

人工智能与天然药物 动态监测快报

总第 006 期 2024-05-25



中国科学院昆明植物研究所
云南省植物学会
中国科学院成都文献情报中心

目 录

政策法规	2
美众议院听证会通过《生物安全法》	2
北京市医疗保障局发布《北京市支持创新医药高质量发展若干措施（2024年）》	3
研究前沿	4
化学结构多样的大环低聚酰胺的广泛发现.....	4
《自然》：AlphaFold 3 准确预测生物分子间作用	5
JCIM: VenomPred2.0: 基于 AI 的药物分子毒性预测工具	6
Nature 子刊 生成式 AI 设计出对抗超级细菌的全新抗生素.....	7
Chem Sci 机器学习+组合化学显著加速抗菌化合物高效筛选.....	8
AI 成功改写人类 DNA，近 5 倍蛋白质宇宙 LLM 全生成.....	9
分子指纹在探索天然产物化学空间中的有效性	10
Tapcin，一种体内活性双拓扑异构酶 I/II 抑制剂，由合成生物信息学天然产物（Syn-BNP）偶联的宏基因组学发现.....	11
推进天然产物发现：一个面向结构的化合物注释和分离馏分筛选平台	12
建立酵母天然产物可持续生产综合平台的路线图.....	13
LUMIOS – 在有机样品中利用机器标签-一种用于去复制、分子对接以及机器和深度学习相结合的软件	14
三种不同金属酶合成具有 C-末端 β -氨基- α -酮酸基团的大环肽.....	15
真菌细胞色素 P450 区域和立体选择性催化二酮哌嗪多样化二聚的全面探索研究.....	16
近期会议与活动	18

政策法规

美众议院听证会通过《生物安全法》

2024-05-16

5月15日，美国众议院监督与问责委员会针对最新修订的《生物安全法》草案（编号：H.R.8333）召开了听证会，以决定是否将该法案推进到下一个议程。在听证会上，众议院监督和问责委员会现场以“40:1”投票批准通过了《生物安全法案》修订版。

此次众议院听证会通过的新版《生物安全法案》由美国共和党众议院议员 **Brad R. Wenstrup** 发起，为此前1月由共和党众议院议员 **Mike Gallagher** 发起的旧版《生物安全法案》的修订版本。两版法案相比，所涉企业在药明康德、华大基因、华大智造及其子公司 **Complete Genomics** 的基础上，明确新增药明生物；新版法案在现有合同/产品的豁免期方面做出了一些调整，将美国生物医药行业与法案中被点名的中国生物技术公司的合作期限明确设定在2032年1月1日。这意味着，双方都有一段缓冲期应对变化。

信息来源：<https://news.yaozh.com/archive/42148.html>

北京市医疗保障局发布《北京市支持创新医药高质量发展若干措施（2024年）》

2024-04-17

4月17日，北京市医疗保障局发布关于印发《北京市支持创新医药高质量发展若干措施（2024年）》的通知，从提升创新医药临床研究质效、加速创新药械审评审批、促进医药贸易便利化、促进创新医药临床应用、拓展创新医药支付渠道、鼓励医疗健康数据赋能创新、强化创新医药企业投融资支持、及充分保障等八个方面提出32条举措，意在推进创新链、产业链和政策链深度融合，加强创新药械研、产、审、用全链条政策支持，优化要素资源配置，培育优质创新生态，加速医药健康产业创新，助力发展新质生产力。

其中强化创新医药企业投融资支持方面，提出推动一批具有战略性、前沿性的全球原创技术和品种在京转化，支持一批有重大潜在产值贡献的创新药械、细胞与基因治疗、数字医疗等领域产业项目落地并实现产品快速上市。

