

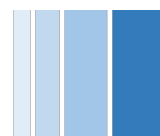
大健康与新医疗

BIG DATA Health
and New Medical

2025 年

第 6 期

上海科学技术情报研究所
上海市前沿技术发展研究中心
技术与创新支持中心(TISC)



量子计算+AI 药物设计

编者按

药物研发是一个艰难且漫长的过程。传统上，一款新药从研发到上市，平均需要“十年时间、十亿美元”的投入，且绝大多数候选药物会在中途失败。计算机辅助技术虽已应用多年，但在模拟人体内复杂的分子相互作用、筛选海量化合物时，其能力仍存在瓶颈。

多个权威报告指出，2025 年已成为药物研发模式的一个分水岭——行业正在从高度依赖经验的传统路径，全面转向由人工智能（AI）驱动、量子计算增强的智能化新范式。这一年生成式 AI、量子计算、机器学习深度融合、协同发力，共同构成了一个更强大、更智能的药物研发系统。这不仅是一次技术升级，更是一次研发范式的根本性转变。2025 年之所以被称为“转折点”，正是因为这些技术的成熟度与实践价值已通过多项验证，使得“AI+量子”这一混合策略，演进为全球药物研发体系中不可或缺的核心支柱。本期《大健

康与新医疗》简报将从基础研究、量子计算供应商赋能跨界合作、医药行业内部加速整合与布局等方面介绍量子计算 +AI 药物设计的研究进展。

目

录

基础研究.....3

-攻克 AI 药物设计瓶颈：量子计算赋能研发新范式
.....3
-FENNIX-BIO1：用于高精度分子模拟的量子人工智能基础模型
.....4
-破解混合量子经典模型架构瓶颈：贝叶斯优化指引分子生成新路径
.....6

量子计算供应商赋能跨界合作.....7

-D-WAVE 与日本烟草公司合作，利用量子 AI 加速药物发现
.....7
-量子计算携手 AI 与超算开启药物研发新纪元
.....7
-丹麦 KVANTIFY 公司将利用 GEFION AI 加速量子化学与药物发现
.....9

医药行业内部加速整合与布局.....10

-CAS 与克利夫兰诊所携手，融合 AI 与量子计算加速临床研究
.....10

➤礼来公司与 CREYON 达成超 10 亿美元 RNA 药物协议

.....11

基础研究

攻克 AI 药物设计瓶颈：量子计算赋能研发新范式

量子算法能显著增强分子模拟，提高药物发现流程的效率，而与 AI 的结合则能减少计算时间并提升筛选准确性。此外，新兴的量子-经典混合模型以及量子资源获取的改善，有望推动超越经典技术能力的创新。

量子计算与人工智能和机器学习融合在应对诊断、药物发现及个性化医疗领域计算挑战方面的变革性潜力。通过协同作用，这些技术不仅弥补了传统 AI 模型的局限，更为精准医疗和药物研发提供了新的解决方案。

1、克服 AI 在药物发现中的局限性

人工智能在模式识别、数据分析和预测建模等领域表现出色。然而，在模拟量子力学系统（如分子相互作用和蛋白质折叠）时却面临显著限制。AI 方法通常依赖近似计算，限制了其准确性，并且其对大量计算资源的依赖使得对于分子对接和优化等复杂任务难以扩展。量子计算通过直接模拟量子相互作用，为这些局限提供了解决方案，能显著提高精度并减少误差。

2、药物发现中的量子-AI 协同效应

量子计算与人工智能的结合，能够精确模拟量子相互作用并优化流程，从而增强药物发现管线。量子算法（如 Grover 算法和 Shor 算法）可加速分子模拟并识别潜在候选药物。量子退火器和量子模拟器进一步扩展了 AI 应用的可扩展性，提高了化合物筛选的吞吐量和精度。

3、增强的分子模拟

变分量子特征求解器 (VQE) 和量子相位估计 (QPE) 等量子算法提高了分子模拟的精度和效率。这些方法在模拟蛋白质折叠和识别候选药物方面表现出色，大幅减少了过程中所需的时间和计算资源。量子计算能够提供高保真度的生物分子相互作用模拟，提供超越经典计算模型的认识边界。

