

近75%

一个新药的诞生,通常需投入10亿甚至数十亿美元,研发周期一般超过10年。而由于AI技术的加入,如今的药物研发成本明显减少,同时也大大缩短了研发时间。例如,AI将临床前候选化合物的时间从平均4年半缩短至约13.7个月,缩短了近75%。



人工智能正在参与从靶点发现到临床实验全流程

## 未来,我们吃的药可能会是“AI造”

◎本报记者 陈曦

近日,据媒体报道,美国华盛顿大学戴维·贝克教授团队在《细胞》杂志上发表论文,利用人工智能(AI)技术平台精准地从头设计出能够穿过

细胞膜的大环多肽分子,开辟了设计全新口服药物的新途径。

近年来,AI加速助力新药研发,几乎参与了从药物靶点发现到临床试验的全流程。在新冠肺炎疫情期间,多款药物问世背后也都有AI的身影,全球AI制药产业实现加速跑。

“目前全球AI制药产业已步入第三个发展阶段。”林建平说。

我国AI制药起步较晚,尚处于第二个阶段。“但是国内的AI制药产业发展速度非常快,各大互联网巨头以及一些大型药企均开始布局

AI制药赛道,当然还包括一些初创公司。”林建平表示。

据统计,目前国内已有超过60家AI制药公司,去年我国AI制药融资规模达12.36亿美元,同比增长163.54%。

### AI制药存在诸多挑战

可以说,AI已经渗透到药物研发领域的各个环节,促进了医药产业的升级,在未来极有可能带来制药产业的变革。随着目前AI制药产业的发展,在不久的将来,我们可能很快会迎来第一款AI技术研发的创新药物。在期盼之余,很多人也对AI研发的药品是否具有风险心存疑虑。

“目前来说,我们利用AI研发的药物的风险与传统的药物研发风险是一样的,包括药物的副作用、毒性、耐受性等。”林建平解释说,由于目前AI在药物研发中大多起着辅助作用,最后仍旧需要经过真实的试验去验证其安全性和有效性,需要专家去做评定,所以在风险性上与传统研发药物相同。但是这样做也带来了另一个问题,制药行业仍以专家经验为基础,成为制约AI制药发展的最大阻碍。“之所以出现这种现象,主要是由于对AI技术助力制药的不信任。”林建平认

### 相关链接

### 超算驱动现代药物研发产业发展

随着AI技术的不断发展,AI药物研发的进程也在“提速”。

此外,超级计算平台在现代药物研发中也发挥着日益强劲的驱动作用,特别是伴随着“天河”等新一代超级计算机的研制成功,百亿级虚拟药物筛选、大规模全原子分子动力学模拟、大规模AI预训练模型等计算和智能技术为现代药物研发创新带来新机遇、新发展。

目前天河超级计算平台支撑了数十家机

构,上百个研发团队开展高性能计算支撑的虚拟药物研发工作,取得了良好的成效。国家超级计算天津中心高性能计算部部长康波表示,超算团队将基于天河新一代超级计算机,研发物理生化模型与人工智能结合的药品设计新方法,构建计算机辅助药品设计研发核心链条聚合机制,探索算数融合、药工结合、研用协同的信创数字数值装置模式,研制面向创新药品发现的虚拟实验室,实现超算驱动现代药品创新发展的综合支撑能力。

而且,AI技术仍在发展中,数据、算法、算力上的突破也需要一定的时间。如数据量不足、数据质量参差不齐、算法精度不高、算法无法满足需求等,都为AI在药物研发和应用上带来了困难。

此外,AI制药还面临许多其他挑战。比如生命领域的基础理论研究还有很多没有解决的问题;再比如复合型人才缺少,“懂计算的不懂制药,懂制药的不懂计算”,如何更好地把问题转化为计算问题,然后用数字手段去解决,这需要大量复合型人才的参与,而这一类人才的培养也是极其耗时的。

## 多个城市开展自动驾驶汽车特定区域商业化试运营

◎新华社记者 郭宇靖 张漫子

重庆、武汉两地近日发布新规,允许自动驾驶车辆进行商业化运营试点。至此,全国已有北京、重庆、武汉、深圳、广州、长沙等多个城市允许自动驾驶汽车在特定区域、特定时段进行商业化试运营。

