



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 115228781 A

(43) 申请公布日 2022.10.25

(21) 申请号 202210851851.1

(22) 申请日 2022.07.20

(71) 申请人 晨星基因(北京)智能科技有限公司

地址 100000 北京市海淀区开拓路5号5层
519-30

(72) 发明人 高军涛 张旭

(74) 专利代理机构 天津麦芽知识产权代理有限公司 12269

专利代理师 李淑敏

(51) Int. Cl.

B08B 1/00 (2006.01)

B08B 13/00 (2006.01)

G16B 15/30 (2019.01)

G16C 20/50 (2019.01)

权利要求书1页 说明书4页 附图3页

(54) 发明名称

一种基于深度学习的药物筛选方法

(57) 摘要

本发明公开了一种基于深度学习的药物筛选方法,包括虚拟筛选机,所述虚拟筛选机的内腔底部固定设置有容纳箱,所述容纳箱的顶部中间固定设置有载药台,所述容纳箱的顶部左右两侧均开设有落药口,涉及药物筛选技术领域,通过伸缩杆、弹性通气柱、衔接杆以及清洁海绵块之间的相互配合,启动抽吸两用泵向弹性通气柱的内部充入气体,从而推动伸缩杆变长,使清洁海绵块对载药台表面的药渣进行清洁,避免残留的药渣对下一种待筛选的药物造成干扰,筛选的准确性提高,通过承载框和塑料刮齿之间的相互配合,清洁海绵块在收回到放置槽内部的过程中会经过清刮组件,塑料刮齿会将清洁海绵块表面的药渣及时刮下,保证下次的清洁效果。

1. 一种基于深度学习的药物筛选方法,其特征在于:该方法包括以下步骤:

步骤一、建立model-1:建立癌细胞系中药物组合协同作用的预测模型model-1;

步骤二、改造结构:基于SMILES提取药物特征、进行数据增强和神经网络结构改造;

步骤三、引入限制条件:基于表型的药物筛选视角出发,引入基因表达谱(作为表型)和分子骨架作为药物虚拟筛选的限制条件;

步骤四、构建model-2:构建基因-分子骨架生成模型model-2;

步骤五、数据库筛选:以分子骨架为锚点,对大规模药物数据库进行药物虚拟筛选;

步骤六、生成小分子:药物设计、生成全新的小分子;

步骤七、药物虚拟筛选:在FDA批准的药物库、ChEMBL药物库和ZINC药物库中对一些癌细胞系进行基于不同表型的药物组合虚拟筛选;

步骤八、验证:通过靶点预测和分子对接等手段对这些组合进行验证。

2. 一种根据权利要求1所述的基于深度学习的药物筛选装置,包括虚拟筛选机(1),其特征在于:所述虚拟筛选机(1)的内腔底部固定设置有容纳箱(2),所述容纳箱(2)的顶部中间固定设置有载药台(3),所述容纳箱(2)的顶部左右两侧均开设有落药口(4),所述虚拟筛选机(1)的内腔左侧开设有放置槽(7),所述放置槽(7)的内部设置有药渣清洁组件(8);

所述药渣清洁组件(8)包括伸缩杆(81),所述伸缩杆(81)的内腔左右两侧壁之间固定设置有弹性通气柱(82),所述伸缩杆(81)的右端固定设置有衔接杆(83),所述衔接杆(83)的底部固定设置有承载板(84),所述承载板(84)的底部固定设置有清洁海绵块(85),所述放置槽(7)的内腔底部右侧固定设置有清扫组件(9),所述虚拟筛选机(1)的内腔左侧壁开设有通气腔(10),所述虚拟筛选机(1)的左侧固定设置有抽吸两用泵(11)。

3. 根据权利要求2所述的一种基于深度学习的药物筛选装置,其特征在于:所述容纳箱(2)的内腔顶部左右两侧均固定设置有两个弹簧(5)。

4. 根据权利要求3所述的一种基于深度学习的药物筛选装置,其特征在于:同侧两个所述弹簧(5)的底部之间固定设置有过滤网(6),所述过滤网(6)位于对应一侧落药口(4)的正下方。

5. 根据权利要求2所述的一种基于深度学习的药物筛选装置,其特征在于:所述清洁海绵块(85)的底部与载药台(3)的顶部位于同一水平高度。

6. 根据权利要求2所述的一种基于深度学习的药物筛选装置,其特征在于:所述清扫组件(9)包括承载框(91),所述承载框(91)的顶部从前到后均匀固定设置有若干塑料刮齿(92)。

