

为了同时利用这两者，Junyuan Shang 等人^[131]在 2019 年提出了 GAMENet，该网络同时使用纵向 EHR 数据和基于药物-药物相互作用 (DDI) 的药物知识作为输入。GAMENet 同时嵌入 EHR 图和 DDI 图，然后将它们输入记忆库 (Memory Bank) 以获得最终输出。

为了进一步利用层级知识进行药物推荐，Shang 等人^[132]结合 GNN 和 BERT 的功能来学习药物代码表示。他们首先使用 GNN 对药物的内部层次结构进行编码，然后将嵌入的数据输入经过预训练的 EHR 编码器和用于下游预测任务的微调过的分类器。

12.2.4 蛋白质和分子交互预测

Alex Fout 等人^[5]在 2017 年发表的论文中专注于名为蛋白质作用位点预测 (protein interface prediction) 的任务，这一任务预测蛋白质之间的相互作用以及作用位点，具有较大的难度。他们所提出的基于 GCN 的方法分别学习配体和受体蛋白残基的表示，并将它们合并进行成对分类。2019 年，Nuo Xu 等人^[133]引入了 MR-GNN，它利用多分辨率模型来捕获多尺度节点特征。该模型还利用两个 LSTM 网络来逐步捕获两个图之间的交互。

GNN 也可以用于生物医学工程。2018 年，Sungmin Rhee 等人^[134]利用蛋白质-蛋白质相互作用网络，基于图卷积和关系网络进行了乳腺癌亚型分类。同年，Marinka Zitnik 等人^[135]提出了基于 GCN 的多元药方副作用预测模型。他们为药物和蛋白质相互作用网络建模，并分别处理不同类型的边。