DOI：10.19789/j.1004-9398.2026.03.003　　**Open Access**
文献引用：孙晓环，路燕，王欢欢．AI驱动的纳米药物癌症治疗新进展[J]．首都师范大学学报（自然科学版），2026，47（3）：39-48. SUN X H，LU Y，WANG H H. Recent advances in AI-driven cancer nanotherapy [J]. Journal of Capital Normal University（Natural Science Edition），2026，47（3）：39-48.

AI驱动的纳米药物癌症治疗新进展*

孙晓环**，路　燕，王欢欢
（扬州大学化学与材料学院，江苏 扬州　225009）

摘要：癌症由于高发病率和高死亡率，成为全球重大公共卫生问题。然而癌症治疗长期以来却面临着不良反应显著、治疗方案优化困难、疗效个体差异大以及经验依赖等挑战。纳米材料的发展，推动了纳米药物递送系统辅助的化疗、光热治疗以及光动治疗的兴起。虽然上述方法提升了癌症治疗的时空可控性，但准确评估并优化纳米药物的个体化安全性及有效性仍然是极具挑战性的课题。近年来，人工智能（AI）技术在癌症治疗领域的深度介入，特别是机器学习、深度学习等核心技术的融合，为纳米药物癌症治疗的安全性、方案制定、优化与实时监控提供了革命性的新范式。本文综述了AI技术在纳米药物癌症治疗领域的前沿应用，重点涵盖了纳米材料化疗生物安全性预测、光热纳米材料参数优化与过程监控、光动纳米材料的剂量规划与疗效评估3个方向。基于上述内容，本文明确了AI技术在推动癌症治疗向精准化、个体化方向转型中的核心价值。同时，本文也对AI技术在模型构建、数据采集及临床应用等方面面临的挑战进行了剖析，并展望未来发展方向。

关键词：人工智能；纳米材料；化疗；光热治疗；光动治疗
中图分类号：TB34；O648；TP18　　**文献标志码**：A

Recent advances in AI-driven cancer nanotherapy*

SUN Xiaohuan**，LU Yan，WANG Huanhuan
（School of Chemistry and Materials，Yangzhou University，Yangzhou Jiangsu　225009）

Abstract：Cancer，characterized by its high incidence and mortality rates，has emerged as a major global public health challenge. However，cancer treatment has long been hampered by significant side effects，difficulties in optimizing therapeutic strategies，considerable inter-patient variability in treatment response，and a reliance on empirical approaches. The development of nanomaterials has promoted the emergence of nanocarrier-assisted chemotherapy，photothermal therapy and photodynamic therapy. Though these modalities improved the spatiotemporal control of cancer therapy，the accurate evaluation of nanodrugs on personalized safety and therapeutic efficacy is challenging. In recent years，the integration of artificial intelligence（AI）technologies into cancer therapeutics，particularly the convergence of core techniques such as machine learning and deep learning，has revolutionized the development，optimization，and real-time monitoring of cancer treatment regimens. This review summarizes the cutting-edge applications of AI technologies in cancer

收稿日期：2025-10-24
*国家自然科学基金项目（22372144）；江苏省“333高层次人才培养工程”项目；扬州大学“青蓝工程”项目
**通信作者：xhuansun@yzu.edu.cn

nanotherapy, including biosafety prediction in chemotherapy, parameter optimization and treatment monitoring in photothermal therapy, as well as dosage determination and efficacy evaluation in photodynamic therapy. It highlights the pivotal role of AI in advancing cancer treatment toward precision and personalization, while also discussing existing challenges and outlining promising future directions.

Keywords: artificial intelligence; nanomaterial; chemotherapy; photothermal therapy; photodynamic therapy

CLC: TB34; O648; TP18 **DC**: A

0 引 言

癌症由于高发病率和高死亡率,成为全球重大公共卫生问题。世界卫生组织和国际癌症研究机构数据显示,2022年全球癌症新发病例约2 000万,死亡病例高达970万[1]。预计到2050年,全球癌症新发病例将增至3 500万,死亡病例翻倍至1 850万[2]。传统癌症治疗手段主要包括手术、化疗和放疗。但手术容易引发肿瘤转移,且给病人带来巨大痛苦;化疗药物靶向性差,放疗难以精准界定肿瘤边界,在抑制肿瘤细胞生长的同时会损伤正常组织,从而引发恶心、骨髓抑制等严重不良反应[3];此外,肿瘤细胞易通过基因突变、表观遗传调控等机制产生耐药性,进一步加剧了传统癌症治疗的难度[4]。

为提升癌症治疗效果,化疗药物的靶向性和耐药性受到了广泛关注,并得到了深入研究。如借助纳米技术的蓬勃发展,纳米递送系统通过增强渗透与滞留效应被动靶向肿瘤,减少了药物对正常组织的毒性,增强了药物在肿瘤部位的富集,实现了化疗药物在肿瘤微环境的选择性功能发挥,为癌症治疗提供了全新方向[5]。此外,新型癌症治疗手段的开发也极大地推动了癌症治疗领域的发展。如:贵金属材料、碳材料等的光热转换特性可实现时空可控的癌症光热治疗[6];吲哚菁绿、卟啉等光敏剂及相关组装体可通过高毒性自由基的生成实现高效光动治疗[7-8];纳米酶的发展,也可促使羟基自由基(·OH)、超氧阴离子自由基($\cdot O_2^-$)等物质生成或葡萄糖、谷胱甘肽等物质消耗,进而实现肿瘤微环境响应性的癌症治疗[9]。尽管癌症治疗技术已经取得了显著进步,中国癌症的5年生存率也从2003—2005年的30.9%提高到2012—2015年的40.5%[10],但为保障“健康中国”计划的进一步实施,当前现状还需进一步改善。

