

药字信息学

YAOXUE XINXIXUE

主编 胡晋红
储文功



第二军医大学出版社
Second Military Medical University Press

药 学 信 息 学

主编 胡晋红 储文功



第二军医大学出版社
Second Military Medical University Press

内 容 简 介

本书内容涵盖了药学信息学、生物信息学及化学信息学概论、药学信息源的利用、药学信息处理技术与方法、药学信息研究的方法学、药学信息服务实践质量控制及药学信息发展与全程化药学服务等,旨在为研究生在学习阶段了解药学信息学新的进展及其在药学领域的应用现状,提高对药学信息学的认知能力及创新思维,更好地推进药学信息学的发展,加强药学信息化技术队伍建设,培养复合型药学专业人才,实现药学学科快速发展。

本书适合药学专业的师生及相关医护人员学习和借鉴。

图书在版编目(CIP)数据

药学信息学/胡晋红,储文功主编. —上海:第二军医大学出版社,2015. 1

ISBN 978-7-5481-0962-4

I. ①药… II. ①胡…②储… III. ①药理学—信息学—进展 IV. ①R9-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 245798 号

出 版 人 陆小新
责任编辑 许 悦

药学信息学

胡晋红 储文功 主编

第二军医大学出版社出版发行

<http://www.smmup.cn>

上海市翔殷路 800 号 邮政编码: 200433

发行科电话/传真: 021-65493093

全国各地新华书店经销

江苏天源印刷厂印刷

开本: 787×1092 1/16 印张: 12.75 字数: 281 千字

2015 年 1 月第 1 版 2015 年 1 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-5481-0962-4/R·1705

定价: 38.00 元

编 委 会

主 审 陈盛新

主 编 胡晋红 储文功

副主编 舒丽芯 杨樟卫

编 委 (按姓氏音序排列)

陈盛新 储文功 胡晋红

盛春泉 舒丽芯 姚春芳

杨樟卫 张 钧 郑灿辉

前 言

药学信息学是应用信息科学的原理和方法,研究药学信息的运动状态和规律的科学,是药学科学和信息科学的交叉学科,是随着药学科学和信息科学迅猛发展而诞生的新兴学科,它研究各种药学信息系统中的信息过程——信息的产生、采集、加工、表达、存储、转换、传播、检索和利用,及其一般规律。目前,药学专业领域已广泛开展药学信息学研究工作。为适应药学信息学教学和科研工作的需要,系统地阐述药学信息学的基本理论和方法,我们组织有关专家编写了这本《药学信息学》。

本书共分为9章。第一至三章主要介绍药学信息学基础知识。由于生物信息学和化学信息学在药物研发领域的广泛应用,已成为药学信息学不可缺少的一部分,因此,第二、三章专门介绍这两部分内容。第四至六章介绍药学信息源、信息处理技术和药学信息的研究方法,意在使读者了解和掌握药学信息学的研究方法和技术。第七至九章主要介绍药学信息学的应用,包括药学信息技术在医院药学中的应用、药学信息服务质量控制、科技期刊的评价及医药学论文的撰写。

本书可作为教材供临床药学、社会与管理药学两个专业本科生和研究生使用,也可作为药品监督管理部门、药品生产和经营部门,尤其是医院药学部门开展药学信息学研究的参考书。本书编写在药学信息学研究方法介绍和应用方面偏重临床,如信息处理技术主要偏重于对临床药学信息的处理,因此,本书对医院药师开展临床药学工作尤其具有指导和借鉴意义。

本书各章作者都是相关研究领域的专家,每一章都凝聚了他们的研究思想、研究心得和研究成果。他们在百忙之中精心组织素材,字斟句酌地编写,付出了大量心血。在此,我们对全体编委的无私奉献,深表谢意!

