

# 融合生物医学知识图谱和药物序列信息的 药物 - 药物相互作用预测研究

李 硕<sup>1</sup>

LI Shuo

## 摘 要

药物 - 药物相互作用 (DDI) 预测是新药研发、临床试验和临床应用中的一项重要任务。有效识别药物间潜在的 DDI 对患者和药企至关重要。目前深度学习和知识图谱技术可以有效地提取实体的特征, 已被广泛用于 DDI 预测领域, 并且取得了不错的效果。然而, 以往基于机器学习的工作需要依赖大量的标记数据, 基于深度学习的方法通常只考虑药物的分子结构特征信息, 而较少考虑药物与其他生物医学对象之间的关系或拓扑信息, 即药物的生物医学信息。为有效挖掘药物的生物医学信息和化学结构信息在 DDI 预测中的联合作用, 提出了一种多尺度特征融合深度学习模型。首先构造药物数据集知识图谱, 然后使用加入了注意力机制的图神经网络 (GNN) 来捕获知识图谱中药物对之间的高阶邻域拓扑结构, 对于简化分子线性输入规范 (SMILES) 特征, 采用卷积神经网络 (CNN) 提取药物分子的局部化学结构特征, 然后通过双向门控循环单元 (Bi-GRU) 来捕获分子序列的时序依赖, 最后拼接两个模块得到的特征。实验结果表明, 在两个数据集 DrugBank 和 KEGG 上对比基线模型, 所提出模型的准确率分别提高了 0.71% 和 0.81%。

## 关键词

DDI; 知识图谱; 图神经网络; 卷积神经网络; 双向门控循环单元

doi: 10.3969/j.issn.1672-9528.2025.05.016

## 0 引言

对于复杂疾病的治疗, 人们通常采用药物联合疗法。当一种药物与另一种或多种药物联合使用时, 可能会发生药物 - 药物相互作用 (DDI)。然而, 潜在的 DDI 可能导致停药和患者死亡<sup>[1]</sup>。随着药物治疗需求的不断增加, 为减轻非预期药理学作用的影响, 有效识别潜在的 DDI 至关重要。然而, 某些未被认识的相互作用直到被批准用于临床时才会发现。确定 DDI 的基本方法是传统的基于实验室的方法。传统的临床试验、计算机模拟方法和体外 - 体内实验<sup>[2-4]</sup>存在许多缺点, 如费时、费力和费用较高<sup>[5]</sup>。现在已经提出了很多利用药物研究的计算方法, 能够很好地解决传统方法的缺点并具有较好的预测能力。

基于机器学习的方法已被较多用于预测 DDI。这类方法通常通过学习药物之间的相似性特征来预测潜在的 DDI。Takeda 等人<sup>[6]</sup>研究了如何通过药物结构相似性和包含药动学 (PK) 和药效学 (PD) 知识的相互作用网络来预测 DDI。Zhou 等人<sup>[7]</sup>通过基因组相似性来预测新型冠状病毒的药物 - 药物相互作用。Cheng 等人<sup>[8]</sup>计算了 4 种类型的药物相似性作为药物对的特征, 最后应用朴素贝叶斯、逻辑回归和支持向量机等方法来预测 DDI。然而, 这些基于机器学习的方法

在很大程度上依赖于手工特征和领域知识。

基于深度学习的方法可以从大量数据中自动学习具有高鲁棒性和泛化能力的抽象特征, 减轻传统机器学习的局限性。Kwon 等人<sup>[9]</sup>使用具有全连接层的 CNN 从编码的简化分子线性输入规范 (SMILES) 中提取隐藏表示, 然后通过组装各种神经单元有效地预测 DDI。Xu 等人<sup>[10]</sup>利用图神经网络 (GNN) 强大的结构提取能力来提取分子图的多尺度化学子结构表示。Nyamabo 等人<sup>[11]</sup>使用并行图神经网络从药物的分子图表示中学习不同大小和形状的化学子结构, 并使用药物对子结构之间的共享注意力机制在药物对子之间进行通信。Ma 等人<sup>[12]</sup>通过共同注意力机制使用了分子结构和化学亚结构之间相互作用的信息。上述方法都是通过单一的药物序列信息或者分子图的信息来预测药物 - 药物相互作用, 忽略较多丰富的生物医学信息 (如基因、疾病、蛋白受体等)。尽管这些方法在一定程度上取得了成功, 但仍然存在提升的空间, 特别是在考虑药物间具体不良反应类型和丰富的生物医学信息方面。

