

HIỂU BIẾT VỀ THUỐC TRONG ĐIỀU TRỊ DỰA TRÊN LOGIC MÔ TẢ UNDERSTANDING DRUGS IN TREATMENT BY DESCRIPTION LOGICS

Lê Thị Bảo Ngọc

Trường Cao đẳng Sư phạm Kiên Giang, Việt Nam

Ngày tòa soạn nhận bài 13/7/2020, ngày phản biện đánh giá 11/8/2020, ngày chấp nhận đăng 14/8/2020.

TÓM TẮT

Hiểu biết về thuốc là một vấn đề thiết yếu ảnh hưởng trực tiếp đến quá trình điều trị cho bệnh nhân. Sự ảnh hưởng này có thể tính từ việc kết hợp các loại thuốc đến việc chọn lựa loại thuốc tương ứng với trạng thái vật lý đặc thù cho một loại bệnh nhất định. Khi số lượng các loại thuốc khá lớn, việc nắm rõ kiến thức về chúng là rất khó. Do vậy, thông tin về thuốc cần được biểu diễn thật hợp lý để có thể trích xuất kiến thức một cách nhanh chóng và hiệu quả. Với khả năng biểu diễn tri thức và suy luận, logic mô tả là một lựa chọn tốt để trình bày kiến thức về thuốc. Bài viết này tập trung vào việc sử dụng logic mô tả để xây dựng một cơ sở tri thức về thuốc. Chúng tôi chạy thử mô hình thông qua Ontology thuốc được tạo bằng phần mềm Protégé dựa trên thông tin thuốc tra cứu từ tài liệu liên quan. Cùng với các dịch vụ suy luận, Ontology về thuốc có thể giúp người dùng sàng lọc thuốc trong điều trị trên cơ sở kiến thức nền được thiết lập, đồng thời nó cũng hỗ trợ việc truy xuất thông tin thuốc khi cần.

Từ khóa: Logic mô tả; Ontology thuốc; Biểu diễn thuốc; Logic mô tả về thuốc; Thuốc và Protégé.

ABSTRACT

Knowledge of drugs is an essential issue that directly affects the treatment process for patients. This influence can range from combining drugs to choosing drugs that correspond to the physical state specific to a particular disease. When the number of drugs is quite large, it is difficult to gain knowledge about them. Therefore, information about drugs should be presented properly to be able to extract knowledge quickly and effectively. By the capability of knowledge representation and reasoning, description logics (DLs) can be used to represent knowledge about drugs. This article focuses on building a knowledge base about drugs by DLs. We also construct a drug ontology on Protégé with drug knowledge from relevant documents to test. Through the inferring service, the drug ontology can help users find out drugs quickly in treatment based on the basic knowledge built, and support to access the information of drugs.

Keywords: Description Logics (DLs); Drug Ontology; Drug representation; DLs for drugs; Drug and Protégé.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Các công tác điều trị bệnh đều mang một mục tiêu chung đó là nỗ lực làm giảm hoặc mất đi các triệu chứng, phục hồi sức khỏe cho người bệnh. Quá trình điều trị bệnh thực chất là quá trình dùng thuốc tác động lên cơ thể người đang mang bệnh. Xét một cách tổng thể, việc điều trị sẽ bao gồm một số thành phần thiết yếu và các mối quan hệ giữa chúng để có thể đạt đến mục tiêu điều trị.

Như vậy, những thành phần trong mô hình điều trị là thuốc, bệnh và người với những mô tả cụ thể sau:

- Người: Những người mắc bệnh và cần được chữa trị một căn bệnh cụ thể.
- Thuốc: Tất cả các loại thuốc phục vụ cho công tác trị bệnh.
- Bệnh: Những loại bệnh đang cần được điều trị.

Tuy nhiên, sự tương tác phức tạp giữa các thành phần và tính đa dạng của chúng luôn là thách thức trong quá trình điều trị. Ngoài những vấn đề tương tác và biểu diễn thông tin cho các thành phần trong mô hình, tương tác thuốc và biểu diễn thông tin thuốc trong điều trị có vai trò rất quan trọng, có khả năng hỗ trợ việc ra quyết định được thực hiện dễ dàng hơn.

Bài viết tiếp cận logic mô tả để biểu diễn thông tin thuốc và sự tương tác giữa chúng trong điều trị. Phần mềm Protégé là công cụ chúng tôi sẽ sử dụng để hiện thực hóa mô hình dưới dạng Ontology.