### 多个城市允许商业化试运营

根据中国汽车工程学会等单位发布的智能网联汽车测试示范区测试互认与评估结果,目前我国累计开放智能网联汽车(自动驾驶)测试道路超5000公里。

8月8日,交通运输部发布《自动驾驶汽车运输安全服务指南(试行)》(征求意见稿),鼓励和规范自动驾驶汽车在运输服务领域应用。

全国乘用车市场信息联席会秘书长崔东树认为,交通运输部发布的政策明确了自动驾驶可用于道路运输经营,从运输经营者、车辆、人员、安全保障、监督管理等多方面提出了相关要求,为自动驾驶汽车的合法、安全运营提供了保障。

今年以来,我国多地出台了自动驾驶方面的政策,各地应用实践也呈现多种趋势。目前,已有北京、重庆、武汉、长沙、深圳等多个城市允许自动驾驶汽车在特定区域、特定时段上路试运营,商业化进程不断提速。

7月,北京正式开放国内首个无人化出行服务商业化试点,开展常态化收费服务,并允许安全员从主驾移到副驾。

8月,重庆、武汉两地发布自动驾驶无人商业化试点政策,允许车内无安全员的自动驾驶车辆在社会道路上开展商业化服务。

此外,对无人驾驶的规范明显加强。8月1日实施的《深圳经济特区智能网联汽车管理条例》成为国内首部关于智能网联汽车管理的法规,首次对智能网联汽车的示范应用、准入登记、上路行驶、网络安全、事故处理、法律责任等事项作出具体规定。

“政府的支持推动,政策的加速落地,自动驾驶从业者的积极性,以及国内市场对汽车‘新四化’(电气化、智能化、网联化、共享化)的高接受程度,为中国自动驾驶快速发展营造了土壤。”亮道智能创始人副董事长说。

### 距离大规模上路还有多远

无人驾驶的实际体验如何?

“小马智行从2017年开始累计测试里程超过1400万公里,建立了一整套技术质量指标体系,用以判断什么样的场景策略更安全,乘坐体验更舒适,车辆运行更高效。”小马智行副总裁、北京研发中心负责人张宁说。

在北京经济特区自动驾驶示范区工作办公室有关负责人介绍,截至目前,自动驾驶出行服务商业化试点累计订单量超43万人次,测试运营状况良好,持续获用户好评。

“两三年前消费者还觉得好奇,如今不少在北京经开区工作的人已经将自动驾驶出租车作为日常使用的交通工具。”张宁说,“主驾无人车辆上路时,后排乘客甚至没有注意到司机位置没有人驾驶。”

北京市高级别自动驾驶示范区工作办公室有关负责人介绍,截至目前,自动驾驶出行服务商业化试点累计订单量超43万人次,测试运营状况良好,持续获用户好评。

自动驾驶距离大规模上路还有多远?张宁认为,随着商业化加速落地,技术将逐步走向成熟。预计2025年左右,自动驾驶车辆的数量将大幅增长,适用范围也将大幅扩大。

“短短半年时间,‘萝卜快跑’在亦庄的车辆数、站点数都增长50%以上。”萝卜快跑”已经完成了综合订单管理体系、车队效率管理平台的建设,正在实现全要素、全流程的数字化和自动化管控。”百度汽车机器人部总经理徐宝强说。

### 业界期待加快建立标准与法规

业内人士认为,随着相关技术、产品的突破,在车、路、云融合发展路径下,我国自动驾驶汽车将走向大规模商业化应用。

数据显示,我国自动驾驶产业链上的市场主体已超过6000家,行业已经形成自动驾驶出租车、公交、卡车、末端物流、环卫等10大类应用,增长迅猛。

中国汽车工程学会副秘书长、中国智能网联汽车产业创新联盟秘书长公维浩认为,目前我国各地智能网联汽车测试示范区还存在场地建设及设备配置标准不统一、测试场景尚不健全,网联化基础设施建设参差不齐,商业模式不清晰等问题。“目前部分测试区实现了测试互认和数据共享,但范围仍需扩大,如果数据不共享将导致测试无法进一步反哺研发、政策和标准。”

