

基于人工智能的药物分子设计与筛选策略研究

王 野

辽宁成大生物股份有限公司 辽宁沈阳

【摘要】人工智能 (AI) 在药物分子设计与筛选领域的应用日益成为提升药物研发效率的关键技术。通过深度学习、机器学习等 AI 技术, 研究人员能够在海量分子数据中快速识别潜在的分子, 从而大大缩短研发周期, 降低成本, 提高命中率。本文探讨了基于人工智能的药物分子设计与筛选策略, 分析了 AI 在药物分子筛选中的优势与挑战, 探讨了如何通过建立有效的计算模型来优化分子设计, 提升药物研发的精确度。本文还重点讨论了 AI 算法与传统药物筛选方法的结合应用, 以及在药物发现中可能遇到的技术难题。综上所述, 人工智能的引入不仅优化了药物分子的设计过程, 还为药物筛选和精准医学的发展提供了新的动力。

【关键词】人工智能; 药物分子设计; 分子筛选; 深度学习; 机器学习

【收稿日期】2025 年 5 月 16 日

【出刊日期】2025 年 6 月 21 日

【DOI】10.12208/j.jccr.20250035

Research on artificial intelligence-based drug molecule design and screening strategies

Ye Wang

Liaoning Chengda Biotechnology Co., Ltd., Shenyang, Liaoning

【Abstract】The application of artificial intelligence (AI) in the field of drug molecule design and screening has increasingly become a key technology to improve the efficiency of drug research and development. By leveraging AI technologies such as deep learning and machine learning, researchers can quickly identify potential drug molecules from massive molecular datasets, thereby significantly shortening the research and development cycle, reducing costs, and improving hit rates. This paper explores AI-based strategies for drug molecule design and screening, analyzes the advantages and challenges of AI in drug molecule screening, and discusses how to optimize molecular design and enhance the accuracy of drug research and development by establishing effective computational models. It also focuses on the combined application of AI algorithms with traditional drug screening methods, as well as the potential technical difficulties encountered in drug discovery. In summary, the integration of artificial intelligence not only optimizes the design process of drug molecules but also provides new impetus for the development of drug screening and precision medicine.

【Keywords】Artificial intelligence; Drug molecule design; Molecular screening; Deep learning; Machine learning

引言

药物研发面临着越来越高的挑战, 尤其是在药物筛选阶段, 传统方法往往依赖于繁杂的实验过程, 导致周期长、成本高、成功率低。随着人工智能技术的快速发展, 尤其是深度学习和机器学习的广泛应用, 为药物分子设计与筛选提供了全新的思路 and 工具。AI 技术通过模拟生物体系、优化分子结构、预测药物活性等手段, 能够显著提高药物研发的效率与准确性。探讨人工智能在药物分子设计与筛选中的应用意义重大, 不仅为现有的药物研发模式带来了创新, 还为未来精准医疗与个性化治疗提供了可能。本文将从人工智能的核心

技术入手, 分析其在药物分子设计中的具体应用, 评估其优势与挑战, 并展望其未来的发展潜力。

1 人工智能技术在药物分子设计中的应用与发展

人工智能 (AI) 技术革新了药物分子设计的传统模式。传统药物设计依赖于经验、化学原理和实验验证, 周期长且成本高。而 AI 的引入, 通过深度学习和机器学习等技术, 显著提升了药物设计的效率和精度。AI 能够高效处理海量数据, 快速识别潜在的活性分子并进行结构优化, 特别是在药物分子设计的早期阶段。通过建立药物-靶标相互作用预测模型, AI 不仅能预测分子的生物活性, 还能评估其毒性, 降低实验失败率。随

着算法和数据的积累, AI 在药物设计中的应用越来越广泛, 涵盖从分子构建到药效优化的各个环节, 极大提升了药物研发的成功率和效率。

计算能力的提升推动了人工智能技术的不断进步, 使药物分子设计变得更加智能和精确。深度学习模型, 特别是卷积神经网络 (CNN) 和图卷积网络 (GCN), 使分子设计能够达到更高层次。AI 通过分析分子结构及其与生物靶标的相互作用, 在设计阶段预测最佳化学结构, 提高药物设计的成功率并提供新的优化思路^[1]。通过模拟和预测分子与靶标的相互作用, AI 为分子结构优化提供了依据, 减少了不必要的实验。AI 技术使药物设计不再仅依赖经验和化学理论, 而是通过大数据支持, 实现精准的结构改造和功能优化, 未来将在药物分子设计中发挥更为不可或缺的作用。