信息来源：<https://zhuanlan.zhihu.com/p/694317280>

研究前沿

化学结构多样的大环低聚酰胺的广泛发现

2024-04-28

美国华盛顿大学 David Baker 团队于 4 月 25 日在《科学》上发表一项研究，报道了化学结构多样的大环低聚酰胺的广泛发现。

具有四个或更少氨基酸的大环是已知的最有效的天然产物之一，但目前还没有办法系统地制备这种化合物。

研究人员基于大约 130 种单体骨架分子，利用人工智能平台，系统性地设计出 1490 万个大自然中从未发现的全新大环分子。其中大约一半能够穿越细胞膜，并且在血液中保持稳定。为了验证这一设计策略的可靠性，研究团队化学合成了其中 18 种大环分子并通过 X 光晶体学和核磁共振解析了它们的分子结构。研究发现其中 15 个分子的结构与 AI 设计的结构非常相像。

研究人员通过开发目前感兴趣的三种蛋白质靶标的选择性抑制剂，来说明这些大环设计的治疗潜力。Baker 教授指出，这项研究揭示了发现具有更强疗效和选择性的大环分子药物的新方向。

信息来源: Salveson et al., Expansive discovery of chemically diverse structured macrocyclic oligoamides. *Science*, 2024. DOI: 10.1126/science.adk1687;
https://www.sohu.com/a/776691760_121948410

《自然》：AlphaFold 3 准确预测生物分子间作用

2024-05-09

《Nature》杂志日前发表了谷歌 DeepMind 团队和 AI 药物研发团队 Isomorphic Labs 的合作研究，展示了全新的蛋白质预测模型 AlphaFold 3。新模型不再局限于预测蛋白质或蛋白质-蛋白质复合物的结构，而是能够破解蛋白质与各种生物分子所形成的复合体结构及其相互作用。

AlphaFold 3 能够针对多种蛋白质、DNA、RNA 和小分子配体和离子之间的交互作用进行复合物结构预测，并可预测翻译后修饰（PTM）和离子对这些分子系统结构的影响。AlphaFold 3 具有原子级结构的精准度，能够加强针对难以靶向靶点的药理性设计，有望为未来药物发现带来崭新的一页。

AlphaFold 3 是一种采用神经网络架构的生成式 AI 模型，该神经网络架构建立在定制化 Transformer 架构之上，并使用扩散模型以生成输入系统中每个原子的位置。该模型以蛋白质数据库（PDB）中的全球分子结构数据为基础，对其中 99% 以上已知的生物分子复合体进行分析。

Isomorphic Labs 的药物发现团队已经使用 AlphaFold 3 进行基于结构的药理性设计。此外，Isomorphic Labs 已经与礼来（Eli Lilly and Company）和诺华（Novartis）开展药物研发合作。学术机构的科学家也可以通过 AlphaFold Server 这一由 DeepMind 开发的免费研究工具使用 AlphaFold 3 模型，以对他们想要研究的分子序列进行结构预测。

信息来源：https://www.163.com/dy/article/J1NTNDJB05349C3E.html?spss=dy_author ;

Abramson, J., Adler, J., Dunger, J. et al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. Nature (2024). <https://doi.org/10.1038/s41586-024-07487-w>

JCIM: VenomPred2.0: 基于 AI 的药物分子毒性预测工具

2024-05-03

2024 年 4 月 8 日,来自比萨大学的研究人员在 *Journal of Chemical Information and Modeling* 上发表研究: *VenomPred 2.0: A Novel In Silico Platform for an Extended and Human Interpretable Toxicological Profiling of Small Molecules*。

VenomPred 2.0 是训练数据来源于 ToxCast/Tox21 和 ChEMBL 等多种数据库,对于每个预测项目,首先处理初始数据集以删除不一致和重复的实例;然后,用标准化的 SMILES 表示化合物的结构。最后,为每个终点获得的精炼数据集被划分为训练集和测试集,分别包含原始数据集的 80%和 20%,使用的是随机划分策略。所有开发的机器学习模型用于生成和评估四个新终点获得的训练集和测试集都进行了使用 t-分布随机邻域嵌入(t-SNE)算法的维度降低处理,该算法应用于编码为 PubChem FPs 的化合物。分析表明,每个终点的训练集和测试集化合物正确地叠加并覆盖了可比较的化学空间,从而确认每个测试集正确代表了用于模型开发的相应训练集。对于每个数据集,都计算了化合物的分子表示。

