

О разнообразиях биомедицинских исследований и планов по материалам избранных публикаций

н.с., к.б.н. Павел Викторович Погодин

14/08/2025

Предпосылки к рассмотрению публикаций

Рецензирование

Неотъемлемая часть научной деятельности. Существуют общие требования, критерии научности. Существуют конкретные рекомендации регулирующих органов, научных журналов и т.п. Переходное звено - понимание особенностей разновидностей исследований и их планирования.

Планирование собственных исследований

Открытие можно совершить и случайно (может потребоваться много времени). А вот добиться принятия его результатов к практическому использованию в области современной биомедицины - вполне закономерно требует успешного осуществления ряда рациональных шагов в определенной последовательности с учетом существующих ограничений, обстоятельств и требований.

Публикации

ORIGINAL ARTICLE

Types of Study in Medical Research

Part 3 of a Series on Evaluation of Scientific Publications

Bernd Röhrig, Jean-Baptist du Prel, Daniel Wachtlin, Maria Blettner

Журнал: Deutsches Ärzteblatt International - bilingual weekly online journal of clinical medicine and public health. As the official journal of the German Medical Association and the National Association of Statutory Health Insurance Physicians we publish independent, peer-reviewed articles from all branches of clinical medicine. In addition, you will find editorials and a section devoted to scientific discussion (correspondence). We hope that for our international readership our journal will be both an important source of medical information and a window to the German medical scene.

Авторы:

- MDK Rheinland-Pfalz, Referat Rehabilitation/Biometrie, Alzey: Dr. rer. nat. Röhrig
- Zentrum für Präventive Pädiatrie, Zentrum für Kinder- und Jugendmedizin, Mainz: Dr. med. du Prel
- Interdisziplinäres Zentrum Klinische Studien (IZKS), Fachbereich Medizin der Universität Mainz: Wachtlin
- Institut für Medizinische Biometrie, Epidemiologie und Informatik (IMBEI), Johannes Gutenberg Universität Mainz: Univ.-Direktorin: Prof. Dr. rer. nat. Blettner

По существу

SUMMARY

Background: The choice of study type is an important aspect of the design of medical studies. The study design and consequent study type are major determinants of a study's scientific quality and clinical value.

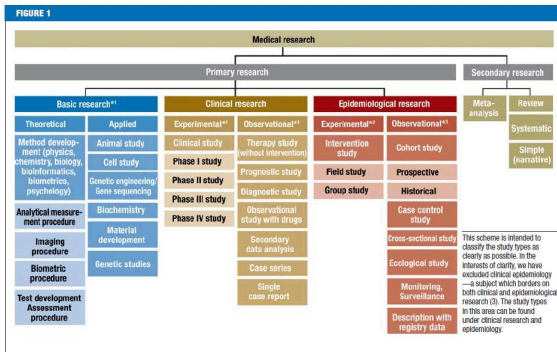
Methods: This article describes the structured classification of studies into two types, primary and secondary, as well as a further subclassification of studies of primary type. This is done on the basis of a selective literature search concerning study types in medical research, in addition to the authors' own experience.

Results: Three main areas of medical research can be distinguished by study type: basic (experimental), clinical, and epidemiological research. Furthermore, clinical and epidemiological studies can be further subclassified as either interventional or noninterventional.

Conclusions: The study type that can best answer the particular research question at hand must be determined not only on a purely scientific basis, but also in view of the available financial resources, staffing, and practical feasibility (organization, medical prerequisites, number of patients, etc.).

Dtsch Arztebl Int 2009; 106(15): 262–8
DOI: 10.3238/arztebl.2009.0262

FIGURE 1



Заключение

- Исследование должно быть хорошо спланировано и выполнено, чтобы ответить на поставленный вопрос. Выбор правильной разновидности помогает.
- При выборе разновидности следует учитывать имеющиеся ограничения: ресурсные, этические и прочие
- Результаты исследования нужно публиковать

Комментарий:

Компьютерная симмуляция биомедицинских исследований видится полезной

Исследования, проведенные по уже полученным результатам, обретают дополнительный смысл: не только сделать выводы на основе большого количества информации, но и ознакомиться с практиками проведения первичных исследований

Полезными видятся простые исследования (требуют мало ресурсов, имеют низкую этическую нагрузку) сложных разновидностей

Address for correspondence:

Dr. Mukul Chandra Kapoor,
6, Dayanand Vihar,
New Delhi - 110 092, India.

