

人工智能与天然药物 动态监测快报

总第 012 期 2025-8-01



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	3
北京市科学技术委员会、中关村科技园区管理委员会等 7 部门印发《北京市加快推动“人工智能+医药健康”创新发展行动计划（2025-2027 年）》	3
研究前沿	4
READRetro Web：基于深度学习的植物天然产物生物合成预测平台	4
AI 助力抗癌新突破, 机器学习模型精准预测肿瘤侵袭性	5
CLaSP：综合药物相似性评估的对比学习引导潜在评分平台	6
基于双向荟萃分析与机器学习的大黄素肝损伤治疗窗研究	7
基于化学型和靶点驱动的基因组挖掘发现新型细菌肽脱甲酰酶天然产物抑制剂	8
DeepDTAGen：用于药物-靶点亲和力预测和靶点感知药物生成的多任务深度学习框架	9
PKAG-DDI：可解释的药物相互作用 AI 预测新方法	10
NC 基于证据深度学习的药物靶点相互作用预测	11
近期会议与活动	12

政策法规

北京市科学技术委员会、中关村科技园区管理委员会等 7 部门印发《北京市加快推动“人工智能+医药健康”创新发展行动计划（2025-2027 年）》

2025-07-03

近日印发《加快推动“人工智能+医药健康”创新发展行动计划（2025-2027 年）》，提出到 2027 年将北京建设成为具有国际影响力的“人工智能+医药健康”创新高地。

《行动计划》立足北京在人工智能技术策源、医疗资源富集等方面的优势，设定了明确的发展目标：在技术创新方面，将产出一批新技术、新工具、新模式，落地转化 30 个以上核心技术和创新产品；在应用场景方面，助力 20 个以上创新药械进入临床试验，推进 10 个以上场景应用；在产业生态方面，引育 100 名以上专业人才，形成 2-3 个具有竞争力的产业聚集区。

为实现这些目标，计划部署了四大重点任务：一是推动基础研究突破，研发自主可控的生物医药基础模型；二是加速数据汇聚流通，建设行业级公共数据集，完善数据标准体系；三是深化 AI 在医药研发、生产、医疗服务等全链条应用；四是培育产业生态，建设创新孵化平台，加强人才引育。

政策亮点主要体现在三个方面：一是强化技术创新，瞄准国际前沿推进研发范式变革；二是突出场景牵引，重点支持创新药械研发和产业化应用；三是创新协同机制，推动产学研医深度融合，构建科学监管体系。

该计划的实施将有力促进人工智能技术与医药健康产业的深度融合，加快培育产业发展新动能，为北京建设国际科技创新中心提供重要支撑。通过 15 项具体任务的落实，北京有望在“人工智能+医药健康”领域形成领先优势，推动医药健康产业高质量发展。

信息来源：北京市人民政府

https://www.beijing.gov.cn/zhengce/zcjd/202507/t20250722_4155088.html

研究前沿

READRetro Web: 基于深度学习的植物天然产物生物合成预测平台

2025-07

本研究开发了 READRetro Web 平台，旨在解决天然产物生物合成研究中计算工具使用门槛高的问题。该平台整合了高性能的 READRetro 机器学习模型（2024 年发布），通过用户友好的网页界面实现了逆合成预测的便捷化操作。

平台采用现代 Web 技术架构，前端使用 Svelte 和 TailwindCSS 确保响应速度，后端基于 FastAPI 和 Docker 提供稳定支持。核心功能包括：1) 交互式参数调节，可优化路径搜索深度和宽度；2) 内置 40 种生物合成前体模块，支持 SMILES 自定义扩展；3) 可视化结果展示，通过颜色编码标注反应可行性，并关联 KEGG、BRENDA 等数据库提供酶分类和代谢通路信息。