2. GIẢI QUYẾT VẤN ĐỀ

2.1 Logic mô tả

2.1.1 Tổng quan

Logic mô tả (description logics) là một trong những thuật ngữ mới nhất trong họ biểu diễn tri thức. Trước khi cụm từ “logic mô tả” trở nên phổ biến như hiện nay, “ngôn ngữ biểu diễn tri thức” hoặc “ngôn ngữ khái niệm” là những cụm từ dùng để chỉ logic mô tả [1], [2]. Nó cũng được xem như là những ngôn ngữ dùng cho mục đích biểu diễn tri thức và suy luận [3].

Logic mô tả có thể được sử dụng để biểu diễn kiến thức khái niệm của một miền ứng dụng ở dạng cấu trúc và chính thức được hiểu rõ bằng cách phân lớp các khái niệm và cá thể. Kết quả phân lớp các khái niệm là các mối quan hệ bao hàm giữa các khái niệm của các thuật ngữ cho trước. Do vậy, cấu trúc dưới dạng một hệ thống phân cấp được dùng để xây dựng thuật ngữ. Cấu trúc này cung cấp thông tin có giá trị trong việc kết nối giữa các khái niệm khác nhau và nó có thể tăng tốc các dịch vụ lập luận khác. Việc phân lớp cá thể xác định liệu rằng các cá thể cho trước có luôn là một thể hiện của một khái niệm nào đó hay không. Thông qua đó, nó sẽ cung cấp những thông tin hữu ích về tính chất của cá thể. Hơn nữa, các mối quan hệ cá thể có thể kích hoạt các ứng dụng luật thông qua những sự kiện thêm vào cơ sở tri thức.

2.1.2 Cơ sở tri thức

Hệ thống biểu diễn tri thức dựa trên logic mô tả cung cấp các công cụ phục vụ cho việc tạo ra cơ sở tri thức, thiết lập suy luận bên trong cơ sở tri thức được tạo ra và thực thi cơ sở tri thức đó.

Một cơ sở tri thức được biểu diễn bằng logic mô tả thường có hai phần [1], [2], [4], [5]. Phần thuật ngữ (TBox), xác định các khái niệm và cũng nêu rõ các ràng buộc bổ sung về việc diễn giải các khái niệm này và phần khẳng định (ABox), mô tả các cá thể và các mối quan hệ giữa các cá thể cũng như mối hệ giữa các thể với khái niệm. Ngoài ra, thông qua các dịch vụ suy luận ta có thể nhận được tri thức đúng đắn. Bên cạnh việc lưu trữ các thuật ngữ và khẳng định, hệ thống logic mô tả cũng cung cấp các dịch vụ suy luận về chúng chẳng hạn như nhiệm vụ suy luận để xác định xem mô tả có thỏa mãn hay không?

2.1.3 Ngôn ngữ mô tả

Những khái niệm phức tạp trong logic mô tả được xây dựng bằng ngôn ngữ thuộc tính (attributive language) viết tắt là AL, “một logic mô tả cung cấp khái niệm nguyên tố, đỉnh, đáy, phủ định, giao, lượng từ với mọi và lượng từ tồn tại” [6] hoặc ngôn ngữ AL mở rộng được gọi là ngôn ngữ mô tả họ AL [1], [2]. Bên cạnh đó cũng có nhiều ngôn ngữ thuộc họ tính toán có những khả năng diễn đạt khác như là SHIO, SHION... [7]. Từ những mô tả mô tả và luật trong xây dựng khái niệm, ngôn ngữ mô tả có thể hỗ trợ tạo ra các khái niệm trong hệ thống cơ sở tri thức.

a. Ngôn ngữ mô tả cơ bản AL

Các yếu tố cơ bản của AL là các khái niệm và vai trò của các khái niệm nguyên tố. Những mô tả phức tạp được hình thành bởi sự tích hợp của các phần tử. Trong ký hiệu trừu tượng, các chữ cái A và B được sử dụng cho khái niệm nguyên tố, chữ R là vai trò nguyên tố, và chữ cái C và D dùng để chỉ mô tả khái niệm. Mô tả khái niệm trong AL được hình thành theo các quy tắc cú pháp sau trong bảng 1 [1].

Bảng 1. Cú pháp của ngôn ngữ AL

$C, D \rightarrow A$	(khái niệm nguyên tố)
\top	(khái niệm đỉnh)
\perp	(khái niệm đáy)
$\neg A$	(phủ định khái niệm)
$C \sqcap D$	(giao khái niệm)
$\forall R. C$	(lượng từ với mọi)
$\exists R. \top$	(lượng từ tồn tại)

b. Họ ngôn ngữ AL

Bảng 2 liệt kê một số thành phần của ngôn ngữ họ AL và họ tính toán [7]. ALC là sự kết hợp giữa ba ký tự trong đó các hai ký tự AL dùng để chỉ ngôn ngữ thuộc tính và chữ C có nghĩa là bổ sung. Ngoài ra, còn các ký tự khác khác bao gồm:

- I là nghịch đảo.
- F là giới hạn chức năng.
- H là vai trò phân cấp.
- Q là giới hạn số lượng tiêu chuẩn.

