



Aine

Tietojenkäsittelytieteen kandiohjelma

**koneoppimisen menetelmät
lääkkeiden/kemiallisessa syntetisoinnin
mallennuksessa**

Heikki Pulli

6.10.2021

MATEMAATTIS-LUONNONTIETEELLINEN TIEDEKUNTA
HELSINGIN YLIOPISTO

Ohjaaja(t)

Tarkastaja(t)

Yhteystiedot

PL 68 (Pietari Kalmin katu 5)
00014 Helsingin yliopisto

Sähköpostiosoite: info@cs.helsinki.fi

URL: <http://www.cs.helsinki.fi/>

Sisällys

1	Johdanto	1
2	Lääkkeiden syntetisointi	2
3	Lääkkeen syntetisoinnin mallenuksen ongelma	3
4	Koneoppimisen käytön hyödyt	4
5	Kehitetyjä apuvälineitä	5
6	Tulevaisuuden koneoppimisen mallit ja kehitys	6
	Lähteet	7

1 Johdanto

Wubba lubba hab [3]

Koneoppimisen mallit ovat

2 Lääkkeiden syntetisointi

Mitä tarkoittaa lääkkeen syntetisointi?

3 Lääkkeen syntetisoinnin mallennuksen ongelma

Miksi lääkkeiden syntetisointi polkujen mallennus on hankalaa? [1]

4 Koneoppimisen käytön hyödyt

Miten koneoppiminen voi auttaa uusien lääkkeiden syntetisoinnissa? [5]

5 Kehitetyjä apuvälineitä

Miten koneoppimista hyödynnetään tällä hetkellä lääkkeiden syntetisoinnissa? [3, 2, 4]

6 Tulevaisuuden koneoppimisen mallit ja kehitys

Miten lääkkeiden kehitys tulee hyötymään tulevaisuuden koneoppimisesta? [1]

Lähteet

- [1] K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev ja A. Walsh. "Machine learning for molecular and materials science". eng. *Nature (London)* 559.7715 (2018), s. 547–555. ISSN: 0028-0836.
- [2] S. Harel ja K. Radinsky. "Accelerating Prototype-Based Drug Discovery Using Conditional Diversity Networks". Teoksessa: *Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. KDD '18. London, United Kingdom: Association for Computing Machinery, 2018, s. 331–339. ISBN: 9781450355520. DOI: 10.1145/3219819.3219882. URL: <https://doi-org.libproxy.helsinki.fi/10.1145/3219819.3219882>.
- [3] M. H. S. Segler, M. Preuss ja M. P. Waller. "Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI". eng. *Nature (London)* 555.7698 (2018), s. 604–610. ISSN: 0028-0836.
- [4] B. Shin, S. Park, J. Bak ja J. C. Ho. "Controlled Molecule Generator for Optimizing Multiple Chemical Properties". Teoksessa: *Proceedings of the Conference on Health, Inference, and Learning*. CHIL '21. Virtual Event, USA: Association for Computing Machinery, 2021, s. 146–153. ISBN: 9781450383592. DOI: 10.1145/3450439.3451879. URL: <https://doi.org/10.1145/3450439.3451879>.
- [5] J. Vamathevan, D. Clark, P. Czodrowski, I. Dunham, E. Ferran, G. Lee, B. Li, A. Madabhushi, P. Shah, M. Spitzer ja S. Zhao. "Applications of machine learning in drug discovery and development". eng. *Nature reviews. Drug discovery* 18.6 (2019), s. 463–477. ISSN: 1474-1776.

