网络分析算法结合支持向量

机算法、邻近算法等机器学习算法为主，其在面对中药数据及多组学数据等非结构化数据时，在性能表现、成本等多方面仍存在不足。而逐步兴起的图神经网络（graph neural network，GNN）技术能够学习图结构数据中的节点以及边的内在规律和更加深层次的语义特征，对图结构数据具有强大的非线性拟合能力，因此在对于非结构化的复杂网络分析相关问题上，GNN 将会表现出更高的准确率和更好的鲁棒性[39]。未来人工智能方法在网络药理学中的应用将有效处理并挖掘复杂网络中蕴含的有价值信息，从数据挖掘算法和分析模型两方面提高复杂网络分析的性能和效率，解决传统机器学习算法性能不足的问题，成为未来中药网络药理学继续发展的推动力。

对于网络药理学分析结果，目前大多数研究者仍采用体内、体外实验及临床试验验证方法。此类方法以实验数据验证复杂网络分析结果，具有高证据力和较好的说服力，但存在周期长、成本高的缺点，且在网络药理学的未来发展中，该验证方法稍显单一。目前计算化学分子对接技术已在位点、靶点寻找中产生良好效果，且成本较低，验证速度较快。未来网络药理学发展可以继续结合分子动力学和结构生物学相关方法，以计算机模拟辅助或在海量相关文献中挖掘相应知识结论辅助验证结果，完善验证过程的理论性。通过计算产生研究假设，通过实验验证研究假设，这将弥补单纯试验方法的不足、降低研究消耗，为研究中药复杂化学体系作用机制提供符合中医药整体特色的新方法。

4 网络药理学在中药领域的应用发展方向

4.1 生物分子网络分析

人体生物网络的失衡导致疾病，疾病从无到有的过程可以通过生物－疾病复杂网络动态表示。探寻不同疾病分子对生物网络的作用节点和其作用方式是探究复杂生物网络失衡的关键。随着图神经网络、卷积神经网络相关的人工智能算法和模型日益成熟，关于生物疾病分子机制领域的研究不断深入，相关应用也逐步展开，疾病生物分子机制探究方面已取得相关成果。He H 等[40]提出新的虚拟筛选过程，使用机器学习和图神经网络方法成功筛选出由桑叶和灵芝配制的治疗多发性骨髓瘤的药物。Ji Y 等[41]提出 MSRUN－KELM 机器学习框架，从多特征指标中较好地分析出多发性骨髓瘤发病机理及生物状态。由此可见，未来在探究疾病状态转变过程中的生物标志物及药物成分针对特异性疾病的关键作用靶点等领域，图神经网络将发挥巨大作用。

在完成前期生物疾病复杂网络构建后，人工智能方法结合多组学分析技术，在药物－生物－疾病靶点预测、药物活性成分分析、药物作用机理分析等多方面均取得一定研究成果。图神经网络技术结合统计学算法，对公开药物、基因、文献数据库中提取出的有效数据进行分析、总结，可以高精度、高效率地归纳出海量数据中蕴含的关联规律。Zeng X 等[42]提出 ImageMol 训练框架，通过基于分子图像的无监督深度学习预测药物性质和药物靶点，帮助研究人员从视觉上直观地理解分子结构影响性质和靶点的过程，开创了分子表征学习新范式。Sun M 等[43]从分子特性和活性预测、相互作用预测、合成预测、从头药物设计 4 个角度总结现有应用，为图卷积神经网络在药物发现领域的未来研究方向和应用提供新思路。Zhi H Y 等[44]提出多种图神经网络研究方法，通过构建 3 个 GNN 模型在数据集中训练，获得更好的建模效果和更高的精度，并运用分子动力学模拟技术验证蛋白质－配体复合物的稳定性，为药物发现提供了新的方法。