Bảng 2. DLs và các thành phần ngôn ngữ

Tên ngôn ngữ mô tả	Cơ chế mệnh đề			Lượng từ với mọi tồn tại	Giới hạn chức năng	Giới hạn số lượng	Tính phân cấp	Tính đảo	Tính bắc cầu	Danh đỉnh
	\sqcap	\sqcup	\neg							
ALC	✓			$\forall R. C$ $\exists R. C$	$\leq 1R$ $\geq 1R$	$\exists_{\leq n} R. C$ $\exists_{\geq n} R. C$	$R_1 \sqsubseteq R_2$	R^-	S	{e}
ALCF	✓									
ALCFH	✓									
SH	✓									
SHCF	✓									
SHCFH	✓									

2.2 Cơ sở tri thức về điều trị

2.2.1 TBox

Hệ thống phân cấp Tất cả các khái niệm ban đầu được sắp xếp theo các cấp độ khác nhau theo một cấu trúc chuyên môn được gọi là một hệ thống phân cấp. Một hệ thống phân cấp của khái niệm Người được minh họa Hình 1(a). Người chứa cấp thấp hơn (bao gồm hai khái niệm Bình_Thường, Đặc_Biệt).

Một khái niệm là con của một khái niệm khác được biểu diễn như sau. Ví dụ, “người đặc biệt cũng là người”

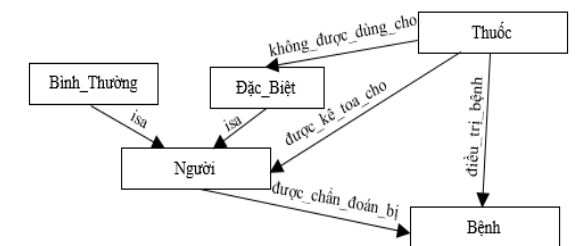
$Đặc_Biệt \sqsubseteq Người$

Một khái niệm tương đương với các thành phần dưới nó trong hệ thống phân cấp được thể hiện cùng với các điều kiện đi kèm. Ví dụ, “Người là khái niệm bao gồm người đặc biệt và bình thường”

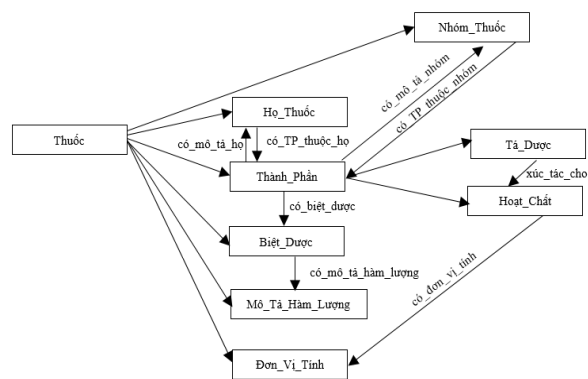
$Người \equiv Đặc_Biệt \sqcup Bình_Thường$

Sự tách rời nhau giữa hai khái niệm con cũng được biểu diễn. “Người đặc biệt là khái niệm tách rời với khái niệm người bình thường”

$Đặc_Biệt \equiv \neg Bình_Thường$



(a)



(b)

Hình 1. TBox của chữa trị, (a) Cấu trúc phân cấp (b) Một phần của cấu trúc phân cấp

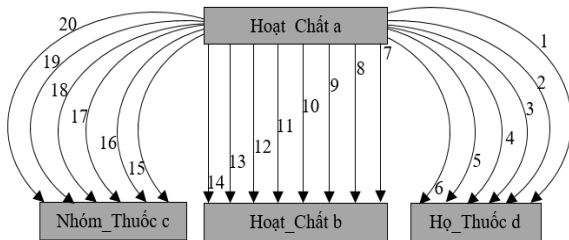
Thuốc Trong y khoa, yếu tố quan trọng của thuốc là khả năng tương tác. Tương tác thuốc là quá trình diễn ra khi loại thuốc này đi kèm với loại thuốc khác. Những khái niệm liên quan đến thuốc được mô tả như hình 1(b).

Biệt dược là khái niệm được sử dụng để chỉ tên thương mại của thuốc. Một loại thuốc gốc có thể có rất nhiều biệt dược.

Mỗi biệt dược có mô tả hàm lượng và đơn vị tính. Bởi vì mỗi biệt dược có thể có

nhiều dạng thuốc khác nhau (dạng viên, dạng dung dịch...) và ứng với mỗi dạng sẽ có hàm lượng tương ứng nên khái niệm mô tả hàm lượng sẽ chứa khái niệm dạng thuốc để có thể biểu diễn được thông tin về hàm lượng tương ứng.

