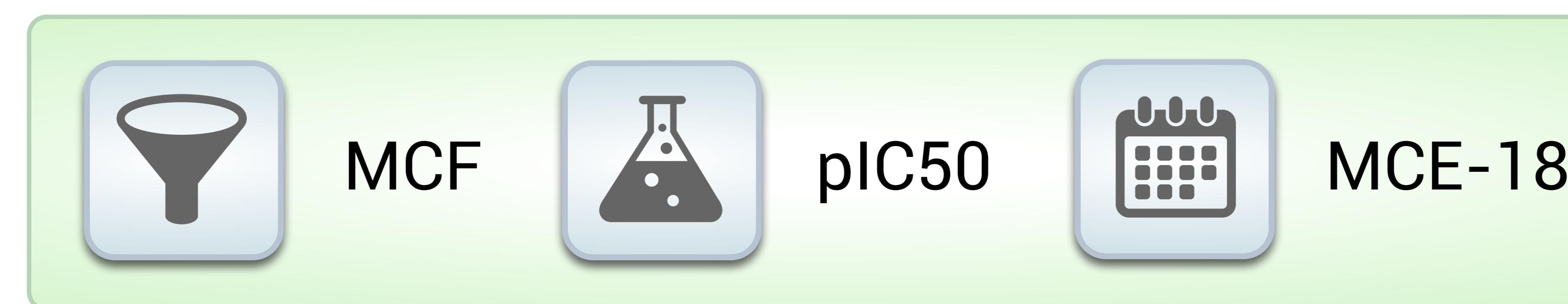


Learning the chemical space

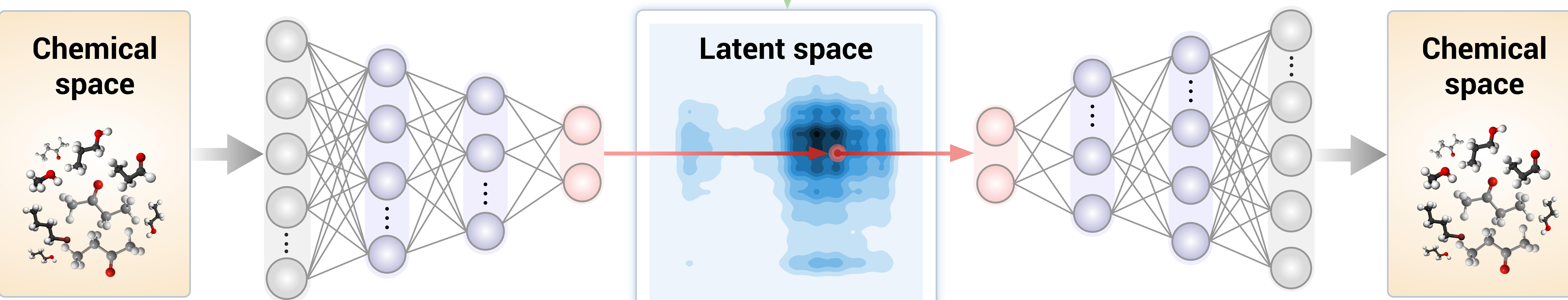
目标：新药设计，给定目标（对xx激酶的活性），快速化合物合成

这种药物设计之前有很多方法都是基于gan的

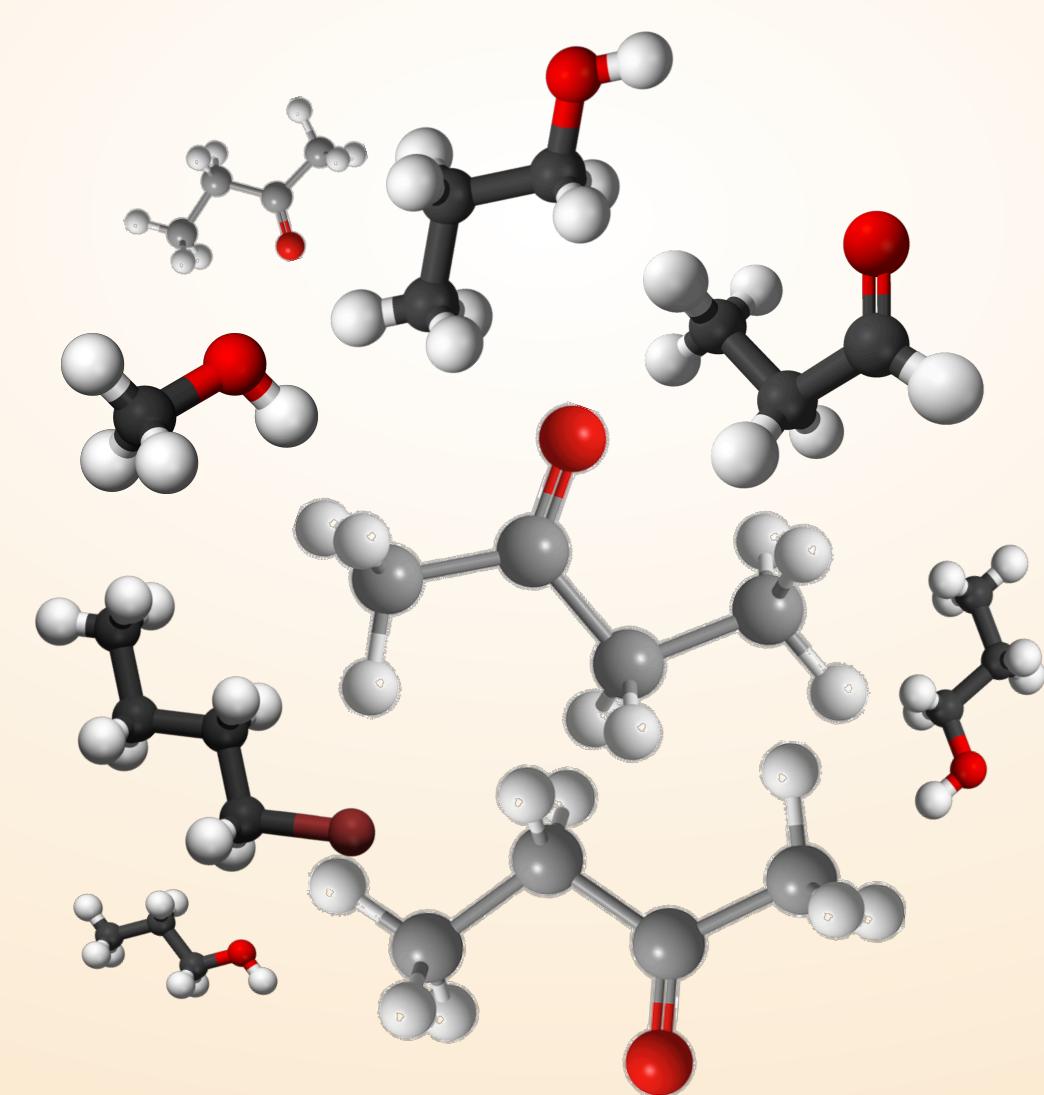