近年来，在中药诊治恶性肿瘤领域，可以基于人工智能方法，充分利用现有的公开中医药成分数据，结合图神经网络和计算化学相关技术，筛选包含对应成分的中药，以药物活性成分及相应的生物标志物蛋白质为桥梁，关联疾病与基因、疾病与药物的联系，构建图神经网络模型，探寻恶性肿瘤从无到有、从“未病”到“已病”的发展过程、发病机理，探究中药在疾病不同发展阶段的治疗效果与发现特异性中药活性成分，以此发现新的治疗方法和中药新方。

4.2 辅助网络药理学实验结果验证

人工智能方法在蛋白质结构分析预测和同类疾

病基因关联强度的预测方面表现出良好性能，并可以将计算机模拟预测分析出的结果与细胞、动物模型验证得到的结果相互对比，在动物实验高证据力的基础上，提高结论的可解释性和逻辑的合理性。唐跃威等[45]建立了一种图卷积神经网络模型，利用计算机辅助预测药物与蛋白质亲和力，加快药物研发过程。Varadi M 等[46]搭建 AlphaFold 蛋白质结构数据库，实现对预测原子坐标、每个残基和成对模型置信度估计以及预测对齐误差的编程访问和交互式可视化。

在中医药领域，可以基于人工智能的大语言模型，从中医医案或经典名方中提取相应实体，构建数据仓库，结合图神经网络技术，挖掘出其中蕴含的中医诊治疾病经验、分析组方及配伍规律，将其与实验验证结果进行比较，充分发挥人工智能模型的知识归纳优势，丰富网络药理学结果验证的方法。

在多组学数据分析领域，可以通过数据挖掘技术在多源异构的系统生物学公开数据库中进行知识抽取，将收集的基因组学数据和生物标志物信息进行归纳整合及结果验证。融合包括网络药理学、计算化学、结构生物学在内的多门学科，充分归纳整理基因组学、代谢组学、蛋白质组学等数据，以多组学数据为输入，以基因预测结果、信号通路预测结果为输出，在未来疾病分子作用机制的预测分析及辅助验证领域发挥积极作用。

5 结语

随着人工智能时代的到来，运用网络药理学结合人工智能分析方法可以有效整合公开组学数据、文献数据、临床数据等多源异构的数据信息，构建生物疾病复杂网络，深入探究基因－蛋白质－药物－疾病间相互作用关系，模拟、预测疾病发病因素，同时从微观分子学角度出发，进一步阐明中药药效作用机制，揭示中药药效物质基础，推动中医药新药、新方研发，弥补中医药领域发展过度依靠临床经验的不足，为中医药发展提供理论依据和科学指导。同时，在实验的基础上辅以大数据分析技术加以说明，充分利用计算机模拟技术，完善中医药网络药理学的研究过程，尽可能使结果验证更加数字化、具体化，增强验证过程的可解释性。将人工智能方法应用在中医药领域，将使中医药临床用药方法更富严谨性、可解释性，有助于提高中医药在全球医疗领域的地位，推动中医药现代化发展。在可预见的未来，计算生物学、生物信息学和系统生物学相关技术的融合应用会更加广泛，从而推动中药网络药理学在中医药领域应用研究进一步发展。

作者贡献：张代峰负责文献整理，数据收集、分析，论文撰写；胡晨骏负责研究方向确定及初稿审阅、修改；胡孔法负责研究过程指导，项目申请、管理。

利益声明：所有作者均声明不存在利益冲突。

参考文献

1 潘锋. 中医药基础研究重在阐明科学内涵［EB/OL］. ［2023－11－12］. https://www.cae.cn/cae/html/main/col100/2012－03/07/20120307172743491677475_1.html

2 段贤春，黄石，彭代银，等. 网络药理学在中药复方研究中的应用［J］. 中国药理学通报，2020，36（3）：303－308.

3 PAUL D, SANAP G, SHENOY S, et al. Artificial intelligence in drug discovery and development［J］. Drug discovery today, 2021, 26（1）: 80.

