

SYSTEMS PHARMACOLOGY

*THEORY,
METHODOLOGY AND APPLICATION*

系统药理学 原理、方法及应用

王永华 李 燕 著



大连理工大学出版社
Dalian University of Technology Press

SYSTEMS PHARMACOLOGY

*THEORY,
METHODOLOGY AND APPLICATION*

系统药理学 原理、方法及应用

王永华 李 燕 著



大连理工大学出版社

Dalian University of Technology Press

图书在版编目(CIP)数据

系统药理学：原理、方法及应用 / 王永华，李燕著
— 大连：大连理工大学出版社，2016.9
ISBN 978-7-5685-0330-3

I. ①系… II. ①王… ②李… III. ①药理学 IV.
①R96

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 039097 号

大连理工大学出版社出版

地址：大连市软件园路 80 号 邮政编码：116023

发行：0411-84708842 传真：0411-84701466 邮购：0411-84708943

E-mail：dutp@dutp.cn URL：<http://www.dutp.cn>

大连日升彩色印刷有限公司印刷 大连理工大学出版社发行

幅面尺寸：185mm×260mm 印张：30 字数：693 千字 插页：16
2016 年 4 月第 1 版 2016 年 9 月第 1 次印刷

责任编辑：于建辉

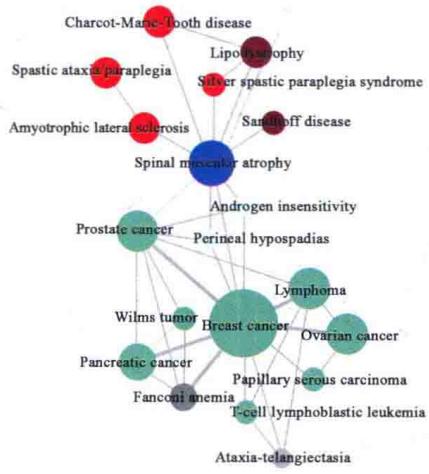
责任校对：许 蕾

封面设计：冀贵收

ISBN 978-7-5685-0330-3

定 价：149.00 元

Human Disease Network (HDN)



DISEASOME

disease phenotype

Ataxia-telangiectasia
Perineal hypospadias
Androgen insensitivity
T-cell lymphoblastic leukemia
Papillary serous carcinoma
Prostate cancer
Ovarian cancer
Lymphoma
Breast cancer
Pancreatic cancer
Wilms tumor
Spinal muscular atrophy
Sandhoff disease
Lipodystrophy
Charcot-Marie-Tooth disease
Amyotrophic lateral sclerosis
Silver spastic paraparesis syndrome
Spastic ataxia paraparesis
Fanconi anemia

disease genome

AR
ATM
BRCA1
BRCA2
CDH1
GARS
HEXB
KRAS
LMNA
MSH2
PIK3CA
TP53
MADIL1
RADS4L
VAPB
CHEK2
BSCL2
ALS2
BRIP1

Disease Gene Network (DGN)

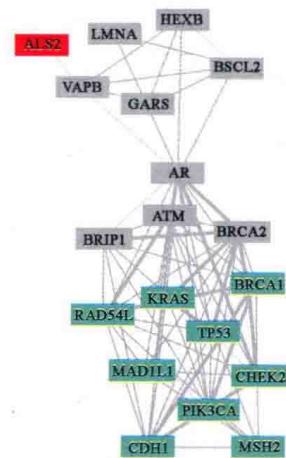
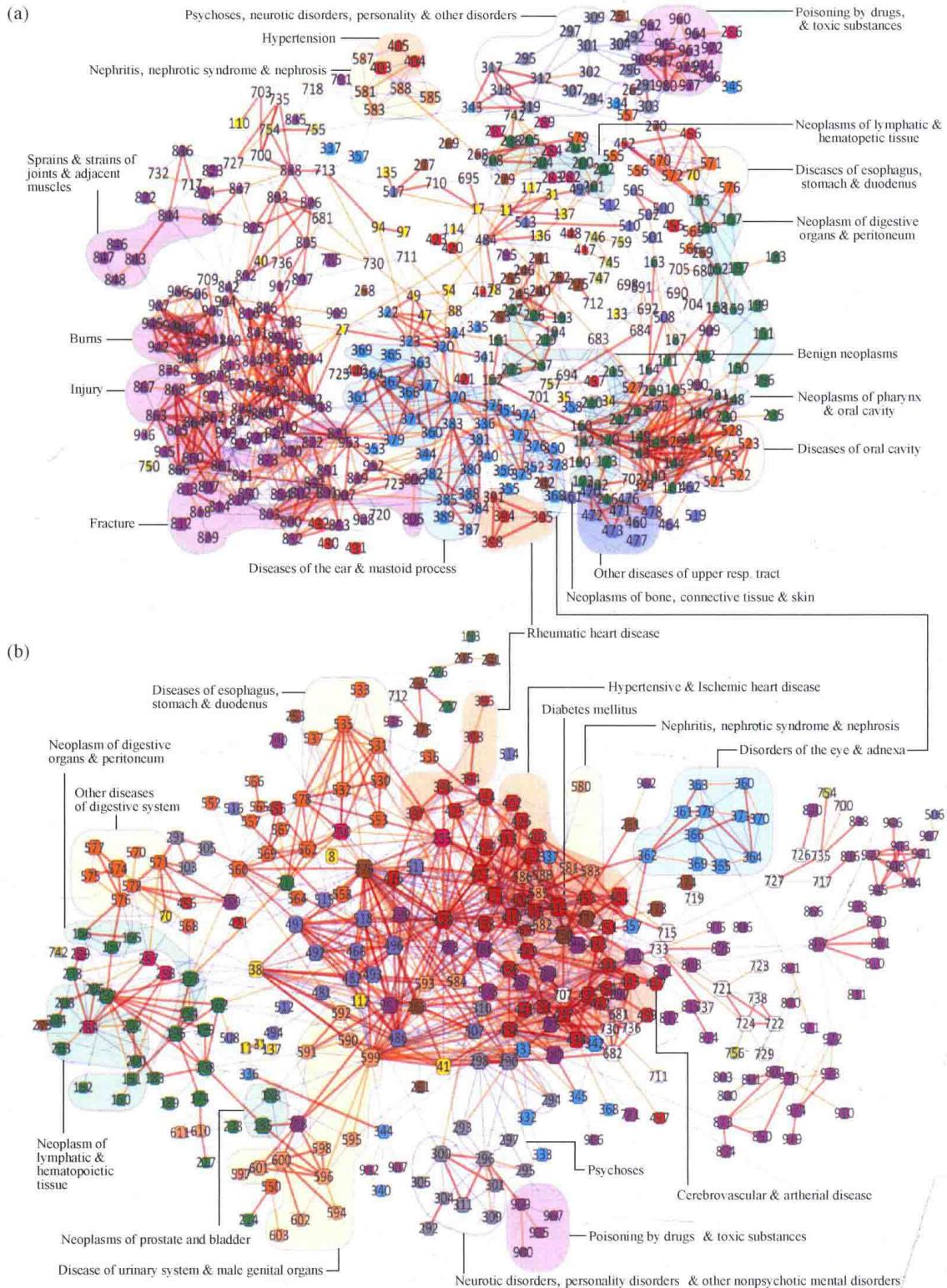


图 7.1 人类疾病网络 (见正文第 85 页)



Node Color
(ICD9 category) (a & b)

- 001-139 Infectious & Parasitic
- 140-239 Neoplasms
- 240-279 Endocrine, Nutritional, Metabolic & Immune
- 280-289 Blood & Blood-Forming Organs
- 290-319 Mental Disorders
- 320-389 Nervous System & Sense Organs

- 390-459 Circulatory System
- 460-519 Respiratory System
- 520-579 Digestive System
- 580-679 Genitourinary System
- 680-709 Skin & Subcutaneous Tissue
- 710-739 Musculoskeletal System & Connective Tissue
- 780-799 Symptoms, Signs & Ill-Defined Conditions

RR Phenotypic Disease Network (a)

Node Size (Prevalence)	Link Weight
1%	RR > 50
0.1%	RR > 30
0.01%	RR > 20

Node Size (Prevalence)	Link Weight
30%	$\phi > 0.2$
1%	$\phi > 0.1$
0.1%	$\phi > 0.06$

图 7.2 伴随疾病网络 (PDN)(见正文第 86 页)

