

# 星球永續健康線上直播

星球健康週新知 &

專題: AI 藥物研發產業 (3)

人工智慧高效藥物結合預測

2026-02-11

CHE團隊：

陳秀熙教授、許辰陽醫師、陳立昇教授、嚴明芳教授、林庭瑀博士、  
劉秋燕、羅崧璋、林家妤、陳虹彤



資訊連結:

<https://www.realscience.top/7>

# 星球永續健康線上直播



<https://www.realscience.top/4>

**Youtube影片連結:** <https://reurl.cc/gWjyOp>

**漢聲廣播星球永續健康:**

[https://audio.voh.com.tw/TW/Playback/ugC\\_Playback.aspx?PID=323&D=20240615](https://audio.voh.com.tw/TW/Playback/ugC_Playback.aspx?PID=323&D=20240615)

**新聞稿連結:** <https://reurl.cc/no93dn>

# 本週大綱

- 星球健康新知 (2026 / W6)
- 新藥研發藥物-標靶結合智慧預測
- 藥物-標靶結合AI預測應用

# 星球健康新知

2026 / W6

# 中東地緣衝突人道風險：「風雨如晦」



以色列初步重啟加薩-埃及拉法邊境  
恢復部分人道物資與人員通行



聯合國與國際人道組織憂慮迦薩邊境  
通行限制仍多 援助物資難以滿足需求

伊朗總統已授命外交團隊與美國重啟談判

aljazeera.com



伊朗總統佩什基安

美國-伊朗同意於阿曼舉行談判  
同時美方重申伊朗不得發展核武



伊朗外交部長  
阿拉奇

apnews.com

# 美中全球戰略經貿互動：「角力未休」



pbs.org  
aljazeera.com

2月4日美國總統川普與中國國家主席習近平進行電話會談 川普對會談過程持正面見解

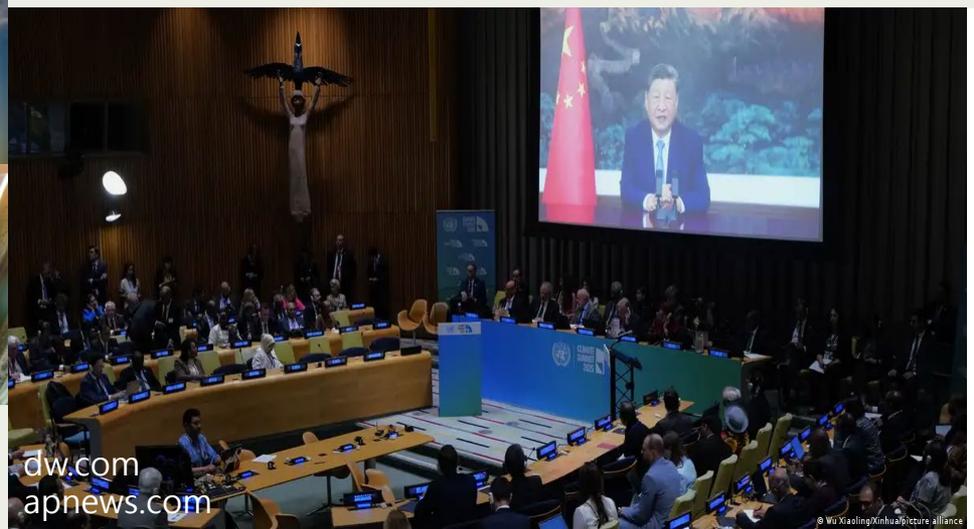
中俄領導人視訊會談  
重申戰略夥伴關係並深化經貿與安全合作



美國對多邊體系投入下降  
中國順勢擴大外交空間並影響國際秩序



地緣政治、安全與經貿領域議題仍為  
美國與中國討論與競逐主要議題



dw.com  
apnews.com

# 美國啟動全球戰略礦產儲備：「未雨綢繆」



theguardian.com

美國進出口銀行批准「礦庫計畫」貸款  
啟動戰略關鍵礦產儲備

川普啟動120億美元「Project Vault」  
關鍵礦物儲備方案



x.com

Project Vault加速美國抗衡中國稀土供應  
鏈



aljazeera.com

美國推動戰略礦產儲備應對供應鏈風險



inquisitr.com

# 美國國內外措施強化經貿韌性：「進退權衡」



印度總理莫迪

美國和印度達成貿易休戰協議  
對等關稅將從25%降至18%

美聯準會主席提名帶動市場反應  
金銀價格重挫



聯準會新任主席人選  
華許

華許提名加劇市場對通膨持續性疑慮



美國降低對印度商品的關稅  
換取印度承諾停止購買俄羅斯石油



# 聯合國財務緊縮影響世衛援助能力:「捉襟見肘」



apnews.com

聯合國秘書長警告聯合國面臨財政崩潰

世衛組織警告資金削減將使  
全球衛生系統面臨風險



美國正式退出世界衛生組織  
結束其在世衛組織的78年會員資格



聯合國財務問題將影響全球援助能力



thesecretariat.in

# 俄烏戰爭黑土危機：「傷筋動本」

Erkai He et al., Science, 2026

烏克蘭為小麥、玉米、葵花籽油的全球重要出口國

- 自 2022 年起，已有 **20%** 以上耕地（770萬公頃）**受戰爭破壞**。
  - 土壤遭受**金屬、有機污染物、爆炸物與碳氫化合物**污染。
  - 農業**損失估計達 800 億美元**，已經嚴重威脅全球糧食供應。
    - 缺乏完整詳細土壤污染地圖與污染物質系統鑑別
    - 傳統污染評估與修復方式**成本高、時間長且不準確**
- 需建構跨學科「**遙測大數據-實地採樣-修復行動**」的資料鏈。



- 呼籲成立「烏克蘭土壤復原國際聯盟」，整合科學家、政策制定者與工程師。
- 修復烏克蘭土壤是確保糧食安全與區域穩定的關鍵行動。

# 軟式矽晶AI邊緣運算突破：「另闢蹊徑」

Kris Myny and Jihad Nacereddine Bouakaz, Nature, 2026

首次在可撓式基板上實作可執行 AI 任務的晶片，**使用低溫多晶矽 ( LTPS )**  
**可直接製造於柔性材料**，適合穿戴裝置與需彎折材質情境應用

增加金屬層數：突破既有可彎曲式電子製程限制  
數位Compute-in-Memory ( CIM ) 架構

- **記憶體內直接運算**
- **減少資料搬移與能耗**
- **避免記憶體牆問題**

效能與可靠性表現

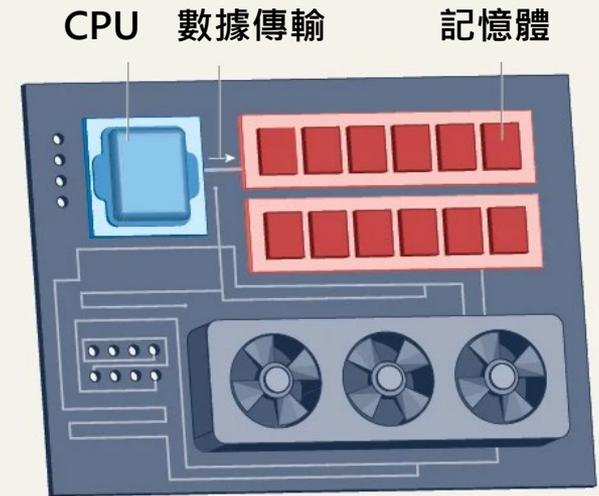
- 晶片在反覆彎折或捲曲下仍能正常運作
- 經測試**可承受40000次彎折後仍保有運算能力**

