پژوهشگران از نقش فوق العاده یادگیری ماشینی در داروسازی می گویند - دیجیاتو

Maryam Mousavi | یکشنبه، ۱۷ تیر ۱۳۹۷

تولید و بهبود داروها فرایندی بسیار طولانی و پیچیده است؛ برای این منظور شیمیدان ها ترکیب های مولکولی مختلفی را می سازند و آنها را دستکاری می کنند که این فعالیت ها نیز گاه برای ایجاد روش درمانی خاص برای یک بیماری مشخص انجام میگیرد و گاهی در جهت بهبود داروهایی که پیشتر ساخته شده اند.

با این حال اما این فرایند همانطور که در ابتدا اشاره کردیم هم زمان بر است و هم به تخصص نیاز دارد و در نهایت نیز تلاش های صورت گرفته به ساخت داروهایی منجر می شود که طبق انتظار عمل نمی کنند. اما خوشبختانه جمعی از دانشمندان MIT اعلام کرده اند که در تلاشند از یادگیری ماشینی در داروسازی و طراحی دارو کمک بگیرند.

به گفته Wengong Jin از دانشجویان دوره دکترای لابراتوار هوش مصنوعی و علوم کامپیوتر MIT:

انگیزه و هدف اصلی از این پروژه حذف پروسه زمان بر بهینه سازی طراحی مولکولی توسط انسان و جایگزین نمودن آن با فرایندهای خودکار ساخت ترکیبات مولکولی است.

تیم تحقیقات برای این منظور الگوهای یادگیری ماشینی خود را با کمک ۲۵۰ هزار گراف مولکولی آموزش دادند؛ این گراف ها در واقع عکس هایی دقیق و مملو از جزئیات از ساختار مولکول ها بود. آنها در ادامه با کمک آن الگوها اقدام به تولید مولکول کردند تا بهترین مولکول های پایه برای فرایندهای آزمایشی را پیدا کرده و مولکول های تازه ای با خواص بهتر را با کمک آنها طراحی نمایند. محققان دریافتند که الگوی طراحی شده می تواند به شکلی موثرتر و کاربردی تر نسبت به دیگر سیستم های که برای مکانیزه سازی فرایند طراحی دارو ساخته شده اند، این کار را به انجام برساند.

وقتی هم فرایند تولید مولکول های جدید و معتبر به الگوی یادگیری ماشینی محول شد مشخص گردید که تک تک مولکول های ایجاد شده از ارزش و اعتبار لازم برخوردار هستند. اهمیت این مساله از آن جهت است که تولید مولکول های نامعتبر از جمله کاستی های اصلی سیستم های خودکارسازی به شمار می رود. محققان برای اثبات این گفته سیستم خود را با دیگری مدل ها مقایسه کردند و دریافتند که نرخ تولید مولکول های معتبر توسط بهترین سیستم های طراحی

شده برابر با ۴۳.۵ درصد است.

در گام دیگر وقتی از مدل خواسته شد بهترین مولکول پایه (که با نام مولکول اصلی هم شناخته می شود) را پیدا کند در سطحی به مراتب بالاتر از سیستم های رقیب عمل کرد. در انتها نیز مدل مذکور توانست ضمن حفظ ساختاری مشابه به مولکول اصلی، ۸۰۰ مولکول دیگر را بهبود داده و خواص خوبشان را تقویت نماید و در حدود ۸۰ درصد از مواقع مولکول هایی جدید با ساختار مشابه به انواع پایه را بسازد.

تیم تحقیق در نظر دارد که الگوی یادگیری ماشینی خود را در دیگر حوزه های داروسازی مورد آزمایش قرار دهد و الگویی بسازد که با دریافت میزان اندکی از داده های آموزشی می تواند تسک های مختلف را به انجام برساند. این تحقیقات قرار است که هفته آینده در کنفرانس بین المللی یادگیری ماشینی ارائه شود. در هر صورت انتظار می رود که یادگیری ماشینی در داروسازی نیز مانند سایر رشته ها موثر واقع شود و به پیشرفت هرچه بیشتر این رشته کمک کند.

دیجیاتو