7. 根据权利要求2所述的一种基于深度学习的药物筛选装置,其特征在于:所述通气腔(10)与弹性通气柱(82)的内部相连通,所述抽吸两用泵(11)的输气端与通气腔(10)的内部相连通。

8. 根据权利要求2所述的一种基于深度学习的药物筛选装置,其特征在于:所述容纳箱(2)的内部滑动连接有集渣盒(12),所述集渣盒(12)的内腔上部前后壁之间均匀固定设置有若干防飞扬板(13)。

一种基于深度学习的药物筛选方法

技术领域

[0001] 本发明涉及药物筛选技术领域,具体为一种基于深度学习的药物筛选方法。

背景技术

[0002] 药物是用以预防、治疗及诊断疾病的物质。在理论上,药物是指凡能影响机体器官生理功能及细胞代谢活动的化学物质都属于药物的范畴,也包括避孕药。依照法律药物及国际上分类管理分为两类:处方药物及非处方药物(OTC)。处方药物指那些考虑到医疗安全只能在医疗监护下使用的药物,必须由执业医师出具书面处方(例如内科医生、牙科医生或兽医)。非处方药物指那些不用医疗监护即具相当安全性的药物,可在无处方情况下由药店直接出售。

[0003] 现有的基于深度学习的药物筛选方法,在确定有效药物组合的过程中,需要将待筛选的药物放置在载药台上进行操作,操作好后将药物取走,载药台表面会残留药渣,缺乏相应清理药渣的结构,会对下一种待筛选的药物造成干扰影响,导致筛选的准确性降低,具有较大的改进空间,实用性较差。

发明内容

[0004] 针对现有技术的不足,本发明提供了一种基于深度学习的药物筛选方法,解决了在确定有效药物组合的过程中,需要将待筛选的药物放置在载药台上进行操作,操作好后将药物取走,载药台表面会残留药渣,缺乏相应清理药渣的结构,会对下一种待筛选的药物造成干扰影响,导致筛选的准确性降低的问题。

[0005] 为实现以上目的,本发明通过以下技术方案予以实现:一种基于深度学习的药物筛选方法,该方法包括以下步骤:

[0006] 步骤一、建立model-1:建立癌细胞系中药物组合协同作用的预测模型model-1;

[0007] 步骤二、改造结构:基于SMILES提取药物特征、进行数据增强和神经网络结构改造;

[0008] 步骤三、引入限制条件:基于表型的药物筛选视角出发,引入基因表达谱(作为表型)和分子骨架作为药物虚拟筛选的限制条件;

[0009] 步骤四、构建model-2:构建基因-分子骨架生成模型model-2;

[0010] 步骤五、数据库筛选:以分子骨架为锚点,对大规模药物数据库进行药物虚拟筛选;

[0011] 步骤六、生成小分子:药物设计、生成全新的小分子;

[0012] 步骤七、药物虚拟筛选:在FDA批准的药物库、ChEMBL药物库和ZINC药物库中对一些癌细胞系进行基于不同表型的药物组合虚拟筛选;

[0013] 步骤八、验证:通过靶点预测和分子对接等手段对这些组合进行验证。

[0014] 本发明还公开了一种基于深度学习的药物筛选装置,包括虚拟筛选机,所述虚拟筛选机的内腔底部固定设置有容纳箱,所述容纳箱的顶部中间固定设置有载药台,所述容

纳箱的顶部左右两侧均开设有落药口,所述虚拟筛选机的内腔左侧开设有放置槽,所述放置槽的内部设置有药渣清洁组件,所述药渣清洁组件包括伸缩杆,所述伸缩杆的内腔左右两侧壁之间固定设置有弹性通气柱,所述伸缩杆的右端固定设置有衔接杆,所述衔接杆的底部固定设置有承载板,所述承载板的底部固定设置有清洁海绵块,所述放置槽的内腔底部右侧固定设置有清刮组件,所述虚拟筛选机的内腔左侧壁开设有通气腔,所述虚拟筛选机的左侧固定设置有抽吸两用泵。

