

◆ AI製藥成近年藥物研究新方向，歐美投資者紛紛加大投資。 網上圖片

利用人工智能(AI)技術研發新藥，成為近年藥物研究的新方向之一。美國科企Google母公司Alphabet名下的藥企Isomorphic Labs，正積極開發有關技術，據報該企業已與數間知名藥廠磋商，最快未來數月達成首宗「AI製藥」交易。分析認為AI製藥將掀起一場「新藥革命」，能更好利用數據分析，為多種疾病提供全新療法。不過也有聲音指任何藥物從研發到臨床使用都相當耗時，AI製藥前景仍有待觀望。

Isomorphic Labs於去年11月從Google的AI部門DeepMind分拆出來，公司以DeepMind的AI系統「AlphaFold2」為研發基礎，該系統近年成功利用數據演算，預測出逾100萬個物種的2.14億個蛋白質結構，幾乎涵蓋地球上所有已知蛋白質。了解蛋白質結構有助優化藥物設計，讓藥物分子與蛋白質受體有效結合，發揮最大療效。

廣招藥廠精英加快研發進度

為加快研發進度，Isomorphic Labs已陸續招聘在科學、製藥、機器學習、系統開發和數據演算領域的人才。公司技術總監亞克寧寧早在Sophia Genetics工作，利用機器學習技術識別腫瘤和其他疾病。公司也不乏來自葛蘭素史克(GSK)或阿斯利康等藥廠，以及其他知名科企的精英。除倫敦總部外，Isomorphic Labs亦在瑞士洛桑設立分部，羅氏、拜耳等製藥巨頭也在當地設有辦公室。

DeepMind曾計劃利用AI系統，研發治療帕金森病和利什曼病兩種高致死率寄生蟲疾病的藥物。不過Isomorphic Labs商業總監默多克稱，公司現時不會專注於特定藥物，而是要建立可供研發不同類型藥物的平台，「公司希望生產各類藥物，再與藥廠合作，將其提供給有需要的患者。」

歐美投資者近年紛紛投資AI製藥，美國投資銀行摩根士丹利近期發表報告稱，AI製藥有望在未來10年開發50種新療法，商業價值可達500億美元(約3,895億港元)。不過報告也提醒，投資者還需看到AI製藥投資實例作為「確鑿證據」。

有業界人士持懷疑態度

有業界人士認為讓AI製藥需遵守嚴格製藥法規、逐步融入醫保系統並非易事。AI製藥初創企業BenevolentAI藥理學副總裁理查森表示，全球現有15種AI設計的藥物正進行臨床實驗，但藥物開發時間一般長達10年甚至更久，「在AI製藥獲得監管部門批准前，肯定會有人持懷疑態度。」

專注AI技術和生命科學領域的風險投資公司Air Street Capital合夥人貝奈奇稱，AI製藥如今還未達到投資業界期待，但疫情蔓延讓藥廠意識到要加快研發進度，AI技術能派上用場，「AI企業如今正為製藥業推開一扇更開放的大門。」

◆綜合報道

藥廠自建資料庫 收錄人類動物實驗數據

許多大型藥廠近年均重視發展AI技術，除與AI製藥初創企業合作外，還自行建立AI資料庫，收錄藥廠積累的人類和動物實驗數據。部分藥廠還會主動聘請AI技術專家，協助提升自家AI演算法效率。

BioNTech培訓AI演算法

德國生物科技公司BioNTech過去4年採用名為「中間人」的方法，由人類針對性錄入數據培訓AI演算法。公司行政總裁沙欣形容，「AI就像孩子。你必須教他們很多東西，直到他們開始得出結論。」公司現時的AI技術已能自動篩選資料庫，整合45億種商業可用化合物數據，加快藥物識別速度。

美國強生的子公司楊森製藥首席數據科學官兼研發戰略主管納賈特·汗表示，公司正建立「雙語人才庫」，這些人才熟悉製藥專業知識，亦非常了解AI技術，「我們的數據科學家在機器學習和數碼健康等領域都有深刻了解，研發新藥所需的科學和醫學知識儲備也很豐富。」

