

中国药学会系列期刊

ISSN 1007-7693

CN 33-1210/R

# 中国现代应用药学

ZHONGGUO XIANDAI YINGYONG YAOXUE

Chinese Journal of Modern Applied Pharmacy

全国中文核心期刊 中国科技核心期刊 中国科学引文数据库来源期刊

“数智药学”专刊



ISSN 1007-7693



9 771007 769221

中国药学会

CHINESE PHARMACEUTICAL ASSOCIATION

科学出版社

Science Press

21

2022年11月

第39卷

Vol.39 No.21

2022年11月 第39卷第21期

半月刊

1984年10月创刊



ZHONGGUO XIANDAI YINGYONG YAOXUE

**主管单位** 中国科学技术协会

**主办单位** 中国药学会

**主 编** 郑裕国

**社 长** 洪利娅

**编辑** 《中国现代应用药学》编辑委员会  
(杭州市滨江区平乐街325号  
浙江省食品药品检验研究院内,  
310052)

**出版** 《中国现代应用药学》杂志社

**合作出版** 科学出版社

**电话:** (0571)87297398

**电子邮箱:** xdyd@chinajournal.net.cn

**网址:** www.chinjmap.com

**印刷:** 杭州嘉业印务有限公司

**发行范围:** 公开发行

**国内订阅:** 《中国现代应用药学》杂志社

**国外发行:** 中国国际图书贸易集团公司  
(北京市海淀区车公庄西路  
35号, 100048)

**国外代号:** M4698

第39卷第21期 2022年11月15日出版

ISSN 1007-7693 CN 33-1210/R

国内定价: 全年960.00元 每期40.00元

广告发布登记证号:

杭高新(滨)市管广发G-001号

**Directed by**

China Association for Science and Technology

**Sponsored by**

Chinese Pharmaceutical Association

**Editor-in-Chief** ZHENG Yuguo

**Proprietor** HONG Liya

**Edited by**

Editorial Board of Chinese Journal of Modern Applied Pharmacy  
(Building of Zhejiang Institute for Food and Drug Control, No. 325  
Pingle Street, Binjiang District, Hangzhou 310052, China)

**Published by**

Chinese Journal of Modern Applied Pharmacy Publishing House

**Co-Published by**

Science Press

**Tel:** (0571)87297398

**E-mail:** xdyd@chinajournal.net.cn

**http://**www.chinjmap.com

**Printed by**

Hangzhou JiaYe Printing Co., Ltd.

**Distribution**

Public Distribution

**Domestic Subscription**

Chinese Journal of Modern Applied Pharmacy Publishing House

**Overseas Distributor**

China International Book Trading Corporation

(No.35 Chegongzhuangxi Road, Haidian District, Beijing 100048,  
China)

**Code No.** M4698

2022 Vol.39 No.21

**Publication Date:** 2022, November 15

ISSN 1007-7693 CN 33-1210/R

《中国现代应用药学》编辑委员会(第九届)

顾问:梁文权

名誉主编:李兰娟

主编:郑裕国

常务副主编:洪利娅

副主编(按姓氏拼音排序):

高建青 顾臻 贺争鸣 黄萍  
李范珠 李绍平 梁广 柳志强  
卢晓阳 吕圭源 阮叶萍 邵蓉  
屠鹏飞 王佑春 文爱东 杨波  
杨苏蓓 于军 曾苏 张福利  
张幸国 周建平 朱金林

编委(按姓氏拼音排序,\*为常务编委):

