

关于人工智能在药学领域的应用

丁怡丹 安雪 马思月 汪洋

兰州现代职业学院, 中国·甘肃 兰州 730300

摘要: 随着互联网与科技水平的高速发展, 人工智能的应用推动了社会各方面的进步和发展, 在医疗领域也得到了广泛的应用, 尤其是在药学领域当中, 现代人工智能发挥着非常重要的作用。在相关政策和时代发展的裹挟下, 人工智能的研发力度愈发增强, 技术水平也在不断提升, 突破了一个又一个难关, 踏入了高层次的领域。从发展的角度而言, 医药产业是永不落幕的朝阳产业, 在新时期当中, 发展势头异常强劲。从专业角度而言, 药学领域中的诸多技术需要依靠人工智能来完成更新迭代, 可以说, 两者在未来都具备较大的发展空间, 因此融合也是时代发展的必然结果。传统药学领域的发展在依托人工智能技术之后, 从传统中药、现代医药、药学服务等方面实现了全新的发展。鉴于此, 本文详细阐述了人工智能在药学领域的具体应用路径, 以期为业内人士提供借鉴。

关键词: 人工智能; 药学领域; 应用

Application of Artificial Intelligence in the Field of Pharmacy

Ding Yidan, An Xue, Ma Siyue, Wang Yang

Lanzhou Modern Vocational College, China Gansu Lanzhou 730300

Abstract: With the rapid development of Internet and technology, the application of artificial intelligence has promoted the progress and development of all aspects of society, and has been widely used in the medical field, especially in the pharmaceutical field, modern artificial intelligence plays a very important role. With the development of relevant policies and times, the research and development of artificial intelligence is becoming stronger and stronger, and the level of technology is also improving, breaking through one difficulty after another and stepping into a high-level field. From the perspective of development, the pharmaceutical industry is a never-ending sunrise industry, in the new era, the momentum of development is exceptionally strong. From a professional point of view, many technologies in the pharmaceutical field need to rely on artificial intelligence to complete the update iteration, it can be said that both have a greater room for development in the future, therefore, integration is also the inevitable result of the development of the times. The development of traditional pharmacy, which relies on artificial intelligence technology, has achieved a new development in traditional Chinese medicine, modern medicine and pharmaceutical service. In view of this, this article elaborated the artificial intelligence in the pharmaceutical field the concrete application path, hoped provides the reference for the profession personage.

Keywords: Artificial intelligence; Pharmaceutical field; Application

0 引言

随着信息技术的范式转型, 人工智能 (Artificial Intelligence, AI) 自 1956 年进入学术视野以来, 已从实验室构想演化为渗透经济社会基础设施的关键变量。当前, AI 在医疗健康、智能终端、移动商务等领域的应用已不再停留于“工具嵌入”层面, 而是逐渐向决策辅助、认知协同乃至局部替代人力判断的方向延展。据互联网数据中心 (Internet Data Center, IDC) 预测, 2023 年中国人工智能市场规模将逼近千亿美元关口; 埃森哲最新全球高管调研亦显示, 49% 的中国企业在近三年内对 AI 项目的累计投入超过 5000 万美元, 投资意愿与落地节奏均显著快于全球平均水平。值得注意的是, 这种投资并非均匀分布于基础层与技

术层, 而更多向应用侧倾斜。

在药学这一人工智能较早渗透的垂直领域中, 技术介入已从早期的化合物筛选、ADMET 性质预测, 延伸至靶点发现、分子生成设计与临床用药策略优化等深度环节。然而, 当前多数应用仍以模式识别与统计关联为核心范式, 因果推断机制的缺失, 构成了 AI 在药物重定位、罕见病建模等复杂任务中解释力与泛化能力的关键瓶颈。人工智能在多大程度上重构药物研发的认识论与方法论基础, 仍是一个有待检验的命题。与此同时, 制度环境也在变革。2017 年以来, “4+7” 带量采购、两票制等支付端改革政策渐次落地, 叠加《药品注册管理办法》《药品管理法》等法规体系的密集修订, 释放出监管趋严与治理精细化并行的

双重信号。当前,在社会发展的需求下,网络问诊、线上购药等需求量骤增,同时在药物的研发与服务方面也有了全新的发展需求,因此人工智能技术对传统药学领域的突破有着至关重要的作用。