知识图谱 (KG), 将生物医学领域中分散的、异构的数据 (如蛋白质、基因、药物、疾病等) 构建成多关系语义异构网络, 具有强大的表达能力和建模灵活性。通过使用知识图谱可以获得药物的丰富的特征, 这些特征可以提高 DDI 预测的精度。近年来很多研究都将 KG 应用到机器学习模型中,

1. 贵州财经大学信息学院 贵州贵阳 550025

使用各种嵌入方法提取药物特征, 知识图谱嵌入 (KGE) 模型在药物 - 药物相互作用预测任务中表现出色<sup>[13-14]</sup>。例如, Dai 等人<sup>[15]</sup>提供了一种使用基于 Wasserstein 对抗自编码器的 KGE 的方法, 该方法可以解决离散表示上的梯度消失问题并利用自编码器生成高质量药物相互作用的负样本, 使得模型能够更好地学习药物之间的相互作用关系。Yu 等人<sup>[16]</sup>提出的 SumGNN 模型通过结合高质量特征和子图的多通道知识, 成功地集成了 KG 的外部信息, 来显著改进多类型 DDI 预测。Lin 等人<sup>[17]</sup>提出 KGNN 仅基于 KG 的三重事实来预测 DDI。Zhang 等人<sup>[18]</sup>使用几种 KGE 算法来提取特征向量, 并用于预测潜在的 DDI。这些方法在获取 KG 中每个实体的丰富邻域信息方面存在局限性。而且这些方法并没有过于关注单个药物化学结构特征。然而, 药物的化学结构对于 DDI 的发生至关重要<sup>[19]</sup>。针对以上局限性, 本文提出了一种新的多尺度特征融合模型, 即利用药物化学结构和生物医学 KG 进行 DDI 预测的深度学习框架。使用具有注意力机制的图神经网络来提取 KG 结构关系的丰富信息, 使用 CNN 层和 Bi-GRU 层来对药物 SMILES 序列处理, 提取药物分子的结构特征。最后融合以上两个模块的特征, 最终发送到分类器进行二进制分类预测潜在的 DDI。在两个公开数据集上的实验结果说明了我们的模型相对于其他经典的 DDI 预测模型的优越性。

## 1 模型介绍

### 1.1 具有注意力的知识图神经网络模块

本文选择使用 Att-GNN 是一种改进的 KGNN 来捕获 KG 中药物对之间的高阶邻域拓扑结构。为便于理解, 考虑药物  $a$  和  $b$  的候选对  $(a, b)$ , 其中  $a, b \in N_d$ , ( $N_d$  是知识图中所有药物的集合) 且  $a \neq b$ 。使用  $N_{\text{neighbor}}(e)$  来表示直接连接到药物的实体的集合, 其中  $N_{\text{neighbor}}(e) \in N_e$  ( $N_e$  是知识图中所有关系的集合)。

此前方法未关注过药物  $a$  的邻居结点的重要性程度。然而, 在实际生活中一种药物可能通过多种不同的机制作用于多个靶点, 这些相互作用关系中有些是重要的, 有些是次要的。所以使用注意力机制来计算药物  $a$  和关系  $r$  之间的分数, 其公式为:

$$g(a, r) = \text{softmax}(\alpha(i, r)) \quad (1)$$

式中:  $\alpha$  是注意力得分函数, 计算过程为:

$$\alpha(i, r) = \mathbf{w}^T \tanh(\mathbf{W}_a \mathbf{a} + \mathbf{W}_r \mathbf{r} + \mathbf{b}) \quad (2)$$

式中:  $\mathbf{W}_a \in \mathbb{R}^{d_a \times d}$ ,  $\mathbf{W}_r \in \mathbb{R}^{d_r \times d}$  是可学习的权重矩阵;  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^d$  是偏置向量;  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$  是注意力向量;  $d_a$  是隐藏层维度。

为了更好地表示药物  $a$  的实体  $e (e \in N_e, e \in N_{\text{neighbor}}(e))$  的拓扑邻域结构, 还计算了每个实体  $e$  的邻域的线性组合。

