QB GCARDTI：基于混合图学习机制的药物-靶标相互作用预测模型

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/27996.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 GCARDTI：基于混合图学习机制的药物-靶标相互作用预测模型。论文标题： GCARDTI: Drug – target interaction prediction based on a hybrid mechanism in drug SELFIES

期刊：Quantitative Biology

作者：Yinfei Feng, Yuanyuan Zhang, Zengqian Deng, Mimi Xiong

发表时间：01 April 2024

DOI： https://doi.org/10.1002/qub2.39

微信链接：点击此处阅读微信文章

药物与靶标之间相互作用（Drug-Target Interactions，DTIs）的鉴定，是药物研发与设计流程中的核心环节，对于缩小候选药物分子的筛选范围具有至关重要的作用。大规模的体外和体内实验不仅成本高昂且耗时较长，同时生物实验在探索DTIs时具有一定的盲目性。然而，传统的计算方法，如随机森林（Random Forest）等学习模型，虽然算法相对简单，但难以提取深层次的特征信息。近年来，深度学习模型的引入为DTIs预测领域的研究带来了突破性的进展。

近期，青岛理工大学张媛媛课题组在Quantitative Biology期刊发表了一篇题目名为GCARDTI: Drug-Target Interaction prediction based on the hybrid mechanism in drug SELFIES 的研究性文章。针对目前面临的两大问题，1.药物分子结构对应度不高；2.如何更好的提取出药物和靶标空间的特征信息；提出混合图学习机制的GCARDTI模型，并指出当前的不足之处以及未来的研究方向。

Received: 25 August 2023 | Accepted: 3 October 2023
DOI: 10.1002/qub2.39

RESEARCH ARTICLE

Quantitative Biology
Open Access

GCARDTI: Drug–target interaction prediction based on a hybrid mechanism in drug SELFIES

Yinfei Feng[1] | Yuanyuan Zhang[1] | Zengqian Deng[1] | Mimi Xiong[2]

全文概要

本文简述了当前深度学习研究所面临的两大挑战。首先，多数药物靶标研究在药物分子结构信息的探索上尚显不足，以往的药物SMILES与有效药物分子的匹配度有待提升。其次，如何更有效地挖掘药物与靶标之间的潜在关联，亦是一大难题。本文提出了基于混合图学习机制的药物-靶标相互作用预测模型，然后对模型进行性能分析、消融实验以及案例分析，并取得了较好的结果。

