以代谢组学为中心的多组学整合在医学研究中的进展

王紫怡[1#]，邓世文[1#]，王晓旭[2]，常骁[3]，郭娜[1]，
陈鹏[1,4*]，杨洪军[1*]

[1] 中国中医科学院医学实验中心

[2] 阿斯利康制药有限公司

[3] 中国人民解放军总医院第三医学中心泌尿外科

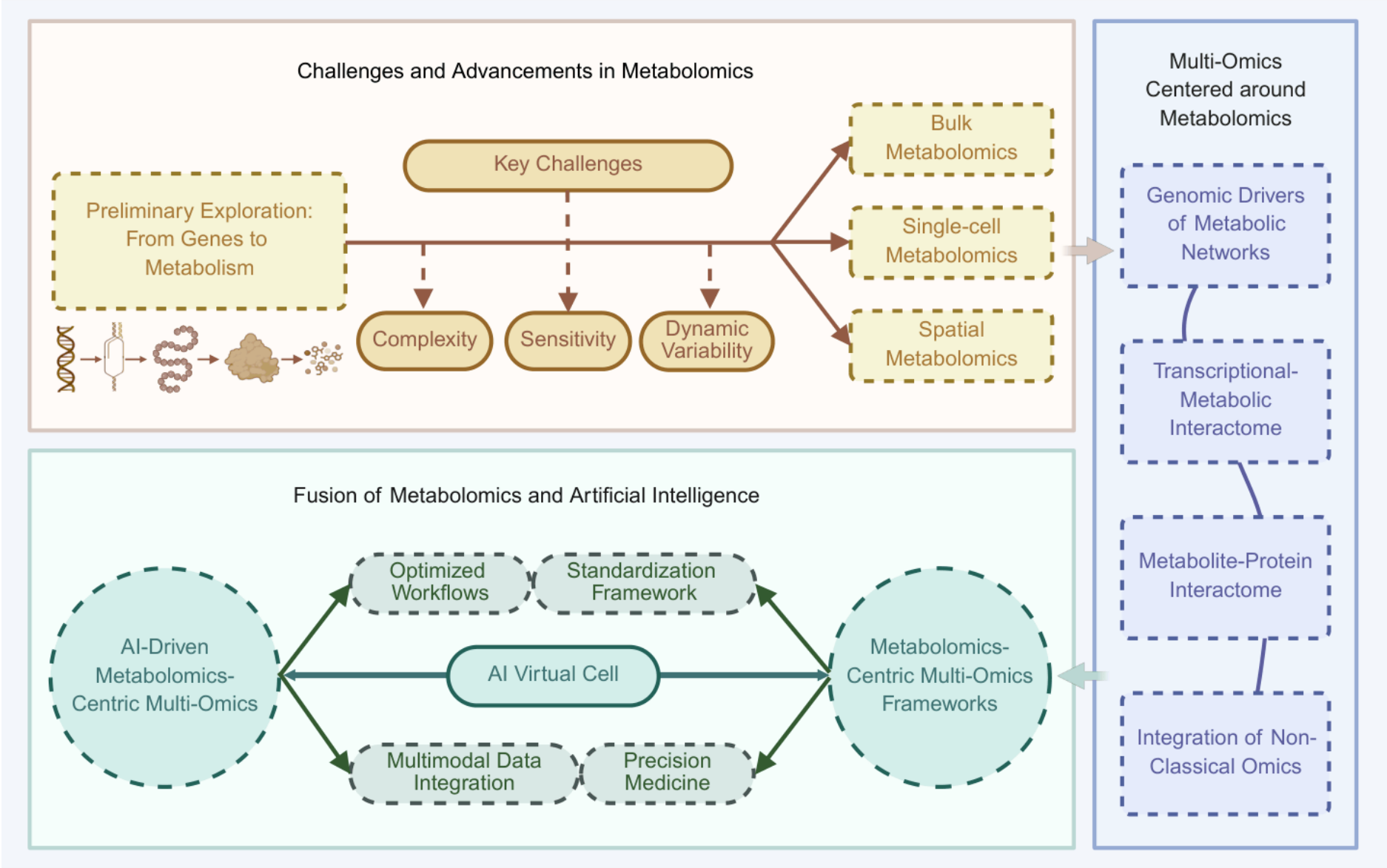
[4] 中成药复杂作用解析湖南省重点实验室



Ziyi Wang, Shiwen Deng, Xiaoxu Wang, Xiao Chang, Na Guo, Peng Chen, Hongjun Yang. 2026. Progress of metabolomics-centric multi-omics research in medicine. ***iMetaOmics*** 3: e70096. https://doi.org/10.1002/imo2.70096

引言 & 亮点

- 提出以代谢组学为中心的多组学整合范式，将其作为解读基因型-表型关系的功能锚点。
- 综述从整体水平到单细胞及空间代谢组学的技术演进。
- 探讨人工智能（AI）驱动的多模态数据整合以克服计算挑战。
- 指出AI虚拟细胞是未来预测性精准医学的关键发展方向。



代谢组学技术的演变

代谢组学技术
（表2 总结）

- 批量代谢组学： 覆盖范围广（1000+ 代谢物），高通量。*最适用于：生物标志物发现。*
- 单细胞代谢组学： 解析细胞间异质性（50-200 代谢物）。*最适用于：稀有细胞亚群。*
- 空间代谢组学： 微米级分辨率，保留组织背景。*最适用于：肿瘤异质性绘图。*

