

基于网络药理学探讨前泌通片对治疗慢性前列腺炎的分子机制

徐卓铭¹, 俞旭君^{1,2*}

¹成都中医药大学临床医学院, 四川 成都

²成都中医药大学医学与生命科学学院, 四川 成都

收稿日期: 2025年12月16日; 录用日期: 2026年1月9日; 发布日期: 2026年1月22日

摘要

本研究利用网络药理学和分子对接方法, 系统探讨了中成药前泌通片(QMT)治疗慢性前列腺炎(CP)的潜在分子机制。研究人员首先从TCMSP等数据库中筛选出QMT的活性成分及其作用靶点, 并从GeneCards等数据库中收集慢性前列腺炎相关的疾病靶点。通过取交集获得药物与疾病的共同靶点, 构建了蛋白相互作用(PPI)网络并筛选出核心靶点(如MAPK3, FOS, AKT1等)。随后, 通过GO和KEGG富集分析揭示了这些靶点主要参与的生物学过程和信号通路, 如VEGF信号通路、细胞凋亡和代谢通路等。最后, 通过分子对接技术验证了柚皮素、槲皮素等主要活性成分与核心靶点之间具有良好的结合能力。研究结论认为, 前泌通片通过多成分、多靶点、多通路的方式, 在抑制血管生成、调节细胞凋亡、纠正代谢紊乱等方面发挥作用, 从而治疗慢性前列腺炎。

关键词

前泌通片, 慢性前列腺炎, 网络药理学, 分子对接

Exploring the Molecular Mechanism of Qianmitong Tablets in the Treatment of Chronic Prostatitis Based on Network Pharmacology

Zhuoming Xu¹, Xujun Yu^{1,2*}

¹Clinical Medical School, Chengdu University of Traditional Chinese Medicine, Chengdu Sichuan

²School of Medical and Life Sciences, Chengdu University of Traditional Chinese Medicine, Chengdu Sichuan

Received: December 16, 2025; accepted: January 9, 2026; published: January 22, 2026

*通讯作者。

文章引用: 徐卓铭, 俞旭君. 基于网络药理学探讨前泌通片对治疗慢性前列腺炎的分子机制[J]. 中医学, 2026, 15(1): 456-463. DOI: 10.12677/tcm.2026.151063

Abstract

This study systematically investigated the potential molecular mechanism of the Chinese patent medicine Qianmitong Tablet (QMT) in the treatment of chronic prostatitis (CP) using network pharmacology and molecular docking methods. Firstly, researchers screened the active ingredients of QMT and their corresponding targets from databases such as TCMSP, and collected CP-related disease targets from databases including GeneCards. The common targets between the drug and the disease were obtained by taking the intersection, after which a protein-protein interaction (PPI) network was constructed and core targets (such as MAPK3, FOS, AKT1, etc.) were screened out. Subsequently, GO and KEGG enrichment analyses revealed the biological processes and signaling pathways mainly involved in these targets, including the VEGF signaling pathway, apoptosis, and metabolic pathways. Finally, molecular docking technology verified that major active ingredients such as naringenin and quercetin had good binding abilities to the core targets. The study concluded that Qianmitong Tablet exerts therapeutic effects on chronic prostatitis through a multi-component, multi-target, and multi-pathway mode, by inhibiting angiogenesis, regulating apoptosis, and correcting metabolic disorders.

Keywords

Qianmitong Tablets, Chronic Prostatitis, Network Pharmacology, Molecular Docking

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

慢性前列腺炎(Chronic prostatitis, CP)是以盆腔区域疼痛或不适、排尿异常等为症状的泌尿男科常见病[1]。虽不危及患者生命,但其能对患者的身心健康造成严重影响,调查数据显示我国慢性前列腺炎患病率在 6.0%~32.9%,这远高于其他国家的 2.0%~16.0% [2],是一大公共卫生问题。此外,慢性前列腺炎病因复杂,发病机制尚未完全阐明,目前认为 CP 的主要病因与发病机制包括病原体感染、尿液反流、下尿路上皮功能障碍、神经内分泌因素、精神心理因素、炎症免疫、氧化应激等方面[3] [4]。

根据《慢性前列腺炎/慢性盆腔疼痛综合征诊疗指南》治疗方案中建议的化学药物,主要以抗生素、 α 受体阻滞剂、非甾体类抗炎药、抗抑郁药及抗焦虑药等对症治疗,在药物的评估使用及相关副作用上具有一定的局限[5]。

