
AI模型精准识别基因与药物靶点

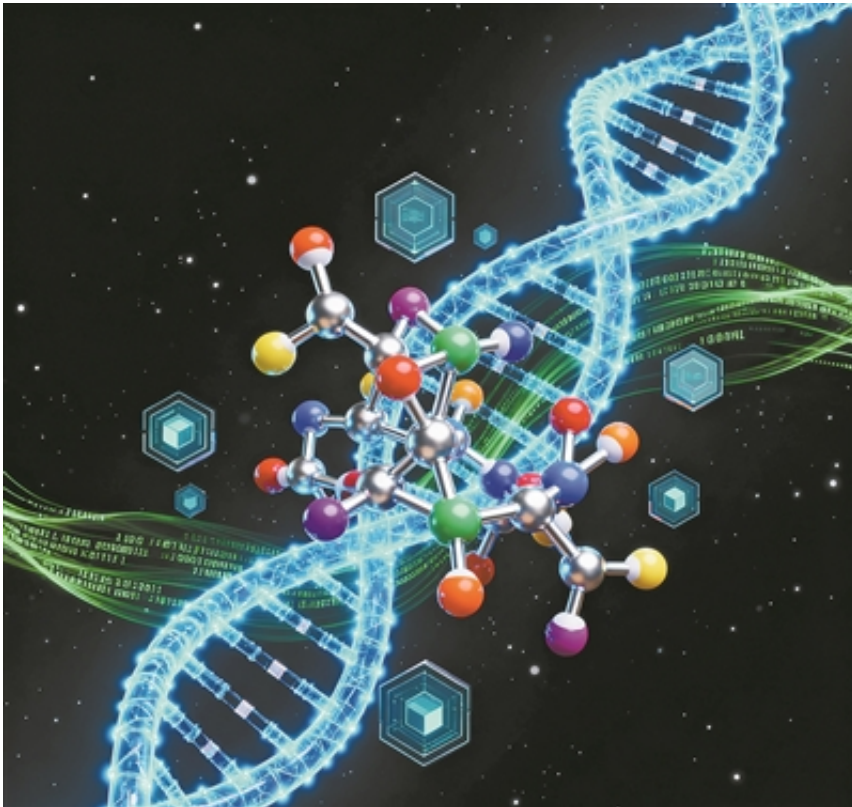
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/35683.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模型精准识别基因与药物靶点

。美国哈佛医学院团队开发出一种名为PDGrapher的人工智能（AI）模型，能够精准识别可逆转细胞疾病状态的基因与药物靶点，有望彻底改变药物发现的路径。该成果发表在新一期《自然·生物医学工程》杂志上。



图片来源：AI生成

?

与传统药物研发聚焦单一蛋白质靶点不同，PDGrapher通过分析疾病的多重驱动因素，系统性地预测最有可能将患病细胞恢复至健康状态的治疗策略，并推荐最佳的单一或联合靶点。该工具现已免费向科学界开放。

研究团队表示，传统的药物发现过程就像品尝数百道菜肴，只为找到一道味道最完美的。而PDG

rapher更像一位精通烹饪的大厨，很清楚最终想要的风味，并知道如何搭配食材来实现它。

PDGrapher是一种图神经网络，属于AI的一种。它不仅分析单个基因或蛋白质的数据，更关注它们之间的复杂联系与相互影响。该模型构建细胞内基因、蛋白质和信号通路的动态网络，模拟干预特定靶点后对细胞整体功能的影响，从而预测哪些组合能有效纠正功能障碍，恢复健康的细胞行为。

团队使用治疗前后患病细胞的大量数据训练PDGrapher，使其学习如何将细胞从疾病状态逆转为健康状态。随后，他们在涵盖11种癌症的19个独立数据集上进行测试，要求模型预测其从未接触过的细胞样本和癌症类型的治疗方案。结果表明，PDGrapher不仅能准确识别已知有效的药物靶点（这些靶点在训练中被刻意排除，以防止模型简单记忆），还预测了多个有新证据支持的候选靶点。例如，模型将KDR（VEGFR2）列为非小细胞肺癌的潜在靶点，与现有临床证据一致；同时识别出TOP2A（一种已被现有化疗药物靶向的酶）作为遏制非小细胞肺癌转移的靶点，这与近期临床前研究的发现相符。

与其他同类AI工具相比，PDGrapher在准确性和效率上均表现卓越。在未见过的数据集中，其对正确治疗靶点的预测排名高出其他模型35%，且运算速度比现有方法快25倍。

作者：张梦然 来源：科技日报

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