

# 大幅縮短研發周期 人工智能輔助製藥潛力大 AI設計新款抗生素 助力攻克超級細菌

人工智能 (AI) 輔助藥物開發又有新突破。美國麻省理工學院 (MIT) 研究團隊近期公布，利用AI設計和研發出兩種新型抗生素，有望對抗難以治療的淋病及「超級細菌」抗藥性金黃葡萄球菌 (MRSA)。傳統藥物研發周期長、成本高，AI技術有望通過高效的數據分析和精準的模型預測，使藥物前期研發時間減半，降本增效。

## 診斷與醫學影像分析

當前AI發展的已經能夠自動地分析各種醫學影像，從X光、CT到MRI，迅速識別微小病灶，並提供量化數據支持。以乳腺癌的早期診斷為例，谷歌旗下DeepMind開發的AI系統通過深度學習技術分析大量乳腺X射線圖像，能夠自動檢測潛在的癌症病變。實踐證明，該AI系統將漏診率降低了5.7%。

## 外科手術

目前，AI技術在外科手術中的應用主要有手術機器人、術前規劃、實時影像等。美國直覺手術公司 (Intuitive Surgical Inc) 生產的達芬奇機器人自2000年問世以來，已在全球範圍內廣泛應用，尤其在微創手術、泌尿科、婦科、胸外科等領域，表現出卓越的精準性和靈活性。

## 藥物研發

傳統的藥物研發不僅耗時漫長成本高昂，且失敗率極高。相較之下，AI通過模擬藥物分子與生理系統的相互作用，利用深度學習和機器學習從海量生物和化學數據中挖掘潛在規律，快速預測候選藥物的療效和安全性。

## 「個人定製」醫療方案

通過大數據分析和深度學習算法，AI能夠解析海量的基因數據，快速識別與疾病相關的基因變異。例如，IBM的沃森基因組系統可以在極短的時間內分析超過20萬種醫學文獻和基因序列，將其與患者的基因差異相匹配，幫助醫生精準地制定個性化方案。

▲圖為知名生物技術公司 Cellular Highways 旗下的藥物研發儀器。網絡圖片

## 過度依賴AI 或導致醫生技能退化

【大公報訊】綜合《金融時報》、彭博社報道：最新公布的研究發現，雖然人工智能 (AI) 能輔助醫療人員更有效地對病灶進行檢查，但在去掉AI輔助之後，可能會造成人類醫生的技能在短時間內下滑。發表在《刺針》上的一項由波蘭西里西亞醫科大學團隊主導的研究，計算在醫院引入AI輔助後醫生對於癌症病灶的判斷情況。結果顯示，內窺鏡醫生在沒有AI輔助的情況下，對結腸癌前病變的檢出率從28.4%降至22.4%，在使用AI輔助的結腸鏡檢查中，檢出率為25.3%。據悉，參與研究的19名醫生都非常有經驗，各自已完

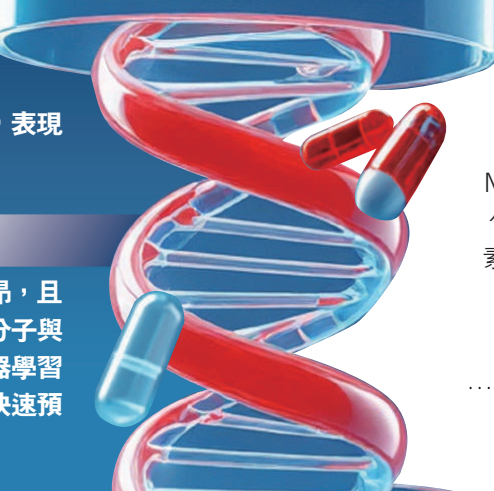
成超過2000例結腸鏡檢查。研究人員警告，長期使用AI可能會導致醫生「去技能化」(deskilling) 效應。研究人員在論文中指出，AI可能會使得醫生過度依賴其建議，讓臨床醫生在缺乏AI協助的情況下，表現反而退步。挪威奧斯陸大學研究人員森悠一指出，隨著AI功能越來越強，技能退化的影響可能更嚴重。英國倫敦大學附屬醫院胃腸病學家奧默，艾哈邁德形容，上述發現「令人震驚」，顯示「去技能化」可能影響患者治療結果。他表示，「檢出率從28.4%降至22.4%可能具有非常重大的影響。」