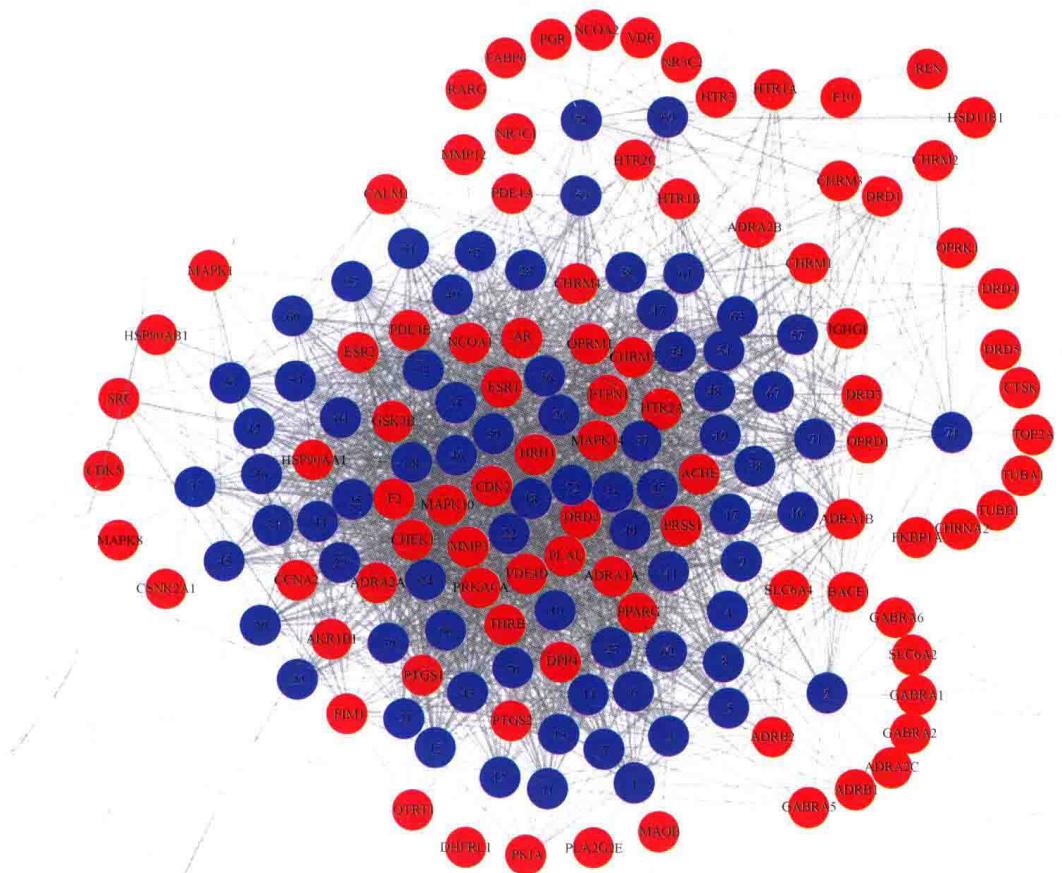


图 10.2 甘草药物 - 靶点相互作用网络图 (见正文第 131 页)
(红色节点代表靶点，蓝色节点代表化合物)

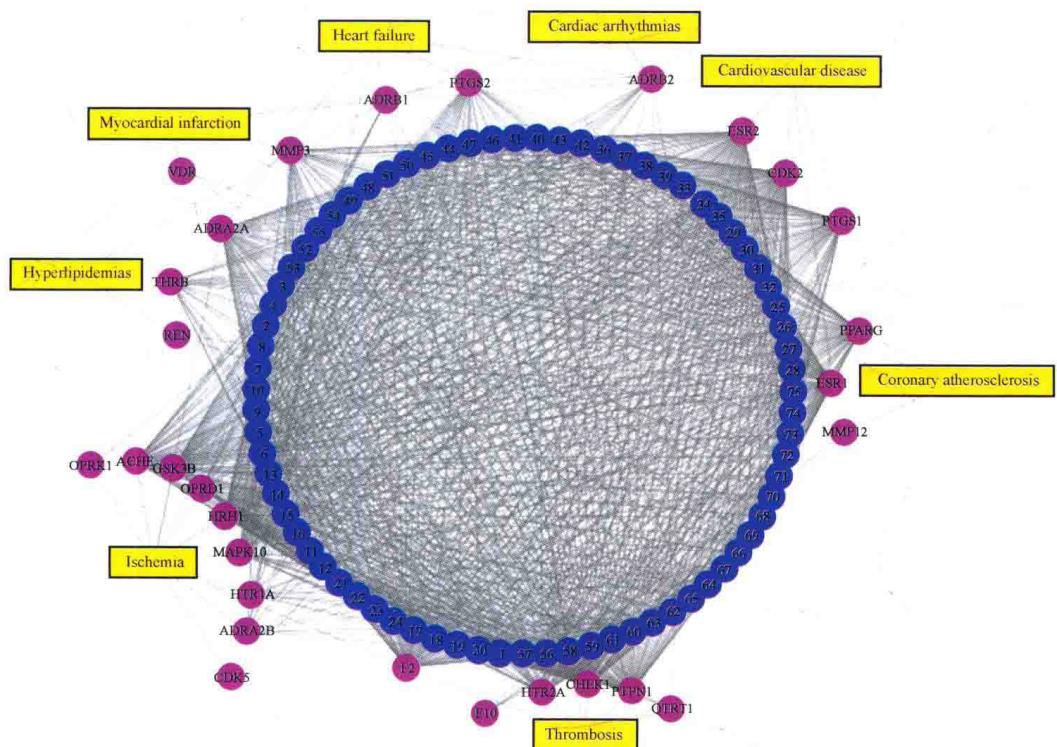


图 10.4 药物 - 靶点 - 心血管疾病网络图 (见正文第 135 页)
(粉色节点代表靶点，蓝色节点代表化合物，黄色方框代表不同的心血管疾病)

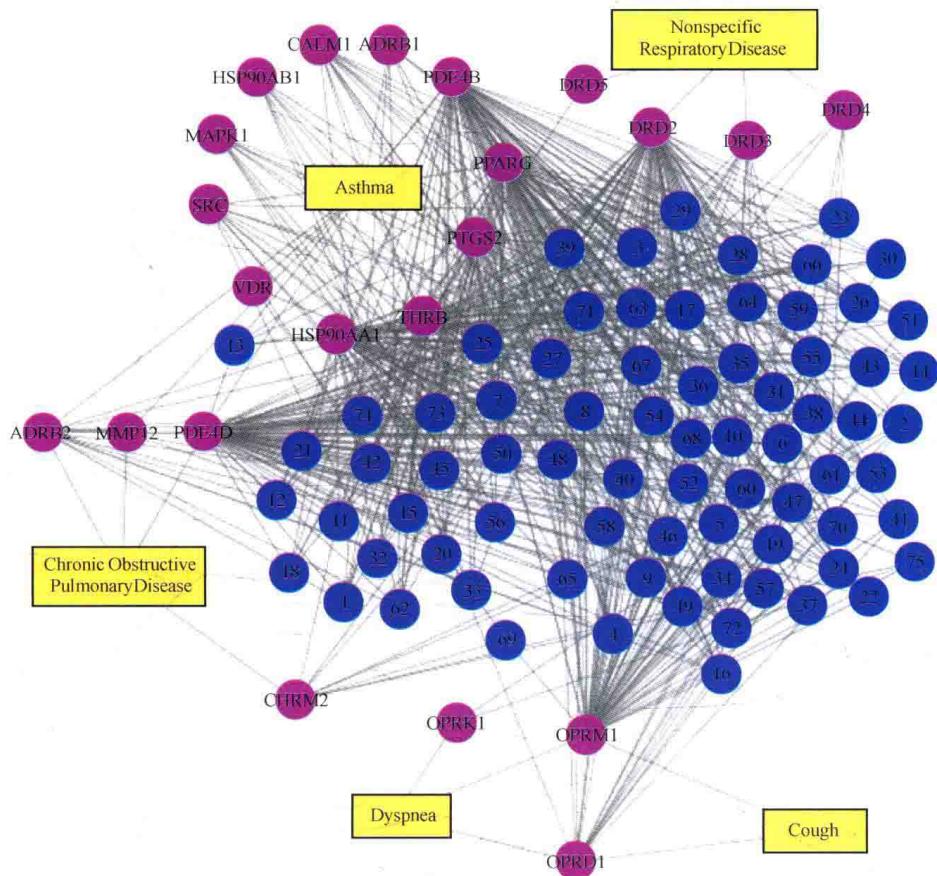


图 10.3 甘草药物 - 靶点 - 呼吸系统疾病网络图 (见正文第 132 页)
 (粉色圆形代表靶点, 蓝色圆形代表化合物, 黄色方格代表某种呼吸系统疾病)