将图神经网络的感受野设置为 2, 来提取高阶结构和语义关系。在真实世界的知识图谱中每个药物的  $N_{\text{neighbor}}(e)$  是不同, 为更好地考虑效率和每个批次数据的固定计算模式, 均匀地采样固定大小的集合  $S(e)$ , 而非使用其完整的邻居

$N_{\text{neighbor}}(e)$ , 然后, 可以获得实体  $e$  的邻域表示  $e_{S(e)}^d$ 。聚合操作中, 需要将实体表示  $e$  及其邻域表示  $e_{S(e)}^d$  聚合成单个向量。使用求和聚合, 将节点的邻居信息通过求和的方式聚合, 对于每个药物  $i$ , 其嵌入向量的聚合为:

$$\mathbf{h}_i^{l+1} = \sigma(\mathbf{W}_l \cdot (\mathbf{h}_i^l + \sum_{j \in N_{\text{neighbor}}(i)} \mathbf{h}_j^l)) \quad (3)$$

式中:  $\mathbf{h}_i^l$  是节点  $i$  在第  $l$  层的嵌入;  $N_{\text{neighbor}}(e)$  是节点  $i$  的邻居集合。通过求和聚合, 邻居节点的嵌入向量  $\mathbf{h}_j^l$  会被直接累加。

### 1.2 SMILES 序列模块

在这一模块中, 使用药物的 SMILES 字符串作为模型的输入, 先经过 Embedding, 直接将其转化为原子向量, 后输入到 CNN 中, 捕捉到药物分子的局部化学结构特征 CNN 层可以帮助“平滑”嵌入后的信息, 通过卷积操作强调局部结构信息, 进而提高 GRU 捕捉时序信息的效率。由于 GRU 的单向性, 无法从后向前编码信息。可能会影响 SMILES 字符串格式的分子化合物部分结构信息的获取。因此, 在本文中采用了 Bi-GRU<sup>[20]</sup>, 而不是直接使用 GRU 神经网络。Bi-GRU 具有 GRU 单元的循环神经网络在前向和后向传播过程中获取信息。Bi-GRU 用两个子层在两个方向上处理输入序列, 以便经过 CNN 处理过的序列能够捕获完整的输入分子。接下来, 将卷积层的输出  $S$ , 输入到 Bi-GRU 层中。Bi-GRU 会从前向和后向分别处理序列, 以捕获分子序列中的上下文信息。

对于 Bi-GRU 的输出  $\mathbf{h}_t$ , 计算公式为:

$$\begin{cases} \vec{\mathbf{h}}_t = \text{GRU}(\mathbf{x}_t, \vec{\mathbf{h}}_{t-1}) \\ \leftarrow \mathbf{h}_t = \text{GRU}(\mathbf{x}_t, \leftarrow \mathbf{h}_{t-1}) \\ \mathbf{h}_t = \mathbf{W}^T \vec{\mathbf{h}}_t + \mathbf{W}^V \leftarrow \mathbf{h}_t \\ \mathbf{o}_t = \Phi(\mathbf{W}^O \mathbf{h}_t) \end{cases} \quad (4)$$

式中:  $\mathbf{W}^T$  和  $\mathbf{W}^V$  是双向隐藏状态对应的权重系数;  $\mathbf{W}^O$  是隐藏层和输出层之间的权重系数, GRU 的公式为:

$$\mathbf{r}_t = \sigma(\mathbf{W}^r \mathbf{x}_t + \mathbf{U}^r \mathbf{h}_{t-1}) \quad (5)$$

$$\mathbf{z}_t = \sigma(\mathbf{W}^z \mathbf{x}_t + \mathbf{U}^z \mathbf{h}_{t-1}) \quad (6)$$

式中:  $\mathbf{r}_t$  和  $\mathbf{z}_t$  分别是重置门和更新门;  $\sigma(\cdot)$  是一个 sigmoid 函数, 输入为  $\mathbf{x}_t$ , 前一个隐藏状态表示为  $\mathbf{h}_{t-1}$ ;  $\mathbf{W}^r, \mathbf{W}^z \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ,  $\mathbf{U}^r, \mathbf{U}^z \in \mathbb{R}^{n \times n}$  是学习到的模型参数;  $n$  是隐藏状态的大小;  $m$  是嵌入的大小。新的隐藏单元  $\mathbf{h}_t$  计算为:

$$\tilde{\mathbf{h}}_t = \tanh(\mathbf{W} \mathbf{x}_t + \mathbf{U}(\mathbf{r}_t \odot \mathbf{h}_{t-1})) \quad (7)$$

$$\mathbf{h}_t = \tanh(\mathbf{z}_t \odot \mathbf{h}_{t-1} + (1 - \mathbf{z}_t) \odot \tilde{\mathbf{h}}_t) \quad (8)$$

