机器学习+化学直觉让药物发现更有效

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/24814.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！

机器学习+化学直觉让药物发现更有效。英国与瑞士科学家合作开发了一种机器学习模型，该模型能部分重现职业化学家在工作中积累的集体知识，这类知识通常被称为化学直觉。该研究或使今后的药物研发更高效。相关研究11月1日发表于《自然—通讯》。

传统上，药物与化学发现需要依靠试错实验和研究人员在工作中积累的知识。使用模拟工具，尤其是机器学习，能让研究人员更快地发现候选分子，极大降低发现新药用化合物的成本。

如果要用机器学习预测分子性质，分子就必须还原到数学表达，这通常包含一组性质或特征。确定正确特征是这些数据驱动性能预测模型成功的关键。

英国剑桥微软研究院科学智能中心的Nikolaus Stiefl和瑞士诺华生物医学研究所的JoseJimenez-Luna与合作者让35名医学化学家各自从5000对分子中选择自己更偏向的分子，再用他们的回答做成排序游戏来训练一个机器学习模型，随后让这个模型给分子打分。这个分数基本不受该领域之前作为特征的其他性质的影响，因为这来自行业内多年的知识积累。

研究者提议的模型还能用来改变数学模型的推荐，从而更好地匹配化学家的集体专业知识，有望在今后早期药物研发中缩短迭代时间。他们认为，这种方法或能在药物研发中作为对分子建模的补充。（来源：中国科学报 晋楠）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41467-023-42242-1

作者：Nikolaus Stiefl 来源：《自然—通讯》

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