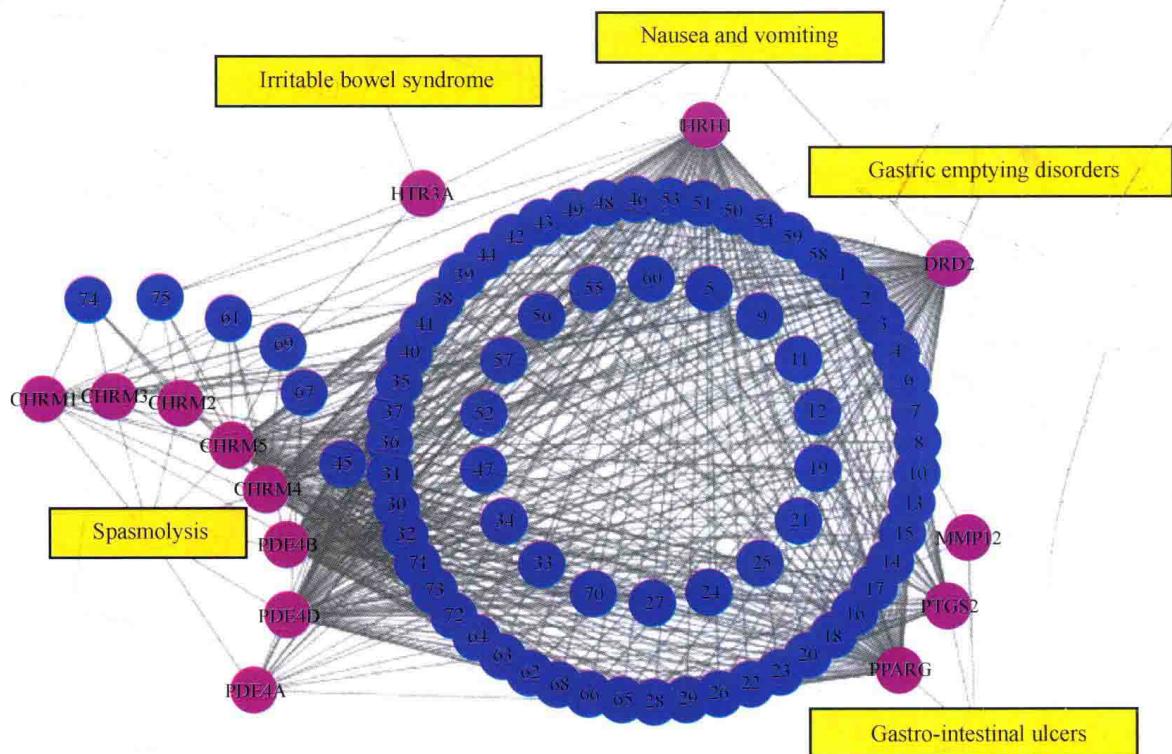


图 10.5 药物 - 靶点 - 消化系统疾病网络图 (见正文第 138 页)
 (粉色节点代表靶点蛋白, 蓝色节点代表化合物, 黄色方框代表不同的消化系统疾病)

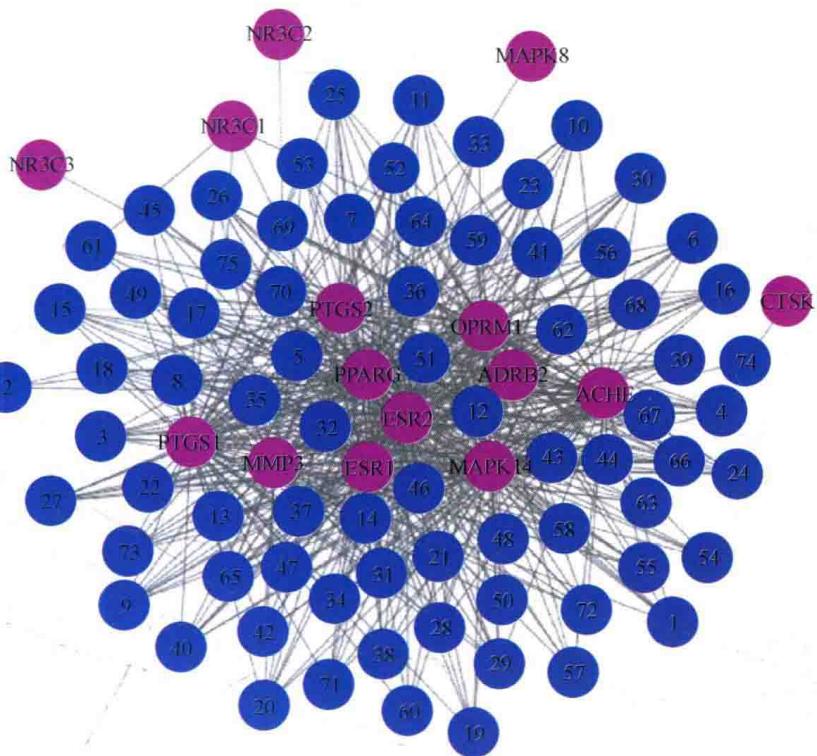


图 10.6 药物 - 靶点 - 炎症网络图 (见正文第 139 页)
(粉色代表靶点, 蓝色代表化合物)

