

INTELLIGENCE ARTIFICIELLE ET SES APPORTS EN THÉRAPEUTIQUE ET EN RECHERCHE MÉDICAMENTEUSE

Panorama général

L'intelligence artificielle s'impose aujourd'hui comme levier stratégique incontournable dans la recherche biomédicale et pharmaceutique. De la découverte de nouvelles cibles thérapeutiques à l'optimisation des essais cliniques, l'IA révolutionne l'ensemble de la chaîne de développement médicamenteux, en apportant rapidité, précision prédictive, réduction des coûts et capacité d'intégration de données massives et hétérogènes. Ces technologies s'intègrent dans un contexte où les modèles traditionnels de drug discovery peinent à répondre à la hausse exponentielle des coûts (estimés à plus de 2 milliards d'USD/molécule), aux délais excessifs, et au fort taux d'échec en phase clinique (90 %).

L'IA, et plus particulièrement le machine learning et le deep learning, permet désormais d'exploiter efficacement les données multi-échelles issues de la biologie, de la chimie, de la pharmacocinétique, de l'imagerie, et même de la littérature biomédicale via le traitement automatique du langage naturel (NLP).



Le Machine Learning désigne un ensemble d'algorithmes capables d'apprendre à partir de données, en identifiant des motifs et des régularités sans être explicitement programmés pour chaque tâche. Il repose sur l'entraînement de modèles statistiques à partir d'exemples, et permet par exemple de prédire l'affinité d'une molécule pour une cible, ou de classer des profils biologiques.

Le Deep Learning, sous-domaine du Machine Learning, s'appuie quant à lui sur des réseaux de neurones artificiels à plusieurs couches, profondes, capables de modéliser des relations complexes et non linéaires dans des jeux de données massifs. Ces architectures sont particulièrement performantes dans l'analyse d'images biomédicales, la modélisation 3D des structures moléculaires, ou encore l'extraction d'informations à partir de textes scientifiques.

Cette convergence technologique ouvre la voie à une pharmacologie computationnelle plus prédictive, plus rapide, et plus personnalisée (Yadav et al., 2024; Rizk et al., 2024).

1. Une chaîne pharmaceutique entièrement impactée par l'IA

Le développement d'un médicament, historiquement long, coûteux et risqué, suit une chaîne de valeur structurée en plusieurs étapes successives : identification de cibles, criblage de molécules, validation préclinique, essais cliniques, et mise sur le marché.

L'intégration des technologies d'intelligence artificielle permet aujourd'hui de réduire les coûts, d'accélérer les délais, et surtout d'améliorer la précision et la pertinence des décisions à chaque niveau. Cette transformation, largement documentée dans la littérature récente (Rizk et al., 2024; Yadav et al., 2024), n'est plus une promesse mais une réalité opérationnelle dans de nombreux laboratoires et biotechs.

"AI tools have become embedded in almost every stage of the drug discovery pipeline—from early prediction models to clinical trial optimization" (Rizk et al., 2024).

L'IA facilite l'identification de nouvelles cibles biologiques (protéines, enzymes, récepteurs) en analysant des jeux de données multi-omiques complexes : génomique, transcriptomique, épigénomique et protéomique. À l'aide de techniques de clustering non supervisé ou d'apprentissage profond, elle peut révéler des corrélations non triviales entre gènes, phénotypes pathologiques et réseaux de régulation biologique.

Par exemple, les modèles graph-based tels que les Graph Neural Networks (GNNs) permettent de cartographier les interactions protéines-protéines (PPI) ou les réseaux de régulation génique, identifiant ainsi des nœuds critiques pouvant servir de cibles prioritaires. L'étude de Rizk et al. (2024) souligne l'utilisation de ces techniques pour détecter des biomarqueurs de cancer ou de maladies neurodégénératives.

"Graph convolutional models have successfully revealed regulatory hubs and novel therapeutic targets in oncology datasets" (Rizk et al., 2024).

Une fois la cible identifiée, l'IA intervient dans la conception rationnelle de médicaments. Les techniques de Deep Learning génératif permettent de créer de nouvelles entités chimiques (NCEs) in silico à partir de contraintes biologiques (structure de la cible, affinité souhaitée, propriétés physico-chimiques).

Des approches comme les autoencodeurs variationnels (VAE), les réseaux antagonistes génératifs (GAN), et les modèles de langage moléculaire (ex. SMILES-BERT, MolGPT) sont utilisées pour générer rapidement des milliers de structures candidates répondant à des critères pharmaco-chimiques précis.