相较于传统命令行工具，READRetro Web 显著降低了使用门槛，同时保持了高预测准确性。平台提供公开 API 和本地部署选项，支持高通量分析，已成功应用于药物研发和香料开发等领域。该开源项目（MIT 许可证）为天然产物研究提供了高效工具，未来将通过扩展反应数据库和优化批处理功能进一步提升实用性。访问地址：<https://readretro.net>。

信息来源: Kwak, Yejin;et.al. READRetro web: A user-friendly platform for predicting plant natural product biosynthesis[J] MOLECULES AND CELLS 2025 48(8):100235
DOI:10.1016/j.mocell.2025.100235

AI 助力抗癌新突破, 机器学习模型精准预测肿瘤侵袭性

2025-06-11

肿瘤是全球主要死亡原因之一, 且对年轻群体的威胁日益加剧。2023 年《BMJ Oncology》研究显示, 1990-2019 年间, 50 岁以下人群的早期癌症发病率增长 79%, 相关死亡率上升 28%。巴西国家癌症研究所预测, 2023-2025 年每年新增病例将达 70.4 万例, 其中非黑色素瘤皮肤癌 (31%)、乳腺癌 (10.5%)、前列腺癌 (10%) 最为常见。

面对癌症复杂性的增加, 人工智能 (AI) 成为癌症预测与检测的新工具。近期, 巴西、波兰等国科研团队开发出一种机器学习模型, 通过分析特定蛋白质预测肿瘤侵袭性。该模型生成 0-1 的“干性指数”, 数值越高, 肿瘤侵袭性、耐药性及复发风险越高。相关成果发表于《Cell Genomics》。

研究基于 11 种癌症的 1300 多份样本数据, 结合多能性干细胞蛋白质组, 识别出驱动肿瘤侵袭的关键蛋白质, 为靶向治疗提供新方向。论文通讯作者 Tathiane Malta 指出, 部分蛋白质已是现有药物靶点, 未来可进一步测试。2018 年, Malta 团队曾在《Cell》发表基于基因表达的干性指数, 此次升级为蛋白质组学分析, 更具临床价值。

PROTsi 模型在区分肿瘤与非肿瘤样本时表现优异, 尤其在子宫癌、头颈癌等类型中预测效果显著。尽管模型对部分癌症适用性更强, 但其广泛性为未来研究奠定基础。团队表示, 这一进展将深化对肿瘤耐药机制的理解, 推动个性化治疗发展, 最终改善患者预后。

科学进步需要持续积累, 但每一步都可能改变患者命运。这一研究为癌症治疗提供了新工具, 也为全球抗癌事业注入希望。

信息来源: Iga Kołodziejczak-Guglas et al, Proteomic-based stemness score measures oncogenic dedifferentiation and enables the identification of druggable targets[J], Cell Genomics .2025. DOI: 10.1016/j.xgen.2025.100851

