附件 6

# 第十七届“挑战杯”辽宁省大学生课外学术科技作品竞赛

作品申报书

作品名称 “量体裁衣，对症下药”—基于R-shiny构建的群体动力学交互平台

学校全称 沈阳药科大学

申报者姓名 韩镒名、王韵怡、李致远、白婧雅

作品类别 √ 自然科学类学术论文

🗆​ 哲学社会科学类社会调查报告

🗆​ 科技发明制作A 类

🗆​ 科技发明制作B 类

# A2. 申报者情况（集体项目）

说明：1.必须由申报者本人按要求填写；

1. 申报者代表必须是作者中学历最高者，其余作者按学历高低排列。团队实际负责人以及其余作者贡献度等情况，以竞赛官网填报信息为准；
2. 指导教师按照填写的先后顺序区分第一、第二、第三指导教师；
3. 本表中尚无法填写的项目，请填“无”。

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 申报者代表情况 | 姓 名 | 韩镒名 | | | | | 性 别 | | | 男 | 出生年月 | | | 2004/12/30 | |
| 学 校 | 沈阳药科大学 | | | | | | | 专业年级 | | | | 大二 | | |
| 学 历 | 本科在读 | | | 学 制 | | | 四年 | | | 入学时间 | | | 2023 | |
| 作品全称 | | “量体裁衣，对症下药”—基于R-shiny构建的群体动力学交互平台 | | | | | | | | | | | | |
| 毕业论文题目 | | | 未定 | | | | | | | | | | | |
| 通讯地址 | | 辽宁省本溪市沈阳药科大学南校区 | | | | | | | | | 邮政编码 | | | 117004 |
| 联系电话 | | | 13652249013 |
| 合作者情况 | 姓 名 | | 性 别 | | | 年 龄 | | | 学 历 | | | 所在学校 | | | |
| 王韵怡 | | 女 | | | 19 | | | 本科在读 | | | 沈阳药科大学 | | | |
| 李致远 | | 男 | | | 20 | | | 本科在读 | | | 沈阳药科大学 | | | |
| 白婧雅 | | 女 | | |  | | | 本科在读 | | | 沈阳药科大学 | | | |
|  | |  | | |  | | |  | | |  | | | |
|  | |  | | |  | | |  | | |  | | | |

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 指导教师 | 姓 名 | 性 别 | 年 龄 | 职 称 | 工作单位 |
| 项荣武 | 男 |  |  |  |
| 梁露花 | 女 |  |  |  |
|  |  |  |  |  |
| 资格认定 | 学校学籍 管理意见 | 以上作者是否为2025 年6 月1 日前正式注册在校的全日制非成人教育、非在职的各类高等院校学生（专科生、本科生、硕士研究生）。  □是 □否 | | | |
| 学校负责人或导师意见 | 本作品是否为课外学术科技或社会实践活动成果  □是 □否 | | | |

# B1. 申报作品情况

（自然科学类学术论文）

说明：1.必须由申报者本人填写；

1. 本表中的学校组织协调机构意见视为对申报者所填内容的确认，并承担相应连带责任。
2. 作品分类按作品的学术方向或所涉及的主要学科领域填写，分类错误或分类不清视为无效作品。
3. 该类作品仅限本专科生参赛，硕士研究生作品不在此列。

|  |  |
| --- | --- |
| 作品全称 | “量体裁衣，对症下药”—基于R-shiny构建的群体动力学交互平台 |
| 作品分类 | **（D）**A.机械与控制（包括机械、仪器仪表、自动化控制、工程、交通、建筑等）  B.信息技术（包括计算机、电信、通讯、电子等） C.数理（包括数学、物理、地球与空间科学等）  D.生命科学（包括生物、农学、药学、医学、健康、卫生、食品等）  E.能源化工（包括能源、材料、石油、化学、化工、生态、  环保等） |
| 作品撰写的目的和  基本思路 | 基于R语言Shiny框架在国内多个领域均有应用，如：医疗领域、生物学领域、统计学领域等，但在药动学应用相对稀缺。目前国外软件NONMEM、Phoenix NLME费用高昂、操作界面不友好、数据不安全、不开源等原因；国内软件CPhaMAS作为首个自主知识产权的类似系统，没有使用机器学习方法预测药物相互作用，只使用基本的模型诊断工具，以及未重视数据隐私保护。本研究旨在融合R、HTML和CSS等技术开发一个交互式开源群体药动学系统，为研究药代动力剂计量分析提供符合的软件工具便于进一步研究。  **基本思路**   1. 首先发现问题：国外的商业类软件租用价格昂贵，使用门槛高和国内软件种类少，多数开发久远，运行缓慢； 2. 提出的解决办法有基于群体药代动力学（PPK）方面理论知识，并结合nlmixr2、posologry和ncappc等先进R包，利用R语言中Shiny成熟框架开发一个交互式开源群体药动学系统； 3. 最后进行研究设计部分，对开发的系统需求进行调研，确定功能需求和性能要求，初步搭建系统总体框架、功能和流程，可实现基本数据探索、NCA、PPK建模以及剂量分析，重点将在主页面、群体界面和剂量推荐三个部分进行系统开发，并在后续投入实际病人数据对整个系统进行校验。 |

