

基于机器学习和与疼痛相关的电压门控钠通道的药物-靶点相互作用网络

Thursday, 21 November 2024 16:10 (20 minutes)

疼痛是一个重要的全球健康问题。当前的治疗方案在有效性和副作用等方面都存在缺陷，特别是一些治疗疼痛药物的不恰当使用会导致上瘾的风险，因此迫切需要改进疼痛治疗方法或者开发新药。随着人工智能技术的快速发展，机器学习算法在药物分子虚拟筛选方面具有广泛的应用。其中一个重要的应用是分子特征提取，即从分子的简化分子线性输入规范字符串 (SMILES) 中提取重要的分子结构信息从而进行分子属性预测，之后本研究根据疼痛的靶点钠离子通道，构建与钠离子通道相关的蛋白质-蛋白质相互作用网络，筛选 111 个抑制剂数据集，通过深度学习算法进行治疗疼痛化合物分子筛选，评估药物分子的 ADMET 特性（吸收、分布、代谢、排泄和毒性），确定最佳先导化合物。

Primary author: 窦, 博正 (华中师范大学)

Presenter: 窦, 博正 (华中师范大学)

Session Classification: Thursday Afternoon Second Session