Types of studies and research design

Mukul Chandra Kapoor

Department of Anesthesiology, Max Smart Super Specialty Hospital, New Delhi, India

Журнал:

The Indian Journal of Anaesthesia (ISSN 0019-5049) or IJA, is the official scientific journal of the Indian Society of Anaesthesiologists, which at a membership strength of nearly 20000 is the 2nd largest society of anaesthesiologists in the world. The Indian Journal of Anaesthesia was first published in 1953 by Dr. M.C. Ganguly as its Editor. The IJA which is an indexed, peer reviewed journal, originated as a platform for the scientific expression of the ISA which is the umbrella society to which almost all anesthesiologists in India belong. However it has grown over the years to be international in its scope, also accepting selected articles of merit from contributors all over the world. IJA is published Monthly. The objective is to provide opportunities for free exchange of ideas and information. The society or the editorial board accept no responsibility for any statements published in the journal. These statements are solely attributable to the authors; they are not necessarily indicative of the policies of the society or the editorial board.

По существу


SUMMARY

Рандомизированные
контролируемые
исследования



Although RCTs are considered ‘gold standard’ in research, their status is at crossroads today. RCTs have conflicting interests and thus must be evaluated with careful scrutiny. EBM can promote evidence reflected in RCTs and meta-analyses. However, it cannot promulgate evidence not reflected in RCTs. Flawed RCTs and meta-analyses may bring forth erroneous recommendations. EBM thus should not be restricted to RCTs and meta-analyses but must involve tracking down the best external evidence to answer our clinical questions.

Доказательная
медицина



По отношению к клинической практике



Table 1: General principles of medical research

Principle	Definition/Details
Essentiality	Entailing the research is absolutely essential after considering all alternatives in light of the existing knowledge
Voluntariness, informed consent and community agreement	Research participants are fully apprised of the research and the impact and risk of such research
Non-exploitation	Research participants are remunerated for their involvement in the research or experiment
Privacy and confidentiality	Identity and records of human participants of the research or experiment are as far as possible kept confidential
Precaution and risk minimisation	Due care and caution are taken at all stages of the research and experiment
Professional competence	Research is conducted at all times by competent and qualified persons who act with total integrity and impartiality
Accountability and transparency	Research or experiment is conducted in a fair, honest, impartial and transparent manner after full disclosure is made by those associated
Maximisation of public interest and distributive justice	Research or experiment and its application are conducted and used to benefit all humankind
Institutional arrangements	All procedures required should be complied with and all institutional arrangements required are duly made in a bona fide and transparent manner
Public domain	Research and any further research emanating from such research are brought into the public domain
Totality of responsibility	Professional and moral responsibility for the due observance of all the principles, guidelines or prescriptions laid down
Compliance	Duty on all persons, conducting, use of a human participant to ensure that guidelines, as well as any other norms, directions and guidelines are followed

Заключение

- Принятие решений в клинической практике требует непредвзятого обоснования
- Получить такое обоснование сложно по объективным причинам
- Соблюдение принципов проведения биомедицинских исследований позволяет минимизировать объективные сложности и избежать субъективных
- Мета-анализ мета-анализов, мета-анализ, рандомизированное контролируемое исследование, как правило, не закрывают биомедицинские вопросы полностью: требуется непротиворечивое фундаментальное объяснение результатов

**Просто любопытно, а что есть в
открытых источниках про
химические соединения (ХС) в
контексте разновидностей
биомедицинских исследований?**

Если есть время

Материалы и методы

- PubMed (<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/>) - можно фильтровать выдачу результатов, в том числе по разовидностям исследований (мета-анализ или обсервационное исследование, например), описанных в публикациях
- Europe PMC (<https://europepmc.org/>) - списки ХС, упомянутых в статьях из PubMed
- ChEBI - структуры ХС из списков Europe PMC
- CRAN-R (<https://cran.r-project.org/>) - источник языка программирования R и библиотек для научных вычислений
- TDV (<https://www.way2drug.com/tdv/>) - инструмент визуализации разнообразия на уровне молекулярных скаффолдов (системы колец и связей между ними), инструмент разработан в рамках проекта РНФ № 23-73-01058, <https://rscf.ru/project/23-73-01058/>