L'étude d'Abbas et al. (2024) illustre comment des modèles de Reinforcement Learning permettent d'optimiser les structures moléculaires en fonction d'un score d'affinité, de solubilité ou de toxicité prédite. Cela permet d'éviter la synthèse coûteuse de composés inefficaces ou dangereux dès les premières phases.

"Reinforcement learning strategies have been instrumental in guiding molecule generation towards high-affinity, low-toxicity profiles" (Abbas et al., 2024).

L'IA permet également d'accélérer le criblage virtuel (virtual screening) en évaluant in silico des millions de molécules candidates pour prédire leur capacité à se lier efficacement à une cible donnée. Les modèles prédictifs estiment les énergies de liaison, l'accessibilité, et la complémentarité structurale sans recourir à des simulations de docking moléculaire longues et coûteuses.

Les approches QSAR non linéaires basées sur des réseaux neuronaux surpassent souvent les méthodes traditionnelles en capturant des interactions complexes entre variables moléculaires. Yadav et al. (2024) montrent que les systèmes hybrides combinant ML et simulations physiques offrent un taux de réussite jusqu'à quatre fois supérieur aux méthodes classiques.

"Hybrid models combining machine learning and physics-based simulations achieved up to 4x better hit rates in virtual screening campaigns" (Yadav et al., 2024).

Une fois un candidat médicament identifié, il devient essentiel d'en prédire les propriétés ADMET (Absorption, Distribution, Métabolisme, Excrétion, Toxicité), afin d'en optimiser les paramètres pharmacocinétique et pharmacodynamique.

L'IA est capable d'anticiper ces propriétés à partir de la structure chimique, du profil biologique ou de simulations de métabolisation hépatique, en améliorant la précision des prédictions de biodisponibilité, de demi-vie et d'interactions médicamenteuses (Yadav et al., 2024).

L'étude de Dhudum et al. (2024) illustre l'utilisation combinée de réseaux de neurones profonds et de forêts aléatoires pour prédire la toxicité hépatique, cardiaque, et la mutagénicité à partir de simples représentations SMILES. Des approches intégrant données in vitro, profils pharmacologiques et réseaux de signalisation permettent d'anticiper des effets indésirables complexes et contextuels.

"Deep models trained on curated datasets like Tox21 and eTOX exhibit high sensitivity in predicting organ-specific toxicity" (Dhudum et al., 2024).

Enfin, la toxicologie prédictive, longtemps freinée par le manque de données standardisées, bénéficie aujourd'hui de l'agrégation de jeux de données publics (Tox21, Open TG-GATEs, eTOX), exploités par des algorithmes capables d'anticiper les risques bien avant la synthèse ou les tests animaux.

Ainsi, l'étude de ces propriétés permet d'évaluer les effets indésirables potentiels, leur gravité, et les différentes voies métaboliques impliquées. L'intégration de ces modules prédictifs dans les pipelines R&D permet de filtrer plus tôt les composés problématiques, réduisant à la fois les coûts d'essai et les risques d'échec en phase clinique.

Toujours concernant le procédé de recherche pharmaceutique, l'IA transforme également les essais cliniques. Grâce aux données cliniques massives (dossiers médicaux électroniques - EHR, registres de cohortes, imagerie, génétique), elle permet de stratifier finement les patients en sous-groupes moléculaires homogènes. Cela augmente la probabilité de détecter un effet thérapeutique significatif, même avec un nombre réduit de participants.

De plus, les essais dits adaptatifs, où le protocole évolue en fonction des données collectées en temps réel, sont rendus possibles par l'IA.

Les algorithmes prédictifs ajustent automatiquement les doses, les critères d'inclusion, ou la répartition des groupes selon l'évolution des données intermédiaires (Rizk et al., 2024).

"AI-based adaptive trials allow for real-time protocol optimization, enhancing efficacy and safety outcomes" (Rizk et al., 2024).