4、量子生成模型的进展

量子增强型生成对抗网络 (GAN) 是分子设计领域的一项重大创新。这些模型通过缩短训练时间并提高准确性，能够生成更优的药物设计分子结构。上述进展使量子计算驱动的生成模型成为制药行业创新的变革性工具。

5、量子实现的挑战

尽管量子计算前景光明，但它仍面临着诸如量子比特稳定性、纠错和硬件

可扩展性等挑战。对高保真量子资源和全面真实世界数据集的访问有限，限制了其立即广泛应用。亟需开发强大的错误纠正技术并扩展数据集，以加速量子-经典混合系统的普及。

资料来源：

<https://nhsjs.com/2025/advancing-drug-discovery-with-quantum-computing-breaking-artificial-intelligence-barriers/>（发布时间：2025.5.10）

FeNNix-Bio1：用于高精度分子模拟的量子人工智能基础模型

2025 年 4 月，法国深度科技公司 Qubit Pharmaceuticals 与索邦大学近日共同发布了一款名为 FeNNix-Bio1 的量子人工智能（AI）基础模型。该模型能以前所未有的精准度和效率模拟分子行为，预计将大幅加速新药探索进程，并显著降低实验室研发成本，为癌症等复杂疾病的治疗带来新曙光。

这项合作成果标志着分子模拟技术的重大飞跃。与以往的模型不同，FeNNix-Bio1 能够精确模拟动态的分子交互作用，例如药物与靶点蛋白之间的共价键结合过程以及蛋白质自身的动态变化。这使得科学家能够在计算机中（in silico）设计和验证复杂的治疗方案，从而减少对昂贵且耗时的实体化学合成与实验的依赖。



索邦大学教授、理论化学实验室主任兼 Qubit Pharmaceuticals 联合创始人
科学总监让-菲利普·皮克马尔 (Jean-Philip Piquemal) 表示：“这种模拟方法将极大地降低药物发现阶段的成本。此模型的精准度媲美真实实验，让我们能快速、低成本地在虚拟环境中测试大量新想法，筛选出最优潜力分子后，再投入资源进行实验室验证。”

据悉，FeNNix-Bio1 的开发动用了来自法国国家高性能计算中心 (GENCI)、欧洲高性能计算共同计划 (EuroHPC) 以及美国阿贡国家实验室的庞大算力。研究团队基于数百万次精密的分子模拟，建立了全球最精确的分子化学数据库来训练该模型。通过学习这些基础的化学与物理定律，FeNNix-Bio1 能如堆叠乐高积木般重构生物分子，并理解它们之间的互动方式。

超越 AlphaFold，模拟动态生物世界

Google DeepMind 开发的 AlphaFold 在预测蛋白质静态结构方面取得了革命性成就，而 FeNNix-Bio1 则在此基础上更进一步。皮克马尔教授解释：“蛋白质并非静态不变，其结构会随时间演化，进而影响与药物的相互作用。FeNNix-Bio1 成功地模拟了这些动态效应。”此外，该模型也弥补了 AlphaFold 在精确模

拟药物候选物与蛋白质相互作用方面的不足。两者的结合，使得从预测新靶点的结构到发现能与之作用的药物，整个流程得以通过 AI 无缝衔接。

FeNNix-Bio1 最令人瞩目的能力之一是其对化学反应的建模，它能模拟化学键的生成与断裂，这是传统模拟软件难以企及的。这使其能直接应用于共价药物（如辉瑞的 Paxlovid 或杨森的 Ibrutinib）的设计，这类药物通过与靶点形成牢固的化学键来发挥作用。

应用前景广阔，引领全化学领域变革

FeNNix-Bio1 的影响力远不止于制药业。Qubit Pharmaceuticals 首席执行官罗伯特·马里诺（Robert Marino）表示：“我们的目标是攻克那些制药行业尚无解决方案的复杂疾病靶点。”该公司目前已有 7 个研发项目正在进行中，重点布局于肿瘤学和炎症领域。

