

APPLICATION OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN PHARMACEUTICAL RESEARCH AND DEVELOPMENT

Van Cong Khanh^{1,2*}, Phan Thi Thao Trang², Nguyen Bao Uyen², Tran Ba Kien³, Duong Thi Thuan²

*1. Faculty of Pharmacy, Mien Dong Innovative Technology University Vietnam -
Roundabout, National Highway 1A, Dau Giay Town, Thong Nhat Dist, Dong Nai Province, Vietnam*

*2Faculty of Pharmacy, College of Medicine and Pharmacy, Duy Tan University -
3 Quang Trung, Hai Chau Dist, Da Nang city, Vietnam*

3Hai Duong Central College of Pharmacy - 324 Nguyen Luong Bang, Thanh Binh Ward, Hai Duong City, Vietnam

Received: 18/02/2025

Revised: 06/03/2025; Accepted: 25/03/2025

ABSTRACT

Objective: This study explores the transformative impact of artificial intelligence (AI) across the pharmaceutical industry, focusing on key areas like R&D, manufacturing, business operations, and clinical applications. The objective is to provide an overview of AI applications, identifying trends and assessing their potential.

Method: The research synthesizes literature from scientific articles, industry reports, and case studies, using keywords such as “artificial intelligence”, “pharmaceuticals”, “drug discovery”, and “process optimization”. Both qualitative and quantitative analyses were conducted, examining metrics such as cost-effectiveness and drug development timelines. The study also includes specific applications of AI such as “drug target identification”, “de novo drug design”, “toxicity prediction” and “clinical trial optimization”.

Results: AI is revolutionizing drug target identification, drug design, and toxicity prediction, accelerating preclinical phases. AI optimizes manufacturing through quality control and predictive maintenance and enhances decision-making in procurement and supply chain management. AI also helps optimize clinical trials through patient recruitment and real time data monitoring, and facilitates drug repurposing. Data mining and predictive modeling contribute to AI-driven market forecasting, sales optimization, and customer engagement. Companies like Pfizer and Novartis have deployed AI for drug discovery and predicting trial outcomes.

Conclusions: The study highlights AI’s potential for reducing costs, shortening development timelines, and improving treatment outcomes. Strategic AI integration is crucial for pharmaceutical competitiveness.

Keywords: Artificial intelligence, pharmaceuticals, research and development.

*Corresponding author

Email: vanconghanh@dtu.edu.vn **Phone:** (+84) 949163458 **Https://doi.org/10.52163/yhc.v66iCD2.2211**

ỨNG DỤNG TRÍ TUỆ NHÂN TẠO TRONG NGHIÊN CỨU VÀ PHÁT TRIỂN DƯỢC PHẨM

Văn Công Khanh^{1,2*}, Phan Thị Thảo Trang², Nguyễn Bảo Uyên², Trần Bá Kiên³, Dương Thị Thuận²

¹Khoa Dược, Trường Đại học Công nghệ Miền Đông -

Vòng xoay, quốc lộ 1A, Thị trấn Dầu Giây, H. Thống Nhất, Tỉnh Đồng Nai, Việt Nam

²Khoa Dược, Trường Y Dược, Đại học Duy Tân - 3 Quang Trung, Q. Hải Châu, Tp. Đà Nẵng, Việt Nam

³Trường Cao đẳng Dược Trung ương Hải Dương – 324 Nguyễn Lương Bằng, P. Thanh Bình, Tp. Hải Dương, Việt Nam

Ngày nhận bài: 18/02/2025

Chỉnh sửa ngày: 06/03/2025; Ngày duyệt đăng: 25/03/2025

TÓM TẮT

Mục tiêu: Nghiên cứu này khám phá tác động chuyển đổi của trí tuệ nhân tạo (AI) trong ngành dược phẩm, tập trung vào R&D, sản xuất, kinh doanh và các lĩnh vực lâm sàng. Mục tiêu là cung cấp tổng quan về các ứng dụng AI, xác định xu hướng và đánh giá tiềm năng của chúng.

