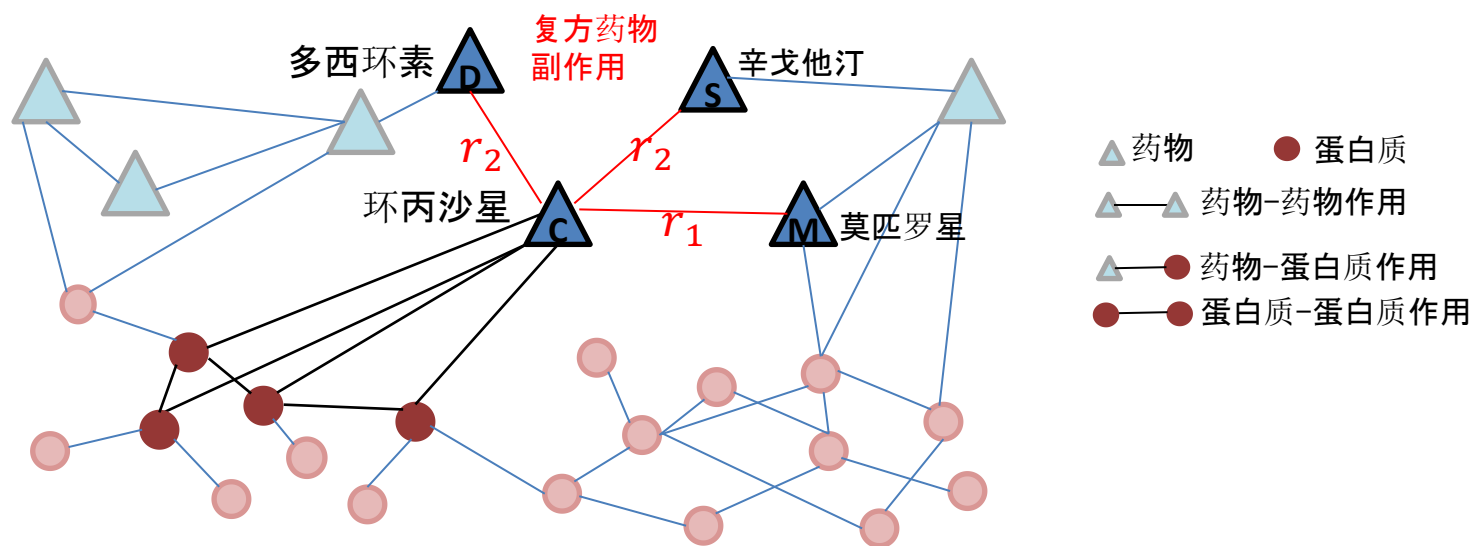
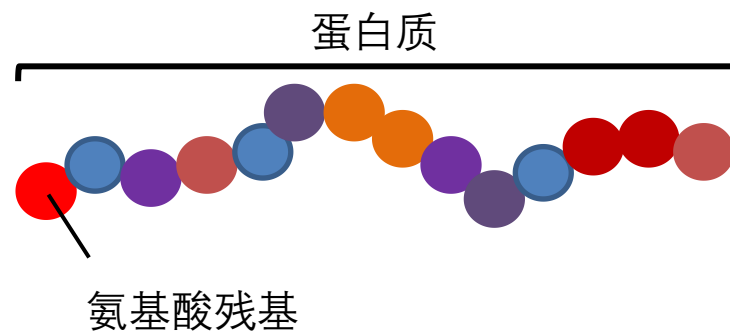
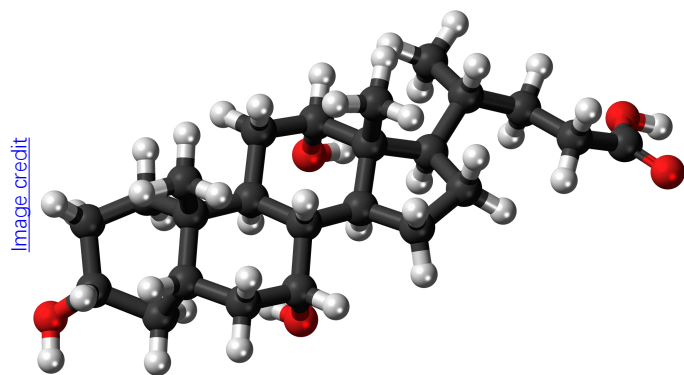


生物化学和医疗健康中的 图神经网络

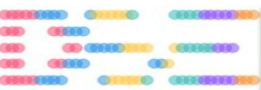
教材：图深度学习，电子工业出版社
<https://baike.baidu.com/item/图深度学习>



