
“万里挑一”的制药过程AI能做什么？只是一种手段

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/29579.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！

“万里挑一”的制药过程AI能做什么？只是一种手段

。“这几年，我们看到各种各样的新技术出现，临床试验的注册数量线性上升，但是每年临床试验的成功率还是保持在一定水平。这给我们的启示是，做药要回归药的本质：安全，有效。技术只是一种手段。”

人工智能（Artificial Intelligence，AI）在药物发现中能够起到什么作用？

华东师范大学药学院院长、人工智能新药创智中心主任李洪林说：AI可以在三个阶段参与药物研发：把数据变成知识，把知识变成技术，把技术应用在产品里。

2024年9月27日，在由中共上海市委统战部、中共上海市科学技术工作委员会指导，民革科技支部主办的第二十三届浦江学科交叉论坛学术分论坛上，李洪林提出上述观点。

他还提到，人工智能出现以来，人们对它充满遐想，以为只要人工智能这一套“组合拳”打出来，药就做出来的了。AI也确实已经参与到药物研发的各个环节中。自2018年AlphaFold出现以来，不管是在MNC（跨国药企）还是在biotech（小型生物技术公司），人工智能已经同步发展。它真正解决的问题其实只有两个，一个是筛选时间，一个是临床成功率。后者可能更加重要。到2020年底，已经有很多药物在研发过程中运用了AI。

“当药物研发中遇到人力难以解决的科学问题或者技术难题，AI就可以参与进来。”李洪林介绍，以药物的发现为例，过去筛选药物，研究者更加关注候选药物的效果，比如在细胞里、在动物体内有没有效果，并不太关注它的靶点或者机制。AI出现以后，可以从靶点出发去筛选药物。

“新靶点是药物研发的源泉。一个新的靶点出现，往往会带来一系列重磅炸弹式的药物。”李洪林说。目前，全世界的新药研发面临的共同难题是靶标枯竭。“靶点到底有多少？我们估算，人不到3万条的基因里只有3%可以作为靶点，还有35%的基因仍为‘黑暗基因’。相应地，现有的（小分子）药物还不到2000种，其中仅涵盖667个已知是人体的靶点。”

如何获得关于新靶点的数据？李洪林说，可以从现有的研究文献和专利里挖掘。“这个过程就是把数据变成知识，也叫知识图谱。”李洪林的团队花了四年半的时间，从所有能获得的280多万篇医药文献里，构建了三个类型的药物靶点和疾病关系的图谱，总共有3亿条，这是目前最大的

生物医药知识图谱。它可以解决两件事：为临床做决策，为新药立项提供依据。

“对于新技术，大家其实不需要太多地批判，更多要去拥抱，把目光放在是否能够利用这些新技术上。”李洪林说。

“一个药物从发现到上市是万里挑一的过程。这句话在制药行业被反复叙述，但只有等到真正做药的时候，才知道它为什么是一个系统工程，每一步都接近‘死亡之城’。这几年，我们看到各种各样的新技术出现，临床试验的注册数量线性上升，但是每年临床试验的成功率还是保持在一定水平。这给我们的启示是，做药要回归药的本质：安全，有效。技术只是一种手段。”李洪林说。

作者：曹年润 来源：澎湃新闻

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