

Astudiaethau sgrinio a docio cyffuriau yn seiliedig ar ddeallusrwydd artifisial i ddilysu cyfle i ddatblygu cynnyrch ac ymchwil cydweithredol rhwng busnesau bach a chanolig ac academyddion

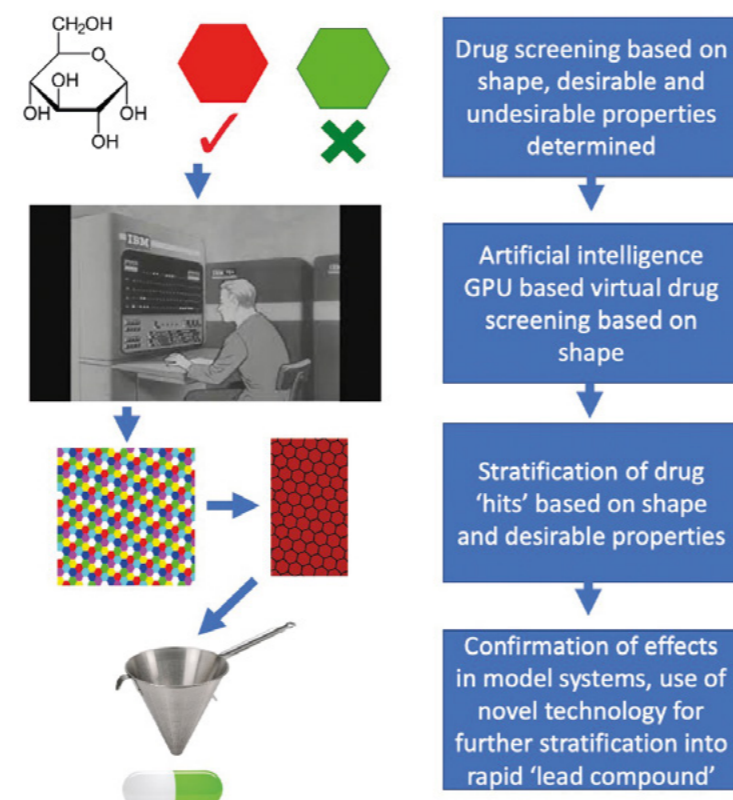
Crynodeb

Yr her

Un her sylweddol ar gyfer canfod cyffuriau yw bod 16% o'r holl gyffuriau yn methu astudiaethau diogelwch oherwydd eu bod yn achosi methiant yr afu. Dyma'r gost fwyaf i'r sector fferyllol ac mae'n cyfyngu opsiynau triniaeth i gleifion. Ar hyn o bryd, mae canfod cyffuriau yn dibynnu ar sgrinio llyfrgelloedd cemegol helaeth yn erbyn targedau biolegol, ond nid yw hyn yn darparu gwybodaeth ynghylch gwenwyndra ac mae wedi arwain at lai o gyffuriau yn cael eu datblygu. Yn amlwg mae angen strategaethau gwell i gyflawni cyffuriau gwell, mwy diogel ac mwy effeithiol, gan gynnal y defnydd o lyfrgelloedd cemegol mewnol sydd wedi'u datblygu am brisiau uchel.

Datrysiad

Mae mwyfwy o ddefnydd o ddeallusrwydd artifisial er mwyn canfod cyffuriau newydd a chyfansoddion offer. Mae un dull gweithredu yn defnyddio cyfrifiadura o safon, sef unedau prosesu graffig, i lyfrgelloedd cyfansawdd sgrin ar gyfer cemegion sy'n debyg yn eu siâp 3D i ligand neu boced glynu'r protein targed. Gwnaethom gynnig dull cyfunedig i ddefnyddio sgrinio cyffuriau gyda siâp 3D wedi'i greu drwy ddeallusrwydd artifisial mewn dwy ffordd. Yn gyntaf, gwnaethom sgrinio moleciwlau siwgr am gyffuriau newydd o bosibl a all effeithio ar fetabolaeth siwgr, yn ail gwnaethom ail-sgrinio'r cyffuriau a ganfuwyd yn erbyn siâp cyffuriau sy'n achosi gwenwyndra'r afu. Gwnaethom sgorio ein cyfansoddion yn ôl y mwyaf a'r lleiaf tebygol o fod yn wenwynig a'u rhoi dan brawf mewn celloedd. Gan ddefnyddio technoleg buro magnetig a ddatblygwyd gan Liquids Research, llwyddasom i gadarnhau bod ein dull deallusrwydd artifisial wedi gweithio a'n bod wedi cynhyrchu llwyfan sgrinio cyffuriau newydd, gwell.



Awduron:

Sophie Cook¹, Helen Waller-Evans² ac Emyr Lloyd-Evans¹

Cysylltiadau:

¹Ysgol Biowyddorau, Adeilad Syr Martin Evans, Prifysgol Caerdydd, Rhodfa'r Amgueddfa, Caerdydd, CF10 3AX

²Y Sefydliad Darganfod Meddyginiaethau, Prif Adeilad, Prifysgol Caerdydd, Rhodfa'r Amgueddfa, Caerdydd, CF10 3AT

Buddion/buddiolwyr

1. Gwyddonwyr canfod cyffuriau (academaidd ac yn y diwydiant) - Pan fydd ein dull gweithredu newydd, sy'n defnyddio deallusrwydd artifisial, yn cael ei gadarnhau'n llwyr gyda mwy o dystiolaeth arbrofol, gellir ei ddefnyddio i wella'n sylweddol y broses o ganfod cyffuriau. Bydd hyn yn lleihau amser i adnabod prif gyfansoddion ac mae'n dangos cyfansoddion a all fod yn wenwynig, gan leihau'r amser i'r clinig o bosibl a lleihau costau canfod cyffuriau yn sylweddol.
2. Liquids Research Ltd - Wedi cael cadarnhad, drwy'r prosiect hwn, o ddefnydd eu nanoronnau haearn ocsid hynod baramagnetig ar gyfer cadarnhau effeithiau cyffuriau ar y targed ac oddi arno wedi'u haenu gan ddeallusrwydd artifisial. Mae hwn yn ddull newydd sydd â'r posibilrwydd o fod yn hynod ddefnyddiol i'r sector diwydiannol canfod cyffuriau.

Gwahaniaeth a wneir

Cadarnhad ei bod yn bosibl cyfuno ymchwil dan arweiniad deallusrwydd artifisial gyda gwyddoniaeth gweithgynhyrchu bioddeunyddiau newydd o Gymru i gynhyrchu ffordd newydd a gwell o ganfod cyffuriau.

Defnyddiau ychwanegol/camau nesaf

Ein nod nawr yw cyhoeddi'r ffordd newydd, a fydd yn tystio ein dull canfod cyffuriau newydd yn seiliedig ar ddeallusrwydd artifisial. Mae'n debyg y bydd hyn, yn ei dro, yn atgyfnerthu cydweithfeydd sydd eisoes yn bodoli (e.e. gyda chwmnïau lleol a rhyngwladol), ysgogi rhai newydd ac arwain at gyllid i goethi a defnyddio'r dull ymhellach. Dilyniant naturiol yw datblygu'r dull deallusrwydd artifisial/bioddeunyddiau cyfunedig ar gyfer profi effeithiau cyffuriau ar dargedau gwenwyneg eraill (e.e. yr ensymau p450 sytocrom).

Grŵp y prosiect



Cwmnïau cysylltiedig:

1. Liquids Research Ltd, Bangor, Gogledd Cymru
2. SOM Biotech, Barcelona, Sbaen