



## 星球永續健康線上直播

### AI 藥物研發產業 (3)

#### 人工智慧高效藥物結合預測

2026 年 2 月 11 日

藥物研發近年逐步導入人工智慧 (AI) 流程，成為輔助新藥開發的重要工具。藥物研發過程中，藥物與標靶之間是否能產生作用，以及其結合強度的高低以及專一性不僅決定了是否值得進一步投入實驗與臨床資源，於臨床運用階段也影響投藥頻率、藥物療效與以及是否與其他藥物具有交互作用與影響其他器官系統相關之藥物安全性。本週我們將探討新藥研發中藥物 - 標靶結合的智慧預測，並介紹相關 AI 預測方法於藥物研發應用發展。

#### 星球健康新知

##### 中東地緣衝突人道風險：「風雨如晦」

中東局勢持續緊繃，人道與地緣政治風險交織升高。以色列於本週重新開放連接加薩與埃及、被視為對外生命線的拉法邊境關卡。該口岸自 2024 年 5 月以色列軍方控制加薩一側後幾乎全面關閉，此次重啟原屬美國總統川普所提出 20 點以哈停火方案第一階段內容之一，但實際執行被以色列政府與哈瑪斯交還最後一名以色列人質遺體相互連結，直到上週遺體返還後才正式放行。關卡名義開放後，實際通行規模仍極為有限，首日僅 5 名病患與 7 名陪同者出境，遠低於原先宣稱的每日 50 人上限，並出現多人因安全審查滯留埃及一側的情形。加薩醫療體系與世界衛生組織指出，目前約有 2 萬名病患與傷者等待出境治療，聯合國亦評估，自 2024 年 5 月以來醫療撤離長期中斷，等待名單已累積逾 18,500 人，其中包含大量兒童。中東多國與伊斯蘭國家在此背景下呼籲以色列切實履行停火承諾，認為持續的軍事行動與高度限縮的通行政策，正削弱政治降溫與人道安排的可行性，也使拉法口岸的象徵性意義遠大於其實際效能。另一方面，美國與伊朗於 2026 年 2 月初選擇在阿曼重啟核議題相關會談，試圖在高度對立的區域情勢中維持最低限度的對話空間。會談原曾考慮於伊斯坦堡進行，並納入多邊與安全



議題，但最終因伊朗堅持限縮為美伊雙邊、且僅聚焦核計畫而改至阿曼。伊朗外交部長阿拉奇證實會談時程後，美方仍持保留態度，川普在會前對伊朗最高領袖佩什基安發出強硬警告。美國官員與前外交人員普遍對談判成果不抱高度期待，而國務卿盧比歐亦公開表示，華府希望議題能擴及彈道飛彈、區域代理勢力與人權狀況。伊朗方面，改革派總統佩什基安表示已指示外交部追求對等談判，被視為獲得最高領袖默許的訊號，但同時海上與軍事摩擦仍持續升高。整體而言，美伊阿曼會談被視為一項風險控管式接觸，其目的在於避免衝突失控，而非短期內達成結構性突破，對中東地緣穩定的影響仍充滿不確定性。

### 美中全球戰略經貿互動：「角力未休」

2026年2月4日，美國總統川普與中國國家主席習近平進行電話通話，美方將其形容為「非常正面」且「內容廣泛」，並被多家國際媒體視為在高度緊張的國際環境下，美中透過領導人層級直接溝通以管控分歧與降低誤判風險的重要安排。川普表示，雙方討論議題橫跨貿易、能源、台灣、伊朗情勢，以及俄羅斯對烏克蘭戰爭等多項焦點，顯示這通電話同時觸及雙邊經貿競爭與多個牽動區域安全與全球秩序的地緣政治議題。在美方的敘事中，川普特別強調他與習近平之間的私人互動關係，稱兩人的關係「極為良好」，並指出雙方都理解維持此一關係對於穩定美中互動的重要性；他也公開提到自己預計於4月訪問中國，將其視為延續高層接觸與對話的安排，延續其一貫以領導人個人層次互信向外界傳達「關係仍可控、仍能溝通」的論述策略。此一通話的時序同樣引人關注，因其發生在習近平稍早與俄羅斯總統普丁通話後不久，中俄領導人在當日對話中以「國際局勢動盪」為背景，表態將進一步強化雙邊關係，使川習通話自然被放入更寬廣的戰略框架中觀察，並引發外界對中國是否同時在美俄之間進行平衡互動與訊號管理的討論。伊朗議題是川習通話重要項目之一。美伊關係處於高度緊張狀態，伊朗在上個月因全國性抗議活動遭強力鎮壓而引發國際關切，川普政府同時要求伊朗在核計畫等議題上做出讓步，並主張美方先前在以色列與伊朗衝突期間轟炸伊朗三處核設施，已對其核能力造成實質影響；川普也重申若德黑蘭未就多項議題讓步，美方不排除採取更