生物化学与医疗健康领域的一些图数据

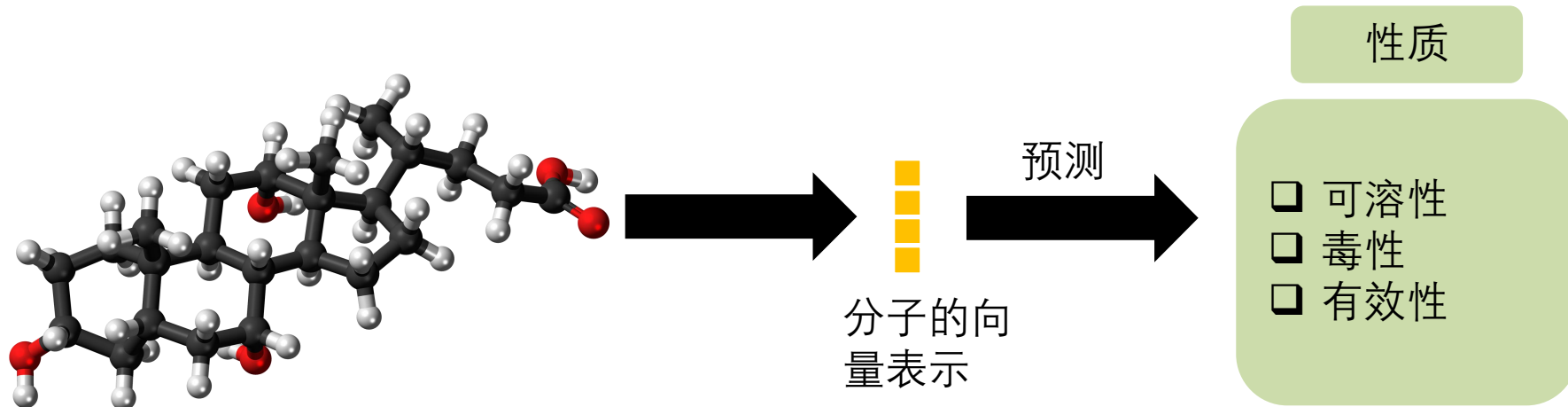


- ❖ 化学分子表示学习
- ❖ 蛋白质相互作用界面预测
- ❖ 药物-蛋白质结合亲和性预测
- ❖ 复方药物副作用预测
- ❖ 疾病预测



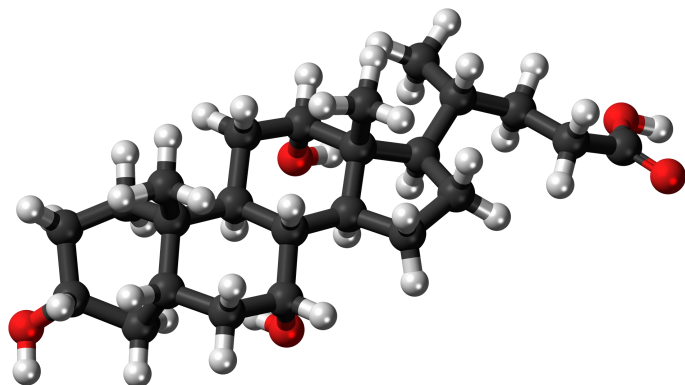


化学分子





化学分子表示学习

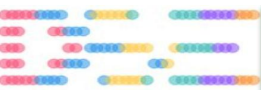


滤波操作

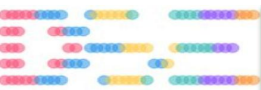
$$F_i^{(l)} = \sigma \left(\left[F_i^{(l-1)} + \sum_{v_j \in \mathcal{N}(v_i)} F_j^{(l-1)} \right] \Theta_{|\mathcal{N}(v_i)|}^{(l-1)} \right)$$

池化操作

$$f_{\mathcal{G}} = \sum_{l=1}^L \sum_{v_i \in \mathcal{V}} \text{Softmax} \left(F_i^{(l)} \Theta_{\text{pool}}^{(l)} \right)$$