人工智能(artificial intelligence,AI)技术的快速发展,为癌症治疗领域带来了新的机遇,不仅助力药物筛选与性能优化,也推动了个性化治疗的安全性与有效性评估。机器学习(machine learning,ML)算法可通过分析大量癌症治疗试剂的理化性质与生物效应数据,预测其靶向效率、药物释放动力学及毒性[11];深度学习中的卷积神经网络可实现细胞状态的自动分割,提升癌症治疗效果评估效率[12];强化学习算法能动态优化药物的给药剂量与频率,实现个性化治疗[13]。AI技术的数据分析与预测能力,使癌症治疗从“经验驱动”向“数据驱动”转型,可为癌症治疗精准度提升提供新的解决方案。目前已有综述多集中于探讨AI技术在评估或优化传统癌症治疗效果方面的应用,针对AI在纳米药物癌症治疗领域中的系统性综述仍较为有限。因此,本文系统梳理了AI技术驱动的纳米药物癌症化疗、光热治疗和光动治疗新进展,明确了AI技术与纳米药物癌症治疗的融合场景及机制,分析了此领域当前面临的技术、临床及伦理挑战,并展望了未来发展方向,为相关领域的研究人员与临床医生提供了理论与实践参考。

1 AI驱动化疗:纳米材料生物安全性预测

肿瘤化疗是通过干预肿瘤的核酸和蛋白质的合成及功能,从而抑制肿瘤细胞增殖,诱导肿瘤细胞凋亡的治疗方法[14]。一直以来,化疗在临床应用中存在以下2个弊端:(1)化疗的低靶向性导致不良反应发生;(2)化疗效果受制于肿瘤的耐药性。为提升化疗靶向性,研究者构建了一系列纳米递送系统用于化疗药物的肿瘤靶向传输[15-16]。纳米递送系统一般由直径<200 nm的纳米材料构成,借助高通透性和滞留效应[17],其更容易渗透进肿瘤组织,从而将化疗药物高效递送到肿瘤部位。纳米递送系

统的设计需要综合考虑生物相容性、生物降解性、药物包封率及肿瘤微环境响应性药物释放等多种因素。

常见的无机纳米载体包括硅材料、碳材料和贵金属材料,有机纳米载体主要为聚合物材料、超分子组装材料等[18]。Miao等[19]通过优化多孔二氧化硅纳米球(mesoporous silica nanoparticle,MSN)的比表面积、尺寸和孔特征等参数,选取了具有最大比表面积和合适尺寸分布的MSN_3为载体,经由3-氨基丙基三乙氧基硅烷(KH550)在其表面进行修饰,实现了对阿霉素(doxorubicin,DOX)的包封;进一步通过在MSN_3表面包覆聚多巴胺(polydopamine,PDA)层和MnO_2层,实现了DOX在肿瘤微环境的靶向释放。为克服肿瘤耐药性所引起的化疗效果不佳的问题,研究者开发了一系列和化疗相关的联合治疗手段,如化疗/光热联合治疗、化疗/饥饿联合治疗及化疗/纳米酶联合治疗等。在这些联合治疗方法中,级联治疗中上游反应的产物是下游反应的底物。级联治疗一旦启动,这一序列化过程会在原位生成中间产物,为后续步骤提供动力,形成具有放大疗效的自强化效应。这些中间产物的持续消耗还会推动反应平衡向前移动,进一步促进抗肿瘤物质的生成。Jo等[20]制备了包封葡萄糖氧化酶(glucose oxidase,GOx)的二氧化硅纳米颗粒(GOx@NR),并进一步包载了以酮缩硫醇相连的环氧化酶-2抑制药COX-2和SN-38化疗药物的前药。在肿瘤微环境中,过量表达的葡萄糖被GOx氧化生成H_2O_2,H_2O_2的生成一方面加剧肿瘤的氧化应激,另一方面诱导酮缩硫醇断裂,从而释放COX-2和SN-38,促使化疗功能发挥。

尽管肿瘤化疗方法得到了研究者的广泛关注并取得了显著进步,但受限于群体统计困难、影响因素复杂等原因,其个体治疗效果仍然难以预测。此外,纳米材料作为常见的化疗药物递送载体,对正常细胞和肿瘤细胞的选择性生物毒性评估对于纳米化疗领域的发展也至关重要,但纳米材料的多项物理化学性质对多种细胞系的活性评估数据量大,难以通过实验手段完成。

基于上述问题,Kaur等[21]通过整合患者的临床信息(如肿瘤分期、治疗历史),基因组数据及医学影像等多源数据,应用支持向量机、随机森林、神经网络等多种ML模型构建了个性化化疗有效性预测模型。支持向量机关注数据点的边界,适用于小到中等规模数据集且对模型泛化能力要求高的场景;随机森林通过分类或回归进行综合数据分析,可输出不同特征在决策中的重要性排序,适用于特征分析场景;神经网络通过多层非线性变换逐级提取数据的深层特征,适用于大数据量、问题复杂度高的场景;不同模型应用结果显示随机森林和神经网络表现优异,如神经网络的受试者工作特征曲线下面积(area under the receiver operating characteristic curve,AUC)达0.96,该研究证实了ML在实现癌症个性化治疗方面的潜力,表明其能够辅助临床医生制定更精准的化疗方案。

此外,Jyakhwo等[22]还构建了包括纳米材料种类、合成方法、物理化学性质以及细胞毒性等信息的数据库(>3 700个样品),通过ML强化的遗传算法(genetic algorithm,GA)识别对特定肿瘤细胞具有高毒性而对正常细胞低毒性的纳米材料(图1),该模型筛选速度快,且在交叉验证中表现出较高准确性(均方根误差为13.6);作为概念验证,该方法成功筛选出对HepG2细胞具有42%选择性毒性的银纳米颗粒。上述研究表明ML能有效整合纳米材料理化性质及生物活性相关大数据,实现化疗安全性和有效性的早期预测,为纳米颗粒在靶向药物递送系统中的临床转化提供了新途径,为临床制定个性化治疗方案、主动干预高风险患者提供了可靠工具,从而有望改善肿瘤治疗效果。

2 AI驱动光热治疗:光热材料参数优化与过程监控

在化疗领域之外,AI技术在光热治疗中同样展现出显著应用潜力。光热治疗作为一种非侵入性的肿瘤治疗策略,具有组织穿透性强、对组织损伤小以及能时空可控地实现体外选择性照射等优点[23-24]。有机光热试剂在合适光源照射下,外层电子由基态跃迁至激发态,经历内转换和振动弛豫过程实现光热转换[25]。常见有机光热试剂包括吲哚菁绿及其衍生物、卟啉衍生物、有机共轭聚合物等[26]。无机光热试剂光热转换的机制主要在于其吸收电磁辐射后会产生晶格振动或电子振荡,从而使材料的温度升高,主要包括贵金属纳米材料、碳材料和过渡金属氧化物等[27]。

