

FCS 文章精要：滑铁卢大学&中南大学——机器学习在药物副作用预测中的应用：数据库、方法和挑战

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/30692.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！

FCS 文章精要：滑铁卢大学&中南大学——机器学习在药物副作用预测中的应用：数据库、方法和挑战。论文标题：Application of machine learning in drug side effect prediction: databases, methods, and challenges

期刊：Frontiers of Computer Science

作者：Haochen ZHAO, Jian ZHONG, Xiao LIANG, Chenliang XIE, Shaokai WANG

发表时间：02 Apr 2024

DOI：10.1007/s11704-024-31063-0

微信链接：点击此处阅读微信文章

Front. Comput. Sci., 2025, 19(5): 195902
<https://doi.org/10.1007/s11704-024-31063-0>

REVIEW ARTICLE

Application of machine learning in drug side effect prediction: databases, methods, and challenges

Haochen ZHAO^{1,2}, Jian ZHONG^{1,2}, Xiao LIANG^{1,2}, Chenliang XIE^{1,2}, Shaokai WANG (✉)³

1 School of Computer Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China

2 Hunan Provincial Key Lab on Bioinformatics, Central South University, Changsha 410083, China

3 David R. Cheriton School of Computer Science, University of Waterloo,
Waterloo ON N2L 3G1, Canada

引用格式：

Haochen ZHAO, Jian ZHONG, Xiao LIANG, Chenliang XIE, Shaokai WANG. Application of machine

learning in drug side effect prediction: databases, methods, and challenges. Front. Comput. Sci., 2025, 19(5): 195902