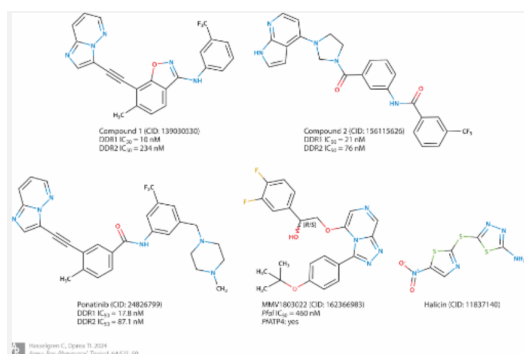
2. Conception assistée de médicaments : IA et génération moléculaire

L'intelligence artificielle constitue aujourd'hui un moteur central de la conception rationnelle de nouveaux composés thérapeutiques, en transformant en profondeur les outils de recherche, de simulation et d'optimisation moléculaire.

À l'intersection de la chimie computationnelle, de la modélisation structurale et des approches génératives, l'IA permet de dépasser les limites du criblage empirique traditionnel en apportant flexibilité, adaptabilité et exploration orientée de l'espace chimique.

Contrairement aux bibliothèques chimiques statiques, les modèles génératifs modernes – tels que les autoencodeurs variationnels (VAE), les réseaux antagonistes génératifs (GAN) ou les transformers chimiques (MolBART, SMILES-GPT, DrugGPT) – sont capables de générer dynamiquement des milliers de structures moléculaires valides, optimisées pour une cible ou un profil pharmacologique spécifique.

L'article de Xiangru Tang et al. (2024) propose une revue exhaustive de ces technologies, mettant en évidence la capacité des modèles de diffusion et transformers à générer des nouvelles entités chimiques ainsi que des macromolécules comme les peptides thérapeutiques ou mini-protéines.



Ces architectures s'appuient sur des représentations SMILES, graphes moléculaires ou coordonnées 3D, et sont entraînées pour générer des structures respectant les règles de chimie organique, tout en optimisant des objectifs multiples.

“Generative models are now capable of learning implicit chemical rules, enabling the creation of novel, synthesizable and bioactive compounds” (Tang et al., 2024).

Une tendance émergente est celle de l'apprentissage par renforcement moléculaire, où un agent IA génère des molécules, les évalue à l'aide d'un scoring multi-objectif (affinité, solubilité, toxicité, drug-likeness), puis adapte sa stratégie de génération. Des plateformes comme MolDQN ou REINVENT exploitent ces approches. L'étude d'Abbas et al. (2024) démontre que cette stratégie itérative permet de naviguer efficacement dans l'espace chimique tout en maximisant la probabilité d'activité biologique.

“Molecule generation platforms leveraging reinforcement learning have demonstrated high success in multi-objective compound design” (Abbas et al., 2024).

Parallèlement, l'IA permet de modéliser avec précision les interactions 3D entre un ligand et sa cible, en particulier via des réseaux neuronaux tridimensionnels (3D-CNN) ou des Graph Neural Networks (GNNs), capables d'apprendre les règles topologiques de liaison chimique.

L'article d'Odin Zhang et al. (2025) met en avant le rôle clé des GNNs dans la prédiction d'affinité ligand-récepteur, l'identification de poches de liaison, ou encore l'estimation de la stabilité conformationnelle. Les architectures comme GAT, SchNet, DimeNet ou EGNN permettent de traiter des représentations moléculaires complexes tout en respectant les symétries physiques.

“Graph neural networks offer an elegant and scalable way to represent molecular systems, enabling accurate property prediction and binding estimation” (Zhang et al., 2025).

Les modèles de langage biomoléculaire (comme DrugGPT, BioGPT ou MolBART), étudiés par Yizhen Zheng et al. (2024), participent également à cette transformation : ils peuvent non seulement générer des séquences chimiques ou peptidiques à partir de prompts (ex. "génère un inhibiteur de kinase"), mais aussi extraire automatiquement des connaissances pharmacologiques enfouies dans la littérature scientifique grâce aux techniques de Natural Language Processing (NLP) appliquées à PubMed, DrugBank ou PDB.

“LLMs are uniquely positioned to unify unstructured biomedical knowledge with structured chemical design tasks” (Zheng et al., 2024).

Enfin, ces outils s'intègrent de plus en plus dans des plateformes technologiques holistiques, comme AtomNet, DeepChem, Insilico Medicine ou ChemCrow, qui combinent génération, prédiction de propriétés, docking moléculaire, et tests de synthétisabilité.

L'article publié dans Artificial Intelligence Review par Springer (mars 2024) souligne que cette intégration permet de transformer un pipeline historiquement séquentiel et cloisonné en un système d'optimisation dynamique et itératif. Le processus devient ainsi adaptatif, capable d'ajuster en temps réel les contraintes (affinité, toxicité, synthèse) en fonction des retours de simulation ou de prédiction.