強硬作為。美國在政策層面加大對伊朗的經濟與外交施壓，白宮表示美國特使將與伊朗官員接觸，而川普政府已宣布，對任何與伊朗進行商業往來的國家課徵 25% 的進口關稅，藉此迫使各國與德黑蘭拉開距離。儘管多年制裁使伊朗在國際上相對孤立，相關報導仍指出伊朗在 2024 年國際貿易總額接近 1,250 億美元，其中與中國的貿易額高達 320 億美元，顯示中國在伊朗對外經濟關係中仍居關鍵位置，也使美國試圖說服北京配合孤立伊朗的政策，必然面臨實務上的侷限與成本計算。相較於川普偏向個人化、成果導向的表述，中國官方對此次通話的說明延續制度性與原則性語調，強調雙方保持「良好溝通」，並提及未來一年雙方將主辦的重要國際峰會，以及兩位領導人可能再度會面的機會，但未提及川普所公開談到的 4 月訪中安排，呈現出雙方在對外訊息管理上各自選擇敘事重點的差異。台灣議題在中方表述中仍被置於優先位置，中國官方明確指出台灣問題是中美關係中最重要且最敏感的議題之一，重申不會放棄長期統一目標，強調「台灣絕不允許與中國分離」，並要求美方在對台軍售上保持高度審慎；此一立場也與美國於 2025 年 12 月核准規模龐大的對台軍售案形成對照，凸顯台灣始終是美中互動中難以迴避的核心結構性矛盾。再往上拉到宏觀層次，相關報導亦指出川習通話與全球核武與安全架構的變動相互交織，隨著美俄之間最後一項核武管制協議即將到期，川普曾主張未來任何新的核武限制安排應納入中國，以維持戰略穩定，顯示美中高層互動同時牽動更廣泛的全球安全議程；同日川普政府在華盛頓召集歐洲、亞洲與非洲多國討論重建關鍵礦物供應鏈，美國副總統范斯強調關鍵礦物對高科技產業與經濟成長的重要性，並直指中國在相關市場的主導地位，進一步呈現美國一方面維持與中國的高層溝通，另一方面仍推動降低對中國依賴的結構性調整。

普丁於同日與習近平也透過視訊舉行俄中高層會談，會談重點涵蓋俄中經貿合作深化、重大戰略議題協調，以及雙方各自與美國關係的發展方向。普丁在開場談話中指出，全球局勢日益動盪，在此背景下俄中於外交政策上的密切協調，已成為國際體系中不可忽視的穩定力量，並重申俄方支持雙方在維護國家主權、安全、社會經濟福祉，以及自主選擇發展道路等共同目標上的一致立場；習近平則表示雙方將就雙邊關係的中長期規



劃與多項重大戰略議題深入交換意見，呼籲把握歷史契機，持續推進全面戰略協作夥伴關係。報導並指出，俄中通話的國際背景，正值多位西方領導人近期密集與北京互動之際，歐洲國家在烏克蘭衝突持續下長期要求中國減少對俄支持，但在西方制裁壓力下北京已成為莫斯科最重要的貿易夥伴之一；同時英國、加拿大領導人相繼訪中，德國總理亦預計 2 月成行，而部分美國傳統盟友因與川普在關稅與外交議題上出現摩擦而開始評估加強與中國合作的可能性，使俄中高層互動在權力重新排列的情境下更具戰略指向。就合作內容而言，普丁高度評價俄中具「戰略性質」的能源合作，並點出核能和平利用、高科技產業、工業製造與太空研究等領域的合作進展，也肯定中國對俄羅斯公民開放免簽入境並指出俄方採取對等措施；習近平則強調過去一年雙方在其領導下將兩國關係推向新階段，貿易與經濟往來穩定推進，未來將透過更頻繁的高層互訪與務實合作，確保雙邊關係在更深層次的戰略協作架構下持續發展並承擔更積極的大國責任。雙方亦就與美國關係交換看法，俄羅斯總統外交顧問烏沙科夫轉述指出兩人在多項涉及核心利益的議題上立場相近，主張依國際法與聯合國憲章所揭示之平等互利原則推動合作，並觸及美方提出的「和平委員會」構想、美俄核武管制協議到期情勢，以及中東、伊朗、委內瑞拉與古巴等地區議題；普丁重申支持「一個中國原則」，並表示在新戰略環境下俄方將以審慎且負責態度，對談判與維護戰略穩定保持開放，從而呈現俄中正透過高層密集溝通，在多重壓力與秩序重組的情境中鞏固長期戰略夥伴定位。