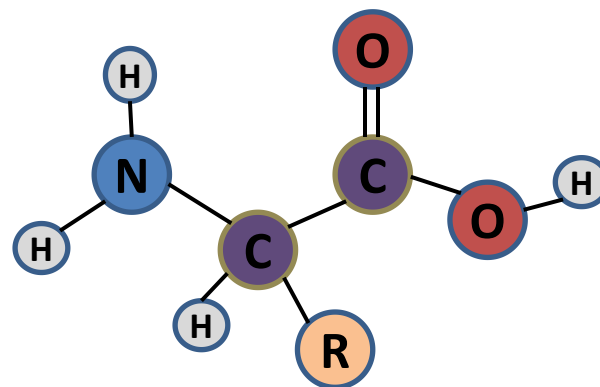
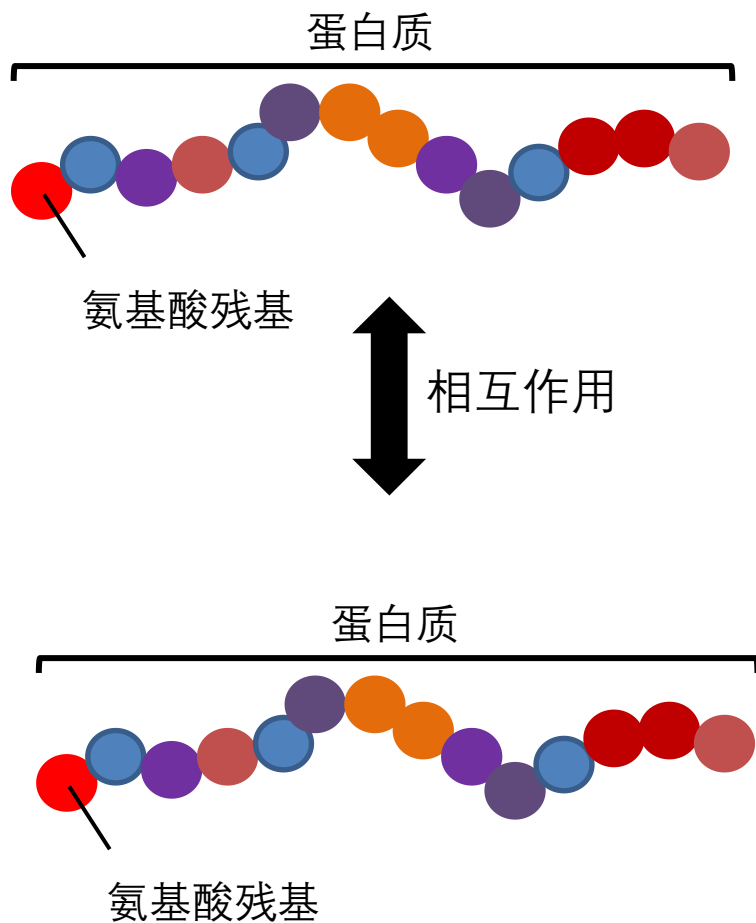