VenomPred 2.0 提供了多种毒性预测,包括致癌性、致突变性、肝毒性、极性口服毒性、皮肤刺激和眼部刺激等。该方法经过 MCC 等标准验证可靠性较高,而且该工具还提供了一个基于 Shapley AdditiveexPlanations (SHAP) 方法的用于解释毒性来源基团的展示功能。

信息来源: Dr. TT. 智药邦. JCIM | VenomPred2.0: 基于 AI 的药物分子毒性预测工具
https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzU2NTA1MzYyOA==&mid=2247559290&idx=1&sn=9b8c559a3a6311c042684deac2618460&chksm=fd16441e0da4f8b21cc3f2b2323d1c1bb5b49e1560cb035459422353f4da2f812804b75d7b05&scene=0&xtrack=1

Nature 子刊 | 生成式 AI 设计出对抗超级细菌的全新抗生素

2024-03-22

2024 年 3 月 22 日，麦克马斯特大学和斯坦福大学的研究人员在 Nature 子刊 Nature Machine Intelligence 上发表了题为：Generative AI for designing and validating easily synthesizable and structurally novel antibiotics 的研究论文。

该研究开发了一种新的生成式人工智能 (Generative AI) 模型——SyntheMol，可以从近 300 亿个分子的化学空间中设计易于合成的新型化合物。研究团队应用 SyntheMol 设计能够抑制超级细菌鲍曼不动杆菌的分子，从中合成了 58 个生成的分子并验证了其中 6 个结构新颖的分子对鲍曼不动杆菌和其他几种系统发育不同的细菌病原体表现出抗菌活性。

该研究表明了生成式人工智能从巨大的化学空间中设计结构新颖、易于合成和有效的小分子抗生素候选物的潜力，代表了将生成式人工智能用于抗生素发现和药物发现的实际应用迈出的重要一步。

信息来源：

https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzU2NTA1MzYyOA==&mid=2247558560&idx=1&sn=51018c97d786a396dbd788a00730f4ec&chksm=fda144a3d65ebcb769bba41158f4a94b1f0bf29e39c6923f577676be31d6467be795634ce8&scene=0&xtrack=1;
<https://www.nature.com/articles/s42256-024-00809-7>

Chem Sci | 机器学习+组合化学显著加速抗菌化合物高效筛选

2024-05-10

浙江大学计剑教授和张鹏研究员团队设计了一套基于组合化学和机器学习的高通量方法，并应用于抗菌化合物的高效筛选，成功得到 3 种对 MRSA（耐甲氧西林葡萄球菌）具有强力抗菌效果的小分子产物。相关成果“Combinatorial discovery of antibacterials via a feature-fusion based machine learning workflow”(《基于特征融合的机器学习加速组合化学文库抗菌筛选》)发表于 2024 年 3 月 26 日在英国皇家化学会期刊 *Chemical Science* 上。

该研究采用 Ugi 四组分组合化学反应，选取 38 种酸、20 种醛、21 种胺和 7 种不同的异腈，构建了具有 111,720 种 Ugi 产物的多样化文库。为获得初筛数据，采用一致流形近似与投影技术将文库的高维信息降为二维分布图，从中尽可能均匀地选取了 360 个具有代表性的组合。随后合成了所有 360 个组合，并通过高通量实验对其抗菌性能进行了表征，以 OD 吸光度作为抗菌性能标签，具有良好抗菌性能的组合占比极少，若以 OD 值低于 0.1 为界划分，则筛选命中率仅为 5.3%

