

AI 辅助制药存在的问题与解决策略

刘语墨

DOI:10.32629/irmet.v3i2.19173

[摘要] 近年来,随着人工智能技术的飞速发展,其在药物研发领域得到广泛应用。其中AI辅助制药凭借强大的数据处理能力、精准的预测分析能力和高效的模拟实验能力,在辅助药物研发的全流程得到深入应用,从而推动制药行业从传统的“试错”模式向“智能精准”模式转变。因此为了发挥AI在辅助制药中的价值,本文就AI辅助制药存在的问题与解决策略进行了探讨。

[关键词] AI; 辅助制药; 应用; 发展; 问题; 解决策略

中图分类号: TU276.91 **文献标识码:** A

The problems and solutions of AI assisted pharmaceuticals

Yumo Liu

[Abstract] In recent years, with the rapid development of artificial intelligence technology, it has been widely applied in the field of drug research and development. Among them, AI assisted pharmaceuticals have been deeply applied in the entire process of drug development with their powerful data processing capabilities, accurate predictive analysis capabilities, and efficient simulation experiment capabilities, thus promoting the pharmaceutical industry to shift from the traditional "trial and error" mode to the "intelligent and precise" mode. Therefore, in order to leverage the value of AI in assisted pharmaceuticals, this article explores the problems and solutions of AI assisted pharmaceuticals.

[Key words] AI; Assisted pharmaceuticals; Application; development; Problem; solution strategy

科技的不断进步,促进了人工智能(AI)技术的快速发展,同时也为生物医药行业带来革命性机遇。目前,AI在数据处理、模式识别与复杂系统模拟方面的优势,正推动药物研发从经验驱动向数据驱动转型,开启以效率提升与成本控制为核心的产业新周期。

1 AI辅助制药的实践应用分析

1.1 靶点发现。靶点发现是现代药物研发的起点,指识别并验证在疾病发生发展中起关键作用的生物分子(如蛋白质、基因、受体等),作为药物干预的精确目标。这一过程决定了新药研发的方向与成败。传统靶点发现主要依赖于生物学实验和科学家的经验判断,不仅效率低下,而且容易遗漏潜在的重要靶点。AI技术的介入彻底改变了这一局面。通过整合基因组学、蛋白质组学、转录组学等多组学数据,利用机器学习算法进行深度挖掘,AI能够快速识别与疾病发生、发展密切相关的生物分子,精准锁定潜在药物靶点。例如,英国BenevolentAI公司利用AI技术分析海量生物医学数据,成功筛选出治疗肌萎缩侧索硬化症(ALS)的潜在靶点。

1.2 化合物筛选与设计。在确定药物靶点后,需要从海量的化合物库中筛选出能够与靶点有效结合的候选化合物。传统的化合物筛选主要依靠高通量实验筛选,不仅需要消耗大量的化

学试剂和实验资源,而且筛选效率极低。AI技术通过虚拟筛选和生成式模型,能够在短时间内对数百万甚至数十亿个化合物进行筛选和设计。利用深度学习算法,AI可以根据靶点的结构和性质,预测化合物与靶点的结合亲和力、生物活性和毒性等关键属性,快速筛选出具有潜在成药性的化合物。例如,Insilico Medicine公司的AI平台仅用21天就设计出了新型抗纤维化候选药物,而传统方法则需要数年时间。生成式AI模型还能够自主生成全新的化合物结构。通过学习大量已知化合物的结构特征和活性规律,AI可以生成具有特定性质和功能的新型化合物,为药物研发提供更多的候选分子。

1.3 临床试验优化。临床试验优化是指通过科学设计和先进技术手段,提升临床试验效率、质量与伦理水平的系统性策略。传统临床试验面临着招募患者困难、试验周期长、成本高、成功率低等诸多问题。AI技术在临床试验优化方面发挥着重要作用。在患者招募阶段,AI可以通过分析患者的电子病历、基因数据和健康档案等信息,精准匹配符合临床试验入组标准的患者,提高招募效率和准确性。例如,Tempus公司利用AI技术分析大量患者数据,为临床试验快速筛选出合适的患者,将患者招募时间缩短了50%以上。在临床试验设计方面,AI可以根据疾病的特点和药物的作用机制,优化试验方案,确定最佳的给药剂量、给药

途径和试验终点等。通过模拟临床试验过程, AI还可以预测试验结果, 提前发现潜在的风险和问题, 及时调整试验方案, 提高临床试验的成功率。此外, AI还能够实时监测临床试验数据, 及时发现药物的不良反应和疗效信号, 为临床试验的安全管理和决策提供支持。例如, 通过对临床试验数据的实时分析, AI可以快速识别出药物的潜在副作用, 及时采取措施保障患者的安全。