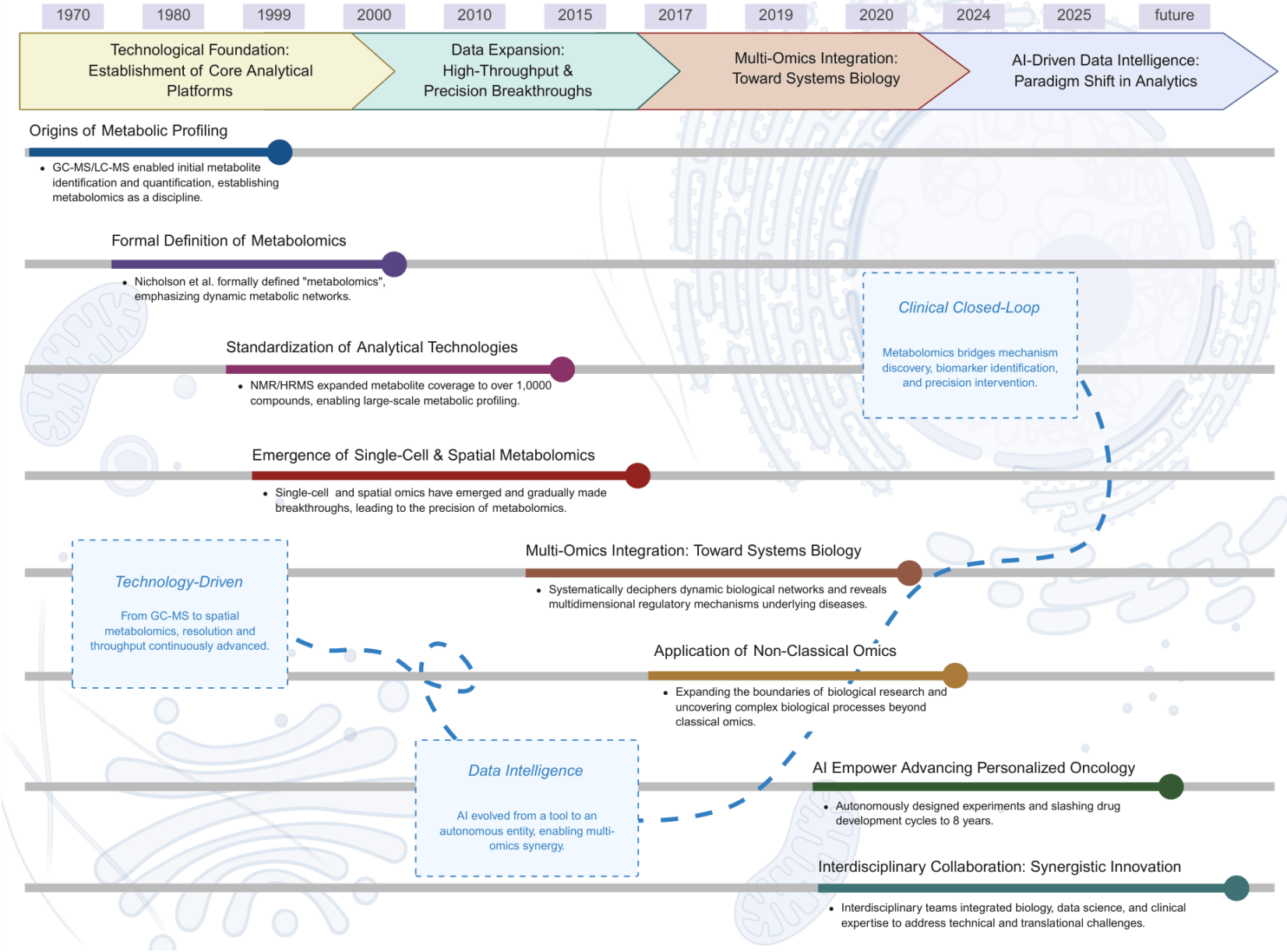


图1 代谢组学的演变：向多组学整合的范式转变

以代谢组学为中心的多组学框架

组学侧重点对比（表1 总结）

基因组学	揭示遗传基础和稳定变异。
转录组学	捕获基因表达动态。
蛋白质组学	检测直接功能关联和修饰。
⭐代谢组学	直接反映表型，对动态生理变化具有高度敏感性。

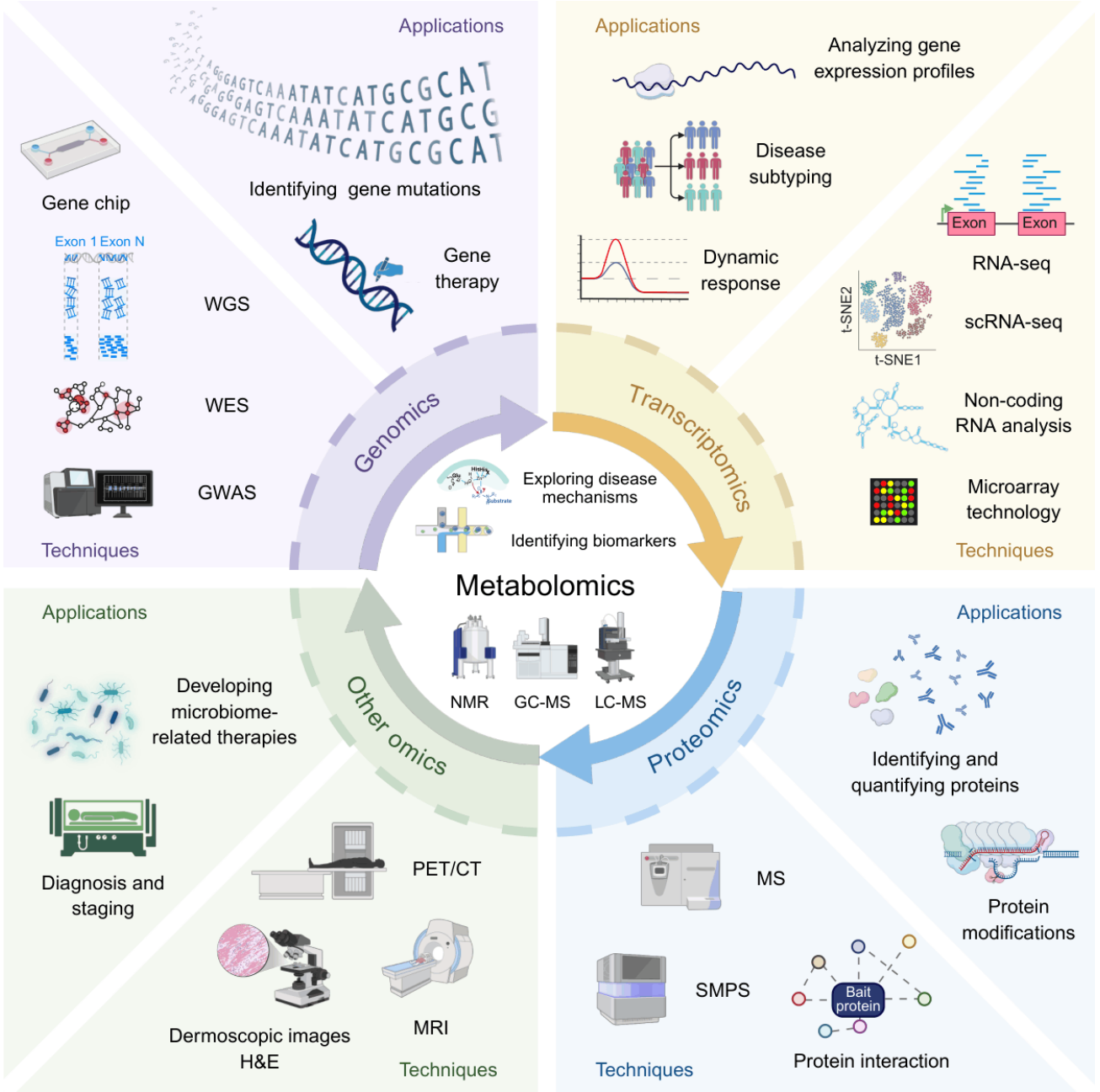


图 2 疾病研究中的多组学整合

AI 驱动的以代谢组学为中心的多组学整合

多组学整合方法论

（表3 总结）

- 基于网络（如 SNF）：融合样本相似性网络，对噪声具有鲁棒性。
- 统计与矩阵分解 （如 MOFA）：线性关系的统一统计框架。
- 基于深度学习（如 MOGONET）：用于模拟复杂非线性跨组学关系的先进神经架构。
- 用户友好平台（如 BiomiX）：用于探索性分析的工作流驱动界面。