剧学铭说,期待加快推动标准体系和规范制定,智能网联汽车自动驾驶道路测试、示范应用、示范运营、商业运营等工作涉及的部门加强统筹协调,在政策、技术、标准等方面形成合力。此外,可鼓励地方先行先试,依托深圳立法、北京设立政策先行区等创新探索,为全国性立法创新提供支持。

“未来,我国自动驾驶产业将朝更加绿色、更加高效、更加智慧的方向发展。智慧交通将与智慧城市、智慧生活相融,不仅提供运输服务,还将提供信息服务、生活服务。”交通运输部公路科学研究院公路与综合交通发展研究中心主任虞明远说。

### 图说智能

### 四足巡检机器人亮相



参观者在安徽合肥举办的2022世界制造业大会上拍摄展出的一款四足巡检机器人。新华社记者 张瑞摄

本版图片除标注外由视觉中国提供

### AI融入药物研发各个环节

“AI一词是约翰·麦卡锡在1956年达特茅斯会议上提出的,用来描述‘制造智能机器的科学和工程’。AI差不多也是在这个时候被引入到药物研发领域的。”南开大学药学院教授林建平介绍,1964年,定量构效关系建模领域的建立成为AI开始用于药物研发的标志。

如今,AI在药物研发中发挥着越来越重要的作用,并与药物研发的各个环节紧密结合。

一款药物从无到有,要历经漫长且坎坷的过程。其中主要包括4个研发阶段,即靶点选择和验证、化合物筛选和先导优化、临床前研究以及临床试验。而每一个阶段又涉及到许多具体环节。

林建平举例说,比如在靶点选择和验证阶段,需要确定疾病相关的靶标。根据传统实验去确定靶标,既费时成本又高,而使用AI技术并结合已有的组学大数据,根据已知的以及新产生的实验数据,可以快速分析出潜在候选靶标,节约时间和成本;或在已知先导化合物的功效,但

是缺少明确靶标而导致具体作用机制和副作用不明确时,AI可以大范围预测靶标,缩小候选靶标的范围,最后结合实验手段快速定位真正的靶标。“AI帮助药物研发者快速找到靶标,加快先导化合物向药物转化的进程。”林建平介绍。

对于已有的药物,AI同样可以通过靶标预测,发现新的靶标,从而发现新的药物适应症,这也是一个非常热门的领域——药物重定位。在最重要的临床试验阶段,AI的应用也起到了事半功倍的效果。“在这一阶段,需要在患者身上评价药物的安全性和有效性,AI可以参与到患者的招募、临床试验设计以及试验结果数据分析等。”林建平举例,比如可以通过AI技术从过去的临床患者中,提取患者的个人特征、症状、治疗效果等数据,找到最匹配当前试验的患者;试验设计上,AI可以预测合适的药物剂量、治疗方案等;而试验数据上,可以采用AI技术跟踪和管理患者的实时情况,预测患者预后情况等。

### AI大大缩减药物研发成本

一个新药的诞生,通常需投入10亿甚至数十亿美元,研发周期一般超过10年,成功率却低于10%。而由于AI的加入,如今的药物研发成本减少了上亿美元,同时也大大缩短了研发时间,一般来说可以缩短一半以上。例如,AI将临床前候选化合物的研发时间从平均4年半缩短至约13.7个月,缩短了近75%。

此外,AI还提高了药物研发的成功率。“通俗讲,药物研发实际上是一个试错的过程,AI可以帮助我们排除大量错误,最后留给我们的就是

更大的成功机会。”林建平说。

正是由于AI制药具有对传统制药碾压式的优势,使得AI制药产业在全球发展壮大。目前,AI制药产业发展可概括为三大阶段:第一个阶段,AI制药公司初步形成,主要针对某个阶段的药物研发提供AI技术服务;第二个阶段,AI制药公司开发了成熟的研发管线,并且开发的药物进入临床验证,这一阶段将吸引大量资本和初创企业加入;而第三阶段,则进入到关键的临床II期药效性实验,真正证明AI研发药物的有效性。