采用基于特征融合的机器学习模型来辅助文库筛选，对整体文库中 11 万种产物的抗菌性能做出预测并排序，通过湿实验合成了模型预测的最优抗菌性能组合，最终研究团队筛选得到了三种具有优异抗 MRSA 性能的 Ugi 产物结构，筛选成功率大幅提升（60%），且这三种抗菌分子表现出了极低的诱导细菌耐药性产生能力。

信息来源：Cong Wang, et al. Combinatorial discovery of antibacterials via a feature-fusion based machine learning workflow. *Chemical Science*, 2024, 15, 6044-6052;
https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzU2NTA1MzYyOA==&mid=2247559851&idx=2&sn=2b36e62cb1eb0a22095ee723f517d1f1&chksm=fd06d701843c95a7ed62bc4e3ea15dddf489478f8c75e938f16f8be9b9838537a4f2d6b3bf0&scene=0&xtrack=1

AI 成功改写人类 DNA，近 5 倍蛋白质宇宙 LLM 全生成

2024-05-09

初创公司 Profluent Bio 近期宣布，完全由 AI 设计的基因编辑器，已经成功编辑了人类细胞中的 DNA。

在迄今最广泛的基于 CRISPR 的基因编辑系统数据集上，研究者训练了 LLM。这些 LLM 产生的蛋白质，将几乎所有天然存在的 CRISPR-Cas 家族的多样性，扩大了 4.8 倍，并且，基因编辑器在人类细胞中显示出了与 SpCas9（一个示例基因编辑器）相当或更好的活性和特异性，同时距离超过 400 个突变。

研究者演示了 AI 生成的基因编辑器，称为 OpenCRISPR-1，显示出与碱基编辑的兼容性，并公开发布 OpenCRISPR-1，以促进研究和商业应用程序的广泛、合乎道德的使用。

信息来源：Jeffrey A. Ruffolo¹, et al. Design of highly functional genome editors by modeling the universe of CRISPR-Cas sequences. bioRxiv preprint, 2024-4-22. Doi: <https://doi.org/10.1101/2024.04.22.590591>

分子指纹在探索天然产物化学空间中的有效性

2024-04-02

Boldini, D 等系统地评估哪种分子指纹在天然产物化学空间中提供最佳性能。研究者考虑了来自四个不同来源的 20 个分子指纹，然后在来自 COCONUT (COLlection of Open Natural prodUcTs)和 CMNPD (Comprehensive Marine Natural Products Database) 数据库的 100000 多种独特天然产品上进行了基准测试。研究者的分析集中在 12 个生物活性预测数据集上的不同指纹及其分类性能之间的相关性。结果表明，不同的编码可以提供对天然产物化学空间的完全不同的看法，导致成对相似性和性能的显著差异。虽然扩展连接性指纹是编码类药物化合物的事实选择，但在天然产物的生物活性预测中，其他指纹与它们匹配或优于它们。这些结果强调了评估多种指纹算法以获得最佳性能的必要性，并提出了新的研究领域。最后，研究者提供了一个开源 Python 包，用于计算研究中考虑的所有分子指纹，以及复制结果所需的数据和脚本，网址是：
https://github.com/dahvida/NP_Fingerprints.

信息来源: Boldini, D, et al. Effectiveness of molecular fingerprints for exploring the chemical space of natural products.
JOURNAL OF CHEMINFORMATICS, 2024, 16(1)
DOI 10.1186/s13321-024-00830-3

Tapcin, 一种体内活性双拓扑异构酶 I/II 抑制剂, 由合成生物信息学天然产物 (Syn-BNP) 偶联的宏基因组学发现

2024-04-01

Wang, ZQ 等结合宏基因组挖掘、生物信息学结构预测算法和化学合成制备了双拓扑异构酶抑制剂 tapcin。

Tapcin 是一种混合对氨基苯甲酸 (PABA)-噻唑, 具有罕见的三噻唑亚结构和皮摩尔抗增殖活性。在鼠中空纤维和异种移植物模型中, Tapcin 分别降低了结肠癌 HT-29 细胞的增殖和肿瘤体积。在这两项研究中, 它显示出与临床使用的拓扑异构酶 I 抑制剂 irinotecan 相似的活性。这项研究表明, 使用合成生物信息学天然产物方法询问土壤微生物组, 有可能成为一种有价值的策略, 用于识别强效、生物学相关的抗增殖剂。