Thuốc được sản xuất từ họ thuốc hoặc nhóm thuốc cụ thể. Vì vậy họ thuốc và nhóm thuốc luôn có phần tử là các loại thuốc.



Hình 2. Quan hệ tương tác thuốc

Thành phần thuốc gồm hoạt chất và tá dược đi kèm với hoạt chất đó. Hoạt chất “là chất hoặc hỗn hợp các chất dùng để sản xuất thuốc, có tác dụng dược lý hoặc có tác dụng trực tiếp trong phòng bệnh, chẩn đoán bệnh, chữa bệnh, điều trị bệnh, giảm nhẹ bệnh, điều chỉnh chức năng sinh lý cơ thể người” [8]. Tá dược “là các chất phụ thêm vào dược phẩm làm thuận lợi cho quá trình sản xuất thuốc, tạo ra dược phẩm có thể chất, khối lượng, màu sắc, mùi, vị thích hợp hoặc tiện dụng, dễ bảo quản, tăng độ ổn định của thuốc, giải phóng dược chất tại nơi mong muốn, phát huy tối đa tác dụng của dược chất, hạn chế tác dụng phụ và độc tính” [9]. Do vậy, sự tương tác thuốc thực chất là sự tương tác giữa các hoạt chất với nhau. Ở nhiều trường hợp, một số hoạt chất có sự tương tác không chỉ trên vài hoạt chất cụ thể mà còn có khả năng tương tác với họ thuốc hoặc nhóm thuốc [10], [11]. Với a, b là các hoạt chất; c là nhóm thuốc và d là họ thuốc khi đó mối quan hệ giữa các hoạt chất và giữa hoạt chất với họ, nhóm thuốc được mô tả ở hình 2 cùng với diễn giải tương ứng ở bảng 3.

Ngoài những đặc điểm về tương tác thuốc, trạng thái vật lý của thuốc của rất quan trọng. Cùng một loại thuốc nhưng có thể sử dụng để điều trị các loại bệnh khác nhau tương ứng theo từng trạng thái vật lý.

Bảng 3. Ý nghĩa các quan hệ tương tác thuốc

TT	Quan hệ	Diễn giải
1	ức_chế_họ(a,d)	Hoạt chất a ức chế họ thuốc d
2	hỗ_trợ_họ(a,d)	Hoạt chất a hỗ trợ họ thuốc d
3	kết_hợp_được_họ(a,d)	Hoạt chất a kết hợp được với họ thuốc d
4	chống_chi_định_họ(a,d)	Hoạt chất a chống chỉ định với họ thuốc d
5	làm_mất_tác_dụng_họ(a,d)	Hoạt chất a làm mất tác dụng của nhóm thuốc d
6	tạo_ra_tác_hại_họ(a,d)	Hoạt chất a tạo ra tác hại khi kết hợp với họ thuốc d
7	cùng_họ(a,b)	Hoạt chất a cùng họ thuốc với hoạt chất b
8	khác(a,b)	Hoạt chất a khác hoạt chất b
9	ức_chế(a,b)	Hoạt chất a ức chế hoạt chất b
10	hỗ_trợ(a,b)	Hoạt chất a hỗ trợ hoạt chất b
11	kết_hợp_được(a,b)	Hoạt chất a kết hợp được với hoạt chất b
12	chống_chi_định(a,b)	Hoạt chất a chống chỉ định với hoạt chất b
13	làm_mất_tác_dụng(a,b)	Hoạt chất a làm mất tác dụng của hoạt chất b
14	tạo_ra_tác_hại(a,b)	Hoạt chất a tạo ra tác hại khi kết hợp với hoạt chất b
15	ức_chế_nhóm(a,c)	Hoạt chất a ức chế nhóm thuốc c
16	hỗ_trợ_nhóm(a,c)	Hoạt chất a hỗ trợ nhóm thuốc c
17	kết_hợp_được_nhóm(a,c)	Hoạt chất a kết hợp được với nhóm thuốc c
18	chống_chi_định_nhóm(a,c)	Hoạt chất a chống chỉ định với nhóm thuốc c
19	làm_mất_tác_dụng_nhóm(a,c)	Hoạt chất a làm mất tác dụng của nhóm thuốc c
20	tạo_ra_tác_hại_nhóm(a,c)	Hoạt chất a tạo ra tác hại khi kết hợp với nhóm thuốc c

Lượng từ Bảng cách sử dụng khái niệm và vai trò của hoạt chất, nhóm thuốc, họ thuốc; lượng từ có khả năng được biểu diễn. Lượng từ được chia ra làm hai nhóm: lượng từ về thuốc và lượng từ trong điều trị. Những lượng từ về thuốc có thể được viết trong logic mô tả như sau:

