

【編者按】「AI技術超越人類智慧後，最明顯的影響將體現在醫療領域。」入選時代雜誌「AI百大影響力人物」的庫茲威爾在今年大膽預測，人工智能在2032年後就能讓人類停止老化，且未來AI與人類大腦連接後，可大幅增進人類智力，治癒大部分疾病。

對於AI醫療發展抱有樂觀態度的專家不在少數，2024年諾貝爾獎化學獎得主，藉自行研發的Alpha fold 2 AI模型，攻克了預測蛋白質複雜結構的世紀難題。三位得獎者展現出強烈的信心，宣稱模型的發明將會在

2036年治療人類所有的疾病，人類壽命有望延長至150歲。

這一充滿無限想像的領域，吸引愈來愈多的探索者加入。那麼真實情況到底如何？《大公報》記者邀請香港高校相關的研究學者，從藥物研發、癌症診斷、影像分析、居家健康護理等角度，全面剖析香港學術界在AI醫療發展方面的成績和現況。其中有學者贊同AI醫療將給人類健康護理帶來轉折性的改革，但認為這是一個逐步前進和變化的過程，而非突變式的改革。

AI走進醫療①

AI時代的到來，將會為醫療行業帶來怎樣的奇跡？美國AI企業Anthropic執行長Dario Amodei使用「壓縮的21世紀」一詞來總結他對AI發展的樂觀看法。他說，人類可能在未來5至10年取得相當於50至100年的進展，例如治癒癌症、應付傳染病並找出預防阿茲海默症的方法。

愈來愈多的研究似乎都在證明着AI作為「醫療發展加速器」的角色，香港中文大學計算機科學與工程學系助理教授李煜及其團隊，正與百圖生科（BioMap）進行相關的三項研究，其中AI藥物協同預測項目，可幫助預判多個藥物組合使用的效果，有望為醫生提供新的治療方案，以及為新藥研發帶來靈感。「在藥物研發十年期間，大概有三至四年是做藥物篩選；而在AI的幫助下，這個過程可縮短至一年左右。」李煜說道。

大公報記者 湯嘉平(文) 林少權(圖)

傳統的新藥開發領域普遍存在所謂的「雙十法則」，意思是指一款創新藥物的研發通常需耗時十年、投入約十億美元，且成功率偏低。這使得許多罕見疾病所需的特殊藥物，難以獲得足夠的研發資源。

預測藥物組合效果 免人手測試

李煜教授表示，臨床上常需採用聯合用藥策略去治療疾病，因為單一藥物往往效果有限。然而，哪些藥物的搭配能起到一加一大於二的效果，哪些藥物的搭配又會導致效果相互抵銷甚至變差，就需要科研人員逐一地去嘗試，「就像鑰匙和鎖一樣，鑰匙是藥物，鎖是發生病變的蛋白質。」科研人員需要製造出一把最適合的鑰匙去開這個鎖，而這個鑰匙需要經過多種材料和不同的窗口設計組合，打磨成千百種不同的模樣去開不同的鎖，讓病變之處恢復正常。

「傳統的方法，就是我給你一萬把鑰匙，你就一個個慢慢去試，總有一個能打開。然後現在我們的AI藥物協同預測項目，就是會直接告訴你，哪些藥物組合是可行的，即哪些潛在的鑰匙是能開這個鎖的，然後你直接去試就好。」李煜解釋，這就是藥物研發必須經過的藥物篩選階段，該階段一般需要三至四年，而AI藥物協同預測項目則有望將時間縮短至一年，即整體的新藥研發時間，可能從原先的十年縮短至七年左右，甚至是更短的時間。

此外，經過實驗發現，AI藥物協同預測項目預測藥物組合效果的準確率，會比現有技術提升10%至30%，即使是未見過的新藥也能準確地預測效果。

談及該項目所運用的AI大模型，李煜介紹，該AI大模型是以蛋白質語言為核心的大模型，在預訓練階段學習多種態大規模生物資訊（包括藥物、細胞系和疾病）和圖結構，並進行微調，即針對特定的預測任務進行模型參數的調整和優化。（見藥物組合協同作用預測模型框架圖）

發現逾300種胰腺癌藥物組合

至於蛋白質語言，李煜教授解釋，正如人類擁有語言，生命世界也有一套由氨基酸序列構成的「分子語言」，即蛋白質。而人工智能（AI）領域的蛋白質語言模型（PLM）展現出解碼這套語言的強大能力，能夠精準預測蛋白質的結構與功能。「我們根據這個蛋白質的結構，才能去設計或者發現藥物。」