L'étude la plus récente, parue en juin 2025 dans Discover Pharmaceutical Sciences (Springer, 2025), rappelle que la conception moléculaire assistée par IA soulève aussi des défis : qualité des données d'entraînement, robustesse des générateurs, interprétabilité des modèles, validation expérimentale.

L'alignement entre IA générative et contraintes biologiques réelles reste un enjeu critique pour une transposition clinique fiable.

“Despite promising capabilities, generative AI in drug design must address data noise, model explainability, and regulatory compliance before becoming a mainstream industry standard” (Springer, 2025).

L'efficacité des systèmes d'IA dans la conception moléculaire repose également sur leur capacité à modéliser finement les cibles biologiques, notamment les protéines, récepteurs membranaires ou enzymes.

Grâce à des avancées en apprentissage supervisé, apprentissage par transfert, et surtout modélisation 3D guidée par IA, il est désormais possible d'anticiper la conformation spatiale d'une cible, d'identifier ses poches actives, et de prédire son interaction avec des ligands candidats.

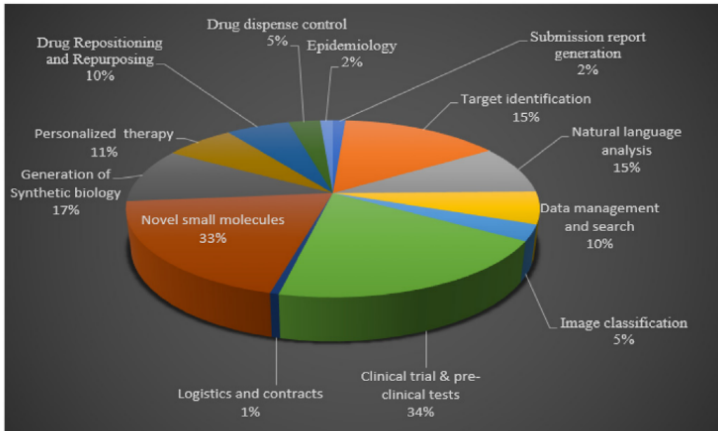
Des outils comme AlphaFold, RoseTTAFold, ou leurs dérivés spécifiques à la drug discovery (ex. EquiBind, DiffDock) utilisent des réseaux neuronaux profonds pour générer des structures protéiques précises à partir de séquences, y compris pour des protéines difficilement cristallisables.



Ces modèles permettent ensuite de simuler l'impact d'un ligand sur la structure, la flexibilité locale, et les éventuelles modifications allostériques. L'article de Zhang et al. (2025) insiste d'ailleurs sur l'intérêt croissant des graphes tridimensionnels de protéines pour modéliser non seulement les structures, mais aussi les réseaux fonctionnels d'interactions intra-cellulaires.

Parallèlement, les progrès récents dans l'intégration multi-échelle des données biologiques, du génome aux phénotypes cellulaires, permettent à l'IA de croiser des informations provenant de sources hétérogènes, notamment protéomiques, transcriptomiques, métabolomiques ou issues d'imagerie. Les modèles multi-modaux, qui combinent graphes biologiques, séquences, et imagerie, facilitent la compréhension des mécanismes pathologiques complexes.

Comme le souligne l'article Springer (mars 2024), cette approche holistique est essentielle pour capter la complexité biologique d'une maladie donnée et éviter les échecs liés à une vision trop réduite ou compartimentée de la cible. En intégrant l'ensemble du contexte cellulaire, l'IA peut orienter la génération moléculaire vers des composés plus pertinents biologiquement et cliniquement.



AI is implemented in various fields as per as survey.

Enfin, l'IA générative ne se limite plus aux petites molécules : elle est désormais appliquée à la génération de protéines, peptides thérapeutiques, anticorps ou ARN thérapeutiques, ouvrant la voie à une bioingénierie in silico.

Les modèles tels que ProGen, ProteinMPNN ou ESMFold permettent de créer des protéines de novo, avec des fonctions enzymatiques ou thérapeutiques précises, souvent inaccessibles par des approches évolutives classiques.

L'article de Xiangru Tang et al. (2024) souligne que cette dimension protéique du drug design devient stratégique, notamment dans les domaines de l'oncologie, des maladies rares ou des infections virales (ex. inhibiteurs de protéines virales). Ces générateurs apprennent non seulement les motifs structuraux, mais aussi les contraintes de stabilité, d'immunogénicité et d'activité biologique, offrant un contrôle précis sur les propriétés fonctionnelles.

