

学术报告会

时间: 2023年10月16日 10:30

地点: 电信群楼2-402会议室

基于靶点3D结构的小分子药物生成模型

马剑竹

清华大学, 副教授



摘要:

现有的 AI-based Drug Design (AIDD) 大多采用虚拟筛选和分子对接的方式进行辅助药物开发。本次报告中, 我们将探索另一种 AIDD 的方式 - 根据靶点的 3D 结构采用生成模型直接生成 3D 的小分子配体。我们将讨论三种不同的机器学习算法并分别从不同角度来解决这一问题。这些模型包括了自回归模型、扩散模型和基于先验知识的生成模型。我们将首先分析生成模型和传统的虚拟筛选模型的区别, 然后探讨这三种模型生成的小分子在 2D、3D 和药物靶点对接上的各项指标, 最后分析他们各自的优势和劣势以及不同的应用场景。

简介:

马剑竹博士, 现任清华大学电子系副教授, 清华大学智能产业研究院副教授, 博导。曾任北京大学人工智能研究院副教授, 北京大学医学部公共卫生学院副教授, 美国普度大学 (Purdue University) 计算机系 Walther 助理教授, 普渡大学生物化学系助理教授。主要研究领域为生物信息学、化学信息学和机器学习。马剑竹博士的生物医学研究成果收录于《Nature Methods》《Nature》《Nature Cancer》《Cell》《Nature Communications》《PNAS》等国际顶级期刊, 马剑竹博士曾获得 RECOMB 最佳论文奖、Warren DeLano 奖, 是基金委海外优青项目入选者。马剑竹博士开发的蛋白质三维结构预测 RaptorX 服务器曾 CASP 中获得比赛总分第二名, 在 2016 年的 CASP 中获得接触图比赛的第一名。除了结构生物学外, 马剑竹博士的机器学习研究成果曾发表于国际顶级机器学习会议 NeuralPS、ICML、ICLR、CVPR、KDD、WWW 和 UAI。