1.4 药物生产与质量控制。药物生产是药物研发的最后一环, 也是确保药物质量和供应的关键环节。传统药物生产主要依靠人工经验和固定的生产流程, 生产效率低下, 质量控制难度大。AI技术在药物生产中的应用主要体现在生产过程优化和质量控制两个方面。在生产过程优化方面, AI可以通过分析生产设备的运行数据和生产工艺参数, 优化生产流程, 提高生产效率和产品质量。例如, 西门子公司的AI系统可以实时监测制药厂设备的运行状态, 预测设备故障, 将设备停机时间减少了30%以上。在质量控制方面, AI可以通过对药物生产过程中的各种数据进行实时分析, 及时发现产品质量异常, 确保药物质量符合标准。利用计算机视觉技术, AI还可以对药物的外观、形状和颜色等进行自动检测, 提高质量检测的准确性和效率。

2 AI辅助制药发展的简述

2.1 国内发展现状。随着国家对生物医药产业和人工智能产业的大力支持, 国内涌现出了一批具有核心竞争力的AI制药企业。例如, 晶泰科技融合量子物理与人工智能, 建立了小分子药物模拟算法平台, 与辉瑞制药等国际巨头开展合作; 望石智慧利用AI技术构建了亿级别的超高通量分子筛选系统、多维度分子生成系统和基于映射数据库的分子优化系统, 为新药研发提供高效的技术支持。国内药企也积极拥抱AI技术, 加快药物研发创新步伐。复星医药与英矽智能合作, 将英矽智能端到端人工智能驱动的药物发现平台与自身强大的临床开发和商业推广能力相结合, 共同开发创新药物和疗法; 恒瑞医药则通过自主研发和外部合作的方式, 将AI技术应用于药物靶点发现、化合物筛选和临床试验优化等多个环节。

2.2 全球发展态势。近年来, 全球AI辅助制药市场呈现出快速增长的态势。根据市场研究机构Grand View Research的报告, 预计到2029年市场规模有望突破200亿美元。全球各大制药巨头纷纷布局AI辅助制药领域, 通过与AI科技公司合作或自主研发AI技术, 加快药物研发进程。例如, 辉瑞制药与晶泰科技合作, 融合量子物理与人工智能, 建立小分子药物模拟算法平台, 提高算法的精确度和适用广泛度, 驱动小分子药物的创新; 默沙东则与BenevolentAI达成合作, 利用AI技术发现新的药物靶点和候选化合物。同时, 一批专注于AI辅助制药的初创企业也如雨后春笋般涌现。这些企业凭借先进的AI技术和创新的商业模式, 在药物研发的各个环节取得了显著成果。

3 AI辅助制药存在的问题与解决策略

3.1 数据质量与数据隐私问题的解决策略。AI辅助制药高度依赖高质量的生物医学数据, 然而当前生物医学数据存在着数据碎片化、标准化程度低、数据质量参差不齐等问题。不同数

据源之间缺乏统一的标准和规范, 数据格式各异, 数据缺失和错误现象较为普遍, 这严重影响了AI模型的训练效果和预测准确性。同时, 数据隐私和安全性也是AI辅助制药面临的一大挑战。AI模型的训练需要大量的患者数据, 这些数据包含了患者的敏感信息, 如基因数据、病历记录等。如何在保证数据充分利用的前提下, 保护患者的数据隐私和安全性, 防止数据泄露和滥用, 是亟待解决的问题。为解决数据质量问题, 需要建立统一的生物医学数据标准和规范, 加强数据治理和整合。通过建立跨机构、跨学科的数据共享平台, 实现数据的互联互通和共享利用。同时, 采用数据清洗、标注和验证等技术手段, 提高数据的质量和可靠性。在数据隐私保护方面, 可以采用联邦学习、差分隐私等技术手段。联邦学习允许AI模型在不直接访问原始数据的情况下, 通过在多个数据源上进行分布式训练, 实现数据的共享和利用; 差分隐私则通过在数据中添加噪声, 保护患者的隐私信息。此外, 还需要加强法律法规建设, 完善数据隐私保护的相关条款, 严厉打击数据泄露和滥用行为。

3.2 算法可解释性与可信度问题的解决策略。大多数AI模型, 尤其是深度学习模型, 被视为“黑箱”模型, 其决策过程和内在逻辑难以解释。在药物研发领域, AI模型的决策直接关系到药物的安全性和有效性, 如果无法解释模型的决策依据, 将难以获得医生、患者和监管部门的信任。例如, 当AI模型筛选出一个候选化合物时, 研究人员无法清楚地了解模型是基于哪些特征和因素做出的选择, 这使得他们难以对化合物的成药性进行准确评估和验证。此外, AI模型的预测结果可能存在一定的偏差和不确定性, 如何评估和降低这些偏差和不确定性, 提高模型的可信度, 也是需要解决的问题。为提高算法的可解释性, 需要开发可解释的AI模型和算法解释工具。例如, 采用基于规则的模型、决策树模型等具有较强可解释性的模型, 或者通过可视化技术、归因分析等方法, 解释AI模型的决策过程和依据。同时, 加强对AI模型的验证和评估, 建立科学的模型评估体系, 确保模型的预测结果准确可靠。