在本书的编写过程中,尽管我们努力跟踪学科的新知识、新技术和新方法,并尽量把它们纳入到本书中,但难免因学识水平和能力的限制,书中一定还存在许多不足之处,敬请读者不吝赐教。

胡晋红 储文功

2014年10月23日

目 录

第一章 绪论	(1)
第一节 信息概述	(1)
一、信息的含义	(1)
二、信息、情报和知识	(2)
三、信息的分类	(2)
第二节 药学信息学的定义和特点	(4)
一、定义	(4)
二、特点	(4)
第三节 药学信息学的研究对象和内容	(6)
一、技术信息学	(6)
二、药学服务信息学	(8)
第二章 生物信息学概论	(11)
第一节 什么是生物信息学	(11)
一、生物信息学的定义	(11)
二、生物信息学产生的背景和发展历史	(12)
第二节 生物信息学的主要研究内容和方法	(15)
一、生物学数据库的建立和搜寻	(15)
二、序列比较与相似序列搜索	(16)
三、基因组结构注释	(17)
四、蛋白质结构和功能的预测	(17)
五、基因组数据的分析	(18)
六、比较基因组和系统发生遗传学分析	(18)
七、功能基因组和蛋白质组学数据的分析	(19)
八、信号传导、代谢和基因调节途径的构建与描述	(19)
第三节 生物数据库	(19)
一、基因和基因组数据库	(20)
二、蛋白质数据库	(23)
三、结构数据库和功能数据库	(24)
四、文献数据库	(25)

第三章 化学信息学概论	(26)
第一节 定义和研究内容	(26)
一、化学信息学定义	(26)
二、化学信息学的研究内容	(26)
三、化学信息学的应用	(31)
第二节 计算机辅助药物设计	(33)
一、计算机辅助药物设计概述	(33)
二、常用的计算机辅助药物设计技术	(34)
第四章 药学信息源的利用	(48)
第一节 常用文摘数据库	(48)
一、中国文摘数据库	(48)
二、国际文摘数据库	(50)
第二节 常用全文数据库	(54)
一、中国全文数据库	(54)
二、国际全文数据库	(56)
三、学术不端文献检测系统	(58)
第三节 常用特种文献	(59)
一、专利数据库	(59)
二、药典	(61)
第五章 药学信息处理技术与方法	(63)
第一节 信息处理技术的概念和分类	(63)
一、数据库技术	(63)
二、信息系统技术	(64)
三、搜索引擎技术	(64)
四、自动化信息技术	(64)
第二节 信息及其处理技术在医院药学领域中的作用	(65)
第三节 医院药学信息处理技术的主要方法	(65)
一、药品基础信息的处理	(65)
二、药品供应管理信息处理	(66)
三、辅助决策信息系统	(68)
四、自动化信息技术	(69)
五、药学信息处理应用过程中可能面临的问题	(70)
第六章 药学信息研究的方法学	(72)
第一节 文献计量学方法	(72)
一、文献计量学的概念	(72)
二、文献计量原理	(73)

三、文献计量法	(80)
第二节 引文分析法	(81)
一、引文分析法的特点	(81)
二、引文分析的基本测度概念	(82)
三、引文分析的应用	(83)
四、引文分析的局限性	(83)
第三节 药学信息调研法	(83)
一、药学信息调研工作的特点	(84)
二、药学信息调研的过程	(85)
三、药学信息调研的方法	(87)
四、药学信息编码	(90)
第四节 药学信息分析法	(92)
一、逻辑分析	(92)
二、流程分析	(92)
三、排序分析	(93)
四、相关分析	(95)
五、聚类分析	(96)
 第七章 药学信息技术在医院药学中的应用	(98)
第一节 药学信息技术的发展	(98)
一、药学信息技术的产生	(98)
二、药学信息技术的概念内涵	(99)
三、药学信息技术的发展	(99)
第二节 药学信息技术在医院药学中的重要性	(100)
一、药学信息技术是推动医院药学服务模式转变的助推剂	(101)
二、药学信息技术是提高医院药学服务质量的增强剂	(102)
三、药学信息技术是提升医院药学管理的增效剂	(103)
第三节 药学信息技术在医院药学中的应用	(107)
一、传感技术在医院药学中的应用	(107)
二、通信技术在医院药学中的应用	(113)
三、计算机技术在医院药学中的应用	(117)
四、自动化设备和技术应用于医院药学	(125)
第四节 药学信息技术在医院药学中应用概况及前景	(130)
一、国家卫生信息化整体提升将促进药学信息技术在医院药学中应用	(130)
二、医院药学信息系统的不断完善将提高药学服务质量和辅助决策作用	(131)
三、医院药学信息化技术的发展将推进医院药学调剂自动化时代的到来	(132)