未來改進方向

- **新型半導體材料以降低漏電流**
- **電路設計技術與縮小電晶體尺寸**

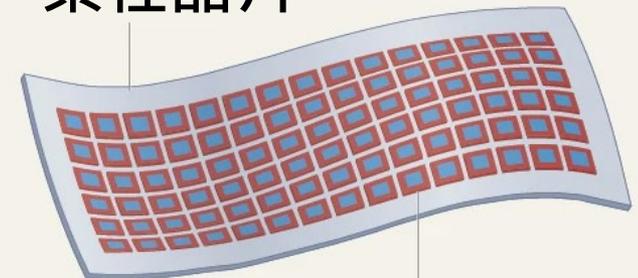
晶片製造成本低(約US\$0.016)

**具備極端邊緣應用與商業化的潛力**



傳統運算配置

柔性晶片



數據處理元件嵌入於記憶體中  
無需進行數據傳輸

# AI專家能力極限測試:「尚待火候」

Katherine M. Collins and Joshua B. Tenenbaum, Nature, 2026

**Humanity's Last Exam ( HLE ) 以專家層級問答為目標**，  
題目來自 50 國、涵蓋多學科，經多階段審核確保難度與原創性

## 主要發現

- 主流AI在HLE上正確率僅個位數(%), **明顯低於其在傳統benchmark的表現**
- 新一代模型已有進步 ( 如 GPT-5約25% ) , 但仍屬中低水準效能與可靠性表現

## 重要意涵

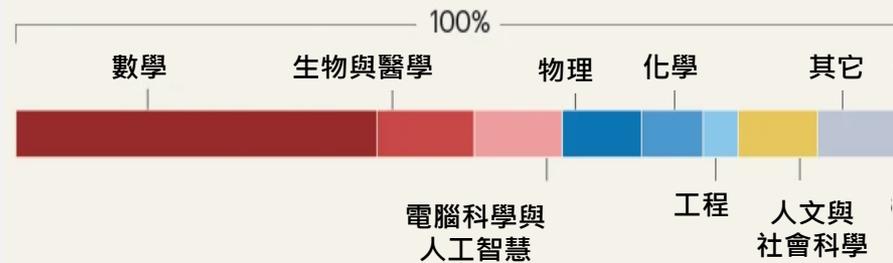
- **AI距離穩定的專家層級推理仍有明顯落差**
- **HLE成為評估前沿模型的新壓力測試標準**

**專家能力 ≠ 答對問題**

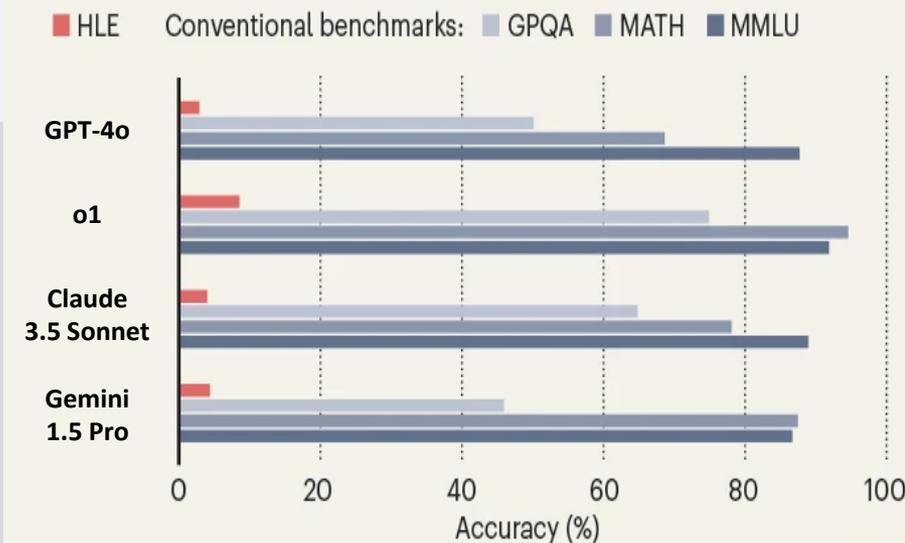
還包含：

1. 判斷問題品質
2. 處理不確定性
3. 評估是否值得作答

a HLE 題目集的學科分佈



b AI系統在多項基準測試中的準確度

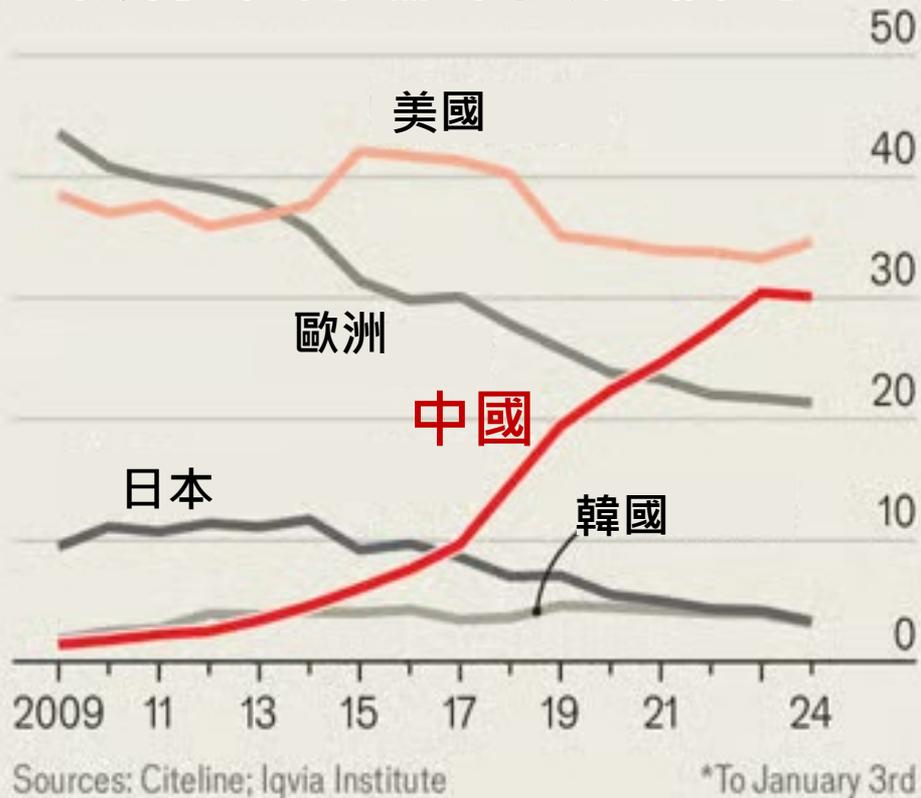


# 生技領域地緣競爭：「競逐白熱」

中國以制度改革與規模優勢  
快速推動生醫創新落地



## 執行藥物臨床試驗佔比

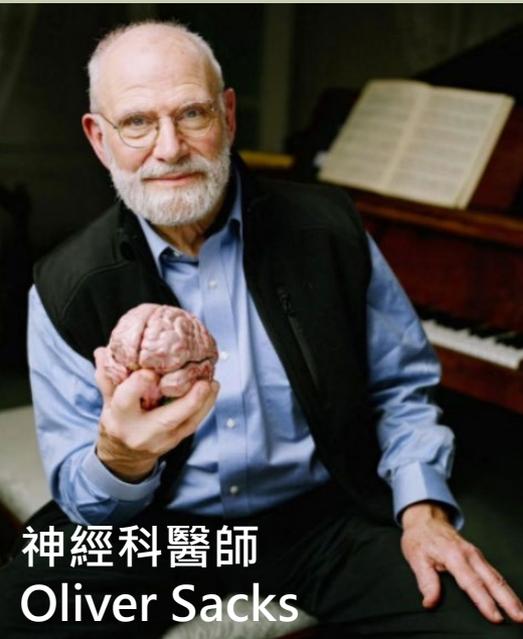


- 美國生醫政策資源緊縮基礎生醫研究投入與制度穩定性降低
- 歐美藥廠因競爭關係轉向中國，補足創新與研發需求
- 生醫供應鏈與臨床資料治理逐步演變為新的地緣政治風險