信息来源: Wang, ZQ, et al. Tapcin, an In Vivo Active Dual Topoisomerase I/II Inhibitor Discovered by Synthetic Bioinformatic Natural Product (Syn-BNP)-Coupled Metagenomics, *ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION* 63(17), DOI10.1002/anie.202317187

推进天然产物发现：一个面向结构的化合物注释和分离馏分筛选平台

2024-03-29

Ge, YC 等研究了基于核磁共振/质谱的机器学习工具“面向结构的馏分筛选平台 (SFSP)”的首次应用，实现了官能团引导的分馏，并加速了未描述的天然产物的发现和表征。这一概念被应用于一种海洋真菌的提取物，这种真菌是多种天然产品的生产者。在 SFSP 的协助下，从曲霉菌 GE2-6 中分离出 24 种黄脂蛋白衍生物和 5 种萘醌类似物，揭示了 27 种未描述的化合物。化合物 7-22 被认为是具有 5/6 环融合的异构衍生物，通过黄脂蛋白 E (5) 的二聚形成。化合物 23 和 24 被设想为具有 6/5/6 环融合的异构衍生物，通过降解两个黄脂蛋白 E 分子产生。此外，黄脂蛋白 A (1) 和 asperphenalenone E (28) 表现出强大的抗流感 (PR8) 活性，IC₅₀ 值分别为 21.9 +/- 0.2 and 12.9 +/- 0.1 μ M。

信息来源: Ge, YC, et al. Advancing Natural Product Discovery: A Structure-Oriented Fractions Screening Platform for Compound Annotation and Isolation, ANALYTICAL CHEMISTRY, 2024, 96(14): 5399-5406

建立酵母天然产物可持续生产综合平台的路线图

2024-04-06

天然产物 (NPs) 是药物发现的丰富来源。然而, NPs 的低丰度使得它们从自然界中的提取效率低下, 而化学合成则具有挑战性且不可持续。酿酒酵母和毕赤酵母是生产 NPs 的优秀制造系统。Naseri, G 讨论了通过四个层面的系统相关优化在两种酵母中可持续生产 NPs 的综合平台: 遗传学、时间控制器、生产力筛选和可扩展性。此外, 指出 NPs 生物工程中的关键代谢构建要素可以通过使用深度学习连接优化系统的多级数据来识别。

信息来源: Naseri, G. A roadmap to establish a comprehensive platform for sustainable manufacturing of natural products in yeast. *NATURE COMMUNICATIONS*, 2024, 14(1)
DOI: 10.1038/s41467-023-37627-1

LUMIOS – 在有机样品中利用机器标签-一种用于去复制、分子对接以及机器和深度学习相结合的软件

2024-02-13

LUMIOS (Label Using Machine In Organic Samples) 是一个多功能的基于 Python 的软件，旨在帮助有机化学专业人员和学生对天然产物 (NPs) 进行计算探索。LUMIOS 采用儿茶素，可可碱，和咖啡因三个质谱类别，提供用户友好和无代码应用程序。值得注意的是，其机器和深度学习模型的准确率超过 90%，特别调节呼吸疾病，尤其是通过儿茶素和可可碱来调节。

LUMIOS 的功能是预处理来自质谱的分子信息，通过与化学数据库的集合进行比较来进行分子去重复。该软件确保与 NP 类保持一致，确保去重复过程。然后在 ML 和 DL 模型中测试注释结构，引导用户快速找到与哮喘和 SARS-CoV-2 等呼吸系统疾病相关的生物大分子靶点。这样就能够对输入数据进行简化的计算筛选。

