

人工智能技术在药学领域的应用与发展

李璐 宋起萌 李雨虹

武警黑龙江省总队医院 黑龙江 哈尔滨 150076

摘要: 本文聚焦人工智能技术在药学领域的应用与发展。先概述人工智能技术定义与发展趋势,接着阐述其在药物研发中用于靶点发现、设计筛选及临床试验优化;在药品生产中助力质量控制、流程优化与设备系统智能化;在临床药学方面提供用药决策支持、不良反应监测预测及患者依从性管理。最后展望其发展前景,指出技术创新与多学科融合将推动药学全方位变革,为人类健康提供更优质服务。

关键词: 人工智能技术; 药学领域; 药物研发; 应用与发展

引言: 在科技飞速发展的当下,人工智能技术已成为推动各行业变革的关键力量。药学领域作为保障人类健康的重要阵地,正积极引入人工智能技术。从药物研发的源头探索,到药品生产的精细管控,再到临床药学的精准服务,人工智能技术正深度融入药学各环节。深入探讨其在药学领域的应用与发展,不仅有助于把握药学发展新方向,更能为提升医药服务水平、保障人类健康提供有力支撑。

1 人工智能技术概述

1.1 人工智能技术的定义

人工智能技术是指通过构建具有类人智能特征的计算机系统,实现对人类智能行为的模拟、延伸与扩展的一系列技术总称。其核心目标是让机器具备感知环境、理解信息、学习知识、推理判断和自主决策的能力,无需人类直接干预即可完成复杂任务。该技术以数据为核心燃料,借助机器学习算法对数据进行分析与建模,通过深度学习等技术模拟人脑神经网络的工作机制,实现从数据中提取规律、发现知识的过程^[1]。它并非单一技术,而是涵盖了语音识别、图像识别、自然语言处理、专家系统等多个技术方向,其定义的核心在于“智能模拟”,即通过技术手段让机器展现出原本只有人类才具备的智能行为与能力。

1.2 人工智能技术的发展趋势

人工智能技术正朝着更智能、更高效、更安全、更普惠的方向快速演进。在技术层面,深度学习与多模态融合技术持续突破,能够实现对文本、图像、语音等多种信息的跨模态理解与处理,大幅提升模型的感知与认知能力;强化学习在复杂场景中的应用不断深化,推动智能体自主决策能力的进一步提升。在产业应用方面,人工智能正从单一场景应用向全产业链渗透,与各行业深度融合,形成“人工智能+”的创新发展模式。随着技

术的广泛应用,人工智能的伦理规范与安全保障体系建设日益受到重视,隐私保护、算法公平性、可解释性 etc 成为技术发展的重要考量因素。

2 人工智能技术在药物研发中的应用

2.1 药物靶点发现

药物靶点发现是药物研发的首要环节,人工智能技术通过对海量生物医学数据的整合与分析,显著提升了靶点发现的效率与准确性。利用机器学习算法对基因组学、转录组学、蛋白质组学等多组学数据进行深度挖掘,能够识别与疾病发生、发展相关的关键基因、蛋白质等生物分子,预测其作为药物靶点的潜力。通过构建生物网络模型,人工智能可以分析生物分子之间的相互作用关系,发现疾病调控的关键通路,进而筛选出具有特异性作用的药物靶点。同时,结合药物分子的结构数据与药理活性数据,人工智能模型能够实现靶点与药物分子的匹配性预测,为靶点验证提供重要参考^[2]。相比传统靶点发现方法,人工智能技术能够快速处理海量复杂数据,挖掘隐藏在数据中的潜在规律,有效缩短靶点发现周期,提高靶点发现的成功率,为后续药物研发奠定坚实基础。

2.2 药物设计与筛选

人工智能技术在药物设计与筛选环节实现了效率的大幅提升,改变了传统依赖经验与大量实验筛选的模式。基于深度学习的生成式模型能够自主设计符合药物理化性质、药代动力学性质及安全性要求的分子结构,通过模拟分子之间的相互作用,预测药物分子与靶点的结合亲和力,生成具有潜在活性的候选药物分子。在药物筛选方面,人工智能通过构建虚拟筛选模型,对大规模化合物库进行快速筛选,精准识别出与靶点具有高亲和力、高特异性的化合物,大幅减少了实体实验的数量。借助机器学习算法对化合物的生物活性、毒性、代谢稳定性等关键性质进行预测,优化化合物结构,提高候选药物