**新藥研發藥物-標靶**

**結合智慧預測**

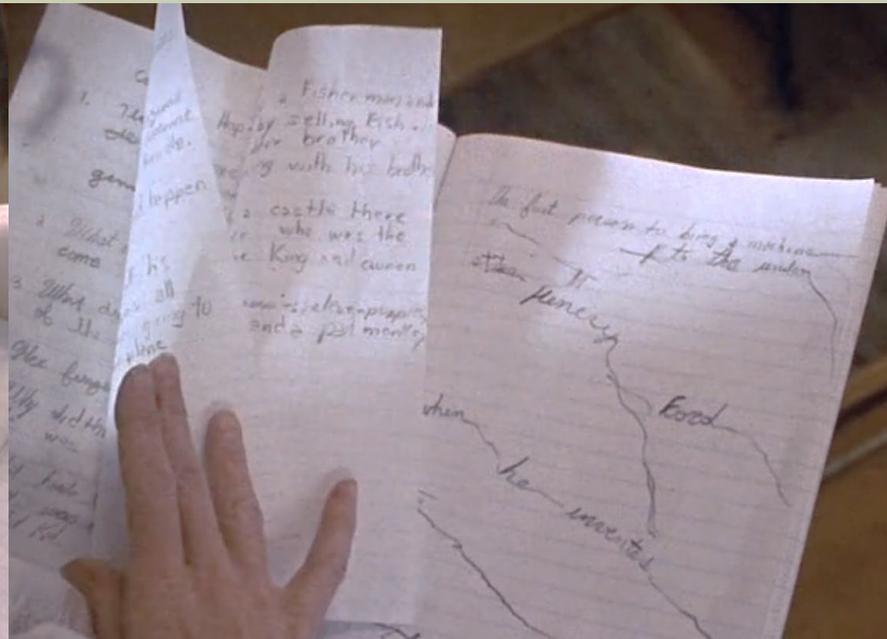
# 神經新藥開發喚醒睡人



神經科醫師  
Oliver Sacks



罹病患者Leonard



腦炎後行動僵直

赤色果凍 黃色果凍 每天果凍

- 依據神經科醫師Olive Sacks1973著作 Awakeness改編，描述1930年代嗜睡性腦炎發展與藥物治療經過
- Leonard兒時罹患嗜睡性腦炎後逐漸出現手出現顫抖，學業表現下降，最終陷入僵直與深度昏迷長期臥床轉至慢性照護機構

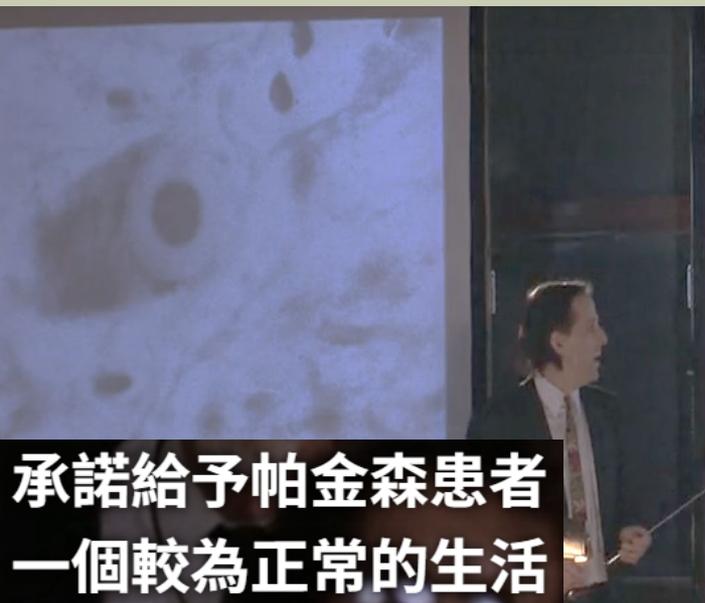
# 賽爾醫師探索沉睡意識



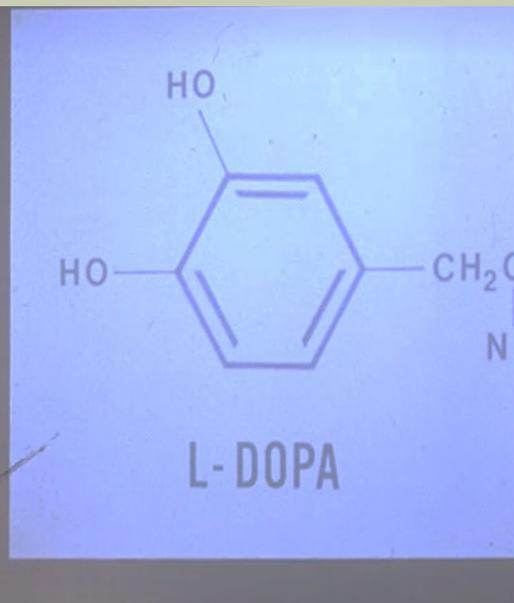
昏睡性腦炎

- 1969 年塞爾醫生到紐約布朗克斯慢性醫院任職，發現被視為植物狀態的病患其實仍會對名字、音樂或觸碰出現細微反應
- 查閱病歷後發現這些病人大多是 1917 至 1928 年嗜睡性腦炎倖存者
- 塞爾以字母拼板成功引出Leonard回應，證實內在意識存在