陈碧莲\* 陈桂良\* 陈红梅\* 陈枢青\*  
陈素红\* 陈永正 陈悦 程国华  
戴海斌\* 狄斌 董作军 范晓辉\*  
方红梅\* 方罗 方晴霞 傅旭春  
高向东 葛卫红 郭建明 郭瑞臣\*  
郭晓迪 韩博 韩钢 韩旻  
韩奇 何俏军 侯雪梅 胡昌勤\*  
胡巧红 胡英 黄进宇 黄巧玲\*  
黄永焯 黄真 菅凌燕\* 江波  
姜赛平 蒋健敏\* 金岩 匡荣  
李功华\* 李明焱 梁锦锋 林厚文  
林能明\* 刘茂柏 刘滔 柳文媛  
卢红阳 罗文华 马双成\* 马忠俊  
苗明三\* 缪静 那仁满都拉\* 潘远江\*  
秦路平\* 邱利焱 瞿海斌 茹仁萍\*  
申屠建中 盛荣 施菁 寿旦  
宋剑锋 孙德清 陶巧凤\* 滕乐生  
王长连\* 王刚 王建 王建平\*  
王临润\* 王溶溶 王如伟 王晓颖  
王泽民\* 王志安 魏炜 魏晓红  
吴斌 吴人照 吴永江 夏焕章  
向铮 肖伟烈 谢升阳 徐颖颖\*  
徐云根 许东航 严伟 颜小锋\*  
燕茹 杨兵勋 杨峰 杨江丰  
杨明华 杨伟峰 叶益萍 应美丹  
应雪 余露山 袁弘 曾茂法  
詹金彪 张庆生\* 张水利 张信岳  
张秀华\* 张志清\* 张尊建\* 赵华军  
赵梦丹 赵青威\* 赵瑞芝 赵维良  
赵孝斌 赵永星\* 郑彩虹\* 郑高利\*  
郑金琪 郑仁朝 周华 周萍  
周权\* 周长新 朱峰 朱炯  
朱婉萍

目次

·智慧药事管理·

数智信息推进药学改革,药事服务提高医疗质量  
董曦浩,姜赛平,卢晓阳,等(2717)

药品智慧监管

浙江省药品安全智慧监管“黑匣子”应用建设研究  
徐润龙,陈仲永,吴晖,等(2721)

浙江数字化中药标本平台建设探索与实践  
陆静娴,陈浩,戚雁飞,等(2726)

大数据战略下医药产业高质量发展协同共治路径研究——  
以浙江省医药产业数字化转型与监管为视角  
丁静,茅鸯对(2732)

数智药房建设与管理、数字技术在临床试验中的应用  
未来医院药物管理新模式的探索——数智药学大脑建设与实践经验  
陈菲菲,董曦浩,滕天立,等(2738)

一项基于中国医院智慧药房建设现状的横断面研究  
闫盈盈,宋再伟,杨丽,等(2744)

数据与知识联合驱动的智慧药学服务体系构建及系统实践  
吴非,沈爱宗,蔡琼,等(2751)

智慧药房信息管理系统在门诊发药窗口设置中的应用  
史香芬,卢晓静,张旭峰,等(2757)

智能化建设在细胞毒性药物集中调配中的应用与实践  
华小黎,辜明,王旭,等(2762)

数字化药房建设与智慧调剂系统的应用与实践  
陈成群,任清华,王松,等(2770)

品管圈加强智慧型手术药房麻醉药品管理的实践  
钱赛楠,郭剑浩,郭舒文,等(2775)

基于中心化管理的药物临床试验药房信息化平台设计与实现  
黄冰琳,方令平,郭锦华,等(2781)

远程多媒体电子知情同意的知晓率和满意度模拟调研  
唐坚,王月圆,陈钱,等(2787)

·智慧药物研究·  
数智药学推进智慧药物研究创新发展  
罗永超,朱峰,曾苏(2793)

药物与靶点相互作用研究、计算机辅助药物设计  
基于人工智能的药物-靶点相互作用预测  
杨朔,王洁,张梦婷,等(2797)

分子动力学模拟和机器学习结合在药物设计领域的应用  
谷书凯,王哲,侯廷军,等(2804)

药物-靶点相互作用预测中的方法、数据及软件的发展现状  
牛步盈,孙菁菁,石江珊,等(2809)

基于先验知识的分子表征多任务深度卷积神经网络的小样本激酶抑制剂  
活性预测  
霍文博,谭英,申万祥,等(2819)

计算机辅助金属酶靶向药物发现的研究进展  
余俊霖,李国波(2828)

计算机辅助预测EGFR突变的非小细胞肺癌药物敏感性的研究进展  
石禹龙,谢冬,徐志建,等(2834)

基于分子理化性质特征的小样本G蛋白偶联受体靶点结合活性预测的  
深度学习模型  
李因,谭英(2842)

抗体药物发现、合成路线设计与分子动力学研究  
从新冠Spike蛋白抗原抗体复合物探究表位与抗体的空间识别关系  
王彩琴,毛甜甜,裘天颐,等(2850)