“Tá dược có khả năng xúc tác cho ít nhất là một hoạt chất”

$Tá_Dược \sqsubseteq \exists xúc_tác_cho.Hoạt_Chất$

“Thành phần thuốc thuộc về ít nhất một nhóm thuốc hoặc họ thuốc”

Thành Phần

$\sqsubseteq \exists có_mô_tả_nhóm.Nhóm_Thuốc$

$\sqcup \exists có_mô_tả_họ.Họ_Thuốc$

“Mỗi một biệt dược có ít nhất một mô tả hàm lượng”

Biệt_Dược

$\sqsubseteq \exists \text{có_mô_tả_hàm_lượng. Mô_Tả_Hàm_Lượng}$

“Thành phần thuốc có ít nhất là một biệt dược”

Thành_Phần $\sqsubseteq \exists \text{có_biệt_dược. Biệt_Dược}$

Những lượng từ trong điều trị:

“Họ thuốc có tối đa 1000 hoạt chất”

Họ_Thuốc

$\sqsubseteq \exists_{\geq 1} \text{có_TP_thuộc_họ. Hoạt_Chất}$

$\sqcap \exists_{\leq 1000} \text{có_TP_thuộc_họ. Hoạt_Chất}$

“Hoạt chất chống chỉ định là hoạt chất có thể ức chế, làm mất tác dụng hay tạo ra những tác hại khi kết hợp với một hoạt chất khác, thậm chí là với họ thuốc hoặc nhóm thuốc”

Hoạt_Chất_Chống_Chỉ_Định

$\sqsubseteq \exists \text{ức_chế. Hoạt_Chất}$

$\sqcup \exists \text{ức_chế_nhóm. Nhóm_Thuốc} \sqcup$

$\exists \text{ức_chế_họ. Họ_Thuốc}$

$\sqcup \exists \text{làm_mất_tác_dụng. Hoạt_Chất} \sqcup$

$\exists \text{làm_mất_tác_dụng_nhóm. Nhóm_Thuốc}$

$\sqcup \text{làm_mất_tác_dụng_họ. Họ_Thuốc}$

$\sqcup \exists \text{tạo_ra_tác_hại. Hoạt_Chất}$

$\sqcup \exists \text{tạo_ra_tác_hại_họ. Họ_Thuốc}$

$\sqcup \exists \text{tạo_ra_tác_hại_nhóm. Nhóm_Thuốc}$

“Hoạt chất hỗ trợ là một hoạt chất có khả năng hỗ trợ ít nhất một hoạt chất khác”

Hoạt_Chất_Hỗ_Trợ $\sqsubseteq \exists \text{hỗ_trợ. Hoạt_Chất}$

2.2.2 ABox

Dữ liệu thử nghiệm được chọn từ tài liệu về thuốc [10] để minh họa cho ABox là thông tin chữa trị chứng lo âu. Diazepam là một loại thuốc điển hình trong việc điều trị căn bệnh này. Diazepam là một dẫn xuất của Benzodiazepin có các biệt dược: Ansiolin, Anxiolytic, Seduxen... Ansiolin dạng dung dịch đậm đặc, hàm lượng 5ml/ml. Anxiolytic dạng viên nén, hàm lượng 10mg. Seduxen dạng viên nén, hàm lượng 5mg. Thuốc không

sử dụng cho người nghiện rượu. Chống chỉ định với các dẫn xuất khác từ Benzodiazepin (Tetrazepam là một dẫn xuất Benzodiazepin). Thuốc Omeprazol (trị loét dạ dày và tá tràng) có khả năng làm tăng tác dụng của Diazepam. Với những chi tiết này, một phần của ABox sẽ như sau:

$A = \{$

Diazepam, Omeprazol, Tetrazepam: Hoạt_Chất
 Lo_âu, loét_dạ_dày_tá_tràng: Bệnh

Benzodiazepin: Nhóm_Thuốc

Ansiolin, Anxiolytic, Seduxen: Biệt_Dược

Người_Nghiện_Rượu: Đặc_Biệt

(Diazepam, Benzodiazepin):

tạo_ra_tác_hại_nhóm

(Seduxen, Viên): có_mô_tả_hàm_lượng

(Seduxen, 10): miligram

(Seduxen, mg): có_đơn_vị_tính

(Diazepam, Người_Nghiện_Rượu):

không_được_dùng_cho

(Omeprazol, Diazepam): hỗ_trợ

...}

“Hoạt chất Diazepam là một dẫn xuất từ Benzodiazepin”