由于其高度的通用性、速度与精度，该模型未来还可应用于更广泛的化学领域，包括工业酶的设计、海水淡化膜的优化、新一代电池开发以及加速绿色化学的创新进程。

更重要的是，FeNNix-Bio1 的成功也为量子 AI 的发展铺平了道路。通过结

合量子计算与机器学习，未来将能生成更优质的分子模拟数据。Piquemal 教授透露，团队已经开始利用量子数据来强化模型，这项被认为在 2035 年前难以实现的技术如今已见雏形。

FeNNix-Bio1 的问世，代表着分子设计、测试与验证的范式转移。随着 AI、高性能计算与量子计算的融合，一个自动化、高效率的分子发现时代正加速到来。

资料来源：<https://thequantuminsider.com/2025/05/20/sorbonne-university-and-qubit-pharmaceuticals-unveil-powerful-quantum-ai-model-for-medical-discovery/>（发布时间：2025.5.20）

破解混合量子经典模型架构瓶颈：贝叶斯优化指引分子生成新路径

2025 年 6 月，美国约翰霍普金斯大学（Johns Hopkins University）工程学院（Whiting School of Engineering）研究人员 Andrew Smith 和 Erhan Guven 在开放获取的预印本平台 arXiv 发表了题为《弥合量子与经典计算在药物设计中的鸿沟：改进分子生成的架构原则》的预印本论文。该论文旨在解决噪声中等规模量子（NISQ）设备上混合量子-经典机器学习模型架构不明确的问题。

作者系统地优化了分子发现中生成对抗网络（GANs）的量子-经典桥接架

构，采用了多目标贝叶斯优化方法。他们选择 GANs 作为框架，因为其已建立的经典和混合基准，这使得他们能够专注于混合架构本身进行分析。

他们的优化模型（BO-QGAN）在药物候选分数（DCS）上比先前的量子混合基准高出 2.27 倍，比经典基准高出 2.21 倍，同时参数减少了 60%以上。一个关键发现是，分层使用多个（3-4 个）浅层（4-8 量子比特）量子电路是更优的选择，而经典架构在达到最低容量后对灵敏度表现出较低的依赖性。

这项工作为混合模型提供了首个基于经验的架构指南。这对于更有效地将当前量子计算机整合到制药研究管线中至关重要，为以降低计算成本实现显著性能提升提供了实用路径。这种系统性优化，通过贝叶斯方法提供经验指导，直接解决了 NISQ 设备上混合模型有效性受限于架构设计原则不明确的问题。

优化后的 BO-QGAN 模型在性能上显著提升，同时参数更少，这直接意味着更高效、可能更准确的分子生成。具体的架构建议（分层使用多个浅层量子电路）为研究人员和开发人员提供了关键的实用指导，促使他们以更明智的方式设计混合系统，从而加速现有量子硬件在药物发现中的开发和有效利用，即使

在容错系统尚未普及的情况下。这推动了该领域从试错法向基于证据的混合模型设计转变。

资料来源：

<https://arxiv.org/html/2506.01177v1> (发布时间：2025.6.1)

量子计算供应商赋能跨界合作

D-Wave 与日本烟草公司合作，利用量子 AI 加速药物发现

2025 年 3 月 31 日，总部位于加州帕洛阿尔托的量子计算解决方案供应商 D-Wave 量子公司 (D-Wave Quantum Inc.) 近日宣布，其与日本烟草公司 (Japan Tobacco Inc., JT) 的制药部门成功完成了一项合作性概念验证项目。该项目旨在利用量子混合人工智能 (AI) 方法改进药物发现流程，有望加速新药研发进程。

在过去六个月中，D-Wave 的股价飙升超过 670%，显示出市场对其技术前景的高度关注。此次与 JT 的合作重点是将 D-Wave 的量子处理单元 (QPU) 集成到 JT 使用的人工智能框架中，以增强大型语言模型 (LLM) 的性能。