CLaSP: 综合药物相似性评估的对比学习引导潜在评分平台

2025-07-27

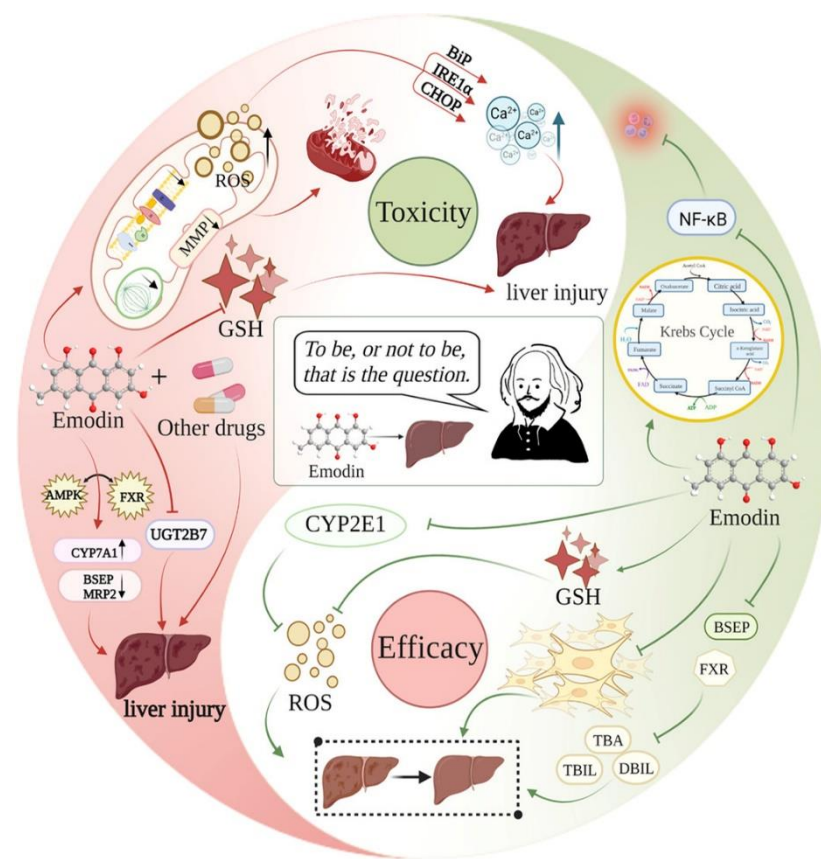
中高效的药物相似性评估对于加速药物发现和降低早期化合物筛选的成本至关重要。然而，现有的方法要么依赖于严格的经验规则，要么依赖于监督分类模型，缺乏普遍性和可解释性。本研究介绍了对比学习引导的潜在评分平台（CLaSP），这是一个将变分自编码与三元组对比学习相结合的新型框架，用于药物相似性评估。CLaSP 构建了一个由物理化学和 ADMET 相关特征告知的结构化潜在空间，从而实现反映分子可开发性的连续、可解释的 CLaSP_Score。该功能集是根据 ADMETlab 3.0 和 admetSAR 3.0 策划的，并通过功能选择进行优化。基准评估表明，CLaSP 在多个数据集和真实案例研究中的表现优于 QED 和 DBPP-Predictor。此外，CLaSP 有效地捕获了药物优化轨迹，如 Wee1 抑制剂的案例研究所示。用户友好的门户网站（<https://lmmd.ecust.edu.cn/CLaSP>）支持早期的单次和批量分析药设计。

信息来源: Xinmin Li et.al. CLaSP: A Contrastive Learning-Guided Latent Scoring Platform for Comprehensive Drug-Likeness Evaluation[J] Journal of Medicinal Chemistry
DOI:10.1021/acs.jmedchem.5c01618

基于双向荟萃分析与机器学习的大黄素肝损伤治疗窗研究

2025-07

大黄素是一种从草药中提取的活性成分，具有显著的肝保护作用，但高剂量或长期使用可能引发肝毒性。传统研究方法难以精准预测其剂量与时间依赖性效应。本研究通过荟萃分析结合机器学习，系统评估大黄素的双重作用，并确定其疗效与毒性的临界阈值，为临床合理用药提供依据，经过实验，发现大黄素的肝保护与肝毒性效应存在明确的剂量和时间依赖关系。机器学习模型确定的临界阈值（45.74 mg/kg/天，30.41 天）为其安全应用提供了重要参考。



信息来源: Sihan Hu et.al. The efficacy and toxicity equilibrium of emodin for liver injury: A bidirectional meta-analysis and machine learning[J]. 2025. Phytomedicine 142:156650. DOI: 10.1016/j.phymed.2025.156650

基于化学型和靶点驱动的基因组挖掘发现新型细菌肽脱甲酰酶天然产物抑制剂

2025-6-10

传统 PDF 抑制剂（如 actinonin）因含羟肟酸基团存在体内毒性问题，本研究旨在寻找不含羟肟酸基团的细菌肽脱甲酰酶（PDF）抑制剂。通过生物信息学工具（ClusterScout 和 CORASON）分析了 13.5 万个细菌基因组，筛选出 73 个候选生物合成基因簇（BGCs），重点关注来自 γ -变形菌纲（Gammaproteobacteria）的一个 BGC。该 BGC 编码的天然产物类似 actinonin，但缺乏羟肟酸基团。