当前,肿瘤光热治疗研究的一个重要方向是通

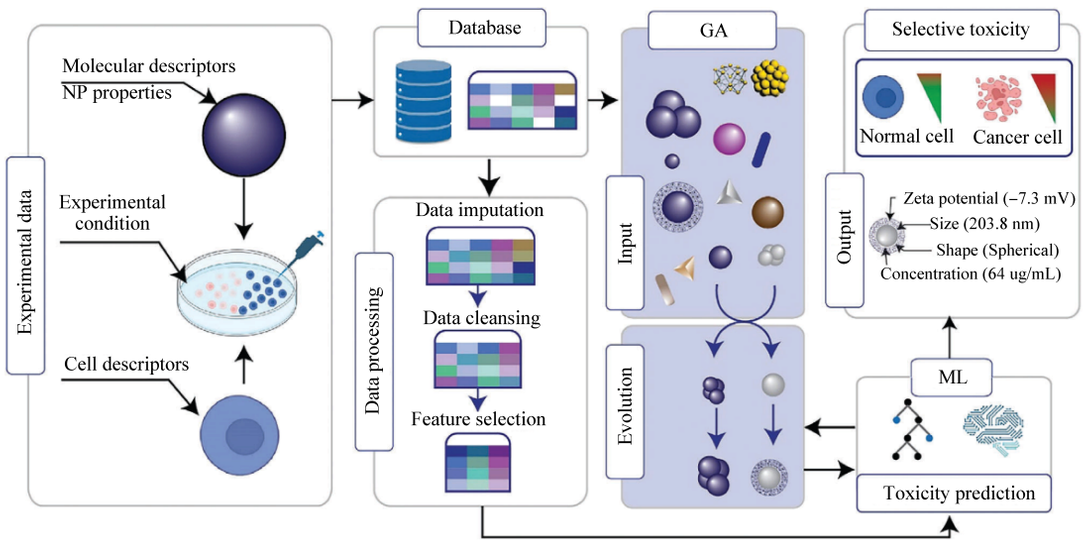


图1　机器学习(ML)强化的遗传算法(GA)预测肿瘤细胞特异性生物毒性纳米材料的工作流程[22]

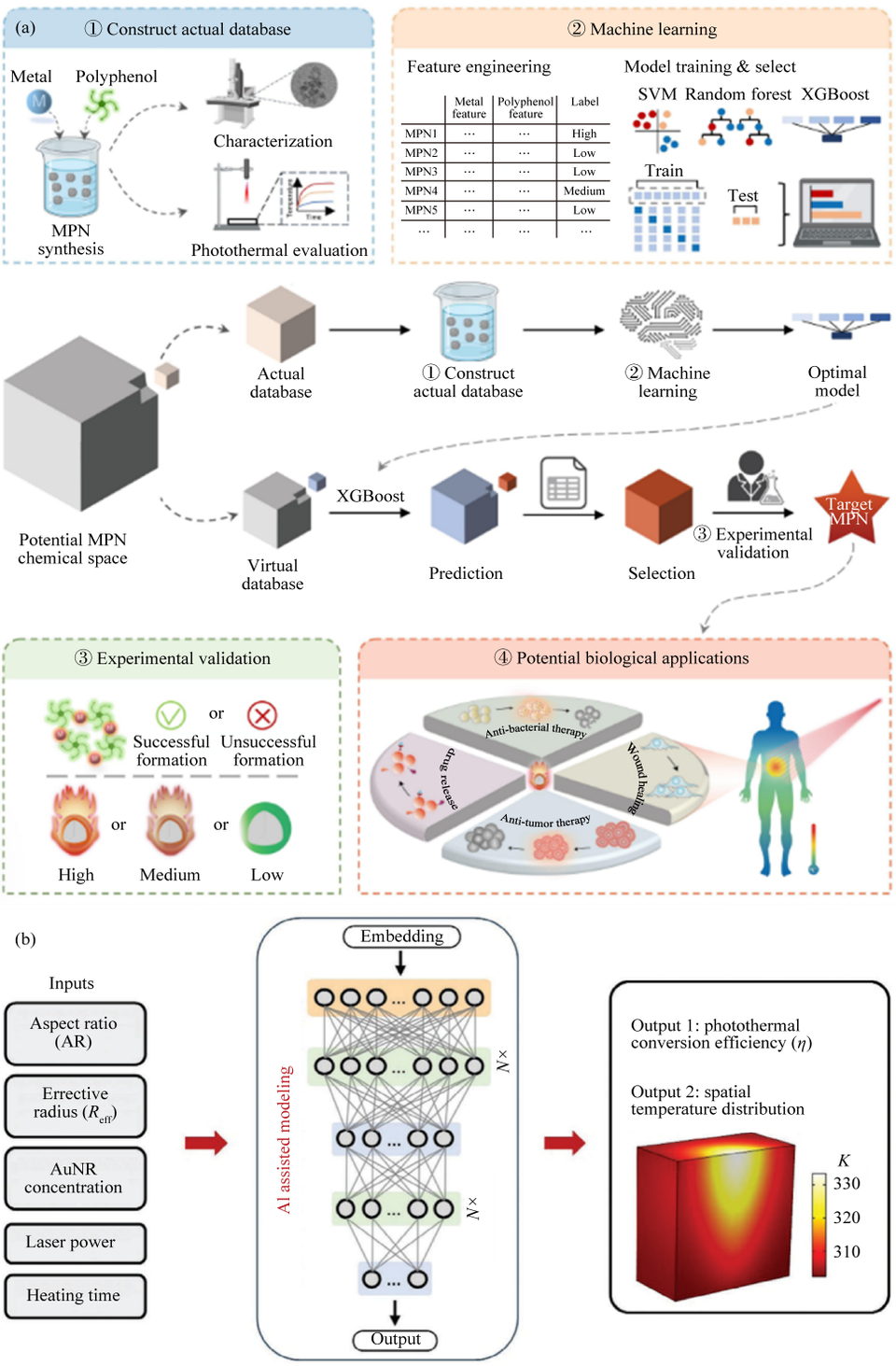
Figure 1　schematic illustration of the prediction of selective toxicity of nanomaterials using machine learning (ML)-reinforced genetic algorithm (GA) algorithm[22]