项目成果表明，与单纯使用经典计算方法相比，这种量子混合模型能够生

成更多有效的分子结构，并具有更高的“类药性”定量评估分数。通过这种量子辅助训练生成的分子展现出更低的能量分布，预示着一一条更为高效的药物发现路径。

JT 中央医药研究所首席科学官馆野胜博士对项目取得的积极成果表示兴奋，他指出：“量子混合 AI 系统生成的化合物比训练数据集本身更具‘类药性’，这标志着退火量子计算在药物发现应用领域取得了重大进展。”

D-Wave 首席执行官艾伦·巴拉茨博士则强调，量子计算有潜力为人工智能面临的计算挑战提供可扩展且高能效的解决方案。他认为，与 JT 的合作是量子计算增强 AI 能力、实现更高效、快速和节能的 AI 工作负载的典型范例。

继本次项目成功后，JT 的制药部门计划继续开发由量子 AI 驱动的药物发现技术，并将量子计算应用于分子设计。

资料来源：<https://au.investing.com/news/company-news/dwave-and-jt-complete-quantumai-drug-discovery-project-93CH-3757912>（发布时间：2025.3.31）

量子计算携手 AI 与超算开启药物研发新纪元

2025 年 8 月 8 日，由日本量子软件公司 QunaSys、Cortex Discovery 与弗劳

恩霍夫 ITWM 研究所高性能计算 (HPC) 部门联合发起的 QuEnAIS (量子增强 AI 合成器) 项目，近日获得欧盟 EUREKA 应用量子计划资助。该项目获丹麦创新基金与德国联邦教研部 (BMBF) 联合支持，致力于构建融合人工智能、量子计算与 HPC 技术的创新计算流程，以突破传统药物研发的效率极限。

1、技术突破：三核驱动破解计算难题

QuEnAIS 项目将构建包含三大核心组件的先进计算平台：

基于图变换器的分子结构生成器：通过 AI 技术探索巨大化学空间，高效设计候选分子；量子计算专用评分函数：利用量子算法精确预测分子结合亲和力，精度超越经典方法；量子-经典中间件接口：实现量子算法与 HPC 基础设施的无缝协同运算。

该技术方案通过量子并行性加速电子结构计算，结合机器学习实现分子模式识别，可在保证计算可行性的同时，以前所未有的精度模拟复杂生物分子相互作用。

2、行业痛点：传统方法的局限与破局

经典药物研发方法面临双重挑战：分子动力学模拟难以捕捉化学反应性，

而量子力学方法对大型生物分子体系计算成本过高。QuEnAIS 通过量子计算模拟量子化学系统的独特优势，结合双分辨率量子-经典描述方法，精准建模蛋白质-配体相互作用与反应机制，为药物有效性评估提供新范式。

3、优势互补：跨国团队凝聚专业力量

QunaSys：提供量子相位估计与张量超压缩等先进量子算法，大幅降低电子结构计算复杂度；

Cortex Discovery：依托图神经网络与变换器架构，深耕药物临床前研究的深度学习技术；

弗劳恩霍夫 HPC 部门：专注 QM/MM 混合实施方案，优化大规模模拟的能效计算与混合 workflows。

4、未来展望：推动量子计算实用化进程

项目周期为 2025 年 8 月至 2027 年 7 月，预期成果将显著提升量子计算、AI 与药物研发领域的交叉创新能力，助力丹麦与德国实现国家量子战略目标。

资料来源：

https://qunasys.com/news/posts/quenais_e/（发布时间：2025.8.8）

丹麦 Kvantify 公司将利用 Gefion AI 加速量子化学与药物发现

2025 年 5 月 13 日，丹麦人工智能创新中心（DCAI）近日宣布，丹麦量子软件先驱 Kvantify 公司将利用其 AI 超级计算机 Gefion，进行大规模的量子计算机模拟。尽管 Gefion 此前已支持过多项量子计算研究计划，但 Kvantify 是首家利用其强大性能的专业量子软件公司。

此次合作中，Kvantify 将借助 Gefion 的 GPU 加速基础设施，运行并扩展其专为化学问题优化的新型模拟器。Kvantify 的软件包含专有算法，这对于精确建模药物设计和酶工程中涉及的分子系统及反应路径至关重要。