隨著AI更廣泛地被應用在專業領域，艾哈邁德表示，「雖然AI仍展現出提升臨床結果的巨大潛力，但我們也必須防範AI悄悄侵蝕醫生所需的基本技能，以防止對AI產生過度依賴。」

## AI在醫學上的應用



▲機械手臂輔助醫生進行外科手術。網絡圖片



【大公報訊】目前全球抗生素濫用問題嚴重，導致細菌進化為具有抗藥性的超級細菌，每年全世界約超過一百萬人因為超級細菌感染死亡。由美國麻省理工學院 (MIT) 教授柯林斯帶領的研究團隊，利用人工智能 (AI) 首次在原子層面設計新藥，主要針對經性接觸傳播的淋病，以及被稱為「超級細菌」、可能致命的抗藥性金黃葡萄球菌 (MRSA)，為抗生素研發開啟新篇章。

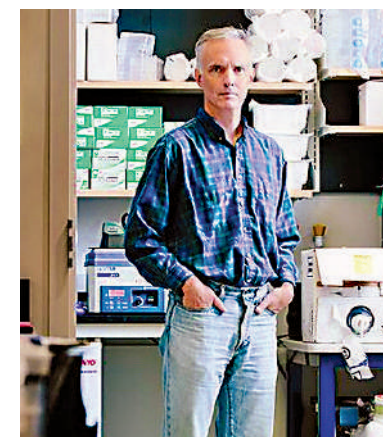
## AI篩選3600萬種化合物

據介紹，研究人員首先向AI輸入大量已知化合物的結構及其對不同細菌的作用數據，讓AI學會哪些分子特性能抑制細菌生長，再讓AI從超過3600萬種已知或尚未存在的化合物中，通過計算篩選抗菌特性。研究中，團隊嘗試了兩種利用AI設計抗生素的方法：第一種是片段構建法，讓AI從數百萬個化學片段中尋找有前景的起始點，然後進行構建；第二種是自由設計法，讓AI從一開始就自由發揮，自主設計全新化合物。這一過程還排除了與現有抗生素過於相似的化合物，並確保所設計的藥物不會對人類有毒。最終，團隊合成了部分候選新藥，並在實驗室及老鼠身上測試，最終發現兩款新抗生素能有效殺滅淋病及MRSA。研究人員表示，最終AI生成的化合物在結構上不同於任何現有抗生素，是實實在在「從0到1」的結果。麻省理工學院 (MIT) 團隊表示，

AI或將開啟抗生素研發的「第二個黃金時代」。研究人員表示，雖然這些藥物尚未準備好進入臨床試驗，預計還需要一到兩年的時間進行精煉，然後才能開始長期的臨床測試。柯林斯表示：「AI可以讓我們以低成本快速地研製出分子，真正讓我們在與超級細菌的鬥智中佔上風。」

倫敦帝國學院愛德華茲博士指出，此項技術具有「重大意義」和「巨大的潛力」，或可大幅加快藥物研發。抗生素存在研發周期長、研發成本高等特點，而且很快會有新的耐藥菌出現。AI在短時間內設計、驗證超過3600萬種化合物的類似效率，是人力無法比擬的。

目前，一款新藥的平均研發成本超過10億美元，且需要經過十多年才能進入市場。但AI能夠通過高效的數據分析和精準的模型預測，大幅提高藥物研發的時間、降低所需的資源成本。波士頓諮詢公司最近發表的一項分析發現，至少有75種「AI發現的藥物分子」已經進入臨床試驗，預計這一數字將不斷攀升。市場分析公司的數據顯示，至2028年，AI將在藥物發現領域節省超過700億美元的資金。



▲美國麻省理工學院柯林斯教授。網絡圖片

▲MIT教授柯林斯的團隊成功利用AI研發出兩種全新抗生素。網絡圖片

## 虛擬細胞取代真人 降低研發成本

【大公報訊】綜合報道：隨著人工智能 (AI) 技術的突飛猛進，AI虛擬細胞 (AIVC) 逐漸嶄露頭角，這類「細胞」能夠在藥物研發、藥物試驗等方面充當「虛擬病人」，大幅減少新藥開發及試驗的時間與成本。

AIVC就是利用AI模擬細胞行為，探索生命機制的過程。美國史丹福大學等研究團隊去年年底在《細胞》雜誌發文，倡議全球科學界運用AI技術打造虛擬細胞。文章指出，多尺度、多模態的大型神經網絡模型，已經能夠精準模擬分子、細胞和組織在不同狀態下的動態行為，且效率極高。原本需要數周才能獲得的實驗結果，如腫瘤細胞對特定藥物的反應，現在通過AIVC可快速獲取。