信息来源: Vieira, R, et al. LUMIOS - Label using machine in organic samples - A software for dereplication, molecular docking, and combined machine and deep learning. EXPERT SYSTEMS WITH APPLICATIONS, 2024, 248:
DOI: 10.1016/j.eswa.2024.123447

三种不同金属酶合成具有 C-末端 β -氨基- α -酮酸基团的大环肽

2024-04-17

Nguyen, DT 等通过挖掘含有用于核糖体合成和翻译后修饰肽 (RiPP) 生物合成的普遍肽结合结构域的 BGC 的基因组, 发现了一种新的化合物类别, 涉及由细胞色素 P450 (细胞色素 P450 是一种多核铁依赖性非血红素氧化酶 (MNIO, 以前称为 DUF692))、钴胺素和自由基 S-腺苷-L-甲硫氨酸依赖性酶 (B12-rSAM) 和甲基转移酶的修饰安装。所有酶均在伯克霍尔德杆菌 FERM BP-3421 中功能表达。结构表征表明, P450 酶催化两个 Tyr 残基之间形成联芳基 C-C 交联, B12-rSAM 生成 β -甲基酪氨酸。MNIO 将 C 端天冬氨酸残基转化为氨基丙酮酸, 而甲基转移酶则作用于该 α -酮酸的 β -碳。使用激子耦合圆二色光谱和微晶电子衍射 (MicroED) 来阐明联芳基交联时形成的阻转异构体的立体化学构型。研究显示, 该途径中的 MNIO 是第一个修饰除 Cys 以外的残基的。这项研究强调了基因组挖掘在分离通过以前未发现的酶化学生物合成的新大环 RiPP 方面的效用。

信息来源: Nguyen, DT, et al. Biosynthesis of Macrocyclic Peptides with C-Terminal β -Amino- α -keto Acid Groups by Three Different Metalloenzymes. ACS CENTRAL SCIENCE, 2024, DOI: 10.1021/acscentsci.4c00088

真菌细胞色素 P450 区域和立体选择性催化二酮哌嗪多样化二聚的全面探索研究

2024-05-03

近日，中国海洋大学医药学院、海洋药物教育部重点实验室李德海教授团队在 *Advanced Science* 发表论文，报道了真菌细胞色素 P450 区域和立体选择性催化二酮哌嗪多样化二聚的全面探索研究。

二聚吲哚二酮哌嗪 (dimeric indole-containing diketopiperazine, di-DKP) 由两分子二酮哌嗪 (diketopiperazine, DKP) 单体通过 C-C 或者 C-N 键偶联形成，是广泛存在于细菌和真菌中的生物碱。该类化合物具有多样的生物活性，但其立体选择性的化学合成依然存在巨大的挑战。在 di-DKP 生物合成过程中，存在多种区域及立体选择性的二聚化模式，极大丰富了 di-DKPs 的结构多样性。虽然已报道的 di-DKPs 绝大多数来源于真菌，但目前二聚化的机制研究多基于细菌，关于真菌催化关键二聚化反应的酶仅有一例报道。因此，鉴定真菌的 DKP 二聚化酶不仅能够揭示 di-DKPs 多样性的基础，也有助于理解二聚化反应的区域及立体选择性。