Diazepam

$\sqsubseteq \text{có_mô_tả_nhóm. Benzodiazepin}$

“Hoạt chất Diazepam có các biệt dược là Ansiolin, Anxiolytic, Seduxen”

Diazepam $\sqsubseteq \exists \text{có_biệt_dược. Ansiolin}$

$\sqcup \exists \text{có_biệt_dược. Anxiolytic}$

$\sqcup \exists \text{có_biệt_dược. Seduxen}$

“Hoạt chất Omeprazol làm tăng tác dụng của hoạt chất Diazepam”

Omeprazol $\sqsubseteq \exists \text{hỗ_trợ. Diazepam}$

“Hoạt chất Diazepam gây hại với những dẫn xuất cùng nhóm (có thể gây chứng quên ở người bệnh)”

Diazepam

$\sqsubseteq \exists \text{tạo_ra_tác_hại_nhóm. Benzodiazepin}$

hoặc

Diazepam $\sqsubseteq \exists \text{tạo_ra_tác_hại. Tetrazepam}$

2.2.3 Luật

Từ mối quan hệ giữa hoạt chất – hoạt chất và hoạt chất – nhóm/ họ thuốc được trình bày, luật về tương tác thuốc có thể được tạo ra nhằm phục vụ công tác điều trị cho bệnh nhân:

“Hoạt chất a làm tăng tác dụng của nhóm thuốc b, hoạt chất c thuộc nhóm thuốc b. Vậy hoạt chất a làm tăng tác dụng của hoạt chất c.”

$(a, c): hỗ_trợ \leftarrow (a, b): hỗ_trợ_nhóm$
 $\wedge (c, b): có_mô_tả_nhóm$
 $\wedge b: Nhóm_Thuốc$
 $\wedge a: Hoạt_Chất$
 $\wedge c: Hoạt_Chất$

“Hoạt chất a, b có họ thuốc là c, hoạt chất a khác với b. Vậy hoạt chất a và b có cùng họ thuốc.”

$(a, b): cùng_họ$
 $\leftarrow (a, b): khác$
 $\wedge (b, c): có_mô_tả_họ$
 $\wedge (a, c): có_mô_tả_họ$
 $\wedge c: Họ_Thuốc$
 $\wedge a: Hoạt_Chất$
 $\wedge b: Hoạt_Chất$

“Hoạt chất a hỗ trợ hoạt chất b. Vậy hoạt chất b có thể kết hợp được với hoạt chất a.”

$(b, a): kết_hợp_được_với$
 $\leftarrow hỗ_trợ(a, b)$
 $\wedge Hoạt_Chất(a)$
 $\wedge Hoạt_Chất(b)$

Một vài luật trong điều trị:

“Người đặc biệt hay người bình thường đều là người”

$a: Người \leftarrow a: Đặc_Biệt \vee a: Bình_Thường$

$a: Người \leftarrow a: Đặc_Biệt \vee a: Bình_Thường$

“Những vấn đề liên quan đến phổi đều thuộc nhóm hô hấp và cũng là bệnh”

$có_TP(? b, ? a)$
 $\leftarrow a: Phổi \wedge b: Bệnh$
 $\wedge c: Hô_Hấp \wedge có_TP(? c, ? a)$
 $\wedge có_TP(? b, ? c)$

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

Trong phần này, chúng tôi sử dụng Protégé (phiên bản 4.3), “một nền tảng mã nguồn mở miễn phí, cung cấp cho cộng đồng người dùng bộ công cụ giúp xây dựng các mô hình miền và các ứng dụng dựa trên tri thức bằng bản thể luận” [12] để biểu diễn cơ sở tri thức điều trị được trình bày ở mục 2.2. Thông tin về thuốc trong tài liệu [10] là nền tảng để xây dựng Ontology điều trị. Chúng tôi xây dựng bộ thử khoảng 300 loại thuốc và biệt dược cùng với những chỉ định và những lưu ý về tương tác thuốc được trích xuất trong [10]. Kế đến, những luật về tương tác thuốc sẽ được xây dựng nhằm tạo ra khả năng suy luận mối quan hệ giữa các loại thuốc.

Ví dụ 1

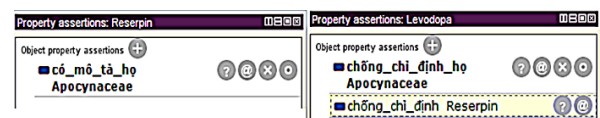
Hoạt chất a chống chỉ định với họ thuốc b, hoạt chất c có họ thuốc là b. Vậy hoạt chất a chống chỉ định với hoạt chất c.