1 人工智能技术在药学领域应用的基本情况

人工智能技术因为其强大的优势在各行业中成为改革与发展的重要抓手,因此,我国教育部更是在2018年提出让AI与学科进行交叉融合,实现AI技术的进步,紧跟国际水平。人工智能是将人类有关于智能的相关理论作为底层逻辑,运用机器学习以及大数据的方法,将人类的方法、技术、理论进行深度模拟与延伸的一门技术。关于人工智能的分支还包括数据挖掘、数据库、模式识别、知识发现、神经网络等等,当下已经被运用在各个领域中,尤其是在医疗健康中得到了广泛、深度、多元化的应用。医疗健康领域目前存在着诸多现实性的问题,如药品研发及医生培养周期长、医疗成本高、优质资源不足等,这些问题阻碍着医疗健康体系的快速发展。因此,人工智能技术在医疗健康领域展现出的巨大优势,能够预见一个可观的发展前景,所以当下世界范围中诸多科技公司如IBM、谷歌等都在前仆后继布局AI医疗市场。作为最开始应用人工智能技术的医疗健康领域,药学领域中的辅助诊疗、药物挖掘、健康管理、药品调配以及临床用药等方面,都已经开始应用人工智能技术,并取得了良好的效果。同时,人工智能在药物研究方面也有着极大优势,包括药物开发、药物发现、药物相互作用关系以及药物警戒等。人工智能技术能够辅助临床治疗药物检测、提高新药研发转化效率、合理化药物设计(如计算机辅助药物设计)、临床用药咨询、提供新的药物靶向手段(如飞利浦“蜂群”机器人)、完善对患者的健康风险识别(如Café WellHealth健康优化平台)、智能用药监测及不良反应风险评估(如计算机辅助的贝叶斯不良反应诊断系统),还包括从综合视角分析患者的临床信息,并且寄哪里科学的药物经济数据,最终给予个性化的处理、治疗意见等。

2 人工智能在药学领域的应用路径

2.1 智能辅助药品研发,实现新药升级

中咨华研(ByResearch)数据库最新数据显示,2022年全球医药市场规模将达到1.4万亿美元,比上年增长4.6%;根据全球医药行业研究机构艾昆纬(IQVIA)预测,2025年全球医药市场规模将达到1.6万亿美元,2022至2025年复合年均增长率约为4.6%。以上数据表明,全球医药市场增长势头持续增强,展现出广阔的发展前景。其中,

中国医药产业的发展速度也呈现出逐年递增的态势,而这些数据的背后则是对于药品的巨大需求量。因此,在药品研发方面需要另辟蹊径,寻找发展的新方向。

人工智能作为一种精确、高效的算法,具备“理性”分析的能力,能够在数据与实验两个层面支撑药物研发。传统药物研发通常流程繁琐、周期漫长、复杂度高:从靶点的发现与筛选,到先导化合物的合成与优化,再到临床阶段的反复验证,整个过程依赖真实数据与确切的疗效反馈,因而进展缓慢,失败风险与资金投入长期处于高位。据统计,一款新药从研发启动至最终上市通常耗时约10年,所需资金超过十亿美元,研发周期长、人力与资金投入巨大。相较之下,人工智能凭借其强大的算法能力与数据处理能力,可有效降低研发成本。在靶点发现阶段,AI通过深度学习、算法建模与大数据分析,从临床文献、试验结果及各类研究数据中精准识别有效靶点,同时提取小分子化合物的结构特征,模拟其与靶点的相互作用机制。基于化合物药理特性的模拟评估,可快速筛选出活性高、成药性强的化合物进入设计合成环节。结合药物代动力学、药理学等专业知识,AI可进一步辅助确定候选化合物。此外,人工智能在晶型预测方面也展现出显著优势,有助于研究人员高效筛选稳定性和药效俱佳的晶型,从而提高药品质量与疗效。在临床试验环节,AI可汇集并分析医院等机构的临床数据,快速匹配符合试验要求的受试者,大幅缩短患者招募与试验开展周期。人工智能的介入显著加速了药物研发流程,降低了时间、人力与资金成本,推动研发模式从“经验驱动”向“数据—智能驱动”转型。

2.2 智能改进发展模式,促进中药传承

中药是我国珍贵的传统文化之一,集合了数代先贤的智慧,具有浓厚的历史底蕴和特征,对于我国药学的发展和创新有着深远影响。中药历史悠久,秉承着传承的理念发展至今,但是重在“传下去”,却在整体形式上没有过多的创新与改变。因此,想要让中药得到更好的传承,必须要做到“传承精华,守正创新”。近年来,随着中医药的发展,中药的功效也得到了广泛的认可,在未来具有较大的潜力。而中药的创新与人工智能结合,能够开辟出一条全新的道路。在具体的实践中,可以依托于人工智能技术,将中医药传统典籍中的各种信息、数据进行汇总、整合、分析,通过智能算法构建出一套以传统中药为根基的中药数据库。人工智能技术中强大的算法能够将病症与药方进行深度结合,并且寻找到其中的医治规律,根据中药的特性与病症的特性开具出相应的处方,从大量的数据与信息

中总结出一些用药习惯,通过智能学习,积累用药经验。同时,人工智能技术也为中医诊断提供了新的路径。传统中医依赖“望闻问切”,但在实践中易受时间、环境等因素限制。通过视频问诊、语音交互及智能诊断等手段,可有效突破上述制约。