第八章 药学信息服务质量控制	(134)
第一节 药学信息服务概述	(134)
一、医院药学信息的有关概念	(134)
二、医院药学信息服务的起源与现状	(134)
三、医院药学信息服务的意义、目的和特点	(135)
第二节 医院药学信息源的评价	(139)
一、医院药学信息源	(139)
二、对药学文献的评价	(140)
三、系统性综述	(142)
四、对医院内部产生的原始药学信息的利用	(150)
第三节 医院药学信息服务的组织和实施	(150)
一、医院药学信息服务机构和人员	(150)
二、医院药学信息服务的实施	(152)
第四节 药学信息服务质量管理	(156)
一、文件管理体系	(156)
二、药学信息服务的质量评价	(157)
第九章 科技期刊的评价及医药学论文的撰写	(159)
第一节 我国科技期刊的现状 & 期刊评价体系	(159)
一、科技期刊评价指标的理论意义和计算方法	(159)
二、我国科技期刊的现状	(159)
三、CNKI-JCR2013 编制方法及其特点	(160)
四、国内评价科技期刊的 3 个主要单位及其评价工具	(161)
第二节 医药学论文的特点	(169)
一、科学性	(169)
二、规范性	(171)
三、可读性	(171)
四、伦理性	(171)
第三节 如何提高医药学论文撰写水平	(172)
一、题名	(172)
二、作者署名	(173)
三、摘要	(173)
四、关键词或主题词	(174)
五、正文	(174)
第四节 医药学论文英文摘要的撰写	(183)
一、英文摘要的重要性	(183)
二、英文摘要的撰写	(183)
彩图	(189)

第一章 绪 论

随着科学技术的迅速发展,知识总量大大增加,更新周期越来越短。当今世界上数量最多、增长最快的是信息。据联合国科教文组织(UNESCO)报道,信息正以每分钟1亿个单元的速度在增长。西方学者利用信息指数(information index)来衡量一个国家的发达程度。因此,信息被视为继材料、能源之后的人类第三大资源。信息化已成为人类知识结构组成的必然趋势,捕捉和利用信息已成为新世纪人才的基本素质和技能。

第一节 信息概述

一、信息的含义

“信息”一词在我国是一个古老而又年轻的名词,其在唐宋古代诗词中就已经出现,如唐朝的李中在《暮春怀故人》中就有“梦断美人沉信息,目穿长路倚楼台”的诗句。宋朝的陈亮在《梅花》一诗里写道:“欲传春信息,不怕雪埋藏。”这里的信息指的是迹象、征兆、消息的意思,这在自然界中可说是比比皆是,如树木的年轮反映了其生长的年龄与发展的信息,潮涨潮落表现了月亮围绕地球运转的信息,动物的异常表现往往传递着地理气候变化的信息。

在汉字中,对“信息”一词按望字生义去解释,所谓“信”就是信号(signal),所谓“息”就是消息(news),因此,信息就是利用信号传递消息。

“信息”一词被引入科学领域,并作为科学概念来对待和解释是在现代通信科学产生之后,特别是在信息论产生之后,信息的概念几乎进入到所有的学科,因而,信息这一概念日益引起众多科学人士的关注,并站在各自的学科角度对信息进行了多方面的探讨和解释。

1) 认为信息是客观世界中各种事物变化与特征的最新反映,是客观事物状态经过传递后的再现。

2) 认为信息是自然界或社会中各事物间的某种自然规律和人为约定建立联系的一种形式,是被表现出来的事物增添了确定性或被取消的不确定性。

3) 认为信息乃是经过传递并为接收者所理解,对解决面临任务或实现特定目的、有用的、预先不知的新报告、新知识。

4) 认为信息是物质存在的一种形式,它是以物质的属性和运动状态为内容,并且总是借助于一定的物质载体传输和储存的。

综上所述,信息可定义为客观世界中各种事物的变化和特征的反映,以及经过传递

后的再现。或者说,信息是通过一定的物质载体形式反映出来,表征客观事物变化和特征的实质内容。

从上述的信息定义中可以归纳出3点:①信息是客观的,不是主观的;②信息的形式是主观的,是一事物对另一事物的反映,而不是事物本身;③信息是通过传递后的再现。文字、语言、电波、影视和图像都是信息的载体。