## 多模态人工智能正大步走向场景应用新阶段

◎实习记者 李诏宇

近日,以“共创产业智能新高度”为主题的多模态人工智能产业联合第二次会议在武汉召开,会上发布了由中国科学院自动化研究

所、武汉人工智能研究院、华为技术有限公司牵头的《多模态基础大模型技术白皮书》。

“当前,人工智能正从单模态、有监督学习,迈向多模态、自监督学习的时代。”中国科学院自动化研究所研究员、武汉人工智能研究院院长王金桥表示,“多模态人工智能的未来必将风光无限。”

### 对数据标注的依赖性降低了一个数量级以上

要了解多模态人工智能,首先需要明白何为模态,“一般来说,每一种信息的来源或者形式,都可以称为一种模态。”王金桥说。

人类在信息获取、环境感知、知识学习与表达等方面都是采用多模态的输入、输出方式。比如,如果一个人要在一片草坪上找到一朵盛开的花朵,既可以通过视觉这一模态来寻找,也就是直接用眼睛看;也可以通过嗅觉这一模态来搜索,也就是用鼻子闻;还可以通过触觉这一模态来探寻,也就是用手触摸。面对寻找花朵这个问题,一般来说,人们会采取视觉、嗅觉等多模态的方式来进行。“某种程度上说,多模态的输入、输出方式正是人类智慧的重要体现之一。”王金桥表示。

目前的网络数据包括图像、视频、文字、音频等不同模态。对于人工智能来说,要想更好

地掌握、分析、利用网络上的数据,就需要能够对这些多模态的数据进行系统的统筹和分析。

王金桥表示,“技术创新是推动多模态人工智能产业发展的重要动力之一。自20世纪70年代多模态学习起步以来,伴随着近年来生成式预训练、基于Transformer的双向编码器表达等大规模预训练模型的快速涌现,人工智能研究领域正在经历一场有监督学习向无监督学习条件下‘大数据+大模型’的大规模预训练范式转变,多模态人工智能发展迎来了新的巅峰。”

近年来,多模态人工智能在场景泛化性、对数据的依赖性等方面都取得了巨大的技术突破。

“多模态人工智能通过自监督的学习方式对海量无标注数据进行学习,同时面向特定任务场景进行小数据的标注学习和微调。相对于单模态人工智能,其对数据标注的依赖性降低了一个数量级以上。”王金桥说。

### “多模态大模型+小模型”模式或成主流

2017年,国务院印发《新一代人工智能发展规划》,由人工智能技术引发的产业变革正在加速演进。目前,各行各业利用人工智能技术打造的产业新应用、新业态、新模式不断涌

现,我国的人工智能产业化势头迅猛,多模态人工智能产业也取得了许多突破。

如今,多模态人工智能产业正大步走向场景化、实用化。“目前,模型参数与数据规模不再是各研发机构的比拼重点,多模态人工智能产业正在走向场景应用的新阶段。”王金桥表示。

“例如,‘全媒体多模态大模型’就是基于中国科学院自动化研究所‘闻海’多模态媒体大数据和‘紫东太初’三模态大模型的技术积累,结合新华社全媒体的海量数据积累和媒体融合业务场景而建立的。”全媒体多模态大模型”将加速推动人工智能在视频配音、语音播报、标题摘要、海报创作等多元媒体业务场景的应用。”王金桥说。

此外,在智慧城市、金融科技、民生服务等许多领域,多模态人工智能也有着广阔的应用场景。

王金桥表示,未来“多模态大模型+小模型”的模式或将成为多模态人工智能的主流,该模式可以有效解决需求碎片化、多样化等问题。

王金桥表示,我国应该打造工业化范式的多模态大模型生态,持续完善国产基础软硬件支撑体系,加大人工智能与医学、材料、气候等科学研究领域的结合力度,健全人工智能产业应用政策标准,大力培养人工智能复合型人才。

