QB 华中农业大学章文刘世超团队综述基于深度学习的药物-药物相互作用预测前沿进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/27708.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

QB
华中农业大
学章文刘世超团队综述基于深度学习的药物-药物相互作用预测前沿进展。论文标题： Deep learning for drug-drug interaction prediction: A comprehensive review

期刊：Quantitative Biology

作者：Xinyue Li, Zhankun Xiong, Wen Zhang, Shichao Liu

发表时间：13 February 2024

DOI：https://doi.org/10.1002/qub2.32

微信链接：点击此处阅读微信文章

药物-药物相互作用(DDI)预测是药物安全性研究的关键任务，识别潜在的DDI有助于探索联合治疗背后的机制。传统的DDI湿化学实验既繁琐又耗时，限制了DDI预测的效率。因此，开发高效的计算方法来检测药物间的相互作用尤为重要。随着深度学习的发展，学者们提出了众多基于深度学习的DDI预测计算模型。与传统机器学习相比，深度学习可以显著提高DDI预测性能，能够扩展到大规模数据集，并接受多种数据类型作为输入，从而使DDI预测更加高效和准确。

近期，华中农业大学章文/刘世超课题组在Quantitative Biology期刊发表了一篇题目名为Deep learning for drug‐drug interaction prediction: A comprehensive review的综述文章。文章对基于深度学习的药物-药物相互作用预测研究进展进行了回顾，包括基于传统神经网络的方法、基于图神经网络的方法、基于知识图谱嵌入的方法和基于多模态学习的方法，并指出了当前研究面临的挑战与未来可能的研究方向。

Received: 30 December 2022 | Accepted: 30 June 2023

DOI: 10.1002/qub2.32

REVIEW ARTICLE

Quantitative Biology
Open Access

Deep learning for drug-drug interaction prediction: A comprehensive review

Xinyue Li | Zhankun Xiong | Wen Zhang | Shichao Liu

全文概要

本文综述了基于深度学习的药物-药物相互作用预测研究进展。首先，文章概述了药物互作的原理及研究现状（图1）；接着介绍了四类主流的基于深度学习的药物-
药物相互作用预测方法；最后总结了当前研究面临的挑战，同时指出了未来可能的研究方向。