式中:  $\tanh(\cdot)$  是激活函数;  $\odot$  是逐元素乘法;  $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ,  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  是模型参数。

### 1.3 药物 - 药物相互作用预测模块

DDI 预测建模为二元分类任务, 将两个模块的药物表示拼接起来作为一个药物的最终表示  $\mathbf{H}_D$ , 包括基于 KG 的表示

$H^s$ ，基于 SMILES 序列的药物表示  $H^s$ 。该过程可描述为：

$$H_D = [H^s \| H^s] \quad (9)$$

将一对药物的两种特征进行拼接，后将其输入全连接层中，预测 DDI 概率得分，用公式表示为：

$$\hat{y}_{ij} = \sigma(\text{MLP}([H_i \| H_j])) \quad (10)$$

式中： $\hat{y}_{ij}$ 表示在二分类任务中药物对相互作用的可能性； $\sigma$ 表示 sigmoid 函数。

在训练中，使用最小化交叉熵损失函数来优化参数，用公式表示为：

$$L = -[y_{ij} \log \hat{y}_{ij} + (1 - y_{ij}) \log (1 - \hat{y}_{ij})] \quad (11)$$

式中： $y_{ij} \in \{0,1\}$ 表示二进制类任务中药物对 $(d_i, d_j)$ 的相互作用标签。

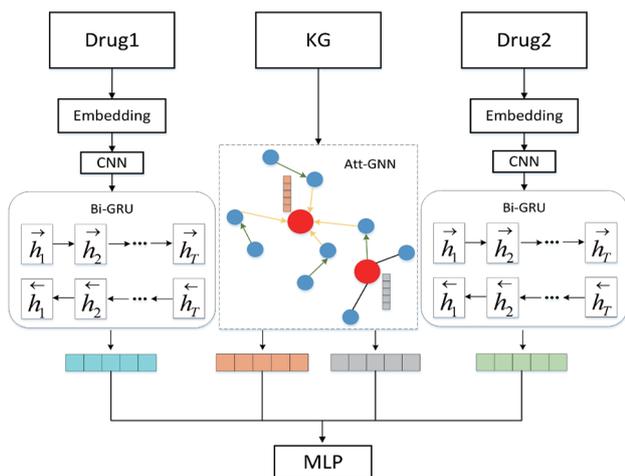


图 1 模型架构图

图 1 是本文模型的整体架构图，通过 CNN 和 Bi-GRU 处理药物的分子结构信息，并通过 Att-GNN 处理知识图谱药物相互作用的知识，最后将这些特征拼接起来输入到多层感知机。

## 2 实验分析

### 2.1 数据集

使用两个数据集来评估本文提出的模型。

**DrugBank:** 从 DrugBank (v5.1.4) 解析提供的配置文件中获得经过验证的 DDI 三元组，并添加药物标识符组合的边列表，获得 2 578 种已批准的小分子药物和 612 388 个已批准的 DDI，涵盖 13 339 种生物分子。

**KEGG-drug:** 解析来自 KEGG 的生物分子并将其映射到 DrugBank 标识符 (ID)，结果显示有 1 925 种已批准药物和 56 983 种已批准相互作用，分别涵盖 11 147 种生物分子和 324 183 种相互作用。