因临床症状表现主次不同,慢性前列腺炎在中医学中被划分为“精浊”、“淋证”、“白浊”等范畴,并且中医药是中国由来已久的传承文化,中医药治疗慢性前列腺炎独具优势与特色。改善患者疼痛症状、排尿症状和生活质量的同时,还具有药物不良反应少等优势[3]。古代医家指出,慢性前列腺炎病机复杂,病程长,多为虚实夹杂,病因上多因湿、热、寒、瘀、郁、虚所致[6]。主要病机为湿热瘀阻和脾肾两虚。治疗上主张“通补兼施”,以清热利湿、导浊通淋为主,同时兼顾补脾肾,辨证施治强调标本兼治、补泻并用、气血同调[7]。并应当注意分清主次、权衡用药,切不可一味清利,或过用温补[8]。

前泌通片(Qianmitong Tablets, QMT),原名增瀑颗粒,由天台乌药、延胡索、川楝子、木香、青皮、槟榔、泽兰、黄柏、川牛膝等组成,具有疏肝行气、活血止痛、清热利湿的作用,对治疗气滞血瘀型慢性前列腺炎及引发的疼痛症状具有明显改善作用,还能提高卵磷脂小体水平,降低 TNF- α 、IL-8 水平、p38

基因、NGF 的表达[9]。慢性前列腺炎病因复杂, 治疗棘手, 而中医药复方在改善症状方面具有优势。前泌通片作为一种临床常用药物, 其作用机制尚不完全明确。该研究采用网络药理学这一系统性方法, 首次从分子层面系统性地预测了前泌通片治疗 CP 的“活性成分 - 作用靶点 - 信号通路”网络, 为阐释其“多靶点、整体调节”的特点提供了科学假设和分子生物学依据。

2. 材料与方法

2.1. 药物活性成分及靶点筛选

通过 TCMSP 数据库(<https://old.tcmsp-e.com/tcmsp.php>)查询乌药、延胡索、川楝子、木香、青皮、槟榔、泽兰、黄柏、川牛膝的活性成分, 以口服利用度(OB) $\geq 30\%$ 、类药性(DL) ≥ 0.18 作为筛选标准, 对收集到的活性成分及靶点汇总后去重, 得到前泌通片靶点。

2.2. 疾病相关靶点筛选

通过 DisGeNET (<https://www.disgenet.com>)、GeneCards (<https://www.genecards.org>)、OMIM (<https://www.omim.org>)数据库, 以“Chronic prostatitis”为关键词, 设置物种为“Homosapiens”, 检索慢性前列腺炎相关靶点, 将检索结果合并后去重, 得到慢性前列腺炎疾病靶点。

2.3. 交集靶点获取及药物 - 活性成分 - 靶点网络构建

将药物靶点和疾病靶点导入 Venny 平台(<https://bioinfogp.cnb.csic.es/tools/venny>)取交集, 得到前泌通片治疗慢性前列腺炎的潜在作用靶点。分别将前泌通片组成药物、药物活性成分及交集靶点导入 Cytoscape3.8.0 软件, 构建药物 - 活性成分 - 靶点网络, 并根据度值(Degree)大小排序, 筛选主要成分。

2.4. 蛋白子相互作用网络构建及靶点筛选

将交集靶点导入 STRING 数据库(<https://version-11-5.string-db.org/>), 限定研究物种为“人”(“Homosapiens”), 最低互作评分设置为“中间置信度”(medium confidence 0.400), 构建蛋白相互作用(PPI)网络。使用 Cytoscape3.8.0 进行可视化处理并分析。

2.5. GO 和 KEGG 通路富集分析

将前泌通片治疗慢性前列腺炎的交集靶点导入 Metascape 数据库(<https://metascape.org/gp/index.html>), 进行 GO 富集分析, 包括生物过程(BP)、细胞分组(CC)、分子功能(MF)及 KEGG 通路富集分析, 以 $P < 0.01$ 为条目, 并利用微生物平台(<https://www.bioinformatics.com.cn/>)对结果进行可视化分析。