隨著川普第二任期內美國陸續退出多個聯合國機構與國際多邊組織，中國同步擴大外交布局並在特定領域尋求更高能見度與影響力，分析指出美國的制度性退場為中國提供了調整並影響部分全球秩序運作方式的空間。2026 年 1 月美國宣布退出多達 66 個多邊組織的同一個月，中國在北京接待加拿大、芬蘭與英國領導人，習近平於 1 月 29 日會晤英國首相施凱爾時指出「國際秩序正承受巨大壓力」，並呼籲打造「平等且有序的多極世界」，使中國以「穩定力量」自我定位的外交話語，在美國淡出多邊體系的背景下更具現實操作性。相關分析也指出，川普政府的退出特別集中在氣候、勞工與移民等領域，並將其視為不符美國利益的「覺醒派」議程；相對地，中國仍留在多數相關組



織並獲得更多國際社會正面評價，加上部分調查顯示多國受訪者預期中國未來十年全球影響力上升，進一步強化國際社會對權力結構變化的感受。中美權力差距正在快速縮小，美國仍最強但中國追趕速度極快，中國透過全球南方布局與一帶一路倡議累積追隨者與外部支撐，但也因財務風險與夥伴國債務疑慮而調整投資策略，從大型資本密集型計畫轉向更小、更精準的投資模式。在安全與地緣政治層面，中國與俄羅斯及北韓的互動被視為高度策略性且偏向交易取向，其核心目標在於削弱美國在中國視為戰略關鍵區域，特別是亞太地區的影響力。

### 美國啟動全球戰略礦產儲備：「未雨綢繆」

美國總統川普於 2026 年 2 月 2 日正式啟動「Project Vault 金庫計畫」，初期投入約 120 億美元，建立國家級關鍵礦產戰略儲備體系，以強化供應鏈安全並降低對單一來源的依賴。美國總統 川普 於 2026 年 2 月 2 日正式啟動「Project Vault 金庫計畫」，初期規模約 120 億美元，透過美國進出口銀行提供 100 億美元長期貸款與約 16.7 億美元民間資本，建立國家級關鍵礦產戰略儲備體系。此計畫鎖定稀土、鋰、鈷、鎳與石墨等對國防、高科技與能源轉型至關重要的原料，目標在於降低美國對中國高度集中的礦產供應依賴，提升供應鏈韌性與國家安全。金庫計畫除在美國境內設置儲備與加工設施，也結合《國防生產法》與公私合夥機制，由政府初期扮演穩定需求的關鍵角色，以加速本土產能擴充。在國際層面該計畫被設計為多邊合作架構，美國內政部長 道格·伯古姆 指出，預計將有 11 個國家加入，涵蓋澳洲、日本、印度、南韓、加拿大及多個歐洲國家，並與既有的礦產安全夥伴關係相互銜接。美國財政部長 史考特·貝森特 亦已與多國部長級官員協調合作方向，同時拓展與烏克蘭、沙烏地阿拉伯等國的雙邊合作。在產業端，通用汽車、波音、GE Vernova 等多家大型企業參與其中，形成跨政府、盟友與企業的供應鏈安全聯盟。整體而言，Project Vault 象徵美國在關鍵礦產政策上由市場依賴轉向戰略性制度布局，試圖以長期、結構化方式重塑全球供應鏈秩序。

### 美國國內外措施強化經貿韌性：「進退權衡」

美國與印度在 2026 年 2 月初達成暫時性的貿易緩和協議，美方下調對印度商品



關稅並撤除因俄油問題加徵的懲罰性關稅，換取印度在能源採購上的政策調整，顯示美國與印度間經濟關係緩和。印度對停止進口俄羅斯原油與大規模採購美國能源的承諾仍保持模糊，使協議的實質內容與長期穩定性存疑。短期內，關稅鬆動改善了市場情緒，但印度高度依賴俄油的結構性問題，使能源轉向的可行性仍受質疑。同時，川普提名華許出任聯準會主席，對全球金融市場產生顯著影響。市場將其視為重視通膨、政策紀律較強的人選，美元走強、風險資產與貴金屬大幅回落。然而，華許過往在金融危機期間偏重通膨風險的立場，引發外界對其未來政策平衡性的討論。整體而言，這兩項發展分別在貿易與貨幣政策層面重塑市場預期，但其長期效果仍有待後續政策落實與經濟情勢驗證。

#### **聯合國財務緊縮影響世衛援助能力：「捉襟見肘」**

聯合國 正面臨嚴重的結構性財務危機，秘書長 安東尼奧·古特雷斯 警告，因多個會員國未履行繳納評定會費的法定義務，聯合國現金流可能在短期內枯竭，已實質衝擊其核心任務與日常運作，並迫使組織採取緊急節流措施。此一危機與最大出資國美國的政策轉向密切相關，也透過專門機構向外擴散，對全球公共財供給形成連動風險。其中，聯合國旗下的 世界衛生組織 明確警示，國際援助削減與長期財務缺口正在削弱全球衛生體系穩定性，在疫情威脅、抗藥性感染與人力短缺同時升高的情況下，資金不足已影響疫情整備、緊急應變與基本衛生服務維持。隨著美國正式退出世界衛生組織並終止資金挹注，全球健康治理更趨碎片化，增加跨境健康風險外溢的可能性。整體而言，若會員國未能即時補繳會費或推動制度改革，聯合國及其專門機構支撐多邊體系與全球健康安全的能力，將面臨嚴峻考驗。