过结构优化以提升光热转换效率。例如,Wang等[28]将羧基修饰水溶性柱五芳烃(water soluble pillar[5]arene, WP5)与聚乙二醇修饰苯胺四聚体(polyethylene glycol-modified aniline tetramer, TAPEG)共组装,有效提升了苯胺四聚体的近红外(near-infrared,NIR)吸收强度及光热转换效率;除此之外,传统光热治疗所诱导的高温一般>50 ℃,在此温度下,光热试剂虽然可以抑制肿瘤细胞生长,但也会引起正常组织的不可逆损伤,因此,通过调控光热试剂光热性能的动态响应性或控制最优光照剂量以实现低温光热治疗,近年来也成为了光热治疗领域的又一重要研究方向。Shen等[29]开发了一种可用于恒温光热肿瘤治疗的隐色染料-显色剂-溶剂体系的热致变色纳米颗粒(转变温度为45 ℃),在低于该温度时,纳米颗粒呈深绿色,能有效吸收光能并转化为热能;一旦温度达到转变温度,有色纳米颗粒将转为无色状态,从而将温度维持在低温光热治疗水平。

近年来,肿瘤光热治疗虽然取得了明显进展,但仍存在一些亟待解决的问题。比如如何高通量筛选高效光热试剂?此问题的复杂性主要源于光热试剂种类繁多、结构各异及性能评价参数多样化等因素。在此基础上,要想进一步推动低温光热治疗发展,实现对纳米材料的光热空间分布预测也显得尤为重要。

AI技术的数据驱动模型为上述问题提供了独特的解决方案。金属多酚网络(metal-phenolic network,MPN)材料因其低成本、良好的生物相容性以及优异的配体-金属电荷转移特性,被视为理想的光热材料[30]。然而,并非所有MPN材料都具备显著的光热性能,因此高效筛选MPN材料的光热性能具有重要意义。

极端梯度提升算法(XGBoost)通过梯度提升框架迭代优化,可自动处理缺失值并进行特征重要性评估。基于此,Fan等[31]构建了包含80种模块化MPN材料光热特性的数据库,并借助特征工程与模型训练对ML流程进行了优化,最终通过XGBoost从包含44 438种材料的虚拟数据库中,成功筛选出1 654种高性能光热MPN材料(图2(a)),验证结果表明该模型预测高性能光热MPN材料的准确率高达70%;此外,Wu等[32]采集了文献所报道的44种有机光热试剂的数据,基于对不同ML方法的对比,构建了最佳性能回归模型,并预测季铵基团、甲氧基和四苯乙烯等基团具有提升光热试剂光热转换效率的潜力;在此基础上,Jia等[33]基于离散偶极近似(discrete dipole approximation, DDA)、蒙特卡洛(Monte Carlo,MC)模拟、有限元方法(finite element methods,FEM)等数值方法,训练了ML模型。其中DDA用于光学特性计算,MC用于光传输分析,FEM用于温度分布建模。以1 024组光热转换效率数据和2 016组温度场数据为模型训练数据集,该ML模型准确预测了金纳米棒(gold nanorod,AuNR)



注:SVM为支持向量机;XGBoost为极端梯度提升算法。

图2 基于ML的模型预测流程

(a)金属多酚网络(MPN)光热性能预测流程[31];(b)金纳米棒(AuNR)光热转换效率及空间温度分布预测流程[33]

Figure 2 schematic illustration of ML-based prediction models

(a) procedure for photothermal performance prediction of metal-phenolic network (MPN)[31];

(b) a workflow for predicting the photothermal conversion efficiency and spatial temperature distribution of gold nanorod (AuNR)[33]

流体的光热转换及温度空间分布等性能(图2(b)),用户根据AuNR溶液的具体情况自定义输入纵横比、有效半径和浓度等参数,即可快速、准确地预测其光热行为(相关系数高达0.972)。上述ML驱动方法,不仅简化并加速了预测流程,还为肿瘤光热试剂的优化和选择提供了理论指导,也为AI-纳米医学融合提供了范例。