[0015] 进一步的,所述容纳箱的内腔顶部左右两侧均固定设置有两个弹簧。

[0016] 进一步的,同侧两个所述弹簧的底部之间固定设置有过滤网,所述过滤网位于对应一侧落药口的正下方。

[0017] 进一步的,所述清洁海绵块的底部与载药台的顶部位于同一水平高度。

[0018] 进一步的,所述清刮组件包括承载框,所述承载框的顶部从前到后均匀固定设置有若干塑料刮齿。

[0019] 进一步的,所述通气腔与弹性通气柱的内部相通,所述抽吸两用泵的输气端与通气腔的内部相通。

[0020] 进一步的,所述容纳箱的内部滑动连接有集渣盒,所述集渣盒的内腔上部前后壁之间均匀固定设置有若干防飞扬板。

[0021] 有益效果

[0022] 本发明提供了一种基于深度学习的药物筛选方法。与现有技术相比具备以下有益效果:

[0023] 1、一种基于深度学习的药物筛选方法,容纳箱的顶部中间固定设置有载药台,容纳箱的顶部左右两侧均开设有落药口,虚拟筛选机的内腔左侧开设有放置槽,放置槽的内部设置有药渣清洁组件,药渣清洁组件包括伸缩杆,伸缩杆的内腔左右两侧壁之间固定设置有弹性通气柱,伸缩杆的右端固定设置有衔接杆,衔接杆的底部固定设置有承载板,承载板的底部固定设置有清洁海绵块,放置槽的内腔底部右侧固定设置有清刮组件,虚拟筛选机的内腔左侧壁开设有通气腔,虚拟筛选机的左侧固定设置有抽吸两用泵,通过伸缩杆、弹性通气柱、衔接杆以及清洁海绵块之间的相互配合,启动抽吸两用泵向弹性通气柱的内部充入气体,从而推动伸缩杆变长,使清洁海绵块对载药台表面的药渣进行清洁,避免残留的药渣对下一种待筛选的药物造成干扰,筛选的准确性提高。

[0024] 2、一种基于深度学习的药物筛选方法,清洁海绵块的底部与载药台的顶部位于同一水平高度,清刮组件包括承载框,承载框的顶部从前到后均匀固定设置有若干塑料刮齿,通过承载框和塑料刮齿之间的相互配合,清洁海绵块在收回到放置槽内部的过程中会经过清刮组件,塑料刮齿会将清洁海绵块表面的药渣及时刮下,使其通过左部的落药口掉落到集渣盒的内部,保证下次的清洁效果。

[0025] 3、一种基于深度学习的药物筛选方法,容纳箱的内腔顶部左右两侧均固定设置有两个弹簧,同侧两个弹簧的底部之间固定设置有过滤网,过滤网位于对应一侧落药口的正下方,容纳箱的内部滑动连接有集渣盒,集渣盒的内腔上部前后壁之间均匀固定设置有若干防飞扬板,通过弹簧、过滤网和防飞扬板之间的相互配合,避免推落的药渣再次扬起,同时避免药物直接掉落到集渣盒内,结构简单但是功能性强大。

附图说明

- [0026] 图1为本发明工艺流程结构示意图；
- [0027] 图2为本发明药物筛选装置的主视图；
- [0028] 图3为本发明药物筛选装置的剖视图；
- [0029] 图4为本发明图3中A处的放大示意图；
- [0030] 图5为本发明清刮组件的右视图。
- [0031] 图中：1、虚拟筛选机；2、容纳箱；3、载药台；4、落药口；5、弹簧；6、过滤网；7、放置槽；8、药渣清洁组件；81、伸缩杆；82、弹性通气柱；83、衔接杆；84、承载板；85、清洁海绵块；9、清刮组件；91、承载框；92、塑料刮齿；10、通气腔；11、抽吸两用泵；12、集渣盒；13、防飞扬板。

具体实施方式

[0032] 下面将结合本发明实施例中的附图，对本发明实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述，显然，所描述的实施例仅仅是本发明一部分实施例，而不是全部的实施例。基于本发明中的实施例，本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例，都属于本发明保护的范围。