4 HOPKINS A L. Network pharmacology［J］. Nature biotechnology, 2007, 25（10）: 1110－1111.

5 ANG N, ZHENG Y, GU J, et al. Network－pharmacology－based validation of TAMS/CXCL－1 as key mediator of XIAOPI formula preventing breast cancer development and metastasis［J］. Scientific reports, 2017, 7（1）: 14513.

6 LYU M, YAN C L, LIU H X, et al. Network pharmacology exploration reveals endothelial inflammation as a common mechanism for stroke and coronary artery disease treatment of Danhong injection［J］. Scientific reports, 2017, 7（1）: 15427.

7 HONG M, LI S, TAN H Y, et al. A network－based pharmacology study of the herb－induced liver injury potential of traditional hepatoprotective Chinese herbal medicines［J］. Molecules, 2017, 22（4）: 1－14.

8 WATTS D J, STROGATZ S H. Collective dynamics of small－world networks［J］. Nature, 1998, 393（6684）: 440－442.

9 BARABÁSI A L, ALBERT R. Emergence of scaling in random

networks [J]. Science, 1999, 286 (5439): 509 – 512.

10 LIU J, LI W, WANG L, et al. Multi – omics technology and its applications to life sciences: a review [J]. Chinese journal of biotechnology, 2022, 38 (10): 3581 – 3593.

11 王晓艳，李伟霞，张辉，等. 基于网络药理学的甘草黄酮类成分药效作用研究 [J]. 中医学报，2020，35 (1): 155 – 163.

12 SEAL R L, BRASCHI B, GRAY K, et al. Genenames. org: the HGNC resources in 2023 [J]. Nucleic acids research, 2023, 51 (D1): D1003 – D1009.

13 KLEIN E A, HUBBELL E, MADDALA T, et al. Development of a comprehensive cell – free DNA (cfDNA) assay for early detection of multiple tumor types: the circulating cell – free genome atlas (CCGA) study [J]. Journal of clinical oncology, 2018, 36 (Sl): 12021.

14 LIU J, LICHTENBERG T, HOADLEY K A, et al. An integrated TCGA pan – cancer clinical data resource to drive high – quality survival outcome analytics [J]. Cell, 2018, 173 (2): 400 – 416.

15 BARRETT T, WILHITE S E, LEDOUX P, et al. NCBI GEO: archive for functional genomics data sets – update [J]. Nucleic acids research, 2012, 41 (D1): D991 – D995.

16 XU H Y, ZHANG Y Q, LIU Z M, et al. ETCM: an encyclopaedia of traditional Chinese medicine [J]. Nucleic acids research, 2019, 47 (D1): D976 – D982.

17 RU J, LI P, WANG J, et al. TCMSP: a database of systems pharmacology for drug discovery from herbal medicines [EB/OL]. [2023 – 11 – 27]. https://doi.org/10.1186/1758 – 2946 – 6 – 13.

18 XUE R, FANG Z, ZHANG M, et al. TCMID: traditional Chinese medicine integrative database for herb molecular mechanism analysis [J]. Nucleic acids research, 2012, 41 (D1): D1089 – D1095.

19 KUHN M, VON MERING C, CAMPILLOS M, et al. STITCH: interaction networks of chemicals and proteins [J]. Nucleic acids research, 2007, 36 (Sl): 684 – 688.

20 GAULTON A, BELLIS L J, BENTO A P, et al. ChEMBL: a large – scale bioactivity database for drug discovery [J]. Nucleic acids research, 2012, 40 (D1): D1100 – D1107.

21 MERING C, HUYNEN M, JAEGGI D, et al. STRING: a database of predicted functional associations between proteins [J]. Nucleic acids research, 2003, 31 (1): 258 – 261.

22 KIM S, CHEN J, CHENG T, et al. PubChem 2019 update: improved access to chemical data [J]. Nucleic acids research, 2019, 47 (D1): D1102 – D1109.