Gentrl 模型是一个具有丰富潜在空间先验分布的变分自动编码器。



分子是否能通过这个药物化学过滤器



Chemical
space

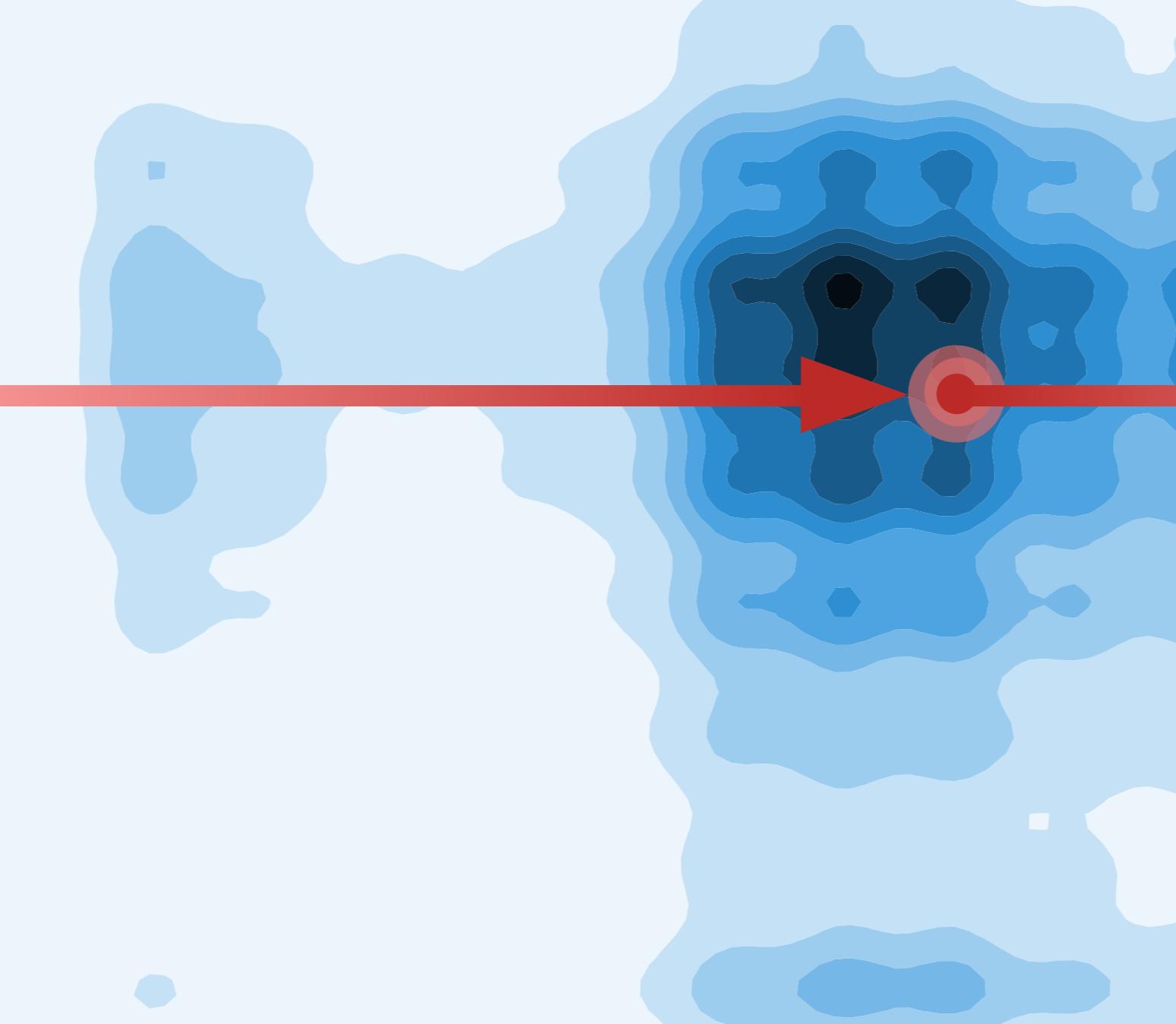


Encoder

利用张量分解对分子结构及其性质之间的关系进行编码，并对缺失值的数据进行学习。

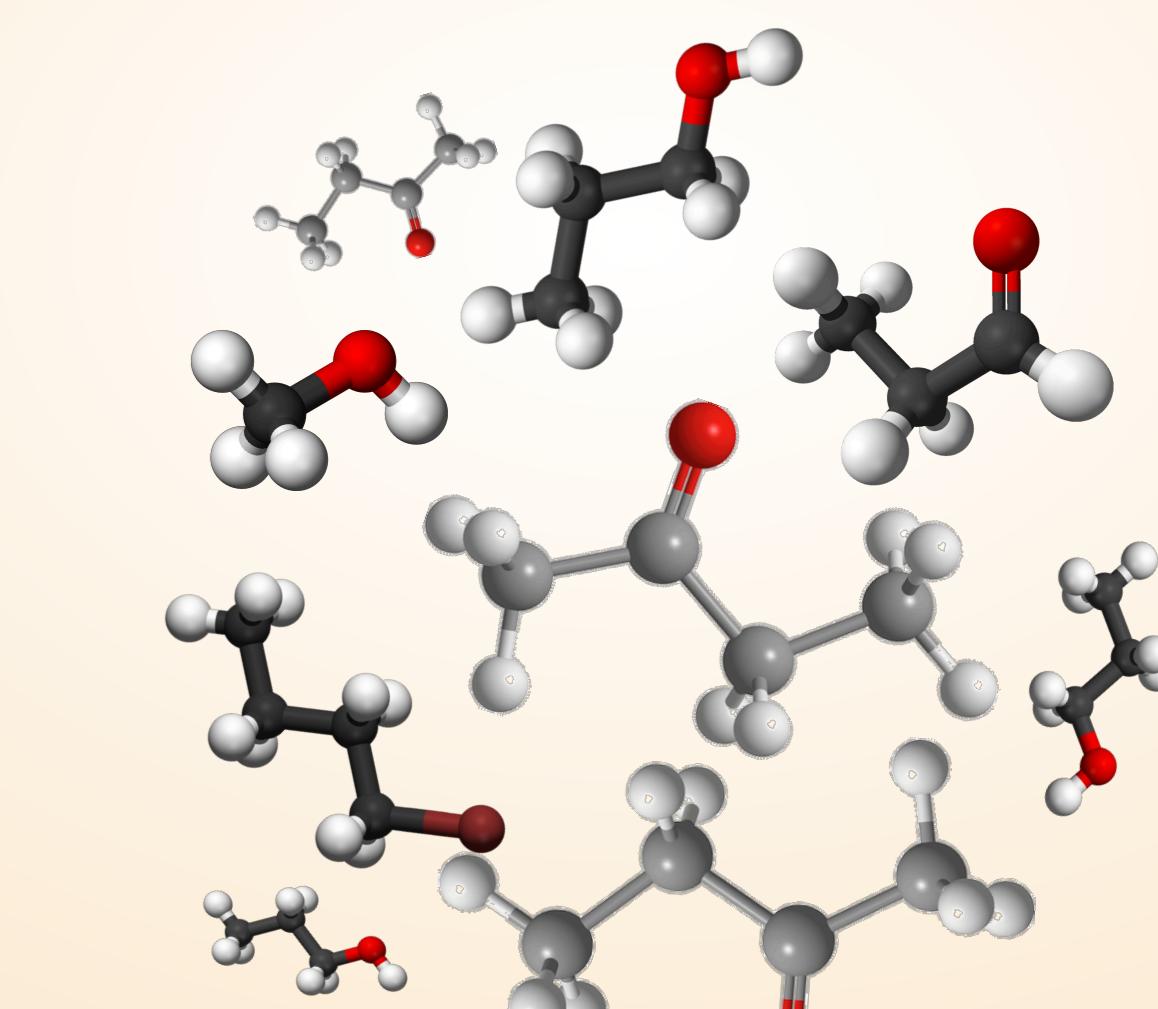
