



# 研發新藥好難？呼叫AI幫忙

文·圖片提供 / 董俊維 (國家衛生研究院生技與藥物研究所研究員) 圖 / 達志影像

## AI協助研製新藥的三個步驟

**1. 辨識弱點**  
發現疾病的「弱點」蛋白質。

**2. 篩選藥物**  
從資料庫找出打擊弱點的藥物武器。

**3. 終極目標**  
消滅病毒和控制病情。

全球的疾病種類越來越**多**，有**新**的病毒，也有**複雜**的慢性**病**。可是**新藥**的研發速度**很慢**，一顆**新藥**常常要耗時**超過十年**才能上市，而且**失敗率**很高。為什麼製藥這麼難呢？

找疾病弱點 曠日廢時 因為科學家要先找到疾病的「弱點」，通常是其中一個關鍵的蛋白質，再測試上

製藥時，AI能從過去的「知識寶庫」中，聯規則就是AI學習到的「知識寶庫」。製藥時，AI能從過去的「知識寶庫」中，聯規則就是AI學習到的「知識寶庫」。

智慧機器人 遷移學習 它對每種藥物能打擊哪個疾病的弱點瞭若指掌，像個經驗老到的醫師和藥師。它還能根據藥物的結構歸納出原子或分子片

AI，像ChatGPT，課業、新聞、常識都能聊；很會看影像的AI，就像車上的自動駕駛，一邊看路況，一邊把車開到目的地。那很懂疾病和藥物的AI呢？

為了解決這樣的困境，專家找來得力助手——AI，超級會念書的智慧機器人，還能舉一反三，融會貫通。很會看文字的AI，像ChatGPT，課業、新聞、常識都能聊；很會看影像的AI，就像車上的自動駕駛，一邊看路況，一邊把車開到目的地。那很懂疾病和藥物的AI呢？

**小辭典**  
蛋白質：它是有機化合物，構成生物體的最重要部分。像體內的工人完成各項重要工作。

分子片段：藥物是由多個原子組成的一個分子結構，而分子片段是藥物結構的一部分。

安全又有效 雙管齊下 不過，另一個棘手的问题是：現有的藥物安全資料並不多。如果AI只用少量資料來推敲藥物的安全程度，勢必有很大的風險。幸好，AI能做「多任務學習」。一般的AI一次只學一種安全性資料，但多任務的AI

### AI絕招：多任務學習與遷移學習

單任務學習 普通AI	多任務學習 一個AI同時處理	遷移學習 以此類推AI
<p>肝臟AI</p> <p>腎臟AI</p> <p>心臟AI</p>	<p>絕招1</p> <p>肝臟 AI</p> <p>腎臟</p> <p>心臟</p>	<p>絕招2</p> <p>脾臟</p>
<p>每個科目的冠軍：會一種，其他的不會。</p>	<p>全部科目的冠軍：我什麼都會！多功能類型。</p>	<p>舉一反三的冠軍：沒試過的新工作，也行！</p>