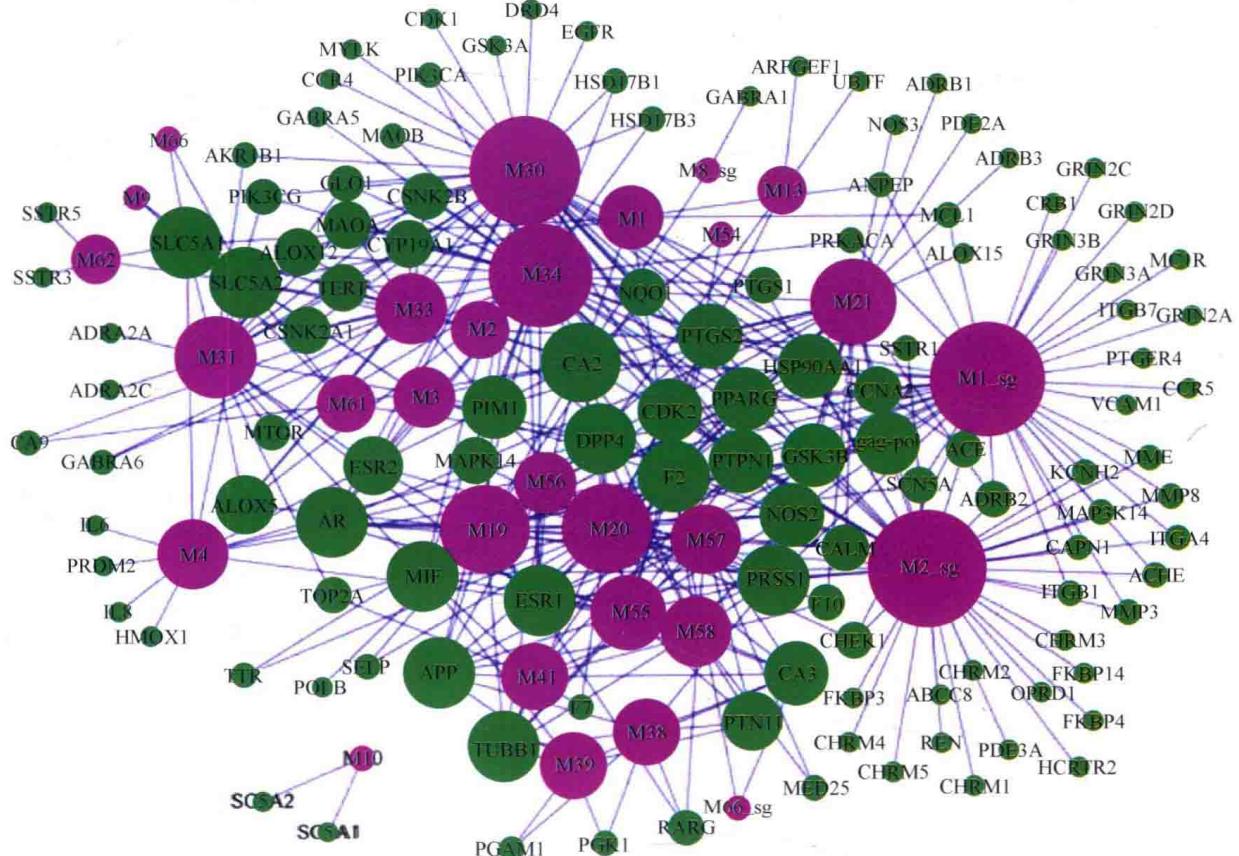
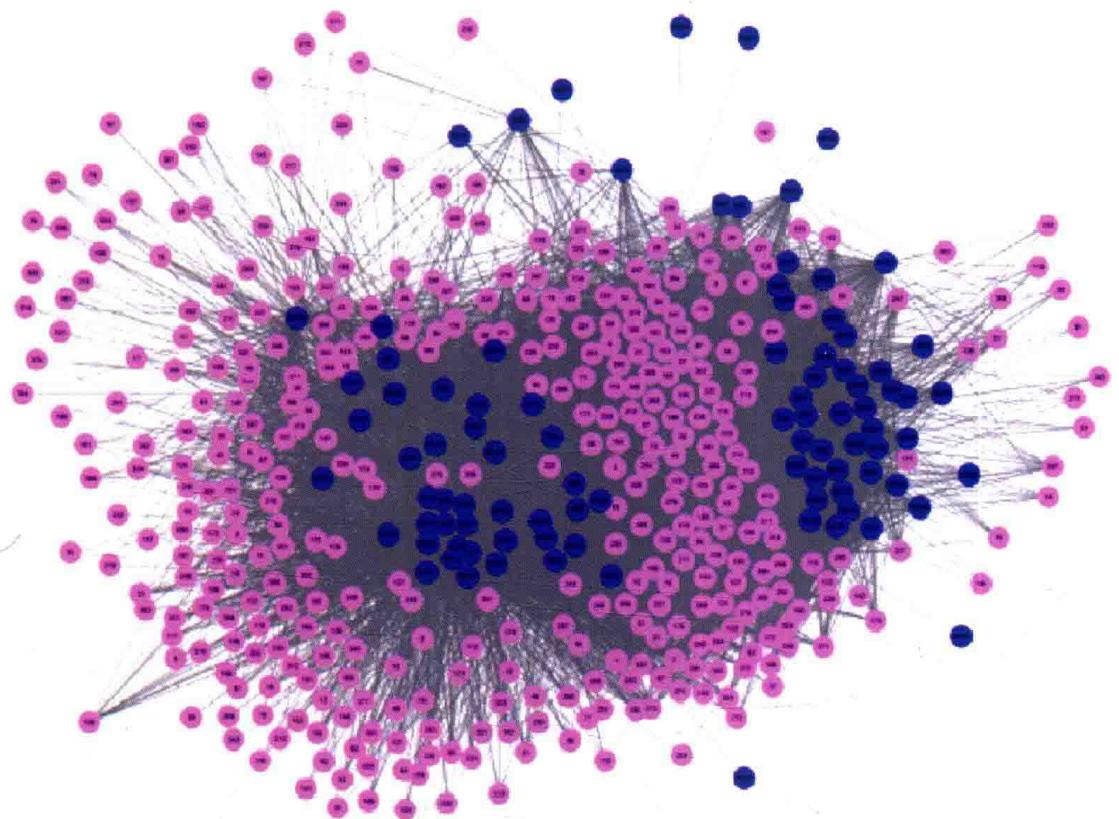
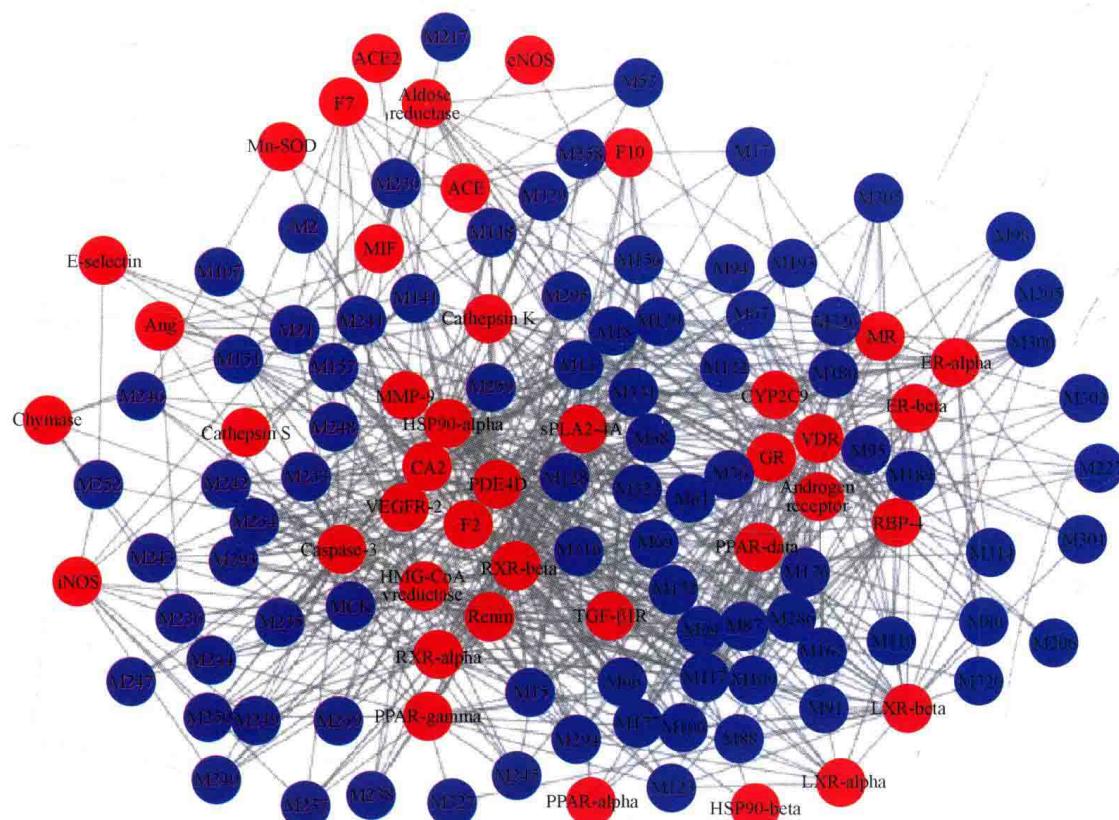


图 10.13 热毒宁注射液的药物 - 靶点网络 (见正文第 169 页)
[该网络由 29 个药物节点 (紫色) 和 121 个靶点节点 (绿色) 构建而成, 圆圈的大小即节点的度数]



(a) C-cT 网络



(b) C-T 网络

图 10.8 复方丹参方的 C-cT 网络及 C-T 网络 (见正文第 150 页)

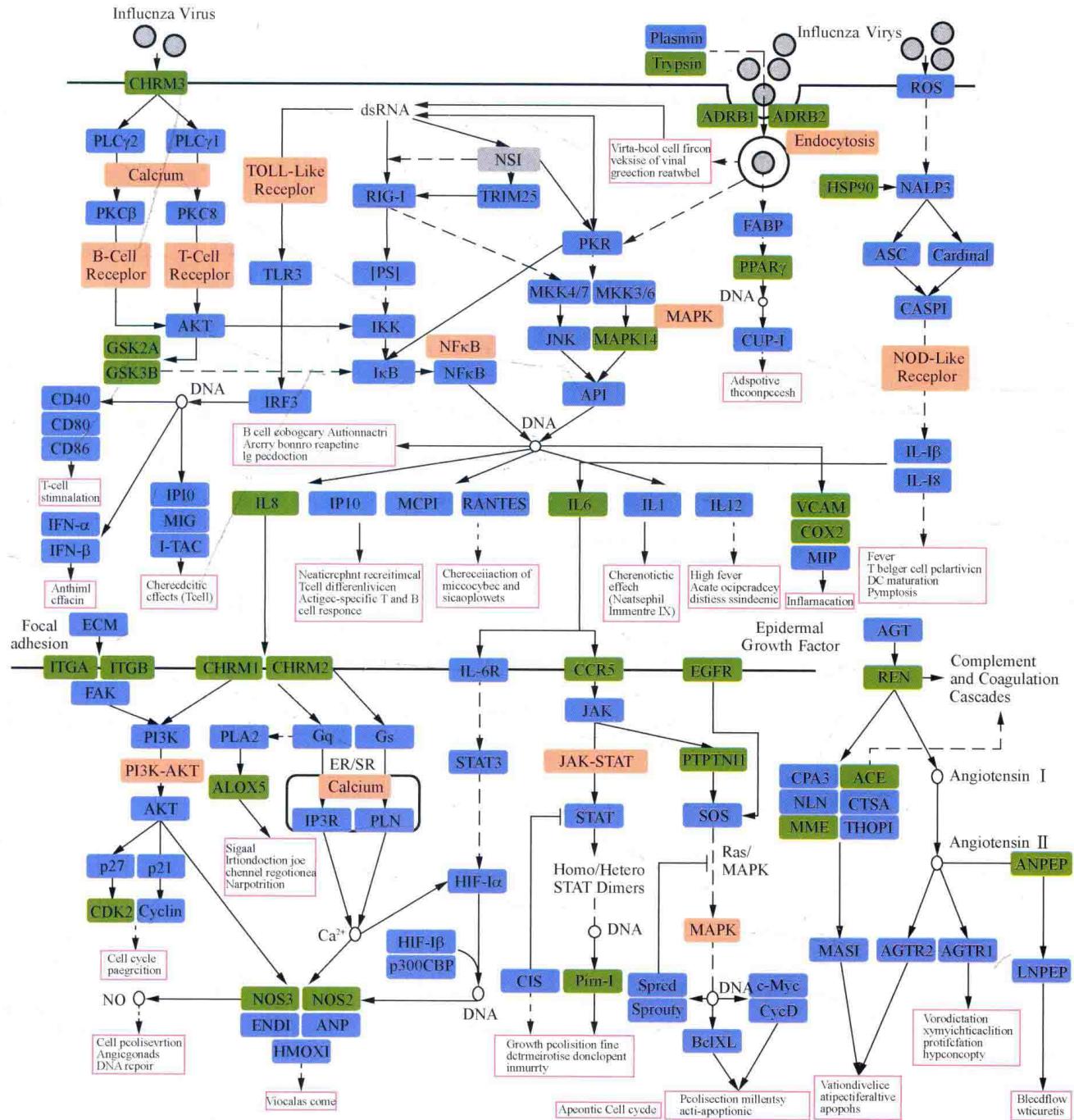


图 10.20 热毒宁注射液的系统分析 (见正文第 175 页)