# 創新藥物分子治療轉機



承諾給予帕金森患者  
一個較為正常的生活



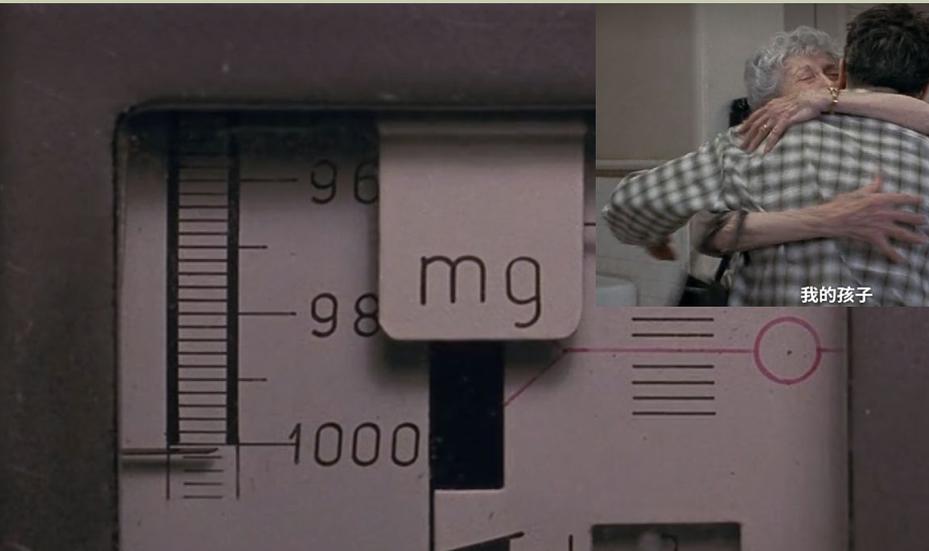
假如有一位病人具有所有的  
帕金森病人的強迫加速



我只是一位化學家醫生  
你是外科醫師

- 藥物化學合成巴金森氏症治療新藥L-DOPA並於國際會議發表
- 由症狀與神經機轉賽爾醫師推論患者症狀可能為特殊形態巴金森氏症，嘗試以L-DOPA治療

# 精準劑量調控療效關鍵



用了200毫克 他毫無反應



- 經過反覆劑量調整Leonard成功甦醒
- L-DOPA 療法擴及其他患者後多名長期昏睡者相繼甦醒，病房重新充滿交流情感與生命氣息
- 藥物結合與神經反應使病情反覆，需重新調整劑量維持療效

# 人工智慧加速藥物研發

Jarallah et al., 2025

## AI 藥物開發流程

結合生物醫學多元資料與演算模型  
支持藥物從發想到臨床前評估的各階段

### 前期藥物 發現與設計

加速標靶識別、藥物篩選與分子生成模型，加速開發化合物與先導藥物

### 藥效分子 特性評估

預測化學性質與藥物-標靶交互作用，精準評估結合能力與藥效

### 安全性與 藥物代謝 動力分析

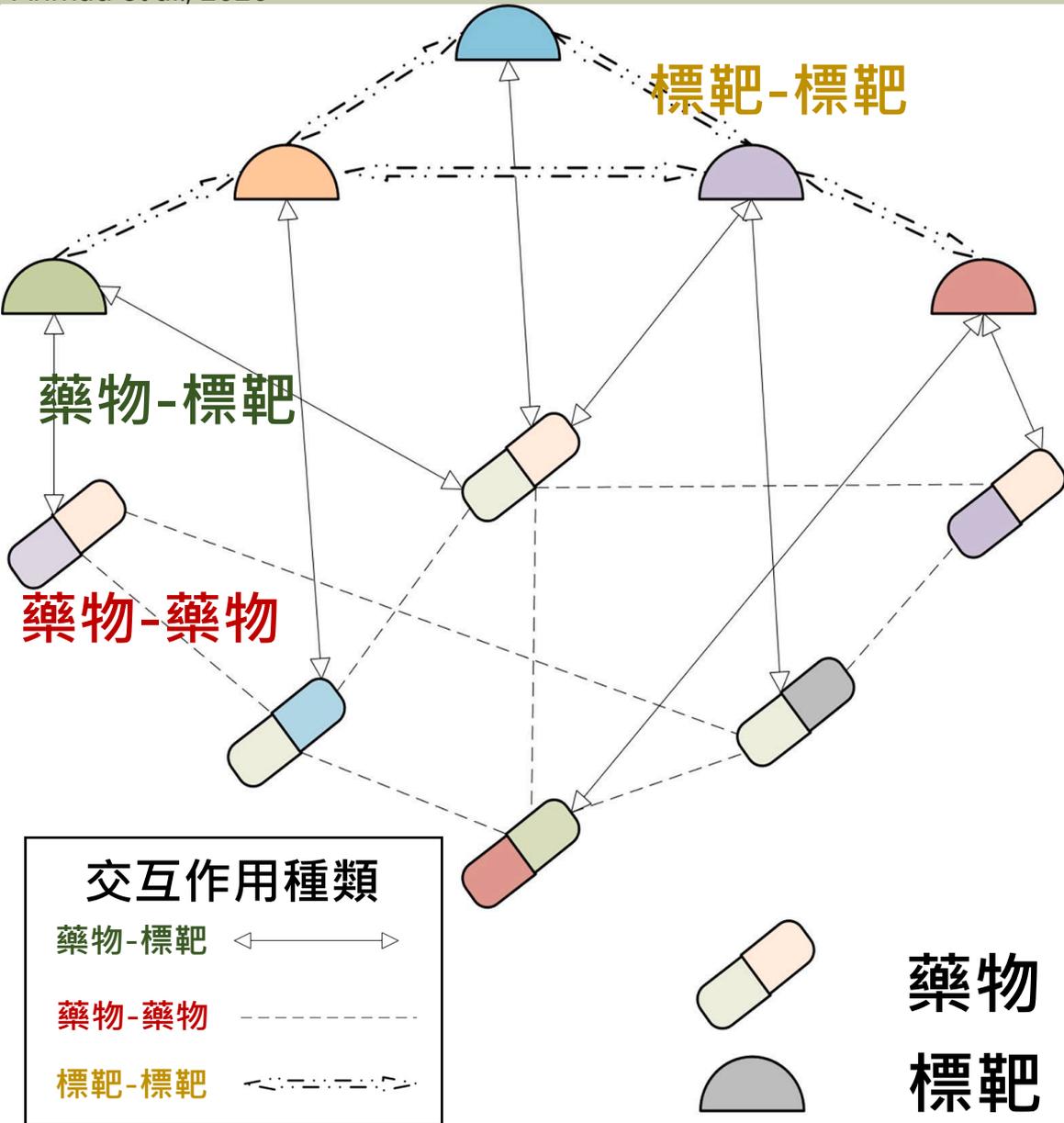
預測人體藥物動力(ADMET)掌握  
候選藥物  
安全風險

### 藥物適應症 定位與擴展

運用AI分析藥物  
探索驗證新適應症  
降低成本並縮短開發時程

# 新藥研發藥物及標靶交互關係

Ahmad et al., 2026



- 藥物相關研究中有三種相互關係影響療效
  - 藥物-標靶 (DTI)
  - 藥物-藥物 (DDI)
  - 標靶-標靶 (TTI)
- 三者同時存在並彼此影響，共同構成系統層級的多層次生物交互作用
- 釐清可能交互影響為藥物開發療效預測基礎