#### **俄烏戰爭黑土危機：「傷筋動本」**

自 2022 年俄羅斯入侵以來，烏克蘭戰爭已對其具全球重要性的黑土系統造成嚴重且持續性的退化。烏克蘭黑土約占全球最肥沃黑土總量的近四分之一，其高有機碳含量、穩定團粒結構與高度生物複雜性，源於長時間特定氣候與生態條件的累積，一旦破壞即難以恢復，因此科學導向的土壤復育應被視為戰後重建的核心支柱。現代戰爭透過壕溝



開挖、防禦工事建設與重型軍用車輛通行，造成廣泛的物理擾動；同時，爆炸物、燃料與重金屬污染，以及地雷與未爆彈藥的殘留，大幅提升土壤安全風險。由於污染與破壞在空間上高度異質，傳統土壤調查與整治方法難以有效應對。此外，大尺度水文事件（如卡霍夫卡水壩潰決）進一步加劇鹽化、侵蝕與地下水動態改變等對農業系統形成長期壓力。黑土退化不僅限制戰後農業復原，也削弱土壤碳儲存能力，對全球糧食安全與氣候調適產生連鎖影響。作者因此主張，戰後重建應優先推動具國際支持的全國性土壤盤點，整合高解析度遙測、地面調查與長期監測，並以自然為本、低投入的修復策略，加速恢復土壤結構、生物功能與農業生產力。

### 軟式矽晶 AI 邊緣運算突破：「另闢蹊徑」

當前多數人工智慧系統依賴高效能但高耗能的運算平台，然而穿戴式、植入式與物聯網裝置多受限於成本、功耗與機械可彎曲性等需求，難以採用傳統架構。這類極端邊緣裝置需在本地端完成即時資料處理與初步推論，使低功耗、可彎折且具基本智慧運算能力的晶片成為長期技術瓶頸。Yan 等人提出的突破性研究，首次將可執行人工智慧任務的晶片直接製作於可撓式基板上。研究團隊利用低溫多晶矽製程，使電晶體能在低溫下製作並與柔性材料整合，兼顧低成本、低功耗與高機械彈性。透過製程、電路與演算法的協同設計，該晶片成功執行神經網路與資料分類任務，顯著拓展柔性電子的應用範圍。其核心創新在於採用數位型記憶體內運算架構，將運算直接嵌入記憶體中，大幅降低資料搬移所造成的能耗與延遲，並有效緩解記憶體牆問題。相較類比實作，數位設計進一步提升運算穩定性與系統可擴展性。實驗顯示，該晶片即使在反覆彎折與捲曲條件下仍能穩定運作，經四萬次彎折後運算效能未顯著下降。研究並示範其應用於穿戴式生理監測，可於本地端即時處理多項生理訊號，展現其在健康照護與極端邊緣應用上的潛力。作者亦指出，目前仍受限於功耗與續航時間，未來可透過低漏電材料、電路節能設計與元件微縮進一步改善能源效率。隨著製程良率與量產條件成熟，該技術具備進入實際商業化應用的潛力。

### AI 專家能力極限測試：「尚待火候」



隨著前沿模型在大量資料與既有題庫上高度訓練，傳統基準測試逐漸失去鑑別能力，難以區分模型是否真正具備高層次推理，而僅反映資訊搜尋與模式對齊能力。作者將此現象稱為「基準測試飽和」，並指出在模型可即時存取網路資訊後更加嚴重。為回應此問題，研究團隊提出 Humanity's Last Exam (HLE)，以專家層級問答為評測目標。題目涵蓋數學、自然科學、工程與人工智慧等多個領域，需具備研究所等級的專業訓練，並由來自五十國的專家設計與多階段審核，以確保難度與原創性，同時保留未公開題庫以避免過度擬合。測試結果顯示，即使是當代最先進的模型，在 HLE 上的表現仍明顯低於其在傳統 benchmark 中的成績。雖然新一代模型已有進步，但整體結果顯示，穩定且可靠的專家層級推理能力仍未被充分掌握。作者亦指出 HLE 的限制。由於題目需可自動評分，難以涵蓋研究設計、問題重構與論證等開放式專業能力，人文與社會科學題目比例也相對偏低。這凸顯專家能力不僅在於答題正確性，更包含對問題品質、不確定性與是否值得作答的判斷。HLE 並非終極評測，而是推動評測典範更新的過渡工具。未來若要真正評估人工智慧是否能成為人類知識探索的思考夥伴，仍需超越問答形式，納入問題生成、長時間推理與判斷能力。