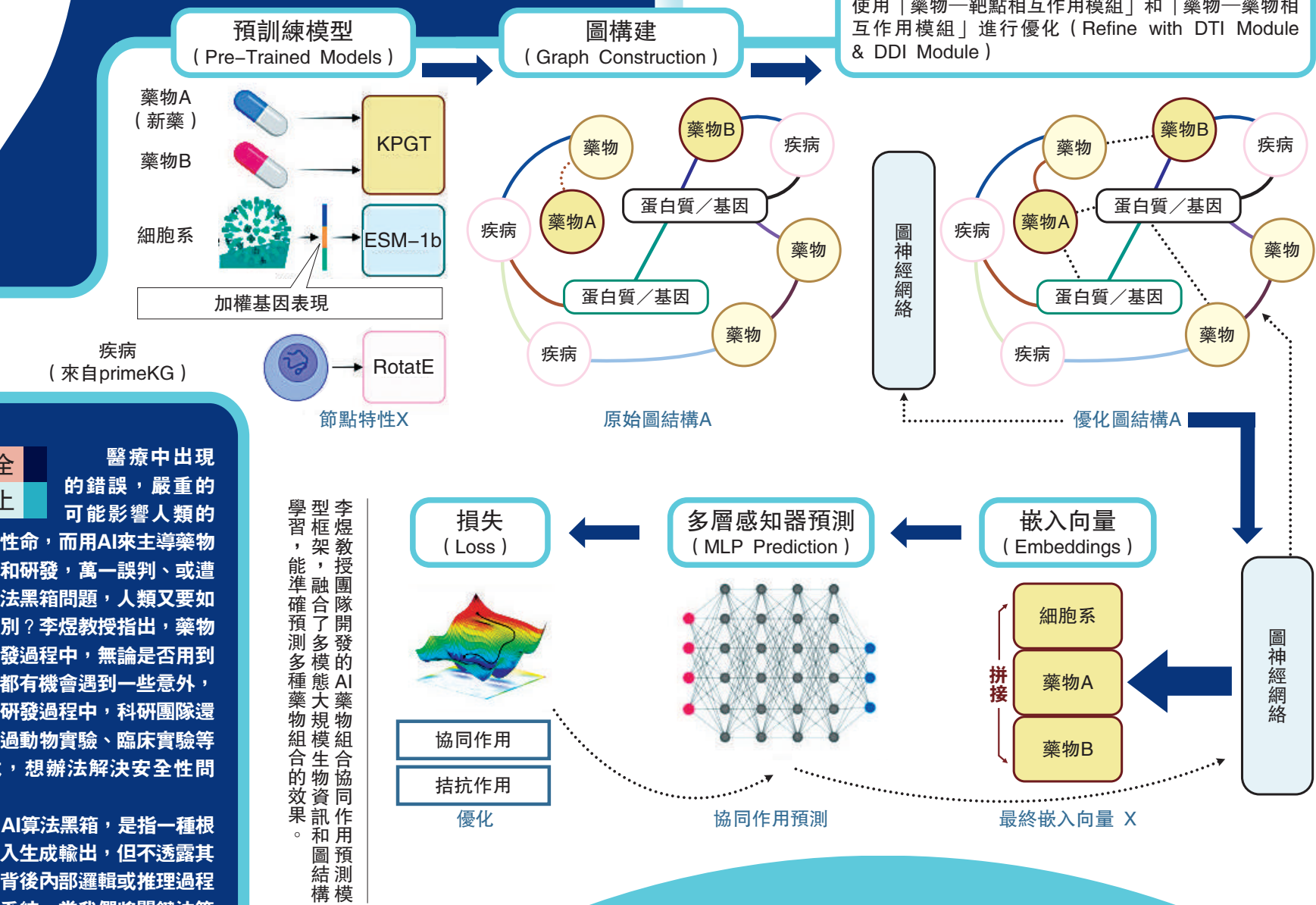
目前，該AI藥物協同預測項目已針對胰腺癌的治療，發現300多個具有協同作用的新組合。李煜透露，團隊現時也在用此技術研究抗生素抗性藥物，以及包括治療漸凍症在內的罕見病的藥物。對於數據稀缺、模型面臨「小樣本學習」的挑戰，李煜指團隊也在想辦法去擴展數據的來源，「不光是用這一個疾病的數據，我們可以用很多不同疾病的數據，如果這些疾病是相關的。比如說神經退行性疾病，那麼不光是有漸凍症，其實還有一些其他的跟運動神經相關的疾病，這些疾病的數據都是有可能幫助模型去學習。」

中大研發大模型 篩選藥物需時減至一年

加速新藥面世 治罕見病



藥物組合協同作用預測模型框架圖



降低 成本

用AI預測藥物在細胞上的作用

香港中文大學 計算機科學與工程學系助理教授李煜及其團隊，與百度參與發起創立的 生命科學大模型公司——百圖生科進行三項AI醫療研究，其中AI藥物協同預測項目已完成，AI細胞形態預測項目則於今年9月發表，另一項研究正處於修改論文的階段。李煜教授日前就AI細胞形態預測項目接受《大公報》獨家專訪時透露，該項目是由自行研發的AI大模型去預測藥物在細胞上的作用，細胞的形態會出現哪些變化，幫助減少細胞實驗的操作部分，降低相關的時間消耗和成本。

AI與人類協作 短期內易取得突破

一款新藥從研發到上市需經歷三個階段：臨床前研究（藥物研究）、臨床研究及藥物上市。臨床前研究主要是藥物篩選的階段，包含藥物研究（例如標靶點確認、化合物合成及篩選）、臨床前實驗（細胞實驗、動物實驗）以及臨床實驗審批（IND）三個部分。而AI細胞形態預測項目，可在細胞實驗階段前，用AI去預測哪些藥物能對目標細胞達到特定的效果，「甚至是之前還沒有見過的藥物，也可以預測它的效果，省去傳統的實驗環節。」李煜說：「如果通過AI已經預測到該藥物作用於該細胞是不能產生預期效果（hopeless）的，那可能就不做了。」與AI藥物協同預測項目所用到的模型不

同，AI細胞形態預測項目中的模型，並不涉及預訓練和微調的階段。李煜解釋，因其總體的數據量並不是特別大，而預訓練和微調AI模型更適合支持大量的數據樣本。

像AI細胞形態預測項目中的AI模型，李煜介紹，主要包含變分自編碼器模型和潛擴散模型（見上方預測細胞形態框架圖）。當中原理簡單而言，有點像教一個小孩怎麼去認識世界，「比如說我們訓練一個模型，就讓AI去識別這個物體，它是一隻狗，還是貓？給AI一些圖片，然後給AI一些標籤，讓模型學習兩者的映射關係。」

問及該項目的下一步打算，李煜表示，下一步團隊還會與其他機構一齊研究AI模型去預測細胞基因表達的一些變化。而對於整個AI醫療行業發展，李煜認為AI與人類的協作更容易在短期內取得突破。