·药咖论坛·
INSIDERS FORUM

·评述·

人工智能在医药领域的应用

陆涛

（中国药科大学理学院，江苏 南京 211198）

近年来，随着计算能力的发展和海量数据的产生和积累，人工智能（artificial intelligence，AI）技术快速发展，尤其是在图像识别、语音交互、认知计算等方面技术逐渐成熟，其与医药健康领域的融合不断加深。人工智能在医药领域的应用场景越加丰富，例如通过计算机视觉技术、图像识别等手段进行医学影像智能识别；通过自然语言处理、语音识别等进行语音病例录入实现智能诊疗；利用机器人技术制造智能医用机器人；将大数据分析及智能终端等技术用于医药大健康管理；利用机器学习及深度学习等技术助力药物研发等。目前人工智能技术已逐渐成为影响医药领域行业发展的重要因素之一。

1 人工智能在医药领域的应用

人工智能是模拟扩展人类智能应用的学科，其通过技术手段使机器智能化，从而完成某些对智力要求较高甚至是以往人类无法实施的工作。人工智能的概念自 1956 年首次被提出以来，已经经历了 60 多年发展历程，进展并不顺利。随着计算机技术的快速发展及市场的需求，近年来人工智能又一次走进大众的视野，成为备受关注的焦点和热点之一。各个行业巨头纷纷布局，试图将人工智能应用于自己的科学领域。人工智能之所以能从理论研究转为实际应用，主要是跟大数据的爆炸性增长，计算机性能的大大提高，各种智能算法的迅速发展密切相关。在人工智能技术中，计算机视觉、自然语言处理、语音处理以及人工神经网络等方面的研究是目前较为成熟且占较大比重的研究领域，也是各个行业争相借鉴和使用的主要方法。

医药领域一直是国家和地区及老百姓重点关注的领域。而随着医药领域的快速发展，医药服务需求激增，医药行业的数据信息也成爆炸式增长，具有明显的大数据特征，为人工智能的应用奠定了较

[专家介绍] 陆涛：教授，药物化学专业博士生导师，江苏省教学名师，中国药科大学副校长。现担任全国药学专业学位研究生教育指导委员会副主任委员，国家基金委生命科学部通讯评议专家，教育部本科教学审核评估专家；江苏省学位委员会委员；江苏化学化工学会理事、有机化学专业委员会委员等学术职务。《药学进展》执行主编，《中国药科大学学报》编委。主要研究方向：新药分子设计与合成研究、计算机辅助药物设计、有机合成化学、药物生物统计与计算药学。主持完成多项国家、省部级课题，目前课题组在研国家自然科学基金 10 项，自主知识产权的抗急性髓细胞性白血病（acute myeloid leukemia，AML）临床候选化合物，完成以 FN-1501 为代表的原创性科技成果转化。获得美国 FDA “突破性药物”（breakthrough) 资格进入加速审批通道、临床试验许可和孤儿药资格认证。目前，FN-1501 作为治疗 AML 的药物已被美国 FDA、澳大利亚和中国 NMPA 批准进入Ⅰ期临床研究，有望弥补国内 AML 治疗的药物空白，为合理用药和临床试验方案设计提供新的选择，推动医药行业的创新发展，产生明显的社会和经济效应。迄今已培养博士研究生 16 名，硕士研究生 90 名，共发表 SCI 论文 100 余篇，获得国内外授权专利 9 项，其中 2 个代表性药物的研发历程和工艺研究发表在 *J Me. Chem*、*Angew Chem-Int Edit*、*Org Lett* 等药物研究知名期刊，为小分子创新药物的研发提供重要的科技支撑。

好的数据基础。另一方面，医药大数据也需要人工智能来进行辅助，以便从各方面更好地服务大众。目前，人工智能在医药领域的应用主要集中在以下几个方面：首先是将计算机视觉技术应用于医疗影像诊断，以便对医疗影像进行快速读片和智能诊断。计算机视觉主要包括图像识别、图像检测、图像理解等技术。通过对医疗影像数据的分析，快速准确地识别和标记特定异常结构，供相关科室医生参考，提高诊断效率，还可缓解放射科医生供给缺口的问题。其次，随着医疗信息化发展，电子病历已经成为当前医疗诊断一项不可或缺的内容。其不仅能实现医生与病人交互过程以及病情发展情况的电子化，而且为整个疾病的研究提供大量可快速获取的电子资源，为该疾病的研究提供重要可循证依据。语音识别、自然语言处理等技术则为医生书写病历，为普通用户在医院导诊提供了极大的便利，可谓是医生和病人的人工智能虚拟助理。再有，机器人技术的发展为从事医疗或辅助医疗的智能医用机器人包括临床医疗、护理、医药教学以及为残疾人服务等的机器人研究提供了强大助力。其中，尤其是手术机器人，由于其更开阔的视野，更加精准的手术操作，更有利于患者伤口愈合，减小创伤面和失血量，减轻疼痛等，已经成为机器人领域的“高需求产品”。手术机器人还可缓解传统手术中医生长期处于紧张状态及过于劳累等问题，为各诊疗各阶段所逐渐认可和应用普及。此外，基于将数据分析及智能终端等技术开发的各类可穿戴设备等产品被广泛应用于医药大健康管理。最后，在医药领域一个非常关键的问题就是药物研发。然而，新药的研发往往具有成本高、研发周期长、成功率低 3 大高风险。如何加速新药研发进程，降低研发费用已成为各大制药公司及学术界研究机构迫切需要解决的问题。而如今药物研发累计数据高速增长，药物研发领域数字化转型加速，促进了人工智能在药物研发领域的应用。目前人工智能已被应用于药物研发的各个阶段，包括药物靶点识别、候选药物筛选、药物设计与优化、药物合成、药代动力学性质预测、病理生理学研究及新适应证的开发等方面。其中，基于人工智能的药物筛选让老药新用达到新的高度，成为药物研发的最热门领域之一。同时小分子药物的设计与筛选仍然占据主要地位。目前，国内外各大药企纷纷布局，自 2017 年以来，国际制药巨头包括默克、诺华制药、罗氏、辉瑞制药、强生等纷纷部署自主研发的人工智能系统，用于提高新药研发效率。而国内制药公司如江苏豪森、正大天晴等也积极加强与人工智能公司如 Atomwise 公司、阿里云等的紧密合作，旨在提高药物发现与发展这一关键环节的效率与成功率，从而降低研发成本。