### 生技領域地緣競爭：「競逐白熱」

全球生命科學版圖正快速重組，過去美國憑藉長期高額科研投入與制度優勢，在生醫與製藥創新中居於主導地位；然而近二十年來，這種優勢逐步鬆動，特別是在醫學與生技製藥領域，中國正迅速縮小差距。中國的崛起並非偶然，而是來自國家層級的系統性布局。透過五年計畫、法規與審查制度改革，以及臨床試驗與藥品審批流程的加速，中國成功降低研發成本並縮短時程，使新藥研發數量快速成長，逐步接近甚至追平美國。龐大的病患族群、密集的試驗能量與回流的國際人才，進一步放大其速度與規模優勢。相較之下，美國近年政策重心偏向製造回流，卻未同步強化基礎生醫研究投資，引發對長期創新能力的疑慮。在專利到期壓力下，歐美藥廠愈來愈多轉向中國尋找創新分子與合作機會，使中國生技產業由代工與學名藥，轉型為具創新能力的研發來源。地緣政治緊張使這一趨勢更為複雜。美國一方面試圖降低供應鏈依賴，另一方面卻在藥物創新上



愈發難以脫鉤，數據治理與監管問題隨之浮現。整體而言，全球生命科學正走向多極化競爭，美國若欲維持影響力，勢必需重新思考長期科研投入、國際合作與人才流動的策略。

### 新藥研發藥物-標靶結合智慧預測

《睡人(Awakenings)》描寫嗜睡性腦炎後遺症的電影，由羅賓·威廉斯與勞勃·狄尼洛主演，其劇本改編自神經科醫師 Oliver Sacks 於 1973 年的真實臨床觀察。影片以患者 Leonard 的生命歷程為主軸，呈現疾病如何逐步改變一個原本活潑、學習表現正常的孩子。Leonard 在童年時期感染不明病毒後，罹患嗜睡性腦炎，腦部神經功能逐漸受損。他開始出現動作遲緩與僵直，書寫能力明顯退化，筆跡無法維持在固定位置，彷彿身體在關鍵時刻「凍結」下來。隨著病情惡化，他的學業表現急遽下降，並陸續出現顫抖、意識障礙與長期昏迷，最終被轉送至慢性照護機構。在外表近似植物人狀態的背後，Leonard 是否仍保有意識，當時無人能確定。他的母親長年守候在照護機構中，只盼有一天，兒子能再次清醒，叫她一聲「媽媽」。醫療史上曾發生過這樣的事件。20 世紀初，一場不明病毒的流行，造成大量患者出現嚴重的腦神經發炎，如同 COVID-19 等病毒感染後影發之腦病變或免疫失衡造成廣泛神經後遺症。當時許多倖存者雖於急性期後康復但後續因長期神經功能受損影響意識與生活機能須居住於慢性照護機構，病患外表看起來彷彿失去意識長期臥床。1969 年，神經內科醫師賽爾前往紐約布朗克斯的一家慢性醫院任職。當時，醫療界普遍將這些患者視為植物狀態，認為他們已不具備意識。然而，賽爾醫師在日常照護中逐漸注意到一些異常現象：這些病人對特定刺激仍會出現細微反應，有些會對音樂產生反應，有些在球被拋向他們時，竟能準確地伸手接住，眼鏡掉落時誘發抓握動作。其他醫療人員多半將這些行為解釋為單純的反射反應，但賽爾醫師對此產生質疑。因為「接球」並非單一反射動作，而需要視覺輸入、空間判斷與動作協調，這樣的行為是否意味著患者仍保有某種程度的內在意識？當他向院內主管提出這個疑問時遭到嘲諷，認為這樣的動作不足以被稱為「意識的表現」。即便如此，賽爾醫師並未放棄。他嘗試透過字母拼板，引導患者進行更具目的性的回應，並成功引出 Leonard