- ❖ 化学分子表示学习
- ❖ 蛋白质相互作用界面预测
- ❖ 药物-蛋白质结合亲和性预测
- ❖ 复方药物副作用预测
- ❖ 疾病预测



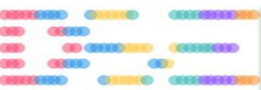


蛋白质相互作用



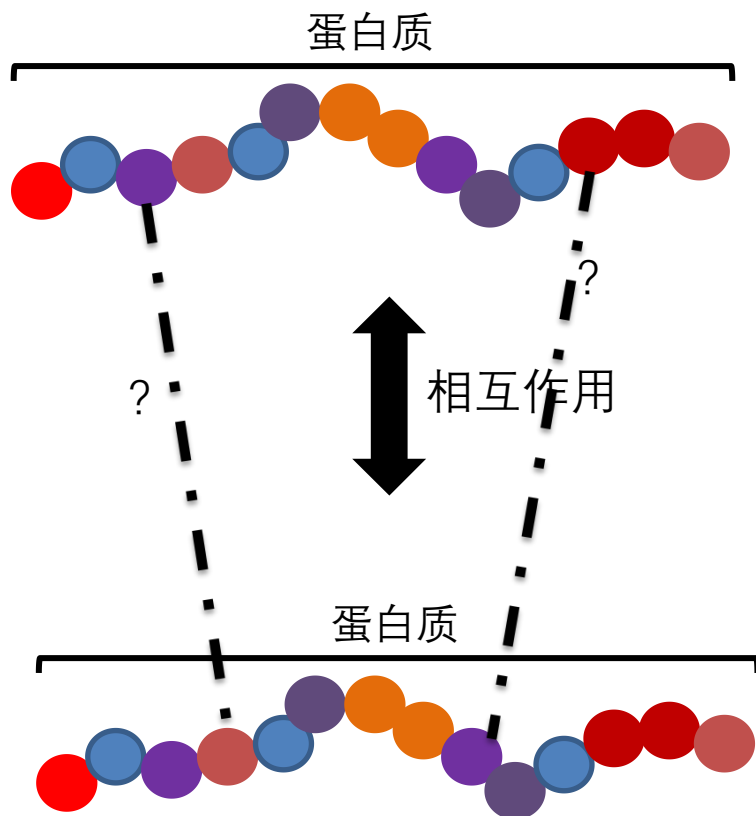
建模为图

- 氨基酸残基节点
- 通过距离位置关系定义边



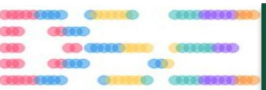


蛋白质相互作用界面预测



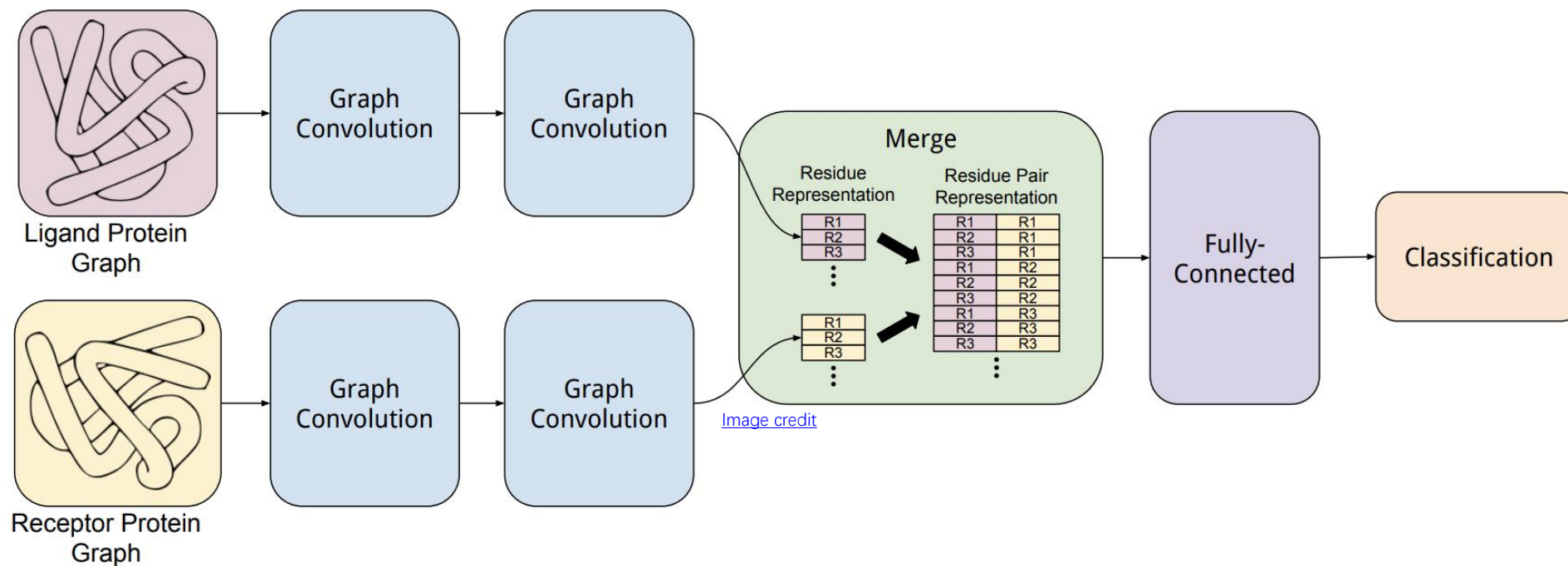
Pairwise Classification

判断给定的两个残基是否在相互作用界面上

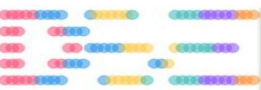




基于GNN的蛋白质相互作用界面预测



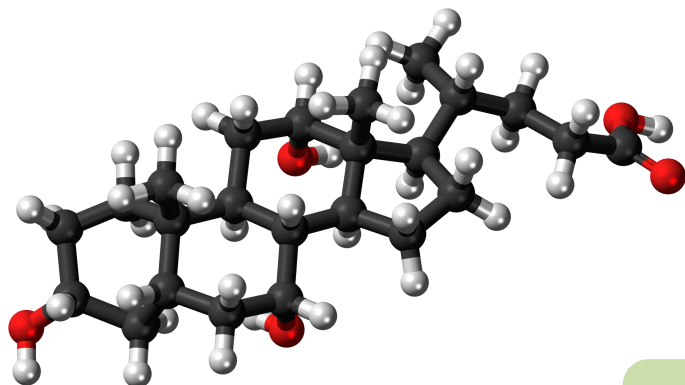
- ❖ 化学分子表示学习
- ❖ 蛋白质相互作用界面预测
- ❖ 药物-蛋白质结合亲和性预测
- ❖ 复方药物副作用预测
- ❖ 疾病预测





