**A1專題題目：蛋白質與配體結合模擬**

指導老師：許弘駿 教授

專題組員：黃雨婕、趙翊妏、馬琇衾

**2017/10/29**

**摘 要**

在國內，人們很常使用一些成藥，國內藥局的非處方藥品市場一年達 94 億 元，健保一年的藥費達 1300 億，可見國人對藥物的依賴性有多高，而頻繁的使用藥物可能會使身體產生抗藥性，如此就勢必得開發另一新藥，而開發新藥需要花許多時間去研發，進一步去研究藥物跟人體的結合是否會產生有效的用。

一般在研製藥物之前，需要先了解造成該疾病的原因，研究者會「抑制與細胞增值相關的蛋白質作用」去和緩症狀的方向研究，身體中的抗體會根據蛋白質的不 同而有不同的種類，能夠辨識應該正確結合的對象，抗體藥物製造出以癌細胞特有之蛋白質為標靶的抗體，將其藥投入到體內，藥物只會到達該細胞。研究藥物與蛋白質的結合位置需要花時間跟成本去找出，開發此系統，目的是為了減少繁瑣的程序進而去快篩出適合的配體，研究人員可從結合的配體中，選出可研究的藥物。

系統利用機器學習方法，建立機器學習的模型(Model)，用深度學習，預測此蛋白質與哪些配體可以結合，以利研究開發新藥物，達到幫助快速篩選新藥，節省大量的測試時間，能達到提升藥物設計的效率。

關鍵字：機器學習,配體,蛋白質,TensorFlow,PDB,大數據