的反應。這使他開始認真思考一個關鍵問題：這些患者是否其實仍保有清醒的意識，只是因為運動功能嚴重受限，而無法將意識表達出來。當時新藥物分子 L-DOPA 被開發出來，原本是為了治療巴金森氏症而設計，後來也成為西方醫學中治療巴金森氏症的重要用藥。賽爾醫師在臨床觀察中提出了一個關鍵的推論：典型的巴金森氏症以顫抖為主要表現，而他所照顧的這些患者，卻呈現出截然不同的狀態，他們幾乎不動，身體長時間僵直，彷彿被「鎖住」一般。從神經病理的角度來看，這些患者腦部所出現的細微病變，與巴金森氏症其實高度相似。於是，賽爾醫師向一位參與 L-DOPA 合成的化學家提出了一個大膽的問題：既然這個新合成的化合物對巴金森氏症如此有效，是否也有可能為這些長期被視為「無意識」的患者帶來轉機？化學家坦言，自己只是負責分子設計與合成，對臨床治療並沒有發言權；而醫師則站在病床旁，看見的是一群尚未被理解的患者。正是在這樣的交會之下，臨床觀察與化學合成開始真正結合，形成後來所熟知的生物化學與轉譯醫學，也為創新藥物分子帶來實際進入人體、改變生命的可能性。在多次嘗試之後，賽爾醫師證實了 L-DOPA 對患者能產生明顯的臨床改善。Leonard 在接受治療後，他第一次能夠清楚地回應外界，甚至重新與母親相擁，這對長期被視為「沉睡者」的患者與家屬而言，是極為震撼的轉變。然而，真正的困難隨之而來。由於這是一種前所未見的疾病狀態，L-DOPA 的適當劑量完全沒有既有經驗可循。藥物本身是一把雙面刃，劑量不足可能無效，劑量過高則可能引發副作用，甚至造成不可逆的傷害。賽爾醫師最初以相對保守的劑量進行治療，例如 200 毫克時，患者幾乎沒有反應；直到劑量逐步提高至約 1000 毫克，臨床改善才明顯出現。但療效並未因此穩定下來。隨著治療時間拉長，不僅 Leonard，其他接受治療的患者也陸續出現病情反覆與療效減弱的情形。這使賽爾醫師意識到，藥物效果並非一成不變，而是會隨著神經系統的反應動態改變。在當時沒有 AI、也缺乏精密藥物動力學模型的情況下，只能依靠反覆試驗與臨床經驗，不斷調整劑量，試圖在療效與副作用之間取得平衡。最終，這些治療多半只能帶來短暫的甦醒。患者在一段時間內恢復動作與情感表達，之後又逐漸回到僵直與沉睡的狀態。Leonard 在清醒後曾形容，那段長時間的沉睡對他而言就像一場夢，他並未感受到明顯



的痛苦。這段經歷，也突顯了藥物與神經系統之間複雜而脆弱的互動關係。

L-DOPA 是一個非常典型的例子，賽爾醫師必須反覆嘗試不同劑量，才能找到暫時有效的治療方式，這正是藥物與標靶之間的親和力問題，在什麼濃度之下，藥物才能產生足夠的結合效果，同時又不至於引發副作用。進一步來看，這不只牽涉到藥物與標靶的結合強度，還包含藥物在體內的代謝動力學，以及不同病人對藥物反應的差異。這些因素在當時只能透過臨床經驗不斷試錯，但在今天，正是 AI 可以介入的關鍵環節。因此，AI 藥物研發流程是一整套從前期藥物發現開始的系統性架構。從標靶的識別與篩選、分子的生成與設計，到後續對藥效分子特性的評估，AI 可以協助預測藥物的化學性質、藥物-標靶交互作用，以及潛在的結合能力與藥效表現。同時，化學性質仍然是不可忽視的核心。因為在實際臨床情境中，病人往往同時使用多種藥物，這就牽涉到藥物-藥物之間的交互作用，以及藥物是否會在不同標靶、不同受體蛋白之間產生非預期的影響。若沒有精準的評估工具，就難以全面理解藥物在各個受體與蛋白質層級上的結合情形。

在新藥研發過程中，藥物是否能與特定生物標靶產生有效作用，不僅影響治療效果，也關係到對正常組織的安全性。因此，現代治療策略逐漸從非選擇性的化學治療，轉向強調分子層級專一性的標靶治療。標靶治療的前提，在於腫瘤細胞是否表現出可被藥物辨識與結合的分子標的。若特定受體或訊號途徑不存在，相關藥物即難以發揮療效。以乳癌為例，三陰性乳癌因缺乏 HER2、ER 與 PR 等常見治療標靶，對於 HER2 標靶藥物與內分泌治療並不產生反應，臨床治療選項因此受到高度限制。影響藥物療效的因素並不限於單一藥物與單一標靶之間的關係。藥物之間的交互作用，以及不同標靶之間的訊號調控與互相影響，往往同時存在，並在系統層級共同形塑最終的治療結果。這些多層次的生物交互作用，使得療效預測與藥物開發變得更加複雜。隨著對這些交互關係的理解逐步深化，臨床研究開始發展新的治療策略，以回應過去療效不足的疾病類型。三陰性乳癌後續出現的免疫治療與其他創新療法，正是建立在對藥物-標靶、藥物-藥物與標靶-標靶交互作用更全面理解的基礎之上。



在新藥研發相關的多種交互關係中，藥物－標靶交互作用 (Drug – Target Interaction, DTI) 是篩選候選分子的核心基礎。DTI 的目的，在於判定特定藥物與生物標靶之間是否存在交互作用，進而推估該藥物是否可能成功結合標靶，並產生調控生物功能的效果。這類分析通常被視為一項二元分類任務，用以區分「可能交互」與「不具交互作用」的藥物－標靶配對。從過去的內分泌治療、標靶治療到近年的精準醫療發展，其核心概念皆建立在藥物是否能與特定生物標的產生有效作用之上。DTI 預測正是用來在早期階段，協助研究者快速縮小候選藥物範圍，避免將資源投入於不具結合潛力的分子。在實務應用上，SARS-CoV-2 爆發初期即是一個典型例子。研究者迅速將病毒的棘蛋白 (spike protein) 視為關鍵治療標靶，並利用 DTI 預測模型，評估既有藥物或候選分子是否可能與棘蛋白產生交互作用。透過這樣的方式，得以在短時間內篩選出具潛力的抗病毒藥物與疫苗開發方向，大幅提升後續藥物研發與臨床驗證的效率。因此，DTI 不僅是藥物研發流程中的第一道關卡，也構成後續標靶治療、藥物再定位與精準醫療策略的重要基礎。