Phương pháp: Nghiên cứu tổng hợp các bài báo khoa học, báo cáo ngành và nghiên cứu điển hình, sử dụng các từ khóa như “trí tuệ nhân tạo”, “dược phẩm” và “khám phá thuốc”. Đánh giá định tính và định lượng đã được thực hiện để xem xét hiệu quả chi phí, thời gian phát triển thuốc và tỷ lệ thành công của thử nghiệm lâm sàng.

Kết quả: Kết quả cho thấy AI đang cách mạng hóa việc xác định mục tiêu thuốc, thiết kế thuốc và dự đoán độc tính, tối ưu hóa sản xuất và cải thiện việc ra quyết định. Các công cụ hỗ trợ AI cũng nâng cao hiệu quả thử nghiệm lâm sàng và cá nhân hóa các phác đồ điều trị. Các công ty như Pfizer và Novartis đã triển khai thành công AI để khám phá thuốc và dự đoán kết quả thử nghiệm.

Kết luận: Nghiên cứu này nhấn mạnh tiềm năng của AI trong việc giảm chi phí, rút ngắn thời gian phát triển và cải thiện kết quả điều trị. Việc tích hợp chiến lược AI là rất quan trọng để các công ty dược phẩm duy trì tính cạnh tranh.

Từ khóa: Trí tuệ nhân tạo, dược phẩm, nghiên cứu và phát triển.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ngành công nghiệp dược phẩm trong vài thập kỷ qua đã gặp khó khăn do quy trình phát triển thuốc mới phức tạp, tốn thời gian và chi phí cao. Nghiên cứu và phát triển thuốc (R&D) cần cải thiện năng suất để giảm thời gian và chi phí. Các cải tiến dược phẩm hiện nay bao gồm từ phân tử nhỏ đến chất sinh học, với yêu cầu về độ ổn định và hiệu lực cao hơn. Đánh giá độc tính của thuốc mới là một lĩnh vực quan trọng cần nghiên cứu thêm. Ngành dược phẩm cũng đối mặt với nhiều thách thức và cần áp dụng công nghệ mới để đáp ứng nhu cầu y tế toàn cầu. Trí tuệ nhân tạo (artificial intelligence - AI) đã nổi lên như một công cụ mạnh mẽ, giúp tối ưu hóa quy trình khám phá, phát triển và thử nghiệm thuốc [1], [2].

Việc áp dụng AI trong ngành dược phẩm hứa hẹn sẽ cải thiện đáng kể quy trình phát triển thuốc, từ phân tích dữ liệu đến tối ưu hóa sản xuất và thiết kế thử nghiệm

lâm sàng. AI cũng đóng vai trò quan trọng trong việc định hình lại ngành chăm sóc sức khỏe, cải thiện quyết định và hiểu biết về bệnh tật. Các công ty dược phẩm đang tận dụng các bằng sáng chế về AI để đổi mới hoạt động kinh doanh, mặc dù số lượng đơn đăng ký bằng sáng chế liên quan đến AI đã giảm trong thời gian gần đây [2], [3], [4].

Việc ứng dụng AI trong nghiên cứu và sản xuất dược phẩm mang lại tiềm năng lớn cho ngành dược phẩm, giúp nâng cao hiệu quả sản xuất, thiết kế thử nghiệm lâm sàng và định vị thị trường. Việt Nam có thể học hỏi từ những tiến bộ này để phát triển lĩnh vực dược phẩm trong nước, cải thiện khả năng phát hiện và sản xuất thuốc cũng như tối ưu hóa quy trình thử nghiệm lâm sàng và cá nhân hóa điều trị.

2. PHƯƠNG PHÁP TỔNG QUAN

*Tác giả liên hệ

Email: vanconghanh@dtu.edu.vn Điện thoại: (+84) 949163458 <https://doi.org/10.52163/yhc.v66iCD2.2211>

Nghiên cứu tập trung vào việc tổng quan và phân tích các ứng dụng của AI trong ngành dược phẩm, từ khâu sản xuất đến kinh doanh.

