

DrugPred: модель прогнозирования нежелательных лекарственных реакций при полипрагмазии и рекомендации специалистов на основе EdgeConv-GNN и Bio_ClinicalBERT

Источник: Frontiers in AI — Medicine

Оригинал: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/frai.2026.1874825>

Bio_ClinicalBERT

GNN

NLP

взаимодействие лекарств

глубокое обучение

полипрагмазия

прогнозирование ADR

фармаконадзор

Нежелательные лекарственные реакции (НЛР) вызываются применением медикаментов и считаются серьёзной проблемой в здравоохранении при одновременном использовании различных лекарственных средств, приводящем к лекарственному взаимодействию (ЛВ). Традиционные подходы в основном фокусируются на эффектах, вызванных отдельным препаратом, и не способны улавливать побочные эффекты от комбинаций лекарственных средств.

В данной исследовательской работе предлагается основанный на глубоком обучении фреймворк DrugPred для прогнозирования рисков НЛР путём интеграции индивидуальных эффектов препаратов, статистики взаимодействия лекарств и структурных взаимосвязей между графами лекарственных взаимодействий.

На первом этапе базовые_scores ассоциации между отдельными препаратами и соответствующими им НЛР, такими как тошнота, гепатотоксичность или сердечно-сосудистые эффекты, изучаются с использованием многослойного

перцептрона (МСП), обученного на наборе данных OFFSIDES, предоставляющего вероятностные значения для отдельных пар препарат-НЛР.

На втором этапе графовая нейронная сеть (ГНС) на основе архитектуры EdgeConv используется для моделирования лекарственных взаимодействий с использованием набора данных TwoSIDES, захватывая реляционные зависимости путём использования попарных статистических значений, таких как частота совместного возникновения и статистика взаимодействий, полученных из сигналов фармаконадзора, включая трансформированные сигналы на основе PRR (Proportional Reporting Ratio).

На третьем этапе Bio_ClinicalBERT, предварительно обученная языковая модель на основе трансформера, специально обученная на клинических заметках и биомедицинских текстах, используется для кодирования представлений пар препаратов и комбинирования их с оценками ассоциации и взаимодействия через механизм с управлением вниманием, что позволяет модели адаптивно взвешивать разнородные признаки и окончательно выполнять многометочное прогнозирование НЛР.

Предложенная модель достигает точности 95,73%, F1-меры 0,94, ROC-AUC 0,993 и PR-AUC 0,988. Эти результаты указывают на то, что наш предложенный фреймворк DrugPred эффективен в прогнозировании рисков НЛР с высокой точностью и полнотой.

В целом, предложенный фреймворк обеспечивает масштабируемый подход для прогнозирования НЛР в условиях применения нескольких препаратов. Мы дополнительно расширяем наш фреймворк системой руководства на основе поиска, которая сопоставляет уровни рисков прогнозируемых НЛР с соответствующими системно-органными классами (СОК) и медицинскими специалистами для предоставления рекомендаций с использованием источников реальных клинических данных, таких как PubMed и OpenFDA.