



新药研发平均成本26亿美元、耗费10年,成功上市不足1/10 AI入局能让药企告别“豪赌”吗

本报记者 刘垠

不久的将来,技术革新将这样改变我们的生活:人工智能极大地加快新型药物、材料的研发速度,新型诊断工具打造更先进的个性化医疗;增强现实变得随处可见,现实世界被大量信息和动画所覆盖……

这些足以改变世界的想法与其他新兴技术,近期一起入围由《科学美国人》和世界经济论坛发布的2018年全球十大新兴技术。其中,人工智能辅助化学分子设计—机器学习算法加速新型药物和材料的研发,尤为引人关注。

目前,全球有近100家初创企业已在探索用于研发新药的人工智能方法。“人工智能在材料合成的自动建模、高速匹配和假设检验等环节可以发挥重要作用,其性能比人类高出多个数量级。”新一代人工智能产业技术创新战略联盟秘书长、北京大学计算科学技术系主任黄铁军说,一旦材料和药物的模型库比较完备,人工智能就会极大加速新型材料和药物的研发进程。

助力化合物合成 简单直接有效

无论是设计新型太阳能材料、抗癌药物还是用于农作物的抗病毒化合物,有两个难题待解决:找到所需的正确化学结构,并确定哪些化学反应能让正确的原子与所需的分子连接。如果使用传统方法,上述问题的答案往往来自于复杂的猜测和意外的发现。

常规的新药研发模式是,随着一个潜在的药靶被发现,新药研发工作者通常利用高通量筛选的方式来发现苗头化合物。对数以百万计的化合物进行筛选,过程十分缓慢且产生的有效结果较少,并且要经历许多次失败、痛苦的尝试。

显然,人类做这样的工作力不从心。“人工智能的助力,正在提高设计和合成化学分子的效率。”北京大学前沿交叉学科研究院特聘研究员裴剑锋说,机器学习算法通过分析已知的所有实验,设计新分子的合成步骤,可极大提高分子合成的成功率。

值得注意的是,有机合成的概念在19世纪就已产生,但人类在近100年后才真正开始对合

成路径设计的模式进行探究总结。

“20世纪中期,化学家开始用计算机进行化合物合成路径辅助预测。近年来,人工智能算法被广泛地应用到合成设计领域。”裴剑锋告诉科技日报记者,化学家们也在创造和发展一种叫做自动合成机器人的设备,用于自动合成特定的目标化合物或者多个不同类型的化合物分子。机器学习和人工智能算法的引入,让合成机器人得以更加自动高效的工作,并能发现新的化学反应。

今年4月,一则“化学界‘AlphaGo’问世”的消息让人印象深刻,科学家们在《Nature》上发文证明,AI能以前所未有的速率进行逆向合成反应。上海大学教授马克·沃勒等人使用类似AlphaGo算法的三种神经网络+蒙特卡罗树搜索的方法,实现了逆合成分析和路径预测。该方法在双盲测试中表现优异,有机化学领域的专家们认为AI的合成预测结果不逊于人类专家。评论称,这将加速合成人类所需的化合物。

提速药物研发 更快更经济

最近,大名鼎鼎的英国Benevolent AI公司筹集了1.15亿美元,准备将其人工智能技术应用于运动神经元疾病、帕金森病和其他难治性疾病的药物研发。

业界专家表示,人工智能可应用在药物开发的不同环节,包括虚拟筛选苗头化合物、新合成路线设计、药物有效性及安全性预测、药物分子设计等。通过有效运用人工智能技术,基于已有的化学、生物学数据和知识建立有效的数据模型,来预测药品研发过程中的安全性、有效性、副作用等,从而有望实现减少人力、时间、物力等投入,降低药品研发成本。

人工智能技术在药物研发中已然崭露头角,显示出光明前景。比如,Benevolent AI公司使用人工智能助力新药开发,自2013年以来,Benevolent AI共开发出24个候选药物,且已有药物进入临床二期试验阶段。