Đối tượng nghiên cứu bao gồm các công ty dược phẩm trên toàn thế giới, các quy trình phát triển thuốc, sản xuất, mua sắm, bán hàng, quản lý kho, và các công nghệ AI được sử dụng trong các quy trình này. Để tìm kiếm và tổng hợp tài liệu, các từ khóa như “trí tuệ nhân tạo”, “AI”, “dược phẩm”, “sản xuất dược phẩm”, “khám phá thuốc”, “tối ưu hóa quy trình”, “thử nghiệm thuốc”, “mua sắm dược phẩm”, “bán hàng dược phẩm”, “quản lý chuỗi cung ứng” và “quản lý đơn thuốc” đã được sử dụng.

Phương pháp nghiên cứu chủ yếu là tổng hợp tài liệu, phân tích các trường hợp ứng dụng AI cụ thể trong các công ty dược phẩm, và đánh giá các tác động của AI đến hiệu quả, chi phí và thời gian trong ngành dược phẩm.

3. KẾT QUẢ TỔNG QUAN TÀI LIỆU

3.1. Tổng quan về AI trong ngành dược

3.1.1. Khái niệm về AI

AI là hệ thống máy tính có khả năng thực hiện các quá trình giống như con người, bao gồm học tập, điều chỉnh và xử lý dữ liệu phức tạp [5].

3.1.2. Các loại trí tuệ nhân tạo

Hầu hết các giải pháp AI trong chăm sóc sức khỏe hiện nay dựa trên thuật toán khoa học dữ liệu do con người tạo ra, sử dụng phân tích dữ liệu đa biến kết hợp với kinh nghiệm quá khứ để đưa ra phương pháp điều trị. Một cấp độ khác là học máy, sử dụng mạng lưới thần kinh để đưa ra quyết định nhanh chóng và chính xác hơn. Cấp độ cao hơn là học sâu, cũng dựa trên mạng lưới thần kinh nhưng có nhiều lớp tính toán, giúp phân tích hình ảnh và dữ liệu bệnh lý một cách chính xác [6].

Xu hướng thỏa thuận chiến lược về trí tuệ nhân tạo trong ngành dược phẩm. Các công ty dược phẩm đang đầu tư vào AI để nâng cao danh mục bằng sáng chế và bảo đảm giao dịch sinh lợi. Trong quý II năm 2024, số lượng giao dịch liên quan đến AI trong ngành dược phẩm đã tăng 14% so với cùng kỳ năm trước, mặc dù giảm 23% so với quý trước đó [4]. Trong quý IV năm 2023, số lượng tin tuyển dụng trong ngành dược phẩm giảm 60% so với quý trước và giảm 79% so với cùng kỳ năm trước. Các công việc liên quan đến khoa học đời sống, thể chất và xã hội chiếm tỷ lệ cao nhất (50%), tiếp theo là quản lý (25%). Hoa Kỳ dẫn đầu về ứng dụng AI trong ngành dược phẩm, theo sau là Trung Quốc, Anh, Hàn Quốc và Ấn Độ [4]. AI đang cách mạng hóa ngành dược phẩm thông qua các quy trình tự động, phân tích dữ liệu và khám phá thuốc, hướng tới y học chính xác [4], [7].

3.2. Vai trò của AI trong ngành dược

3.2.1. Vai trò của AI trong lĩnh vực sản xuất dược phẩm

AI đóng vai trò quan trọng trong sản xuất dược phẩm, từ xác định mục tiêu thuốc, thiết kế và khám phá thuốc bằng mạng đối nghịch tạo sinh (GANs) và học sâu, đến cải tiến quy trình sản xuất thông qua kiểm soát chất lượng và giảm lãng phí. AI cũng hỗ trợ bảo đảm tuân thủ dùng thuốc, dự đoán độc tính, tối ưu hóa thử nghiệm lâm sàng, và tái sử dụng thuốc. Các thuật toán học máy có thể dự đoán đặc tính hóa lý của thuốc, sàng lọc phân tử chống ung thư và phát hiện biến cố bất lợi, giúp ngành dược phẩm phát triển hiệu quả và tiết kiệm chi phí.