二、信息、情报和知识

信息(information)、情报(intelligence)和知识(knowledge)既有联系又有区别。有人从化学的角度来比拟,把信息看作是原子,情报看作是原子基团,知识看作是分子。人们重视知识,但是,没有信息就得不到知识。

从信息学的角度来看,客观事物无时无刻不在发出信息,人类接收、选择、处理这些信息,获得了对事物本质及其运动规律的认识,信息就此转化为知识。也就是说,信息是知识的原料,知识是信息加工后的产品。因此,人类不断地接受客观物质世界发出的信息,经过思维加工成为系统化的知识,人类又用获取的知识创造新信息,人类就在这种感知信息,把信息加工组合知识的过程中不断地认识世界和改造世界。如此反复循环,信息越来越纷繁,知识越来越丰富,世界越来越精彩。

情报是有目的、有时效、经过传递特定的情况报道或资料整理的结果,它是一种特定的知识性信息。并非所有的知识、信息都能成为情报,只有那些经整理加工并为用户所需要的特定的知识或信息,才是情报。钱学森称它是被激活了、活化了的的知识。情报有三大要素:①知识性(knowledge),描述事实,阐明道理,论证观点。②传递性(transmission),情报是传递着的知识,知识要转化为情报,必须经过传递,并为用户接受和利用,使静态的知识变为动态的情报。有情不报就不叫情报,因此,传递是构成情报的必不可少的要素。③效用性(usefulness),没有效用的知识,不是情报,效用性也是衡量情报服务工作质量的重要标识。效用性实际上与用户的要求密切相关,同样的情报,对某用户可能有效,具有情报意义,而对另一些用户可能无效,不具有情报意义。

综上所述,可以知道信息、情报和知识三者的关系。信息是知识的原料,知识是信息的产物。情报是为了解决某一个特定问题去搜寻所需要的知识,是进入人类社会交流为用户接受和利用的知识,实际上是知识的一部分,是被传递的知识和事实。所以信息的范围比情报广泛得多,而情报的知识性较信息的信息性强得多。

三、信息的分类

按信息的内容、来源、产生过程、储存形式、传递范围、载体形式、反映面、时态、运动形态等等,有十几种分类。本节着重按信息的内容、来源和产生过程阐述其分类。

(一) 按信息的内容划分

1. 自然信息 又称非人类信息。是指人类以外的宇宙天体,自然界万事万物客观存在或随机发生的各种事物、事件的信息,是物质运动和生物生存活动的产物。它随着事物的存在而存在,随着事物的变化而变化,如生物信息、自然信息(物质物理信息)等,

其信息载体形式纯属自然存在的物质。但人们可以通过对自然信息的收集、整理、分析和利用去认识世界和改造世界。

2. 社会信息 又称人类信息。是指人类从事各种社会活动所产生和彼此交流的各种信息,也是人类社会维系生存、生产和发展的条件,是人类从事一切活动的基础。按照其内容不同,可细分为政治信息、经济信息、文化信息、军事信息、科技信息、教育信息、社会生活信息等。其信息的载体是语言、文字、图像等,较之自然信息更为丰富多彩。

(二) 按信息的来源划分

按信息的来源划分(又称按人对信息的感知方式划分)如下:

1. 直接信息 是指人通过直接感知客观事物所获得的信息。这种信息是人的眼、鼻、嘴、手、耳、皮肤等感觉器官直接接触客观事物,进而对客观事物做出反映而生成的信息。我国古代神农尝百草就属于直接信息。

2. 间接信息 是指人类对事物的存在状态、运动形式和规律的总结而产生的信息。它包括经过加工整理后的数据、资料、理论、观点等,是人们通过历史资料查阅、各种信息传播媒介传递,以及对未来事物发展趋势预测所获得的信息。