2.6. 分子对接

将药物 - 活性成分 - 靶点网络度排名靠前的主要成分与核心靶点进行分子对接。在 TCMSP 数据库中下载主要成分的 mol2 结构, 在 PDB 数据库(<https://www.rcsb.org/>)中下载蛋白晶体结构, 使用 AutoDock Tools1.5.7 对小分子进行去水、加氢处理, 进行配体对接, 输出结合自由能较低(亲和力较高)的结构, 并使用 PyMOL 进行可视化展示。

3. 结果

3.1. 网络药理学分析结果

3.1.1. 前泌通片活性成分及药物靶点

通过 TCMSP 等数据库检索并筛选出前泌通片潜在活性成分 128 个, 其中乌药有 9 个活性成分, 延

胡索 49 个, 川楝子 9 个, 木香 6 个, 青皮 5 个, 槟榔 8 个, 泽兰 2 个, 黄柏 36 个, 川牛膝 4 个, 活性成分去重后得到药物靶点 255 个。

3.1.2. 慢性前列腺炎疾病靶点

通过 GeneCards、DisGeNET、OMIM 数据库检索合并后去重, 共得到疾病靶点 18,920 个。

3.1.3. 药物与疾病交集靶点及药物 - 活性成分 - 靶点网络

通过 Venny 平台将前泌通片药物靶点与慢性前列腺炎疾病靶点取交集, 共得到 245 个交集靶点(见图 1)。采用 Cytoscape3.8.0 构建药物 - 活性成分 - 靶点网络(见图 2), 包含 95 个分子节点、245 基因节点数量和 1581 条边, 筛选出主要成分为柚皮素、槲皮素、表儿茶素、黄连素、荷包牡丹碱。