"The frontier of generative drug design is shifting from small molecules to protein and peptide-based therapeutics, leveraging structure-aware AI architectures." (Tang et al., 2024).

Ce glissement vers une IA structure-aware, capable de générer aussi bien la molécule que la cible, amorce une nouvelle ère de co-conception thérapeutique IA-centrée, où la frontière entre chimie et biologie s'efface.

Cette évolution ouvre de nouvelles perspectives pour les approches multi-cible, la médecine personnalisée, et l'optimisation des futures biothérapies.

3. Applications industrielles de l'intelligence artificielle en pharmacie

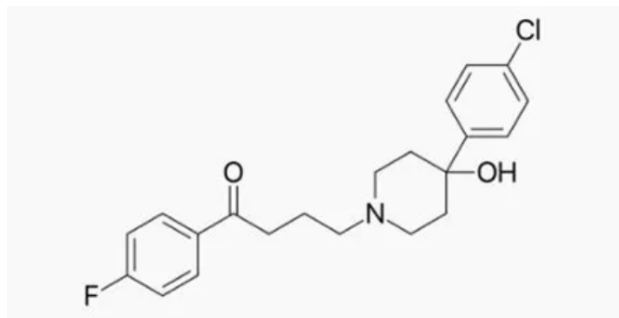
Au-delà du champ de la recherche académique, l'intelligence artificielle s'est aujourd'hui imposée comme un vecteur d'innovation industrielle majeur dans l'industrie pharmaceutique. De nombreuses entreprises, des grands laboratoires pharmaceutiques traditionnels aux startups spécialisées en bio-informatique, ont intégré des technologies d'IA dans leurs pipelines de développement afin de gagner en efficacité, en précision et en compétitivité.

Des firmes comme Pfizer, Novartis, Sanofi ou AstraZeneca collaborent désormais avec des sociétés technologiques spécialisées (Insilico Medicine, Exscientia, BenevolentAI, Atomwise) pour externaliser des étapes stratégiques du processus de R&D via des plateformes basées sur l'IA. Ces collaborations ont permis l'identification accélérée de candidats médicaments en oncologie, en neurologie ou dans les maladies rares, avec des délais réduits de plusieurs années par rapport aux processus traditionnels.

“AI has significantly shortened the hit-to-lead and lead optimization timelines in industry-level drug discovery” (Rizk et al., 2024).

Par exemple, la société britannique Exscientia a conçu, grâce à un système d'IA, une molécule anticancéreuse (DSP-1181) en moins de 12 mois – un record comparé au délai habituel de 4 à 5 ans – qui a ensuite été validée pour des essais cliniques au Japon en collaboration avec Sumitomo Pharma.

“DSP-1181, discovered using an AI-driven platform, became the world's first AI-designed drug to enter clinical trials” (Abbas et al., 2024).



L'IA joue également un rôle de plus en plus stratégique dans la repurposing de médicaments, en exploitant des algorithmes de similarité moléculaire ou de corrélation phénotypique pour identifier de nouvelles indications pour des molécules existantes.

Cette approche, accélérée par les outils de NLP capables d'extraire automatiquement des relations biomédicales depuis des millions de publications scientifiques, a été cruciale durant la pandémie de COVID-19, où des traitements comme la dexaméthasone ou le baricitinib ont été repositionnés en urgence grâce à des outils d'IA (Rizk et al., 2024).

Sur le plan industriel, l'IA transforme également la production pharmaceutique, notamment via l'automatisation du contrôle qualité, la détection précoce d'anomalies dans les chaînes de production, et l'optimisation des procédés de formulation. Grâce à la vision par ordinateur couplée à des algorithmes d'apprentissage supervisé, il est possible de détecter en temps réel des défauts microscopiques dans les comprimés ou les lots de fabrication, améliorant la sécurité et la conformité réglementaire.

Enfin, les algorithmes de maintenance prédictive intégrés aux lignes de production permettent d'anticiper les pannes, de réduire les temps d'arrêt et d'optimiser la maintenance des équipements, selon les principes de l'industrie 4.0. Cette convergence entre IA et automatisation industrielle s'inscrit dans une dynamique globale de digitalisation de la chaîne de valeur pharmaceutique.