在藥物－標靶交互分析中，另一個同樣關鍵的概念是藥物－標靶的親和力 (Drug – Target Affinity, DTA)。相較於 DTI 著重於判定是否存在交互作用 DTA 進一步量化藥物與標靶之間交互作用的強度，用以評估不同候選藥物在結合效能上的差異。DTA 的核心價值，在於能將藥物開發的判斷重點，從「是否結合」轉為「結合強度的高低」。這正是早期 L-DOPA 臨床治療中所面臨的關鍵問題：在缺乏親和力量化技術的情況下，劑量只能透過反覆試驗進行調整，難以精準預測最佳治療範圍。若能事先掌握藥物與標靶之間的親和力，劑量設定與療效評估便能更有效率地完成。藥物－標靶親和力通常以實驗量測指標作為基礎，包括  $IC_{50}$ 、 $K_d$  與  $K_i$  等動力學與抑制指標，並透過連續值回歸模型預測不同化合物對標靶的結合強度。這些指標不僅反映藥物在分子層級的作用能力，也直接影響後續的藥物動力學行為與臨床有效性。在藥物開發流程中，DTA 分析的目的在于於優先挑選具較高結合穩定性與抑制效果的候選分子，進入後續的結構最佳化與治療效果驗證階段。無論是疫苗、抗病毒藥物，或標靶治療藥物，其是否能有效抑制腫瘤細胞或病毒活性，皆高度依賴於關鍵結合區域的親和力表現。因此，若在此階段未能準



確評估藥物－標靶的結合強度，後續臨床試驗的成功率將大幅下降。第一期與第二期臨床試驗的失敗，往往可回溯至早期對親和力評估不足。這也凸顯了在新藥研發中，精準掌握關鍵結合區域與其親和力特性，對於提高整體研發成功率具有決定性的重要性。

在藥物－標靶結合的預測上，AI 可達到關鍵輔助應用。這類預測架構的起點，必然來自於高品質的資料庫。透過整合 ChEMBL、BindingDB 與 DrugBank 等資料來源，可以系統性蒐集藥物的化學結構資訊、標靶蛋白的序列與結構特徵，以及既有的交互作用標註，作為後續模型建構的基礎。在資料處理層面，藥物與標靶需先轉換為可供模型學習的數值或結構化表示形式，包括分子式、分子圖表示法，以及蛋白質序列或嵌入向量，並透過前處理與特徵工程維持分子與結構資訊的一致性。這一步驟在過去相當困難，但隨著機器學習與深度學習方法的成熟，已能有效處理高度複雜的結構資料。在模型層面，現行的藥物－標靶結合預測架構，涵蓋多種類型的 AI 方法，包括監督式學習模型、深度學習模型、圖論式模型，以及結合多種方法的混合式模型。圖論模型特別適合用於描述藥物與蛋白質的結構關係，而混合式模型則可同時整合序列、結構與交互作用資訊，以提升預測表現。在學習任務上，AI 模型可同時處理類別區分問題與連續數值回歸問題，分別對應 DTI 中的「是否產生交互作用」與 DTA 中的「結合強度高低」。透過模型訓練與評估流程，得以系統性比較不同候選藥物的結合潛力與藥效表現。整體而言，這類智慧架構的成效高度仰賴資料品質、模型的可解釋性，以及是否具備良好的可擴展性。唯有在這些條件之下，模型才能進一步揭示多重藥理作用，理解藥物－藥物與藥物－標靶之間的複雜交互關係，並實際應用於加速藥物研發流程，降低試錯成本，提升新藥開發的成功率。

### 藥物-標靶結合 AI 預測應用

應用 AI 技術於精準藥物-標靶結合預測須由建構特徵資料庫起始。藥物特徵真實實驗與應用觀察(RWD)資料庫(包括藥物的化學結構、標靶序列結構，以及已知交互作用標註資訊)在同化整合多維度藥物與標靶資料後可維持多元來源及藥物結合特徵品質標籤一致。藥物與標靶資料轉換為數值或特徵結構(如蛋白質序列編碼、分子指紋、SMILES



分子圖)，維持分子訊息與蛋白結構資料維度。藥物與標靶數位同化資料成對輸入，以機器學習建立結合預測演算法，並運用預訓練與微調提高對資料稀疏或新藥、新標靶情境預測表現。最後模型輸出藥物-標的配對是否可產生交互作用 (DTI)之類別任務預測，挑選具研發潛力之後訊藥物，改變輸入-演算型態可適用於 DTA 連續數值預測運用於精準結合力與專一性預測。