# 藥物-標靶交互作用(DTI)篩選候選分子

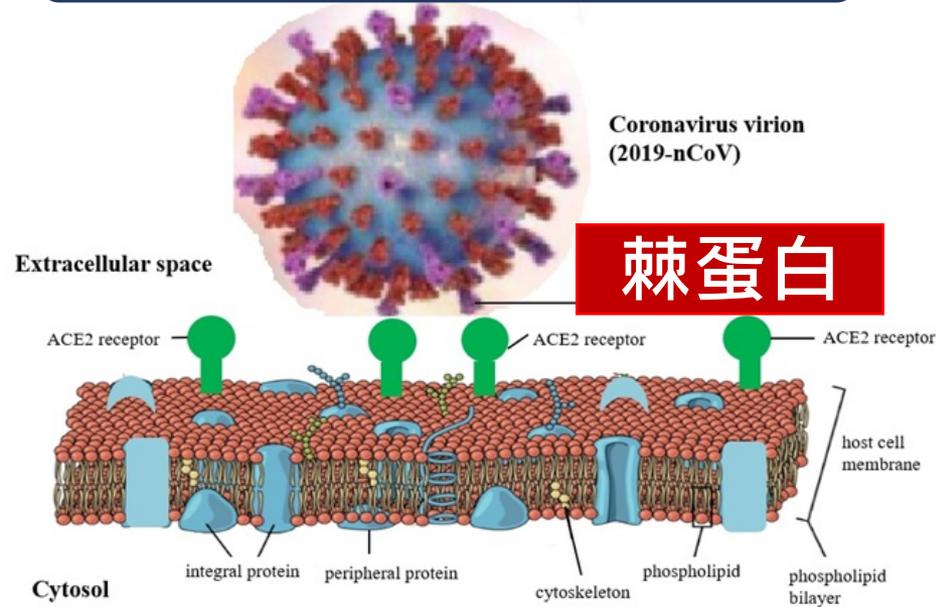
Ahmad et al., 2026

## 什麼是DTI

藥物-標的交互作用**有無**  
Drug-Target Interaction

- 判斷特定藥物與生物標的之間是否存在交互作用
- 二元分類任務
- 由藥物與標靶特徵預測是否可能產生結合或功能調控效果

## 應用範例



在 SARS-CoV-2 爆發初期將棘蛋白做為治療標靶，利用 DTI 預測模型快速篩選既有藥物中可能產生交互作用，提高後續藥物發展與臨床實驗效率

# 藥物-標的親和力(DTA)選出最佳藥物

Ahmad et al., 2026

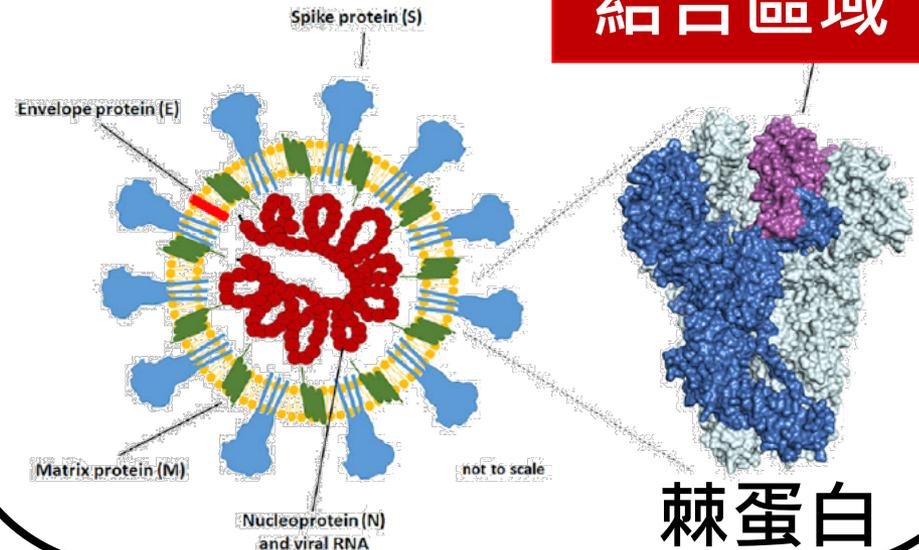
## 什麼是DTA

藥物-標的**親和力**  
Drug-Target Affinity

- 量化藥物與標靶間交互作用強度
- 連續值回歸任務
- RWD資料來自實驗量測的親和力指標 (如Kd、Ki、IC50)，預測不同化合物對標靶結合強度

## 應用範例

- 由DTI選出可結合藥物後藥物開發重點由「**是否結合**」轉為「**結合強度高低**」
- 預測候選藥物與蛋白質標靶結合區域親和力，優先挑選具較佳結合與抑制效果者進入後續結構優化與治療效果驗證試驗



# 藥物-標靶結合預測智慧架構

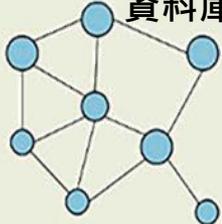
Ahmad et al., 2026

## 資料與表示特徵

ChEMBL  
資料庫



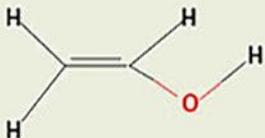
BindingDB  
資料庫



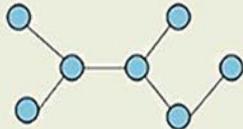
DrugBank  
資料庫



分子式



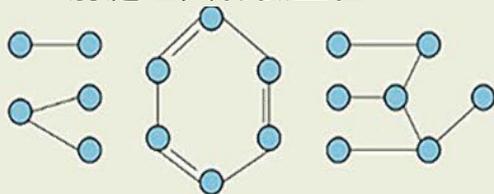
分子圖表示法



序列嵌入表示



前處理與特徵工程



## 模型

監督式學習模型

支援  
向量機

隨機森林

梯度增強學習

深度學習模型

DeepPS

MEDTI

DeepLSTM

圖論式模型

DSG-DTI

MPNN

HyperAttentionDTI

混合式模型

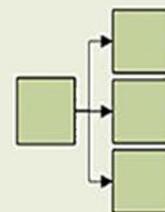
MINDG

DTI-RCNN

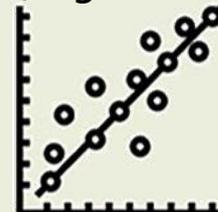
AttentionDTA

## 梯度增強學習

類別區分  
(Classification)



連續數值評估  
(Regression)