AIVC能讓研究人員在電腦虛擬環境中取代傳統的活體實驗。史丹福大學教授史蒂芬·奎克認為，未來的生物學研究可能90%依賴計算模擬，而非實驗

室操作。《美國國家科學院院刊》今年1月發文稱，研究者用AI「病人」取代真實「病人」進行模擬測試。研究中，1635個「活在電腦裏」的「虛擬病人」，患上了乳腺癌且癌細胞已發生轉移，研究者對虛擬病人進行「治療」，結果發現在治療過程中，虛擬病人的病理特徵及治療過程與真實病人的數據高度一致。

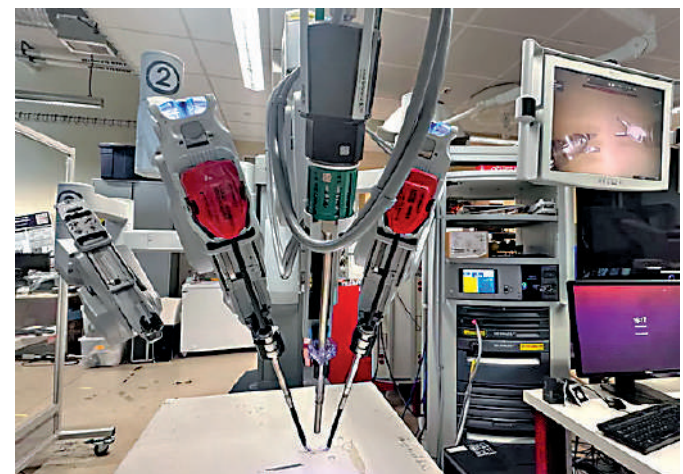
專家指出，現實生活中若要進行藥物試驗，可能需要幾千位患者試驗幾千種藥，實施困難且成本極高；但是虛擬細胞能夠在一套模型中，同時「吃」幾千種藥，研究者可以因此獲得幾千套數據，大幅降低成本。

不過，AIVC雖前景廣闊，也有研究者指出，現有AIVC在預測泛化能力上存在局限，尚無法完全突破訓練數據的邊界，生物醫學數據涉及的隱私倫理問題同樣不容忽視。

▲虛擬細胞模型可以幫助預測腫瘤細胞(如圖)對實驗藥物的反應。網絡圖片



▲經過AI訓練的機器人自主成功切除豬膽囊。網絡圖片



▲此次手術中所使用到的機械臂。網絡圖片

## AI機器人首次「自主執刀」切除豬膽囊

【大公報訊】據《衛報》報道：根據美國約翰霍普金斯大學、史丹福大學和哥倫比亞大學日前共同發表的研究，研究團隊以經過人工智能 (AI) 訓練的機器人，在無人類協助下，自主成功切除豬膽囊，被視為自動化外科手術的重要里程碑。

研究人員利用真人外科醫生在豬屍體切除膽囊手術的視頻，訓練這款SRT-H實驗型手術機器人，讓機器人進行8次同樣的手術，結果成功率100%。這項手術涉及處理軟組織，需要做抓取、夾、切等動作，機器人在手術中，只花了5分鐘就完成切斷

膽囊與肝臟的連接、依特定順序上夾、取出器官等17個步驟。目前現有的手術機器人大多都是由真人外科醫生遠程操控。領導這項研究的約翰霍普金斯大學的專家克里格說，新系統能夠利用AI進行獨立判斷，並且應對手術過程中出現的突發狀況。

克里格指出，這一進步意味著手術機器人能夠從單純執行特定手術任務，轉變為真正理解手術程序，他希望實現如同自動駕駛汽車，減輕外科醫生負擔。在實驗中，機器人在手術進行過程中，自行多次修正錯誤，

也會更換不同器械和適應解剖結構的差異。8次試驗中，機器人平均每次自動修正手術路徑6次。

這項研究表示，若後續驗證順利，10年內可望展開人體試驗。不過，負責英國國家保健服務 (NHS) 機器人策略的專家麥格拉斯提醒，在豬屍體上的試驗，無法測試機器人對病人呼吸、身體動態、開刀部位出血等狀況的反應能力。英格蘭皇家外科醫學院機器人手術負責人亞辛指出，下一步研究須探討這方面的細微差異，評估這項技術如何安全且有效地應用在人類身上。