药物-蛋白质结合亲和力预测

药物

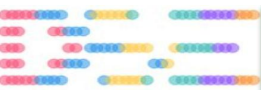


蛋白质

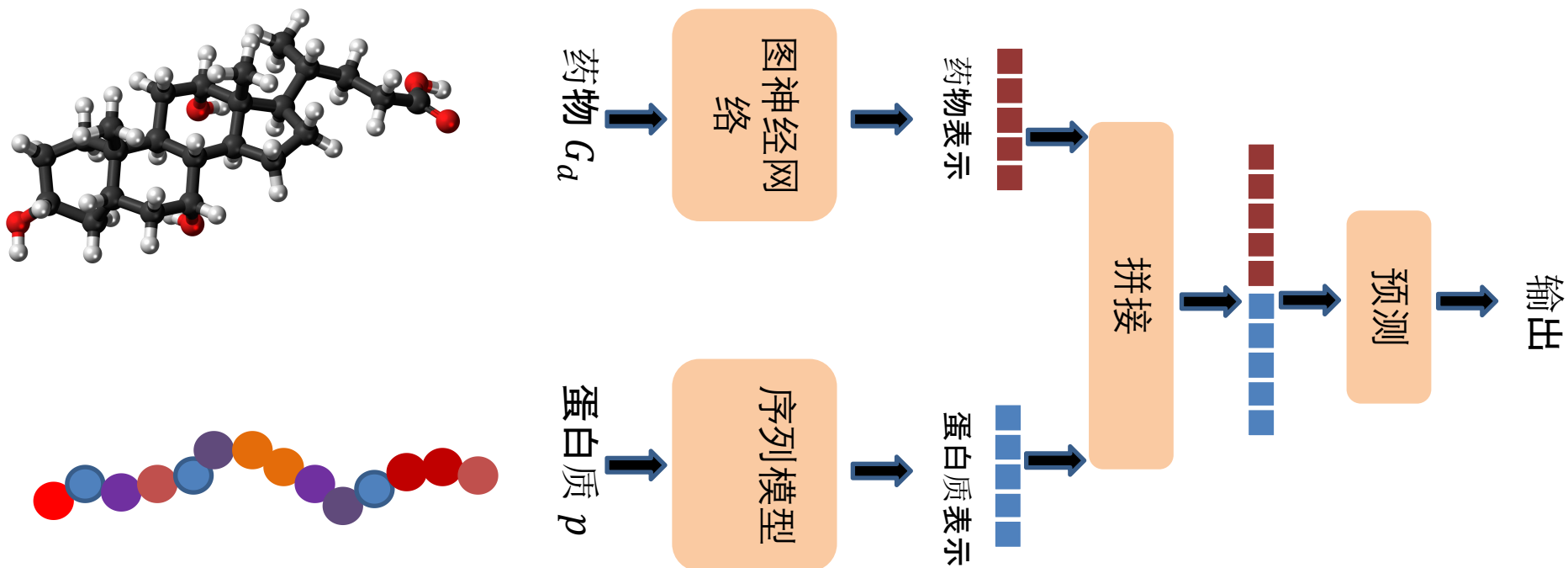


预测亲和力

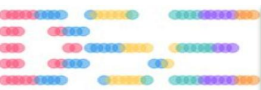
回归任务



基于GNN的药物-蛋白质结合亲和力预测

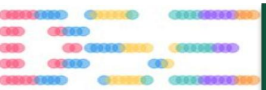
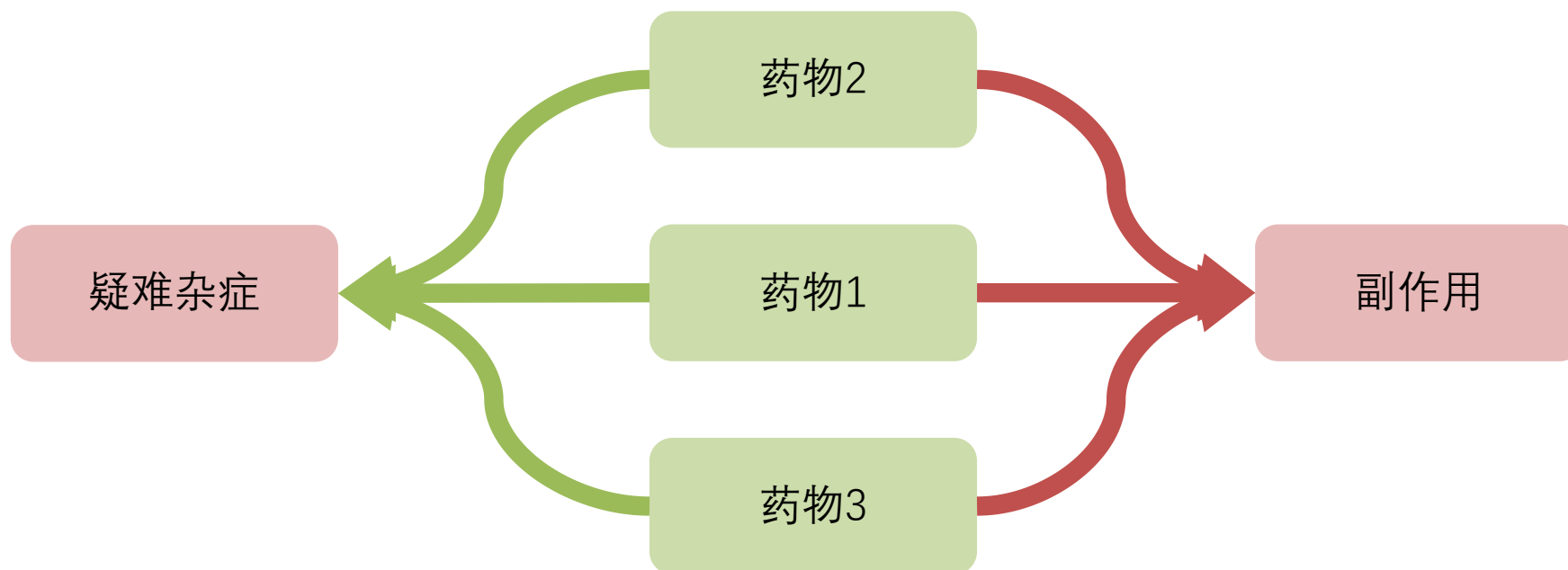


