
AI探路，新药研发迈向“奇点突破”

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/27950.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！

AI探路，新药研发迈向“奇点突破”

。AI（人工智能）制药企业英矽智能前不久官宣了一个好消息：公司自主研发的首款AI候选药物——小分子抑制剂INS018_055完成了中国IIa期临床试验全部患者入组。

这或许只是INS018_055在治疗特发性肺纤维化上迈出的一小步，但对于担任公司联合首席执行官的任峰来说意味良多：“整个行业都需要一个真正在临床上能够完成概念性验证的项目，让AI制药踏上新的台阶。”眼下，英矽智能正抓紧推进多个自研管线的临床进度，努力完成端到端全流程验证，以期最终实现AI药物获批上市。其中，INS018_055正是距离那条终点线最近的一个。



英矽智能联合首席执行官兼首席科学官任峰。（采访对象供图）

打破瓶颈

加入英矽智能之前，任峰在传统小分子创新药的研发上已深耕了14年。药物研发领域一直流传着“双十定律”，即从新药研发开始到最终获批上市需要平均耗时10年，投入成本约10亿美元。

实际上，生物医药的研发投入远不止于“双十”。“平均每款药物上市需要10至15年的研发周期，投入20亿美元以上的研发资金，投资回报率非常低。”任峰当时就在思考：能否通过颠覆性技术打破瓶颈呢？

2020年一次偶然的的机会，英矽智能创始人兼首席执行官亚历克斯·扎沃洛科夫邀请任峰成为公司顾问，这段经历让他看到了解开问题的可能性，“AI算法可以高效而系统性地帮助研发人员，找到创新靶点和创新的小分子药物。相比传统药物研发，AI制药具有降本增效的作用。”很快，任峰决定加入英矽智能，牵头组建了一支由AI和药物研发跨界人才组成的资深科学家队伍，共同投入到这一前沿领域的创新探索中。

围绕传统药物研发领域的瓶颈，英矽智能搭建了AI药物研发平台Pharma.AI，覆盖生物学、化学和临床医学3个板块，通过赋能高效识别靶点，生成具有特定属性分子结构的候选化合物，提高研发效率。

提升效率

英矽智能在2021年提名了全球首款由生成式AI完成新颖靶点发现和分子设计的候选药物——INS018_055，用于治疗特发性肺纤维化。

在这一项目中，任峰带领团队利用AI靶点发现平台首先找到了20多个与纤维化相关的潜在靶点，随后逐步将范围缩小到专门针对特发性肺纤维化的1个全新靶点——TNIK。“针对TNIK靶点，全球只有英矽智能在临床上开发化合物。”任峰告诉记者，研发团队又利用Pharma.AI中的生成化学平台Chemistry42，针对TNIK的蛋白质结构生成设计了分子。再经过几轮的生成、合成、测试、反馈的循环，最终找到了潜在抗纤维化全球首创候选药物。

“INS018_055也是中国首个进入临床阶段的AI药物。”任峰向记者列出了一连串的具体数据：从早期的靶点发现，到临床前候选化合物的确定，只用了18个月，研发投入260万美元。

今年3月，英矽智能在《自然·生物技术》杂志上发表了一项研究，详细介绍INS018_055这一候选药物从人工智能算法开发到II期临床试验的研发流程，还首次披露原始实验数据，以及临床前和部分临床试验评估结果。

目前，INS018_055已经在中国和美国同步开展I期临床试验，而中国IIa期临床试验6月完成了全部患者入组，计划在今年第四季度披露部分试验结果和数据，“这不仅是英矽智能自有管线的全新里程碑，也标志着AI驱动的药物研发验证又向前迈进了一步。”任峰说。

自我造血

2021年以来，英矽智能在研药物中有18个项目提名临床前候选化合物，覆盖癌症、纤维化、自身免疫和抗衰老等领域，包括多个潜在全球首创和同类最佳候选药物，其中7个AI辅助开发和设计的候选药物获得临床试验批件，研发管线数量及进度都跻身全球第一梯队。

“尽管全球AI赋能在研药物已超100款，但总体来说，目前AI制药还处在相对早期发展阶段，大多集中在临床I期阶段，进展最快的也处在临床II期。以此推断，AI制药要得到概念性的验证至少还需要3年的时间。”身处一线，任峰对于行业未来的判断格外冷静：AI制药需开发适合自身的商业模式，实现自我造血，这是整个行业面临的共同挑战。

2023年，英矽智能先后与纳斯达克上市公司Exelixis和意大利药企美纳里尼达成管线对外授权，前一项合作英矽智能获得8000万美元首付款，后一项合作涉及总金额超过5亿美元。而前不久，英矽智能又宣布，与复星医药合作开发的抗肿瘤药物ISM8207完成了首批患者给药。

任峰直言，未来AI制药的热度不会消退，但随着行业的发展，一定会经历大浪淘沙的过程，“技术实力更强的AI制药公司才能得到市场的持续关注。”

人物小传

任峰，2007年毕业于美国哈佛大学化学系，至今已发表国际学术论文30余篇、获得国际专利20余项，拥有超过15年药物研发行业经验。曾任葛兰素史克小分子创新药物研发负责人，成功研发治疗帕金森病、多发性硬化症、疼痛以及银屑病等多个临床候选药物和临床药物。2021年加入英矽智能科技（上海）有限公司，全面负责研发工作和基础搭建，2022年6月起担任联合首席执行官。获评2023上海城市数字化转型“领军先锋”。

来源：文汇报

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