2026 年 11 月 27 日 星期五
编辑：张思玮 / 电话：（010）62580821/ 邮箱：ykb@stimes.cn

当计算医学成为大科学装置

◉张思玮

近日，工业和信息化部、国家发展改革委等十部门联合印发《医药工业发展“十五五”规划》，将计算医学与人工智能（AI）、量子计算、超级计算并列为赋能药物研发的新技术。这不只是一次概念“入规”，更是把计算医学放到了与算力、算法同级的战略位置上：生物医药的下一程，比拼的不只是模型有多聪明，而是能不能把对生命的计算做成可以托付的基础设施。

过去十年，AI 制药主要解决一件事——让分子设计更快一点；但临床失败率并没有随之下降。卡点不在分子端，而在临床端：疾病本身没有被“算清楚”。人群分层、终点选择、机制假设，任何一个环节的偏差都会在二期、三期被放大。

2026 年 10 月，一套名为 WHIRLPO 的计算医学平台在 CCF HPC China 2026 上发布。该平台呈现的指标有：29244 项生命科学数据资源、51 个标准数据集、33 种实体肿瘤与 360 个病理亚型、约 1600 万个精细化患者亚群、200 余个潜在靶点。可以说，计算医学正在尝试从“工具”变成“装置”。



图片来源：视觉中国

大科学装置带给产业“无限可能”

过去二十年，国内布局大科学装置的逻辑大致相同。上海光源的价值不是“卖蛋白质结构”，而是让张江的药企把结构解析变成研发流水线，开放运行以来，服务企业的机时连年攀升，2026 年上半年企业用户机时同比增长 44.2%。EAST“人造太阳”的价值也不是“发电给千家万户”，而是把超导磁体、射频、离子源、低温控制沉淀成可转移的技术能力，合肥离子医学中心的质子治疗系统、地铁太赫兹安检都是从这个聚变装置里“长”出来的产业分支。

神威超算的意义不在“跑分”，而在把气象、流体、核模拟从经验试错变成数值推演，让一批原本只能靠实验堆时间的学科，第一次有了“先算再验”的能力。人类基因组计划本身不治病，却建立了生命的坐标系，此后所有基因检测、靶向药、罕见病诊断，都在这套坐标系上做加法。

这些装置的共同特征是不直接交付终端产品，而交付观测能力、坐标系、仿真能力和工程流水线；产业升级不是“装置替企业干活”，而是企业借助装置，把原本高不可攀的研发动作变成可调用、可复用、可规模化的日常能力。

从试错研发到导航研发

生命问题从来不是纯粹的算法问题，而是系统工程问题。单模型可以拟合“基因—表达”的相关性，产业要的却是因果：干预 A 之后，系统 B 怎么变？哪一类患者获益、哪一类可能不耐受？剂量怎么定？这要求数据治理、知识图谱、因果推断、世界模型、实验编排、算力调度全部打通，任何一层停在演示阶段，整体结论就不可信。

药企的谨慎也可以理解：没有人会把核心管线押在一个不可解释、不可迁移的“黑盒”上。装置型平台至少要满足四个条件——数据标准可引用、流程可编排、实验可回流、算力可异构。做到以上四点，才谈得上从“帮药企跑 notebook”升级为“研发体系中的基础设施”。

落到具体的研发范式上，变化主要有三个层面：第一层是从“试错研发”到“导航研发”。过去药企的路径是假设靶点、造分子、动物实验、临床撞概率；装置型路径是先在计算系统里推演疾病机制，在虚拟患者上跑干预，只把高置信的假设送进湿实验。

第二层是从“合同研究组织（CRO）代工”到“IP 共创”。传统 CRO 卖工时，装置型平台输出的则是疾病机制、新靶点、患者分层、适应症重定位和虚拟临床证据，这些成果可专利、可引用。对药企而言，研发采购清单上除了 CRO、试剂、算力，会多出一类“计算医学装置使用权限”。这也是为什么有的平台明确不整体出售平台、只输出机制与 IP：装置的价值在于被使用，不在于自己下场造车。

第三层是从“单点模型”到“产业集群”。上海光源周边的张江药谷，合肥 EAST 周边的质子治疗、太赫兹、量子等一串产业，人类基因组计划之后基因检测与精准医疗全产业链迅速崛起。因此，计算医学若要复制这一路径，最终形态不会是一家企业，而是一整条链：组学中心、专科医院专病库、国产算力、自动化实验室、创新药企。

装置建起来只是刚刚开始

工程化底座搭起来，只是让装置“能跑”，但“能跑”与“跑出价值”之间，至少有三道硬坎。

一是缺用户。没有药企真的把管线问题搬上来跑，再先进的装置也是一座空转的工厂。世界模型需要真实研发任务驱动迭代：跑得越多，推演越准；跑得越少，越接近纸面推演。

二是缺输入。生命世界模型的精度，取决于有没有持续、真实、高质量的疾病数据灌进去。33 种肿瘤、360 个亚型、1600 万亚群，这些数字背后需要新病种、新队列、新临床反馈不断“喂养”，模型不会自己变聪明。

三是缺算力持续运行。10 天交付 1P 级万人专病库、端到端性能翻倍，这些指标意味着巨大的算力开销。装置不是买一次就完事，而是和上海光源一样，开机就要花钱，不运转就贬值。

三道坎无法跨越，平台再漂亮也难以持续产出具备专利潜力、可落地推进的研发 IP。所以这一阶段的关键词不是“建”，而是“用”：数据开放到什么程度、算力成本由谁承担、医院与企业的真实任务如何接入，决定装置是资产还是摆设。

回望大科学装置史，有一条规律反复被验证：光源建好了，要有药企来“照”结构；超算买回来了，要有气象和流体团队“跑”任务；基因组计划测完了，要有临床医生把它变成诊断方案。

大科学装置的价值，永远等于被使用的深度。若把这条规律放到计算医学上，接下来的问题是：药企端愿不愿意把核心管线的疾病机制问题，从“内部试错”变成“装置导航”，敢不敢把一部分研发预算从 CRO 工时转向计算医学装置的使用权限？资金端能不能看到“平台 +IP”模式的长周期价值，而不是只盯着短期分子生成的数字游戏？政府端能不能把计算医学装置纳入区域生物医药创新基础设施的规划，像当年布局光源和超算那样，为数据开放、算力补贴、产学研协同留出空间？

一款新药在研发之前，如果相关的疾病机制能先在计算机里推演清楚、虚拟患者先替真人承担风险、只有高置信假设才送进临床，那么研发周期与成本的改变就不是“压缩几个百分点”，而是失败位置的前移——真金白银只“烧”在确定性最高的那一步。

药物研发只是生命计算最直观的价值出口。一旦“算得清生命”成为可复用的能力，诊断、治疗、早筛早诊、衰老机制与健康管理都会被重新提问。过去这些领域各自为战，是因为底层缺少一个统一逻辑——疾病是怎么生出来的。链式反应不会一夜发生，重大病种被逐一算清楚也需要以十年计的时间，但方向是清楚的：计算医学的下一程，比拼的不是谁家的模型在榜单上排名更高，而是谁能把装置真正用起来。

因此，建起来只是第一步，用起来才是关键。