以阿匹斯靈 (Asplim) 作為示例多模態資料在標靶治療研究中的編碼方式中藥物可透過化學序列或 SMILES 字串描述，也能以二維與三維結構呈現其化學特性；標靶蛋白 (如胰島素) 則具有胺基酸序列、二維鍵結與三維摺疊模型等多種表徵。當阿匹斯靈與標靶蛋白結合時，可形成藥物-標靶複合體，其三維交互作用對預測藥效、結合親和力與治療反應極為關鍵。序列資料容易取得，是常用的模型輸入；但結構資料更能反映真實的分子互動，雖取得成本較高。整合這些多模態資訊有助於提升標靶治療模型準確度，並加速新藥開發。多模態資料如何用於藥物與標靶蛋白的表示可增加資料特徵維度與訊息豐富度，提升對藥物-標靶關係的理解能力。在序列層面，藥物與蛋白質可由字串序列編碼，使模型能直接處理符號化的分子資訊。結構時序關聯矩陣可記錄序列中各位置之間的相對關係反映局部到全局構型特徵有助於正確預測是否具結合力。除了序列資訊外，蛋白質 3D 結構提供其真實的空間摺疊樣貌，有助於理解分子功能。結構關聯圖則以圖論方式描述子結構或殘基之間的連結，而交互作用圖則整合藥物與蛋白質兩者，呈現結合界面與作用位置。這些多模態資訊共同使 DTI 與 DTA 模型能捕捉更完整的分子層次特徵，提升藥物-標靶預測的準確度。

三維表示能完整呈現原子在空間中的位置與立體化學資訊，但其資料量大、處理成本高，在訓練演算法時往往造成運算負擔。將三維結構轉換為分子鍵結的二維數據，可保留重要的化學鍵結、相鄰原子關係與拓樸結構，同時降低計算複雜度。這種轉換保留了影響藥物-標靶親和力的核心化學特徵，使模型能更有效率地學習關聯訊號。透過此資料簡化流程，不僅提升了計算速度，也使預測親和力的模型可在較低成本下維持良好精度，是現代藥物設計中常用的資料前處理方式之一。



「智慧藥物—標靶交互作用」的預測流程包含先把藥物／小分子結構與蛋白質／酵素結構等資料轉成可用的特徵，再交由多種機器學習模型分析，包括監督式學習、圖式模型、深度學習與混合式模型。模型效能則以指標評估：分類任務看準確率、精確率、召回率、F1 分數；連續數值預測則以  $R^2$ 、MSE、RMSE 等衡量，讓藥物親和力與標靶關係的判讀更系統化、可比較性。在應用面，近期研究指出可用 DTI/DTA 模型加速藥物研發：例如在 SARS-CoV-2 疫情初期，透過模型快速篩選既有核准藥物中，可能與病毒蛋白酵素或 RNA 相關酵素互作的候選分子，縮小搜尋空間並形成可驗證的假說。同時也強調多標靶藥理與網絡藥理解析：預測藥物對多個標靶的交互作用，用於設計多標靶藥物、提升安全性；在癌症研究中，則可挑選同時作用於主要與替代致病路徑的化合物，並結合藥物—標靶與蛋白質結構網絡來預測多重用藥下的不良反應風險。

AI 也被定位為精準醫療與臨床決策支持的關鍵工具，透過整合病患的基因體學、蛋白體學與表現型資料，再結合 DTI/DTA 建立「藥物—標靶連結」，推估最可能可調控的致病網絡治療選項；例如 DRUML 模型可整合蛋白體表現與藥物反應資料，為個別病人提供更高治療效益的用藥建議。另一方面，在臨床決策與上市後監測上，可用 RWD 藥物監測資料搭配 DTI/DTA，推論不良反應或藥物交互作用的潛在分子機制，並透過整合式平台解析標靶網絡、協助辨識臨床療效與副作用機轉，用於上市後的風險評估與預警。

以上內容將在 2026 年 2 月 11 日(三) 10:00 am 以線上直播方式與媒體朋友、全球民眾及專業人士共享。歡迎各位舊雨新知透過[星球永續健康網站專頁](https://www.realscience.top/)觀賞直播！

- 星球永續健康網站網頁連結: <https://www.realscience.top/7>
- Youtube 影片連結: <https://reurl.cc/o7br93>
- 漢聲廣播電台連結: <https://reurl.cc/nojdev>
- 不只是科技: <https://reurl.cc/A6EXxZ>



講者：

陳秀熙教授/英國劍橋大學博士、許辰陽醫師、陳立昇教授、嚴明芳教授、林庭瑀博士



聯絡人：

林庭瑀博士 電話: (02)33668033 E-mail: [happy82526@gmail.com](mailto:happy82526@gmail.com)

劉秋燕 電話: (02)33668033 E-mail: [r11847030@ntu.edu.tw](mailto:r11847030@ntu.edu.tw)