通过异源表达和代谢组学分析，鉴定出一系列三肽衍生物，最终分离出活性分子 gammanonin（4）。gammanonin 通过半缩醛胺结构共价抑制 PDF，表现出对革兰氏阴性菌的选择性活性，且其 BGC 包含一个自我保护的 PDF 基因（GamD）。尽管 gammanonin 的抑制活性低于 actinonin，但其独特的作用机制为开发新型抗生素提供了新思路。

研究还揭示了 BGC 中不寻常的转座 N-甲基转移酶（GamE）和还原酶（Re）域的功能，阐明了 gammanonin 的生物合成途径。该研究展示了表型和靶点驱动的天然产物发现策略在抗生素开发中的潜力，为解决抗菌药物耐药性问题提供了新方向。

信息来源：Jonas H.et.al. Chemotype- and Target-Driven Genome Mining for a New Natural Product Inhibitor of Bacterial Peptide Deformylase.[J] Journal of the American Chemical Society. 2025, 147, (25): 21400–21407. DOI:10.1021/jacs.4c17876

DeepDTAGen: 用于药物-靶点亲和力预测和靶点感知药物生成的多任务深度学习框架

2025-05-30

药物-靶点相互作用对于理解药物的治疗效果至关重要,它在新疾病的治疗发现中扮演着关键角色。近年来,药物-靶点结合亲和力(DTA)预测受到了越来越多的关注,因为它能提供药物与靶点之间相互作用强度的详细信息。然而,现有的基于回归的模型和深度学习模型在提取药物和靶点的相关特征方面存在局限性。

为了克服这些挑战,本研究提出了一种多任务学习(MTL)框架——DeepDTAGen。该框架通过共享特征空间同时执行 DTA 预测和新药生成任务,不仅提高了效率,还增强了模型对药物-靶点关系的理解,并且开发了 Fetter Gradients (FetterGard) 算法,有效缓解了多任务学习中的梯度冲突问题,确保了模型的稳定性和准确性。

研究采用三大关键技术:1) 基于门控卷积神经网络(Gated-CNN)的蛋白质特征提取,通过门控机制筛选关键氨基酸序列特征;2) 融合原子级特征的图编码器,将药物 SMILES 转化为包含环结构、杂化方式等 21 种原子特征的图数据;3) 条件 Transformer 解码器,以亲和力值和蛋白质特征为条件生成靶向药物。实验数据来自 KIBA、Davis 和 BindingDB 三大基准数据集,涵盖超过 18 万组药物-靶标相互作用。