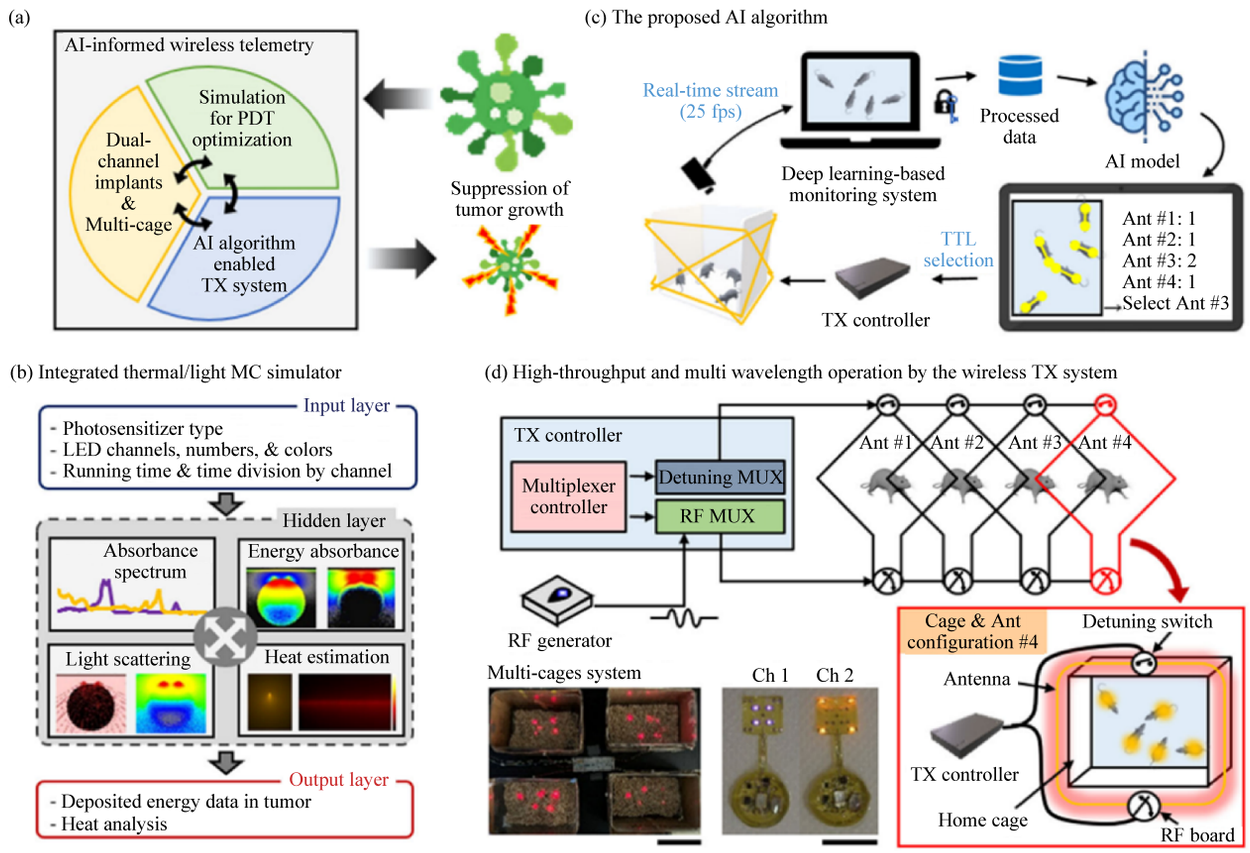
3 AI辅助光动治疗:光敏剂疗效评估

除了在化疗、光热治疗领域的应用,AI技术在光动治疗中也展现出重要的应用潜力。光动治疗是在光照下,光敏剂通过和氧气、水等底物作用从而生成单线态氧($^1O_2$)、$\cdot O_2^-$或·OH等抗肿瘤物质的新型治疗手段[34-35]。

光动治疗一般包括I型和II型2种路径[36]。在光照条件下,光敏剂外层电子由单重态基态(S_0)跃迁至单重激发态(S_1),随后经历系间窜跃和内转换过程进入三重激发态(T_1)。对于I型光动治疗,处于T_1的光敏剂直接和细胞内物质发生电子或质子转移,从而生成活性中间体。所得活性中间体进一步和氧气、水等物质反应产生H_2O_2、$\cdot O_2^-$或·OH等物质;对于II型光动治疗,处于T_1的光敏剂通过与氧气的能量转移进行激发态能量耗散,从而生成$^1O_2$。对比2种光动治疗机制可知,I型光动治疗氧气依赖程度较低,而II型光动治疗氧气依赖程度高。由于肿瘤具有缺氧特征,科研工作者一直致力于开发I型光动治疗试剂,以期降低肿瘤低氧环境对光动治疗效果的影响。在最近发表的一项研究工作中,Su等[37]将4对氨基苯基卟啉(TAPP)与N-苄氧羰基-L-亮氨酸(Cbz-Leu)组装,得到了I型光动路径激活的超分子纳米颗粒(TAPP@Cbz-Leu);Teng等[38]巧妙地以一种典型的II型光动试剂——碘代氟硼二吡咯为客体(G),考虑到其缺电子特征,以富电子的二聚柱五芳烃(BP5A)为主体(H),通过主客体相互作用同样构建得到了具有I型光动机制的球形纳米颗粒(HG)。

新型光敏剂虽然一定程度上提升了肿瘤治疗的安全性和有效性,但其临床转化仍然受制于以下因素:(1)光穿透深度与组织损伤的矛盾,光动治疗一般使用高功率激光以增强光穿透深度,但这不可避免地会造成对正常组织的损伤;(2)光敏剂激活效率低,常见光敏剂大部分具有多吸收峰,但传统单波长光源无法同时对其利用,导致光敏剂激活效率不足;(3)临床前研究通量低,临床前光动治疗,高度依赖激光设备,导致临床前动物实验难以高通量进行,不能很好地研究个体差异影响;(4)光动疗法对肿瘤细胞的杀伤效果经常采用活/死细胞染色进行评估,但此方法依赖人工计数,不仅过程繁琐,而且易受染色剂品质影响。

Kim等[39]集成AI技术和可植入、低功率、多通道无线遥测系统,开发了光动治疗增强新方法(图3),该系统采用MC算法进行热/光模拟,通过计算光传播、光吸收和组织热消散,促成有效波长、光源数量等重要参数的选择,以实现光动治疗效果优化,并以金丝桃素和替莫卟吩为光敏剂治疗体内外结直肠癌,结果表明红/紫双LED光源联合照射比单波长疗效更优,证实了AI融合的无线遥测系统能显著抑制肿瘤生长,为肿瘤光动治疗提供了理论指导和实践基础;YOLOv3具有较高的特征提取能力,适用于在特征图中进行目标检测。为实现准确、高效的光动治疗效果评估,Lü等[40]合成了吲哚菁绿-二氢卟吩纳米颗粒光敏剂,并进行了HeLa细胞的活/死染色实验,继而利用图像处理技术于荧光图像中自动生成细胞的位置和活/死状态,构建了细胞状态识别数据集;进一步选用YOLOv3对数据集进行模型训练,实现了细胞存活率的自动统计,验证结果表明此模型对活细胞的平均识别精度达到94%,对死细胞识别精度达到71.3%。为研究无标记、自动化地定量评估光动疗法对癌细胞动态形态影响的问题,Rahman等[41]运用深度学习方法,采用Cellpose实例分割算法对金纳米颗粒(gold nanoparticle,AuNP)光动治疗后明场显微镜下的肝癌细胞进行了高精度分割,系统提取并分析了光动治疗后细胞的面积、周长、圆形度和曲率等多种形态参数,从而实现了对细胞收缩、变圆等凋亡相关形态变化的定量追踪(图4);研究者还结合逻辑生长模型对细胞圆形度动态变化进行了拟合,并揭示了光动效应随激光强度和光照时间增加的饱和趋势,为优化光动治疗参数提供了量化依据。上述工作表明,将AI技术融入光动治疗,为治疗参数的调整及疗效评估的优化开辟了新的路径。



