人工智能识别人造毒品有一手

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/16629.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

人工智能识别人造毒品有一手。《自然—机器智能》11月15日发表了一种自动化、生成式的机器学习方法，可以仅利用质谱确定未知的新型精神药物（又称人造毒品）的化学结构。了解这些结构能帮助法医实验室更快识别出疑似的人造毒品。

每年有大量新型精神药物出现在非法市场上。这些物质会造成与已知非法药物相近的精神效果；但独特的合成方式使其在化学结构上有所不同，从而规避了现有的毒品法规，甚至难以被侦测。

法医实验室通常使用质谱分析法在查封药片或粉末中识别已知人造毒品。但要弄清一种全新人造毒品的结构，通常需要化学专家工作数周或数月，并且需要用到其他的实验技术。

加拿大温哥华英属哥伦比亚大学的Michael Skinnider和同事，使用全球各地法医实验室众包的保密数据训练了一个机器学习模型，使其产生结构和性质类似于近期人造毒品的分子。

该模型随后产生了一个数据库，包含10亿种潜在新型精神药物的结构。科学家随后用模型训练结束后新收集的数据测试了该模型，发现这一方法仅用质谱就可以确定未知人造毒品。在准确结构难以精准确定的实例中，该模型建议的结构与未知人造毒品非常相似。

研究人员总结说，用其他数据集训练的类似生成方法也可以帮助识别其他特定领域未知分子的结构，例如识别新型兴奋剂或者环境污染物。（来源：中国科学报赵熙熙）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s42256-021-00407-x

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：Michael Skinnider 来源：《自然—机器智能》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发