- ❖ 化学分子表示学习
- ❖ 蛋白质相互作用界面预测
- ❖ 药物-蛋白质结合亲和性预测
- ❖ 复方药物副作用预测
- ❖ 疾病预测



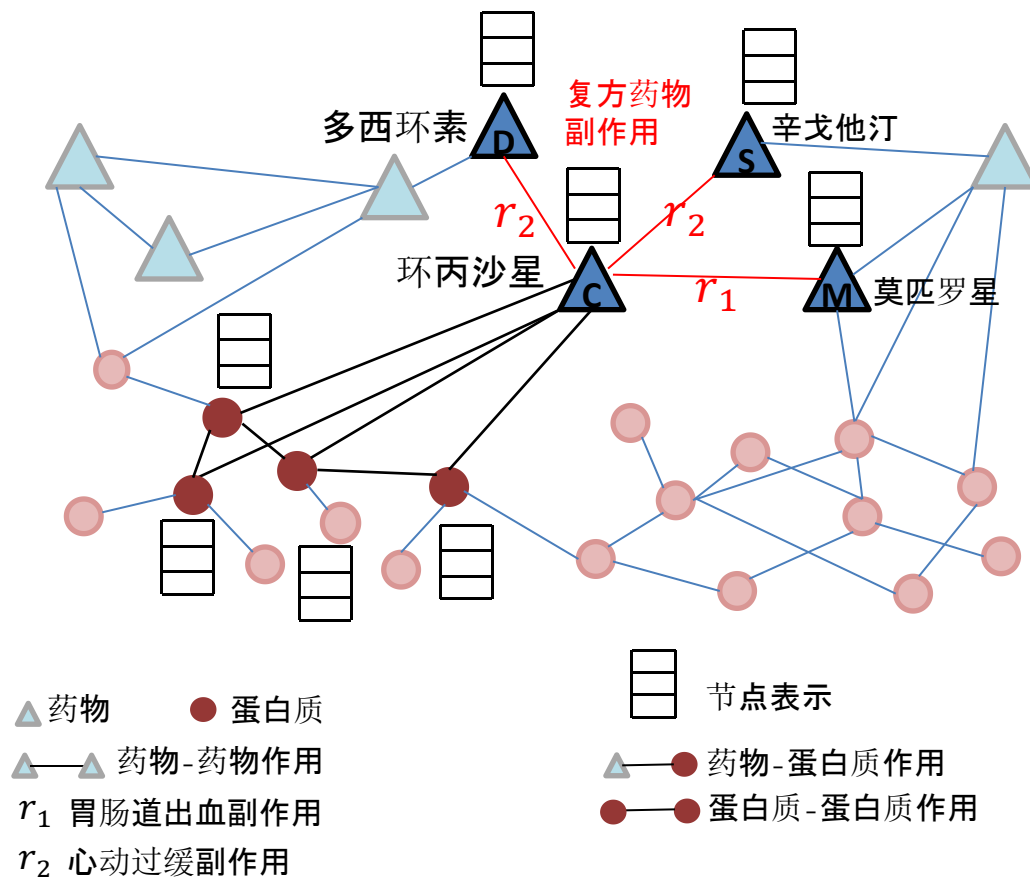


复方药物副作用预测



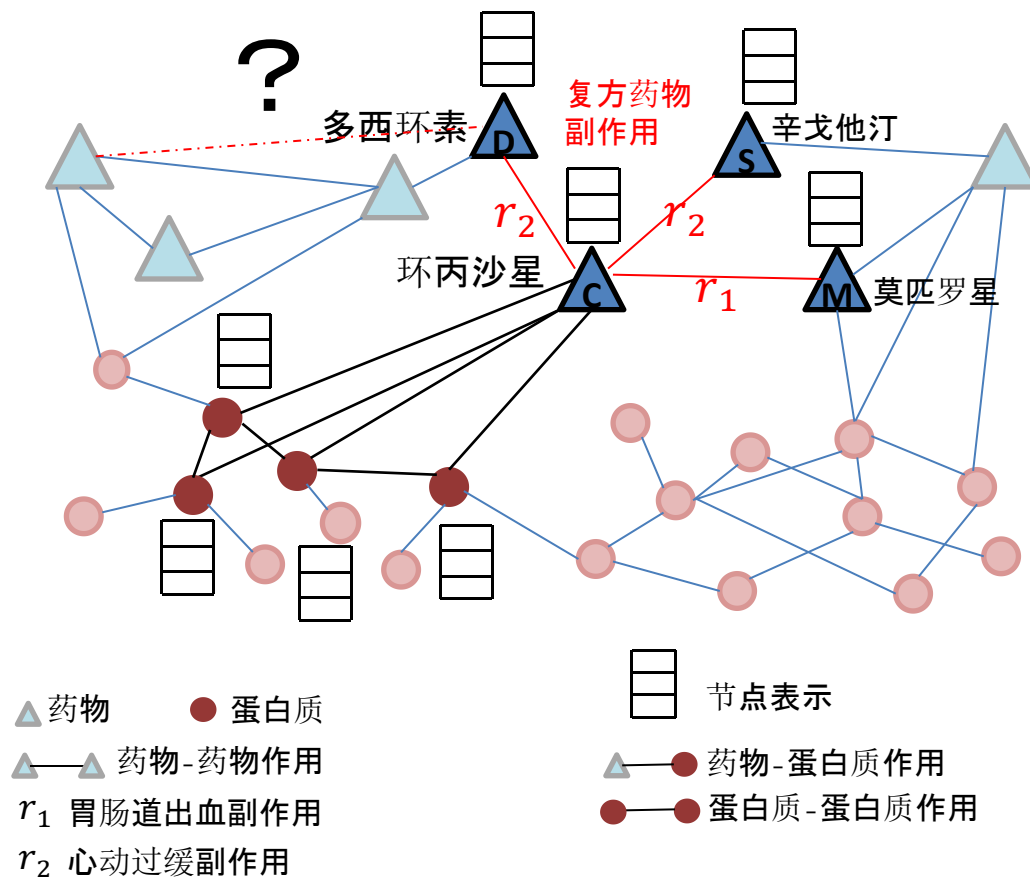


构建多模态图





基于GNN的复方药物副作用预测



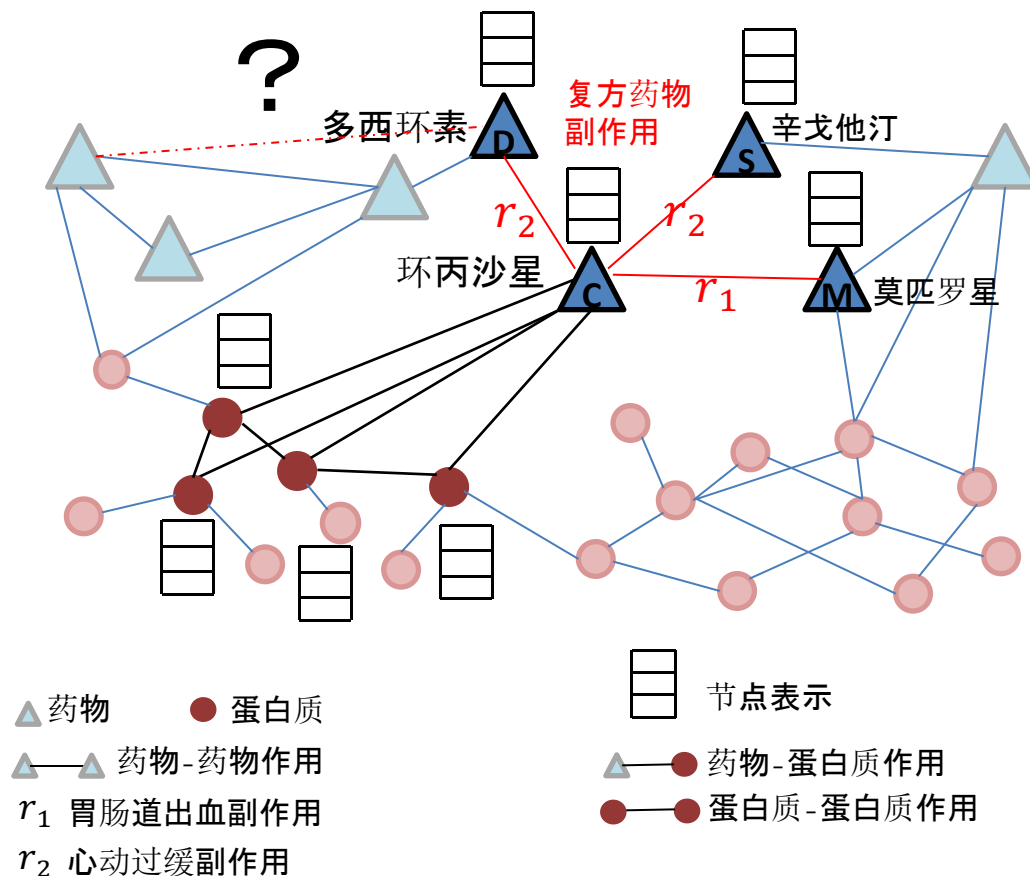
特殊的链接预测任务