23 DOMS A, SCHROEDER M. GoPubMed: exploring PubMed with the gene ontology [EB/OL]. [2023 – 11 – 27]. https://doi.org/10.1093/nar/gki470.

24 VOLK R, STENGEL J, SCHULTMANN F. Building information modeling (BIM) for existing buildings – literature review and future needs [EB/OL]. [2023 – 11 – 27]. https://doi.org/10.1016/j.autcon.2013.10.023.

25 GABRIELSON S W. SciFinder [J]. Journal of the medical library association, 2018, 106 (4): 588.

26 李梢. 网络药理学 [M]. 北京：清华大学出版社，2022.

27 PAN L, LI Z, WANG Y, et al. Network pharmacology and metabolomics study on the inter vention of traditional Chinese medicine Huanglian Decoction in rats with type 2 diabetes mellitus [EB/OL]. [2023 – 11 – 27]. https://doi.org/10.1016/j.jep.2020.112842.

28 世界中医药学会联合会. 网络药理学评价方法指南 [J]. 世界中医药，2021，16 (4): 527 – 532.

29 郝鹏飞，钟书婷，张超云，等. 大黄附子汤治疗慢性肾衰竭的网络药理学研究及初证 [J]. 中国医院药学杂志，2020，40 (5): 515 – 521.

30 CAI F F, BIAN Y Q, WU R, et al. Yinchenhao decoction suppresses rat liver fibrosis involved in an apoptosis regulation mechanism based on network pharmacology and transcriptomic analysis [EB/OL]. [2023 – 11 – 27]. https://doi.org/10.1016/j.biopha.2019.108863.

31 SONG Y A, WANG H Y, PAN Y J, et al. Investigating the multi – target pharmacological mechanism of hedyotis diffusa willd acting on prostate cancer: a network pharmacology Approach [J]. Biomolecules, 2019, 9 (10): 591.

32 陈郁郁，黄旭龙，罗覃，等. 基于网络药理学探讨葛根解酒的作用机制 [J]. 药物资讯，2020，9 (1): 17 – 26.

33 LIU X, WEI F, LIU H, et al. Integrating hippocampal metabolomics and network pharmacology deciphers the antidepressant mechanisms of Xiaoyaosan [EB/OL]. [2023 – 11 – 27]. https://doi.org/10.1016/j.jep.2020.113549.

34 屠鹏飞，史社坡，姜勇. 中药物质基础研究思路与方法 [J]. 中草药，2012，43 (2): 209 – 215.

35 杨帆，张轩，张荟荟. 基于网络药理学探索瓜蒌活性成分的药理作用 [J]. 中国药物经济学，2021，16 (9): 92 – 98.

36 施岚尔，聂课朝，张文婧，等. 基于网络药理学的丹参治疗 2 型糖尿病作用机制研究 [J]. 中药材，2020，43 (2): 444 – 451.

（下转第 56 页）

类，同时围绕医学行业和区域人才需求对高层次复合型医学技术人才培养等进行政策引导，使医学领域向多学科、区域协同合作发展，从而促进学科平衡、可持续发展。同时建议以医学领域“中国高被引学者”为基础，加强各学科人才建设，放眼“全球高被引学者”，开展前瞻性培养和应用转化，强调战略科技人才生态化培养。

作者贡献：崔艳梅负责研究设计、论文撰写；陶佳颐负责数据分析；陈宣男负责政策研究；刘海涛负责整体构思及论文修改。

利益声明：所有作者均声明不存在利益冲突。

参考文献

1 BIHARI A, TRIPATHI S. EM - index: a new measure to evaluate the scientific impact of scientists [J]. Scientometrics, 2017, 112 (1): 659 - 677.

2 郝晓梅，李日，高歌，等. 医学领域学者学术论文影响力评价方法 [J]. 中华医学图书情报杂志，2019，28 (9): 46 - 50.

3 尹志欣，谢荣艳. 我国顶尖科技人才现状及特征研究——以汤森路透 2015 高被引科学家为例 [J]. 科技进步与对策，2017，34 (1): 136 - 140.