的成药概率。

2.3 药物临床试验优化

人工智能技术为药物临床试验的全流程优化提供了强大的技术支持，有效提升了临床试验的效率与成功率。在患者招募阶段，人工智能通过分析电子病历、基因数据等多源信息，构建患者特征模型，实现临床试验入排标准的精准匹配，快速筛选出符合条件的患者，缩短招募周期，减少招募偏差。在临床试验过程中，借助实时数据监控与分析系统，人工智能能够及时发现试验数据中的异常情况，预警潜在风险，保障临床试验的安全性。通过机器学习算法对临床试验数据进行深度分析，能够优化试验设计方案，调整样本量、试验终点等关键参数，提高试验结果的可靠性与有效性。

3 人工智能技术在药品生产中的应用

3.1 生产过程质量控制

人工智能技术在药品生产过程质量控制中发挥着关键作用，实现了从传统人工检测向智能化精准检测的转变。通过在生产线上部署传感器、机器视觉等设备，实时采集生产过程中的温度、压力、湿度、物料配比等关键参数数据，以及药品的外观、粒径、纯度等质量指标数据。运用机器学习、深度学习等算法构建质量预测模型，对采集到的实时数据进行快速分析与处理，精准识别数据中的异常波动，及时预警潜在的质量风险。人工智能系统能够根据分析结果自动调整生产工艺参数，实现对生产过程的闭环控制，确保药品质量始终处于可控范围内。相比传统质量控制方法，人工智能技术不仅提高质量检测的效率与准确性，还实现了质量问题的提前预判与及时处理，有效降低药品生产过程中的质量风险，保障药品的安全性与有效性。

3.2 生产流程优化

人工智能技术通过对药品生产全流程数据的深度挖掘与分析，实现了生产流程的智能化优化，大幅提升生产效率与资源利用率。借助大数据分析人工智能算法，对生产过程中的设备运行数据、物料消耗数据、生产节拍数据等进行全面分析，精准识别生产流程中的瓶颈环节与优化空间。基于分析结果，优化生产调度方案，合理分配生产资源，调整生产工序与节拍，实现生产过程的高效协同。同时，人工智能系统能够根据市场需求变化、原材料供应情况等动态调整生产计划，提高生产的灵活性与适应性。另外，通过模拟不同生产场景下的流程运行情况，人工智能可以为生产流程的优化提供科学的决策依据，帮助企业实现降本增效，提升整体生产运营水平。

3.3 智能化生产设备与系统

人工智能技术推动药品生产设备与系统的智能化升级，构建了集自动化、智能化、数字化于一体的现代化生产体系。智能化生产设备搭载传感器、控制器与人工智能算法，能够实现自主运行、自我诊断与自适应调整。在生产系统层面，通过构建智能制造执行系统（MES），整合生产计划、设备管理、质量控制等各类信息，实现生产过程的全流程数字化管控^[3]。人工智能算法能够对系统中的海量数据进行分析与决策，优化生产调度、设备维护与质量控制等环节，实现生产系统的自主运行与智能优化，为药品生产提供了稳定、高效、可靠的技术支撑。

4 人工智能技术在临床药学中的应用

4.1 临床用药决策支持

人工智能技术构建的临床用药决策支持系统，为临床医生提供了科学、精准的用药参考，有效提升了临床用药的合理性与安全性。该系统整合了海量的医药数据库，包括药物说明书、临床诊疗指南、循证医学证据、患者电子病历等多源信息，通过自然语言处理技术提取关键信息，运用机器学习算法构建用药决策模型。当临床医生为患者制定用药方案时，系统能够根据患者的疾病诊断、年龄、性别、肝肾功能、合并用药情况等个体特征，快速分析药物的适应症、禁忌症、药物相互作用等信息，为医生推荐个性化的用药方案，包括药物选择、剂量调整、用药频次等。同时，系统还能够实时更新医药知识与临床证据，确保用药建议的时效性与科学性，帮助医生规避用药风险，减少不合理用药现象的发生。

4.2 药物不良反应监测与预测

人工智能技术为药物不良反应的监测与预测提供了全新的技术手段，实现了从被动上报到主动预警的转变。通过收集医院信息系统、药品不良反应监测数据库、社交媒体、电子病历等多渠道数据，运用自然语言处理、机器学习等算法，快速识别与提取药物不良反应相关信息。构建不良反应预测模型，根据患者的个体特征、用药史、疾病状态等因素，预测患者使用某种药物后发生不良反应的风险概率，为临床用药风险评估提供参考。人工智能系统能够实时监测用药过程中的不良反应信号，及时向医护人员发出预警，以便采取相应的干预措施，降低不良反应带来的危害。通过对大量不良反应数据的分析，还能够发现潜在的、罕见的不良反应，为药品安全性评价与监管提供重要依据。