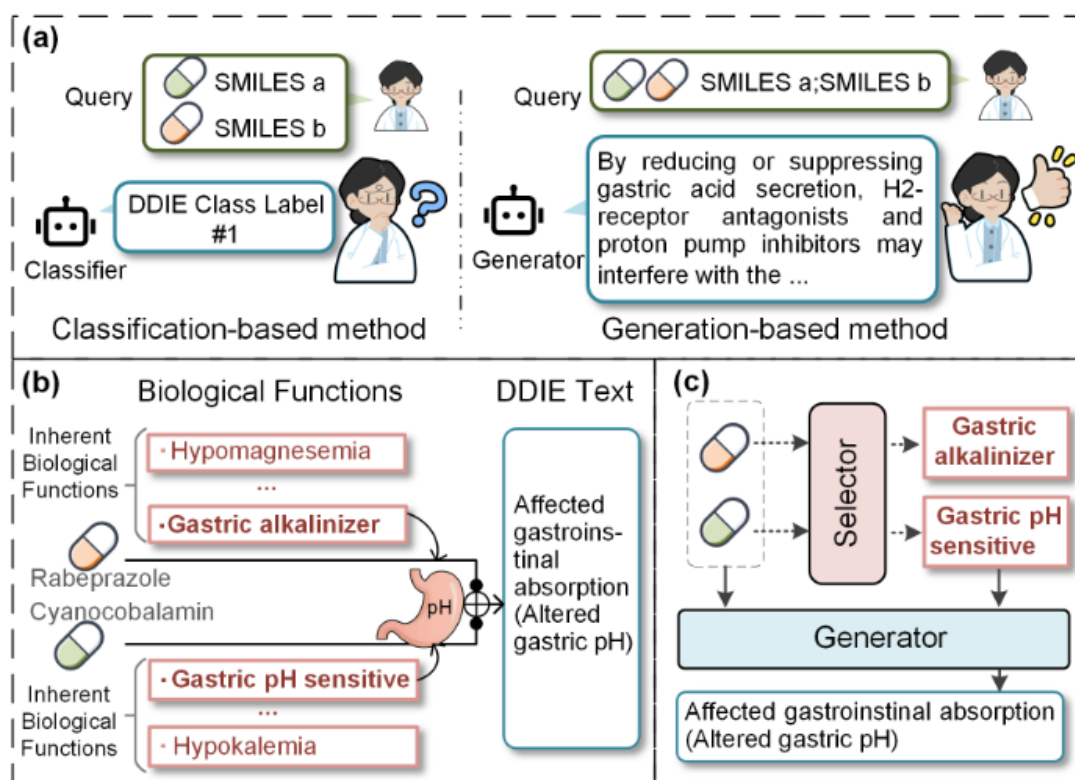
通过广泛的实验验证,DeepDTAGen 在预测药物与靶点之间的结合亲和力以及生成靶点感知药物方面均表现出色。无论是在药物选择性分析、定量构效关系分析,还是在冷启动测试中,DeepDTAGen 都展现了其稳健性。此外,对于生成任务,也进行了化学药物性分析、靶点感知性分析和多药理学分析,进一步证明了模型的实用性和灵活性。

信息来源: Pir Masoom Shah et.al. DeepDTAGen: a multitask deep learning framework for drug-target affinity prediction and target-aware drugs generation[J]. Nature Communications 2025, 16: 5021 <https://www.ebiotrade.com/newsf/2025-5/20250531075735895.htm>

PKAG-DDI: 可解释的药物相互作用 AI 预测新方法

2025-07-25

药物相互作用（DDI）的准确预测对临床用药安全至关重要。传统方法多依赖分类模型，但存在结果不直观、无法覆盖复杂机制等局限。本研究提出 PKAG-DDI 模型，首次将药物的生物学功能（如代谢机制、药效类别）作为上下文信息，通过成对知识增强技术生成可解释的 DDI 事件文本。模型包含两大创新：1）成对知识选择器（PKS），通过双向注意力机制和参数复用策略，高效筛选药物对中最相关的生物学功能；2）知识集成策略，通过联合概率分布将匹配的功能动态注入语言模型，避免噪声干扰。实验表明，在 MecDDI 和 DDInter2.0 数据集上，PKAG-DDI 的文本生成质量（BLEU-4 提升 5% 以上）和临床风险评估准确性均显著优于基线模型，尤其在未知药物场景（Scaffold Split）中展现强泛化能力。该方法为 DDI 预测提供了可解释的生成式解决方案，但其性能仍受限于预定义的生物学功能集，未来需进一步支持动态知识扩展。

