

---

# 人工智能技术有望提升药物研发效率

作者：张家伟 来源：新华社

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/1238.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

英国研究人员18日说，他们开发出一种由人工智能驱动的机器人系统，能高效发现新的化学反应和分子。这项技术未来有望用于药物研发，从而达到缩短研发流程、降低成本的目的。

格拉斯哥大学研究人员在新一期英国《自然》杂志上报告说，他们选取了18种不同化学物质组合出的大约1000种化学反应，验证采用深度学习算法的新型机器人系统的能力。

结果显示，该系统仅分析了其中约100种化学反应后，就能预测出哪些化学物质的组合能够形成新的化学反应和分子，其准确率超过80%。

研究人员说，他们通过这种自动化方法发现了一系列此前从未发现过的新分子和化学反应。

论文通讯作者、格拉斯哥大学的勒罗伊·克罗宁教授在一份声明中说：这一方法是实现化学工业数字化的关键一步，有助实现对化学空间的实时搜索，从而发现新药物与有实用价值的分子，降低成本和耗时。(来源：新华社 张家伟)

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发