模型訓練



模型評估



關鍵  
應用



資料品質



可解釋性



可擴展性



多重藥理作用



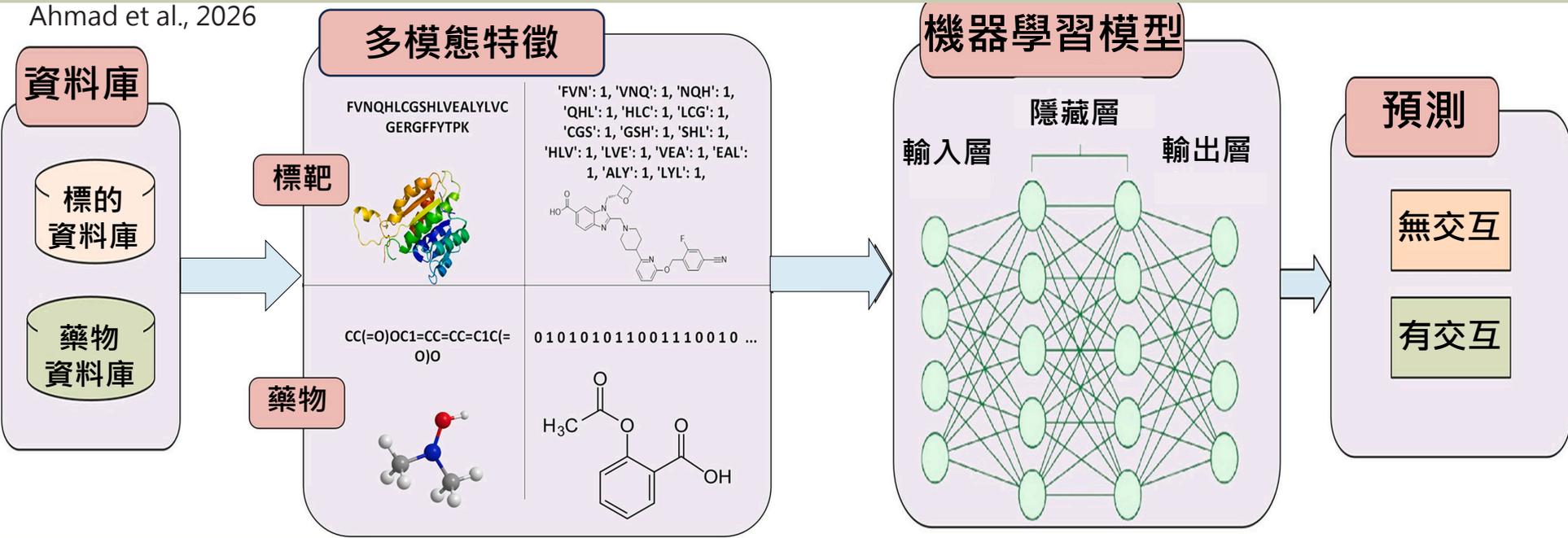
加速藥物開發

**藥物-標靶結合**

**AI預測應用**

# 藥物-標靶交互作用智慧預測流程

Ahmad et al., 2026



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)同化整合。維持多元來源及品質標籤一致

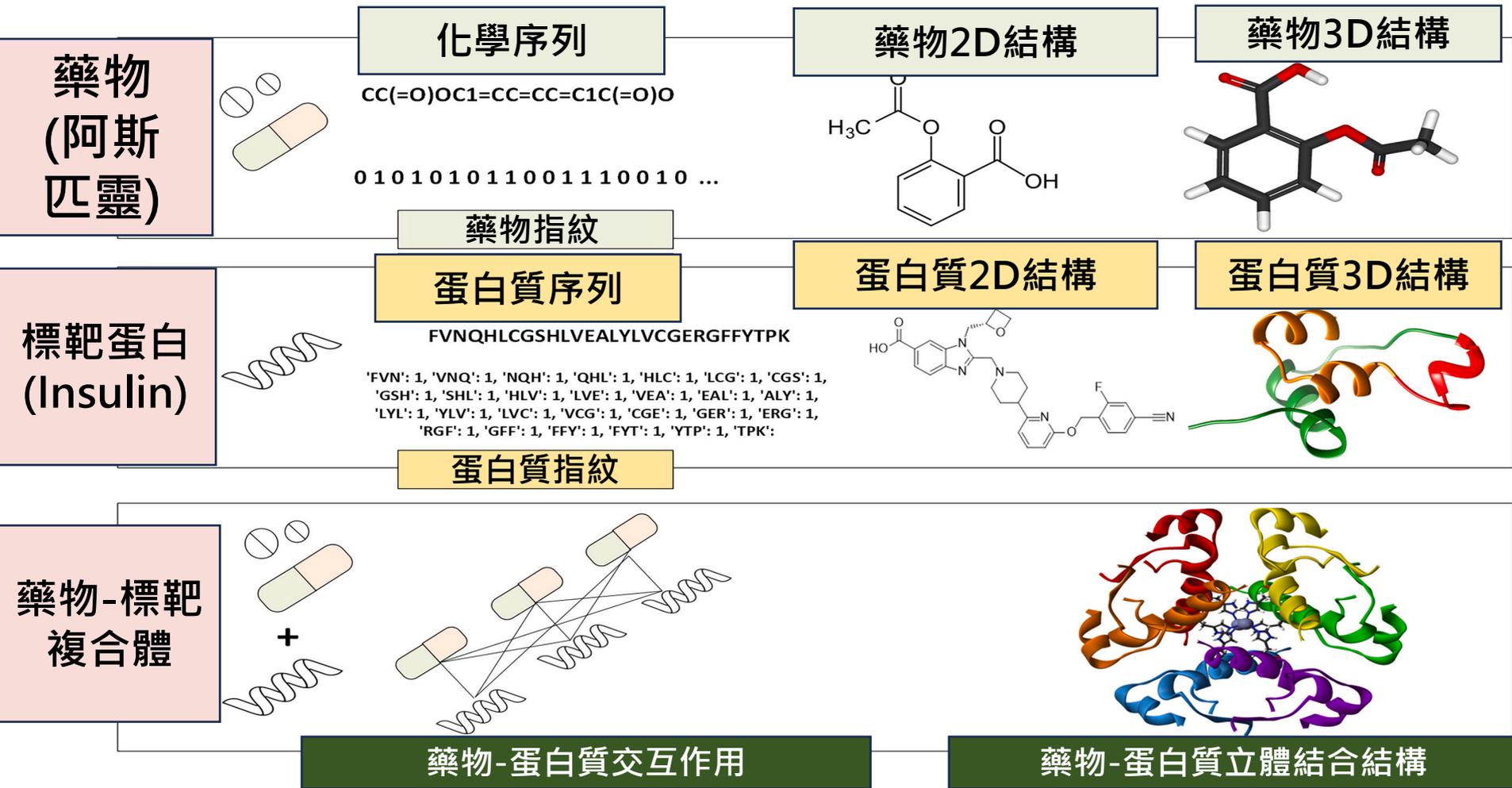
藥物與標靶資料轉換為數值或特徵結構(如蛋白質序列編碼、分子指紋、SMILES 分子圖)，維持分子訊息與蛋白結構資料維度