注:PDT为光动治疗;TX为发送;TTL为生存时间;Ant为天线;MUX为多路选择器;RF为射频;Ch为通道;数字为编号。

图3　人工智能(AI)驱动可移植、多波长无线遥测光动治疗示意[39]

(a)AI与无线遥测系统的集成示意;(b)分析热耗散与光传播的集成蒙特卡洛(MC)仿真器工作流程;(c)小鼠实时监测的AI工作流程;(d)多波长、低功耗无线遥测系统示意

Figure 3　artificial intelligence (AI)-driven implantable, multichannel wireless telemetry for photodynamic therapy[39]

(a) overview of the AI-enhanced wireless telemetry; (b) workflow for an integrated Monte Carlo (MC) simulator for analyzing heat dissipation and light propagation; (c) AI-based workflow for real-time monitoring of mice; (d) schematic diagram illustrating the low-power wireless telemetry system designed for multi-wavelength operation

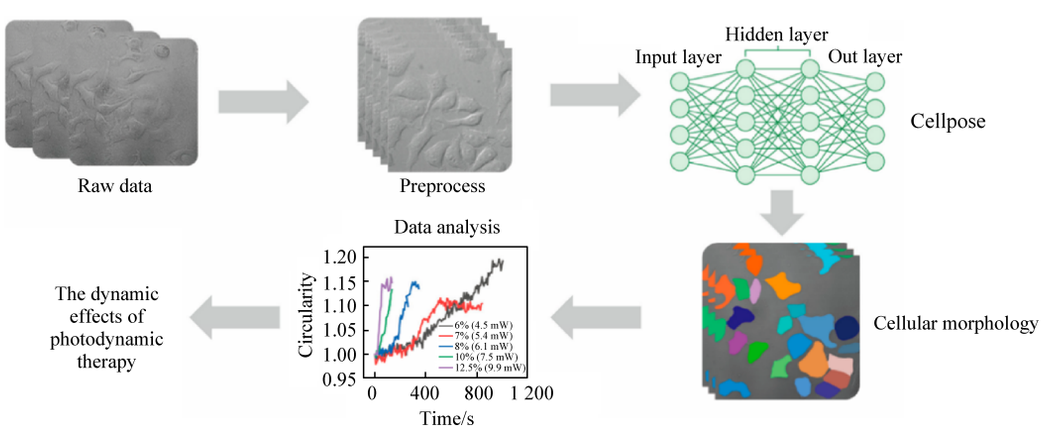


图4　基于Cellpose模型的细胞形态分析及金纳米颗粒(AuNP)光动效果监测流程[41]

Figure 4　schematic representation of Cellpose model-based cellular morphology analysis and photodynamic effects of gold nanoparticle (AuNP)[41]

4 结论与展望

本文系统梳理了AI技术在纳米药物化疗、光热治疗以及光动治疗中的应用,主要得出以下结论:(1)AI技术可筛选具有特异性肿瘤细胞毒性的纳米药物递送载体,辅助解决纳米药物化疗中的安全性问题;(2)AI技术可预测光热纳米试剂的光热转换效率及其空间温度分布,辅助解决光热纳米试剂性能及潜在毒副作用预评估问题;(3)AI技术可实时优化光动治疗光剂量,并评估其光动治疗效果,辅助解决光动纳米药物性能优化及效果定量分析问题。通过上述内容,本文明确了AI技术对纳米药物癌症治疗安全性的预测能力,厘清了AI技术对纳米药物癌症治疗参数优化、剂量规划等关键环节的监控能力,也阐明了AI技术对纳米药物癌症治疗有效性的评估能力。

尽管证实了AI在纳米医学领域的应用潜力,二者间的深度融合以及后续临床应用仍然面临一系列挑战:(1)纳米药物主要依赖增强渗透与滞留效应被动靶向肿瘤,其靶向效率受尺寸、形貌及表面性质等多种参数影响,如何借助AI技术解析高靶向纳米药物的共性特征,并实现高效纳米载体的智能化筛选,仍然是纳米药物癌症治疗领域的关键挑战之一;(2)纳米药物进入血液会吸附蛋白质形成蛋白质冠,该冠层会直接影响纳米药物在体内的循环时间及清除路径,利用AI技术分析纳米药物及血液蛋白的物理化学参数,进而预测纳米药物的蛋白质冠组成及其后续生物学过程,是推动纳米药物临床转化亟待解决的重要问题;(3)AI技术应用于纳米药物癌症治疗时,需整合药物理化性质、生物毒性以及治疗效果等方面的大量实验数据,然而这些数据常因设备来源不一,实验条件差异等问题,存在一致性与可比性不足的挑战。因此,推动数据的标准化与规范化,是提升AI技术预测模型准确性、增强其临床应用价值的重要突破口;(4)AI技术算法复杂,其对数据的理解、内化以及决策不可见。虽然通过实验可验证AI模型的准确度,但由于无法用临床可理解的语言解释内在逻辑,导致其与临床实验的结合尚显不足。进一步研究可解释AI,逐步破解AI的"黑箱"效应是增强AI技术临床应用的有效途径;(5)AI算法的临床验证标准缺失,如模型的训练数据量、外部验证规模、性能指标(如准确率、灵敏度)的最低要求等尚未明确,此外,AI技术与癌症治疗领域的融合需收集大量患者数据,数据隐私保护同样面临挑战,上述问题都需详细制定相应法规加以监管;(6)基于治疗效果预测及优化,麻省理工学院的柯林斯实验室和哈佛大学的Wyss研究所正进一步将AI技术应用于新药研发,此前沿方向预示着AI技术的发展方向将从"辅助分析"向"源头创新"转移。

综上,在化疗纳米药物安全性预测方面,AI技术仍然面临高品质、标准化毒理学数据集匮乏的挑战;在光疗优化中,挑战则体现为多模态时序数据的耦合与对齐难题;在辅助剂量决策方面,除了决策的准确性,决策依据及可解释性也是AI技术面临的重要挑战。因此,未来AI技术与纳米药物癌症治疗领域的深度融合,应更加重视纳米药物在生物体内行为机制的基础研究,同时着力推进数据与模型的透明化、标准化与规范化,实现癌症的安全、精准、个性化治疗,为降低癌症死亡率、实现"健康中国"战略目标提供关键技术支撑。

©The editorial department of Journal of Capital Normal University (Natural Science Edition) 2025. This is an open access article under the CC BY-NC-ND 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

参 考 文 献

[1] BRAY F, LAVERSANNE M, SUNG H, et al. Global cancer statistics 2022: globocan estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries [J]. CA(A Cancer Journal for Clinicians), 2024, 74(3): 229-263. DOI: 10.3322/caac.21834.

