TCMSP中药研发大模型全新升级

（赋能研究机构教学与科研）

【主要特色】

全球**最大**数据库，
包含2.4亿天然产物和30万种植物。

计算工具最多（共260个），
一键自动分析。

新增复方量效计算，虚拟细胞、虚拟器官、虚拟敲除、PBPK，
归经分析，多组学，ADME/T等前沿计算工具，助力高分论文产出。

外部使用和评价



【行业开创者·用标准数据定研究方向】

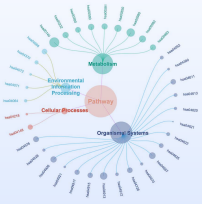
已被**3万**篇硕士论文、**1万**篇博士论文采用；累计引用超**7万**次，
稳居全球天然产物数据库访问量第一，平均**每秒10人**访问。

注册会员**120万**人。

获得诺贝尔奖得主Harold W. Kroto和Michael Houghton高度评价。

用户覆盖**128**个国家，**2000**余所高校、医院及研发机构；
在国内高校/医院的中医、中药研究中被视为“**标配工具**”。

160余家企业新药研发，成功应用于**6000多**个复方和药物研究，
转化上市产品超**300**个。



【全流程科研赋能体系】

由来自哈佛大学、中科院、清华大学等知名高校专家，提供一对一深度辅导。

成果凝练

针对SCI、核心、普刊及硕博学位论文，提供技术支持。

知识产权保护

辅助申请专利、数据资产，以及软件著作权。

实验资源支撑

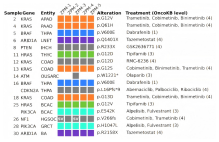
提供中药复方标准品、化合物单体及相关实验耗材。

12个核心分析模块，覆盖研究全流程

第一层 分子层面

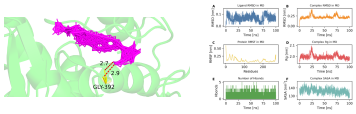
1. 靶点预测

直接靶点WES



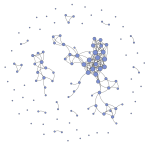
WES 测序分析

靶点结合力



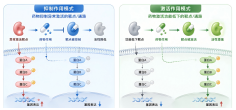
分子对接+分子动力学模拟
MM/PBSA 自由能计算

间接靶点SysDT



系统级靶点预测

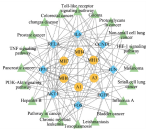
药物作用模式PreMoA



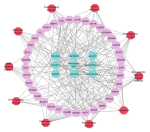
预测药物作用模式
（激活 / 抑制）

第二层 网络层面

2. 系统/网络药理学分析



C-T/D-T
网络

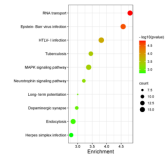


症状-基因-化合物
多维互作

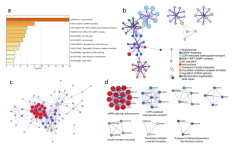


PPI蛋白互作
网络构建

3. 富集分析与功能注释



GO/KEGG富集分析

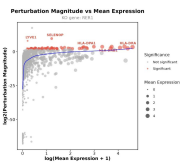


Metascape整合分析

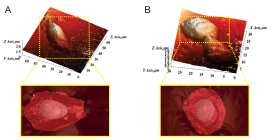
第三层 细胞层面

4. 虚拟细胞敲除

虚拟基因敲除（VKO）



虚拟细胞模型
（Boolean Network）



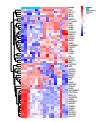
信号通路干扰模拟
（ODE simulation）

$$\frac{dX}{dt} = f(X,u,t)$$

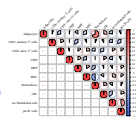
$$X(0) = X_0$$

第四层 组织层面

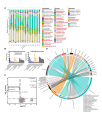
5. 多组学分析



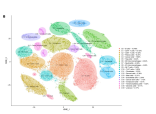
转录组分析
（DESeq2）



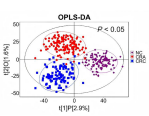
免疫浸润
（CIBERSORT）



蛋白组学分析
（MaxQuant）

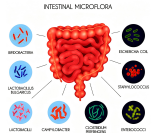


单细胞转录组分析
（Seurat）

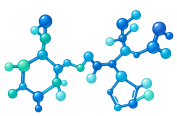


代谢组学分析
（MetaboAnalyst）

6. 肠道菌群组学



中药-肠道菌群互作分析



肠道菌代谢产物分析
（QIIME2 + MMCA）

第五层 器官层面

7. 入血成分分析



入血成分预测

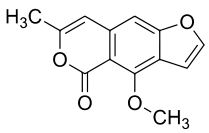


器官定位
（PBPK + BBB预测）

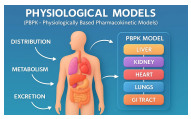
8. 药代动力学分析



ADME/T参数计算



理化性质分析



人体PBPK计算

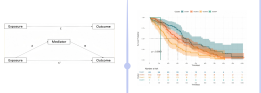
第六层 整体层面

9. 中医药基础理论解析



脏腑归经 | 药性药味 | 配伍 | 寒热

10. 因果与预后分析



孟德尔随机化
（MR）

生存分析
（Cox回归）

11. 统计与验证工具



Meta分析 | 实验设计 | 文献验证

12. 智能报告生成



一键生成完整分析报告
结果总结与解读

从分子到整体，构建多尺度、多维度的
“中医药虚拟人”数字孪生

技术客服 (1) (2)

平台访问链接：https://next.tcmsp-e.com/ai-agent

官方电话/微信：17392526548