

# 网络药理学视域下复方中药多成分作用机制的探讨

杨美

云南人民大药房有限公司

DOI:10.12238/bmtr.v7i1.11821

**[摘要]** 中药复方所含成分繁多,其治疗病症的范围广泛,涉及多个医学领域。在疾病治疗方面,中药复方展现出了显著的疗效。然而,其作用机制极为复杂,长期以来一直是科学界亟待解决的难题。尽管众多科研人员历经多年不懈探索,投入大量精力进行研究,但至今仍未完全阐明其中奥秘。值得庆幸的是,网络药理学这一新兴学科领域应运而生。其创新性地构建了“疾病-基因-靶点-药物”多维度关联网络,将原本分散且看似无序的研究要素有机整合起来。凭借这一网络模型,网络药理学不仅有力推动了中药复方研究取得突破性进展,为新药研发提供了全新的思路与方法,还在药物安全性评估中发挥着关键作用,为现代药学研究贡献了重要力量。

**[关键词]** 网络药理学; 复方中药; 药物成分; 作用机制

**中图分类号:** R282 **文献标识码:** A

Discussion on the mechanism of action of compound TCM under network pharmacology vision

Mei Yang

Yunnan People's Great Pharmacy Co., Ltd.

**[Abstract]** The Chinese medicine compound contains complex and diverse ingredients, and it treats a wide range of diseases, involving many medical fields. In terms of disease treatment, the traditional Chinese medicine compound has shown a significant curative effect. However, its mechanism of action is extremely complex, which has been an urgent problem to be solved in the scientific community. Although many researchers have spent years of unremitting exploration and energy on research, they have not been able to fully clarify the mystery. Fortunately, network pharmacology, a new discipline, has emerged. It innovatively constructs a multi-dimensional association network of &quot;disease-gene-target-drug&quot;, and organically integrates the originally scattered and seemingly disordered research elements. With this network model, network pharmacology not only strongly promoted the breakthrough progress of the research of traditional Chinese medicine compound, provided new ideas and methods for the research and development of new drugs, but also played a key role in the evaluation of drug safety, and contributed an important force to the modern pharmaceutical research.

**[Key words]** network pharmacology; compound Chinese medicine; pharmaceutical composition; mechanism of action

中药复方的独特之处在于成分繁多、作用靶点广泛且作用路径错综复杂,这使得它在治疗多种疾病时能够展现出多样化的疗效和卓越的效果。然而,正是由于其内在的复杂性,要深入探究其为何如此有效,成为了一个既引人入胜又极具挑战性的课题。面对这一难题,网络药理学的出现为研究中药复方提供了全新的视角和工具。这一新兴学科巧妙地融合了系统生物学、生物信息学以及计算机科学等多个领域的先进理论和技术,构建出高度复杂且精细的生物网络模型。这些模型不仅能够直观地展示中药复方中各种成分之间的相互作用关系,还能深入剖

析它们如何通过多靶点、多途径的协同作用,实现对疾病的有效治疗。基于网络药理学视域研究中药复方多成分作用机制,一方面不再局限于传统的单一成分或单一靶点的分析思路,能够全面、系统地把握其整体作用规律。另一方面,为中药复方的临床应用提供了更加科学合理的理论依据,也为新药研发和安全性评估开辟了新的思路。未来,随着网络药理学的不断发展和完善,相信中药复方多成分作用机制会被进一步揭示,其在疾病治疗中的潜力和价值也将得到更加充分的发挥。

## 1 网络药理学概述

网络药理学,以其敏锐的洞察力和深邃的逻辑分析,将药物、靶点、疾病等生物分子与错综复杂的网络体系紧密相连,剖析并揭示它们之间错综复杂的关联。这一学科所运用的技术与方法丰富多样,包括靶点预测、药物分子高效筛选、以及详尽的药物代谢途径分析等。通过构建详尽且动态的药物-靶点-疾病网络模型,网络药理学能够以全局的视角,系统地审视药物在生物体内的作用机制与路径。让相关研究者能够深入理解药物如何在分子层面与靶点结合,进而影响疾病进程,还为药物研发的全过程提供了坚实的科学基础与指导。从候选药物的初步筛选到临床前评估,再到后续治疗策略的优化与调整,网络药理学都发挥着不可或缺的作用。因此,网络药理学的兴起不仅推动了生物医学研究的深入发展,也为药物创新与治疗策略的革命性变革带来新的助力。它让研究者更加接近精准医疗,即根据患者的个体差异与疾病特征,量身定制最为有效的治疗方案,从而实现治疗效果的最大化与副作用的最小化。