4 中国高被引学者 [EB/OL]. [2023 - 04 - 04]. https://www.elsevier.cn/zh - n/solutions/scopus/most - cited.

5 2023 年中国科技论文统计报告 (1) [EB/OL]. [2023 - 04 - 04]. https://www.istic.ac.cn/ueditor/jsp/upload/file/20230919/1695123797464034826.pdf.

6 赵兵，郭才正，钱景. 基于 Clarivate Analytics “Highly Cited Researchers” 的中美高被引科学家分析 [J]. 农业图书情报学刊，2017，29 (7): 75 - 77.

7 靳军宝，曲建升，吴新年，等. 2014—2019 年我国高被引科学家群体特征计量分析 [J]. 科技管理研究，2021，41 (3): 202 - 210.

8 王茜，张宓之. 全球“高被引科学家”的聚焦领域、分布格局及发展态势 [J]. 科学发展，2022 (10): 23 - 29.

9 赵宁，范巍，张锐昕. 中国“全球高被引学科学家”结构特征和成长规律分析 [J]. 科技管理研究，2022 (1): 208 - 214.

10 王卓然，李明穗，蒋慧莉，等. 聚焦国家医学发展，实施人才培养“六才”理念 [J]. 中国医学科学院学报，2022，44 (5): 837 - 839.

11 李海云，景斌，于红玉. 生物医学工程学科发展的思考 [J]. 北京生物医学工程，2015，34 (6): 626 - 629.

12 赵志强，赵涵，吴航，等. 医院医学工程部门的学科建设及其内容 [J]. 中国医学装备，2017，14 (9): 145 - 148.

(上接第 36 页)

37 LI Y, WANG L, XU B, et al. Based on network pharmacology tools to investigate the molecular mechanism of Cordyceps sinensis on the treatment of diabetic nephropathy [EB/OL]. [2023 - 11 - 27]. https://doi.org/10.1155/2021/8891093.

38 FAN J, XU M, ZHOU L, et al. Integrating network pharmacology deciphers the action mechanism of Zuojin capsule in suppressing colorectal cancer [EB/OL]. [2023 - 11 - 27]. https://doi.org/10.1016/j.phymed.2021.153881.

39 吴博，梁循，张树森，等. 图神经网络前沿进展与应用 [J]. 计算机学报，2022，45 (1): 35 - 68.

40 HE H, CHEN G, CHEN C Y C. Machine learning and graph neural network for finding potential drugs related to multiple myeloma [J]. New journal of chemistry, 2022, 46 (11): 5188 - 5200.

41 JI Y, SHI B, LI Y. An evolutionary machine learning for multiple myeloma using runge kutta optimizer from multi characteristic indexes [EB/OL]. [2023 - 11 - 27]. https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2022.106189.

42 ZENG X, XIANG H, YU L, et al. Accurate prediction of molecular properties and drug targets using a self - supervised image representation learning framework [J]. Nature machine intelligence, 2022, 4 (11): 1004 - 1016.

43 SUN M, ZHAO S, GILVARY C, et al. Graph convolutional networks for computational drug development and discovery [J]. Briefings in bioinformatics, 2020, 21 (3): 919 - 935.

44 ZHI H Y, ZHAO L, LEE C C, et al. A novel graph neural network methodology to investigate dihydroorotate dehydrogenase inhibitors in small cell lung cancer [J]. Biomolecules, 2021, 11 (3): 477.

45 唐跃威，刘治平. 基于深度学习与多层次信息融合的药物靶标亲和力预测 [J]. 中国生物工程杂志，2021，41 (11): 40 - 47.

46 VARADI M, ANYANGO S, DESHPANDE M, et al. AlphaFold protein structure database: massively expanding the structural coverage of protein - sequence space with high - accuracy models [J]. Nucleic acids research, 2022, 50 (D1): D439 - D444.