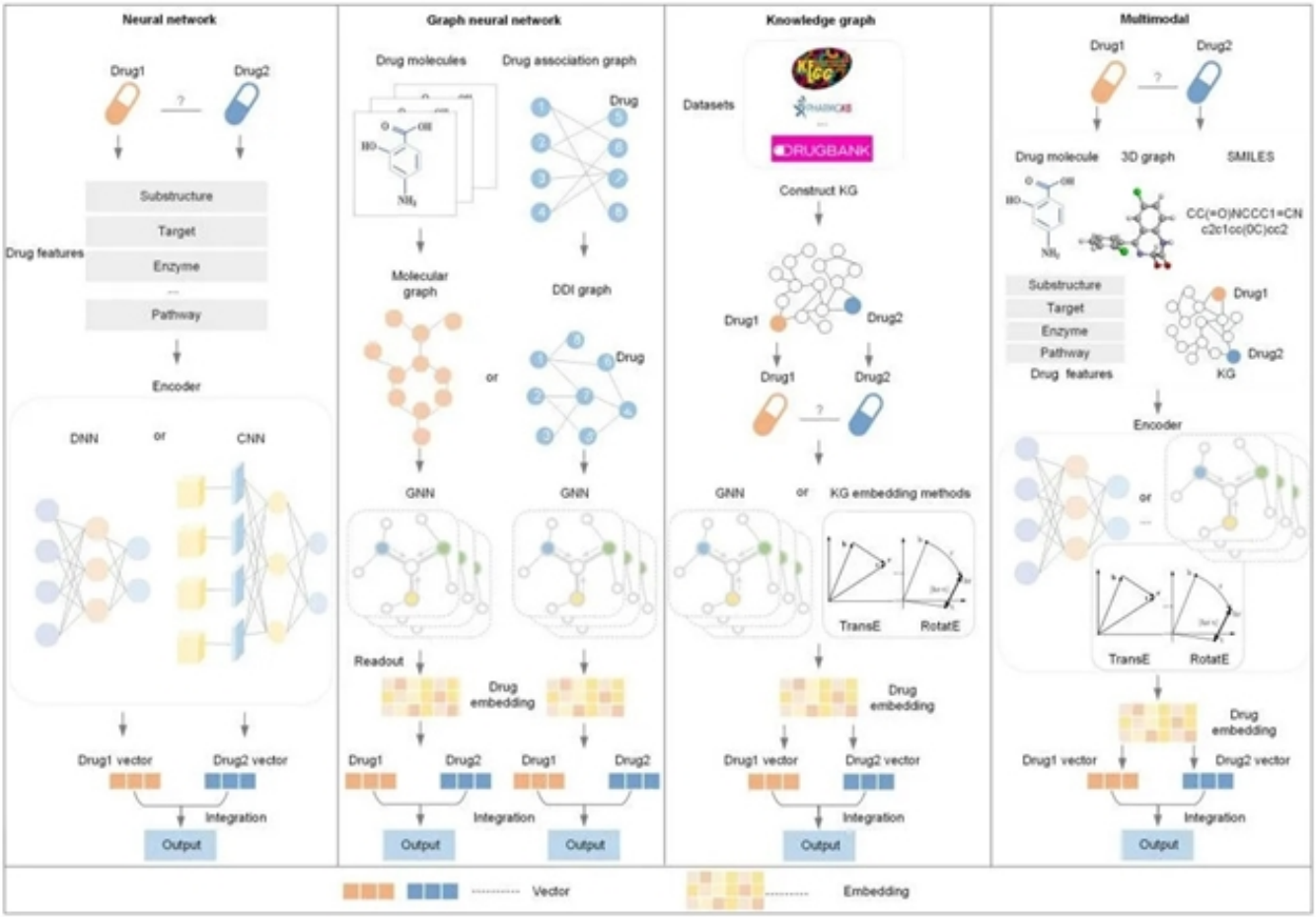


图1 四种基于深度学习的DDI预测方法总体工作流程

1. 基于传统神经网络的方法

传统的神经网络模仿自然界的生物神经网络，由许多神经元以复杂的方式连接而成，一般由输入层、隐藏层和输出层组成。在DDI预测中，通常在将药物输入神经网络之前对其进行变换或特征提取。

2. 基于图神经网络的方法

根据输入数据的类型，将基于图神经网络（GNN）的方法分为两类：基于分子图的GNN和基于关联图的GNN。基于分子图的GNN使用药物分子图作为模型输入，并通过RDKit将药物SMILES序列表示转换为分子图。基于关联图的GNN模型输入一般为DDI图，其中包含药物、DDI或副作用等相关信息。大多数现有的方法都是基于分子图，但是基于关联图的方法可以考虑药物分子结构之外的特性，从而进行更全面的DDI预测。

3. 基于知识图谱嵌入的方法

知识图谱（KG）是多关系数据的图结构表示，包含丰富的语义信息和知识事实。KG以三元组形式存储实体及其关系（头实体、关系、尾实体），例如，（DRUG1，关系类型，DRUG2），其中头实体（DRUG1）通过谓词关系（关系类型）连接到尾实体（DRUG2）。通常用于DDI预测的数据库，如DrugBank和KEGG，在很大程度上是作为药物信息网络构建的，因此可以将其描述为KGs。通过KG可以获得更多的生物关联信息，用于DDI预预测。现有的KG嵌入方法可分为三类:基于翻译的方法、基于张量分解的方法和基于神经网络的方法。

4. 基于多模态学习的方法

多模态深度学习将多种药物特征作为不同模态，并将它们结合起来进行DDI预测。药物具有多种与其有关联的实体特征，如靶标、酶和作用通路等。同时，药物具有多种维度的结构特征，如一维SMILES序列、二维分子图、三维构象图等。考虑多种特征可以在一定程度上获得较好的DDI预测性能。

5. 现存挑战与可能的研究方向

尽管深度学习在DDI预测领域取得了显著进展，但仍面临数据稀疏性、罕见DDI事件和模型可解释性不足等挑战。为克服这些限制，未来的研究可以探索利用对抗性学习来优化数据集，利用其他生物网络作为补充数据源以缓解网络稀疏性问题；引入小样本学习和零次学习来处理罕见DDI事件；开发更具可解释性的DDI预测模型，以提高模型的准确性、可靠性和可信度。

QB期刊介绍

Quantitative Biology （QB）期刊是由清华大学、北京大学、高教出版社联合创办的全英文学术期刊。QB主要刊登生物信息学、计算生物学、系统生物学、理论生物学和合成生物学的最新研究成果和前沿进展，并为生命科学与计算机、数学、物理等交叉研究领域打造一个学术水平高、可读性强、具有全球影响力的交叉学科期刊品牌。

QB期刊目前已被ESCI, Scopus,
CSCD等国内外重要数据库收录。Citescore2021=4.6，2023年将获得第一个影响因子（IF）。



《前沿》系列英文学术期刊

由教育部主管、高等教育出版社主办的《前沿》（Frontiers）系列英文学术期刊，于2006年正式创刊，以网络版和印刷版向全球发行。系列期刊包括基础科学、生命科学、工程技术和人文社会科学四个主题，是我国覆盖学科最广泛的英文学术期刊群，其中12种被SCI收录，其他也被AHCI、Ei、MEDLINE或相应学科国际权威检索系统收录，具有一定的国际学术影响力。系列期刊采用在线优先出版方式，保证文章以最快速度发表。

中国学术前沿期刊网

http://journal.hep.com.cn



来源：Quantitative Biology

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发