Ainsi, l'IA ne constitue plus une simple innovation de laboratoire, mais s'impose comme un outil opérationnel au cœur de la stratégie industrielle des grands acteurs du médicament, modifiant en profondeur les pratiques, les modèles économiques et les horizons d'innovation du secteur.

4. Limites, défis réglementaires et enjeux éthiques de l'IA appliquée à la recherche

Malgré le potentiel transformateur de l'intelligence artificielle dans la R&D pharmaceutique, son intégration à grande échelle se heurte encore à de nombreux obstacles techniques, réglementaires, éthiques et méthodologiques.

Le premier défi majeur concerne la qualité et la disponibilité des données. Les modèles d'IA, qu'ils soient génératifs, prédictifs ou de classification, sont aussi performants que les données sur lesquelles ils sont entraînés.

Or, dans le domaine biomédical, les jeux de données sont souvent :

- Bruyants, faussés (annotations incohérentes, erreurs humaines),
- Biaisés (sous-représentation de certaines populations, maladies rares ou profils atypiques),
- Non interopérables (formats hétérogènes, silos entre sources),
- Confidentiels (frein à l'open science en raison de contraintes industrielles ou légales).

Ces lacunes peuvent conduire à des prédictions erronées, des sur-apprentissages sur des biais (ex. surestimation de l'efficacité dans certaines cohortes), ou à l'échec lors de la validation préclinique. L'article de Zheng et al. (2024) insiste sur ce point :

“Despite their performance, large language models remain sensitive to domain-specific data scarcity, and their outputs must be critically evaluated in high-stakes biomedical contexts.”

Un second défi majeur est celui de la transparence des algorithmes. La plupart des modèles d'IA utilisés – notamment les réseaux neuronaux profonds (deep learning) – sont des "boîtes noires", rendant difficile l'explication des décisions prises (par exemple, pourquoi telle molécule a été priorisée, ou tel effet secondaire anticipé).

Dans un cadre aussi critique que le développement pharmaceutique, cette opacité pose des problèmes de traçabilité, de reproductibilité et d'acceptabilité scientifique.

C'est pourquoi un effort important est actuellement porté vers les approches dites "XAI" (Explainable AI), qui cherchent à fournir des modèles interprétables par des experts (visualisation d'activations, attribution de caractéristiques, contre-exemples).

Cependant, ces outils restent encore limités pour les systèmes les plus complexes. L'article de Zhang et al. (2025) note ainsi :

“The interpretability of graph neural networks in drug discovery remains a key bottleneck before their full deployment in regulated pipelines.”

Du point de vue réglementaire, les agences comme la FDA (États-Unis), l'EMA (Europe) ou l'ANSM (France) commencent à se positionner sur la validation des outils IA dans le cadre du développement de médicaments.

Toutefois, aucune harmonisation claire n'existe encore concernant les critères de validation d'un modèle IA dans les essais cliniques, la traçabilité des décisions algorithmiques dans le dossier de demande d'AMM, l'intégration de l'IA dans les protocoles de pharmacovigilance ou les plans de gestion des risques.

Les publications comme celle de Springer (juin 2025) insistent sur le fait que l'IA en santé nécessite des cadres de régulation spécifiques, articulés autour de la transparence algorithmique, de la responsabilité en cas d'erreur, et de l'auditabilité des systèmes.