(图中所示的是候选靶点与“流感相关的通路”的互作关系。其中，通路标记为红色，候选靶点标记为绿色、箭头表示激活作用，T- 箭头表示抑制作用，虚线表示针对不同的靶点其作用不一样，该作用可以是抑制也可以是激活)

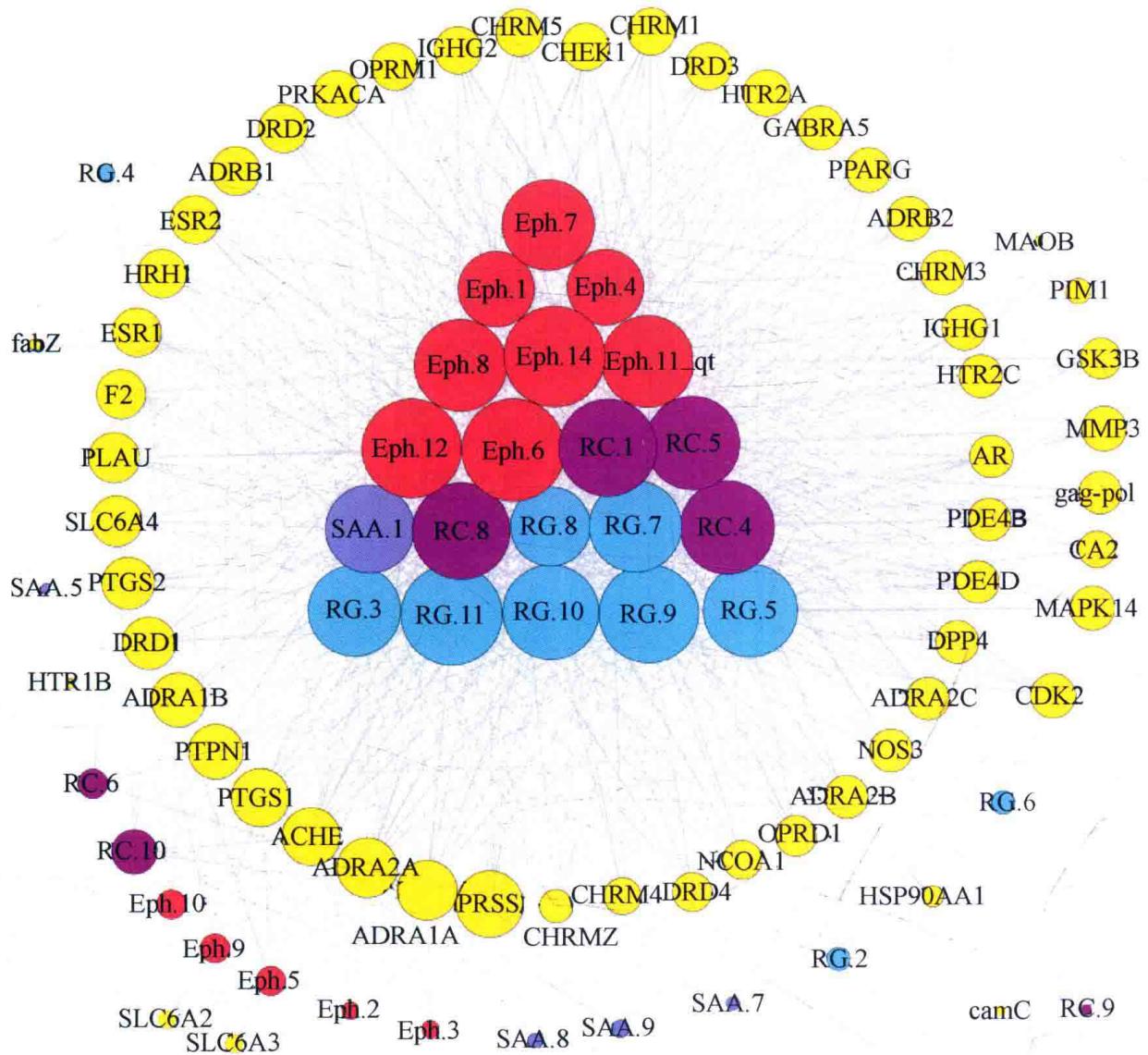


图 11.7 麻黄汤核心药物 - 靶点网络 (cd-T 网络) (见正文第 201 页)
 (核心药物 - 靶点网络由 35 个候选药物和 57 个候选靶点组成 92 个节点和 1 049 条边。
 每一个节点的面积大小代表其度数。黄色圆圈表述四个草药共同的靶点，
 体现了复方草药之间的协同作用。Eph, 麻黄; RC, 桂枝; SAA, 杏仁; RG, 甘草)

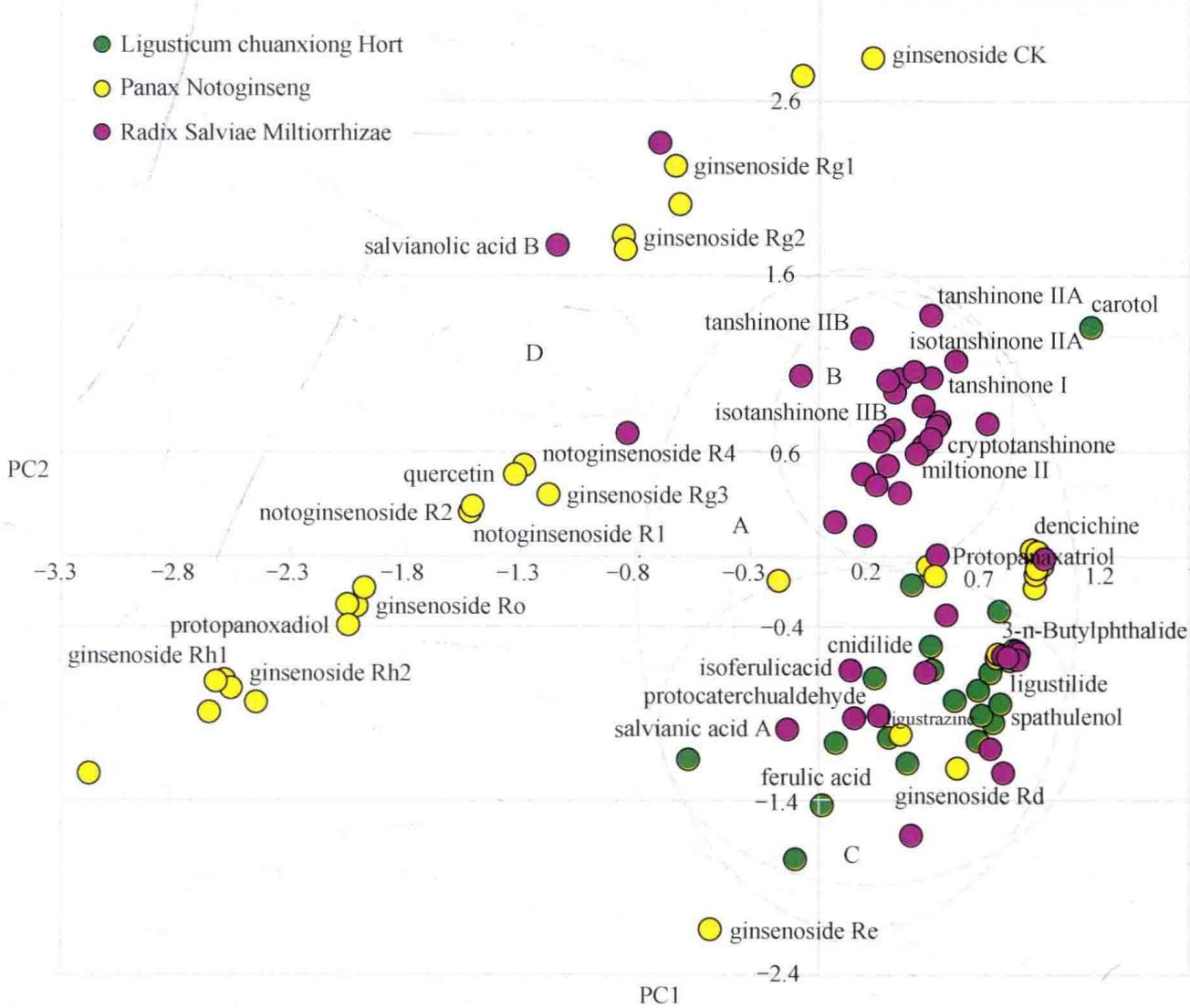


图 11.10 基于药物理化性质分析的川芎、丹参和三七中活性成分的化学空间分布(见正文第 213 页)