它是将整个蛋白质的结构压缩到一个分布上，也就是降维

Latent space



Generator

Chemical
space

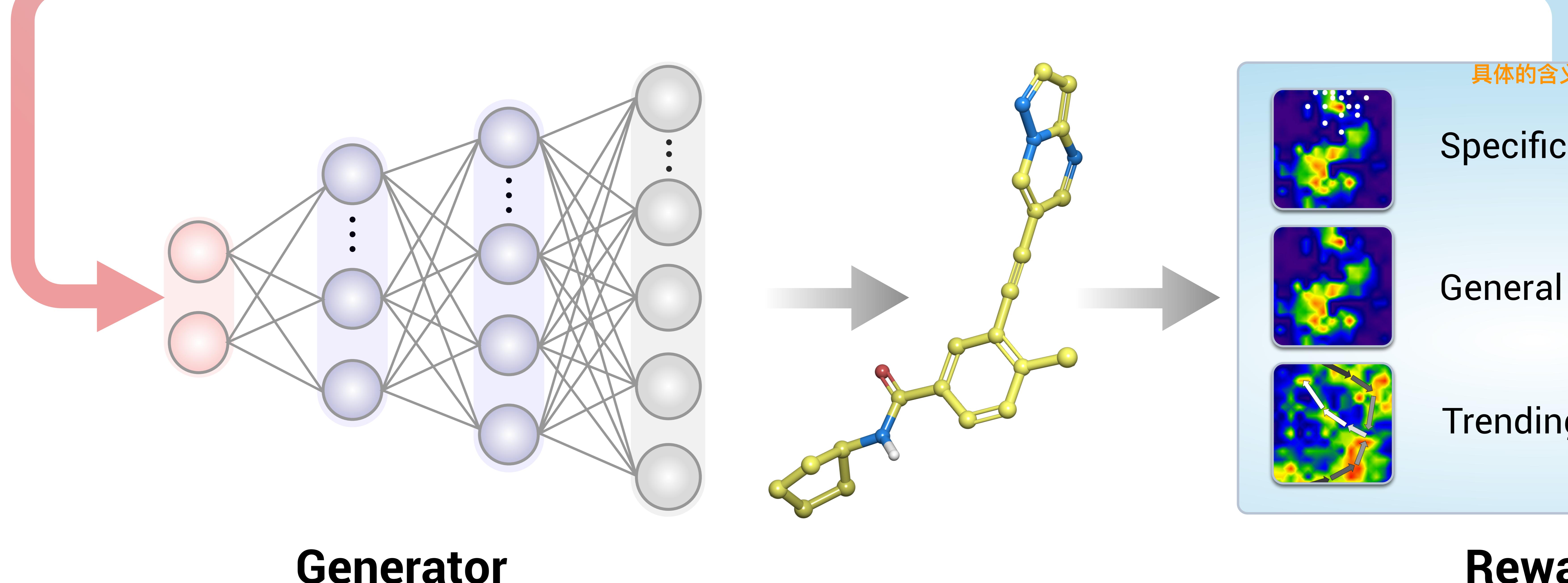


Generation Strategy

然后我们冻结所有的参数，除了可以学习的prior，并探索化学空间，以找到高回报的分子

