



www.most.gov.cn

## 科学家利用机器学习加快药物制剂开发

日期：2023年02月10日 10:47 来源：科技部生物中心 【字号：大 中 小】

长效注射剂（LAI）是治疗慢性病最有前途的治疗策略之一，是一类先进的药物递送系统，可以提高治疗效果、安全性和患者依从性。传统的药物制剂开发依赖于反复试错，需要开展广泛且耗时的体外实验，然而，这种试错法对聚合物LAI的开发带来了重大挑战。近期，多伦多大学的研究人员利用机器学习（ML）方法来帮助解决LAI开发中的这一瓶颈问题。研究成果发表在《Nature Communications》期刊，标题为“Machine learning models to accelerate the design of polymeric long-acting injectables”。

研究人员首先基于先前发表的研究构建了数据集，并将其分为两个子集——用于训练的训练集和用于测试的测试集。接下来，研究人员训练并评估了11种不同的ML算法，包括多元线性回归（MLR）、最小绝对收缩和选择算子回归（LASSO）、偏最小二乘法（PLS）、决策树（DT）、随机森林（RF）、轻量级梯度提升机（LGBM）、极限梯度提升（XGB）、自然梯度提升（NGB）、支持向量回归（SVR）、K-最近邻（KNN）和神经网络（NN）。研究表明，ML算法可用于预测LAI的药物释放率，其中LGBM模型的预测性能最佳，准确率最高。研究还表明，这些经过训练的模型可用于指导新型LAI的设计。另外，研究人员已经将此数据集和代码共享在开源平台Zenodo上，以供所有人使用来共同创建强大的制药科学数据库。

这项研究将ML技术应用于聚合物LAI的设计，朝着数据驱动的药物制剂开发迈出了关键一步，也为制药科学提供了新见解。

论文链接：

<https://www.nature.com/articles/s41467-022-35343-w>

注：此研究成果摘自《Nature Communications》期刊原创文章，文章内容不代表本网站观点和立场，仅供参考。

扫一扫在手机打开当前页



打印本页

关闭窗口



政府网站  
找错



版权所有：中华人民共和国科学技术部

办公地址：北京市海淀区复兴路乙15号 | 联系我们

邮政地址：北京市海淀区复兴路乙15号 | 邮政编码：100862

ICP备案序号：京ICP备05022684 | 网站标识码：bm06000001 | 建议使用IE9.0以上浏览器或兼容浏览器