## 2 网络药理学在中药复方研究中的应用

### 2.1 活性成分的收集与筛选

中药复方的疗效根植于其内含的丰富且复杂的活性成分体系之中。网络药理学的引入,为这一领域的深入研究提供了前所未有的视角与工具。其首要任务,是全面而系统地收集并精细筛选中药复方中的活性成分。通过深度挖掘如TCMSP、BATMAN-TCM等权威数据库,获取详尽的化学成分信息,构建起庞大的数据基础。进一步地,结合药代动力学等体内过程分析手段,能够精准识别出那些真正在生物体内发挥药效的关键成分,为后续深入解析其作用机制奠定基础。在探索中药复方配伍及方证相应的领域中,谭晓梅等<sup>[1]</sup>学者率先采用了基于功效成分体内过程的策略,深入剖析了中药复方中活性成分的代谢路径与动态变化,还揭示了不同成分之间微妙的相互作用关系,为优化复方配伍、提升治疗效果提供了宝贵的科学依据。

### 2.2 作用机制的深度解析

网络药理学能够系统地解析中药复方治疗疾病的作用机制。通过构建药物-靶点-疾病网络,能够清晰地看到中药复方中多成分与多靶点之间的复杂交织关系,从而揭示其多途径、多靶点治疗疾病的独特优势。何海等学者<sup>[2]</sup>在研究中药复方抗上呼吸道感染的过程中,成功运用了数据挖掘及网络药理学方法,深入分析了复方中各成分与上呼吸道感染相关靶点的相互作用关系,为揭示其多靶点治疗机制提供了有力证据。谢成志等学者<sup>[3]</sup>也强调了网络药理学在中药复方功效研究中的核心地位,指出其对于揭示复方治疗疾病具体机制和路径的不可替代作用。

### 2.3 网络药理学在中药复方研究中的成果

以益气健脾中药复方治疗糖尿病胃轻瘫为例,郑玲彤等学者<sup>[4]</sup>运用网络药理学方法构建了详尽的药物-靶点-疾病网络,并通过基因富集分析和KEGG通路富集分析,深入揭示了复方中多成分与糖尿病胃轻瘫相关靶点的相互作用关系及其可能的治疗机制。这一研究成果不仅为糖尿病胃轻瘫的治疗提供了新的思路和方法,也再次证明了网络药理学在中药复方研究中的巨

大潜力和价值。秦少杰等学者<sup>[5]</sup>在探究中药复方对马蹄叶抗炎作用机制的研究中,也成功运用了网络药理学和分子对接方法,为复方的优化和临床应用提供了有力支持。上述研究充分展示了网络药理学在推动中药复方现代化、科学化进程中的重要作用。

## 3 网络药理学在中药新药研发中的应用

### 3.1 精准筛选,发掘新药优质候选物

现阶段,网络药理学作为一门融合了系统生物学、计算机科学、生物信息学以及药理学等多学科的前沿领域学科,近年来于中药新药研发方面展现出一定的潜力与价值。为深入理解中药复方复杂作用机制提供了崭新视角,为新药发现、优化以及安全性评价给予了强有力的技术支撑。

中药复方具有成分繁多、作用靶点多样的特点,传统研究方法难以完整解析其奥秘。网络药理学的诞生犹如一架高倍放大镜,能够从海量中药成分中精准定位具有潜在药效的候选物。通过构建药物-靶点-疾病网络模型,科研人员可系统剖析中药复方各成分与目标疾病间的相互作用关系,进而锁定关键活性成分及其作用靶点。例如在对肝硬化腹水中中药复方的研究中,可以运用网络药理学方法从众多专利文献筛选出有治疗潜力的复方,并借助模型揭示复方成分与疾病靶点的复杂关联,为新药研发提供了珍贵的候选物及作用机制线索。

### 3.2 预测机制,明晰药物作用原理

网络药理学不仅助力筛选新药候选物,还能进一步预测药物的作用机制与代谢途径,这对优化药物设计、提升疗效、降低副作用意义重大。通过整合生物信息学数据,科研人员可构建更为精密的药物作用网络模型,深度洞察药物在生物体内的作用方式以及可能产生的副作用。以中药复方CB001的低剂量辐射防护研究为例,可以结合网络药理学与实验验证手段,阐明CB001的作用机制,预测其代谢途径,为中药在辐射防护领域的应用提供了科学依据。

### 3.3 加速研发进程,实现高效低成本

传统新药研发流程耗时久、成本高且成功率低。网络药理学的应用有助于推进新药研发进程,通过提升药物筛选精准度与效率,优化药物设计与评价流程,显著加快新药诞生速度。借助网络模型构建与分析,研究人员可在早期筛选出有潜力的候选物并预测其药效与安全性,从而降低后期临床试验失败率,削减研发成本。此外,网络药理学促进了中药复方与现代医学的融合,还为中药国际化与现代化开辟了新路径与方法。