倫敦大學國王學院藥物化學教授拉赫曼稱，生物製藥行業早年曾斥巨資研究組合化學技術，但未見變革性突破，如今對於AI製藥技術，部分藥廠態度審慎。不過拉赫曼認為未來5至10年間，所有大型藥廠都會將AI技術與研發新藥互相結合。

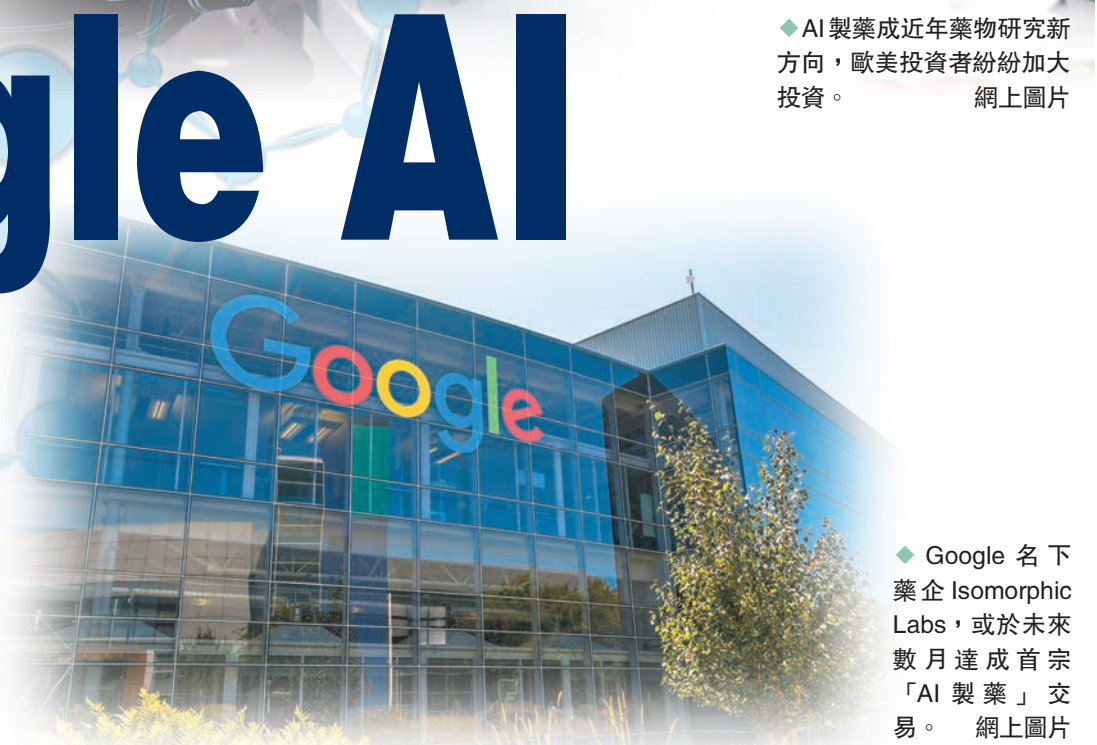
◆綜合報道

可預測蛋白質結構 有助優化藥物設計

Google AI

與知名藥商

有望達成首宗交易



◆ Google名下藥企Isomorphic Labs，或於未來數月達成首宗「AI製藥」交易。 網上圖片

AI運算解析蛋白質結構尋「鎖匙」

AI製藥並非直接用人工智能技術研發新藥，而是借助AI運算能力解析蛋白質結構。在藥物研發領域，如果將與特定疾病相關蛋白質視作「鎖」，最適切與「鎖」結合的藥物分子，就是治療該疾病的「鎖匙」。如此一來，若能運用AI技術加快確認蛋白質結構，就有望加速新藥開發。

以AI系統「AlphaFold」為例，該系統透過運算大量數據，預測部分人類蛋白質序列。科學界早年已剖析部分蛋白質結構，覆蓋約17%人類蛋白質序列。AlphaFold在此基礎上，預測出約98.5%的人類蛋白質結構，而在58%的預測結構中，合成蛋白質所需氨基酸的位置被認為可信，證明AI預測有一定精確度。當擁有龐大準確的數據庫，研究人員就能更專注確認蛋白質結構細節，這也是許多藥物能否成功的關鍵。