(三) 按信息的产生过程划分

1. 原始信息 指未经加工的第一次发出的信息,如科学发现、科学发明中首次揭示事物的状态或运动规律的信息及科学试验、政治、经济、文化、军事活动中的原始数据。原始信息是零星的、分散的、无规则的、无序的,需要对其进行加工处理成二次信息、三次信息(又称再次信息),才能进行存储、检索、传递和应用。

2. 再生信息 是以原始信息(一次信息)为基础,经过加工处理而产生的信息(二次信息、三次信息)。这种信息已使无序的原始信息变成了有序、有规律的信息,便于人们查找和使用,具有较高的使用价值。

(四) 以信息资源的获取难易程度划分

1. 白色信息 是指已公开发行、较易获得的文献信息,当然也包括电视、广播、其他媒体公开的信息。

2. 黑色信息 是与白色信息相对而言的,是指处于保密状态、极难获取的文献信息,如未解密的政府文件和技术档案等。但随着时间的变迁、情况的变更,由保密转为解密,由秘密转为公开,这时黑色信息就成了白色信息。

3. 灰色信息 是指人们既不易找到,又不是不可能得到的文献称为灰色文献资料,如会议资料和未公开的学位论文等。

(五) 按信息资料的载体形式划分

按信息资料的载体形式划分可分为纸质型信息资源、缩影型信息资源、视听型信息资源和电子型信息资源等。

(六) 按信息资源的内容形式划分

按信息资源的内容形式划分可划分为如图书、期刊、专利文献、标准文献、科技报告、会议文献、学位论文、产品资料、科技档案等。

上述的第五、六类的信息分类,在本书的其他章节中有详细介绍,不在此赘述。

第二节 药学信息学的定义和特点

一、定义

在对药学信息学(pharmacoinformatics)下定义之前,我们有必要提到“什么是信息学(informatics)”这个问题。1966年,前苏联学者米哈伊诺夫(A. I. Mikhailov)在《信息学基础》一书中定义信息学为研究科学信息的结构和特点,以及科学交流内在规律的学科。20世纪80年代末,国际信息处理联合会把计算机科学更名为信息科学,提到信息科学的意义是研究信息源信息的产生、获取、识别、转换、组织、存储、处理、检索、表达、评价和信息的提供等有关的理论和方法论。简言之,信息学是研究信息的运动状态和运动规律的科学。根据信息学的定义,笔者认为药学信息学应定义为:应用信息科学的原理和方法,研究药学信息的运动状态和规律的科学,它是药学科学和信息科学的交叉学科。随着学科信息化建设的发展,关于药学信息学的研究日益引起人们的重视。尽管作为一门新兴的学科,其地位尚未确定,许多未决因素尚待研究,但在讨论药学信息学的定义中,有几种对其定义不同的理解和解释应当提出,避免对其含义出现错误的诠释。

1. 把药学信息学和药学情报学等同起来 认为两者是一回事。因为英文中的信息和情报是同一个词“information”。因此,会误以为:为了适应国际潮流的发展,而把“情报”改为“信息”,同时也可避免国外、境外的误解,把“情报”误解为“谍报”(espionage)。无可讳言,在1992年,国家科技委决定,将“科技情报”改称为“科技信息”,将“科技情报所”改为“信息研究所”也是其中的原因之一。但决不能将信息和情报等同起来。至于信息和情报的关系在上一节中已有阐述,不在此重复。

2. 把药学信息学与药学信息检索等同起来 药学信息检索只是药学信息学的一部分,其着重于信息源(source),特别是文献资料源的研究,以及检索工具的应用。一方面,药学信息学研究内容要宽广得多,丰富得多。由于目前我国药学信息学处于学科发展的初期阶段,有关学科的理论、方法尚处于潜科学时期;另一方面,在医药院校从事药学信息(严格地说是检索)教学的人员,又主要来自从事图书管理的科技人员,其所编的教材、所讲的课程也都是“药学信息检索”的内容。这从一个侧面可以看出,药学信息学在理论、方法和应用,以及研究人才的结构方面都存在着亟待提升的空间。

3. 把药学信息学理解为计算机在药学中的应用 这种理解是片面的、狭义的。药学信息学首先是运用信息学的理论,以计算机为主要工具,对药学信息流全过程中的信息运动规律和应用方法进行研究,它是信息科学与药学相结合的交叉学科,绝不是单纯计算机在药学中应用的问题。

