

开药物设计先河 辟化学生物天地
融多种学科之长 铸新药研发国器

来鲁华敬挽

追风的科学家——沉痛悼念蒋华良先生

昨夜惊闻蒋华良先生猝然离世，无比震惊，无法相信，无限悲伤。过往的一切历历在目，彻夜难眠。

我与华良相识于上世纪九十年代初，当时我博士毕业后工作不久，与上海药物所陈凯先先生一起承担了八五期间的国家八六三计划生物领域蛋白质工程主题“基于蛋白质和核酸三维结构知识的合理药物设计”课题，华良是课题研究骨干。当时国内的药物设计研究处于起步阶段，虽然条件艰苦，但大家都干劲十足，在努力学习赶超中开展创新研究。从那时起，我逐步见识了他雷厉风行的做事风格和真诚做人、无私助人的品格。

2000年我们一起受聘成为十五（2001-2005）八六三计划生物和农业技术领域生物信息技术主题专家组成员，之后有了很多的接触，难忘一起激烈讨论的思想碰撞，华良忧国忧民的高瞻远瞩，一起到课题承担单位现场考察的所见所闻，2003年春天多地考察后启动的快速反应课题，还有一起吃大闸蟹的快乐。十一五到十二五（2006-2015）期间华良继续留任专家组，而我则承担了靶标发现和药物分子设计关键技术发展与软件研发的重点项目，在华良和专家组的领导下组织中科院上海药物所、北京大学、华东理工大学、四川大学、中科院上海有机化学所、医科院北京药物所等单位的优势力量开展研发工作，发展了多种药物设计新方法、新技术，开发了具有我国自主知识产权的药物分子设计系列软件产品，建立了面向药物研发的药物分子设计技术平台，并开始在创新药物研发中得到成功应用。我在十三五（2016-2020）期间承担了国家重点研发计划蛋白质机器与生命过程调控专项中的“蛋白质机器三维结构导向的新型药物研发关键技术研究”项目，继

续组织中科院上海药物所、北京大学、华东理工大学、中科院上海有机化学所等相关研究团队在原八六三项目的基础上围绕药物设计与靶标预测方法领域的关键问题进行攻关，发展了多种具有国际引领性的药物设计方法与软件，在国内外形成了广泛的用户群；并应用所发展的技术和软件开展了药物设计应用示范，一些候选药物已经实现了专利权转让及合作开发。二十多年来，在华良的领导推动和国内同仁们的共同努力下，我国的药物设计领域实现了飞跃式发展，为推动我国原创药物研发做出了贡献。

华良是天才的科学家，他在研究中经常有很多奇思妙想，敢于做别人不敢做的研究。比如说，他的研究组在 2007 年的一项工作中发展了只基于序列信息进行蛋白质-蛋白质相互作用预测的机器学习方法，这在当时被很多人认为是一种异想天开的想法，因为主流的看法是需要基于结构才能更好地进行相互作用预测。近年来随着深度学习方法的发展，越来越多的蛋白质结构、功能与相互作用预测可以直接基于大量序列信息进行，华良在 2007 年的工作已成为应用 AI 进行预测的先驱。再比如说，他与合作者在 2013 年就发展了基于计算模拟进行药物结合停留时间计算的方法，并成功应用于药物优化，引领了相关研究。

华良是一位卓越的教育家。在过去的二十年间，我与华良在上海药物所的同事以及他过去的多位学生、现在已在各单位挑起大梁之责的中青年才俊有过很多接触并共同承担项目，从中感受到他的人格魅力对于同事和学生的影响，他追求卓越科学和为我国创新药物发展贡献全部力量的精神对于周围人的感召。他创立的华东理工大学药学院，经过二十年的发展已经成为一流药学院，培养了大批药学研发人才。我有幸多次到上海药物所和华理药学院访问，为他们所取得的成就感到骄傲。华良大力支持北京大学的交叉人才培养，曾为北大前沿交叉学科研究院和定量生物学中心交叉学科研究生培养点的建立多次建言，并专程到北大参加论证会，给予大力支持。

华良是一位真正的战略科学家，总是站在国家的高度上思考应该如何推动我国药学、化学生物学、计算化学等领域的发展，对于学科的发展前沿动向十分敏感，总能及时建议在国家层面上给予支持与引导。还记得他在多年前提出要在八六三项目中设立老药新用的研究方向和课题，遗憾的是当时未能实现，再见面时他多次痛惜我们失去了一次绝好的超越机会。为推动我国化学生物学的发展，他

2007-2015 年期间作为专家组主要成员参与领导了“基于化学小分子探针的信号转导过程研究”重大研究计划项目的进行，使我国化学生物学学科实现了跨越式发展，进入国际先进行列。从 2018 年起，华良担任了“生物大分子动态修饰与化学干预”重大研究计划项目的专家组组长，承担了引领我国化学生物学学科发展的重任。他担任上海药物所所长期间，大力引进人才，设立 G 蛋白偶联受体结构研究及其它具有引领作用的实验室，推动多学科合作，为药物所和我国的药化和化学生物学研究做出了杰出贡献。担任所长时总说卸任后要好好休息，但真的卸任后又担任了更重要的岗位。大家已经习惯了在他的引领下奔赴前行，他的猝然离世，使我们失去了一位领航人，使国家失去了栋梁之才。每次见到他，总感觉他很疲劳，他太累了，希望他到天堂后可以好好休息。

华良，多希望能再次见到你，听到你风趣幽默的谈话和发人深省的论述，感受到你对生活和美食的热爱。愿我国的药学科学和化学生物学研究在华良精神的感召下，发展的越来越好。

来鲁华

2022 年 12 月 24 日于北京大学