## 4 网络药理学在中药安全性评价中的应用

### 4.1 深度剖析,保障中药安全性

中药复方安全性问题始终是中医药领域的关键议题。传统安全性评价方法多依赖动物实验与临床试验,存在耗时长、成本高且难以全面评估中药复方潜在风险的弊端。网络药理学的应用能够深入探究中药复方各成分间的相互作用及其与生物体内关键靶点的关联,从而预测复方可能引发的副作用与毒性反应。

### 4.2 预测副作用,实现提前防范

在中药安全性评价中,网络药理学的另一重要应用是预测潜在副作用与毒性。通过整合生物信息学数据与药理学知识,科研人员可构建涵盖药物、靶点、通路及疾病等多层面的网络模型,用以评估中药复方在体内可能产生的副作用与毒性。例如在荨麻疹中药复方研究中,研究者利用网络药理学方法揭示复方关键活性成分与荨麻疹病理生理过程的复杂联系,同时预测复方可能引发的副作用与毒性反应,为中药复方临床应用提供了科学依据与安全保障。

#### 4.3 推动创新,促使评价更趋完善

网络药理学的应用不仅提高了中药复方安全性评价的准确性与效率,还推动了评价方法的创新。传统安全性评价方法多聚焦于单一成分或简单复方评估,而网络药理学能够处理更为复杂的中药复方体系,揭示其中各成分相互作用及潜在风险。这种全面的评价方法为中药复方安全性评估提供了全新思路与工具。随着网络药理学技术的持续发展与完善,有望在未来中药新药研发领域发挥更为关键的作用。

#### 5 未来发展前景展望

尽管网络药理学在中药复方研究领域已经取得了显著的进展,为传统中医药的现代化转型与安全性评估开辟了新途径,然而,这一领域仍面临着诸多挑战,需要持续的努力与探索。具体而言,中药复方成分的复杂性构成了首要难题,其内部包含的众多活性成分之间的相互作用机制尚未完全阐明,因此,加强活性成分的全面收集与高效筛选尤为重要。不仅要求研究者们要深化对中药化学成分的认识,还需借助先进的分析技术,提高成分分离与鉴定效率。

此外,网络药理学方法的准确性和可靠性也是亟待提升的关键环节。当前,虽然该方法能够基于大数据和复杂网络理论预测药物作用及潜在风险,但其预测模型的构建、参数的设定以及算法的优化仍需进一步精细化,以确保预测结果的精准度与可信赖度。

值得注意的是,实验验证作为连接理论预测与实际应用的重要环节,其作用不言而喻。由于中药复方作用机制的复杂性,实验设计往往面临诸多挑战,如实验条件的控制、动物模型的选择以及人体临床伦理与可行性等。因此,加强实验验证工作的系统性与科学性,建立更加完善的验证体系,也是推动网络药理学在中药复方研究中应用的关键。

展望未来,中药复方研究还需在多个方面实现突破。一是持续深化对中药复方成分的深入研究,揭示更多未知活性成分及其作用机制;二是不断优化网络药理学方法,提升其预测精度与适用范围;三是强化实验验证环节,确保研究成果的可靠性与实用性;四是积极推动中药复方研究的国际化进程,加强与国际同行的交流与合作,共同推动中医药在全球范围内的传播与发展。基于这些努力,有望为中药复方的安全和有效应用提供更加坚实的基础。

#### 6 总结

综上所述,网络药理学优势在于能够更为清晰地洞察中药复方中各类成分与靶点之间的关联,进而深入理解其治疗疾病的内在逻辑。网络药理学在中药新药研发的过程中亦扮演着至关重要的角色,不仅有利于加速新药发现的速度,还能够在安全性评价方面提供了有力支撑,为中医药的现代化进程奠定基础。然而,亦需正视其尚存的挑战与不足,进一步提升网络药理学的应用价值,为网络药理学的持续进步与中药复方研究的发展贡献力量。

#### [参考文献]

- [1]谭晓梅,刘昌顺,汤庆发,等.基于功效成分体内过程的中药复方配伍及方证相应研究[J].世界科学技术-中医药现代化,2021,23(3):655-661.
- [2]何海,张小荣,赵沙沙,等.基于数据挖掘及网络药理学方法探讨中药复方抗上呼吸道感染的用药规律及作用机制[J].安徽农业科学,2022,50(3):178-185,212.
- [3]谢成志,任建勋.中药及复方功效的网络药理学研究与思考[J].中国实验方剂学杂志,2024,30(1):198-207.
- [4]郑玲彤,崔晶晶,付晓.基于网络药理学探讨益气健脾中药复方治疗糖尿病胃轻瘫的作用机制[J].中国临床药理学杂志,2021,37(17):2335-2337,2346.
- [5]秦少杰,王超,巩志国,等.基于网络药理学和分子对接探究中药复方对马蹄叶炎的作用机制[J].内蒙古农业大学学报(自然科学版),2024,45(1):1-11.

#### 作者简介:

杨美(1983-),女,汉族,云南昆明人,中药学专科,研究方向:中医药理。