|  |  |
| --- | --- |
| 作品的科学性、先进性及独特之处 | **科学性：**  该系统以群体药代动力学（PPK）为核心，通过结合现代统计模型，如非线性混合效应模型（NONMEM）等方法，科学地描述了药物在不同个体中的代谢和分布。这些方法能够准确捕捉个体间的药代动力学差异，并为个性化给药提供理论支持。此外，增加了更多的模型诊断工具（如拟合优度图GOFs和视觉预测检验VPC），这些工具有助于全面评估模型的稳健性与预测能力，从而确保模型的准确性和科学性。这些诊断方法使得系统能够适应复杂的临床数据，提高模型的可靠性和广泛适用性。  **先进性：**  （1）**技术框架的创新：**本系统采用了R语言及Shiny框架进行开发，这一技术框架提供了高效的计算能力与易用的用户界面，极大地降低了模型应用的技术门槛。相比传统药代动力学建模软件，该系统具有更好的开放性和扩展性，用户可以根据需要调整和优化模型，增强了该系统在学术研究和临床应用中的适用性。  （2）**机器学习算法的引入**：为了提高药物代谢模型的预测精度，该系统引入了机器学习算法（如深度学习、随机森林等）。这些算法能够处理复杂的非线性关系和高维数据，尤其适用于分析药代动力学中的多重变量和非线性效应。机器学习通过从已有数据中学习变量之间的潜在规律，建立预测模型，并在新数据中应用这些规律进行预测。具体而言，这些算法通过反复迭代优化参数，从大量患者数据中挖掘关键特征和隐含模式，以提高预测能力。借助这一技术，系统可以更精确地分析患者数据的个体差异，进而为个性化剂量推荐提供科学依据，显著提升建模的智能化水平。  （3）**联邦学习的隐私保护：**为应对数据隐私问题，系统采用了联邦学习算法，使得多个数据中心能够在不直接共享数据的情况下实现资源共享和协同建模。通过联邦学习，各数据中心的数据始终保留在本地，避免了隐私敏感信息的泄露，而模型训练所需的参数或更新则通过安全传输机制在各方之间交换。这种方式有效保障了患者数据的隐私性，同时利用多方数据资源形成了更全面的训练数据集。联邦学习的应用提升了数据共享的效率，同时为跨机构的药代动力学研究提供了更高的灵活性。  **独特性：**  （1）**开源与交互性：**与传统药代动力学建模软件不同，本系统采用了开放源代码的开发模式，使得科研人员和开发者可以自由修改和扩展功能，满足不同研究需求。此外，系统通过Shiny框架提供了一个用户友好的交互式界面，不仅降低了使用门槛，还增强了用户体验，使得药代动力学的建模和分析过程变得更加直观和便捷。  （2）**模型自定义与功能集成：**该系统不仅集成了多种常见的药代动力学模型，还支持用户自定义模型，极大地提高了其灵活性。用户可以根据具体药物的特点进行模型的选择和优化，适用于不同药物的个性化治疗。此外，系统集成了非房室分析、协变量筛选等功能，提供了一整套完整的药代动力学分析流程，增强了系统的功能性和应用广度。  （3）**隐私保护与数据共享的创新结合：**联邦学习算法的加入，使得系统在保障数据隐私的同时，也能够促进跨机构之间的数据共享与合作，突破了传统集中式建模的局限。这一创新结合不仅提升了数据的使用效率，同时也为跨机构参与的药代动力学研究提供了更多可能。 |
| 作品的实际应用价值和现实意义 | 本研究开发的基于R-shiny的群体药代动力学交互式系统，整合了多个先进的R包，提供了数据探索、非房室分析（NCA）、群体药动学（PPK）建模以及剂量推荐等核心功能。系统的实际应用价值在于其能够辅助研究人员和临床医生在新药研发和个体化治疗中进行精确的药物剂量调整，优化治疗方案，提高治疗效果。通过模型诊断工具，系统能够评估模型的稳健性和预测能力，确保药物使用的安全性和有效性。此外，系统结合机器学习技术，可以预测药物之间的相互作用，进一步保障用药安全。系统还考虑了隐私保护，采用联邦学习的算法，实现数据不出本地的联合建模，保护患者隐私的同时实现数据的高效利用。这些特点使得本研究开发的基于R-shiny的群体药代动力学交互式系统在现实医疗和药物研发中具有重要的意义，能够促进个体化医疗的发展，降低药物研发成本，提高药物使用的精准度。 |
| 学术论文文摘 | 本研究针对现有群体药代动力学软件在操作复杂性、成本高昂以及数据安全性方面的不足，开发了一款基于R-shiny框架的群体药代动力学（PPK）交互式系统。该系统整合了nlmixr2、posologry和ncappc等先进的R包，提供了数据探索、非房室分析（NCA）、PPK建模及剂量推荐等核心功能。为提升模型的科学性和预测能力，我们引入了多种模型诊断工具，如拟合优度图（GOFs）和视觉预测检验（VPC），以全面评估模型的稳健性。此外，系统结合机器学习技术开发了药物相互作用模块，能够预测药物间的拮抗作用等相互作用，增强了系统的实用性。为保护数据隐私，系统采用了联邦学习算法，实现数据不出本地的联合建模，确保了数据处理的安全性。并且本研究的最终代码开源发布，以最大程度保证数据安全。本研究的系统在新药研发和个体化治疗中具有重要的应用价值，能够辅助研究人员和临床医生进行精确的药物剂量调整，针对不同的人群量体裁衣，优化治疗方案。 |

