

موقعیتیابی مجدد دارو به عنوان روشی برای شناسایی نشانه‌های درمانی جدید برای داروها یک راهبرد مؤثر برای کشف و توسعه دارو است. پیش‌بینی تعاملات دارو-بیماری یکی از زمینه‌های محاسباتی موقعیتیابی مجدد دارو است که در سال‌های اخیر به یک موضوع چالش‌برانگیز در کشف دارو تبدیل شده است. بررسی نظام‌مند روابط پیچیده میان داروها و بیماری‌ها می‌تواند به کشف ارتباطات جدید کمک کند. در این تحقیق، ما با در نظر گرفتن همه فرآیندهای بیولوژیکی مربوط به اثر مولکولی داروها بر بیماری‌ها سعی در بهبود دقت پیش‌بینی داریم. برای این هدف روابط نظام‌مند چند سطحی بین داروها و بیماری‌ها می‌توانند برای ساخت شبکه ناهمگن چندلایه ترکیب می‌شوند. در این تحقیق، ما یک روش برای شناسایی روابط دارو-بیماری از طریق یک الگوریتم قدم زنی مؤثر در یک شبکه ناهمگن چندلایه ارائه می‌دهیم. این شبکه از ترکیب زیر شبکه‌های دارو، هدف، مسیر بیولوژیکی، ژن و بیماری تشکیل می‌شود. این روش می‌تواند نشانه‌های جدید را برای داروهای موجود و همچنین نشانه‌های بالقوه را برای داروهای کنار گذاشته شده که اطلاعات درمانی مشخصی ندارند پیش‌بینی کند. نتایج ارزیابی روش ارائه شده نشان می‌دهد که یکپارچه کردن اطلاعات داروها و بیماری‌ها در یک شبکه ناهمگن از طریق مسیرهای بیولوژیکی که هدف‌های دارو و ژن‌های مرتبط با بیماری را متصل می‌کنند به شناسایی تعاملات دارو-بیماری کمک می‌کند.