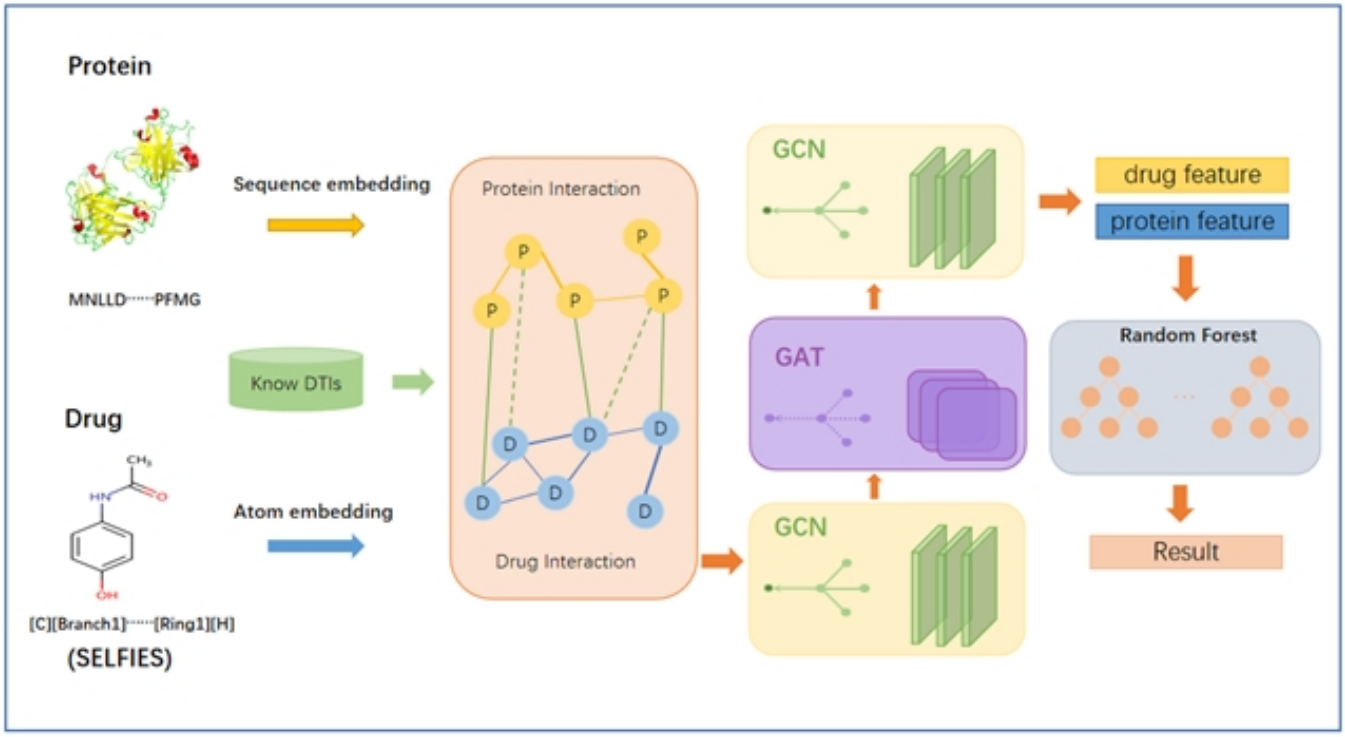


图1. GCARDTI模型框架

图1展示了GCARDTI模型框架。首先将药物分子和靶标序列通过原子嵌入和序列嵌入，然后与已知的DTIs进行构建异构网络；将其输入到带有GCN和GAT的混合机制之中进行训练，得到药物和靶标的特征；最后输入到随机森林进行得分预测。通过与6种流行方法在两个不同的数据集上进行比较，GCARDTI模型具有较高的性能，如图2。

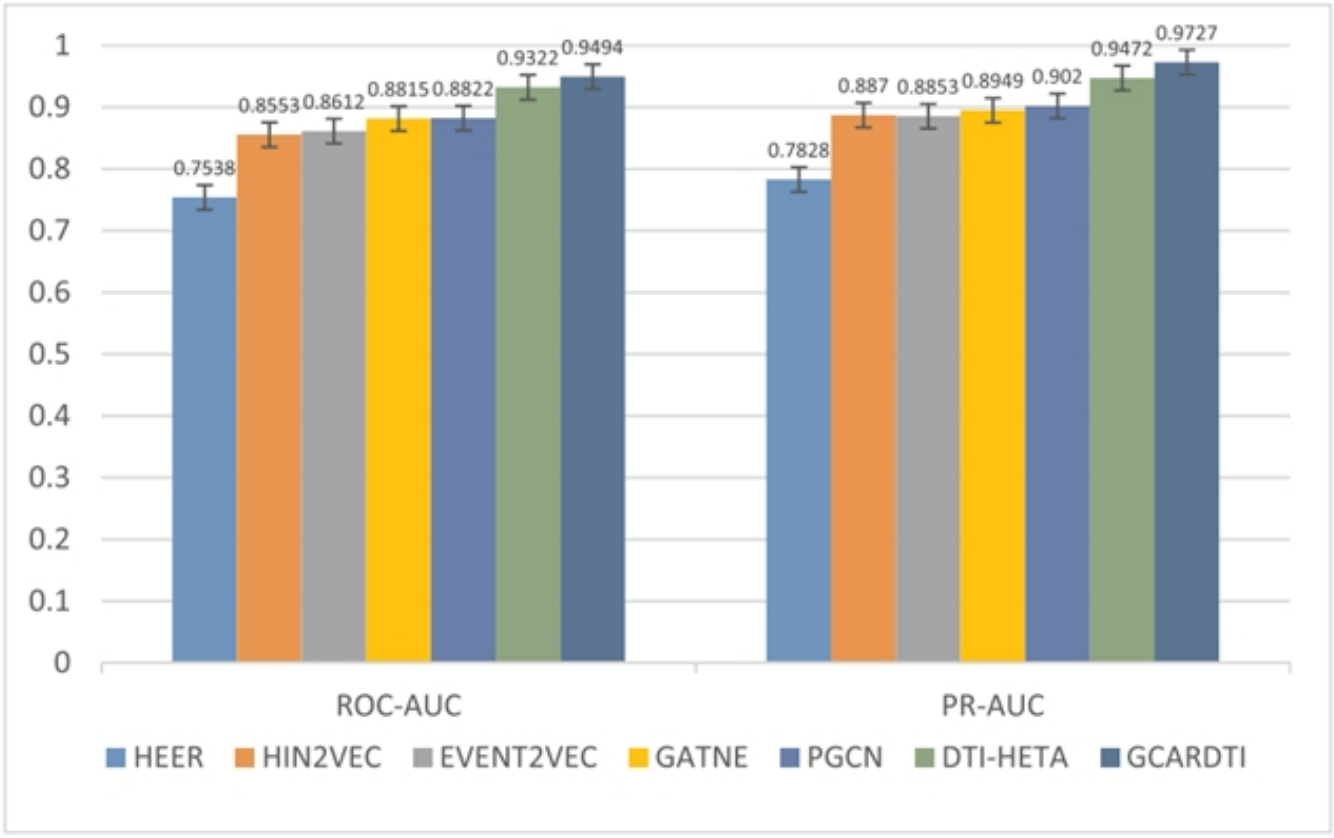


图2 GCARDTI方法与其他六种方法ROC - AUC和PR - AUC预测值的比较。

未来工作与展望

本文提出的GCARDTI模型，运用嵌入字符串SELFIES以及使用混合图学习机制取得了不错的效果，促进药物的研发；虽然模型具有较大的潜力，但需大量预训练以发挥其特性。展望未来，工作重心将不仅在于整合异构网络的多源信息，还需融入高阶元路径信息。高阶元路径信息蕴含药物与靶标间的高阶关联，挖掘这些关联有助于丰富特征信息，提升模型预测与泛化性能，从而更精准地预测DTIs。

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