Biểu diễn luật:

Hoạt_Chất(?a), Hoạt_Chất(?c),
 Họ_Thuốc(?b), chống_chỉ_định_họ(?a, ?b),
 có_mô_tả_họ(?c, ?b) ->
 chống_chỉ_định(?a, ?c)



(a)



(b)

Hình 3. Minh họa ví dụ 1, (a) Dữ liệu ban đầu, (b) Kết quả sau khi thực hiện luật.

Bàn luận:

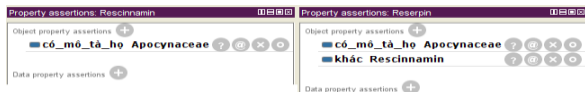
Ở hình 3(a) mô tả Reserpin thuộc họ thuốc Apocynaceae và Levodopa chống chỉ định với họ thuốc Apocynaceae. Sau khi luật được thực hiện, hình 3(b) cho thấy Levodopa sẽ chống chỉ định với Reserpin.

Ví dụ 2

Hoạt chất a, b có họ thuốc là c, hoạt chất a khác với b. Vậy hoạt chất a và b có cùng họ thuốc.

Biểu diễn luật:

Hoạt_Chất(?a), Hoạt_Chất(?b),
 Họ_Thuốc(?c), có_mô_tả_họ(?a, ?c),
 có_mô_tả_họ(?b, ?c), khác(?a, ?b) ->
 cùng_họ(?a, ?b)



(a)



(b)

Hình 4. Minh họa ví dụ 2, (a) Dữ liệu ban đầu, (b) Kết quả sau khi thực hiện luật.

Bàn luận:

Ở hình 4(a), Rescinnamin có họ thuốc là Apocynaceae, Reserpin cũng thuộc họ thuốc Apocynaceae. Mặt khác, Reserpin và Rescinnamin là hai hoạt chất khác nhau. Sau khi thực hiện luật, kết quả hiển thị ở hình 4(b) cho thấy, Reserpin cùng họ thuốc với Rescinnamin.

Ví dụ 3

Hoạt chất Diazoxid dùng để điều trị bệnh cao huyết áp khi ở dạng dung dịch với đơn vị tính là ml. Diazoxid có dạng viên với đơn vị tính là mg dùng trong điều trị giảm glucose huyết do u ở tụy hoặc ngoài tụy.

Biểu diễn luật 1:

Biệt_Dược (?c), Hoạt_Chất (Diazoxid),
 có_biệt_dược (Diazoxid, ?c),
 có_mô_tả_hàm_lượng (?c, Dung_Dịch),
 có_đơn_vị_tính (?c, ml) -> điều_trị_bệnh (?c, cao_huyết_áp)

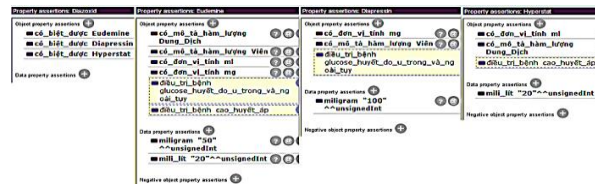
Biểu diễn luật 2:

Biệt_Dược(?c), Hoạt_Chất(Diazoxid),
 có_biệt_dược (Diazoxid, ?c),
 có_mô_tả_hàm_lượng (?c, Viên),

có_đơn_vị_tính (?c, mg) -> điều_trị_bệnh (?c, glucose_huyết_do_u_trong_vàngoài_tụy)



(a)



(b)

Hình 5. Minh họa ví dụ 3, (a) Dữ liệu ban đầu, (b) Kết quả sau khi thực hiện nhóm luật.

Bàn luận:

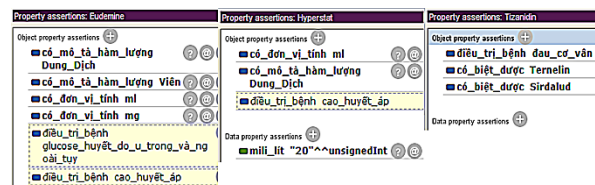
Ở hình 5(a), hoạt chất Diazoxid có 03 biệt dược là Eudemine, Diapressin và Hyperstat. Trong đó, Eudemine có dạng viên (đơn vị tính là mg) và dạng dung dịch (đơn vị tính là ml), Diapressin ở dạng viên (đơn vị tính là mg), Hyperstat ở dạng dung dịch (đơn vị tính là ml). Sau khi thực hiện luật 1 và 2, kết quả ở hình 5(b) cho thấy, Eudemine được dùng để điều trị bệnh cao huyết áp và giảm glucose huyết do u ở tụy hoặc ngoài tụy, Hyperstat được dùng để điều trị bệnh cao huyết áp, Diapressin được dùng để điều trị giảm glucose huyết do u ở tụy hoặc ngoài tụy.