[2] FORCE L, KOCARNIK J, MAY M, et al. The global, regional, and national burden of cancer, 1990-2023, with forecasts to 2050: a systematic analysis for the global burden of disease study 2023 [J]. Lancet, 2025, 406 (10512): 1565-1586. DOI: 10.1016/S0140-6736 (25) 01635-6.

[3] 王建,李超群,陈君均,扶正升白膏改善顺铂化疗副作用的临床研究[J].中医药临床杂,2024,36(11):2178-2183. DOI:10.16448/j.cjtcm.2024.1130.
WANG J, LI C Q, CHEN J J, Clinical study on improving the side effects of chemotherapy in malignant tumors with fuzheng shengbai cream [J]. Clinical Journal of Traditional Chinese Medicine, 2024, 36(11): 2178-2183.

[4] DAVODABADI F, SAJJADI S, SARHADI M, et al. Cancer chemotherapy resistance: mechanisms and recent breakthrough in targeted drug delivery [J]. European

Journal of Pharmacology, 2023, 958: 176013. DOI: 10.1016/j.ejphar.2023.176013.

[5] 朱斌,陈思禹,宋明明,纳米药物递送系统在基于化疗的联合治疗中的研究进展[J].生命科学,2023,35(4):437-447. DOI:10.13376/j.cbls/2023052.
ZHU B, CHEN S Y, SONG M M, Advances of nanocarrier-based drug delivery system in chemotherapy-based combination therapy[J]. Chinese Bulletin of Life Sciences,2023,35(4):437-447.

[6] QI M H, WANG D D, QIAN W, et al. High-efficiency gold nanoaggregates for NIR led-driven sustained mild photothermal therapy achieving complete tumor eradication and immune enhancement [J]. Advanced Materials, 2025, 37 (5) : 2412191. DOI: 10.1002/adma.202412191.

[7] SUN X H, YUAN Y H, LU Y, et al. Porphyrin-based supramolecular chiral assembly for enantioselective interaction and augmented photodynamic therapy [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2025, 699: 138235. DOI:10.1016/j.jcis.2025.138235.

[8] YE Q Y, LIANG Y Y, YUAN Y H, et al.pH-responsive chiral supramolecular cysteine-Zn^{2+}-indocyanine green assemblies for triple-level chirality-specific anti-tumor efficacy [J]. Chinese Chemical Letters, 2025, 36 (5) : 110432. DOI:10.1016/j.cclet.2024.110432.

[9] NAVYA N, MEHLA S, BEGUM A, et al. Smart nanozymes for cancer therapy: the next frontier in oncology [J]. Advanced Healthcare Materials, 2023, 12 (25):2300768. DOI:10.1002/adhm.202300768.

[10] LU Z H, CHEN Y, LIU D, et al. The landscape of cancer research and cancer care in China[J]. Nature Medicine, 2023, 29 (12) : 3022-3032. DOI: 10.1038/s41591-023-02655-3.

[11] GREENER J, KANDATHIL S, MOFFAT L, et al. A guide to machine learning for biologists [J]. Nature Reviews Molecular Cell Biology, 2022, 23 (1) : 40-55. DOI:10.1038/s41580-021-00407-0.

[12] GOSHISHT M. Machine learning and deep learning in synthetic biology: key architectures, applications, and challenges [J]. ACS Omega, 2024, 9 (9) : 9921-9945. DOI:10.1021/acsomega.3c05913.

[13] NEFTCI E, AVERBECK B, Reinforcement learning in artificial and biological systems [J]. Nature Machine Intelligence,2019,1(3):133-143. DOI:10.1038/s42256-019-0025-4.

[14] ANAND U, DEY A, CHANDEL A, et al. Cancer chemotherapy and beyond: current status, drug candidates, associated risks and progress in targeted therapeutics[J]. Genes & Diseases, 2023, 10(4):1367-1401. DOI:10.1016/j.gendis.2022.02.007.

[15] YAN J Q, LONG X H, LIANG Y, et al. Nanodrug delivery systems and cancer stem cells: from delivery carriers to treatment [J]. Colloids and Surfaces B-Biointerfaces, 2022, 217: 112701. DOI: 10.1016/j.colsurfb. 2022.112701.

[16] MA D W, WANG G, LU J S, et al. Multifunctional nano MOF drug delivery platform in combination therapy[J]. European Journal of Medicinal Chemistry, 2023, 261: 115884. DOI:10.1016/j.ejmech.2023.115884.

[17] SUN R, XIANG J J, ZHOU Q, et al. The tumor EPR effect for cancer drug delivery: current status, limitations, and alternatives [J]. Advanced Drug Delivery Reviews, 2022, 191: 114614. DOI: 10.1016/j.addr.2022.114614.

[18] YADAV P, CHAUHAN D, YADAV P, et al. Nanotechnology assisted drug delivery strategies for chemotherapy: recent advances and future prospects[J]. ACS Applied Bio Materials, 2025, 8 (5) : 3601-3622. DOI:10.1021/acsabm.5c00046.

[19] MIAO Y L, FENG Y C, BAI J, et al. Optimized mesoporous silica nanoparticle-based drug delivery system with removable manganese oxide gatekeeper for controlled delivery of doxorubicin [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2021, 592: 227-236. DOI: 10.1016/j.jcis.2021.02.054.