市场表现可期 时间将给出答案

业界评价,人工智能技术的加持,让新药研发开始提速换挡。能否解决新药研发投入越来越大、时间越来越长的痛点,人工智能的介入人才只是开始。

据《Nature》报道,新药研发的平均成本约为26亿美元,大约耗费10年时间。它包括了漫长的小分子化合物研发阶段、三期临床试验、以及注册审批的过程。然而,能够通过重重考验并成功上市的药物,仅有不到1/10。

“药物信息研究中常面临大量的非结构数据、数据集数据较少、负样本数据不足、数据不平衡等问题,人工智能技术也有助于解决这类药物设计中的难题。”在裴剑锋看来,人工智能技术不仅有望破解药物信息杂乱和难以利用的问题,实现针对特定疾病、靶标和化合物分子自动进行药物研发评估和自动新药发现的系统。同时,还能显著提高药物研发流程中各种计算预测模型的准确性,促进新型药物设计技术的

“北京大学化学与分子工程学院/前沿交叉学科研究院分子设计实验室已初步完成1个人工智能化合物合成路径辅助分析系统,用于节省合成生物学家大量的人工设计工作。”在裴剑锋看来,药物设计已成为创新药物研发的核心技术之一。目前,各发达国家都有一批著名科学家领导的研究组从事药物设计方法和应用研究,各大跨国制药企业的研发中心都设有与化学合成和生物测试部门并列的药物设计部门,其中,不乏通过计算机辅助药物设计而成功上市的药物。

而裴剑锋所在的北京大学分子设计实验室,在国际上较早、国内率先开展人工智能药物设计的研究,所发展的药物设计方法在国际上有较大影响,相关软件在国内外拥有上百万用户,包括辉瑞、诺华、默克和强生等国际大型医药公司等商业用户。

产生,使得基于文献信息数据的新药研发等新方向变得真正可行。

“可以预计,人工智能技术对传统技术的改进以及由其引发的新型药物研发技术,将极大缩短新药研发周期、降低研发成本,显著提高药物研发的成功率。”裴剑锋坦言,新药研发是个长周期的过程(10年—15年),人工智能药物研发技术还处于起始和发展期,其影响还需要用一段时间的积累来证明。

与药物设计类似的是,材料设计中的典型应用如新能源、电池和高性能金属材料等,也会通过新一代分子模拟的方法被大力推动。裴剑锋说,基于机器学习和大数据的材料设计所面临的挑战是,实现高效精准的高通量计算,这势必需要在分子模拟层面有质的突破。

对此,黄铁军表示认同,“人工智能提高了合成的效率,基础有赖于高精度的材料和药物模型,这方面需要长期的试验积累。”

AI要抓住你的胃还不太容易

好机友

本报记者 刘艳

现在已很少人会真的拿着菜谱进厨房,即便真的馋哪道菜,拿出手随便搜一下就能寻得海量的帮助。所以,当看到福布斯报道说,Facebook人工智能研究小组研发了一款“AI菜谱”,不少人也就咧着嘴乐一下丢到脑后了。

虽然Facebook目前还没打算将这个研究成果推向市场,但是这个研究成果的应用价值可能还真对外国人的胃口。和中国人做菜神秘的“适量”不同,外国人的厨房里可是摆着食物秤的,用多少糖、加多少桂皮粉,甚至都要上秤才能入菜,利用AI给出精准的食材分析准是个好卖点。



AI菜谱研究火热

人工智能还真的是个全能型技术,虽然现阶段还处在弱人工智能时代,但它在赶来彻底改变我们生活的路上,已经沿途下了越来越多的蛋。在蒙特利尔的实验室里,安德里安·罗梅罗和他的小伙伴用大量的食物图像和菜谱来训练人工智能,只要给出图像,它就能列出其中的成分,并生成一个菜谱。

在Facebook之前,麻省理工学院计算机科学与人工智能实验室也做过类似的研究,他们根据从各种网站收集的超过一百万种不同的食谱,构建了一个数据库,并在数据库里上传了关于食材的信息资料。通过这一数据库,名为Pic2Recipe的人工智能系统,可以观看一张食物的照片,就能预测出这一食物的成分,并给出一个能做出类似食物的菜谱。