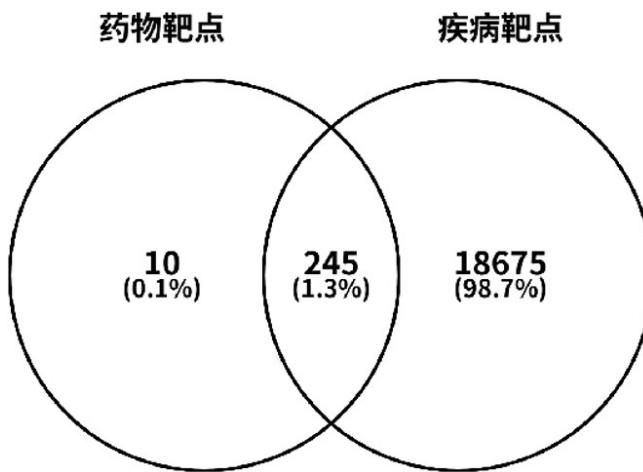


Figure 1. Venn diagram of intersection targets

图 1. 交集靶点韦恩图

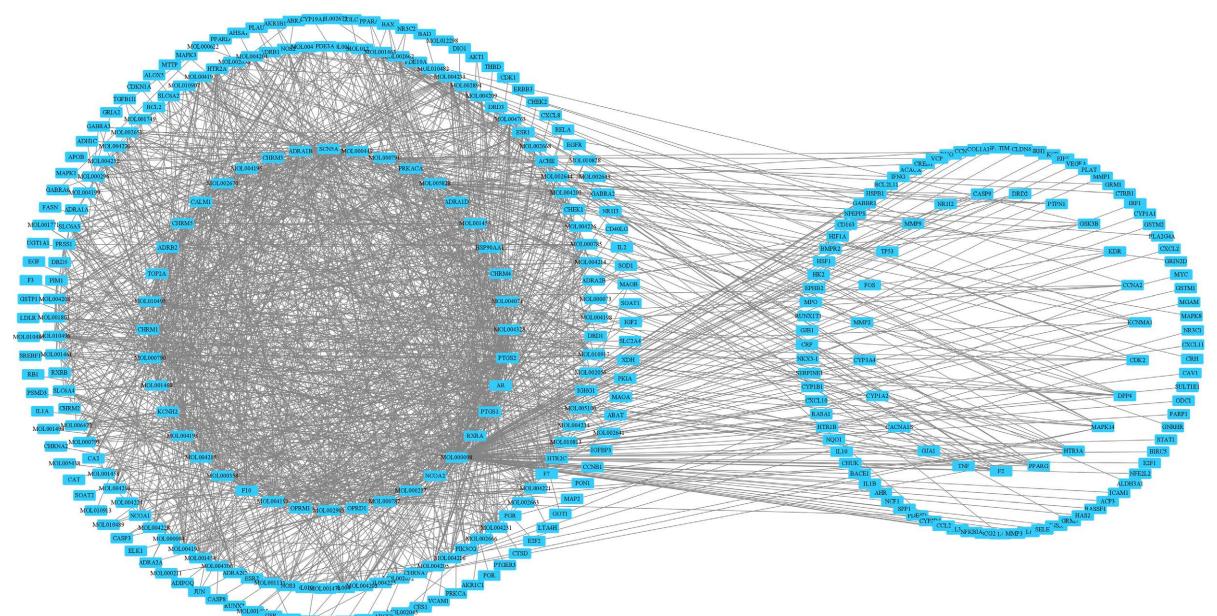


Figure 2. Qianmitong tablet-active ingredients-intersection target network diagram

图 2. 前泌通片 - 活性成分 - 交集靶点网络图

3.1.4. 蛋白相互作用网络构建及核心靶点

利用 Cytoscape3.8.0 平台构建交集靶点 PPI 网络(见图 3), 四轮筛选后, 最终根据 degree > 16、betweenness > 91.11315955、closeness > 0.554989035, 筛选得到 6 个核心靶点, 分别为 MAPK3、FOS、AKT1、ESR1、JUN、TP53 等。

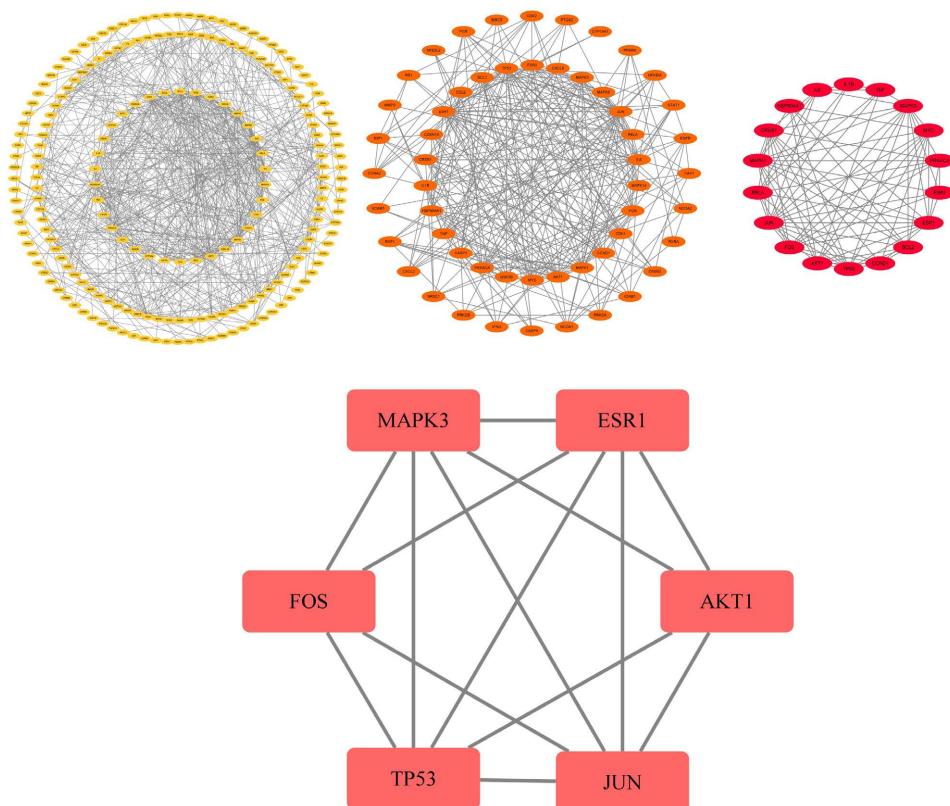


Figure 3. Core target PPI network diagram of drugs and diseases
图 3. 药物与疾病核心靶点 PPI 网络图

3.1.5. GO 和 KEGG 富集分析结果

交集靶点 GO 富集分析共获得 BP 条目 871 条、CC 条目 108 条、MF 条目 237 条, 各项前 10 个条目(见图 4)。KEGG 通路富集分析得到通路 196 条, 前 10 条通路(见图 5)。结果表明, 前泌通片可能通过 VEGF、调节凋亡、代谢等信号通路发挥作用。