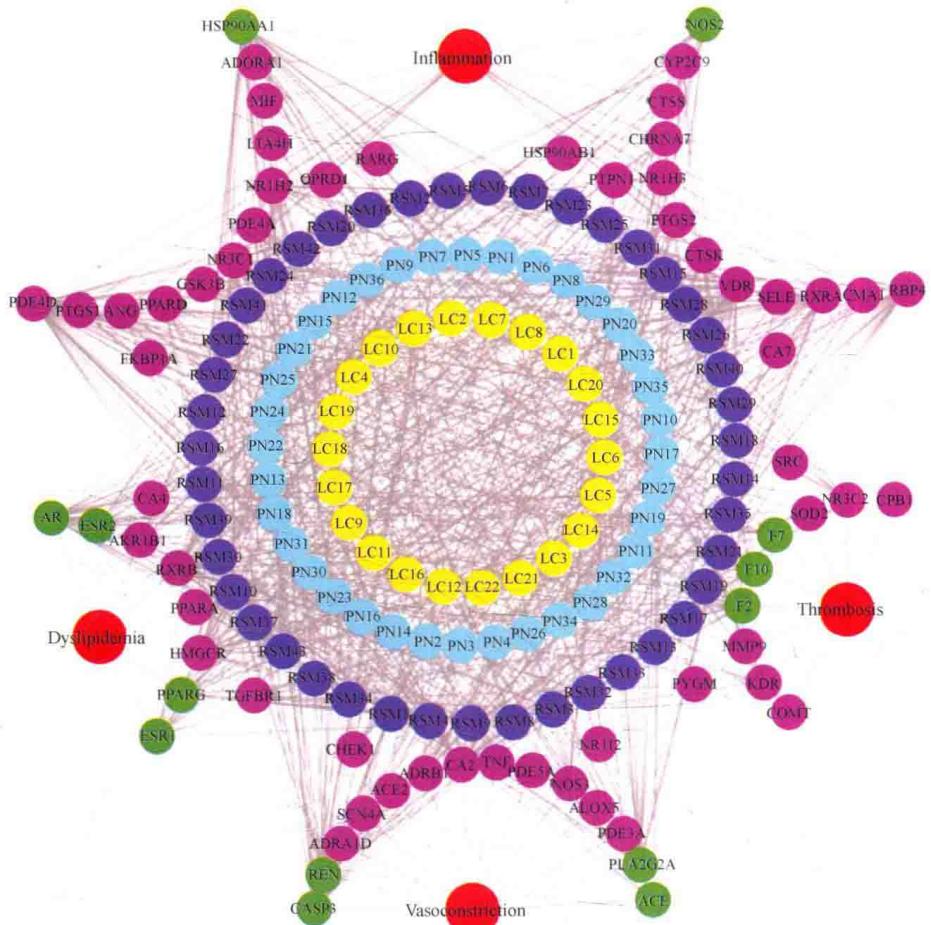


图 11.11 川芎、丹参和三七的药物 - 靶点 - 疾病网络 (见正文第 214 页)
(其中, 黄色、蓝色和紫色圆圈分别表示川芎、三七和丹参的活性成分。粉色圆圈表示三个草药的靶点, 绿色圆圈表示它们的共同靶点。红色圆圈表示与血瘀相关的症状)

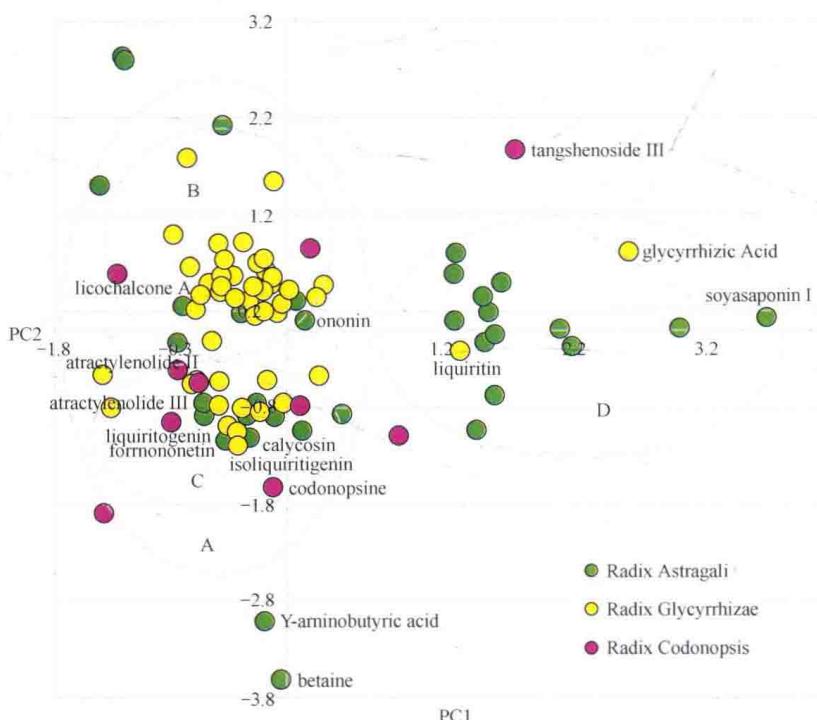


图 11.12 基于药物相关理化特征的党参、甘草和黄芪中活性成分的化学空间分布 (见正文第 216 页)