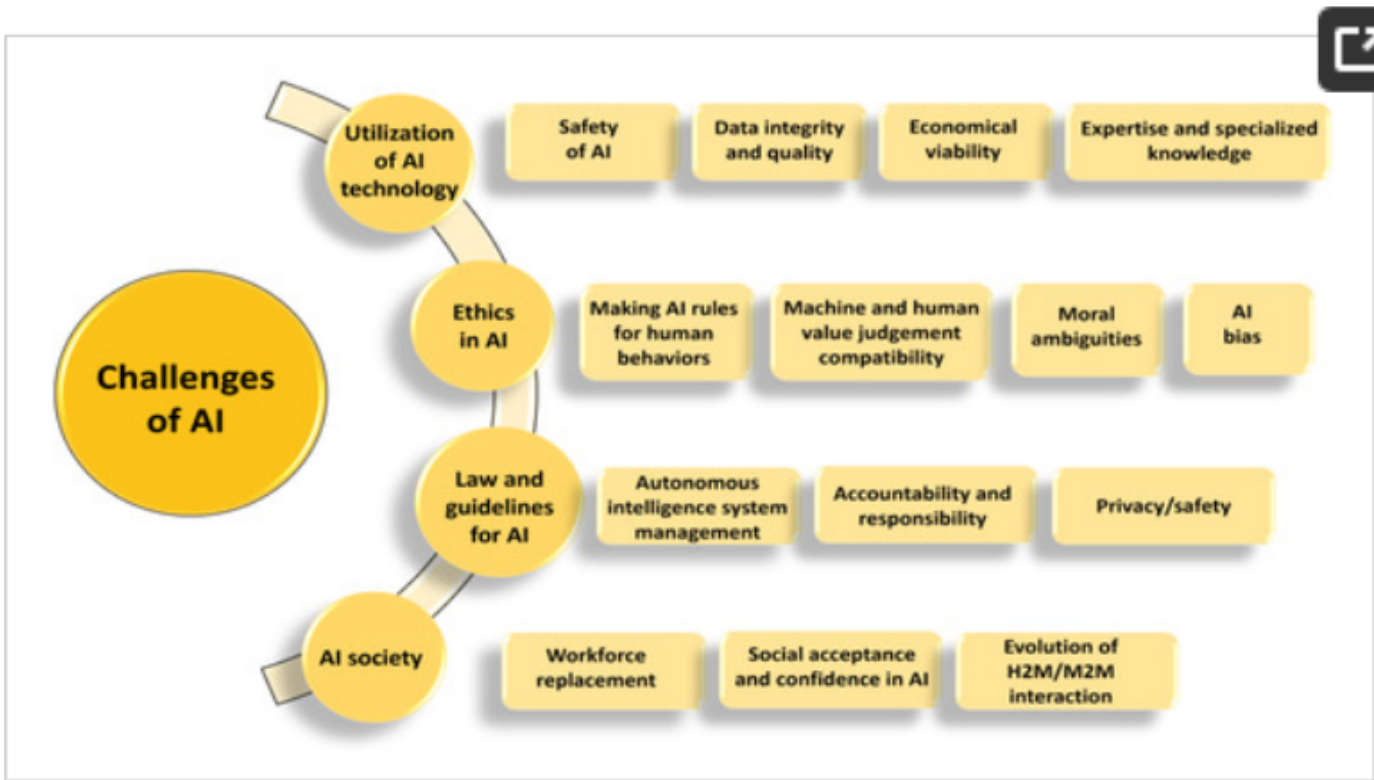
“To fully realize AI’s potential in drug discovery, regulatory frameworks must evolve to support its validation, deployment, and real-time monitoring.” (Springer, 2025)

Au-delà des aspects techniques et juridiques, se posent des questions éthiques fondamentales, parmi lesquelles :

- Le respect du consentement éclairé pour l'utilisation de données cliniques,
- Le risque de discrimination algorithmique, si l'IA pénalise certains groupes de patients (ex. patients non caucasiens, femmes enceintes, personnes âgées),
- La responsabilité morale en cas d'erreur ou d'effets indésirables causés par un médicament conçu ou filtré par IA,
- Le partage équitable des bénéfices générés par ces systèmes (brevets, accès au médicament).

Dans une perspective de santé mondiale, l'IA ne doit pas renforcer les inégalités d'accès aux soins ou à la recherche, mais au contraire favoriser des approches ouvertes, inclusives et éthiquement justifiées. Des initiatives comme AI4Health, ODD4Drugs ou les consortia open source (ex. Open Targets, MELLODDY) visent à promouvoir des modèles équitables, auditable, et partagés.

Pour cela, il est crucial d'assurer la diversité des données utilisées et d'impliquer les acteurs du Sud global dans les processus de développement. L'accessibilité aux outils d'IA doit être pensée comme un bien commun, au service de la santé pour tous.



L'intelligence artificielle s'impose aujourd'hui comme un catalyseur de rupture dans le champ du développement pharmaceutique. En permettant d'accélérer, d'automatiser et d'optimiser des étapes historiquement longues, coûteuses et aléatoires – de la sélection de cibles à la conception de molécules, jusqu'à la conduite des essais cliniques – l'IA marque l'entrée dans une ère de pharmacologie computationnelle aux performances inédites.

Les technologies de machine learning, de modèles génératifs, ou de réseaux neuronaux sur graphes offrent désormais des outils capables de générer in silico des milliers de structures moléculaires viables (Tang et al., 2024), modéliser les réseaux d'interaction à l'échelle cellulaire ou systémique (Zhang et al., 2025), d'adapter dynamiquement les essais cliniques aux données en temps réel (Zheng et al., 2024), et d'anticiper la toxicité, les effets secondaires, ou la biodisponibilité avec une précision croissante (Springer, 2025).