3.1.6. 分子对接结果

使用 Autodock 软件将关键活性成分(柚皮素、槲皮素、表儿茶素、黄连素、荷包牡丹碱)与 PPI 网络中的六个核心蛋白(MAPK3、FOS、AKT1、ESR1、JUN、TP53)进行分子对接。AutoDock 对接得分越低, 反映分子与靶点结合能力越强, 所需结合能量越低。分子对接结果显示, 柚皮素与 MAPK3 结合能为 $-6.8 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$, 柚皮素与 AKT1 结合能为 $-5.6 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$; 荷包牡丹碱与 FOS 结合能为 $-10.5 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$; 槲皮素与 FOS 的结合能是 $-10.4 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$, 与 JUN 的结合能是 $-9.0 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$, 与 AKT1 的结合能是 $-6.2 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$, 与 TP53 的结合能是 -6.3 kcal/mol ; 表儿茶素与 ESR1 的结合能为 $-8.1 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$, 黄连素与 ESR1 的结合能力是 -7.6 kcal/mol 。上述结合能均小于 -5 kcal/mol , 表明主要成分与核心靶点结合性较好, 配体与受体蛋白之间的结合稳定(见图 6)。

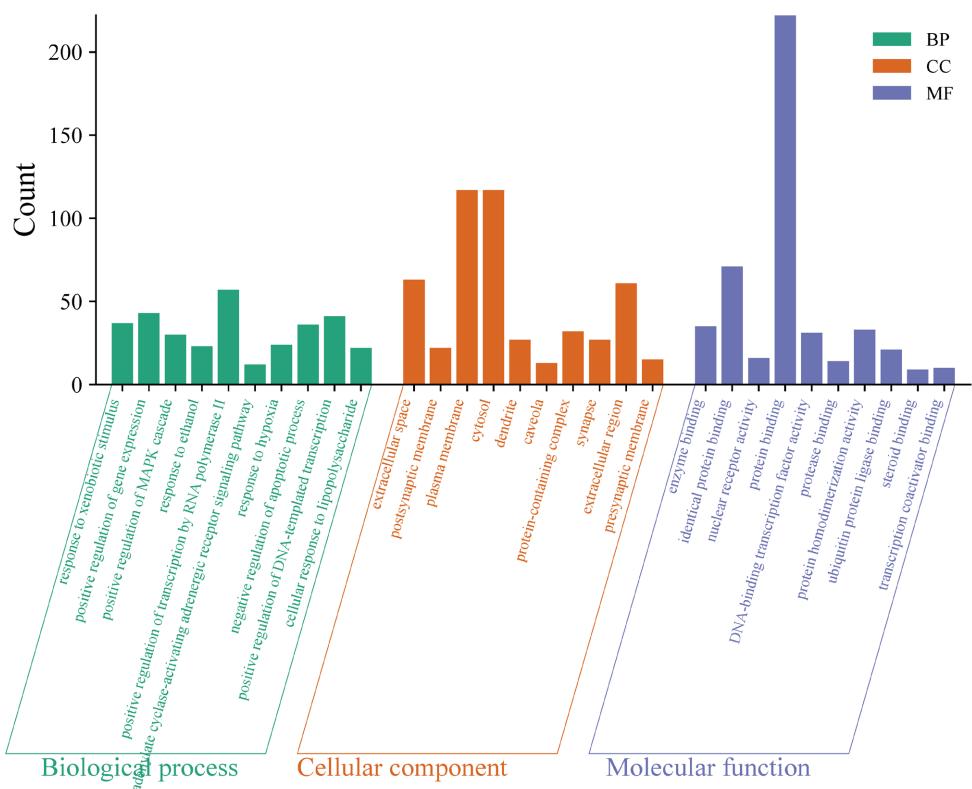


Figure 4. GO analysis diagram of common targets of Qianmitong Tablet on chronic prostatitis
图 4. 前泌通片对慢性前列腺炎共同靶点的 GO 分析图