Kvantify 工程主管卡斯珀·基尔克加德（Casper Kirkegaard）表示：“Gefion 为 AI 提供了百亿亿次级的卓越性能，而其专用硬件恰好也非常适合模拟量子计算。这使我们能够在今天就能模拟未来的量子计算机，我们目前正计划将其用于模拟像青霉素这样具有行业意义的分子，模拟规模将达到数百个量子比特。”

此次合作也凸显了 Gefion 作为新兴量子研发生态系统基础设施骨干的更广泛作用。随着量子技术的不断发展，Gefion 提供了模拟、测试和优化量子算法

所需的强大算力，使研究人员能够加速在材料科学、优化问题等多个领域的突破。

丹麦人工智能创新中心首席执行官娜迪亚·卡尔斯滕（Nadia Carlsten）表示：“Gefion 的建立旨在突破 AI 基础设施的可能性边界，而 Kvantify 的实践则展示了同样的 AI 硬件如何在量子计算领域发挥重要作用。他们的用例表明，量子软件公司在当前阶段就能利用专为规模化和专业化设计的经典计算设施，切实推进其工作。”

Kvantify 首席执行官汉斯·亨里克·克努森（Hans Henrik Knudsen）补充道：“模拟量子计算机是释放其真实世界潜力的基础步骤。Gefion 让我们能够以前所未有的规模和速度进行这项工作，这将直接加速量子算法的开发，并为未来在科学技术领域的应用开辟新的可能性。”

Kvantify 与 Gefion 的合作进一步证明了这台 AI 超级计算机的通用性，其应用已超越传统的机器学习，延伸至量子模拟、分子建模和下一代高性能计算（HPC）工作流程等领域。这也反映出一个更广泛的趋势：经典计算基础设施与前沿量子研究正在加速融合，以共同解决当今最复杂的科学难题。

资料来源：<https://thequantuminsider.com/2025/05/13/kvantify-will-use-gefions-ai-supercomputer-for-quantum-chemistry-and-drug-discovery/>（发布时间：2025.5.13）

医药行业内部加速整合与布局

CAS 与克利夫兰诊所携手，融合 AI 与量子计算加速临床研究

2025 年 4 月 7 日，美国化学会（American Chemical Society）旗下负责科学内容与知识管理的部门 CAS，与全球知名的学术健康系统克利夫兰诊所（Cleveland Clinic）近日宣布达成一项战略合作计划。双方将整合各自独特的专业知识、技术平台和数据能力，共同推动临床研究的加速发展。

在近日举办的“克利夫兰发现与创新论坛”上，这两家全球性机构公布了合作的细节。首个战略重点领域将聚焦于推进健康、福祉及健康老龄化的相关研究。鉴于阿尔茨海默病的复杂性导致目前仍相对缺乏有效的、能够改变病程的治疗方法，双方正在探讨的首批项目将重点关注脑健康领域的药物发现。

克利夫兰诊所首席研究信息官 Lara Jehi 博士表示：“这次独特的合作，将克利夫兰诊所在生物医学研究和临床护理方面的专业知识与 CAS 在科学数据和技术领域的领导地位相结合。通过优势互补，我们旨在创建高质量的医疗数据，

验证科学模型，并整合研究成果，最终提升患者护理水平和慢性病管理能力。”

此次合作将充分利用 CAS 内容合集™（CAS Content Collection™）这一全球最全面的科学信息资源，并结合包括新型人工智能模型和量子计算在内的前沿技术。作为与 IBM 合作的一部分，克利夫兰诊所内安置有全球首台完全专用于医疗保健研究的量子计算机——IBM Quantum System One。

合作双方计划首先从阿尔茨海默病入手，构建并训练针对特定疾病的模型，以推进预防性和预测性策略的开发，并计划在未来将这些成果转化应用于其他慢性病领域。

CAS 总裁曼努埃尔·古兹曼（Manuel Guzman）表示：“CAS 很高兴能与以卓越研究和创新闻名的克利夫兰诊所合作。我们认识到，一项实验室的科学发现平均需要 17 年才能转化为获批的检测或疗法，我们相信通过共同努力，能够缩短这一差距。在我们通过科学创新改善人类生活的共同目标引领下，我们将结合高质量内容、专业知识和先进技术，探索健康老龄化的新路径，并创造积极的社会和经济影响。”