[20] JO S, KIM H, WON M, et al. Dual-targeted nanoreactors and prodrugs: hydrogen peroxide triggers oxidative damage and prodrug activation for synergistic elimination of cancer cells [J]. Advanced Functional Materials, 2022, 32 (26) : 2200791. DOI: 10.1002/adfm.202200791.

[21] KAUR L, BAMNE S, DEHANKAR J, et al. Predictive analytics for chemotherapy effectiveness using machine learning [C]//Proceedings of the 6th International Conference on Information Management & Machine Intelligence. New York: Association for Computing Machinery, 2024, 55: 1-9.

[22] JYAKHWO S, SEROV N, DMITRENKO A, et al. Machine learning reinforced genetic algorithm for massive targeted discovery of selectively cytotoxic inorganic nanoparticles [J]. Small, 2024, 20 (6) : e2305375. DOI:10.1002/smll.202305375.

[23] AN D, FU J Y, ZHANG B, et al. NIR-II responsive inorganic 2D nanomaterials for cancer photothermal therapy: recent advances and future challenges [J]. Advanced Functional Materials, 2021, 31(32):2101625. DOI:10.1002/adfm.202101625.

[24] LIMA-SOUSA R, ALVES C, MELO B, et al. Injectable

hydrogels for the delivery of nanomaterials for cancer combinatorial photothermal therapy [J]. Biomaterials Science, 2023, 11 (18): 6082-6108. DOI: 10.1039/d3bm00845b.

[25] HE Y L, CAO Y Y, WANG Y P, et al. Progress on photothermal conversion in the second nir window based on conjugated polymers [J]. Asian Journal of Organic Chemistry, 2018, 7 (11): 2201-2212. DOI: 10.1002/ajoc.201800450.

[26] LEE S, MIN S, KIM G, et al. Recent advances in the design of organic photothermal agents for cancer treatment: a review [J]. Coordination Chemistry Reviews, 2024, 506: 215719. DOI: 10.1016/j.ccr.2024.215719.

[27] THIRUMURUGAN S, RAMANATHAN S, MUTHIAH K, et al. Inorganic nanoparticles for photothermal treatment of cancer [J]. Journal of Materials Chemistry B, 2024, 12(15): 3569-3593. DOI: 10.1039/d3tb02797j.

[28] WANG Z Y, WANG Y Q, SUN X H, et al. Supramolecular core-shell nanoassemblies with tumor microenvironment-triggered size and structure switch for improved photothermal therapy [J]. Small, 2022, 18 (20): e2200588. DOI: 10.1002/smll.202200588.

[29] SHEN S, FENG L, QI S Y, et al. Reversible thermochromic nanoparticles composed of a eutectic mixture for temperature-controlled photothermal therapy [J]. Nano Letters, 2020, 20 (3): 2137-2143. DOI: 10.1021/acs.nanolett.0c00147.

[30] YE Y, ZHENG Q Q, WANG Z Q, et al. Metal-phenolic nanoparticles enhance low temperature photothermal therapy for bacterial biofilm in superficial infections [J]. Journal of Nanobiotechnology, 2024, 22(1): 713. DOI: 10.1186/s12951-024-02985-5.

[31] FAN D Q, CHEN X, WANG S, et al. Machine learning-assisted prediction of photothermal metal-phenolic networks [J]. Angewandte Chemie International Edition, 2025, 64 (13): e202423799. DOI: 10.1002/anie.202423799.

[32] WU S W, PAN Z X, LI X T, et al. Machine learning assisted photothermal conversion efficiency prediction of anticancer photothermal agents [J]. Chemical Engineering Science, 2023, 273: 118619. DOI: 10.1016/j.ces.2023.118619.

[33] JIA P P, CAO C Y, LU X T, et al. Machine learning-integrated numerical simulation for predicting photothermal conversion performance of metallic nanofluids [J]. Small, 2025, 21 (10): e2408984. DOI: 10.1002/smll.202408984.

[34] ZHAO W C, WANG L Q, ZHANG M H, et al. Photodynamic therapy for cancer: mechanisms, photosensitizers, nanocarriers, and clinical studies [J]. Medcomm, 2024, 5(7): e603. DOI: 10.1002/mco2.603.

[35] WANG X, PENG J L, MENG C, et al. Recent advances for enhanced photodynamic therapy: from new mechanisms to innovative strategies [J]. Chemical Science, 2024, 15 (31): 12234-12257. DOI: 10.1039/d3sc07006a.

[36] AUSTIN E, WANG J, OZOG D, et al. Photodynamic therapy: overview and mechanism of action [J/OL]. Journal of the American Academy of Dermatology, 2025. https://www. jaad. org/article/S0190-9622 (25) 00321-4/abstract. DOI: 10.1016/j.jaad.2025.02.037.

[37] SU W, CEN L, YANG D, et al. Porphyrin-assembled nano-photosensitizer with near-infrared response for highly efficient type I photodynamic and photothermal therapy [J]. Science China Materials, 2025, 68(6): 2122-2131. DOI: 10.1007/s40843-024-3358-1.

[38] TENG K X, NIU L Y, YANG Q Z, et al. A host-guest strategy for converting the photodynamic agents from a singlet oxygen generator to a superoxide radical generator [J]. Chemical Science, 2022, 13 (20): 5951-5956. DOI: 10.1039/d2sc01469f.

[39] KIM W, KHOT M, WOO H, et al. AI-enabled, implantable, multichannel wireless telemetry for photodynamic therapy [J]. Nature Communications, 2022, 13: 2178. DOI: 10.1038/s41467-022-29878-1.

[40] LÜ S S, WANG X H, WANG G S, et al. Efficient evaluation of photodynamic therapy on tumor based on deep learning [J]. Photodiagnosis and Photodynamic Therapy, 2023, 43: 103658. DOI: 10.1016/j.pdpdt.2023.103658.

[41] RAHMAN M, YAN F H, LI R Y, et al. Deep learning insights into the dynamic effects of photodynamic therapy on cancer cells [J]. Pharmaceutics, 2024, 16(5): 673. DOI: 10.3390/pharmaceutics16050673.

(责任编辑:王 媛)