À travers une intégration progressive dans les plateformes industrielles (Insilico Medicine, Atomwise, BenevolentAI), l'IA ne se limite plus à un rôle exploratoire mais devient un acteur stratégique de co-développement thérapeutique.

Cependant, cette dynamique reste conditionnée à la résolution de plusieurs freins critiques : qualité des données, explicabilité des modèles, validation réglementaire et acceptabilité éthique.

Les enjeux de transparence, d'inclusivité des algorithmes, et de gouvernance des systèmes décisionnels seront au cœur de l'implémentation responsable de ces technologies dans la chaîne de soin.

Comme le souligne l'article de Discover Pharmaceutical Sciences (2025), "AI in drug development is not only a scientific transformation, but a societal one – requiring interdisciplinary regulation, ethical safeguards, and collaborative transparency."

Dans un avenir proche, l'évolution des modèles de langage multimodaux, la fusion de l'IA avec les approches omiques et les systèmes de biologie synthétique, ou encore le développement de jumeaux numériques de patients, ouvrent des perspectives inédites pour une médecine de précision réellement personnalisée et proactive.

L'IA n'est pas une solution miracle : c'est un outil. Mais un outil qui, bien encadré, bien régulé, et bien intégré, peut refonder en profondeur la manière dont nous découvrons, testons et délivrons les thérapies du futur.

Articles généralistes sur l'IA

Catrin Hasselgren & Tudor I. Oprea (2024) : Artificial Intelligence for Drug Discovery: Are We There Yet?, Annual Review of Pharmacology & Toxicology

► Analyse des approches comme le deep learning, les autoencodeurs, la chimie générative, avec des cas concrets.

annualreviews.org

Seema Yadav et al. (2024)

Revolutionizing drug discovery: The impact of AI on advancements in the pharmaceutical field, Intelligent Pharmacy

► Revue complète de la pipeline IA : identification de cibles, criblage, repositionnement, etc.

journal.hep.com.cn

Shruti Bharadwaj et al. (2024)

Exploring the Artificial Intelligence and Its Impact in Pharmaceutical Sciences, Chemical Biology & Drug Design

► Focus sur les impacts industriels, la formulation, le scale-up et les applications concrètes.

onlinelibrary.wiley.com

Rushikesh Dhudum et al. (2024)

Revolutionizing Drug Discovery: A Comprehensive Review of AI Applications, Drugs and Drug Candidates (MDPI)

► Bon panorama technique : GNN, DL, NLP, repositionnement, modélisation QSAR, toxicité.

mdpi.com

M. K. G. Abbas et al. (2024)

The Role of AI in Drug Discovery: Benefits, Challenges, and Ethical Considerations, ChemBioChem

► Aborde les biais de données, l'éthique, les limites des IA génératives, les failles dans les datasets.

chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com

Articles spécialisés / techniques avancées

Xiangru Tang et al. (février 2024) : A Survey of Generative AI for de novo Drug Design, arXiv preprint

► Très technique : VAE, GANs, diffusion models, graph transformers, plateformes comme DrugEx.

arxiv.org/abs/2402.02848

Odin Zhang et al. (7 juin 2025)

Graph Neural Networks in Modern AI-aided Drug Discovery, arXiv preprint

► Revue exhaustive sur les GNN pour prédiction structurale, simulation d'interactions, virtual screening.

arxiv.org/abs/2506.00789

Yizhen Zheng et al. (sept. 2024)

Large Language Models in Drug Discovery and Development: Opportunities and Challenges, arXiv preprint

► Rôle des LLM comme DrugGPT, Galactica, Med-PaLM, BioGPT dans les bases de données biomédicales et essais cliniques.

arxiv.org/abs/2309.15384

Articles sur pipeline & aspects réglementaires

Springer (11 mars 2024)

From understanding diseases to drug design: can artificial intelligence bridge the gap?, Artificial Intelligence Review

► Lien entre compréhension des pathologies, identification des cibles, modélisation et design moléculaire.

link.springer.com

Springer (2 juin 2025)

Artificial intelligence in drug discovery and development: transforming challenges into opportunities, Discover Pharmaceutical Sciences

► Traite des bénéfices IA, contraintes réglementaires, transparence, validation, intégration industrielle.

link.springer.com