

浦江创新观察

2024-24

(总第 24 期)

上海浦江创新论坛中心

2024 年 9 月 11 日

编者按：2024浦江创新论坛——上海国际计算生物学创新论坛以“计算生物学赋能生物医药创新”为主题，与会嘉宾围绕计算生物学及其在生物医药研发中的应用展开深入研讨。本期专报对上海国际计算生物学创新论坛嘉宾观点进行梳理，供参考。

2024 浦江创新论坛专报之十七

“赛”出新质生产力 激发生物医药科技创新潜力

计算生物学是一门利用计算机技术研究生物学的交叉学科，随着人工智能技术的兴起，学科实现了跨越式发展，正在重新定义生物医药研发的底层逻辑。与会嘉宾一致认为，计算生物学正推动生命科学研究从依赖实验的“经验驱动”向“数据驱动”的新范式转变，通过配置核心要素资源、吸引全球人才、抢占创新制高点，推进计算生物学高质量发展，赋能生物医药科技创新和产业升级。

一、计算生物学深度赋能生命科学和生物医药发展

1. 破解生命密码，揭示复杂生命调控网络。塞梅维什大学副校长彼得·费迪南迪指出，多组学分析能够帮助鉴定分子网络中的关键调控因子，目前已发现影响心肌梗死发生发展的 microRNA。华为云医疗首席科学家乔楠指出，开发多组学数据分析工具，并将其应用于潜在病原发现，对于传染性疾病的识别和防治具有重要价值。复旦大学类脑智能科学与技术研究院副院长赵兴明提出，开展基因组、转录组、代谢组、微生物组、影像组综合分析，对于脑疾病机制系统研究至关重要。

2. 推动生物医药研发范式变革，赋能新药发现。计算生物学可以通过计算机进行初步筛选，剔除无意义样本，再用生物手段进行验证，可以显著缩短药物研发时间、降低成本。上海科技大学获奖团队代表王世航指出，利用其开发的 Geminimol 模型，能够快速对原始数据库中的 1800 万个化合物分子进行筛选，显著加速新活性化合物发现。乔楠提出，人工智能技术的应用可节省 70% 药物设计时间，并将成功率提升 10 倍。

3. AI+医疗提升全周期健康管理与服务能力。乔楠提出，随着大模型的迅速发展，目前已可以考虑构建集临床法规、临床知识图谱、差异诊疗习惯为一体的临床服务大模型。复旦大学附属华山医院神经内科主任王坚提出，AI 赋能帕金森病临床诊疗，将 AI 与分子影像学、基于计算机视觉的行为分析相结合，有助于实现帕金森病的早诊早治。

二、提升算法迭代速度、药物研发的全周期嵌入是计算生物学未来应聚焦的重点方向

在技术端，通过湿实验数据的反馈，实际验证算法并推动其迭代优化。此次上海国际计算生物学创新大赛聚焦人工智能在离子通道药物开发中的应用，采用干湿实验相结合的创新赛制，旨在实际验证算法并推动其迭代优化。中国科学院上海药物研究所研究员高召兵指出，通过算法更迭，持续提升分子的活性，有助于真正解析 NMDA 通道家族中尚未被充分研究的 GluN1/GluN3A 亚型功能，加速候选药物研发。

在应用端，将计算生物学精准嵌入药物研发的全周期全流程。

(1) 原创靶点发现方面，计算生物学极大地推进了对疾病病理机制的深入理解，为新靶点的识别和生物标志物的筛选提供了新视角。高召兵指出，缺少原创药物靶标是我国原创药物研发领域面临的突出问题，药物所研究团队非常重视计算生物学和人工智能在推动原创药物研发中的关键作用，利用相关技术平台已发现了 4 个新型离子通道。乔楠提出，结合 AI 技术和分子动力学模拟，我们可以更加精准地计算靶点的结构或者靶点跟配体结合的情况，提高靶点发现效率。(2) 新分子实体发现和设计方面，乔楠表示，人工智能技术的应用，降低药物设计的门槛，研究者能方便利用新的工具和方法开展药物设计。

三、推进计算生物学创新发展相关建议

一是配置核心要素资源，搭建多模态数据库和人工智能驱动

的药物开发平台。赵兴明提出，要打造一个多病种、跨维度的中国人群多模态脑科学数据平台，系统收集覆盖全生命周期人群的基因、影像、行为和认知情况数据，用来深度解析脑疾病机制。**高召兵**报告了结合计算生物学和 AI 开发的离子通道药物研发平台，展示了其在新型离子通道发现中的应用。**彼得·费迪南迪**报告了专有的 AI 驱动的药物开发平台，可用于心血管疾病、癌症等多种疾病的药物发现。

二是办好计算生物学创新大赛，吸引更多人工智能行业人才到生物医药赛道。上海国际计算生物学创新大赛的举办旨在遴选吸引一批优秀人才、机构落地上海，达到以赛选项、以赛选人的目的，赋能生物医药科技创新和产业发展。**高召兵**指出，此次大赛涌现出一大批有创新思想、颠覆性思维的团队，提出了一系列具有创造性的技术路线，能够将 AI 很好地融入到药物发现中，期待仅是一个起点，未来通过进一步技术迭代，推动候选药物的研发创新。

整 理：任永飞、施慧琳

编辑：殷梦宇

责任编辑：王 冰

电话：021-53300806

传真：021-64381056

E-mail: wangbing@siss.sh.cn

地址：上海市淮海中路 1634 号 3 号楼 102 室

邮编：200031