2.3 通过智能保障,落实临床用药安全

2018年,在国家卫健委和国家中医药管理局联合发布的《关于加快药学服务高质量发展的意见》中指出,探索提供互联网和远程药学服务,加快药学服务信息互联互通。当下,创新药研发方面受到技术性的加强,仿制药的生产质量标准也进行了有效规范,这也预示着我国药品流通管理步入了正轨,开始拥有成熟的管理体系。因此,在此背景下,药品可及性增强,品质得到了有效保障,在这样高效的体系中,未来会有更多高品质、多品类的创新药进入市场,为其注入全新的生命力。由于当代社会已经开始步入老龄化,用药需求与日俱增,尤其是对于新特药会有更多元化的需求,更在临床用药方面有着大量的需求。

例如,临床引入专家系统。专家系统即预先将大量的医学专业知识与专家的诊断经验输入进去,通过智能算法进行学习后构建出的一套诊断智能系统,更是一种在模拟人类专家在面对疾病时的智能化决策手段。在具体的专家系统诊断当中,通过对研究目标的剖析进行总结,而后根据系统内的海量专业知识技能进行综合性比对,分析出研究目标的病症所在,给予合适的用药方案,同时还能规避一些风险。当下,专家系统已经在临床药学的多个方面得到了应用,如ADRS诊断、治疗药物检测(TDM)、合理用药、药物相互作用预测等,并获得了一定的成效。专家系统将按照四个步骤进行考量预测,分别是:其一,是否感染;其二,细菌的具体菌属;其三,调出最匹配治疗的药物;其四,患者身体状况使用哪种药物效果最佳。这四个步骤能够有效帮助医生选择更具个性化的药物治疗和方案,降低风险,减少因为药品不合适造成的医疗事故,提升治疗质量。此外,专家系统在临床用药的应用,能够对临床抗菌疗法进行一定的监管,现已成为限制滥用抗菌药物的有效途径。

2.4 依托人工智能,提升药学服务质量

药学服务涵盖了用药指导、临床治疗药物检测以及用药跟踪等多种服务内容。依托于人工智能技术,提升药物服务质量,是提升我国医疗服务的重要手段,更是我国居民对于高标准健康生活的必然需求。随着人工智能的崛起,尤其是深度学习技术的不断进步,人工智能已广泛渗透至

健康管理、药物研发、语音识别、临床决策及医学影像等医疗领域,推动传统医疗向智慧医疗转型。在药学服务中引入人工智能,既可提升服务质量、效率与患者满意度,也有助于推动人工智能技术自身的持续发展。

2.4.1 智能调剂服务

(1) 机器人药师调配药品。在欧美国家,人工智能已较早应用于门诊药品调剂工作。以Swisslog公司研发的PillPick机器人为例,该系统可根据处方独立完成大部分调配任务,药师仅需对调配结果进行核对。PillPick日处理处方量可达上万份,调配准确性高,既降低了人工成本,也有效减少了调配差错。此外,该机器人可在低温环境中运行,完成血浆制品、疫苗及其他药品的传输、处理与储存。在配制高风险药物方面,人工智能机器人同样展现出显著优势,能够减少药师与危险药物的直接接触,保障职业安全,降低操作风险。例如,日本某医院引入APOTECaChemo机器人后,约70%的药品调配工作由其承担,且其配制过程中的误差率及变异系数均低于人工操作。

(2) 智能审方系统。将人工智能嵌入处方(医嘱)审核环节,可构建智慧型处方审核系统。该系统通过与医疗信息系统对接,链接处方信息,运用深度学习、语义分析及智能识别等技术,对药品说明书、临床研究文献等内容进行自主学习,形成结构化知识数据库。审核过程中,系统可将处方与患者用药信息进行比对,识别潜在不合理用药,实时预警并拦截问题处方,同时提供明确提示。目前,首都医科大学宣武医院、厦门市妇幼保健院、青海省人民医院等机构已分别在静脉用药调配、住院医嘱审核及门诊调剂服务中部署智慧处方审核系统。

(3) 药品调配预判。药师可借助人工智能技术对药品调配过程进行态势预判,优化发药时机。LAM等融合离散事件模拟、人种志研究及软件系统工程方法,开发出一套可预判用药需求的智能调配系统,为临床药学服务提供决策支持。药品调配预判系统的工作流程是:历史用药数据库→通过观察选择后开始处理数据→离散事件模拟软件系统方法人种学研究→系统构建→产生新数据→分析和预判→通知药房→提前备药。该系统将大大减少患者等待取药的时间,提升药学服务品质和效率,优化患者的体验。