研究人员首先以报道的真菌 DKP 二聚化酶为靶点，通过 blast 及 SSN 分析构建了真菌 P450 的序列相似性网络，揭示了一类可能专一负责二聚化反应的 P450 酶。其中有 20 个 P450 与一个双模块的非核糖体肽合成酶 (nonribosomal peptide synthetase, NRPS) 在基因簇上是连锁的，推测可能负责 di-DKPs 的生物合成。将假定的 DKP 二聚化 P450 酶进行进一步的进化树分析，结果显示这些 P450 分为三支，可能负责催化不同二聚化模式的生成。为了确认这一假设，研究人员分别从三个分支中选取了 5 个基因簇在模式菌株构巢曲霉中进行了异源表达，结果显示：Clade I (AmiP450) 负责催化 C3-C3' (2S,3S,2'S,3'S) 连接的生成；Clade II (AcrP450) 负责催化 C3-C3' (2R,3R,2'R,3'R) 连接的生成；Clade III (AtP450, AcP450, AtuP450) 主要负责催化非对称型二聚化方式的形成。以上研究通过基因挖掘鉴定了 5 个区域及立体选择性不同的 P450 二聚化酶，包括 8 种连接方式，其中有 2 种为新的连接方式 (C3R-C3'R, C3R-C8')，另外 6 种与细菌共有；并首次报道了催化含 D 型氨基酸 DKP 为天然底物的 P450 酶 (AcrP450 和 AtuP450)；同时分离鉴定了 5 个新的 di-DKP 生物碱 (3a, 4a, 8a, 9a, 11d) 和 2 个之前是细菌 (11b, 11c) 途径来源的产物。这

些结果表明了 P450 催化二聚化模式与其在进化树的分支是一致的。为进一步拓展 di-DKP 的结构多样性, 利用组合生物合成构建了五个基因簇的非天然表达途径, 分离到了 9 个与天然途径不同的二聚体, 其中有 5 个为新化合物 (4b, 7b, 8b, 9b, 15c)、2 个之前仅从细菌 (14e) 或者化学合成 (14c) 途径获得; 同时揭示了 P450 催化 DKP 二聚化的模式也受到底物的影响。。

信息来源: Ma, CT, et al. Exploring the Diverse Landscape of Fungal Cytochrome P450-Catalyzed Regio- and Stereoselective Dimerization of Diketopiperazines. *ADVANCED SCIENCE*, 2024, DOI10.1002/advs.202310018

近期会议与活动

时间	题目	地点	相关链接
18-19 Jul, 2024	10th International Conference on Natural Products and Traditional Medicine	Paris, France	https://www.clocate.com/international-conference-on-natural-products-and-traditional-medicine/89813/
24-26 Oct, 2024	The Global Summit on Agriculture and Plant Science (GSAPS 2024)	Bern, Switzerland	https://www.clocate.com/the-global-summit-on-agriculture-and-plant-science-gsaps/101308/
04-05 November, 2024	7th International Conference on Natural Products and Medicinal Plants Research	Toronto, Canada	https://naturalproducts.conferenceseries.com/
10-11 Oct, 2024	10th World Congress on Medicinal Plants and Marine Drugs	Paris, France	https://www.clocate.com/world-congress-on-medicinal-plants-and-marine-drugs/88219/
6月20-21日, 2024	2024人工智能与生物医药生态大会 (AIBC)	上海	https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzA4MzgZMDM5Mg==&mid=2652120873&idx=4&sn=9a78945701e6cabb52bb68f6ea5874e1&chksm=85a064aa7f1128b58296f9d498dc6632df2b5fe6fd569b70c1630a1536d6f87b0e20188860f0&scene=27
7月4-6日, 2024	2024世界人工智能大会—智能药物研发: AI驱动的创新与突破	上海	https://hy.bioon.com/2024WIAC2/intro
6月19-21日, 2024	第二届小分子创新药物发展前沿与实践高端研讨会	南京	https://www.instrument.com.cn/news/20231114/691866.shtml

人工智能与天然药物动态监测快报

编写委员会

主 编：庄会富 陆颖

执行主编：田雅娟

编 委：张于 颜秉超 胡坤 卿立燕 杨帅

编 辑：杜宁 田雅娟 黄蓉 史继强

工作联系人：杜 宁 电话：0871-65223176 邮箱：duning@mail.kib.ac.cn

田雅娟 电话：028-81258707 邮箱：tyj@clas.ac.cn