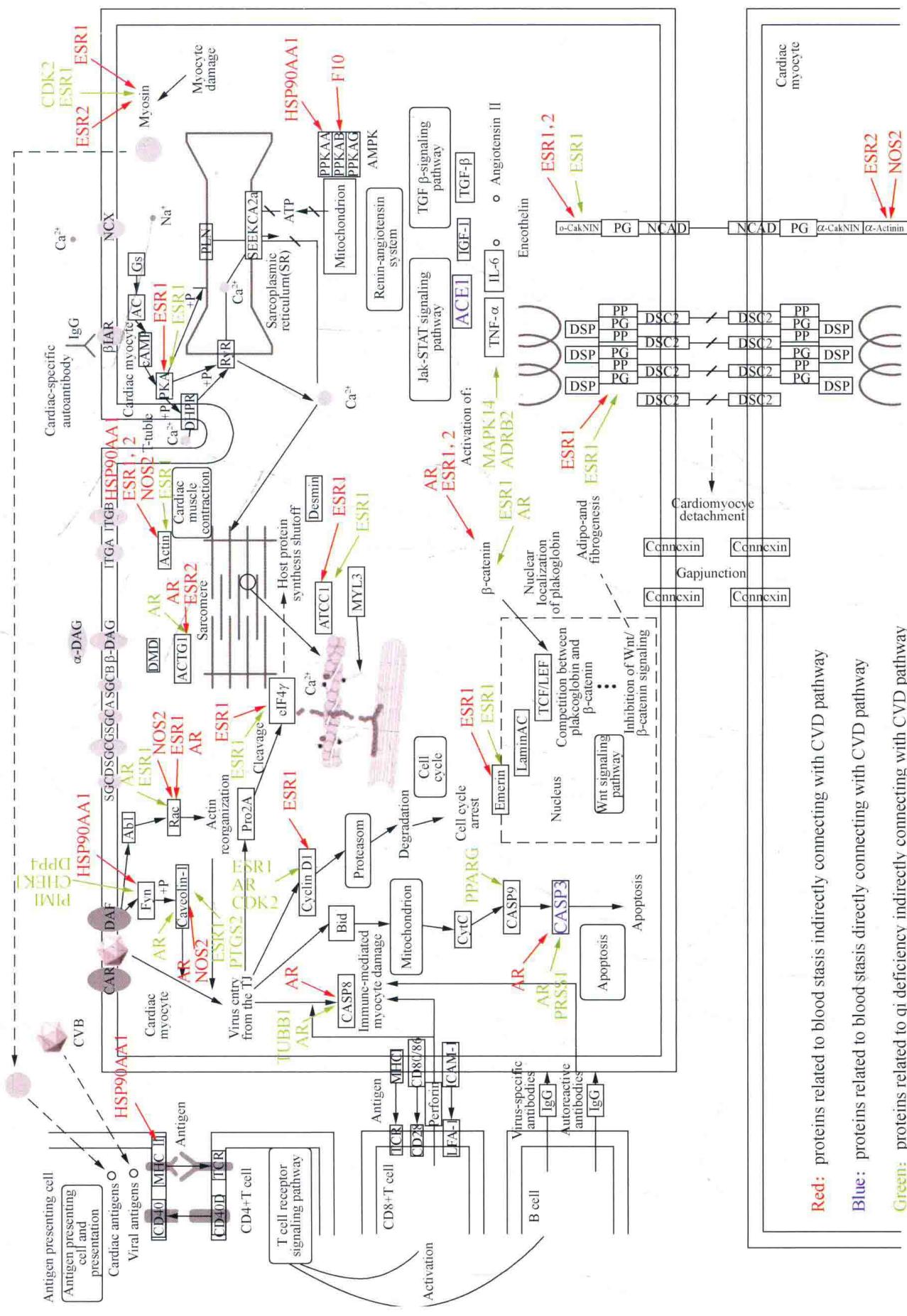


图 11.13 靶点蛋白在心血管疾病通路上的映射 (见正文第 219 页)

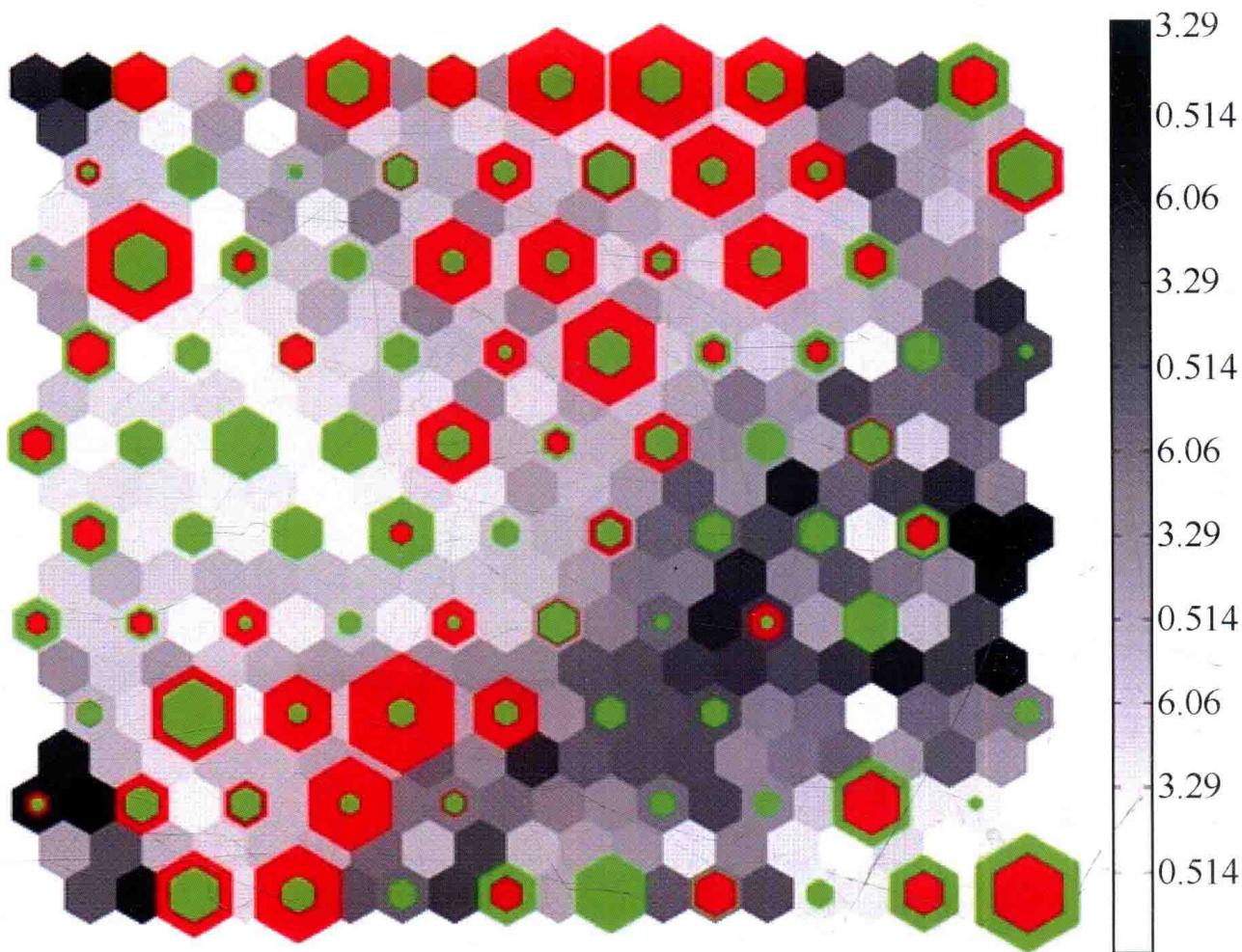


图 11.15 补气、补血分子的自组织映射图 (见正文第 225 页)
(绿色代表补气药中的化学成分, 红色代表补血药中的化学成分)

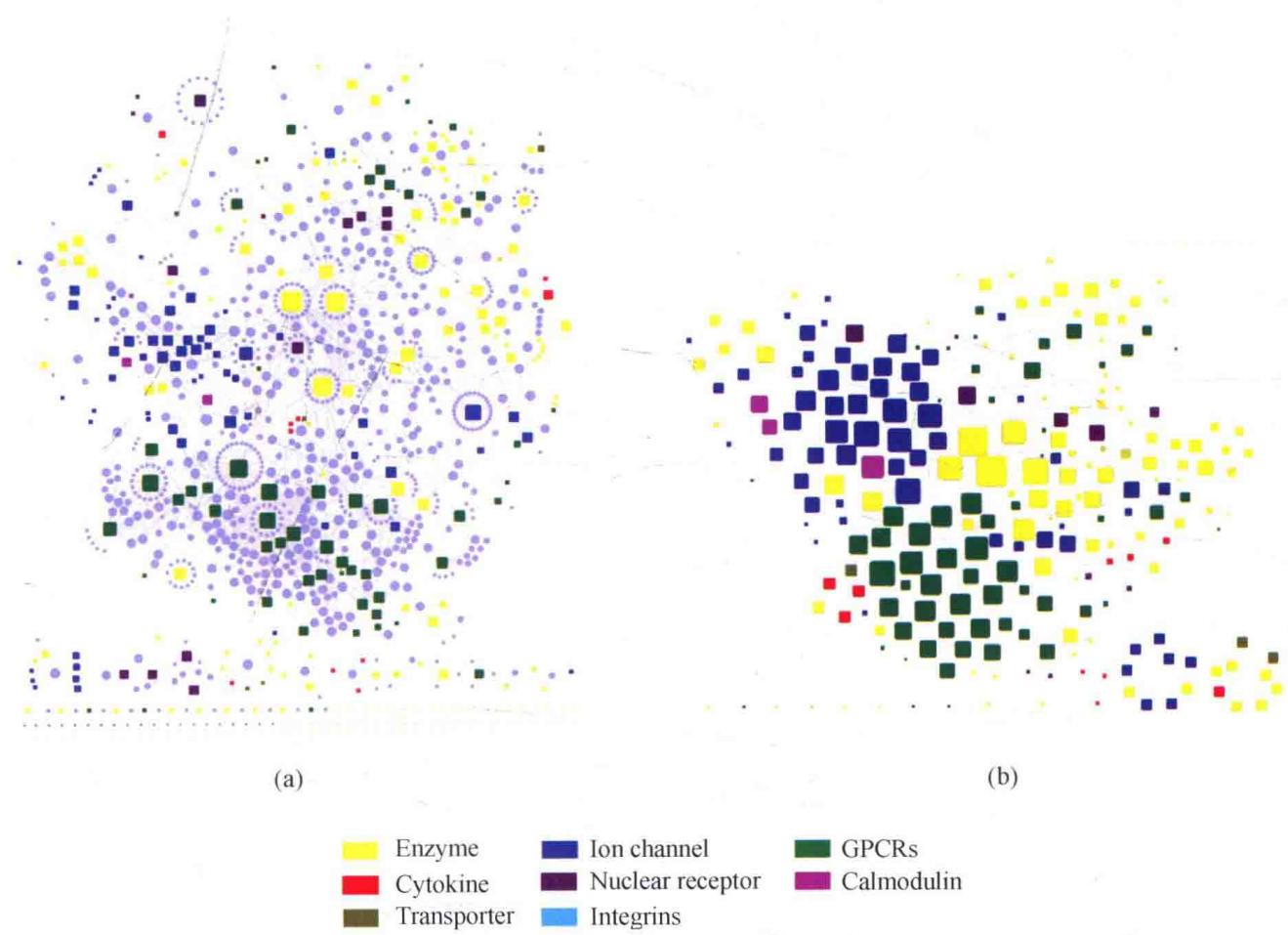


图 12.7 心血管疾病相关的 D-T 网络和 T-T 网络 (见正文第 281 页)
 [网络节点大小和连接度成正比。靶点节点根据蛋白质家族的不同标记不同颜色。
 (a) D-T 网络。其中圆圈代表药物，圆角矩形代表靶点蛋白。每个连接关系
 代表药物和靶点之间的相互作用。(b) T-T 网络。每个节点代表一个蛋白。
 若两个蛋白有相同的药物，则这两个蛋白被连接起来]