2.4.2 智慧药方

(1) 智慧门诊药房。近年来,依托于人工智能技术的智慧药房开始在我国各大医疗机构出现。2016年,上海有将近20家医院建立了国内首批“智慧门诊药房”。智慧药

房相较于门诊药房,优点在于调配速度快,效率高了将近三分之一。同时,智慧药房借助人工智能中的射频识别技术,对药品的购进、库存以及调配等进行智能化管理,节约了管理成本,提高了整体的服务质量。

(2)智慧药店。借助人工智能、云计算、大数据技术,科伦大药房、博爱连锁大药房等社会性药房都配备了智能化机器人“药师小乔”,其集合了多种智能化技术,能够实现症状分析、推荐用药、售后服务、自主学习、语音交互等多种功能,为药房整体运营效率的提升做出了卓越贡献。药师小乔除了能胜任这些基本的药房工作以外,还能够针对多发病、常见病进行回答服务,例如胃肠道疾病、妇科疾病、呼吸道疾病等;能够通过智能技术也算法为患者分析病情,推荐用药方案,并将每一种药的疗效进行充分说明,消除患者的对药品的疑惑,给予患者最为全面、专业、舒适的购药体验。

当先,智慧药房的建设是人工智能促进药学服务升级的重要方式。智慧药房的出现,可以说是传统药房的一次全面革新,在药品调配、准确度方面有着绝对优势,还能够为公众提供个性化、智能化、现代化、多元化的药学服务,节省管理成本,为患者的诊疗、购药体验进行全方位深度服务。

2.4.3 药学监护

一方面,在药学监护的环节当中,对于药品不良反应的检测是重要内容。当下,对于不良反应的检测是使用ADR监测,其主要包括三种途径:第一,ADR系统定期自动回顾;第二,患者随访;第三,自发报告。由于在ADR检测中,相关人员存在误报漏报的问题,进而出现不准确、不全面的检测弊端。因此,人工智能技术在优化ADR检测方面有着独特的优势,人工智能可通过大数据技术将医疗信息系统病例作为样本池,从数据库中搜集大量的电子病历进行分析,进行药品不良反应的筛查。当患者遭遇与其疾病不相符的治疗方案或用药方案时,依托于人工智能的ADR监测将会主动报告,提示给专业人员将其进行处理。此外,人工智能还能够借助关键词识别技术来筛查患者的电子病历,进而发现未识别的ADR。

另一方面,人工智能还能够借助其自动分析与深度学习功能,监控患者的用药情况。例如,DeepMind公司研

发了一款针对急性肾损伤进行自动识别的系统,能够优化患者治疗方案。药师可以通过该系统了解患者的疾病症状、治疗方案,并且针对一些特殊的疾病用药进行全方位、全程监控,充分发挥出药物的最大功效,降低ADR的发生。

综上所述,人工智能现如今已经成为全球各行业发展的重要抓手,也是全球竞争的技术制高点,未来只有紧抓人工智能带来的机遇,才能在未来的发展当中占据话语权与主动权。因此,推动人工智能与药学各领域的深度融合,是未来医疗健康发展的重要方向,潜力巨大。这一融合有助于加速药品研发转型升级、促进中药传承创新、保障临床用药安全、提升药学服务整体质量。我们应把握人工智能技术发展带来的战略机遇,加快药学服务与人工智能的交叉渗透与系统整合,开启智慧药学服务新阶段,助力“健康中国”建设。

参考文献:

[1] 满靖怡. 浅谈人工智能在药学领域的应用[J]. 产业创新研究, 2020, No.47(18):113-114.

[2] 凌曦, 赵志刚, 李新刚等. 人工智能技术在药学领域的应用——基于Web of Science的文献可视化分析[J]. 中国药房, 2019, 30(04):433-438.

[3] 刘蕙嘉, 马国. 人工智能应用于药学服务的探索与思考[J]. 中国临床药学杂志, 2020, 29(03):234-238. DOI:10.19577/j.1007-4406.2020.03.019.

[4] 杨珺, 郭强, 史文钊等. 药学知识库发展与建设[J]. 医学信息学杂志, 2020, 41(11):32-36.

[5] 葛俊爽. 医共体智能审方系统分析与设计[D]. 华中科技大学, 2021. DOI:10.27157/d.cnki.ghzku.2021.005457.

[6] 赵文敏, 喻小勇, 田侃等. 人工智能视域下药师的发展思考[J]. 卫生经济研究, 2019, 36(08):52-55. DOI:10.14055/j.cnki.33-1056/f.2019.08.015.

基金项目: 项目来源“项目名称”: 基于超星学习与Deepseek的《药理学》课程混合式教学模式研究与实践(课题编号: LX2025-029)。

作者简介: 丁怡丹(1995.03-), 女, 汉族, 甘肃兰州人, 硕士研究生, 兰州现代职业学院, 高校讲师, 研究方向: 药物代谢动力学, 药学职业教育。