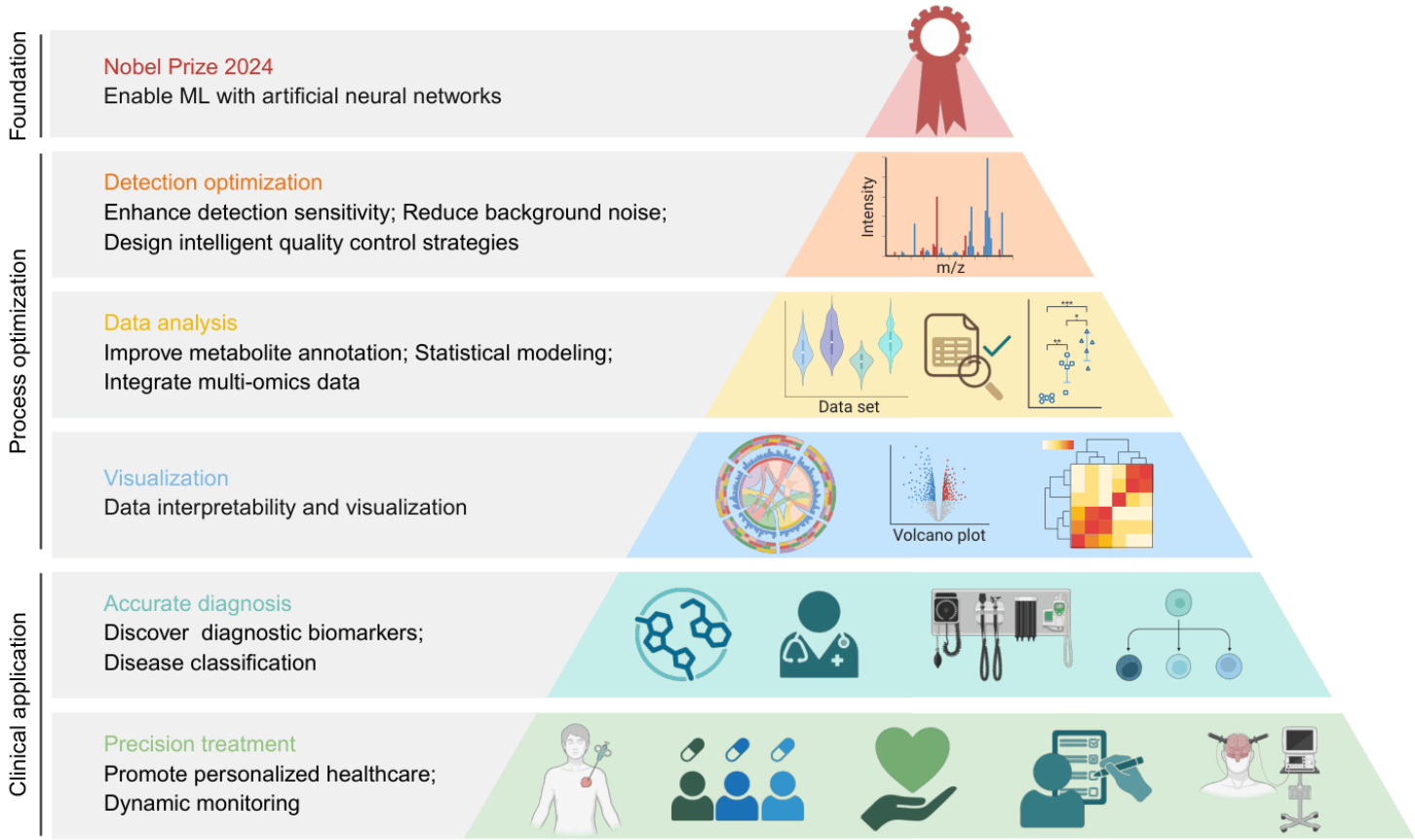


图 3 人工智能驱动的代谢组学：从神经网络基础到精准医疗实施

AI 与组学应用的关键里程碑

精准医学的转化发现

（表4 总结）

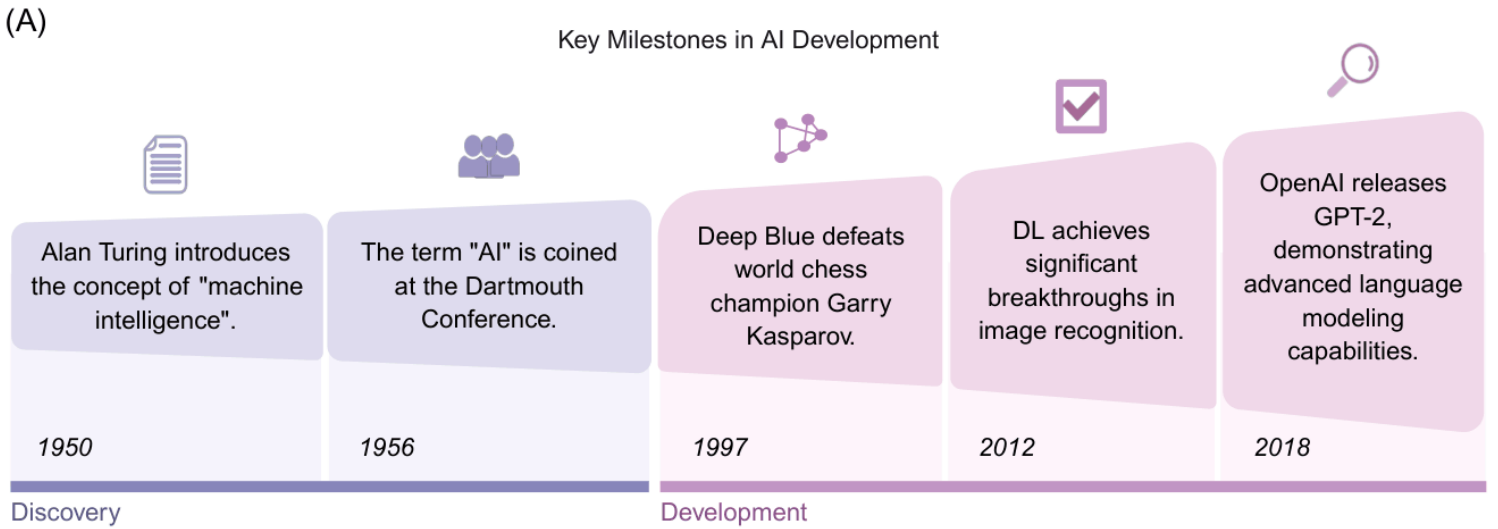
泛癌

阿尔兹海默症

二型糖尿病

一型糖尿病

肾脏疾病



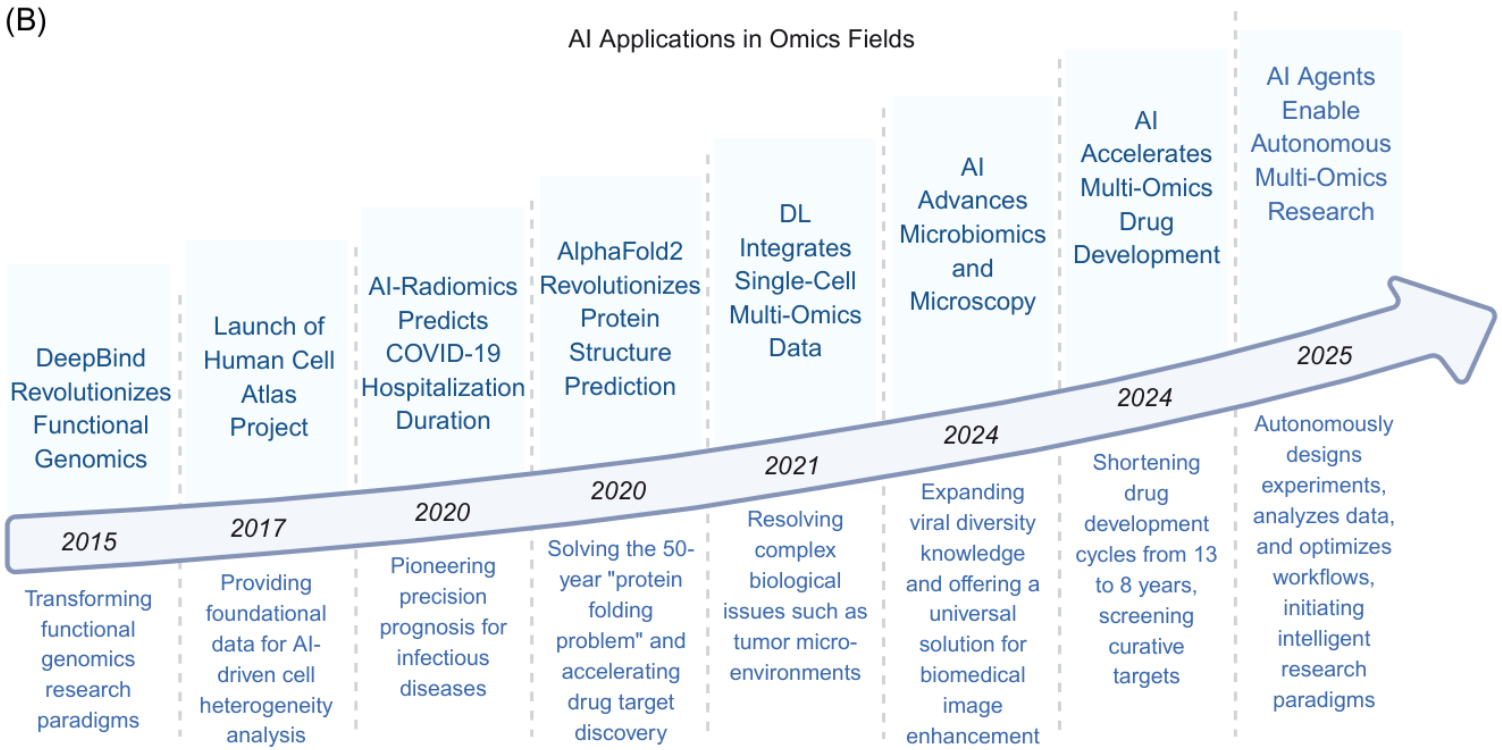


图 4 人工智能发展的关键里程碑及其在组学领域的应用

结论与未来展望

未来方向：AI 虚拟细胞 （AIVC）

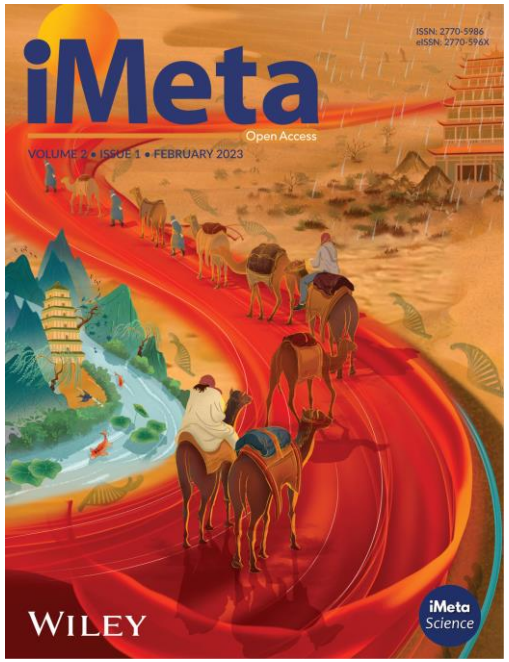
核心要点

