

---

# QB 使用药物-药物相互作用测量药物相似性

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/29597.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 使用药物-药物相互作用测量药物相似性。论文标题：Measuring drug similarity using drug – drug interactions

期刊：Quantitative Biology

作者：Ji Lv, Guixia Liu, Yuan Ju, Houhou Huang, Ying Sun

发表时间：15 Jun 2024

DOI：10.1002/qub2.38

微信链接：[点击此处阅读微信文章](#)

药物相似性是药物研发的核心概念之一。根据药物相似性，可以得到与给定药物相似的集合，进而对作用机制未知的药物进行功能标注，以及预测药物相互作用（drug-drug interaction, DDI）等。随着化学、生物学、药学等学科的飞速发展，我们可以利用药物的化学结构、物理化学性质、作用机制、ATC编码等多种药物信息计算药物的相似性。然而，这些方法大多专注于药物自身的特性。

近期，吉林大学刘桂霞教授课题组在Quantitative Biology期刊发表了一篇题目名为Measuring drug similarity using drug – drug interactions的论文。文章提出了一种在DDI网络中直接计算药物相似性的方法，并展示了其潜在应用。

---

Received: 17 April 2023 | Accepted: 13 August 2023

DOI: 10.1002/qub2.38

RESEARCH ARTICLE



## Measuring drug similarity using drug–drug interactions

Ji Lv<sup>1,2</sup> | Guixia Liu<sup>1,2</sup> | Yuan Ju<sup>3</sup> | Houhou Huang<sup>4</sup> | Ying Sun<sup>5</sup>

## 全文概要

药物相似性是药物发现中的一个基本概念，目前已经开发了各种方法来量化药物相似性。但这些方法主要依赖于药物特征。本文则基于药物网络结构本身，提出了一种基于药物-药物相互作用网络的药物相似性度量方法。通过将其与无监督学习和半监督学习方法结合，探索了这种方法的潜在应用。

在无符号网络中，两个节点的共同邻居的数据越多，这两个节点就越相似。在图1A中， $v_1$ 和 $v_3$ 共享两个邻居节点（ $v_2$ 和 $v_4$ ），因此这两个节点在结构上是等价的。然而，在DDI网络（即符号网络）中，药物相互作用可能是协同的，也可能是拮抗的。如图1B所示， $v_1$ 和 $v_3$ 也具有两个相同的邻居节点（ $v_2$ 和 $v_4$ ），但其相互作用（边类型）不同。因此， $v_1$ 和 $v_3$ 在符号网络中不相似。

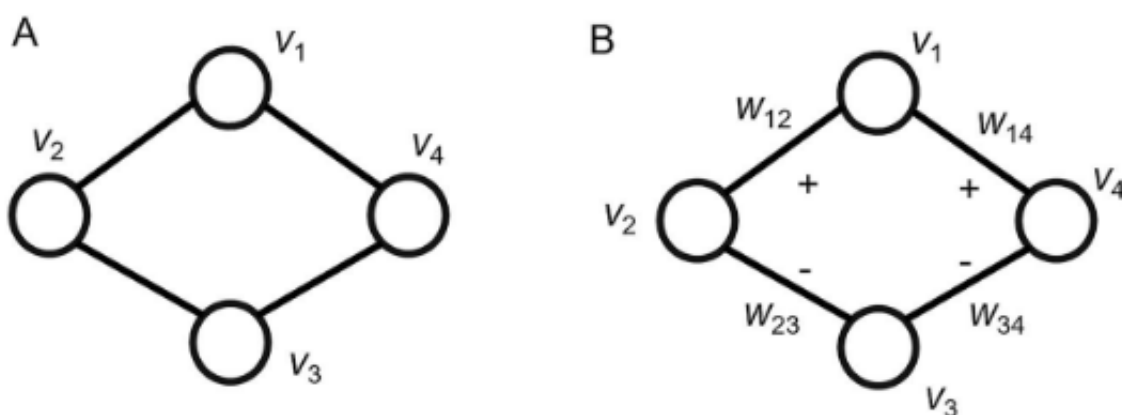


图1. (A) 无符号网络；(B) 符号网络。

为了解决该问题，文章提出了一种在符号网络中计算节点相似性的方法。一方面，该相似性结合 t-SNE 算法以及层次聚类算法，可以实现 DDI 网络的聚类（图2）。聚类后的 DDI 网络表现出良好的单色性，即组与组之间要么都是协同作用，要么都是拮抗作用。并且，处于同一个组中的药物往往具有相似的作用机制。因此，该方法可以对作用机制未知的药物进行功能标注。

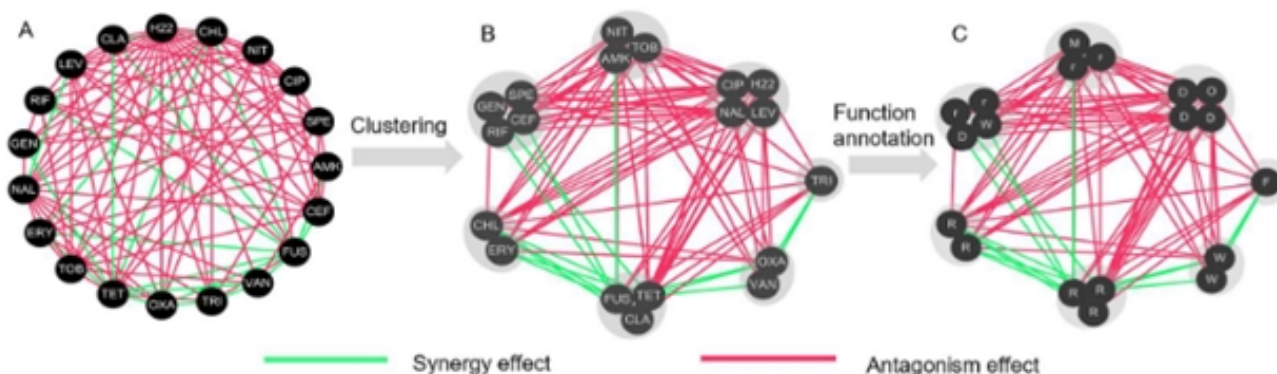


图2. (A) 药物相互作用网络；(B) 聚类后的药物相互作用网络；(C) 功能标注

另一方面，该相似性可以用于构建图半监督模型中的亲和矩阵，从而预测未知的药物相互作用。