[0033] 请参阅图1-5，本发明提供一种技术方案：一种基于深度学习的药物筛选方法，该方法包括以下步骤：

- [0034] 步骤一、建立model-1：建立癌细胞系中药物组合协同作用的预测模型model-1；
- [0035] 步骤二、改造结构：基于SMILES提取药物特征、进行数据增强和神经网络结构改造；
- [0036] 步骤三、引入限制条件：基于表型的药物筛选视角出发，引入基因表达谱（作为表型）和分子骨架作为药物虚拟筛选的限制条件；
- [0037] 步骤四、构建model-2：构建基因-分子骨架生成模型model-2；
- [0038] 步骤五、数据库筛选：以分子骨架为锚点，对大规模药物数据库进行药物虚拟筛选；
- [0039] 步骤六、生成小分子：药物设计、生成全新的小分子；
- [0040] 步骤七、药物虚拟筛选：在FDA批准的药物库、ChEMBL药物库和ZINC药物库中对一些癌细胞系进行基于不同表型的药物组合虚拟筛选；
- [0041] 步骤八、验证：通过靶点预测和分子对接等手段对这些组合进行验证。

[0042] 本发明还公开了一种基于深度学习的药物筛选装置，包括虚拟筛选机1，虚拟筛选机1的内腔底部固定设置有容纳箱2，容纳箱2的顶部中间固定设置有载药台3，容纳箱2的顶部左右两侧均开设有落药口4，虚拟筛选机1的内腔左侧开设有放置槽7，放置槽7的内部设置有药渣清洁组件8，药渣清洁组件8包括伸缩杆81，伸缩杆81的内腔左右两侧壁之间固定设置有弹性通气柱82，伸缩杆81的右端固定设置有衔接杆83，衔接杆83的底部固定设置有承载板84，承载板84的底部固定设置有清洁海绵块85，放置槽7的内腔底部右侧固定设置有清刮组件9，虚拟筛选机1的内腔左侧壁开设有通气腔10，虚拟筛选机1的左侧固定设置有抽吸两用泵11，通过伸缩杆81、弹性通气柱82、衔接杆83以及清洁海绵块85之间的相互配合，启动抽吸两用泵11向弹性通气柱82的内部充入气体，从而推动伸缩杆81变长，使清洁海绵

块85对载药台3表面的药渣进行清洁,避免残留的药渣对下一种待筛选的药物造成干扰,筛选的准确性提高,容纳箱2的内腔顶部左右两侧均固定设置有两个弹簧5,同侧两个弹簧5的底部之间固定设置有过滤网6,过滤网6位于对应一侧落药口4的正下方,清洁海绵块85的底部与载药台3的顶部位于同一水平高度,清刮组件9包括承载框91,承载框91的顶部从前到后均匀固定设置有若干塑料刮齿92,通过承载框91和塑料刮齿92之间的相互配合,清洁海绵块85在收回到放置槽7内部的过程中会经过清刮组件9,塑料刮齿92会将清洁海绵块85表面的药渣及时刮下,使其通过左部的落药口4掉落到集渣盒12的内部,保证下次的清洁效果,通气腔10与弹性通气柱82的内部相连通,抽吸两用泵11的输气端与通气腔10的内部相连通,容纳箱2的内部滑动连接有集渣盒12,集渣盒12的内腔上部前后壁之间均匀固定设置有若干防飞扬板13,通过弹簧5、过滤网6和防飞扬板13之间的相互配合,避免推落的药渣再次扬起,同时避免药物直接掉落到集渣盒12内,结构简单但是功能性强大。

[0043] 使用时,将筛选好的药物从载药台3上取走,此时载药台3表面会残留药渣,只需启动抽吸两用泵11,通过通气腔10向弹性通气柱82的内部充入气体,随着弹性通气柱82内部气体的增多,其体积变长,会推动伸缩杆81向右伸长,带动清洁海绵块85向右移动,过程中清洁海绵块85会将载药台3表面的药渣推到右部的落药口4中,顺着过滤网6的孔洞下落到集渣盒12的内部,然后抽吸两用泵11再次工作将弹性通气柱82内部的气体抽吸走,此时在弹性通气柱82自身弹性的作用下,会使伸缩杆81恢复原状,促使清洁海绵块85向左移动,当经过清刮组件9时,塑料刮齿92会将清洁海绵块85表面的药渣及时刮下,使其通过左部的落药口4掉落到集渣盒12的内部,保证清洁海绵块85之后的清洁效果,定期将集渣盒12抽拉出来,将其内部的药渣清理出来恢复原位即可。

[0044] 需要说明的是,在本文中,诸如第一和第二等之类的关系术语仅仅用来将一个实体或者操作与另一个实体或操作区分开来,而不一定要求或者暗示这些实体或操作之间存在任何这种实际的关系或者顺序。而且,术语“包括”、“包含”或者其任何其他变体意在涵盖非排他性的包含,从而使得包括一系列要素的过程、方法、物品或者设备不仅包括那些要素,而且还包括没有明确列出的其他要素,或者是还包括为这种过程、方法、物品或者设备所固有的要素。