二、特点

在科技领域,信息“爆炸”主要集中于科技文献系统。作为科技领域大家族中的一员——医药科技,更是如此。

(一) 数量激增

随着知识经济的到来,知识和智力成了“点石成金”永不枯竭的资源,而信息是知识的原料。由于现代信息技术的应用,信息生产周期越来越短,信息数量增速加快,就以传统信息资源的图书、期刊、专利、特种文献来说,其增长速度已十分可观。现在,全世界不到1分钟出版一本书,每小时有15~20件专利申请,每天有3~5种新期刊问世,每年有1000多万篇科技论文发表,每年有4000个国际会议召开,论文500万篇。据联合国教科文组织(UNESCO)统计,全世界科技文献正以每分钟2000印张的速度增长。世界上现有3000万种不同书籍,每年还增加20万余种。在这浩如烟海的信息中,医药文献在科技文献中占1/4。目前,世界上生物医药期刊已达2万多种,每年发表医药论文近300万篇。除传统的印刷型文献之外,还有缩微型、声像型、机读型、视听型等新的文献载体不断涌现。除此之外,还有不易得到的灰色信息。

(二) 分散交叉

1. 分散 指的是药学信息资源的分布点。在传统印刷型文献信息一统天下的时代,其信息资源的社会分布主要集中于图书馆、信息所、情报中心、档案馆,以及出版社、编辑部、书店和图书发行公司。如今信息总资源社会分布异常分散,就信息服务部门的信息来说,除了来源于出版社、编辑部、书店外,还有计算机硬件和软件公司、数据库开发公司,以及遍布在世界各地的形形色色的服务器。

2. 交叉 指的是药学与其他相关学科的交叉重叠,使药学信息分布范围宽泛和重复。药学除与医学、化学关系密切外,还涉及生物学、生物化学、生理学、生命科学、环境科学、农业、工业以及管理科学、市场营销等学科,甚至考古学。根据布拉德福文献分散定律,某专业方面的重要论文只有1/3出现在本学科期刊上,1/3出现在相关学科期刊上,1/3在无关学科期刊上。这无疑给搜索和利用信息增加了难度。

(三) 悠久深远

我国是世界文明古国,上下五千年的历史源远流长。在公元1~2世纪就有了药物专著《神农本草经》。我国应用中草药防治疾病已有数千年的历史,积累了丰富的实践经验和理论知识,为今后的药学发展奠定了基础。正如毛泽东所说,“中国医药学是一个伟大的宝库,应当努力发掘,加以提高”。在当今人类回归大自然的趋势下,人们越来越重视中草药的研究和开发。根据WHO资料,未来制药业创制的新药中的中药将由目前不到5%,快速增长到29%以上,欧美一些制药公司对中医药信息已不惜重金搜集。由于年代久远,时代变迁,保存的中医药文献典籍中,有些经多次印刷和传抄存在多种版本,还有些中草药信息散见于综合性中医著作之中,这些给医药专家提出了一个重要而艰巨的任务:甄别、整理和发掘中草药信息资源。

(四) 更新加快

信息爆炸也反映在科学技术的更新周期和科技文献的寿命上,18世纪的科学更新周期为80年,19世纪到20世纪已缩短到15年,而最新的科学技术有的只要2~5年就更新了。据统计,科技文献内容的一般寿命为:图书10~20年;科技报告10年;期刊论文5~7年;学位论文5~7年;技术标准5年;新兴学科及高新科技的文献老化更快,只有1~3年,甚至是几个月。

第三节 药学信息学的研究对象和内容

药学信息学是以药学信息为主要研究对象,以药学信息的性质、运动规律和对其利用为研究内容,以计算机和通信网络等为主要技术工具,其目标是提高人类获取和利用药学信息的能力。它研究各种药学信息系统中的信息过程——信息的产生、采集、加工、表达、存储、转换、传播、检索和利用及其一般规律。由于药学科学的多科学性和学科间的交叉性,使得药学信息学研究变得极其广泛、庞杂。如从药学信息流的角度去分析,就包括药品的研究与开发、临床研究、上市使用、监测评价等各个环节,鉴于各个环节所承载的任务不同,其研究的内容也大不相同,也只有这样,才能满足药学专业各领域或药学信息流各节点的需求。因此,也形成了研究的对象与内容各不相同的药学信息学。