预测副作用是
否存在

预测是什么副
作用



基于GNN的复方药物副作用预测



利用GNN学习
节点表示



基于节点表示
进行连接预测

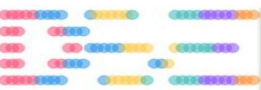


建模药物之间存在
某种特定的副作用
的概率

某个特定的副作用

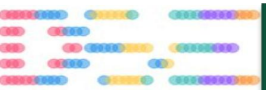
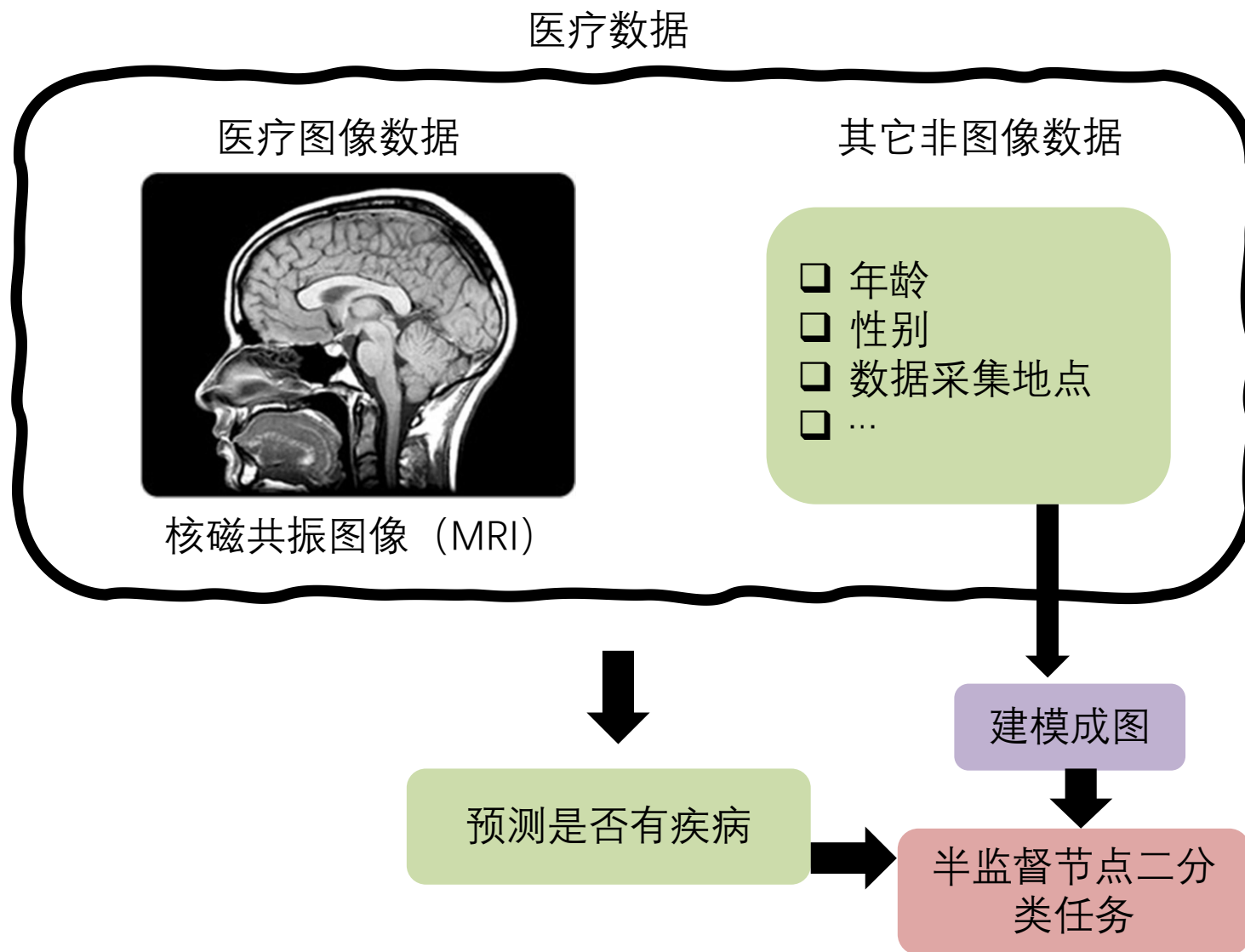
$$p(v_i, r, v_j) = \sigma(z_i^T D_r R D_r z_j)$$

- ❖ 化学分子表示学习
- ❖ 蛋白质相互作用界面预测
- ❖ 药物-蛋白质结合亲和性预测
- ❖ 复方药物副作用预测
- ❖ 疾病预测

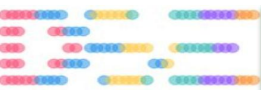




疾病预测



- ❖ 化学分子表示学习
- ❖ 蛋白质相互作用界面预测
- ❖ 药物-蛋白质结合亲和性预测
- ❖ 复方药物副作用预测
- ❖ 疾病预测



感谢聆听！

Thanks for Listening