### 2.2 基线模型

将本文提出的模型与各种基线进行了比较，比较的基线

模型如下：

GraRep 模型<sup>[21]</sup>学习低维向量来表示图中的顶点，并且与现有工作不同，将图的全局结构信息集成到学习过程中。DeepWalk<sup>[22]</sup>将最近在语言建模和无监督特征学习中的进步从单词序列推广到图。Struc2vec<sup>[23]</sup>使用层次结构来度量不同尺度上的节点相似性，并构建一个多层图来编码网络中所有节点之间的结构相似性。通过在该多层图上进行随机游走来生成每个节点的结构上下文，然后利用语言模型来学习节点的潜在表示。GAE<sup>[24]</sup>利用图卷积网络来编码节点，并学习节点表示的分布。在分布中采样得到节点的向量表示后，通过链路预测重新构建图。DeepDDI 开发了一种基于深度学习的方法，该方法基于主成分分析来降低药物特征的维度。KG-DDI<sup>[25]</sup>是一种基于 KG 的 DDI 预测方法，通过包含来自多个数据源的集成知识图的 12 000 多个药物特征，并使用 CNN-LSTM 模型进行嵌入。KGNN 将图中的节点和边视为数据，通过神经网络学习节点之间的关系，实现对图数据的表示学习。

### 2.3 模型性能评估

为评估本文所提出方法的有效性，将提出的模型与基线模型进行比较，采用 ACC、AUPR、AUC-ROC、 $F_1$ -scores 来作为评估模型性能的指标。如表 1~2 所示，在 DrugBank 数据集上的准确率达到 0.963 2，在 KEGG-drug 数据集上的准确率达到了 0.903 1。这些结果强调了模型的有效性和优越性。

表 1 在 DrugBank 数据集上，本文提出的模型和基线模型性能比较结果

Molecule	ACC	AUPR	AUC-ROC	$F_1$
GraRep	0.844 3	0.911 5	0.923 0	0.846 1
DeepWalk	0.834 9	0.907 0	0.918 1	0.835 7
struc2vec	0.788 2	0.867 2	0.873 5	0.796 2
GAE	0.749 1	0.740 3	0.808 5	0.788 9
DeepDDI	0.812 3	0.919 3	0.926 1	0.846 6
KG-DDI	0.786 7	—	0.786 7	0.784 3
KGNN	0.956 1	0.989 2	0.991 2	0.956 6
Ours	<b>0.963 2</b>	<b>0.989 9</b>	<b>0.992 2</b>	<b>0.960 1</b>

表 2 在 KEGG-drug 数据集上，本文提出的模型和基线模型性能比较结果

Molecule	ACC	AUPR	AUC-ROC	$F_1$
GraRep	0.871 8	0.905 5	0.930 5	0.874 8
DeepWalk	0.854 7	0.901 1	0.920 8	0.857 0
struc2vec	0.843 6	0.886 1	0.908 6	0.847 6
GAE	0.758 6	0.757 1	0.833 4	0.788 8
DeepDDI	0.822 9	0.844 2	0.899 4	0.796 6
KG-DDI	0.815 4	—	0.815 4	0.815 2
KGNN	0.895 0	0.953 3	0.951 8	0.898 2
Ours	<b>0.903 1</b>	<b>0.958 2</b>	<b>0.958 8</b>	<b>0.902 3</b>

通过比较不同的基线模型的结果,可以得出以下结论:对比以往使用知识图嵌入的方法,本文模型可以有效地捕获知识图谱中药物对之间的高阶邻域拓扑结构。对比传统使用分子序列结构的方法,本文方法通过融合知识图谱和药物分子的 SMILES 序列的信息也有着很大的提高。

### 3 结论

本文提出了一种用于药物相互作用事件预测的模型。相比于以往直接学习节点嵌入的模型,本文模型通过在药物知识图谱上引入具有注意力的图神经网络,有效地利用了拓扑信息,语义关系以及药物及相关实体的邻域信息。此外,还利用了分子的化学结构信息,有效地挖掘了多模态数据的跨模态互补性。实验结果表明,本文提出的模型的预测性能优于经典的 DDI 预测模型。