AI 技术在药物分子设计中的应用不仅改变了药物的研发流程, 也为新药的发现提供了更多可能性。尤其在癌症、神经退行性疾病等领域, AI 技术的应用使得药物筛选的效率和效果有了突破性进展。在这些复杂疾病的药物设计过程中, AI 技术能够通过病理机制的深刻理解, 结合大量实验数据, 帮助科学家快速发现潜在的药物靶点并设计出具备高亲和力和选择性的分子。这种高效且精确的分子设计方式, 为疾病的治疗提供了更多靶向药物的选择。而随着 AI 算法的不断优化, 未来人工智能有可能在药物设计中发挥更大的作用, 特别是在个性化医学和精准治疗的领域, AI 的潜力不可估量。

2 基于深度学习的药物分子筛选方法探讨

深度学习是人工智能的一个重要分支, 其在药物分子筛选中的应用越来越广泛。传统的药物筛选方法主要依赖于体外实验和高通量筛选技术, 这些方法虽然在药物筛选中发挥了重要作用, 但在处理海量数据时效率较低, 且存在较高的成本。基于深度学习的药物筛选方法能够充分发挥其强大的数据处理和模式识别能力^[2]。通过使用深度神经网络 (DNN)、卷积神经网络 (CNN) 等算法, 深度学习能够从大量的化合物数据中识别出与特定疾病靶标具有潜在相互作用的分子。与传统的筛选方法相比, 深度学习能够在几乎没有实验验证的情况下, 通过对已知药物数据的学习, 预测药物候选分子的生物活性和靶标亲和力, 极大地提高了药物筛选的效率和成功率。

深度学习在药物分子筛选中的应用并非仅限于化合物的预测和筛选, 它还可以辅助设计新的药物分子。通过训练深度学习模型, 使其能够从大量的药物分子和靶标数据中提取出分子特征, 科学家可以利用模型

生成具有药物活性的化合物分子。这种方法通过生成对药物靶标有良好亲和力的分子, 减少了依赖传统药物筛选方法的需要。深度学习还可以优化分子的药效和药代动力学特性, 通过预测药物分子的溶解度、稳定性等性质, 进一步提高药物的临床成功率。通过深度学习对药物分子进行全面评估, 不仅可以加快药物筛选过程, 还能够显著降低开发成本。

尽管深度学习在药物分子筛选中具有明显的优势, 但其也面临一些挑战。深度学习模型需要大量的高质量数据来训练, 这对数据的来源和质量提出了较高要求。其次, 深度学习模型的“黑箱”特性使得其预测结果往往缺乏可解释性, 这在药物筛选中可能导致一些不必要的风险。尽管如此, 随着数据质量的提高和算法的不断优化, 深度学习在药物筛选中的应用前景仍然非常广阔。结合大数据技术和云计算平台, 深度学习可以为药物筛选提供更加高效、精准的解决方案, 在未来药物研发中将发挥更为重要的作用。

3 人工智能与传统药物筛选方法的结合与优化

传统的药物筛选方法通常依赖于高通量筛选技术, 这种方法通过测试数以万计的化合物对特定靶标的作用, 来寻找潜在的候选药物。尽管高通量筛选技术在早期的药物发现中取得了一定的成功, 但其高成本、长周期以及有限的预测能力使得其在面对大规模数据时的效率变得越来越低。而人工智能, 尤其是机器学习和深度学习技术, 能够在更短的时间内处理大量的化合物数据, 并快速筛选出潜在的候选分子。将人工智能与传统筛选方法相结合, 能够充分发挥两者的优势, 提高药物研发的效率和准确性。

通过结合传统药物筛选方法和人工智能技术, 药物研发过程能够在多个阶段得到优化。在初期阶段, AI 可以用来对大量化学分子进行虚拟筛选, 从而减少实验中不必要的试剂和样品测试; 而在后期阶段, 传统的实验验证和临床前试验可以提供更加真实的数据, 进一步验证 AI 筛选的结果。通过这种结合的方式, 药物研发团队能够在保证实验可靠性的前提下, 充分利用人工智能的高效性和预测能力, 显著缩短药物筛选周期, 减少研发成本。AI 技术能够实时调整筛选策略, 优化实验条件, 进一步提高药物发现的成功率。

