基于图神经网络的药物相互作用预测研究

一.成果完成人及所在单位： 康丽萍，计算机与信息工程学院 指导教师：林开标

二.成果简介：

以药物相互作用为研究对象，将药物相互作用预测问题定义为图神经网络的链接预测任务。对药物的关系构建多种视图，在每种视图下采用交叉融合策略，将药物特征信息与拓扑信息进行深度融合。另外，为了区分不同邻居与视图的重要性，本研究使用双层次注意力机制，即节点级别与视图级别，获得最终统一的药物嵌入表示用于药物反应的预测。在真实的数据集上，广泛的实验验证了所提模型的有效性。模型鲁班性及可解释性为预测新药物间反应提供了强有力的支持。

三. 主要研究内容及创新点：

针对大多药物预测方法仅依赖于单一的拓扑视图，并且没有很好地处理药物属性特征与网络结构关系，导致模型效果次优（见图 1）。为了解决以上局限性，本文提出基于多视图的双层注意力融合用于药物反应的预测方法 MFDA（见图 2）。MFDA 首先对药物网络构造多种视图，在每种视图下设置双通道，分别编码药物的特征信息与网络拓扑结构。为了更好地整合特征信息与拓扑信息，在每一层之间采用交叉融合策略进行灵活的交换与融合。最后，本研究使用双层次注意力模块融合药物节点级别与视图级别的嵌入，用于下游药物反应的预测。在多种实验场景与最先进的基线模型相比，MFDA 表现出了卓越的性能。另外，不同于以往模型预测的二进制结果，MFDA 可以预测多种药物的反应事件，更有利于揭示不良药物反应背后发生的药理学机制。

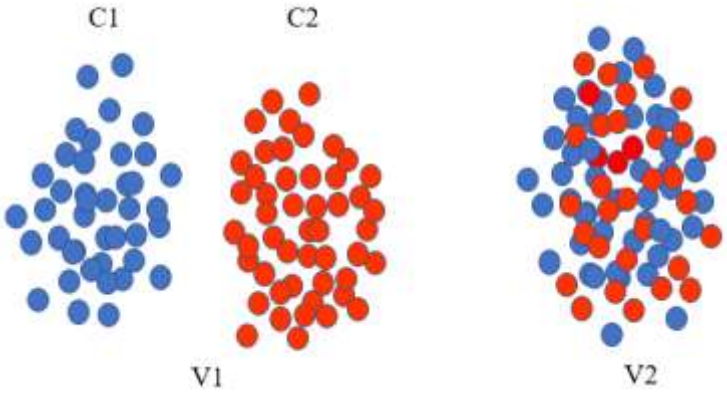


图 1. 单一视图与多视图对比

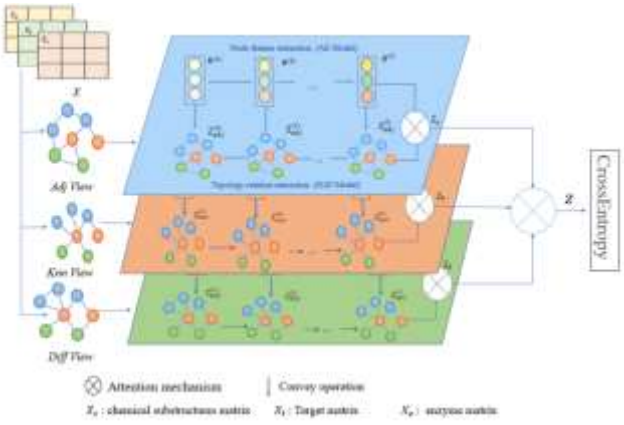


图 2. MFDA 模型框架

四. 主要研究成果及应用情况

1. 在 SCI 三区期刊 *Plos one* 发表 *Multitype drug interaction prediction based on the deep fusion of drug features and topological relationships.* (本人第一，导师第二兼通讯作者)

2. 在 SCI 二区期刊 Frontiers in pharmacology 发表 MFDA:Multiview Fusion Based on Dual-level Attention For Drug Interaction Prediction. Frontiers in pharmacology.(导师第一，本人第二兼通讯作者)

3.申请专利 2 项

4.授权的软件著作 1 项

联系人：康丽萍 电 话：13272471801 Email:1378306221@163.com