人工智能技术在化学反应预测中的应用  
孔祥泰,张润泽,张玮,等(2856)

人参皂苷Rk1修饰的伊曲康唑新型脂质体的构建及抗肿瘤活性初步研究  
钟欣,崔雅琦,汪小又,等(2865)

针对低数据量COVID-19靶点的活性预测深度学习模型  
梁书然,霍文博,申万祥,等(2872)

肿瘤新抗原预测方法研究进展  
吴静成,陈枢青,周展(2879)

三重再摄取抑制剂从单胺转运体解离的拉伸分子动力学模拟研究  
涂高,姚小军,薛伟伟(2887)

不同16S rRNA片段长度在微生物鉴定中鉴定能力的比较研究  
王美霞,李宏,李珏,等(2894)

《中国现代应用药学》编辑委员会(第九届)

CONTENTS IN BRIEF

特约编委(按姓氏拼音排序):

蔡宇 陈丹菲 董晓武 龚行楚  
郭建军 郭勇 何昱 贾飞  
蒋国军 蒋利和 李杨 李沛波  
李文龙 李迎迎 刘斌 骆松梅  
吕小琴 倪韶青 史天陆 寿旗扬  
宋沁馨 王海钠 王娜妮 王俏  
王卓 吴斌 吴耀东 辛传伟  
徐全华 杨建宏 应晓英 原永芳  
张博 张得钧 张剑萍 章越凡  
郑英 朱虹 朱建国 朱全红  
朱余兵

第二届青年编辑委员会

主任委员:张翔南

副主任委员(按姓氏拼音排序):

开国银 饶跃峰 阮昊 汤晓玲  
许明哲 姚建标

青年编委(按姓氏拼音排序):

蔡圣 蔡鑫君 曹戟 陈文腾  
陈云雨 程科军 程汝滨 董宇  
杜文婷 杜晓翔 方伟杰 冯瑛  
傅力 甘礼社 高丽娟 洪燕君  
黄凌 简曦昱 姜昕鹏 蒋程  
蒋剑平 金银秀 康玉 柯霞  
李波 李飞 李清林 李新  
李振皓 刘丙进 刘睿 楼燕  
骆翔 毛根祥 毛培江 年华  
潘杰 潘利强 裴宇盛 彭丽华  
彭昕 邵加安 帅棋 孙世光  
孙晓译 谭亲友 王翀 王金朝  
王启钦 王庭璋 王伟影 王新财  
王增 翁勤洁 谢诚 谢升谷  
熊山 熊阳 颜春鲁 羊红玉  
杨波 杨继鸿 杨欣 杨振中  
应茵 俞振伟 翟科峰 张翀  
张建康 张建永 张军民 张立将  
张耀 张轶雯 郑斌 郑小玲  
周建良 周越菡 周展

INTELLIGENT PHARMACY MANAGEMENT

Digital and Intelligence Promoting Pharmaceutical Reform, Pharmaceutical Care Improving Medical Quality ..... DONG Xihao, JIANG Saiping, LU Xiaoyang, et al(2717)

Intelligent Supervision of Drugs

Research on the Construction of the Intelligent Drug Safety Supervision "Black Box" Application in Zhejiang Province... XU Runlong, CHEN Zhongyong, WU Hui, et al(2721)

Exploration and Practice of the Digital Platform of Zhejiang Traditional Chinese Medicines Specimens ..... LU Jingxian, CHEN Hao, QI Yanfei, et al(2726)

Research on the Collaborative Governance Path of High-quality Development of Pharmaceutical Industry Under the Big Data Strategy—From the Perspective of Digital Transformation and Supervision of Pharmaceutical Industry in Zhejiang Province ..... DING Jing, MAO Yangdui(2732)

Construction and Management of Digital Intelligence Pharmacy,

Application of Digital Technology in Clinical Trials

Exploration of the New Model of Drug Administration in the Future Hospital—Construction and Practical Experience of the Digital-intelligent

Pharmaceutical Brain System ..... CHEN Feifei, DONG Xihao, TENG Tianli, et al(2738)

Current Status of Building Intelligent Pharmacy in China: A Cross-sectional Study ..... YAN Yingying, SONG Zaiwei, YANG Li, et al(2744)

Construction and System Practice of Intelligent Pharmaceutical Care System Driven by Data and Knowledge..... WU Fei, SHEN Aizong, CAI Qiong, et al(2751)