#### 参考文献:

- [1] QIU Y, ZHANG Y, DENG Y F, et al. A comprehensive review of computational methods for drug-drug interaction detection[J]. *IEEE/ACM transactions on computational biology and bioinformatics*, 2022, 19(4): 1968-1985.
- [2] BUI Q C, SLOOT P M A, VAN MULLIGEN E M, et al. A novel feature-based approach to extract drug-drug interactions from biomedical text[J]. *Bioinformatics*, 2014, 30(23): 3365-3371.
- [3] RAJA K, PATRICK M, ELDER J T, et al. Machine learning workflow to enhance predictions of adverse drug reactions (ADRs) through drug-gene interactions: application to drugs for cutaneous diseases[J]. *Scientific reports*, 2017, 7(1): 3690.
- [4] YAN S, JIANG X Q, CHEN Y. Text mining driven drug-drug interaction detection[C]//2013 IEEE international conference on bioinformatics and biomedicine. Piscataway:IEEE,2013: 349-354.
- [5] WHITEBREAD S, HAMON J, BOJANIC D, et al. Keynote review: in vitro safety pharmacology profiling: an essential tool for successful drug development[J]. *Drug discovery today*, 2005, 10(21): 1421-1433.
- [6] TAKEDA T, HAO M, CHENG T J, et al. Predicting drug-drug interactions through drug structural similarities and interaction networks incorporating pharmacokinetics and pharmacodynamics knowledge[J/OL]. *Journal of cheminformatics*, 2017[2024-05-25]. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/28316654/>. DOI: 10.1186/s13321-017-0200-8.
- [7] ZHOU Y D, HOU Y, SHEN J Y, et al. Network-based drug repurposing for novel coronavirus 2019-nCoV/SARS-CoV-2[J/OL]. *Cell discovery*, 2020[2024-09-25]. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/32194980/>. DOI: 10.1038/s41421-020-0153-3.
- [8] CHENG F X, ZHAO Z M. Machine learning-based prediction of drug-drug interactions by integrating drug phenotypic, therapeutic, chemical, and genomic properties[J]. *Journal of the american medical informatics association*, 2014, 21(2): 278-286.
- [9] KWON S, YOON S. DeepCCI: end-to-end deep learning for chemical-chemical interaction prediction[EB/OL](2017-12-14)[2024-11-10]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1704.08432>.
- [10] XU N, WANG P H, CHEN L, et al. MR-GNN: multi-resolution and dual graph neural network for predicting structured entity interactions[EB/OL]. (2019-05-23)[2024-05-15]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1905.09558>.
- [11] NYAMABO A K, YU H, LIU Z, et al. Drug-drug interaction prediction with learnable size-adaptive molecular substructures[J]. *Briefings in bioinformatics*, 2022, 23(1): 441.
- [12] MA M, LEI X J. A dual graph neural network for drug-drug interactions prediction based on molecular structure and interactions[J]. *PLOS computational biology*, 2023, 19(1): 1010812.
- [13] LACROIX T, USUNIER N, OBOZINSKI G. Canonical tensor decomposition for knowledge base completion[EB/OL].(2018-06-19)[2024-06-26]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1806.07297>
- [14] DETTMERS T, MINERVINI P, STENETORP P, et al. Convolutional 2D knowledge graph embeddings[C]//AAAI'18/IAAI'18/EAAI'18: Proceedings of the Thirty-Second AAAI Conference on Artificial Intelligence and Thirtieth Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference and Eighth AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence. Palo Alto: AAAI Press, 2018:1811-1818.
- [15] DAI Y F, GUO C H, GUO W Z. Drug-drug interaction prediction with Wasserstein adversarial autoencoder-based knowledge graph embeddings[J]. *Briefings in bioinformatics*, 2021,22(4):256.
- [16] YU Y, HUANG K X, ZHANG C, et al. SumGNN: multi-typed drug interaction prediction via efficient knowledge graph summarization[J]. *Bioinformatics*, 2021, 37(18): 2988-2995.
- [17] LIN X, QUAN Z, WANG Z-J, et al. KGNN: knowledge graph neural network for drug-drug interaction prediction[C]// Proceedings of the Twenty-Ninth International Conference on International Joint Conferences on Artificial Intelligence. New York:ACM, 2021:2739-2745.

(下转第 80 页)

由图3的对比结果可知,本文提出的基于边缘先验与深度学习相结合的方法在各类图像上均取得最高的SSIM值,且值更加接近1,证明该方法展现出更高的图像复原精度和更强的细节保留能力,使去雾后的图像更贴近现实,提高了视觉效果。这一优异表现得益于边缘先验和深度学习的共同作用。两者的结合使该方法能够在复杂多变的图像环境中实现稳定且高效的去雾效果。

## 6 结语

本研究不仅革新了传统的图像去雾方法,更在视觉传达领域开辟新的应用前景。通过引入边缘先验,去雾处理变得更为精确,保留了图像的关键细节,有效解决了过度平滑或模糊的问题。同时,结合深度学习技术,模型展现出了强大的泛化能力,能够灵活应对多种复杂的雾天环境。随着AI技术的进步与改进,此算法将会在许多方面得到广泛的应用,本文将继续深化研究,致力于开发更高效、更稳定的图像去雾方法,为视觉传达领域的发展贡献更多力量。