[0045] 尽管已经示出和描述了本发明的实施例,对于本领域的普通技术人员而言,可以理解在不脱离本发明的原理和精神的情况下可以对这些实施例进行多种变化、修改、替换和变型,本发明的范围由所附权利要求及其等同物限定。

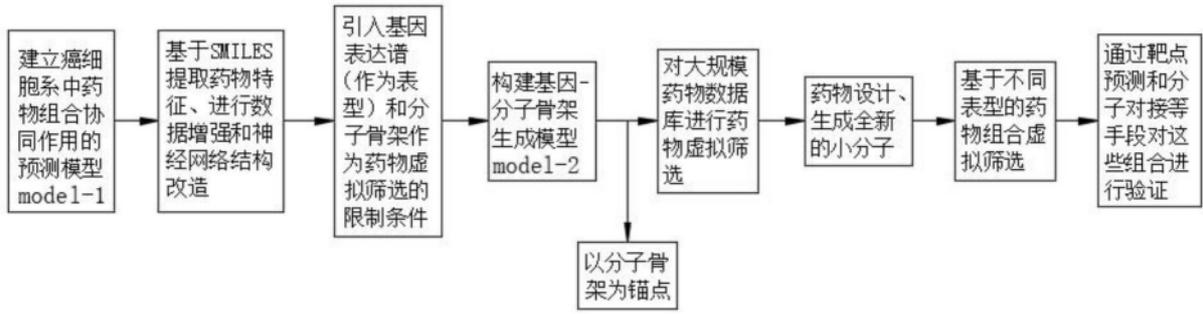


图1

