



浙江工商大学

硕士学位论文

论文题目：基于扩散模型的三维药物分子设计框架

作者姓名：徐璨

学科专业：统计学

研究方向：数理统计

指导教师：王伟刚

提交日期：2024 年 1 月

**Dissertation Submitted to Zhejiang Gongshang University
for Master's Degree of Science**

A Diffusion-based 3D Molecule Generative Framework

Author: Can Xu

Major: Statistics

Supervisor: Prof. Weigang Wang



Jan. 2024

School of Statistics and Mathematics

Zhejiang Gongshang University

Hangzhou, 310018, P. R. China

基于扩散模型的三维药物分子设计框架

摘 要

近年来基于深度学习的生成模型也在多领域有成功应用，例如 AI 在图画、语音、视频、对话等应用上的优秀表现引发了社会对人工智能新一轮广泛关注与热烈讨论。

在智能计算的计算医药相关研究中，深度学习模型在药物发现、药物属性预测等应用中已经展现出良好的性能和极大的潜力。人工智能技术应用能够为药物研发的多个阶段降本增效。过去的 2022 年，AI 制药赛道相关融资总金额达百亿美元。国内互联网巨头如百度百图生科、华为 EIHealth、腾讯云深智药，及初创企业晶泰科技，剂泰医药，星药科技等，相关成果已经展现出深度学习在该领域的强大性能和广阔前景。

近来大火的生成模型被广泛应用于智能计算领域，人工智能算法有望根据人类的要求生成理想的结果，帮助提升药物发现与设计的效率与质量。在计算化学的相关研究中，深度学习模型的成功落地能够推动制药企业减少湿实验成本，助力靶点确认、药物发现、分子生成、化学反应设计、化合物筛选、临床试验、风险评估等多阶段。

本文聚焦于深度学习算法在三维药物分子发现这一主题，意在利用时下最优的生成模型算法，创新性设计出更符合三位药物理化性质的算法，提升全新药物分子设计的性能与效率。

关键词: 扩散模型; 分子生成; 几何神经网络

A DIFFUSION-BASED 3D MOLECULE GENERATIVE FRAMEWORK

ABSTRACT

AAAAAAAAAAAAAA

KEYWORDS: Diffusion model; Molecule generation; Geometry neural network

第1章 引言

1.1 选题背景与研究意义

1.1.1 选题背景

近年来基于深度学习的生成模型也在多领域有成功应用，例如 AI 在图画、语音、视频、对话等应用上的优秀表现引发了社会对人工智能新一轮广泛关注与热烈讨论。

在智能计算的计算医药相关研究中，深度学习模型在药物发现、药物属性预测等应用中已经展现出良好的性能和极大的潜力。人工智能技术应用能够为药物研发的多个阶段降本增效。过去的 2022 年，AI 制药赛道相关融资总金额达百亿美元。国内互联网巨头如百度百图生科、华为 EIHealth、腾讯云深智药，及初创企业晶泰科技，剂泰医药，星药科技等，相关成果已经展现出深度学习在该领域的强大性能和广阔前景。

1.1.2 研究意义

1.2 文献综述

1.2.1 生成模型

1.2.2 分子学习

1.2.3 分子生成

现有的基于扩散的分子生成模型有且只有 EDM^[1] 和 MDM^[2]。

1.3 创新点

1.4 基本框架

第2章 基于扩散模型的分子生成

参考文献

- [1] HOOGEBOOM E, SATORRAS V G, VIGNAC C, et al. Equivariant diffusion for molecule generation in 3D[C]//Proceedings of Machine Learning Research: Vol. 162 Proceedings of the 39th International Conference on Machine Learning. PMLR, 2022: 8867-8887.
- [2] HUANG L, ZHANG H, XU T, et al. Mdm: Molecular diffusion model for 3d molecule generation[A]. 2022.

硕士研究生期间的科研成果

论文:

XU C, ZHANG Y, WANG W, DONG L. Pursuit and evasion strategy of a differential game based on deep reinforcement learning[J]. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2022, 10: 827408.

ZHANG Y, **XU C**, WU X, ZHANG Y, DONG L, WANG W. LFGCF: Light folksonomy graph collaborative filtering for tag-aware recommendation[J]. Expert Systems with Applications, 2022, Under Review.

XU C, ZHANG Y, CHEN H, DONG L, WANG W. A fairness-aware graph contrastive learning recommender framework for social tagging systems[J]. Information Sciences, 2023, Accepted for Publication.

课题:

面向分布式异构计算系统内存池化关键技术, 国家重点研发计划之先进计算与新兴软件。

竞赛:

“华为杯”第十八届中国研究生数学建模竞赛, 三等奖, 排名: 1/3。

第五届全国应用统计专业学位研究生案例大赛, 三等奖, 排名: 1/3。

OGB-LSC @NeurIPS 2022 (PCQM4Mv2 Track), NO.11, 排名: 1/5。