3.2.2. Vai trò của AI trong lĩnh vực kinh doanh dược phẩm

AI đang thay đổi lĩnh vực kinh doanh dược phẩm ở nhiều khía cạnh:

- Nghiên cứu và phát triển: AI giúp các nhà nghiên cứu quét hàng triệu phân tử nhanh chóng, xác định các kết hợp có khả năng tạo ra thuốc mới và hỗ trợ các công ty nhỏ cung cấp dịch vụ chuyên biệt cho các công ty lớn.

- Lập kế hoạch: AI giúp các công ty dự đoán kết quả thử nghiệm lâm sàng và lập kế hoạch bán hàng, đặc biệt là các công ty lớn có khả năng số hóa dữ liệu.

- Mua sắm: AI hỗ trợ quản lý hợp đồng, chuỗi cung ứng và ra quyết định mua sắm, giúp giảm lao động thủ công và tối ưu hóa quy trình.

- Bán hàng và tiếp thị: AI giúp cá nhân hóa các hoạt động, đánh giá hiệu quả kênh tiếp thị và phát triển kế hoạch giữ chân khách hàng, tăng hiệu quả của đại diện y tế.

- Lưu trữ và giao hàng: AI giúp quản lý kho hàng hiệu quả hơn với các hệ thống như Pick-by-Voice và robot, giảm chi phí và tăng năng suất.

- Quản lý đơn thuốc: AI, như GenAI của Amazon Pharmacy, giúp xử lý đơn thuốc nhanh chóng và chính xác, tăng tốc độ xử lý đơn hàng và giảm tỷ lệ sai sót.

3.3. Ứng dụng AI trong lĩnh vực dược phẩm trên thế giới

3.3.1. Hướng tới AI trong phát triển dược phẩm

Mặc dù khả năng sử dụng AI trong phát triển dược phẩm và công nghệ sinh học là rõ ràng, nhưng động thái thực sự hướng tới việc áp dụng các công nghệ như vậy có thể diễn ra chậm chạp. Quá trình khám phá và phát triển thuốc truyền thống không chỉ đòi hỏi sự thích ứng dần dần (thay vì điều mà một số người có thể coi là “gián đoạn” bởi công nghệ), quá trình “đào tạo” AI về những gì hoạt động để khám phá thuốc có thể mất nhiều thời gian hơn so với các ứng dụng khác. Ví dụ: khi phương tiện truyền thông xã hội gắn thẻ ảnh của bạn bằng AI, nó sẽ nhận được phản hồi ngay lập tức từ bạn về việc kết quả có chính xác hay không, điều này cho phép AI học

hỏi nhanh chóng. Với việc phát hiện ra thuốc, phản hồi về một phân tử mới có thể mất nhiều tháng hoặc nhiều năm để chứng minh [4], [5].

Tuy nhiên, không thể phủ nhận rằng AI sẽ là xu hướng lớn tiếp theo trong ngành dược phẩm và những công ty thích ứng và áp dụng các quy trình mới sẽ có lợi thế chiến lược. Ví dụ: chuyển đổi kỹ thuật số đã giúp Amgen triển khai kiểm soát quy trình theo thời gian thực như thế nào [6], [7].

Trong nhiều ngành sản xuất, sự biến đổi của nguyên liệu thô có thể dẫn đến những thay đổi không mong muốn ở sản phẩm cuối cùng. Trong các ngành được quản lý như dược phẩm, điều này đặc biệt có vấn đề do nhu cầu duy trì các quy trình được kiểm soát cẩn thận nằm trong các thông số quy định đã được phê duyệt để phát triển và sản xuất thuốc. Việc thực hiện chuyển đổi kỹ thuật số toàn công ty đã cho phép Amgen căn chỉnh dữ liệu trên nhiều hệ thống để không chỉ kiểm soát mà còn dự đoán kịp thời những sai lệch không thể chấp nhận được để thực hiện các điều chỉnh cần thiết [8], [9].

Chuyển đổi kỹ thuật số là điều cần thiết để giám sát thời gian thực thành công, cho phép các công ty kết hợp dữ liệu từ nguyên liệu thô để cải thiện quy trình trong thời gian thực.