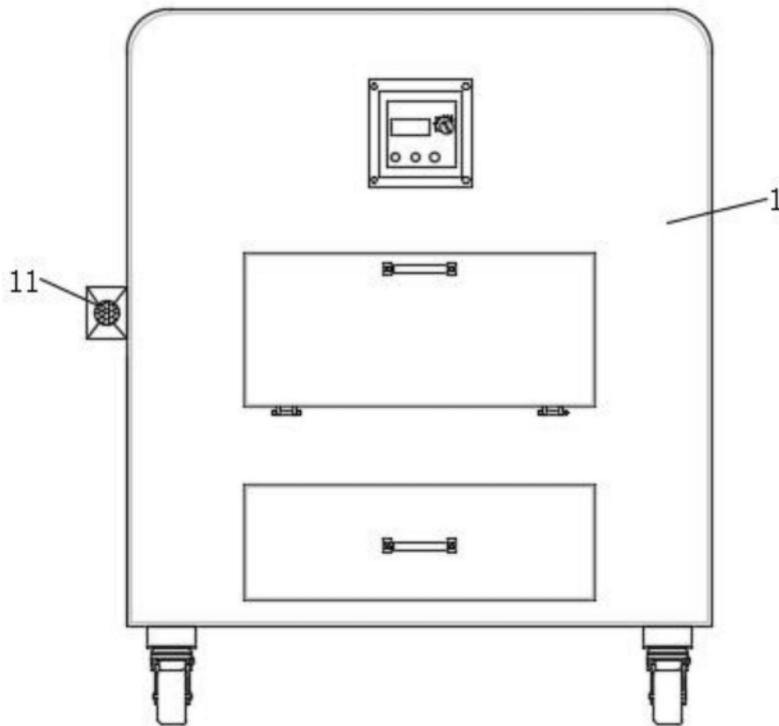


图2

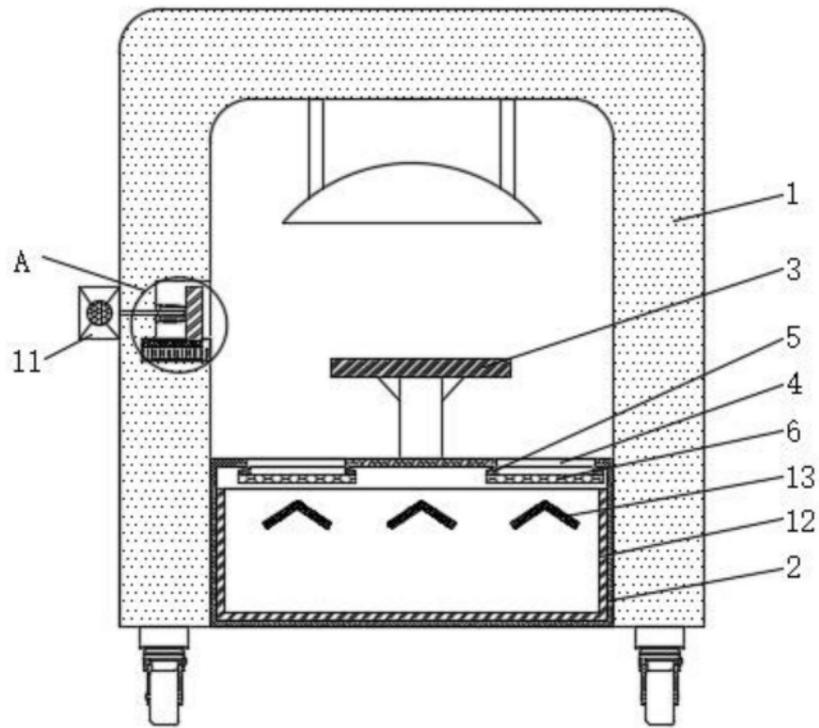


图3

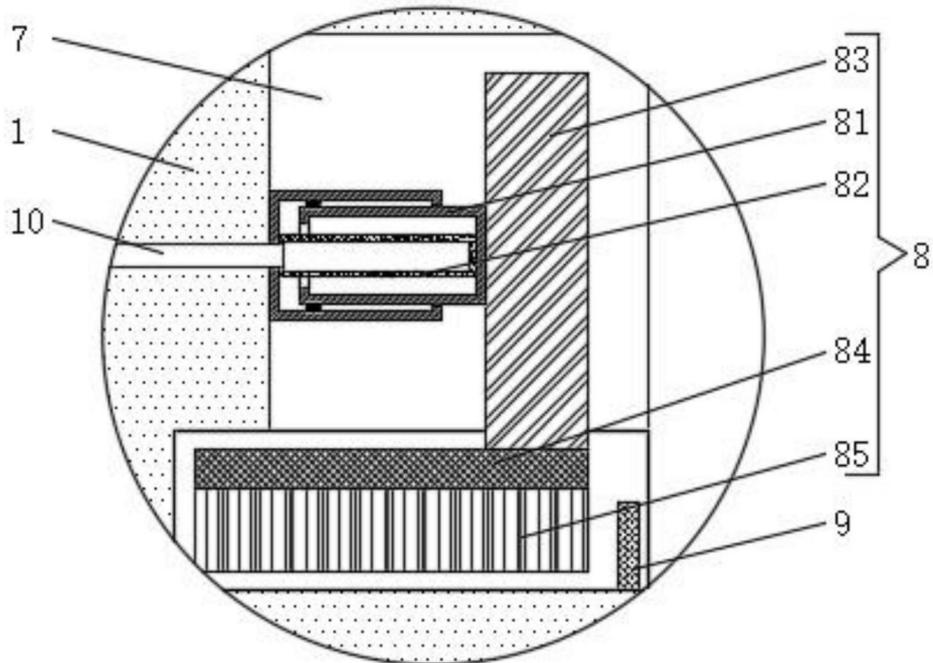


图4

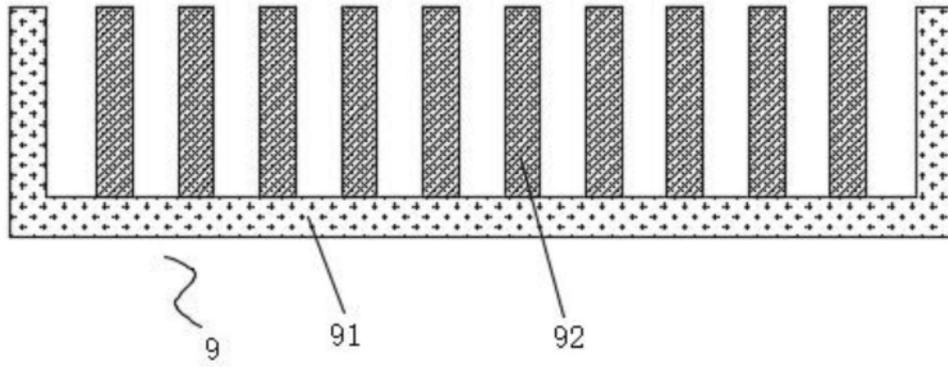


图5