阅读原文：



问题概述

针对大多数药物副作用预测相关综述仅涉及对药物副作用关联预测方法的讨论的问题，本文作者撰写了该综述论文。

文章旨在梳理基于机器学习的单一药物和药物相互作用（DDIs）引起的副作用的预测方法。此外，文章还强调了预测药物副作用发生频率和严重程度的研究。

预测方法梳理

将预测方法分为药物副作用关联预测，多标签药物副作用预测和由DDIs引起的副作用预测三类进行深入探讨。

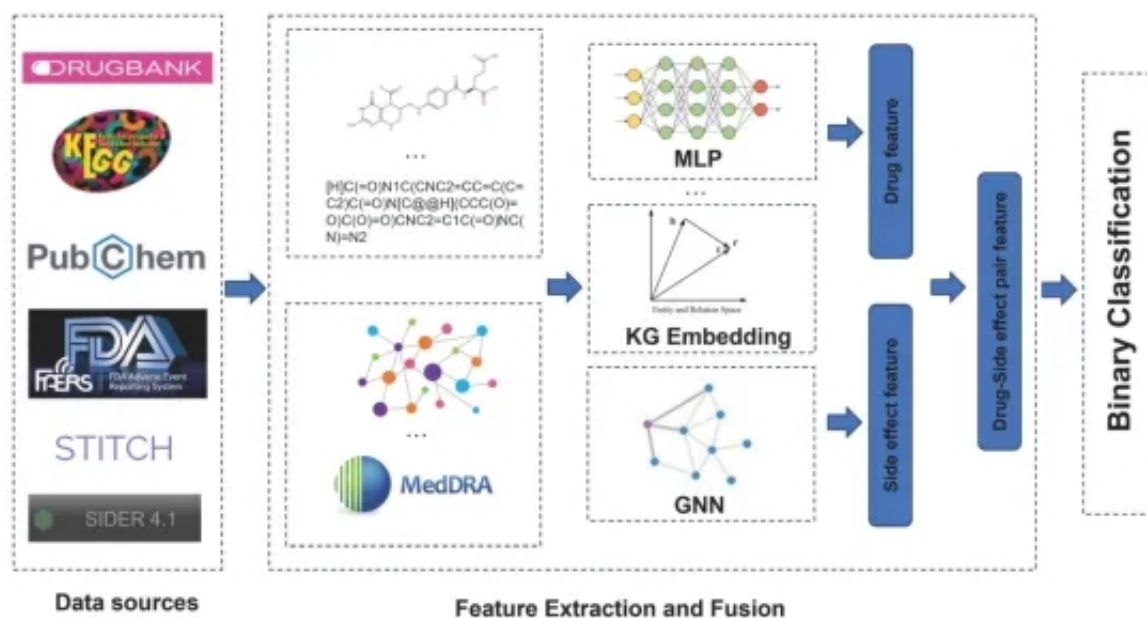


图1 基于机器学习算法的药物副作用关联预测概述

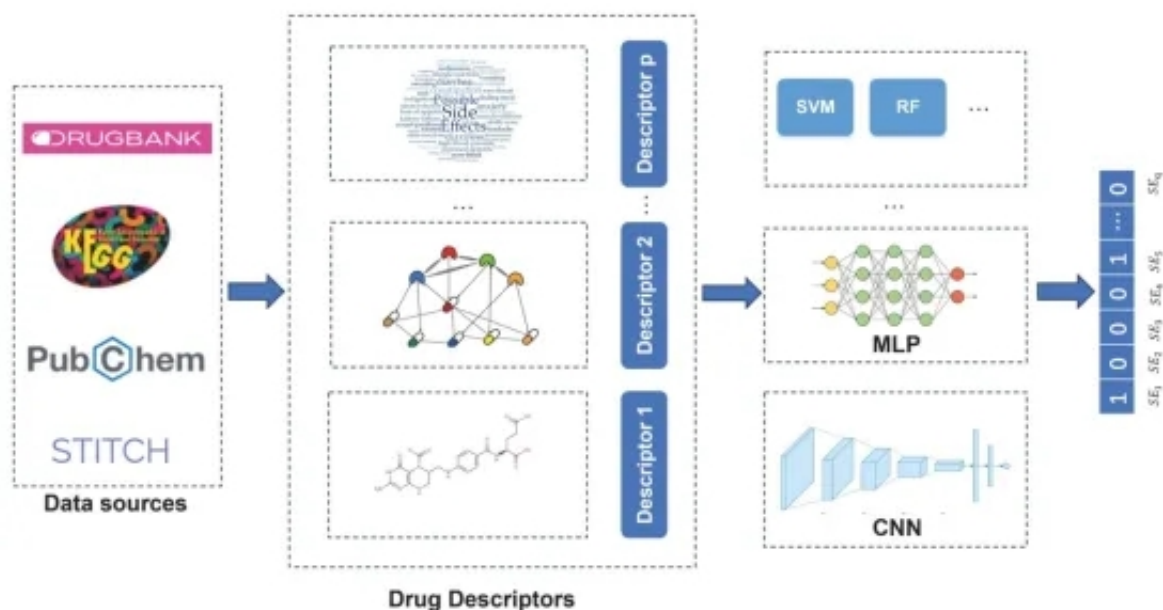


图2 基于机器学习算法的多标签药物副作用预测概述

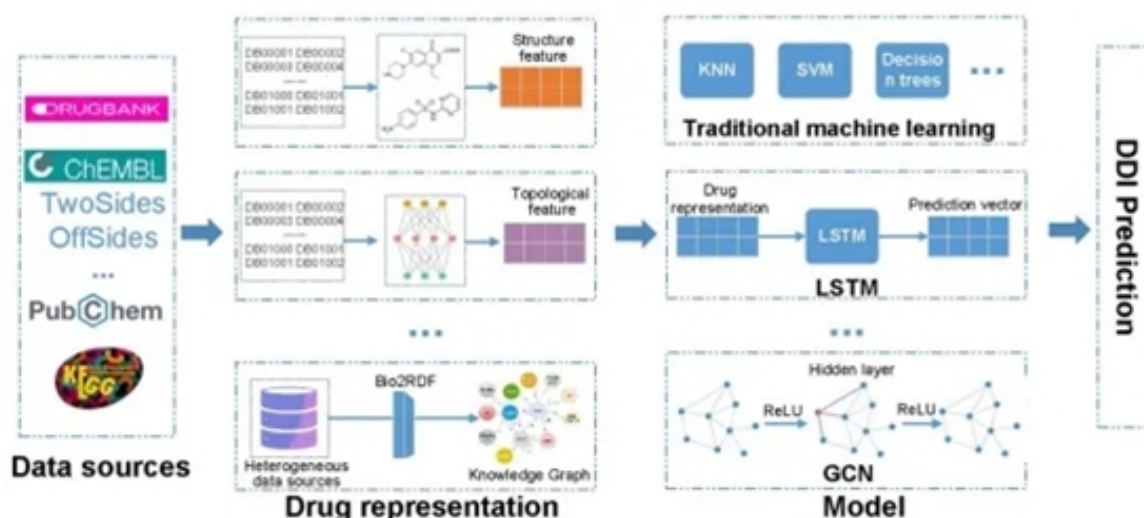


图3 使用机器学习算法对 DDIs 产生的副作用进行预测的概述

挑战和未来方向

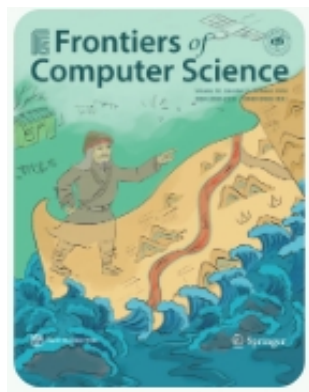
药物副作用预测研究领域面临多重挑战，如不平衡的数据集、数据质量和融合问题、预测由药物组合引起的副作用、预测中药的副作用以及模型可解释性问题。未来可以通过将生成式大型模型与先进的机器学习技术相结合，使药物副作用预测模型变得更加强大。

相关内容推荐

文章精要 山东大学崔学峰、赵巍等：MetaGIN：用于分子性质预测的轻量级框架

文章精要 重庆大学薛伟伟副教授团队：深度学习框架ProteinMPNN在扩展合成蛋白的序列空间上的应用研究

期刊简介



Frontiers of Computer Science (FCS) 是由教育部主管、高等教育出版社和北京航空航天大学共同主办，南京大学支持，SpringerNature 公司海外发行的英文学术期刊。本刊于 2007 年创刊，双月刊，全球发行。主要刊登计算机科学领域具有创新性的综述论文、研究论文等。本刊主编为周志华教授，共同主编为熊璋教授。编委会及青年 AE

团队由国内外知名学者及优秀青年学者组成。本刊被 SCI、Ei、DBLP、INSPEC、SCOPUS 和中国科学引文数据库 (CSCD) 核心库等收录，为 CCF 推荐 B 类期刊；两次入选中国科技期刊国际影响力提升计划；入选第 4 届中国国际化精品科技期刊；两次入选中国科技期刊卓越行动计划（一期梯队、二期领军）。

中国学术前沿期刊网

<http://journal.hep.com.cn>

来源：Frontiers of Computer Science

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](https://www.iikx.com)转发