Đối với các nhà sản xuất, việc có thể giải quyết mọi vấn đề phát sinh từ sự biến đổi của nguyên liệu thô thường có nghĩa là hành động nhanh chóng để tìm ra nguyên nhân gốc rễ. Nếu không, những trở ngại nghiêm trọng và đáng kể đối với sự phát triển và sản xuất có thể xảy ra. Trong thực tế, điều này đòi hỏi phải theo dõi và phân tích cẩn thận và liên tục dữ liệu đến từ nhiều nguồn: từ nhà cung cấp nguyên liệu thô đến sản xuất cho đến phản hồi của bệnh nhân. Kiểm soát quy trình đòi hỏi sự phối hợp trong cách thu thập, chia sẻ và phân tích dữ liệu bắt đầu từ nguyên liệu thô. Theo báo cáo chỉ số chuyển đổi kỹ thuật số II của Dell Technologies, chưa đến 28% công ty đã áp dụng công nghệ kỹ thuật số để chuyển đổi hoạt động kinh doanh của họ. Amgen đi đầu trong việc giúp các công ty sản xuất dược phẩm sinh học thực hiện chuyển đổi kỹ thuật số để kiểm soát quy trình theo thời gian thực [8].

Sự phát hiện và tiến bộ của thuốc có thể được coi là bước chuyên dịch có liên quan cuối cùng nỗ lực khoa học làm tăng thêm sự bất khả xâm phạm và hạnh phúc của con người. Nhưng tiến tới một sự tươi mới dùng thuốc là một hoạt động khá phức tạp, tốn kém và kéo dài, thường tiêu tốn khoảng 2,6 tỷ USD và tiêu tốn khoảng thời gian trung bình là 12 năm [7]. Các phương pháp cắt giảm chi tiêu và đẩy nhanh phát triển thuốc mới khám phá này đã thúc đẩy một hoạt động động não đầy gian khổ và hấp dẫn trong ngành dược phẩm ngành công nghiệp. Sự tham gia của AI, bao gồm thành phần học sâu (DL) đặc biệt, đã được tạo điều kiện thuận lợi bằng việc sử dụng dữ liệu lớn được phân loại, phối hợp với năng lực tính toán và lưu trữ đám mây, trên tất cả các lĩnh vực. AI đã tiếp thêm sinh lực cho máy tính nghiên

cứu chế tạo thuốc. Sự tán thành không hạn chế của học máy (ML), đặc biệt là DL, trong nhiều lĩnh vực khoa học chuyên môn và cải tiến công nghệ trong phần cứng và phần mềm máy tính, phối hợp với các khía cạnh khác nhau của vấn đề, hãy duy trì sự tiến bộ này. Các thuật toán ML đã được sử dụng rộng rãi cho việc khám phá thuốc được hỗ trợ bởi máy tính. Các phương pháp DL, chẳng hạn như mạng nơ ron nhân tạo (ANN) bao gồm nhiều lớp xử lý bị chôn vùi, gần đây đã chứng kiến sự hồi sinh nhờ khả năng của chúng tăng cường khả năng gọi ra thuộc tính tự động từ dữ liệu đầu vào, cùng với khả năng thu được phi tuyến mỗi quan hệ đầu vào - đầu ra. Các tính năng như vậy của phương pháp DL tăng cường các kỹ thuật ML cổ điển giúp ngân hàng trên các mô tả phân tử do con người tạo ra. AI cùng với kiến thức kỹ thuật thực nghiệm hiện đại, được dự đoán sẽ tiếp thêm sinh lực cho việc tìm kiếm các phương pháp mới và cải tiến dược phẩm một cách nhanh chóng, tiết kiệm và ngày càng hấp dẫn. DL hỗ trợ các phương pháp vừa mới bắt đầu khởi động một số vấn đề không thể thiếu trong việc khám phá thuốc. Nhiều công nghệ tiên bộ mới, chẳng hạn như “*mô hình truyền tin nhân*”, “*mạng bảo toàn tính đối xứng không gian*”, “*mô hình lai novo Design*”, và các ví dụ ML khéo léo khác, chắc chắn sẽ trở nên phổ biến rộng rãi và giúp mở xẻ nhiều câu hỏi lớn nhất và hấp dẫn nhất. Mô hình và phân bổ dữ liệu mở. Việc tăng cường sẽ có vai trò quyết định trong quá trình khám phá thuốc sử dụng AI. Cái này đánh giá sẽ giải quyết việc sử dụng AI sắp tới để tinh chỉnh và củng cố hoạt động khám phá thuốc [6], [7].

