**Drug repurposing based on network**

ชื่อสมาชิกในกลุ่ม (Team members)

1. มารีนญา ตะโจปะรัง 6231352421

2. ณิชกานต์ ชัยพจนา 6231322621

3. ดรากรณ์ ผดุงพัฒโนดม 6231323221

**Progress3**

เนื่องจากเราต้องการหาความเป็นไปได้ของสูตรยาใหม่ ๆ สำหรับการรับมือโควิด-19 จึงเริ่มจากการหาข้อมูลของยาที่สามารถยับยั้งโรคโควิด-19 ได้ ซึ่งยาที่หามาได้จะมีประสิทธิภาพที่ต่างกัน โดยจะแบ่งคลาสของยาได้จากค่า IC50 ว่าจะต้องใช้ปริมาณยามากเท่าไหร่ ในการยับยั้งโปรตีนโควิด-19 จากนั้นจะคำนวณค่า QED และ LogP ของยาเก็บไว้เพื่อใช้เป็นผลลัพธ์ที่ควรจะได้จากการ generate ยาใด ๆ

ใน progress 3 จะลอง generate ยาโดยใช้ข้อมูลจาก zinc250k เพื่อ generate ยาโดยไม่มีการปรับค่า paramerter ต่าง ๆ แล้วลองคำนวณค่า QED และ LogP ที่ได้จากยานั้น ๆ เพื่อดูแนวโน้มและความเป็นไปได้ของยาประเภทต่าง ๆ เทียบกับข้อมูลของยาที่เก็บไว้เบื้องต้น

**ขั้นตอนการทำงาน**

**Prepare data**

เก็บข้อมูลยาตัวที่ส่งผลต่อ covid-19 จาก chembl database และนำมา filter โดยใช้ standard type เป็น IC50 เพื่อแบ่งกลุ่มยาเหล่านั้นออกเป็น 3 กลุ่ม ได้แก่ active, inactive, intermediate

Table

Description automatically generated

**Calculate QED and LogP**

Graphical user interface

Description automatically generated with low confidence หลังจากได้ข้อมูลยาที่แบ่งกลุ่มแล้ว จะนำยามาคำนวณค่า QED และ LogP โดยใช้ rdkitหลังจากได้ค่า QED และ LogP ทุกตัวมา จะนำไปคิดค่าทางสถิติต่าง ๆ เพื่อใช้เปรียบเทียบกับยาอื่น ๆ โดยเก็บในลักษณะดังนี้

Table

Description automatically generated

ค่าทางสถิติของ LogP

Table

Description automatically generated with low confidence

ค่าทางสถิติของ QED

**Generate drug**

ใช้ torchdrug เพื่อ generate ยา โดยใช้ RGCN เป็น model และใช้ GCPN ในการ generate ยาใหม่ขึ้น และใช้ dataset เป็น zinc250k เมื่อได้ผลของยาในรูปของ smile แล้วจะนำมาคำนวณค่า QED และ LogP ของยานั้น ๆ เพื่อใช้เปรียบเทียบกับค่า QED และ LogP ของยาที่มีประสิทธิภาพต่อโปรตีนโควิด-19

Text

Description automatically generated

ค่าทางสถิติของ QED

Text

Description automatically generated

ค่าทางสถิติของ LogP

prepare data:

<https://colab.research.google.com/drive/1_yQ0BwggR7-VzNRf1AYGomxAgebN1OUO?usp=sharing>

generate and calculate new QED and LogP:

<https://colab.research.google.com/drive/1_VQMIIS19Mbv-HVsR0vpHycg2QGUC9AJ?usp=sharing>

Training data:

<https://colab.research.google.com/drive/1Q4i2mhDOw7XJgjQB5JiW0IuQIFCWNM_t?usp=sharing>

data folder:

<https://drive.google.com/drive/folders/1eMmlsfq7Ga0Op_GJsSaEi9deQJvqX746?usp=sharing>

ใน progress ถัดไปจะเป็นการ tune parameter เพื่อให้ได้ผลลัพธ์ที่ดีขึ้น และอาจลองวัดผลโดยใช้ binding affinity