<药物-蛋白质相互作用预测\_高维随机投影>随机投影,也是一种降维方法，可用做降维做法的对比算法。其使用的数据集延续了<高维随机投影[12]>提出一种基于最近邻算法的药物-靶点相互作用预测器,但是其数据集由word的代号记录，无法使用。(一个全面的药物-靶点相互作用网络系统已经建立，其中包含四个分类器，用于预测化合物与酶、离子通道、GPCRs和核受体的可药物相互作用。) [开发用于预测药物候选物的敏感性和毒性的计算方法将是有益的[2,3,4]。然而，为了找出药物的确切效果，需要克服许多问题。首先，药物可能有许多效果，包括正面和负面效果，很难发现并阐明可能的效果；其次，即使基因产物只有微小的差异，不同的人对药物的反应也可能完全不同[5,6,7,8]；第三，由于人类的生物相互作用途径极其复杂，追踪药物效果非常困难。因此，如果能更准确地预测药物与靶蛋白之间的相互作用，并更好地理解潜在机制，将对药物开发非常有帮助。](机器学习和数据挖掘方法在计算生物学和生物信息学领域得到了广泛的应用。)

<蛋蛋> 异常检测器 (提出通过高斯过程异常检测器对训练数据中的负链接类别进行去噪。表明了这显著减少了由于错误标记的负链接造成的噪声，并提高了随后的链接预测准确性。)

(我们尝试应用多种异常检测技术，如Parzen窗口、主成分分析（PCA）、最近邻（一种基于距离的方法）以及单类高斯过程，以从训练数据中移除异常的负面链接。 这些方法的详细信息可以在(Clifton 2007; 2009; Pimentel et al. 2014)中找到。经过实验，我们发现基于高斯过程的异常检测给出了最可靠的结果。因此，我们选择了高斯过程模型作为我们分类实验的异常检测器。接下来，我们将简要介绍所有考虑过的方法。)

<Neural Networks2024-AttentionMGT-DTA A multi-modal drug-target affinity prediction using graph transformer and attention mechanism>结合亲和值通常用解离常数（Kd）、抑制常数（Ki）和半最大抑制浓度（IC50）等指标来表示。Davis 数据集中的亲和力用 Kd 值评估，它反映了激酶蛋白家族与相关抑制剂解离常数的选择性测量结果。对于 KIBA 数据集，亲和力值是通过一种名为 KIBA 的方法测量的，该方法利用 Kd、Ki 和 IC50 中包含的统计信息来优化它们之间的一致性。