3.3.2. Ứng dụng AI trong lĩnh vực dược ở một số công ty dược thế giới

AI đang được các công ty dược phẩm hàng đầu trên thế giới ứng dụng rộng rãi [9], [10]:

- Pfizer: sử dụng siêu máy tính và AI của IBM từ năm 2020 để phát triển thuốc, giảm thời gian tính toán đáng kể, và hợp tác với CytoReason để tạo mô hình AI của hệ thống miễn dịch.
- Janssen: khám phá AI trong nhiều lĩnh vực, từ khám phá thuốc đến sản xuất, và sử dụng dịch vụ Trials360.ai để tối ưu hóa thiết kế thử nghiệm lâm sàng.
- Lilly: đặt mục tiêu tăng “*lực lượng lao động tương đương với người lao động kỹ thuật số*” thông qua hơn 100 dự án AI.
- Sanofi: hợp tác với Aily Labs để phát triển nền tảng AI “*plai*” và với Hillo để điều chỉnh công nghệ AI cho bút insulin được kết nối.
- Novartis: sử dụng AI để cải thiện khám phá thuốc và hiệu quả, hợp tác với Microsoft và NVIDIA.
- AstraZeneca: hợp tác với Oncoshot và BenevolentAI để ghép bệnh nhân vào thử nghiệm và xác định mục tiêu thuốc.
- Bayer: hợp tác với Exscientia để khám phá thuốc phân tử nhỏ.

- Merck: hợp tác với nhiều công ty (BenchSci, Atomwise, C4 Therapeutics, ACMED) trong các sáng kiến khám phá và phát triển thuốc bằng AI.

- GSK: hợp tác với Cloud Pharmaceuticals và Insilico Medicine để sử dụng nền tảng AI của họ trong xác định mục tiêu, thiết kế thuốc và tạo khách hàng tiềm năng.

3.3.3. Các công ty dược phẩm ở Châu Á đang tích cực ứng dụng AI để nâng cao hiệu quả và đổi mới

- XtalPi (Trung Quốc): sử dụng cơ học lượng tử và AI để tối ưu hóa công thức thuốc và dự đoán đặc tính.

- BioMap (Trung Quốc): sử dụng AI để đánh giá dữ liệu sinh học phức tạp và đẩy nhanh quá trình phát triển thuốc.

- Cytlimic (Nhật Bản): phát triển vắc-xin peptide ung thư sử dụng máy học để kích hoạt hệ thống miễn dịch.

- Fujitsu Laboratories (Nhật Bản): cung cấp phần mềm mô phỏng phân tử để ước tính ái lực liên kết của protein và thiết kế hợp chất thuốc.

- Sun Pharma (Ấn Độ): áp dụng AI và ML để cải thiện khám phá thuốc, rút ngắn thời gian đưa thuốc ra thị trường, và tối ưu hóa thử nghiệm lâm sàng.

AI đang được áp dụng trong lĩnh vực dược phẩm ở một số công ty dược phẩm trong khu vực Đông Nam Á:

- Malaysia: Mạng lưới Ung thư Phổi Malaysia (LCNM), AstraZeneca và Qualitas Medical Group hợp tác để cung cấp dịch vụ sàng lọc ung thư phổi miễn phí bằng công nghệ AI (Qure.ai).

- Singapore: Gero chuyên về tìm kiếm thuốc do AI điều khiển và đã phát triển Gero AI Drug Discovery Platform để tìm kiếm các loại thuốc tiềm năng chống lại COVID-19.