Application of Intelligent Pharmacy Information Management System in Setting of Outpatient Dispensing Window... SHI Xiangfen, LU Xiaojing, ZHANG Xufeng, et al(2757)

Application and Practice of Intelligent Technology of Cytotoxic Drugs in Pharmacy Intravenous Admixture Services ..... HUA Xiaoli, GU Ming, WANG Xu, et al(2762)

Application and Practice of Digital Pharmacy Construction and Intelligent Dispensing System ..... CHEN Chengqun, REN Qinghua, WANG Song, et al(2770)

Practice of Strengthening the Management of Narcotic Drugs by Quality Control Circle in Intelligent Surgical Pharmacy ..... QIAN Sainan, GUO Jianhao, GUO Shuwen, et al(2775)

Design and Implementation of Information System for Drug Clinical Trial Pharmacy Based on Centralized Management ..... HUANG Binglin, FANG Lingping, GUO Jinhua, et al(2781)

Simulation Research on Awareness Rate and Satisfaction with Remote Multimedia Electronic Informed Consent ..... TANG Jian, WANG Yueyuan, CHEN Qian, et al(2787)

INTELLIGENT DRUG RESEARCH

Digital and Intelligent Pharmacy Promotes the Innovation Development of Smart Drug Research ..... LUO Yongchao, ZHU Feng, ZENG Su(2793)

Interaction Between Drugs and Targets, Computer Aided Drug Design

Drug-target Interaction Prediction with Artificial Intelligence ..... YANG Shuo, WANG Jie, ZHANG Mengting, et al(2797)

Application of Molecular Dynamics Simulations Meet Machine Learning in Structure-based Drug Design ..... GU Shukai, WANG Zhe, HOU Tingjun, et al(2804)

Development of Methods, Data and Software for Drug Target Interaction Prediction ..... NIU Buyang, SUN Jingjing, SHI Jiangshan, et al(2809)

Low Sample Kinase Inhibitory Activity Prediction Capability of Multi-task Deep Convolutional Neural Networks Under Knowledge-based Molecular Representations ..... HUO Wenbo, TAN Ying, SHEN Wanxiang, et al(2819)

Advances in Computer-aided Metalloenzyme-targeted Drug Discovery ..... YU Junlin, LI Guobo(2828)

Research Progress of Computer-aided Drug Sensitivity Prediction for Non-small Cell Lung Cancer with EGFR Mutation ..... SHI Yulong, XIE Dong, XU Zhijian, et al(2834)

Binding Activity Prediction of the Low-data G-protein Coupled Receptors Targets by Deep Learning of Knowledge-based Molecular Representations ..... LI Yin, TAN Ying(2842)

Therapeutic Antibody Discovery, Synthetic Route Design and Molecular Dynamics Study

Exploring the Spatial Recognition Relationship Between Epitopes and Antibodies from SARS-CoV-2 Spike Protein-antibody Complexes ..... WANG Caicui, MAO Tianian, QIU Tianyi, et al(2850)

Application of Artificial Intelligence in Chemical Reaction Prediction ..... KONG Xiangtai, ZHANG Runze, ZHANG Wei, et al(2856)

Construction of a Novel Itraconazole Liposome Modified by Ginsenoside Rk1 and Preliminary Studies on Its Antitumor Activity ..... ZHONG Xin, CUI Yaqi, WANG Xiaoyou, et al(2865)

Deep Learning Models for Activity Prediction Against the Low-data COVID-19 Targets ..... LIANG Shuran, HUO Wenbo, SHEN Wanxiang, et al(2872)

Advances in Tumor Neoantigen Prediction Methods ..... WU Jingcheng, CHEN Shuqing, ZHOU Zhan(2879)

Study on the Unbinding of Triple Reuptake Inhibitor from Monoamine Transporters by Steered Molecular Dynamics Simulations..... TU Gao, YAO Xiaojun, XUE Weiwei(2887)

Comparative Study on the Identification Ability of Different Length of 16S rRNA Fragments in Microbial Identification ..... WANG Meixia, LI Hong, LI Jue, et al(2894)



# 二十载正年少 共富路药先行



## 热烈庆祝

浙江省医学会临床药学分会  
浙江省医院药事管理质控中心  
成立二十周年