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

模型最終輸出藥物-標的配對是否可產生交互作用 (DTI)，改變輸入-演算型態可適用於DTA預測

# 多模態藥物-標靶資料編碼

Ahmad et al., 2026



序列文字資料資料取得較容易  
SMILES為典型例子

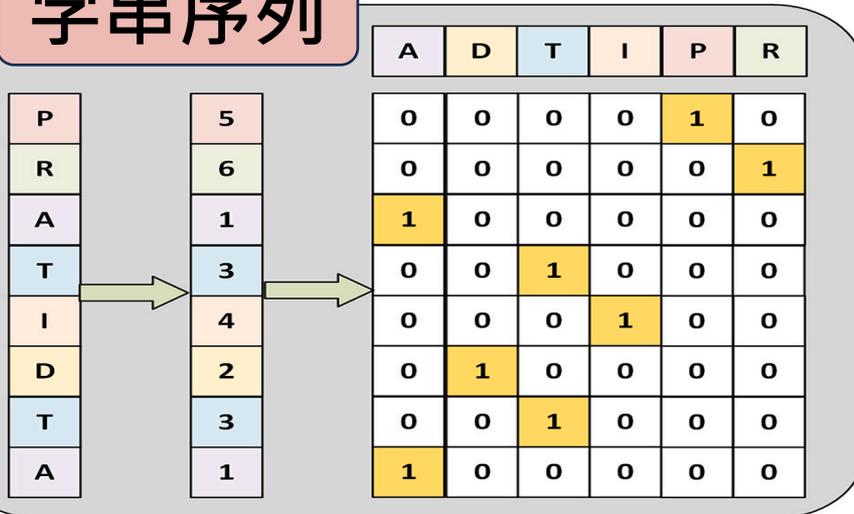
以二維與三維結構表示可反映  
結合構型，但取得成本較高

# 多模態藥物結構-標靶蛋白質表示

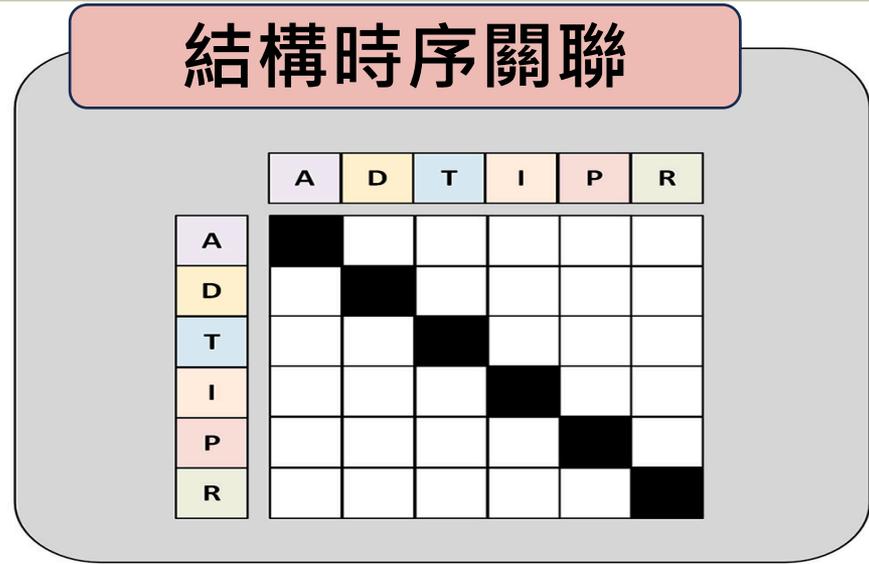
Ahmad et al., 2026

DTI 藥物篩選應用

## 字串序列

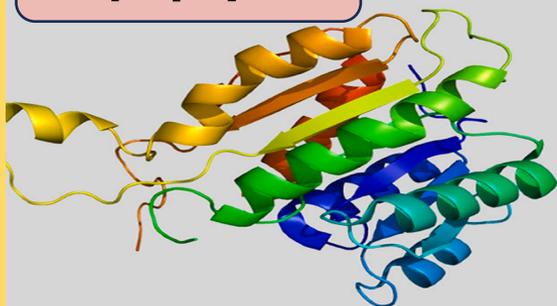


## 結構時序關聯

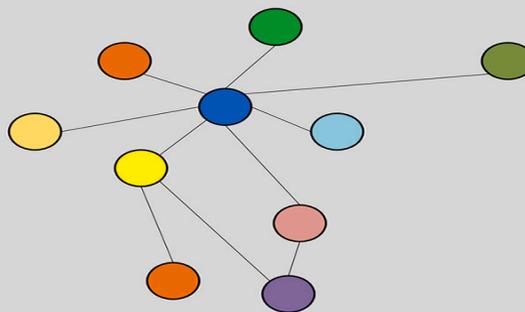


DTA親和力評估

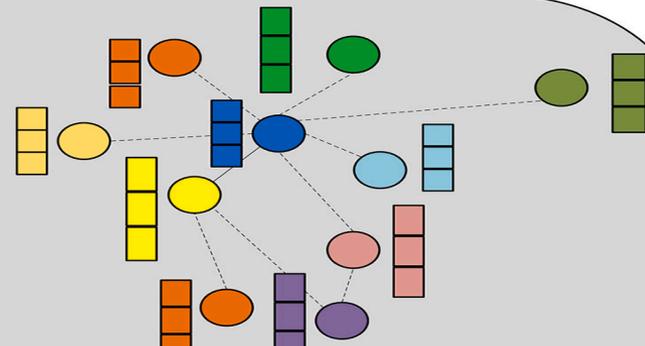
## 圖示



蛋白3D結構



結構關聯圖



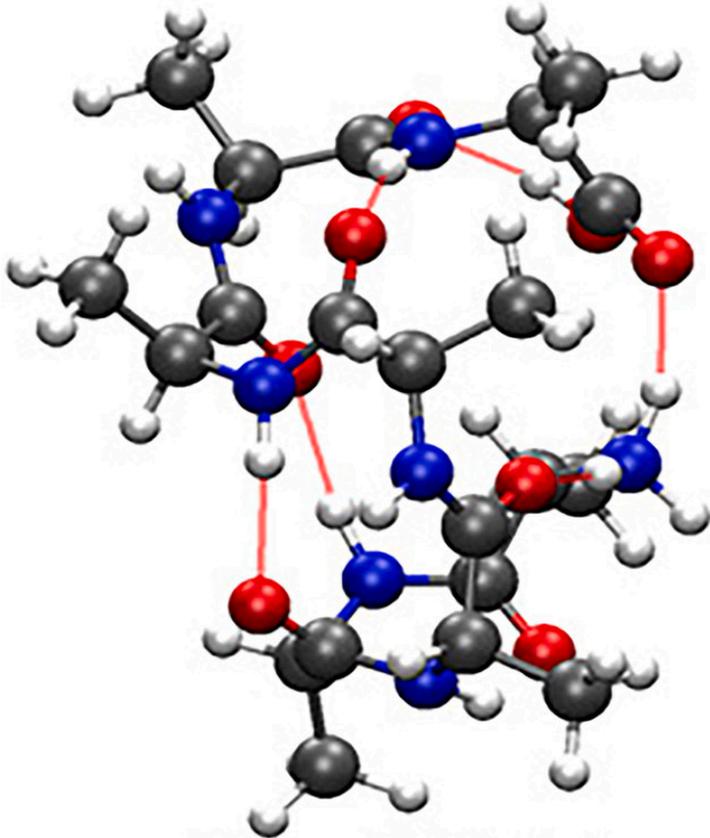
交互作用圖

多模態資料記錄序列、結構關聯等資訊，讓模型捕捉不同層次生物資訊，提升對藥物-標的關係的理解能力

# 分子結構資料轉換預測親和力

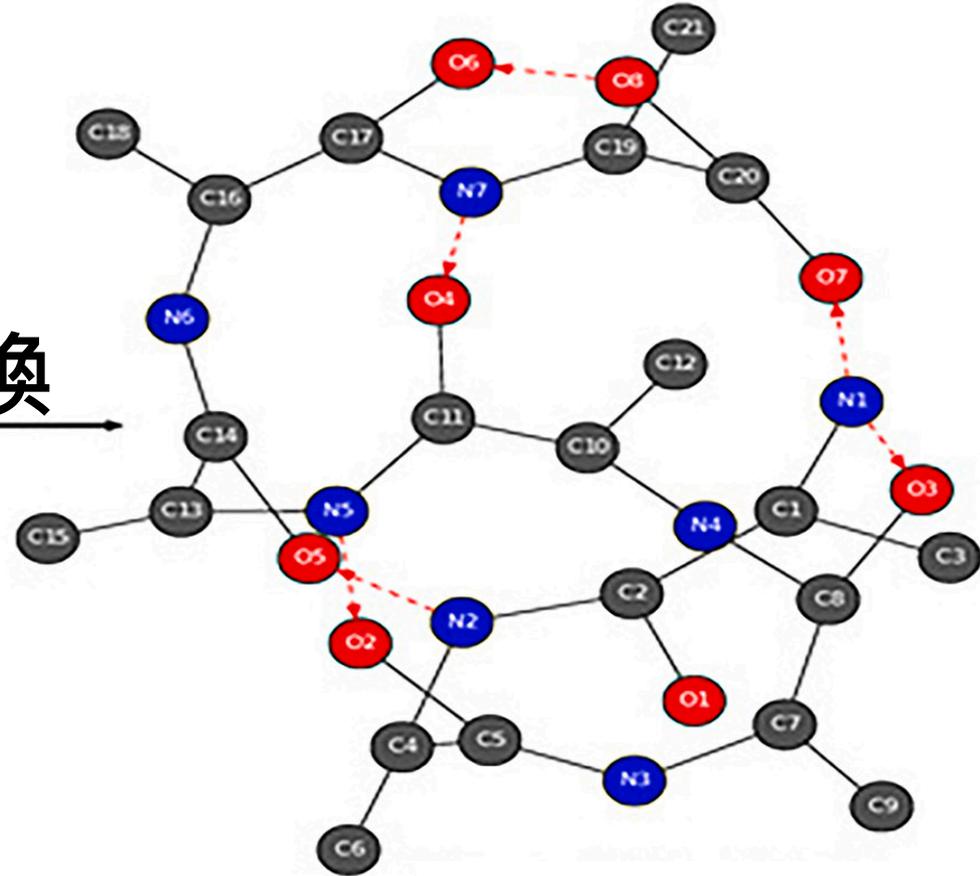
Ahmad et al., 2026

空間位置三維表示



轉換

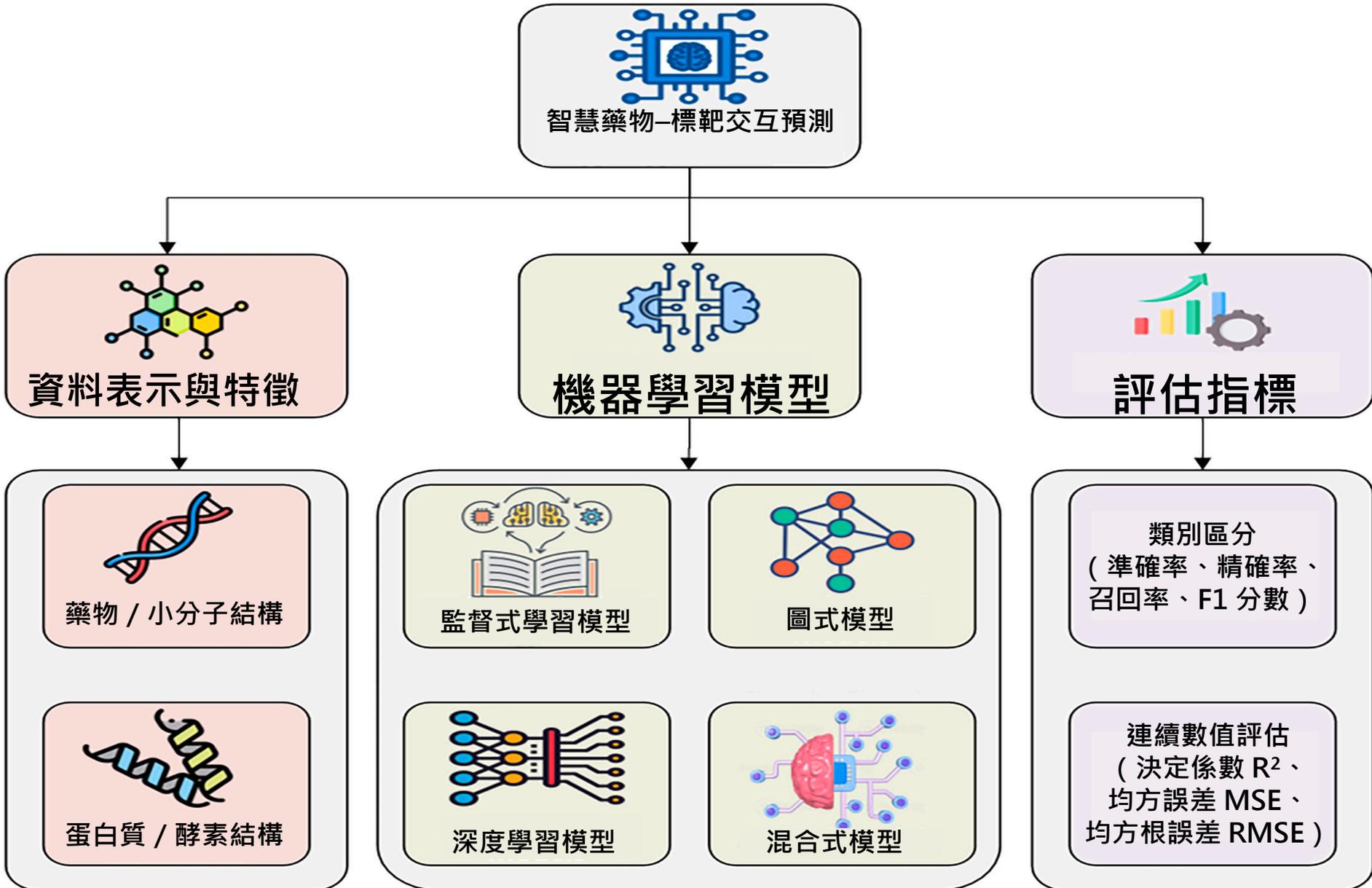
分子鍵結二維轉換



藥物分子結構可由三維空間結構轉換為二維圖表示，保留關鍵化學與交互作用資訊且降低計算複雜度提高演算法學習效率