### 参考文献:

[1] 王士斌,郭嘉懿.基于高低频特征增强和透射率修正的复杂图像去雾方法[J].吉林大学学报(理学版),2024,62(5):1138-1144.  
 [2] 井新新.基于视觉传达技术的舰船航行图像去雾增强方法[J].舰船科学技术,2024,46(7):163-166.  
 [3] 罗小同,杨汶锦,曲延云,等.基于全局局部协同的非均匀

图像去雾方法[J].自动化学报,2024,50(7):1333-1344.  
 [4] 林伟,赵继平,刘世章.基于视觉传达技术的无参考低光照图像增强方法[J].激光杂志,2024,45(2):140-145.  
 [5] 张凯丽,王安志,熊娅维,等.基于Transformer的单幅图像去雾算法综述[J].计算机科学与探索,2024,18(5):1182-1196.  
 [6] 王凯娜,张玉昆,葛海飞.基于分布式光纤的视觉传达图像清晰化处理系统[J].激光杂志,2023,44(5):198-204.  
 [7] 倪倩.基于时空域滤波的视觉传达图像的微小细节增强方法[J].黑龙江工业学院学报(综合版),2022,22(10):66-71.  
 [8] 李灿林,朱金娟,刘金华,等.一种自适应SSR的雾天低照度图像增强方法[J].计算机应用与软件,2022,39(9):233-239.  
 [9] 姜雨彤,宋海平,王光辉.基于质量评价最优的无人机航拍图像去雾方法[J].兵工学报,2022,43(1):148-158.  
 [10] 郭晨鸿,谢维成,杨杨.高斯加权暗通道及边界约束的航空图像去雾算法[J].电光与控制,2020,27(10):17-21.

### 【作者简介】

马浩(1989—),男,河南新郑人,硕士,助教,研究方向:计算机视觉、深度学习。

马孟飞(1997—),男,河南郑州人,硕士,助教,研究方向:物联网技术、深度学习。

(收稿日期:2024-12-13 修回日期:2025-05-14)

(上接第76页)

[18] ZHANG W, JING K H, HUANG F, et al. SFLN: a sparse feature learning ensemble method with linear neighborhood regularization for predicting drug-drug interactions[J]. Information sciences, 2019, 497: 189-201.  
 [19] RYU J Y, KIM H U, LEE S Y. Deep learning improves prediction of drug-drug and drug-food interactions[J]. Proceedings of the national academy of sciences of the united states of america, 2018, 115(18):4304-4311.  
 [20] LIN X, QUAN Z, WANG Z J, et al. A novel molecular representation with BiGRU neural networks for learning atom[J]. Briefings in bioinformatics, 2019, 21(6):2099-2111.  
 [21] CAO S S, LU W, XU Q K. GraRep: Learning graph representations with global structural information[C]// Proceedings of the 24th ACM International on Conference on Information and Knowledge Management. New York: ACM, 2015: 891-900.  
 [22] PEROZZI B, AL-RFOU R, SKIENA S. DeepWalk: online learning of social representations[EB/OL].(2014-06-27)[2024-06-26].https://doi.org/10.48550/arXiv.1403.6652.

[23] RIBEIRO L F R, SAVERESE P H P, FIGUEIREDO D R. Struc2vec: learning node representations from structural identity[EB/OL].(2017-07-03)[2024-03-16].https://doi.org/10.48550/arXiv.1704.03165.  
 [24] KIPF T N, WELLING M. Variational graph auto-encoders[EB/OL].(2016-11-21)[2024-06-29].https://doi.org/10.48550/arXiv.1611.07308.  
 [25] KARIM M R, COCHEZ M, JARES J B, et al. Drug-drug interaction prediction based on knowledge graph embeddings and convolutional-LSTM network[C]// Proceedings of the 10th ACM International Conference on Bioinformatics, Computational Biology and Health Informatics. New York: ACM, 2019: 113-123.

### 【作者简介】

李硕(1999—),男,河南南阳人,硕士研究生,研究方向:计算机应用技术。

(收稿日期:2025-01-07 修回日期:2025-05-13)