测试时,Pic2Recipe可以给出65%的正确配方,学界对这一比例比较满意,但是若要投入市场,人工智能的识别能力显然有限,特别是在遭遇博大精深的中华料理的时候。

目前,该团队正在提升Pic2Recipe的精度,并继续丰富它的技能,主要研究作者尼克·海因斯说:“如果你知道什么成分放在一个菜谱,但不知道数量,你可以拍照、输入成分,并运行模

型找到一个已知数量的类似的食谱,然后使用这些信息就可以输出接近你自己膳食的配方。”

近期,麻省理工学院的一个学生团队发布了他们烤披萨的视频,提供食谱的是他们训练的人工智能厨师Strono,它通过网上的食物博客中数百个“手工披萨食谱”来自动完成披萨的烹饪。目前Strono已经开始和波士顿的一家手工披萨店合作,人工智能创作的食谱依然不完善,有些失误只能靠人工来排除。

但有趣之处在于,除了人工智能,恐怕不会再有谁能创造出看着奇怪但味道不错的披萨,据说,波士顿的这家披萨店已经考虑将Strono的创新纳入店铺的菜单。

显然,人工智能对菜谱的“理解”和人类还有很大差异,面对烹饪,他们尚显迷茫。

AI与饮食健康正在发酵

美国热门剧集《硅谷》第四季有这样的情节,孵化器工程师杨简开发了一个Not Hotdog的应用程序,将手机摄像头对准食物或通过照片,应用程序就能告诉你这个是不是热狗,还是不是热狗。

这个应用看起来有点惹人发笑,但指向的是复杂的人工智能技术。

中粤金桥投资合伙人罗浩元说:“很多漫不经心或看似无用的研究或开发,正是科学家们了解世界的必要手段及过程。人工智能菜谱这种类似于用AI识别图像,对图像进行解读翻译的种种尝试,可能对有的人来说确实不是生活必需,但计算机视觉技术的许多有趣应用,绝对

是走在正确的道路上。”

MIT的教授安东尼·托拉巴表示:“在计算机视觉中,食物这一话题往往被人们忽略,因为我们并没有足够大的数据库来对此作深入研究,但那些社交网络上看似无用的图片实际上却为我们提供了大量的信息。”

维也纳大学新媒体技术部的克里斯托夫·拉特纳教授说:“想象一下,人们可以用这个系统来了解他们每日摄入的营养成分,或者把他们在餐馆享用的美食拍下来,然后回家自己做。”

AI与饮食健康正在持续发酵,即使是非常有经验的营养师也很难掌握10万种食物信息,但AI可以。

据私人定制营养师王曼介绍,目前我国营养师所采用的都是每餐带量食谱,所谓带量食谱,指的是,比如早餐:蛋羹25克、粗粮发糕25克、牛奶250克,这类营养套餐看似健康,执行困难,且千篇一律。

王曼说:“AI配餐可以从用餐者个人健康状态出发,顺应个人口味、习惯,进行合理搭配。AI配餐会帮助中国人获得更健康的饮食,也会成为营养师的好帮手。”

Strono团队在其项目官网上也写道:“在人工智能觉醒的过程中,机器人正变得越来越擅长完成许多原本属于人类的工作,也许有人担心人工智能最终会取代人类导致大规模失业,但我们相信,当人类和机器在共同努力下,可以增强彼此的互补优势和技能,我们就能取得最具创造力和成效的成果。”

情报所

国家人工智能基础资源公共服务平台发布

近日,在国家人工智能基础资源公共服务平台发布会暨第二届人工智能金融创新峰会上,国家人工智能基础资源公共服务平台正式发布。

国家发改委发布的《发展改革委实施新一代信息基础设施建设工程等的通知》对该平台明确了数据技术要求及定义:平台数据容量不低于5PB,图像识别率超过95%,文字识别率超过93%,语音识别率超过97%,形成不少于500万条的标准化数据资源,日均调用次数超过1亿次等,形成一个全行业可用的基础资源数据库,为人工智能生态体系开发与建设提供基础性、公共性服务。