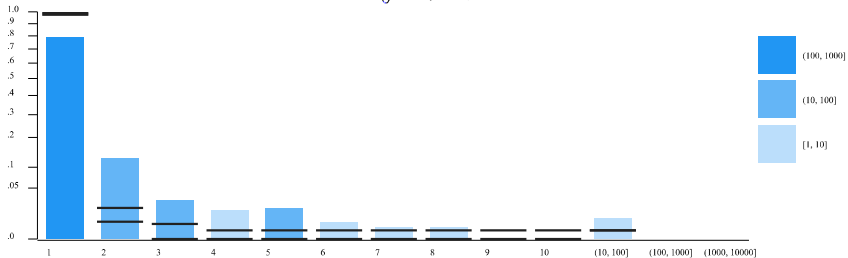
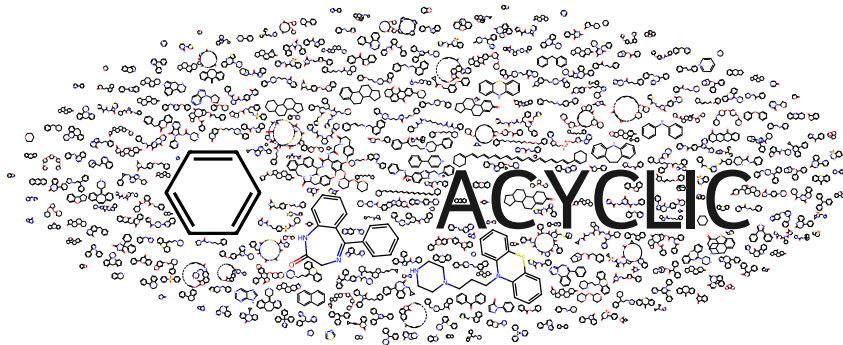
См. https://github.com/pavelVPo/IBMC_AVL_summerClub_14-08-2025

Результаты на примере ХС, упомянутых в публикациях про обсервационные исследования и мета-анализы

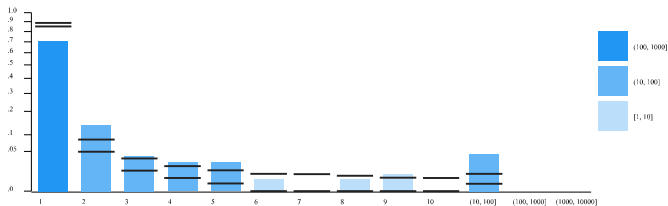
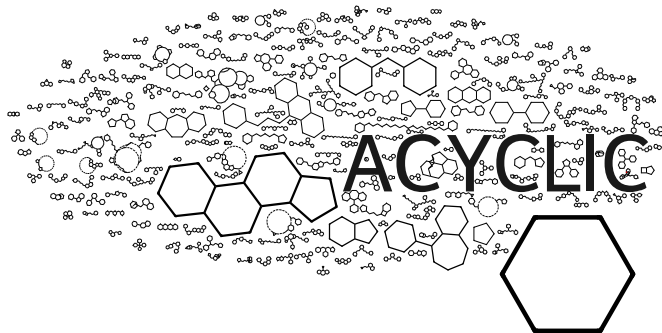
Структуры 906 ХС, упомянутых в выбранных публикациях:

- 212 ХС упомянуты только в публикациях про обсервационные исследования
- 570 ХС упомянуты только в публикациях про мета-анализы
- 124 ХС упомянуты в публикациях обеих разновидностей

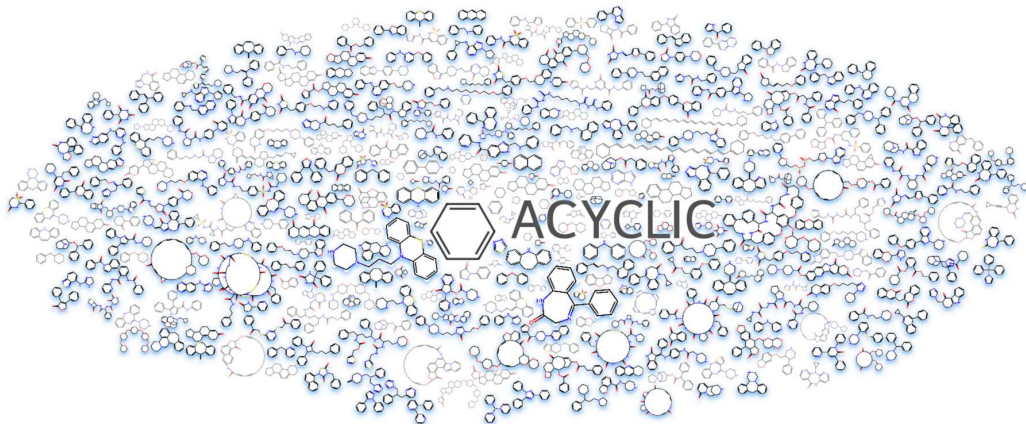
Химическое разнообразие на уровне скаффолдов