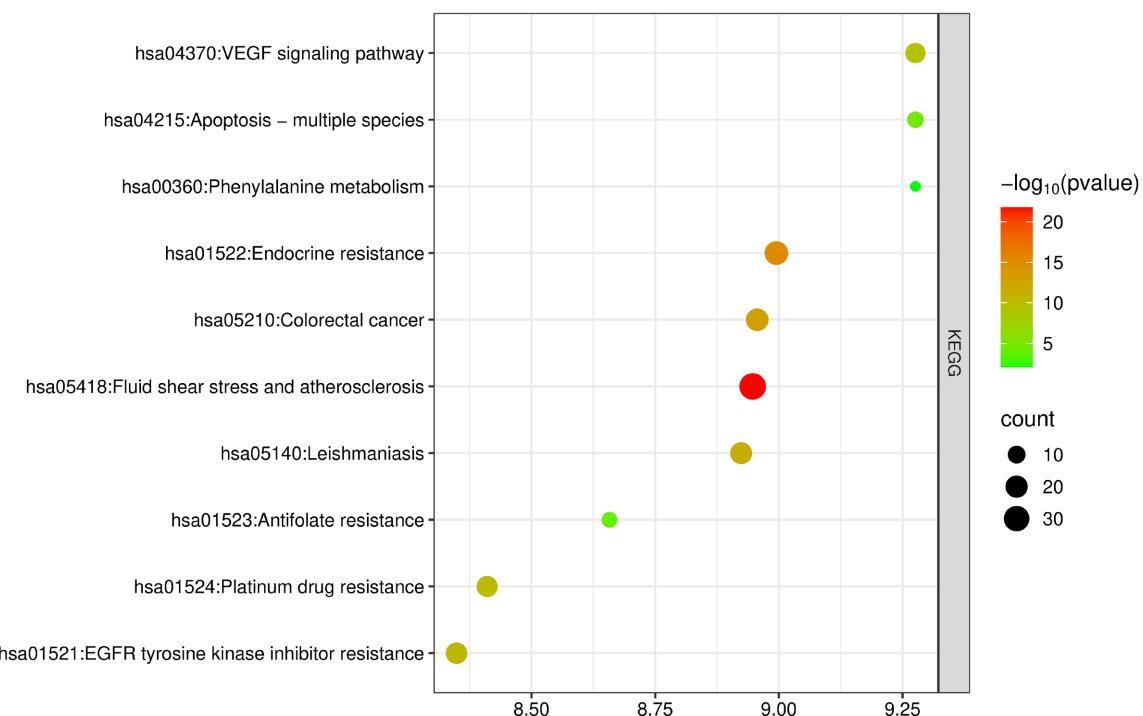


Figure 5. KEGG analysis diagram of common targets of Qianmitong Tablet on chronic prostatitis
图 5. 前泌通片对慢性前列腺炎共同靶点的 KEGG 分析图