根据研究对象和任务的不同,药学信息学可以分为技术信息学和服务信息学。技术信息学以计算机及其相关技术实施对信息的处理,比较典型的是新药的虚拟筛选,就是通过药物合成的信息技术来实现的。服务信息学以信息学的理论及方法,研究药物产品研发、生产、销售、使用及管理过程中产生的信息及其分布、传播和应用规律。

一、技术信息学

技术信息学通过生物信息学、医学信息学、毒理学、流行病学和化学信息学的知识和技能整合了疾病-机制-靶点-配体化合物的全面信息,进行分子的模拟和药物的发现,国外一般称为 Pharmacoinformatics。

技术信息学包括系统生物技术信息学、基因技术信息学、免疫技术信息学、计算毒理学技术信息学、化学反应技术信息学、代谢组技术信息学和中药信息学等。

(一) 系统生物技术信息学

系统生物技术信息学以生物系统的综合研究作为一个单位,同时利用信息技术研究和诠释生物系统的功能。生物系统可以以任意水平——亚细胞、细胞器、细胞、器官、组织或有机体成立。这一研究需要对生物分析和计算生物学工具无缝整合。

(二) 基因技术信息学

基因技术信息学是与生物信息学密切相关的,以各种方法和算法从快速增长的生物序列海量数据库中分析和提取生物相关信息。这个过程产生了一种新的数据,这种数据导致了新的基因序列的产生。基因技术信息学有助于在新药发现过程中大量的靶向选择最优化,基因表述的简化,在细胞核基因水平上解释变异的发生等。基因技术信息学的主要成果是开发和应用一种诠释标准如本体,它提供了领域知识的概念,便于研究人员和计算机之间的交流。

(三) 免疫技术信息学

免疫系统将抗原作为宿主有机体产生合适的反应,抗原包括病毒、细菌、寄生虫、真菌、肿瘤和移植体。免疫技术信息学是通过信息技术研究免疫过程,通过将免疫成分建

模诠释免疫功能。免疫技术信息学直接影响着新药研发的下述领域：鉴定与免疫学疾病相关的新基因、解释药用抗原表达途径与人类疾病之间的关系、预计药物分子的变态反应、个性化医药和药用疫苗研发。

(四) 计算毒理技术信息学

计算毒理技术信息学的任务是应用信息技术和计算机科学预测药物分子的毒性，它需要能预测毒性的计算方法。计算毒理技术信息学的研究为结构活性关系建模(structure activity relationship, SAR)及其规则。典型的毒性预测系统有计算机辅助毒性预测(toxicity prediction by computer assisted technology, TOPKAT)、multicase、compact 等。例如，TOPKAT 用定量结构-毒性关系(quantitative structure toxicity relationship, QSTR)，通过来自于 3 000 个分子片段的像电性质(电荷、电密度、剩余电负性和有效极性)这样的电子拓扑参数、键合参数、形状参数(Kappa 形状指数)和结构参数表述了所建立的模型。基于现有知识的风险预测系统是一种知识系统(deductive estimation of risk from existing knowledge, DEREK)，可预测药物分子的致突变性、致癌性、耐受性、刺激性、过敏性、免疫毒性和神经毒性。现有一个含有基于 QSTR 领域文献报道的毒性载体组成的知识库，即 ONCOLOGIC，这是一个基于知识的专家系统，用于预测化学致癌性。

(五) 化学反应技术信息学

除了化学信息学处理分子的信息外，化学反应信息学在药学信息学中也起了一个举足轻重的作用。化学反应信息学便于药物化学家探讨药物合成反应路线，快速设计和记录全部试验。目前 1.5 亿~2 亿个反应广泛地被收集于各种各样的化学反应数据库(CASReact、ChemReact 和 CrossFire Plus 等)中。化学反应信息学数据库含有下述信息：反应物和产物、原子谱、与反应中心相关的信息、使用的催化剂、反应环境、使用的溶剂、产率、光学纯度及参考文献。化学反应信息学将有助于药物化学家获取反应信息、从化学反应中创造新知识、预测化学反应的过程和结果和设计合成路线。化学反应信息学的分析工具可以完成如下任务：存储和检索化学反应信息、比较和分析反应集合、定义反应类型的范围和限制、建立化学反应性模型、预测化学反应过程、分析反应网络、开发药物合成设计方法。