2 本期文章点评

本期“人工智能在医药领域的应用”专题，邀请了国内多位一线相关专家，其结合自身研究领域，对人工智能在医药领域各个方向尤其是药物研发过程中的应用进行了深入分析和综述。其中，澳门大学中华医药研究院欧阳德方助理教授等采用大数据分析的方法对 1980—2019 年发表的 136 142 篇药剂学文献，以及 38 117 个美国 FDA 批准上市药物的数据进行可视化分析，从全球变化趋势、合作网络、研究热点、产品批准等几个角度分析全球药剂学学术和产业发展现状，为我国未来药剂学研究方向与科研成果转化提供新的思路。并指出了科研与产业在成果转化方面存在的差距，可供后续药剂学研究借鉴。

中国药科大学廖俊副教授对深度学习在医药领域命名实体识别中的研究进行了归纳。近年来，随着深度学习在文本处理领域中的广泛应用，命名实体识别作为自然语言处理的一个分支，在知识库构建、信息抽取等任务中发挥着重要的作用。针对命名实体识别在医药文本中的应用，该文介绍了当前主流的命名实体识别研究方法及主要数据来源，并总结了深度学习在中英文医药领域命名实体识别中的应用，突出深度学习在医药领域实体识别应用中的优势，为该领域相关研究提供参考。

药物重定位也称“老药新用”，是将现有治疗方法应用于新的疾病的过程的一种药物研发方法，是目前药物研发的热点之一。湖南工业大学名誉教授、元码基因首席科学家田埂博士对机器学习和大数据挖掘的药物重定位算法进行了综述，并介绍了

基于机器学习和大数据挖掘的药物重定位的研究进展。该文重点对基于特征、基于矩阵分解和基于网络的3大类药物和化合物重定位的算法进行综述，总结这些方法的优缺点，并对未来药物重新定位方法的发展方向进行剖析。

中国药科大学陈亚东教授等重点介绍了人工智能在药物发现中的应用与挑战。新药研发存在周期长、费用高和成功率低等特点，人工智能作为药物研发领域的一个热点方向，已被应用到药物研发的各个阶段。该文首先介绍了人工智能在药物发现中的应用领域；其次对人工智能包括机器学习和深度学习涉及的多种算法进行了详细阐述；然后对人工智能在药物发现中的应用包括药物靶点识别，活性化合物筛选，化合物性质预测，蛋白结构预测及蛋白配体相互作用，分子生成等方面进行了介绍。最后，对人工智能在药物发现中的机遇与挑战进行了探讨，为药物研发人员提供新的思路。

3 展望

当前，随着人工智能、大数据、云计算等技术的不断进步，医药领域对人工智能技术越来越重视，使得人工智能技术得以在医药领域中快速应用。人工智能在医药领域科研和产业发展的表现均可圈可点，对我国医药事业发展有着非常重要的意义。然而，其落地仍面临许多问题，不仅是技术问题，还有社会和伦理问题。例如，很多医院由于信息化水平较低，很难将人工智能技术付诸于实际应用，甚至连相对较简单的电子化病历处理都不容易实现。再有，很多医用机器人在运行时的可用性明显不如人类，尤其是在外科检查或外科手术这种危险性较高的工作中，如果期间运行出现问题，很有可能对患者的生命造成威胁；而出现意外后，责任的划分也很难界定。另外，医疗人员在享受人工智能技术带来便利的同时可能会产生过度依赖的现象，造成其医疗技能的退化。此外，面对毫无声息的机器人，患者本身的接受程度也有待考量。

综上，在药物研发方面，虽然随着医药数据的不断积累及计算性能的不断提高，人工智能在药物设计上的应用更为成熟，机器学习和深度学习等方法也已被用于药物研发的各个阶段，但其实用性还有待进一步提高。人工智能技术给医药领域提供了前所未有的广阔空间，但在提供机遇的同时也提出了更多挑战，需要每一位学者加强对人工智能技术的研究，使其可以在医药健康领域发挥出更高的价值。

致谢：本文在资料整理与撰写过程中得到中国药科大学理学院医药信息与生物统计教研室张艳敏的协助，在此表示诚挚谢意！