**图嵌入生物医学网络：方法，应用和评估**

**原文标题：**

Graph Embedding on Biomedical Networks: Methods, Applications, and Evaluations

**地址：**

http://arxiv.org/abs/1906.05017

**作者：**

Xiang Yue, Zhen Wang, Jingong Huang, Srinivasan Parthasarathy, Soheil Moosavinasab, Yungui Huang, Simon M. Lin, Wen Zhang, Ping Zhang, Huan Sun

**摘要：** 近年来，旨在自动学习低维节点表示的图嵌入学习越来越受到关注。迄今为止，最新的图嵌入方法主要是在社会和信息网络上进行评估，尚未在系统实验和分析的生物医学网络上进行全面研究。另一方面，对于各种生物医学网络分析任务，诸如矩阵分解（可以看作一种图嵌入方法）的传统技术已经显示出有希望的结果，因此需要系统地评估更新的图。

嵌入方法（例如，基于随机游走和基于神经网络的）在其可用性和进一步发展现有技术的潜力方面。结果：我们对现有图嵌入方法在三个重要的生物医学链路预测任务上进行了系统比较：

药物 - 疾病关联（DDA）预测，

药物-药物相互作用（DDI）预测，

蛋白质-蛋白质相互作用（PPI）预测和

一个节点分类任务，即对医学术语（节点）的语义类型进行分类。

我们的实验结果表明，最近的图嵌入方法通常比传统的嵌入方法更有效。

此外，与两种最先进的 DDA 和 DDI 预测方法相比，不使用任何生物特征的图嵌入方法实现了极具竞争力的性能。此外，我们总结了我们学到的经验，并提供了正确选择图嵌入方法和设置其超参数的指南。可用性：我们开发了一个易于使用的  Python 软件包，其中包含 BioNEV 的详细说明被上传到 GitHub 中，包括所有源代码和数据集，以便于研究生物医学任务中的各种图嵌入方法。