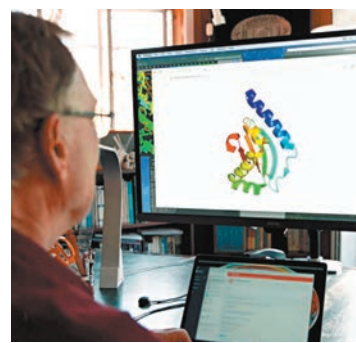
未能降低藥物免疫性風險

不過解析蛋白質結構只是研發步驟之一，對於整體提速的成效暫時仍有限。醫學專家指

出，在最重要的臨床實驗中，藥物免疫性常會導致實驗失敗，不論AI系統以多快速度確認蛋白質結構，都不能降低這些風險，加上AlphaFold現時只能給出預測結果，希望解析完美的蛋白質結構用於藥物篩選，還需要更多數據。

AlphaFold研發團隊認為，預測蛋白質結構已證明AI製藥的價值，研究人員日後可針對AI系統的需求收集數據，讓AI技術發揮更大效用。

◆綜合報道



◆ AlphaFold預測出更多人類蛋白質結構。 網上圖片

專家冀AI「愈學愈精」 改變人類對疾病理解的「癌症疫苗」

AI製藥技術正處於快速發展階段。不少專家展望未來，都希望AI演算法能夠「愈學愈精」，接收更多數據進行針對分析，甚至改變人們現時對疾病的理解。例如利用AI技術獨立分析每名癌症患者的腫瘤數據，就可預測病徵發展趨勢、協助制訂療法，還可以開發個人化

◆ BioNTech團隊期望運用AI技術的癌症疫苗，能引導患者免疫系統攻擊腫瘤。



網上圖片

的「癌症疫苗」。

德國生物科技公司BioNTech近年研究的癌症疫苗，就是以AI技術為核心。研究團隊希望這款疫苗能引導患者免疫系統，主動攻擊體內的腫瘤。行政總裁沙欣稱，每名患者身上的癌症突變成因不一，「我們能否讓AI構建一個程序，自動選擇患者身上適合標靶藥物治療的目標？」沙欣承認這項任務相當複雜，不過他認為AI演算法也正變得「愈來愈好」。

哈佛大學一項研究發現，經過不斷收集分析數據，AI系統AlphaFold除預測蛋白質結構外，似乎還「理解」蛋白質結構之間關係的部分知識。研究團隊正嘗試有意屏蔽一些重要信息，提升AlphaFold的「解難能力」，令其日後的預測更準確。

◆綜合報道

投資者看好前景 美英融資124億元

生物科技及醫藥股今年持續受壓，不過許多AI製藥領域初創企業卻受到投資者青睞，籌得數以億計美元資金，還與多間藥企巨擘達成合作協議。有投資者看好AI製藥前景，認為該技術能建立新平台，有效研發各類新藥，並可降低成本。

較2017年超逾一倍

PitchBook數據公司統計顯示，單是美國和英國AI製藥領域，今年便融資16億美元(約124億港元)，遠超2017年的6.7億美元(約52億港元)。去年9月在倫敦成立的初創企業

Charm，已獲得5,000萬美元(約3.9億港元)融資。該公司AI技術平台「DragonFold」可解析蛋白質的三維結構，協助研發新的抗癌藥物。總部設於倫敦的另一初創企業Peptone則以AI技術解析無序蛋白質的結構，也獲得4,000萬美元(約3.1億港元)融資。

不少大型藥企均與AI製藥企業合作。美國藥廠百時美施貴寶與法國藥廠賽諾菲，都先後與兩間AI製藥企業Owkin和Exscientia簽約。百時美施貴寶全球生物識別和數據服務項目主管塞瑟拉曼表示，公司非常看好AI技術，相信能協助改善藥物臨床實驗的設計。

◆綜合報道