- **数字孪生：** AIVC 作为真实生物细胞的数字孪生体，能高保真模拟其结构和功能。
- **代谢作为锚点：** 代谢组学提供最接近表型的读数，用于约束和验证模型预测。
- **最终目标：** 实现疾病进展的预测建模、个性化治疗设计以及临床数字孪生应用。

Ziyi Wang, Shiwen Deng, Xiaoxu Wang, Xiao Chang, Na Guo, Peng Chen, Hongjun Yang. 2026. Progress of metabolomics-centric multi-omics research in medicine. ***iMetaOmics*** 3: e70096. https://doi.org/10.1002/imo2.70096

iMeta(宏): 生物和医学顶级成果发表平台

iMeta WILEY











iMeta (宏)期刊是由宏科学和威立共同出版，对标***Cell***的生物/医学期刊，主编刘双江和傅静远教授，欢迎高影响力的研究、方法和综述投稿。已被**SCIE**、**PubMed**等收录，最新影响因子(IF)33.2，位列全球第65，中国第5，分区表生物学1区Top，CNS级成果发表平台，外审平均21天，投稿至发表中位数87天。

iMetaOmics (宏组学)，定位IF>15对标***NC/SA***的生物/医学综合期刊，已被**ESCI**、**PubMed**等收录。

iMetaMed (宏医学)定位IF>15的医学综合期刊，欢迎投稿!

主页: http://www.imeta.science

出版社: https://wileyonlinelibrary.com/journal/imeta

投稿: iMeta: https://wiley.atyponrex.com/journal/IMT2
iMetaOmics: https://wiley.atyponrex.com/journal/IMO2
iMetaMed: https://wiley.atyponrex.com/journal/IMM3

office@imeta.science
imetaomics@imeta.science

宣传片

iMeta

更新日期
2026/3/30