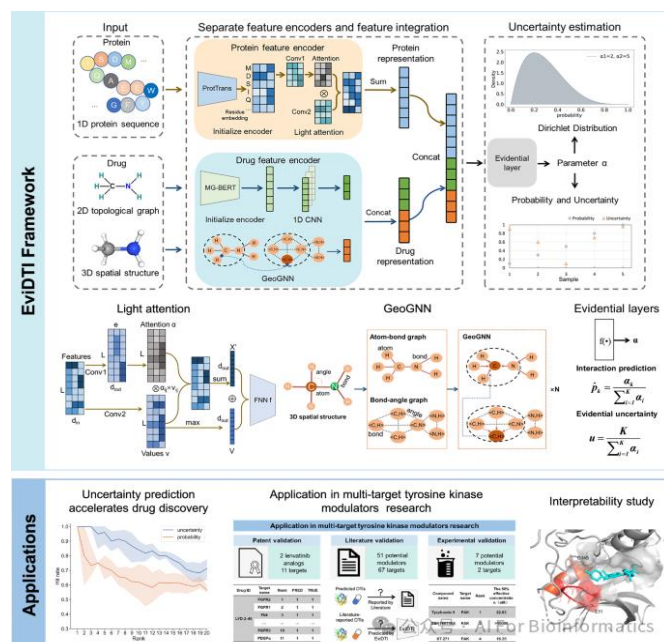


信息来源: Ziyan Wang et.al. PKAG-DDI: Pairwise Knowledge-Augmented Language Model for Drug-Drug Interaction Event Text Generation 2025. arXiv:2507.19011v1
<https://arxiv.org/pdf/2507.19011v1>

NC | 基于证据深度学习的药物靶点相互作用预测

2025-07-26

药物靶点相互作用 (DTI) 预测是药物发现的重要组成部分。最近的深度学习方
法在该领域显示出巨大的潜力,但也面临着巨大的挑战。其中包括为预测生成可靠
的置信度估计,在处理新的、看不见的 DTI 时增强稳健性,以及减轻过度自信和不
正确预测的趋势。为了解决这些问题,本研究提出了 EviDTI,这是一种利用证据深
度学习 (EDL) 在基于神经网络的 DTI 预测中进行不确定性量化的新方法。EviDTI
集成了多个数据维度,包括药物二维拓扑图和三维空间结构,以及靶点序列特征。
通过 EDL, EviDTI 为其预测提供不确定性估计。在 3 个基准数据集上的实验结果证
明了 EviDTI 相对于 11 个基线模型的竞争力。此外,研究表明, EviDTI 可以校准预
测误差。更重要的是,经过良好校准的不确定性信息通过优先考虑具有更高可信度
预测的 DTI 进行实验验证,从而提高了药物发现的效率。在一项以酪氨酸激酶调节
剂为重点的案例研究中,不确定性引导的预测确定了靶向酪氨酸激酶 FAK 和 FLT3
的新型潜在调节剂。这些结果强调了证据深度学习作为 DTI 预测中不确定性量化的
强大工具的潜力及其对加速药物发现的更广泛影响。



信息来源: Zhao, Y. et al. Evidential deep learning-based drug-target interaction prediction[J]. Nat Commun 2025.16:6915 https://mp.weixin.qq.com/s/yHUyXo0szaQ1e9-QvUPO_g

近期会议与活动

时间	题目	地点	相关链接
04-05 Nov 2025	8th International Conference on Natural Products and Medicinal Plants Research	Toronto, Canada	https://www.clocate.com/international-conference-on-natural-products-and-medicinal-plants-research/73011/
03-04 Nov 2025	ICPPNP 2025: International Conference on Pharmacognosy, Phytochemistry and Natural Products	Amsterdam, Netherlands	https://www.clocate.com/icppnp-international-conference-on-pharmacognosy-phytochemistry-and-natural-products/102448/
2025 年 10 月 20 日-22 日	中国化学会手性中国 2025 学术研讨会	无锡, 中国	https://www.chemsoc.org.cn/meeting/home/m641
2025 年 10 月 17 日-20 日	中国药学会智能药物专业委员会学术年会	上海, 中国	https://www.cpa.org.cn/index.php?do=info&cid=76861
2025 年 10 月 24 日-26 日	第二十三届中药和天然药物学术研讨会	南昌, 中国	https://www.cpa.org.cn/index.php?do=info&cid=76854

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：杜宁

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