

A comprehensive evaluation of regression-based drug responsiveness prediction models, using cell viability inhibitory concentrations (IC50 values)

Aron Park, Minjae Joo, Kyungdoc Kim, Won-Joon Son, GyuTae Lim, Jinhyuk Lee,
Jung Ho Kim, Dae Ho Lee ✉, Seungyoon Nam ✉

Bioinformatics, btac177, <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btac177>

Published: 23 March 2022 **Article history** ▼

La predicción de la respuesta a los fármacos es fundamental para la medicina de precisión.

¿Cuál fue el corpus que usaron?

Construyeron once configuraciones de datos de entrada, incluyendo una configuración multiómica, con diferentes tamaños de conjuntos de datos.

https://mega.nz/#F!CeYGDKyS!uqkmWJ4E2XSGJp_C2VO2gg

¿Qué técnica de aprendizaje se utilizaron?

Dos arquitecturas de redes neuronales convolucionales (CNN): CDRScan y la red neuronal residual (ResNet).

Conclusiones

ResNet se introdujo por primera vez en los modelos DL basados en la regresión para predecir la respuesta al fármaco. Como resultado, los modelos de DL obtuvieron mejores resultados que los modelos de ML en todas las configuraciones. Además, ResNet tuvo un rendimiento mejor o comparable al de los modelos CDRScan y ML en todos los escenarios.