- Việt Nam: FPT Long Châu ứng dụng AI để phân tích và dự báo nhu cầu sử dụng sản phẩm, giảm chi số stock-out và tồn kho. FPT.AI hợp tác cùng Boston Pharma ra mắt ứng dụng trợ lý ảo tổng đài để tự động hóa quy trình chăm sóc khách hàng.

4. BÀN LUẬN

AI đã mang lại nhiều đột phá quan trọng trong ngành dược phẩm, đặc biệt trong các lĩnh vực như khám phá và phát triển thuốc: AI giúp rút ngắn thời gian nghiên cứu thuốc từ hàng chục năm xuống chỉ còn vài năm bằng cách phân tích hàng triệu hợp chất hóa học và dự đoán hoạt tính của chúng. AI giúp kiểm soát chất lượng và dự báo sự cố trong sản xuất dược phẩm, giúp giảm tỷ lệ sai sót và tối ưu chi phí. AI giúp cá nhân hóa điều trị thông qua thiết kế phác đồ điều trị cá nhân dựa trên dữ liệu di truyền và bệnh sử của bệnh nhân. Đồng thời, việc tự động hóa trong quản lý chuỗi cung ứng, AI giúp tối ưu hóa tồn kho, dự báo nhu cầu và phân phối thuốc hiệu quả hơn, giảm thất thoát và lãng phí. Dù AI đã đạt

được nhiều thành tựu, nhưng vẫn còn những hạn chế nhất định, đặc biệt là trong nghiên cứu dược phẩm. AI có thể đẩy nhanh quá trình khám phá thuốc, nhưng việc xác minh và kiểm chứng kết quả vẫn cần sự can thiệp của các nhà khoa học. Hiểu rõ cơ chế tác động của thuốc và thực hiện thử nghiệm lâm sàng vẫn chủ yếu do con người đảm nhiệm. Bên cạnh đó, việc sử dụng dữ liệu bệnh nhân để huấn luyện AI đặt ra những thách thức lớn về quyền riêng tư và bảo mật thông tin. AI cũng gặp khó khăn trong việc tích hợp vào quy trình vận hành truyền thống của ngành dược do các yêu cầu pháp lý và tiêu chuẩn chất lượng nghiêm ngặt. Hơn nữa, AI hiện hoạt động hiệu quả với dữ liệu có cấu trúc, trong khi nhiều thông tin y tế và dược phẩm vẫn tồn tại dưới dạng phi cấu trúc như báo cáo lâm sàng hay ghi chú của bác sĩ, gây trở ngại trong phân tích và ứng dụng.

Thách thức khi sử dụng AI là tính minh bạch và độ tin cậy của AI. Nhiều mô hình AI hiện nay là “hộp đen” (black box), tức là khó hiểu và khó giải thích tại sao chúng đưa ra quyết định như vậy, gây khó khăn trong việc kiểm soát chất lượng thuốc. AI cần được huấn luyện trên dữ liệu đa dạng từ các nguồn thực tế để tăng độ chính xác và khả năng áp dụng trong môi trường thực tế. Sự hoài nghi của bác sĩ, dược sĩ và bệnh nhân về độ chính xác và an toàn của AI có thể cản trở việc áp dụng rộng rãi.

Triển vọng ứng dụng AI trong ngành dược là rất lớn, đặc biệt trong việc rút ngắn quy trình phát triển thuốc. Nếu các rào cản pháp lý và kỹ thuật được giải quyết, AI có thể giúp đưa thuốc ra thị trường nhanh hơn, giảm chi phí nghiên cứu và tăng khả năng tiếp cận thuốc mới. Bên cạnh đó, AI còn mở rộng ứng dụng trong chẩn đoán và điều trị, không chỉ hỗ trợ nghiên cứu thuốc mà còn giúp cá nhân hóa phác đồ điều trị, tối ưu hóa chăm sóc bệnh nhân. Khi được tích hợp với công nghệ sinh học và y học chính xác, AI có thể kết hợp với phân tích gen và dữ liệu sinh học để tạo ra phương pháp điều trị cá nhân hóa hiệu quả hơn. Ngoài ra, AI còn góp phần tăng cường tự động hóa trong sản xuất và quản lý chuỗi cung ứng, giúp cải thiện hiệu quả vận hành và bảo đảm nguồn cung thuốc ổn định hơn. AI đã chứng minh được vai trò quan trọng trong ngành dược phẩm, đặc biệt trong khám phá thuốc, tối ưu hóa sản xuất và cá nhân hóa điều trị. Tuy nhiên, công nghệ này vẫn chưa thể thay thế hoàn toàn con người trong nghiên cứu và kiểm soát chất lượng thuốc. Các rào cản pháp lý, chi phí đầu tư và vấn đề đạo đức vẫn là những thách thức lớn.

