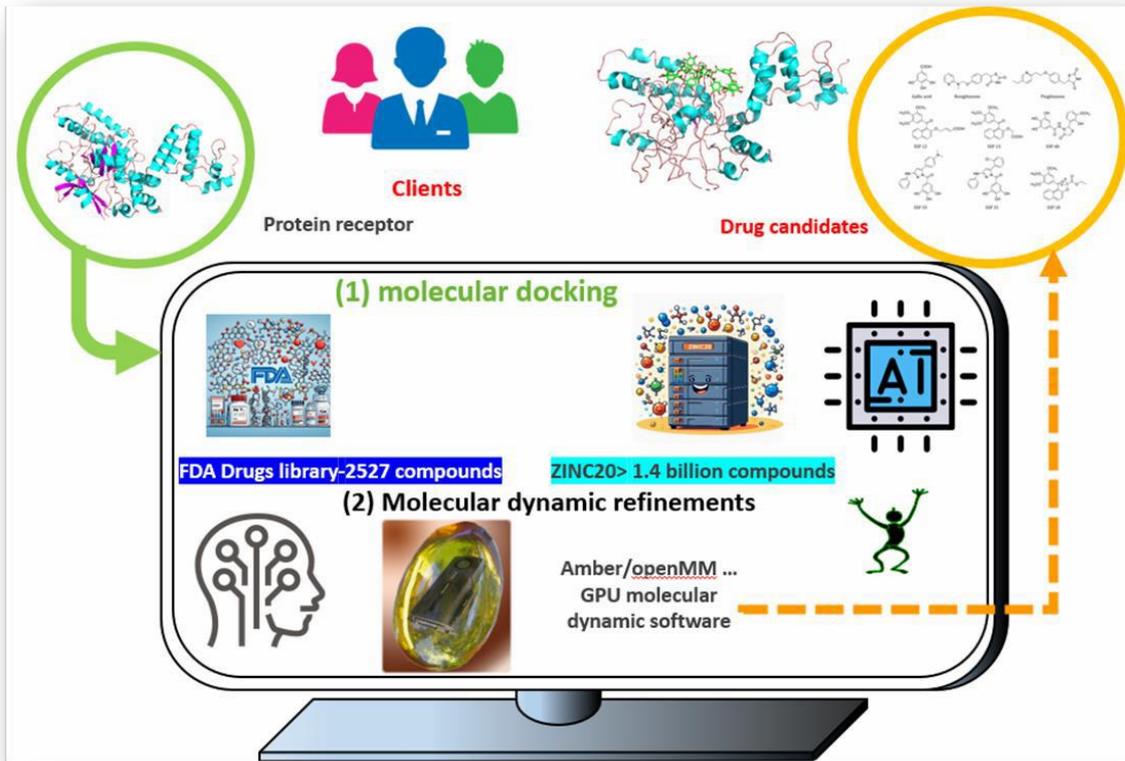




# 高雄醫學大學新藥開發暨價創研究中心 人工智能自動化藥物篩選平台

※平台簡介：



人工智能自動化藥物篩選平台策略圖

小分子藥物研發是一個漫長又艱鉅的過程，從發現到核准的藥物需要經過：探索研究(1-2年)、臨床前試驗(3-5年)與人體臨床試驗階段(5-8年)三個階段，平均約為 9-15 年的時間，需要投資約 10 億美元。因此藉由已知 FDA 上市小分子藥物資料庫與人工智能方法將可大幅降低藥物在人體臨床試驗階段所發花費的時間與相關研發經費的耗費。

本中心已購買美國 FDA 小分子藥物實體化合物與資料庫(2527 compounds)，並搭配高精度卷積層類神經網路架構 GNINA 分子接合軟體(與實驗 IC50 比對後的  $R^2$  可以提高至 0.7 以上)與分子動力學 AMBER 軟體之藥物分子與受體蛋白結合自由能的計算更好地鎖定可能會成功的小分子藥物(人工智能自動化藥物篩選平台策略圖所示)；同時本平台可以提供學界與產業界一個快速準確的小分子藥物虛擬篩選與活性實驗測試平台。

※服務項目及收費標準：

項目	校內	校外
Non-covalent 藥物與一個受體結合蛋白(ligand-receptor docking)之快速高通量分析(high throughput screening)	10,000 元 (或免費但須與研究中心成員共享相關研究論文與專利)	20,000 元
Covalent 藥物與一個受體結合蛋白(ligand-receptor docking)之快速高通量分析(high throughput screening)	20,000 元 (或免費但須與研究中心成員共享相關研究論文與專利)	40,000 元
經同源蛋白建模(homology modeling)與三維結構搜尋之藥物設計開發	5,000 元 (或免費但須與研究中心成員共享相關研究論文與專利)	10,000 元
長時域分子動態模擬	20,000~300,000 元 依資訊條件難易度決定 (或免費但須與研究中心成員共享相關研究論文與專利)	20,000~300,000 元 依資訊條件難易度決定
其他項目：	80,000~300,000 元 依資訊條件難易度決定 (或免費但須與研究中心成員共享相關研究論文與專利)	80,000~300,000 元 依資訊條件難易度決定

※聯絡窗口：

高雄醫學大學 新藥開發暨價創研究中心  
 王焰增教授 07-3121101 分機 2138 轉 21  
 樊曉勵研究助理 07-3121101 分機 2002