该算法由 Teuvo Kohonen 提出，是一种独特的无监督机器学习降维技术。它可以有效地再现一个内在的拓扑结构和模式隐藏在输入化学空间中的忠实和无偏见的方式。输入的化学空间通常用分子描述符(输入向量)来描述，输出通常包括一个二维或三维特征映射，以方便视觉检查。

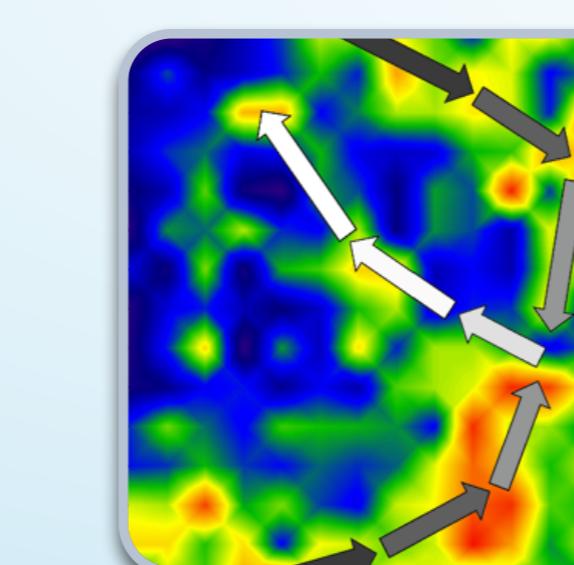
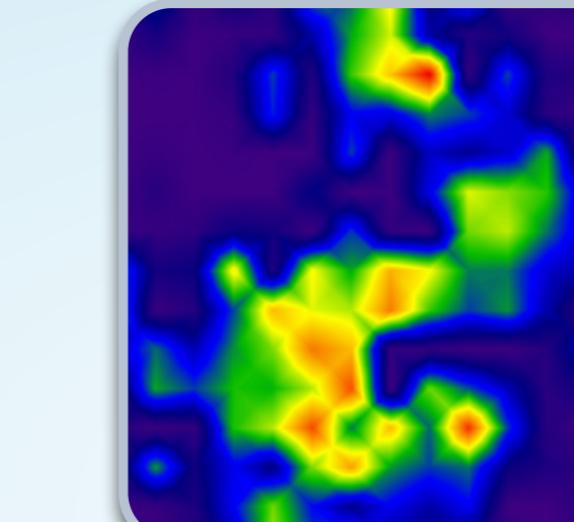