(六) 代谢组技术信息学

代谢组技术信息学是一个类似于基因组学、转录组学、蛋白质组学等的多“组学”新兴学科。该领域的成长与信息技术密切相关。药物发现代谢组技术信息学对靶向识别、作用机制和药物毒性途径作出了贡献。信息技术进行着代谢物靶向分析、代谢物描述、代谢物指纹建立等等。药物发现代谢组技术信息学包括药物代谢信息学和代谢途径信息学。代谢数据库常常包括与氨基酸、维生素、抗氧化剂等相关的生物流体、细胞和特异性组织的信息。目前，还没有全面的代谢组数据库，但是，不同的机构正在以此为目标而努力。

(七) 中药信息学

中药信息学是以计算机为主要工具，对蕴藏着大量中药学、化学、药理学和生物医学信息的文献资料进行分析、归类和整编。这包括将中药的原植物、化学成分，以及药

理作用和传统中医药经验理论中的药材性味、方剂配伍、适应证和药效等信息进行数字化处理,再整合大量随机的生物实验和色谱、光谱数据,然后根据研究课题的需要采用适当的数据挖掘方法分析这些数据,从而迅速提取隐含的有价值信息,并挖掘出有逻辑性和规律性的知识。这是新的历史条件下中药信息学(traditional Chinese medicine informatics, TCM informatics)的主要研究内容,也是现代中医药研究的重要组成部分。涉及中药化学及药效物质基础研究、中药质量控制研究、中药药效检验与评价研究领域和现代中药优化设计与研发研究。

二、药学服务信息学

药学服务信息学的研究对象是药品从新药产品立项到最终患者使用流程中各环节间的信息流,包括药学信息学、药物研发信息学和药品信息学。

(一) 药学信息学

卫生信息管理系统学会(the Health Information Management Systems Society, HIMSS)定义药学信息学是通过咨询、存储、分析、利用和传送药物治疗信息,处理与药品相关的健康服务系统中的数据和知识的学科。根据研究侧重点不同,国外药学信息学有药房信息学(pharmacy informatics),药学或药物信息学(pharmaceutical informatics)和药物情报学(drug informatics)。

1. 药房信息学 是运用信息学,提高药学技术服务水平的学科。是由传统的注重“药物治疗过程”转变成强调“药物治疗结果”。医院药学服务模式从“物”(药物)转向“人”(患者),是以人为本的新颖的“药学保健(pharmaceutical care)”工作模式,它是保健(health care)服务和科技发展到一定阶段的产物。Pharmacy Informatics 是保健服务的一部分,它不仅仅是单纯提供药品情报(drug information)和医院自动化体系(hospital automation system)中的各项药学服务,更重要的是要在此信息体系中有原创性,也就是说药学信息学的专业人员必须参与药房信息系统的原始的设计,真正意义上的药房信息学的行家应该是药房信息和药房信息系统的研究、设计和执行者。

2. 药学信息学 是卫生信息学(health informatics)的一个分支,与医学信息学(medical informatics)相对应的一门学科。主要应用于药物研发、患者用药记录(patient profiling)、药疗决策支持、零售药房处方和账务管理(prescription management and billing)、药品信息系统(medication information system, MIS)及远程药学(telepharmacy)等。

3. 药物情报学 在日本称之为“医药情报学”。它是药物信息专家(drug information specialist)将传统的药物情报(drug information)和新的信息管理技术相结合的产物。它注重药物信息的收集、评价和积累,运用计算机网络技术和互联网技术,为临床用药提供依据。

概括地说,药房信息学和药学信息学侧重于药物的应用和药学服务管理,适用于药物信息流中使用环节的需要,特别是前者更是为医院药房药学服务所必需。药物情报学则完全是侧重于具体药品信息,是医院药师为临床用药提供药物情报所必备。日本及美国等一些西方国家的医院还专门有药物信息专家。