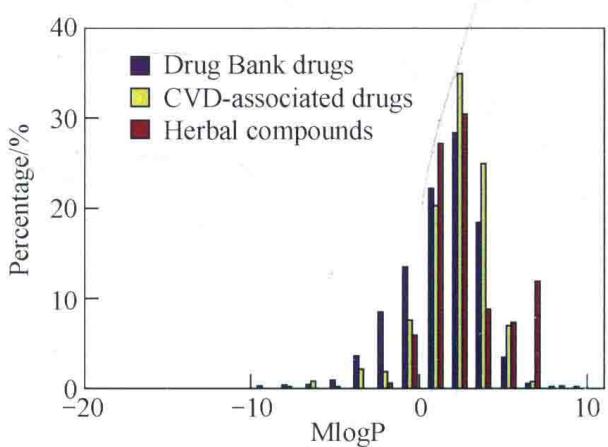
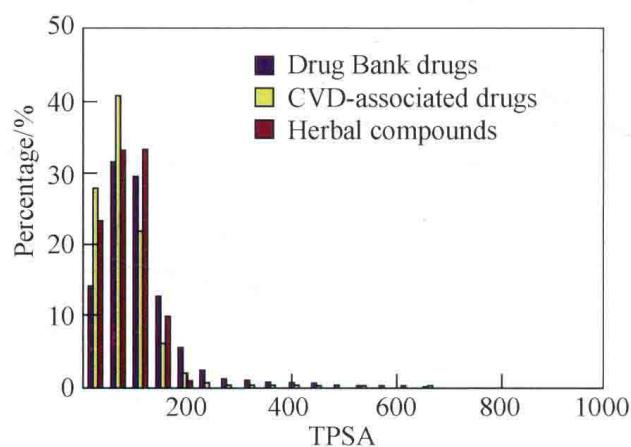
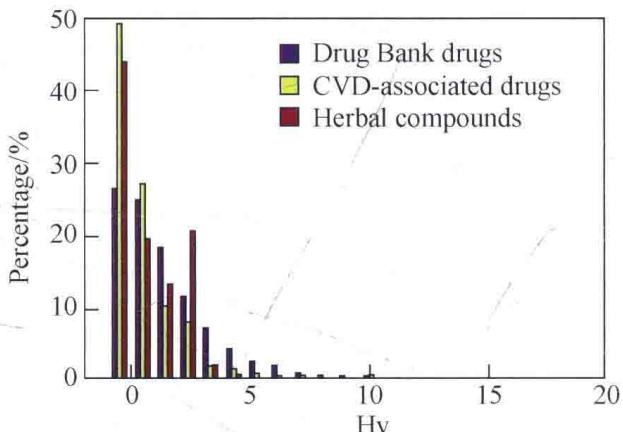
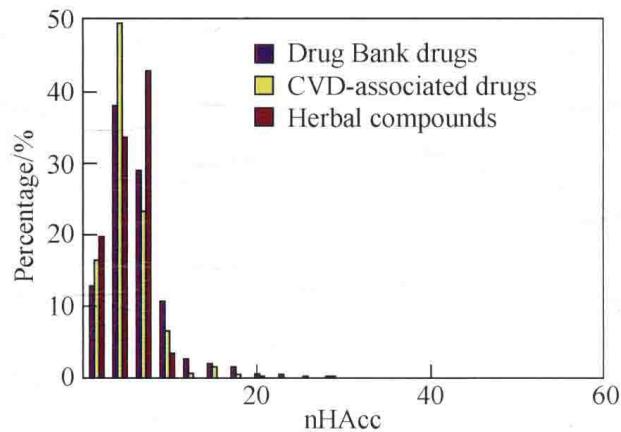
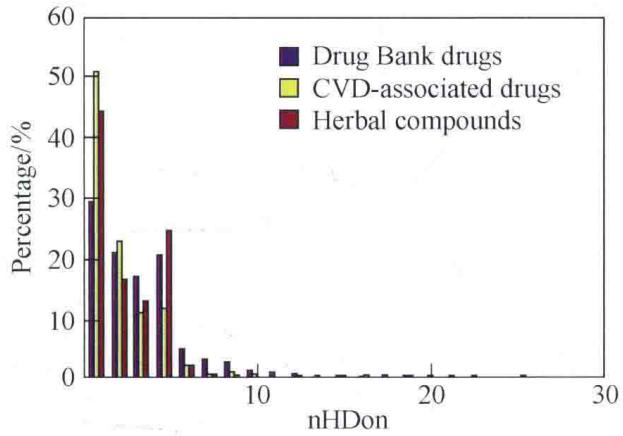
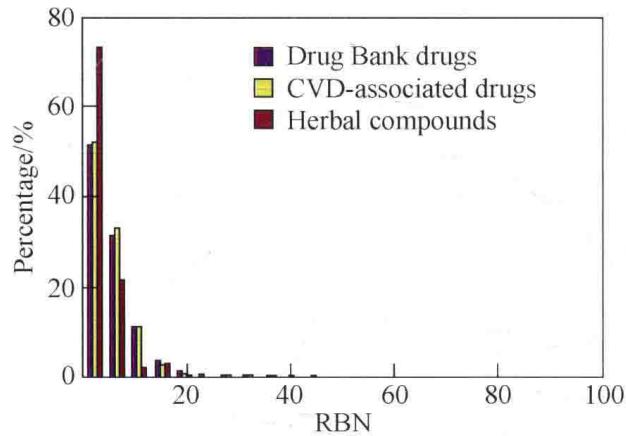
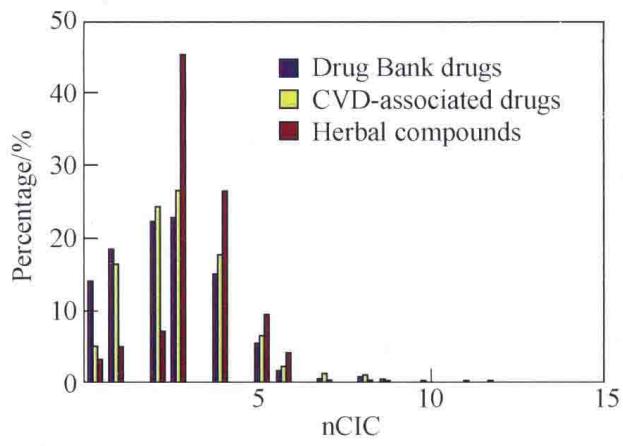
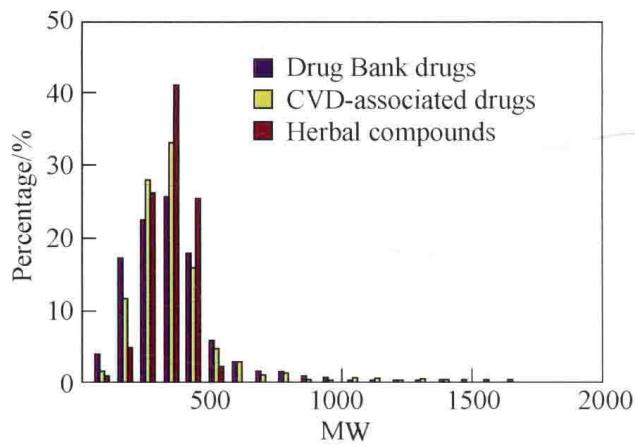


图 12.8 DrugBank 药物、心血管疾病相关药物和草药化合物的 8 个重要分子描述符分布 (见正文第 283 页)