3.3 伦理与监管问题的解决策略。AI辅助制药在带来巨大机遇的同时, 也引发了一系列伦理问题。例如, AI辅助研发的新药可能会导致医疗资源分配不均, 富裕地区和人群可能更容易获得先进的AI药物, 而贫困地区则难以企及; AI在药物研发中的应用可能会导致部分传统医药研发人员失业, 引发就业结构的调整; 此外, AI模型的决策可能存在偏见, 导致某些群体在药物研发和治疗中受到不公平待遇。在监管方面, 当前针对AI辅助制药的监管体系还不完善。由于AI技术的快速发展和应用场景的不断创新, 现有的监管法规和标准难以适应AI辅助制药的发展需求。如何建立一套科学、合理、灵活的监管体系, 既能够促进AI辅助制药技术的创新发展, 又能够保障公众的健康和安全性, 是监管部门面临的重大挑战。为解决伦理问题, 需要建立健全AI辅助制药的伦理准则和规范。加强对AI技术应用的伦理审查, 确保AI技术的应用符合人类的道德价值观和社会公共利益。同时, 加强对医疗资源分配的宏观调控, 促进AI药物的公平可及。在监管方

面,需要加快制定和完善AI辅助制药的监管法规和标准。建立AI辅助制药的注册审批制度,明确AI模型的评估标准和验证方法;加强对AI辅助制药企业的监管,确保其研发活动合法合规;加强国际合作,共同制定全球性的AI辅助制药监管规则,促进AI辅助制药技术的健康发展。

4 AI辅助制药的发展趋势分析

4.1 多技术融合打造智能化药物研发生态。随着AI辅助制药与更多前沿技术深度融合,未来将打造更加智能化、一体化的药物研发生态。例如,AI与基因编辑技术的结合,将能够实现精准的基因治疗。通过AI预测基因编辑的脱靶效应和治疗效果,优化基因编辑方案,提高基因治疗的安全性和有效性;AI与合成生物学的结合,将能够设计和构建人工生物系统,生产新型药物和生物制品。此外,AI与区块链技术的结合,将有助于解决数据隐私和安全问题。通过区块链技术实现数据的去中心化存储和加密传输,确保数据的安全性和完整性;同时,利用区块链的智能合约功能,实现数据的可控共享和交易,促进数据的流通和利用。

4.2 个性化医疗实现精准治疗。随着人们对健康需求的不断提高,个性化医疗将成为未来医疗发展的重要方向。AI辅助制药将在个性化医疗中发挥核心作用。通过分析患者的基因数据、病历记录、生活习惯等个性化信息,AI可以为患者量身定制个性化的治疗方案和药物。例如,根据患者的基因变异情况,AI可以预测患者对某种药物的敏感性和耐受性,为患者选择最合适的药物和给药剂量;通过对患者病情的实时监测和分析,AI可以动态调整治疗方案,提高治疗效果。个性化医疗的实现将大大提高药物的治疗效果,减少药物的不良反应,为患者带来更好的治疗体验。

4.3 药物研发全球化协作。在经济全球化的背景下,药物研发的全球化协作趋势日益明显。AI技术的发展将进一步促进全球药物研发资源的整合和共享。通过建立全球性的AI药物研发

平台,世界各地的科研机构、制药企业和医疗机构可以共同参与药物研发项目,共享数据、技术和经验,汇聚全球智慧,加快药物研发进程。例如,国际科研团队可以利用AI技术联合开展重大疾病的药物研发项目,共同攻克药物研发中的关键难题;全球制药企业可以通过AI平台进行合作,实现药物研发资源的优化配置,降低研发成本,提高研发效率。

5 结语

综上所述,AI辅助制药作为一场深刻的技术革命,正在彻底改变药物研发的面貌。从靶点发现到化合物筛选,从临床试验到药物生产,AI技术贯穿了药物研发的全流程,为解决传统药物研发的痛点问题提供了强有力的技术支撑。尽管当前AI辅助制药还存在诸多问题,但随着AI技术的不断进步与各方的共同努力,这些问题终将逐步得到解决。未来,AI辅助制药将朝着多技术融合、个性化医疗、全球化协作的方向发展,从而为人类健康事业带来更加美好的前景。

[参考文献]

- [1] 朵芳芳,张明亮,丰贵鹏,等.制药工程中结晶分离智能技术的探究[J].山东化工,2023,52(09):186-188.
- [2] 王绪.自动化控制系统在化工制药中的应用[J].大众标准化,2025,(02):142-144.
- [3] 魏星,葛庆伟.人工智能技术在医疗数据挖掘中的应用现状探索[J].中国高新技术,2025,(06):52-54.
- [4] 付素琴,郝辰业,彭骏.人工智能应用于医院药学服务领域的文献计量学分析[J].中国药房,2024,35(04):494-499.
- [5] 黄永亮,吴萍,杨婷,等.中药智慧药学服务的实践与技术分析[J].医药导报,2024,43(01):59-63.
- [6] 卢金森,王广飞,王月玥,等.人工智能与儿科安全合理用药科普互动共生模式的实践与展望[J].中国医院用药评价与分析,2023,23(07):769-772.