相比传统人工智能开放平台,该平台还具有加强国家管控,保障信息安全、数据安全;优先服务于传统行业、深度融合实体经济,加速升级转换;提供惠及民生的公共服务,建设人工智能底层基础设施三大特点。

云从科技高级副总裁张立介绍,国家人工智能基础资源公共服务平台已正式投入运营,现已接入3PB以上基础数据,仅平台试运行期已服务企业200家以上,日均调用次数1.5亿次,提供AI培训次数100次以上。已经有金融服务、公共安全、智能制造、智慧教育、社会服务等各个领域的企业使用。

张立介绍,国家人工智能基础资源公共服务平台不仅仅提供人工智能基础功能和并行计算硬件,更重要的是提供用户可以方便、快速使用的解决方案。对此,他们建立了人工智能技术平台云和人工智能行业应用服务云两大云平台架构,并建立“第三方云”,以纳入各具优势的第三方AI应用服务。(记者 雍黎)

投资10亿美元 麻省理工开设AI学院

据《纽约时报》报道,近日,麻省理工学院宣布投资10亿美元开设一所新的人工智能学院,其根据主要捐赠者的名字被命名为苏世民计算学院,主要目标是推进人工智能在各个学科领域的广泛应用。

据称,这将是美国大学在计算机和人工智能领域的最大投资,将开启上世纪50年代麻省理工学院开始开创性研究人工智能以来最大的结构性变化。

麻省理工学院发言人在接受媒体采访时表示,该学院将于2019年9月开学,预计设立50个新的教职岗位和更多奖学金。在这50个教职员岗位中,有一半将致力于推进计算机科学,另一半将由学院和麻省理工的其他部门联合任命。

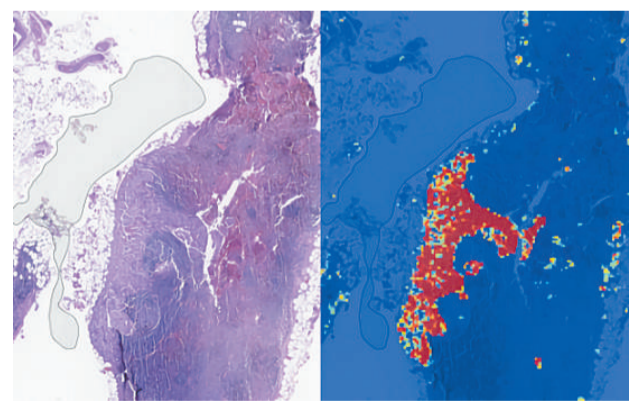
麻省理工学院院长L·拉斐尔·里夫表示,学院的目标就是“教育未来的双语者”。他将双语者定义为那些与生物、化学、政治、历史和语言学等领域有关的人,他们同时精通现代计算技术,能够将其应用于自己的研究领域。

转移性乳腺癌检测 谷歌AI准确率达99%

据美国科技博客网站VentureBeat报道,Google医疗AI团队,联合美国圣地亚哥海军医疗中心,基于深度学习开发出了一项检测算法,可自动评估乳腺癌患者淋巴结活检。他们的AI系统被称为“淋巴助手”(简称LYNA)。在最新公布的进展中,LYNA转移性乳腺癌的检测精度测试,准确率达到了99.3%。

据悉,转移性肿瘤是一种非难以检测的肿瘤,这种疾病的癌细胞会从其起源组织中分离出来,通过循环系统或淋巴系统在体内传播,并在身体其他部位形成新的肿瘤。

当然LYNA并不完美,它偶尔会错误巨细胞、生发癌和骨髓来源的白细胞,也就是所谓的组织细胞,但它的表现比负责评估同样幻灯片的执业病理学家更好。在Google AI发表的第二篇论文中,该模型将6名病理学家组成的小组检测淋巴结转移所需时间减半。



左侧为包含淋巴结的人体组织幻灯片,右侧为LYNA识别的肿瘤区

(本版图片除标注外来源于网络)

扫一扫 欢迎关注 AI瞭望站 微信公众号