4.3 患者用药依从性管理

人工智能技术通过智能化手段有效提升了患者的用药依从性，为提高治疗效果奠定了基础。借助移动互联

网、物联网等技术,开发智能化的用药管理工具,如智能药盒、手机APP等,能够根据患者的用药方案,自动提醒患者按时、按量用药,避免漏服、错服情况的发生。同时,这些工具还能够记录患者的用药情况,形成用药日志,方便医护人员实时了解患者的依从性状况。运用人工智能算法对患者的用药数据、疾病恢复情况进行分析,识别影响患者依从性的关键因素,如药物副作用、用药方案复杂性等,并为医护人员提供个性化的干预建议,帮助患者解决用药过程中遇到的问题。另外,通过构建患者教育平台,利用人工智能技术为患者提供个性化的用药指导与健康宣教,提高患者对疾病与用药的认知水平,增强患者的用药依从性。

5 人工智能技术在药学领域的发展前景

人工智能技术在药学领域的应用前景广阔,将持续推动药学领域的创新发展与转型升级。随着技术的不断进步与多学科的深度融合,人工智能将在药物研发、药品生产、临床药学等各个细分领域实现更广泛、更深入的应用,为药学领域带来全方位的变革。

5.1 技术创新推动药学发展

持续的技术创新将成为人工智能推动药学领域发展的核心动力,不断拓展药学研究与应用的边界。在算法层面,更先进的机器学习、深度学习算法将不断涌现,大幅提升模型的性能与效率,能够处理更复杂的生物医学数据,实现更精准的预测与决策。在数据层面,随着多组学数据、医疗大数据的不断积累与共享,人工智能模型将拥有更丰富的训练数据,进一步提高模型的泛化能力与准确性。在技术融合层面,人工智能将与基因编辑、合成生物学、纳米技术等前沿技术深度融合,催生出全新的药物研发模式与治疗方法。例如,结合人工智能与基因编辑技术,可实现对疾病相关基因的精准编辑与药物研发的协同推进;借助人工智能与纳米技术,能够设计出更高效的药物递送系统。技术创新将持续推动药学领域在药物研发、药品生产、临床药学等方面的突破,为人类健康提供更优质的医药服务。

5.2 多学科融合促进药学进步

多学科融合是人工智能时代药学领域发展的重要趋势,将打破学科壁垒,促进药学与其他相关学科的交叉创新,推动药学事业的全面进步。药学与计算机科学、数学、生物学、医学、工程学等多学科的深度融合,将整合各学科的理论、方法与技术优势,为药学领域的研究与应用提供全新的思路与解决方案^[4]。例如,药学与计算机科学、数学的融合催生了人工智能在药学中的广泛应用;药学与生物学、医学的融合加深了对疾病机制与药物作用机制的理解,为药物研发提供了更坚实的理论基础;药学与工程学的融合推动了药品生产设备与系统的智能化升级。多学科融合不仅能够促进技术创新与成果转化,还能够培养出具备跨学科知识与能力的复合型人才,为药学领域的持续发展提供人才保障。通过多学科的协同创新,药学领域将在药物研发、药品生产、临床药学等方面实现全方位的提升,为保障人类健康作出更大的贡献。

结束语

人工智能技术为药学领域带来了前所未有的发展机遇,在药物研发、生产及临床应用等多方面成效显著。展望未来,随着技术创新持续推进和多学科深度融合,人工智能将在药学领域发挥更大作用,推动药学事业不断迈向新高度。我们应积极拥抱这一变革,加强相关研究与应用,让人工智能更好地服务于药学发展,为人类健康事业铸就新的辉煌。

参考文献

- [1]李旭,孙爱峰.人工智能技术在药学领域的应用与发展[J].中国卫生产业,2025,22(9):139-141.
- [2]张玄龄,周颖.人工智能在药学教育中的创新应用与发展趋势[J].中国药物与临床,2025,25(19):1251-1255.
- [3]扎西才旦,陈静,周瓜加.人工智能技术在藏医药领域的应用思考[J].电子质量,2025(9):102-106.
- [4]崔立有.人工智能背景下临床药学教育改革策略[J].药学教育,2025,41(2):48-52.