Ví dụ 4

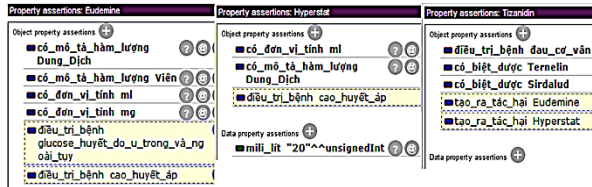
Hoạt chất Tizanidin khi dùng chung với những hoạt chất chữa trị bệnh cao huyết áp sẽ gây ra tác hại (ảnh hưởng đến nhịp tim và gây ra tụt huyết áp đột ngột).

Biểu diễn luật:

Hoạt_Chất(?a), Hoạt_Chất(Tizanidin),
 điều_trị_bệnh(?a, cao_huyết_áp) ->
 tạo_ra_tác_hại(Tizanidin, ?a)



(a)



(b)

Hình 6. Minh họa ví dụ 4, (a) Dữ liệu ban đầu, (b) Kết quả sau khi thực hiện luật.

Bàn luận:

Trong hình 5(a) và 6(a), Eudemine và Hyperstat là 02 biệt dược của hoạt chất Diazoxid dùng chữa trị bệnh cao huyết áp, Tizanidin là hoạt chất dùng để thư giãn cơ vân. Sau khi luật được thực hiện, kết quả ở hình 6(b) cho thấy, Tizanidin dùng chung với Eudemine và Hyperstat sẽ gây tác hại.

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã đề xuất phương pháp tiếp cận logic mô tả cho tương tác thuốc trong điều trị. Mô hình này mô tả các mối quan hệ giữa hai đối tượng thuốc. Từ đây, có nhiều mối quan hệ giữa các đối tượng thuốc khác có thể được suy luận bởi các luật. Sau khi biểu diễn cơ sở tri thức về điều trị bằng Protégé và chạy thử một vài ví dụ, chúng tôi nhận được một số kết quả thuận lợi trong việc suy luận các mối quan hệ thuốc.

Chúng tôi tin rằng sự đóng góp này có thể giải quyết các vấn đề biểu diễn thuốc và mối quan hệ giữa chúng trong điều trị. Nghiên cứu này sẽ được áp dụng để tạo ra một ứng dụng có thể thực thi được trong bài viết kế tiếp.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Franz B., Deborah L.M., Daniele N., and Peter F.P., *Description Logic Handbook: Theory, Implementation, and Applications*, Cambridge University Press, 2002.
- [2] Franz B., Iran H. and Ulrike S., *Description Logics*. In: F. Van Harmelen, V. Lifschitz and B. Porter, editors. *Handbook of knowledge representation*, Elsevier, 2007.
- [3] Nguyễn Việt Chánh, Hoàng Quang, *Biểu diễn mô hình Time-ER bằng logic mô tả*, Kỷ yếu hội nghị quốc gia lần thứ VIII về nghiên cứu cơ bản và ứng dụng công nghệ thông tin (FAIR), Trang 44-53 (2015).
- [4] F. M. Donini, M. Lenzerini, D. Nardi, W. Nutt, A. Schaerf, *An epistemic operator for description logics*, Elsevier Science B.V, p.255–274 (1998).
- [5] Sebastain R., *Foundation of description logics*, Karlsruhe Institute of Technology, 2011.
- [6] Jeff Z. Pan, *Description Logics: Reasoning support for the semantic web*, The University of Manchester, 2004.
- [7] Yu D., *Tableau – based reasoning for description logics with inverse roles and number restrictions*, Concordia University, 2008.
- [8] Quốc hội, *Luật 105/2016/QH13 ngày 06/04/2016 về dược*.
- [9] Võ Thị Trà An, Phạm Châu Giang, Nguyễn Thị Thúy Huyền, Đào Thị Phương Lan, Huỳnh Thị Xuân Phượng, *Tá dược*, Tạp chí KHKT Nông Lâm nghiệp, Số 1&2, Trang 219-226 (2007).
- [10] Phạm Thiệp, Vũ Ngọc Thúy, Hoàng Trọng Quang, *Tra cứu thuốc thông dụng và biệt dược 100000 tên thuốc và biệt dược*, Nhà xuất bản Khoa học và Kỹ thuật, 2017.
- [11] Karen B., *Stockley's Drug Interactions*, the Pharmaceutical Press, Eighth Edition, 2008.
- [12] Mark A. M., *The Protégé project*, AI Matters, Vol. 1, Issue 4, p.4-12 (2015).

Tác giả chịu trách nhiệm bài viết:

Lê Thị Bảo Ngọc

Trường Cao đẳng Sư phạm Kiên Giang

Email: baongoc506@gmail.com