5. KẾT LUẬN

AI đang tạo ra một cuộc cách mạng trong ngành dược phẩm, mang lại những lợi ích to lớn thông qua phân tích dữ liệu thực tế và dự đoán kết quả điều trị. Các công ty dược phẩm có thể khai thác AI để nâng cao hiệu quả và hiệu suất trong nhiều giai đoạn, từ xác định mục tiêu thuốc đến tối ưu hóa sản xuất và quản lý chuỗi cung ứng. Mặc dù vẫn còn những thách thức trong việc phát

triển thuốc hoàn toàn bằng AI, công nghệ này hứa hẹn sẽ trở thành một công cụ không thể thiếu, giúp giảm chi phí, rút ngắn thời gian phát triển, và mang lại các phương pháp điều trị hiệu quả hơn cho bệnh nhân. Việc áp dụng và tích hợp AI ở nhiều cấp độ tổ chức là chìa khóa để các công ty dược phẩm khai thác tối đa tiềm năng của công nghệ này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Lu M et al, Artificial Intelligence in Pharmaceutical Sciences, Engineering, 2023, 27, pp. 37-69, <https://doi.org/10.1016/j.eng.2023.01.014>.
- [2] Vora L.K et al, Artificial Intelligence in Pharmaceutical Technology and Drug Delivery Design, Pharmaceutics, 2023, vol. 7, no. 15, 1916, <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15071916>.
- [3] Shinde P.S, Pawar A.Y, Talele S.G, The Role of Artificial Intelligence in the Pharmaceutical Sector: A Comprehensive Analysis of its Application from the Discovery Phase to Industrial Implementation, International Journal Of Drug Delivery Technology, 2023, 13 (04), pp. 1283-1286, DOI: 10.25258/ijddt.13.4.70.
- [4] Technology P, Artificial intelligence in the pharmaceutical industry: analyzing innovation, investment and hiring trends, 2024, [Online], Available: <https://www.pharmaceutical-technology.com/data-insights/artificial-intelligence-in-pharma/>.
- [5] Alex Zhavoronkov, Artificial intelligence for drug discovery, biomarker development, and generation of novel chemistry, Molecular Pharmaceutics, 2018, vol. 10, no. 15, pp. 4311-4313, <https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.8b00930>
- [6] Science Snippets, The Trending Role of Artificial Intelligence in the Pharmaceutical Industry, <https://www.sartorius.com/en/knowledge/science-snippets/the-trending-role-of-artificial-intelligence-in-the-pharmaceutical-industry-599278>, 2024 (accessed 1 September 2024)
- [7] Junaid Bajwa et al, Artificial intelligence in healthcare: transforming the practice of medicine, Future Healthcare Journal, 2021, vol. 8, no. 2, pp. e188-e194, DOI: 10.7861/fhj.2021-0095.
- [8] Narayan A, Chanana A, Shanker O, Kulkarni Y.R, Role of Artificial Intelligence in Pharmaceutical Drug Development, Current Indian Science, 2024, vol. 2, pp. 1-9, DOI: 10.2174/012210299X313252240521111358.
- [9] Jukka Rantanen, Johannes Khinast, The future of pharmaceutical manufacturing sciences, Journal of Pharmaceutical sciences, 2015, vol. 11, no. 104, pp. 3612-3638, DOI: 10.1002/jps.24594.
- [10] Pharmaceutical Processing World, How 11 Big Pharma companies are using AI, <https://www.pharmaceuticalprocessingworld.com/ai-pharma-drug-development-billion-opportunity/>, accessed 1 September 2024).