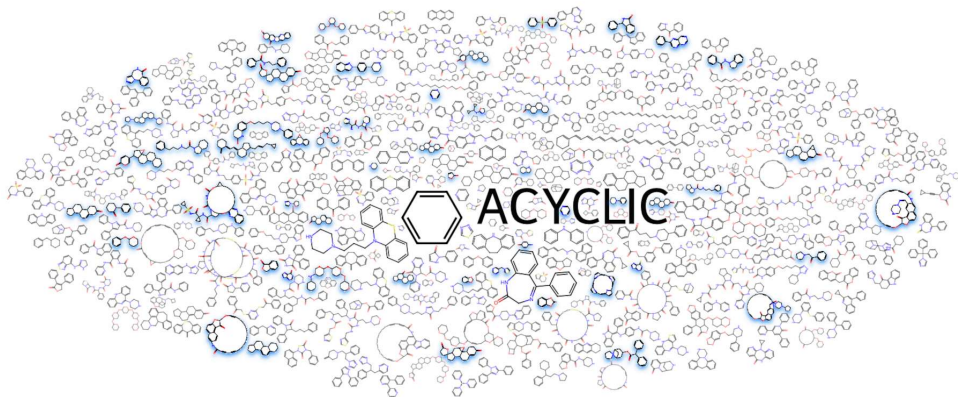
Химическое разнообразие на уровне обобщенных скаффолдов



Химическое разнообразие на уровне скаффолдов для ХС, упомянутых только в публикациях про мета-анализы

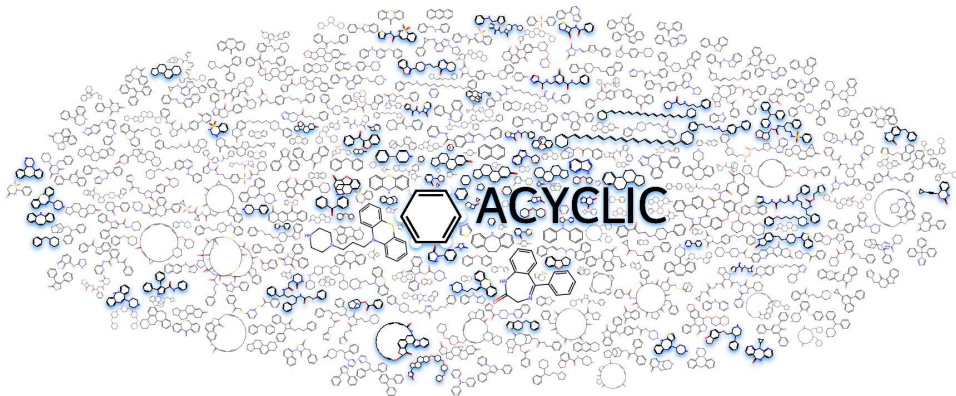


Химическое разнообразие на уровне скаффолдов для ХС, упомянутых только в публикациях про наблюдационные исследования



$^{\wedge}(:(?!\text{meta}).)^*\$$

Химическое разнообразие на уровне скаффолдов для ХС, упомянутых только в публикациях обеих разновидностей



(?=.obs)(?=.meta)