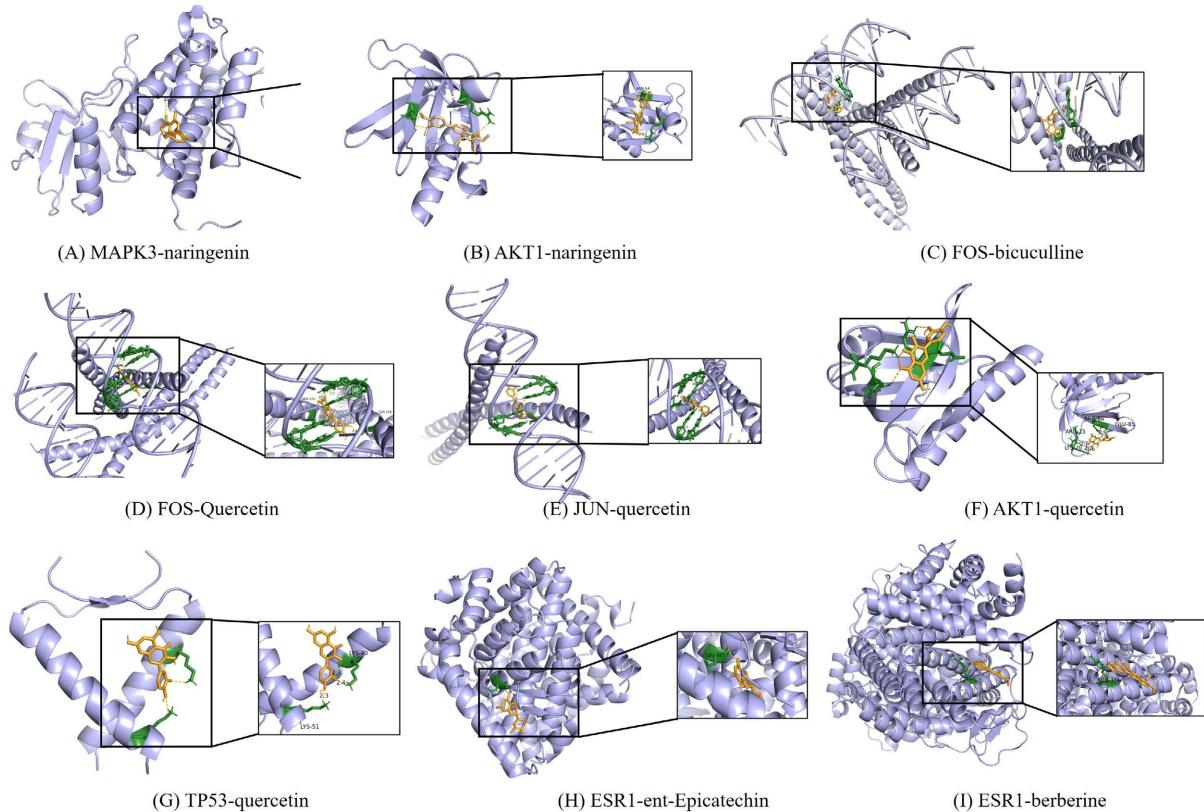


Figure 6. Schematic diagram of molecular docking between partial active ingredients of Qianmitong Tablet and key target proteins of chronic prostatitis

图 6. 部分前泌通片活性成分与慢性前列腺炎关键靶点蛋白分子对接示意图

4. 讨论

慢性前列腺炎属于中医学“精浊”“淋浊”等范畴，临床表现包括盆腔疼痛症状、下尿路症状、精神心理症状和性功能障碍症状。中医辨证辨病体系下，其病机主要以血瘀为主，兼有湿、热、瘀、滞、虚等 [10]。

前泌通片由天台乌药散加减化裁而来，天台乌药散始载于北宋《圣济总录》，金元时期李东垣《医学发明》重新整理并确立今名。现代药理学研究表明，乌药富含倍半萜内酯及挥发油，兼具抗病毒、杀菌、镇痛与抗炎多重效应，可缓解盆底肌痉挛与尿道刺激 [11]；延胡索具有活血、行气、止痛的功效，能用于血瘀气滞诸痛证，主要药效物质基础为生物碱类，能有效抑制中枢和外周疼痛，缓解慢性炎性疼痛 [12]；木香、青皮同为臣药，专司行气：木香具有调节胃肠功能、抗肿瘤、抗菌、抗炎作用 [13]；青皮药功效疏肝破气、消积化滞，用于胸胁胀痛、疝气疼痛、乳癖、乳痈、食积气滞、脘腹胀痛，含有丰富的黄酮类、萜类与挥发油，以及生物碱类 [14]，与木香协同，使解痉止痛范围自两胁延伸至少腹，覆盖面更广。槟榔质重下坠，为破下焦凝结之气的要药，槟榔中含有大量的还原糖、多酚和黄酮类活性物质，有抗氧化和自由基清除，调节相关炎症因子的转录和活性，改善炎症反应功能 [15]；川楝子性寒味苦，既佐制君臣温燥，又延续行气止痛，川楝子的化学成分主要包括柠檬苦素类、木脂素类、挥发油类、黄酮类及有机酸类等，其具有广泛的抗菌作用 [16]。研究表明黄柏主要含有生物碱类、黄酮类、挥发油类等成分，其药理作用亦具有抗炎、抑菌 [17]，泽兰，利水调经；牛膝，利水通淋，引火下行。三者相配合而为使，意在使下焦湿热邪毒有出路。以上诸药合用，具有疏肝行气，活血止痛，清热利湿的作用，通过临床观察，

