



In Silico Assessment of Mode of Action of Radix *Salvia miltiorrhiza* in Cardiovascular Diseases

Chen JIANXIAN¹, Saima DASTGEER², Abubakr A. SAAD^{3*},
Muhammad H.H.B. ASAD⁴ & Ghulam MURTAZA⁵

¹ School of Economics, Capital University of Economics and Business, Beijing, China

² Department of Psychology, Government College of Home Economics, Multan, Pakistan

³ Department of Cardiology, Dera Gahzi Khan Medical College and Teaching Hospital,
Dera Gahzi Khan, Pakistan

⁴ Department of Pharmacy, COMSATS University Islamabad,
Abbottabad Campus, Abbottabad 22060, Pakistan

⁵ Department of Pharmacy, COMSATS University Islamabad, Lahore Campus, Lahore 54000, Pakistan

SUMMARY. To investigate the specific targets along with the pharmacological action mechanisms of *Salvia miltiorrhiza* against cardiovascular diseases (CVD). TCMSP and pieces of literature were searched to develop the ingredient-target database for Radix *Salvia miltiorrhiza* followed by the selection of CVD-related targets. The link between these targets was established by the STITCH database and by designing a network through gene ontology (GO) enrichment analysis, ClueGO and its plugin. As a result of the literature search, 202 chemical constituents and 2566 protein targets of these chemical constituents were enlisted. After careful screening, 41 protein targets were found to have biological activity against CVD. Ultimately, 214 GO terms were found by analysis of gene functional annotation clusters and the abundance value of these targets. The majority of these were linked with CVD. Several numbers of protein targets such as ESR1, CTNNB1, and MAPK14 were served as a functional moiety for Radix *Salviae miltiorrhiza* to treat CVD. This study aids to perceive the molecular mechanism and the clinical interpretations of Radix *Salviae miltiorrhiza* in CVD. The following are the signaling mechanisms of The given results aids to perceive the molecular mechanism and the clinical interpretations of Radix *Salviae miltiorrhiza* such as Histone H3-K9 methylation, DNA damage response signal transduction by p53 class mediator resulting in cell cycle arrest, and embryonic skeletal limb joint morphogenesis signaling pathway.

RESUMEN. El objetivo fue el de investigar los objetivos específicos junto con los mecanismos de acción farmacológica de *Salvia miltiorrhiza* contra las enfermedades cardiovasculares (ECV). Se realizaron búsquedas en TCMSP y en la literatura para desarrollar la base de datos de ingredientes objetivo para raíz de *Salvia miltiorrhiza*, seguido de la selección de objetivos relacionados con ECV. El enlace entre estos objetivos fue establecido por la base de datos STITCH y diseñando una red a través del análisis de enriquecimiento de ontología genética (GO), ClueGO y su complemento. Como resultado de la búsqueda bibliográfica, se enlistaron 202 constituyentes químicos y 2566 objetivos proteicos de estos constituyentes químicos. Después de un examen cuidadoso, se descubrió que 41 dianas proteicas tienen actividad biológica contra la ECV. Finalmente, se encontraron 214 términos GO mediante el análisis de grupos de anotación funcional de genes y el valor de abundancia de estos objetivos. La mayoría de estos estaban vinculados con ECV. Varios números de dianas proteicas como ESR1, CTNNB1 y MAPK14 se sirvieron como un resto funcional de raíz de *Salviae miltiorrhiza* para tratar ECV. Este estudio ayuda a percibir el mecanismo molecular y las interpretaciones clínicas de raíz de *Salviae miltiorrhiza* en ECV. Los siguientes son los mecanismos de señalización de Los resultados obtenidos ayudan a percibir el mecanismo molecular y las interpretaciones clínicas de raíz de *Salviae miltiorrhiza*, como la metilación de la histona H3-K9, la transducción de la señal de respuesta al daño del ADN por mediador de clase p53 que resulta en la detención del ciclo celular y el esqueleto embrionario. vía de señalización de morfogénesis de la articulación del miembro.

KEY WORDS: circulatory system, ClueGO, drug targets, gene ontology, pharmacological action, signaling pathways, STITCH database, TCMSP, traditional chinese medicines..

* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: cardiologistmic@gmail.com