结合传统药物筛选方法和人工智能技术的优化策略还体现在数据共享与协同工作方面。AI 技术能够从全球各地收集和整合海量的药物研发数据, 构建一个统一的药物数据平台, 为药物研发人员提供更为丰富的资源。而传统的药物筛选方法能够在实验室环境中

提供可靠的数据支持,为 AI 提供真实的数据反馈^[3-7]。两者的结合,不仅提高了药物筛选的精确度,也促进了全球药物研发数据的共享和协同工作,为全球健康事业的进步提供了支持。随着科技的不断发展,人工智能与传统药物筛选方法的结合将逐步成为未来药物研发的主流。

4 人工智能驱动的药物分子设计与筛选面临的挑战及应对策略

尽管人工智能在药物分子设计与筛选中取得了显著进展,但在实际应用过程中,仍然面临一系列技术和实践上的挑战。数据的质量和数量仍然是制约人工智能发挥最大潜力的关键因素。在药物分子设计中, AI 模型的训练依赖于大量的高质量数据,当前药物研究领域的数据往往存在数据不完整、标注不准确等问题,这直接影响到 AI 模型的准确性和可靠性。如何获得高质量的数据,并在数据共享和开放的基础上进行更有效的整合,成为亟待解决的核心问题。数据的高效利用和管理将直接影响人工智能在药物研发中的应用效果。

人工智能的“黑箱”问题也是一个不容忽视的挑战。尽管 AI 能够提供准确的预测结果,但其决策过程缺乏透明性和可解释性,这使得研究人员在应用过程中可能无法完全理解模型的工作原理。在药物筛选中,这种不透明性可能导致一些不可预测的风险,尤其是在药物临床前试验阶段^[8]。如何提高 AI 算法的可解释性,使得药物研发人员能够更清楚地理解 AI 模型的预测依据,是当前亟待解决的问题。通过提高 AI 模型的可解释性,能够增强药物研发人员的信任度,进一步推动人工智能技术在药物研发中的广泛应用。

人工智能在药物分子设计与筛选中的普及应用还面临着计算能力的限制。虽然 AI 技术已经取得了显著的进展,但其需要强大的计算平台和高性能的硬件支持,这在一些资源有限的研究机构中可能会造成技术应用的障碍。随着云计算和超级计算平台的发展,人工智能在药物研发中的应用将更加普及。为了应对这些挑战,研究人员需要不断优化 AI 算法,提升计算效率,并通过数据共享和平台建设来推动人工智能技术在药物研发中的进一步发展。

5 结语

人工智能技术的引入极大推动了药物分子设计与

筛选的进步,通过优化设计流程、提升效率与准确性, AI 为新药研发开辟了更广阔的前景。深度学习和机器学习模型在药物筛选中的应用不仅提升了分子筛选的速度和准确性,还有效降低了研发成本。尽管存在数据质量和模型可解释性等挑战,随着技术的不断完善, AI 在药物研发中的角色将愈加重要。未来,人工智能将继续推动药物发现的革新,为个性化治疗和精准医疗提供更有力的支持,成为药物研发领域不可或缺的重要工具。

参考文献

- [1] 谭相端,张妞妞,马小盼,等.人工智能背景下研究生药物分子设计课程“五维一体”教学改革探索[J].科教文汇,2025, (12):118-123.
- [2] 叶子.基于改进图同构网络的药物-靶点亲和力预测研究与应用[D].武汉工程大学,2024.
- [3] 曹溢.基于分子 SMILES 预训练模型的药物治疗属性预测研究[D].四川大学,2024.
- [4] 邓增乾.基于多源特征图表示学习的药物相互作用预测研究[D].青岛理工大学,2024.
- [5] 高蒙蒙.基于深度学习的新药-靶标相互作用预测算法研究[D].东南大学,2023.
- [6] 李诗萌.基于神经网络的类药小分子毒性预测与从头设计研究[D].辽宁大学,2023.
- [7] 殷佳依.药物转运体和代谢酶数据体系构建及药物响应机制研究[D].浙江大学,2023.
- [8] 孙建博,李娜,陈莉.人工智能发现活性分子背景下天然药物化学教学的转型与发展[J].化学教育(中英文),2022, 43(24):79-84.

版权声明: ©2025 作者与开放获取期刊研究中心(OAJRC)所有。本文章按照知识共享署名许可条款发表。

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



OPEN ACCESS