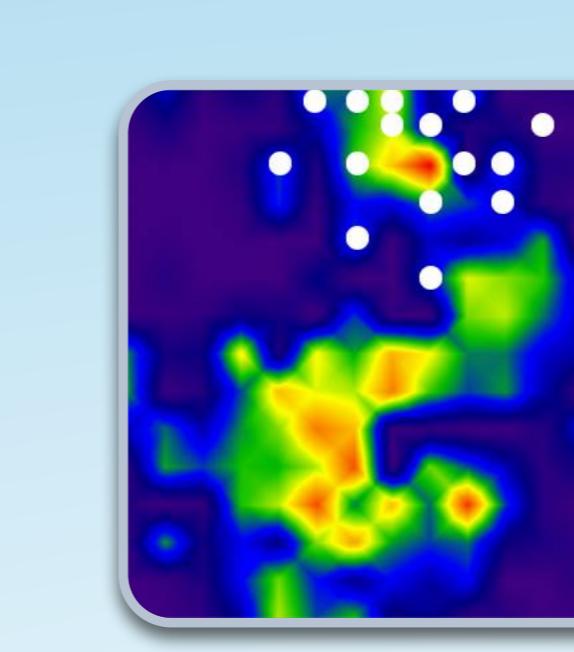
使用3种不同的自组织映射SOMs作为奖励函数



Specific Kinase SOM

General Kinase SOM

Trending SOM



该方法是一种基于 kohonen 的奖励函数，利用专利中已公开的结构的应用优先级数据对复合新颖性进行评分。

Rewards