|  |  |
| --- | --- |
| 作品在何 时、何地、何种机构举行的会议或报刊上发表及所获奖励 |  |
| 鉴定结果 |  |
| 请提供对于理解、审查、评价所申报作品具有参考价值的现有技术及技术文献的检  索目录 | [1]芮建中,张震,李金恒.群体药代动力学/群体药效动力学原理及研究方法[J].医学研究生学报,2005,(03):246-249.DOI:10.16571/j.cnki.1008-8199.2005.03.018.  [2]胡敏,张静华,孙鹤,等.群体药动学原理及NONMEM法数据分析[J].药学服务与研究,2002,(04):227-230.  [3]张兴安,芮建中,吴群林,等.NONMEM法分析静滴异丙酚在中国人体的群体药代动力学[J].中国临床药理学杂志,2004,(06):444-448. |

|  |  |
| --- | --- |
| 申报材料清单（申报论文一篇，相关资料名称  及数量） | 1.申报表 |
| 学校组织协调机构意见 | 学校团委年 月 日 |

# C. 当前国内外同类课题研究水平概述

说明：1.申报者可根据作品类别和情况填写；

2.本栏目为可选项，若填写将有助于评审。

# D1. 推荐者情况及对作品的说明

说明：1.由推荐者本人填写（两名）；

2.推荐者必须具有高级专业技术职称，并是与申报作品相同或相关领域的专家学者或专业技术人员（教研组集体推荐亦可）；

3.推荐者填写此部分，即视为同意推荐。

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 推 | 姓名 | | 梁露花 | | 性别 | 女 | 年龄 | | 37 | | 职称 | 副教授 |
| 荐者情  况 | 工作单位 | | |  | | | | | | | | |
| 通讯地址 | | |  | | | | | | 邮政编码 | |  |
| E-mail | | | liangluhua1988@163.com | | | | 联系电话 | | |  | |
| 推荐作品全称 | | “量体裁衣，对症下药”—基于R-shiny构建的群体动力学交互平台 | | | | | | | | | | |
| 对申报情况的真实性作出阐述 | |  | | | | | | | | | | |
| 对作品的意 义、技术水平、适用范围及推广前景作  出评价 | |  | | | | | | | | | | |
| 推荐者签字 | |  | | | | | | | | | | |

# D2. 推荐者情况及对作品的说明

说明：1.由推荐者本人填写（两名）；

2.推荐者必须具有高级专业技术职称，并是与申报作品相同或相关领域的专家学者或专业技术人员（教研组集体推荐亦可）；

3.推荐者填写此部分，即视为同意推荐。

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 推 | 姓名 |  | | | 性别 |  | 年龄 | |  | | 职称 |  |
| 荐者情  况 | 工作单位 | | |  | | | | | | | | |
| 通讯地址 | | |  | | | | | | 邮政编码 | |  |
| E-mail | | |  | | | | 联系电话 | | |  | |
| 推荐作品全称 | | | “量体裁衣，对症下药”—基于R-shiny构建的群体动力学交互平台 | | | | | | | | | |
| 对申报情况的真实性作出阐述 | | |  | | | | | | | | | |
| 对作品的意义、技术水平、适用范围及推广前景  作出评价 | | |  | | | | | | | | | |
| 推荐者签字 | | |  | | | | | | | | | |

# E. 参赛作品打印处

（作品正文打印页，不能体现作者和作者学校