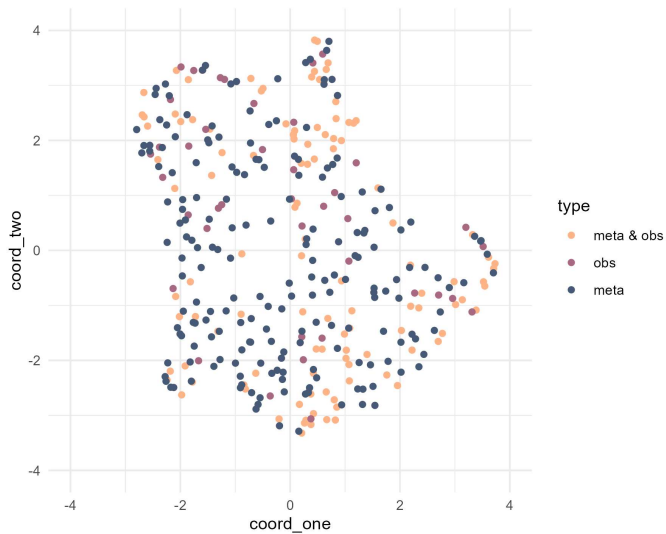
Разнообразие на уровне химических структур (ХС)

- ХС в формате SMILES
- Описания ХС в виде векторов 1 и 0 (фingerprintы MACCS)
- Отбор 11 наиболее значимых признаков по выборке
- Дальнейшее снижение размерности с помощью UMAP (<https://www.nature.com/articles/nbt.4314>)
- Визуализация с помощью ggplot2 (<https://ggplot2.tidyverse.org/>)

Отчетливых кластеров не наблюдается

Это в данном случае ожидаемо, т.к.

- Нет разумных предпосылок
- Процедура отбора предварительного отбора признаков



Разнообразие на уровне ХС, расширение 30%

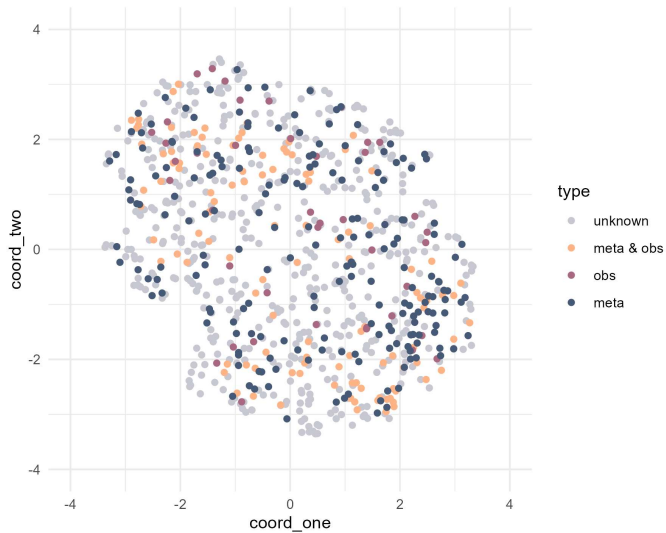
Добавить точки, соответствующие комбинациям признаков, которые не встречаются в имеющихся данных, но в принципе возможны, чтобы улучшить взаимное расположение удаленных друг от друга точек данных

Работоспособность подхода показана, рукопись проходит рецензирование в журнале **Data Intelligence**, был доклад на конференции **НГПМ-2025**

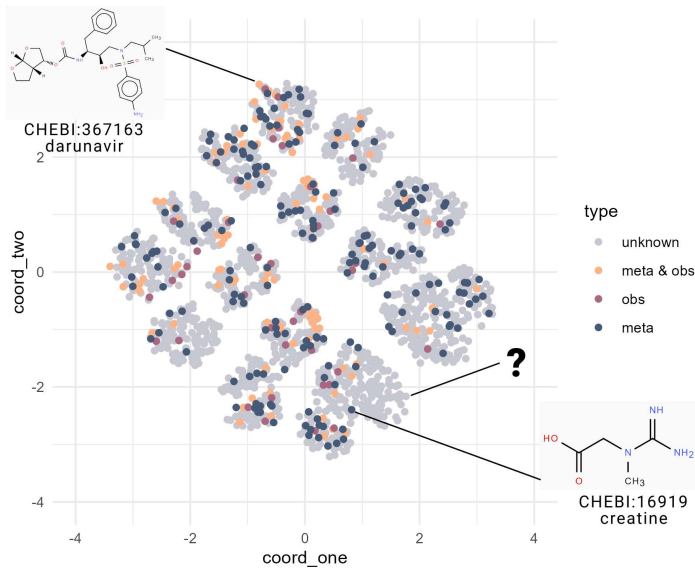
В данном случае добавление точек картины не меняет

Это в данном случае ожидаемо, т.к.

- См. предыдущий слайд



Разнообразие на уровне ХС, расширение 100%



Спасибо за внимание.