据悉，该计划还将受益于“克利夫兰创新区”的支持。该项目联合了俄亥俄州



政府、JobsOhio 以及克利夫兰的医疗保健和高等教育机构，旨在创造就业、加速研究并培养未来的劳动力。

资料来源：<https://newsroom.clevelandclinic.org/2025/04/07/cas-and-cleveland-clinic-collaborate-to-accelerate-research-through-advanced-ai-and-quantum-computing> (发布时间：2025.4.7)

礼来公司与 Creyon 达成超 10 亿美元 RNA 药物协议

2025 年 5 月 12 日，美国制药巨头礼来公司 (Eli Lilly) 宣布布局量子化学领域，以加速新一代 RNA 药物的发现进程。据行业媒体报道，礼来已与生物技术公司 Creyon Bio 签署了一项研究与授权协议，若合作项目最终成功商业化，该交易总价值可能超过 10 亿美元。

根据协议条款，礼来将向 Creyon Bio 支付 1300 万美元的前期现金和股权投资。此次合作旨在利用 Creyon 公司基于人工智能 (AI) 的平台，设计和优化靶向特定 RNA 链的创新疗法。

Creyon Bio 公司董事长兼首席执行官 Serge Messerlian 在《药物靶点评论》的报道中表示：“我们很高兴能与礼来合作，共同推进我们通过 AI 设计的寡核

苷酸疗法，目标是为患者带来更安全、更有效的治疗方案。这次合作对 Creyon 而言是一个重要的里程碑，我们将努力把针对罕见病和常见病的 RNA 靶向疗法管线推向临床。”

以量子化学为 AI 引擎基础

与传统的实验室试错性研发模式不同，Creyon 平台的核心优势在于其 AI 引擎建立在量子化学的基础之上。该平台能够在量子层面分析药物分子与其 RNA 靶点之间的物理和化学相互作用，从而更精确地预测候选疗法的体内行为。这有望显著缩短针对多种疾病的药物发现与优化时间。

Creyon 的联合创始人兼首席创新官 Swagatam Mukhopadhyay 强调了公司的技术优势：“Creyon 已经构建了业界首个也是唯一一个寡核苷酸工程引擎，它利用量子化学原理来高效设计 RNA 靶向疗法，而非依赖传统的试错筛选过程，从而极大地缩短了研发周期。”

超越传统试错，迈向精准设计

通过对分子结构进行量子级别的计算，Creyon 的系统能够在更少的物理实验下对候选药物进行微调和优化。这种精准设计有望提高研发效率，并降低药

物在临床试验中的失败率。

根据协议，礼来将获得由此次合作产生的治疗项目的独家主导权，负责将候选药物推进至后期研究和临床开发阶段，并最终处理成功产品的全球商业化事宜。

此次交易也反映出市场对 RNA 疗法，特别是利用寡核苷酸（合成的 RNA 或 DNA 短链）来调控基因表达的疗法，兴趣日益浓厚。尽管该领域已有数款药物上市，但其在传统小分子和生物制剂难以应对的疾病领域，仍有巨大的潜力尚未被开发。

此次合作标志着量子化学在药物发现中的角色迈入了一个新的里程碑——从长期应用于学术界的理论建模工具，转变为商业化研发管线中的实用工具。这反映出在计算能力和算法日益复杂的推动下，药物研发正朝着精准设计的方向加速转变。

目前，两家公司尚未透露合作将具体针对哪些疾病领域，但协议的广泛范围表明，未来将有多个候选药物得到评估。

资料来源：<https://thequantuminsider.com/2025/05/12/eli-lilly-bets-on-quantum-chemistry-in-1-billion-rna-drug-deal-with-creyon/>（发布时间：2025.5.12）



地址：上海市永福路 265 号
邮编：200031
编辑：李春霞、王涛
责编：赵晓勤
编审：林鹤
电话：021-64455555
邮件：istis@libnet.sh.cn
网址：www.istis.sh.cn