# 藥物親和智慧預測架構

Ahmad et al., 2026



# 智慧藥物研發與臨床決策應用

Ahmad et al., 2026

## 藥物再定位與 早期探索

在 SARS-CoV-2 疫情初期，研究者利用 DTI/DTA 模型快速篩選既有核准藥物，找出可能與病毒主蛋白酶或 RNA 相關酵素產生交互作用的候選分子，以縮小搜尋空間並產生可驗證假說

## 多標靶藥理與 網絡藥理解析

預測藥物對多標靶交互作用，設計多標靶藥物並提高安全性。在腫瘤研究選取同時作用於主要與替代致病路徑化合物提高療效與適應症。結合藥物-標靶與蛋白質結構網絡預測多重用藥不良反應風險

## 綜合性藥物治療 組合設計

整合 DTI/DTA 預測與 RWD 藥物組合療效資料辨識具協同治療潛力化合物組合。ComboNet 成功預測具協同抗 SARS-CoV-2 效果藥物組合進入臨床試驗評估

# AI 驅動的藥物研發與臨床決策應用

Ahmad et al., 2026

## 精準醫療與 臨床決策支援

整合病患基因體學、蛋白體學與表現型資料結合 DTI/DTA 建立藥物-標靶連結，推估最可能調控個體致病網絡治療選項，如 DRUML 模型整合蛋白體表現與藥物反應資料為個別癌症患者提供較高治療效益藥物

## 臨床決策與 上市後監測分析

RWD 用藥監測資料與 DTI/DTA 預測推論不良反應或藥物交互作用潛在分子機制，輔助臨床風險評估。發展整合式平台解析潛在標靶網絡，辨識臨床療效反應機轉，並於上市後協助推測脫靶作用或多重用藥下非預期效應

# 星球永續健康 線上直播



林庭瑀  
博士



陳秀熙  
教授



## 國立台灣大學



林家妤



許辰陽  
醫師



陳虹彦



曾暉哲



劉秋燕



羅崧璋



梅少文 主持人



侯信恩 主持人



楊心怡 製作人



嚴明芳  
教授



陳立昇  
教授



## 台北醫學大學