

36氪获悉，专注于分子设计的企业QuanMol Tech已完成数百万美元天使轮和种子轮融资，由Plug and Play领投，Silicon Valley Future、AI Basis、Decent Capital等跟投。本轮资金主要用于团队扩张和产品开发。

QuanMol Tech团队首先切入的赛道是人工智能辅助药物设计。团队认为，AI制药行业这几年发展迅速，主要都是用计算机模拟分子设计，但市场上的一些解决方案往往难以达到较高的预测精准度，解释性也较弱，并不能从根本上帮助为参与实验的实验化学家提高其对分子的理解，还需要更精准有效的方法。

为此，QuanMol Tech团队采用了深度学习图神经网络加上物理化学领域知识来做分子设计，“图神经网络可以很好地匹配分子模型，解决现有预测精度不够的问题”。基于此方法，目前QuanMol Tech已经取得了在行业领先的分子性质预测精度。公司联合创始人沈兴宇博士认为，药物研发是个极其复杂的过程和体系，人对药物本身的理解也不够，“AI取代人来做药”这个出发点并不可取。

基于上述两点认识，QuanMol Tech从人辅助药物开发的视角切入，聚焦药物开发早期——基于大数据和AI算法辅助药物化学家快速完成药物研发过程的数据解读任务，譬如蛋白质表现、组织表现，以及实验结果的验证模拟等，要使其灵感可以量化，最终减少药物研发过程中的试错成本。据悉，目前产品已经在最终完成阶段，预计明年第一季度产品即可完成。

公司联合创始人吕旭东博士表示，上述应用学习成本低可以广泛辐射于小分子药物化学家，他们是整个产业链中真正做输出、把药做出来的这群人，但他们并没有被服务到。“而从覆盖的人群规模和使用场景上看，市场规模相较于传统的面向计算化学家的工具扩大了非常多。”

在商业模式上，区别于其它AI制药公司，提供CRO服务或是直接定位于Biotech做研发管线，QuanMol Tech的构想是提供软件服务，帮助实验室人员快速用数据和科学计算来支撑其研究假设。

对此，沈兴宇指出，其难度主要体现在高的认知壁垒——“要知道观察、假设、验证的是什么，且要有配套的理论定义问题，用化学的语言进行交流”，在此基础上将人工智能与化学物理有机结合，确保其有很高的解释性。

根据他的简单测算，“现在我们能用很低的计算成本，帮助药物化学家减少4-5步优化工程，现有实验方法需要的花费大概是百倍于我们的价格。”

据沈兴宇透露，其采用的图神经网络算法，所要用的数据量远小于其它模型，“大概只有十分之一”；数据来源主要来源于公开数据集、数据库企业，以及公司自己定制化生成。

目前，公司已获得一些知名药企和合作请求和意向。吕旭东也指出，公司核心算法具有很高的延伸性，可指导许多垂直领域的产品，药物研发只是其中一个场景，公司未来还会探索新材料、能源、日化、食品添加剂等领域。

据悉，公司即将启动新一轮融资计划。

附核心团队介绍

- 沈兴宇（28岁）。沈兴宇博士毕业于加州大学伯克利分校化学学院，毕业后成为了Arcus Bioscience的药物化学家，并在经历过药物研发（临床前阶段）的早中晚期，有十年的有机小分子分子研究经验。
- 吕旭东，北京大学物理和经济学学士，加州大学伯克利分校博士，现为加州理工学院研究员。他也是Taihill Venture合伙人。
- 李勃，加州理工大学的化学系在读博士，先后师从Thomas Miller与William Goddard教授。其主要研究方向是解决分子设计，生成等问题，有计算化学，理论化学，大尺度分子模拟，含几何的深度学习模型以及虚拟分子工程设计方面的经验。
- 易旻臻（27岁），本科毕业于清华大学自动化系，硕士毕业于威斯康星麦迪逊大学计算机系。易旻臻连续四年对使用AI对生物数据学习进行研究，此前曾为Pinterest的高级机器学习工程师，在Pinterest带领团队对其推荐算法进行迭代，使用户参与度提高了30%。其工作期间主要使用的GNN（图神经网络）技术也是QuanMol团队所需要的重要技术。