疗效确切, 能够明显改善患者临床症状。诸药分工明确, 多靶点协同对应慢性前列腺炎“湿热-瘀阻-气滞”病机。

本研究通过分子对接证实乌药-延胡索-川楝子等9味药材的5种代表性活性成分(柚皮素、槲皮素、表儿茶素、黄连素、荷包牡丹碱)可与慢性前列腺炎相关的六个关键靶点(ESR1、AKT1、MAPK3、JUN、TP53、FOS)形成稳定复合物, 结合能大部分 $\leq -5.0\text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。研究结论认为, 前泌通片通过多成分、多靶点、多通路的方式, 在抑制血管生成、调节细胞凋亡、纠正代谢紊乱等方面发挥作用, 从而治疗慢性前列腺炎。并从分子层面系统性地预测了前泌通片治疗慢性前列腺炎的“活性成分-作用靶点-信号通路”网络, 为阐释其“多靶点、整体调节”的特点提供了科学假设和分子生物学依据。通过网络药理学研究了前泌通片对慢性前列腺炎的潜在影响, 指导建立从分子互作验证的研究体系, 为后续深入探索奠定了基础。

本研究仍存在一定局限, 尚需建立CP大鼠模型等更多体内外实验, 进一步验证“代表成分-代表靶点-表型”因果关系, 完成“网络预测-结构验证-功能阐释”全链条闭环。后续研究可引入多组学手段, 从整体水平进一步阐明前泌通片在慢性前列腺炎中的干预机制, 为其临床应用和新药开发提供更充分的理论依据。

参考文献

- [1] 张敏建, 宾彬, 商学军, 邓庶民, 王万春, 周少虎, 等. 慢性前列腺炎中西医结合诊疗专家共识[J]. 中国中西医结合杂志, 2015, 35(8): 933-941.
- [2] 米华, 陈凯, 莫曾南. 中国慢性前列腺炎的流行病学特征[J]. 中华男科学杂志, 2012, 18(7): 579-582.
- [3] 张敏建, 常德贵, 宾彬, 郭军, 金保方, 李彦锋. 慢性前列腺炎中西医结合诊疗指南[J]. 中国男科学杂志, 2023, 37(1): 3-17.
- [4] 俞旭君, 高庆和. 慢性前列腺炎中西医结合多学科诊疗指南[J]. 中华男科学杂志, 2020, 26(4): 369-376.
- [5] 慢性前列腺炎/慢性盆腔疼痛综合征诊疗指南[J]. 中华男科学杂志, 2022, 28(6): 544-559.
- [6] 宁克勤, 吉庆. 慢性盆腔疼痛综合征中医辨治要略[J]. 江苏中医药, 2010, 42(9): 57-58.
- [7] 李岩坤. 基于《中华医典》探讨慢性前列腺炎的用药规律及作用机制研究[D]: [硕士学位论文]. 南宁: 广西中医药大学, 2025.
- [8] 李海松, 王彬, 赵冰. 慢性前列腺炎中医诊治专家共识[J]. 北京中医药, 2015, 34(5): 412-415.
- [9] 李广森, 常德贵, 张培海, 蔡剑, 董润标, 毕明帅, 等. 前泌通片对大鼠慢性非细菌性前列腺炎的治疗作用机制研究[J]. 中国男科学杂志, 2016, 30(6): 15-19.
- [10] 李曰庆. 慢性前列腺炎中医诊疗指南[J]. 中华男科学杂志, 2025, 31(11): 1038-1045.
- [11] 杨文翠, 于金倩, 刘双, 等. 乌药化学成分及药理作用研究进展[J]. 中成药, 2023, 45(7): 2300-2307.
- [12] 陈斯. 延胡索化学成分和药理作用研究进展[J]. 中医药信息, 2021, 38(7): 78-82.
- [13] 郑加梅, 尚明越, 王嘉乐, 等. 木香的化学成分、药理作用、临床应用研究进展及质量标志物预测[J]. 中草药, 2022, 53(13): 4198-4213.
- [14] 刘龙婵, 王星宇, 李林楠, 等. 青皮与陈皮化学成分及分析方法研究进展[J]. 中国中药杂志, 2022, 47(11): 2866-2879.
- [15] 蒋中二, 李志青, 候鹏霞, 等. 槟榔中的主要活性物质及其生理功能研究进展[J]. 动物营养学报, 2025, 37(3): 1527-1538.
- [16] 张雨, 范蒙蒙, 朱建光, 等. 川楝子化学成分、药理及毒理研究进展[J]. 中华中医药学刊, 2023, 41(12): 218-226.
- [17] 王宝才, 李俊江, 杨小源, 等. 黄柏药对的配伍机理与药理作用研究进展[J]. 甘肃科技纵横, 2023, 52(12): 87-92.