

ARTIFICIAL INTELLIGENCE DALAM DRUG DISCOVERY DAN DRUG REPURPOSING: PERKEMBANGAN TERKINI, TANTANGAN, DAN APLIKASI KLINIS

Fauziah Hasdin¹, Rieka Nurul Dwi Anggraeni²

Universitas Negeri Makassar

Fauziah.hasdin@unm.ac.id

ABSTRACT

Drug development is a complex, time-consuming, and costly process with a high failure rate across preclinical and clinical stages. The rapid advancement of Artificial Intelligence (AI) has introduced innovative approaches to improve the efficiency and effectiveness of both *drug discovery* and *drug repurposing* by enabling the analysis of large-scale biological, chemical, and clinical datasets. This review aims to examine recent advances in AI applications for drug discovery and drug repurposing, evaluate their contributions across different stages of drug development, and discuss the challenges associated with their implementation in pharmaceutical sciences. This article was conducted as a narrative review based on literature retrieved from PubMed, Scopus, ScienceDirect, SpringerLink, Web of Science, and Google Scholar, covering publications from 2021 to 2026. Eligible studies were selected according to their relevance to AI, machine learning, deep learning, drug discovery, drug repurposing, medicinal chemistry, and clinical pharmacy. The reviewed literature demonstrates that AI plays a pivotal role in target identification, virtual screening, lead optimization, prediction of Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity (ADMET) properties, and clinical trial optimization. Furthermore, AI accelerates drug repurposing through the integration of multi-omics data, knowledge graphs, and biological network analysis, enabling the efficient identification of novel therapeutic indications. Despite its considerable potential, the implementation of AI remains challenged by issues related to data quality, algorithm transparency, model validation, regulatory frameworks, and ethical considerations. Overall, AI has emerged as a transformative technology capable of accelerating drug development, improving decision-making, and supporting the advancement of precision medicine through multidisciplinary collaboration among pharmaceutical scientists, clinicians, computer scientists, and regulatory authorities.

Kata Kunci: *Artificial Intelligence, Drug Discovery, Drug Repurposing, Machine Learning, Precision Medicine*

ABSTRAK

Pengembangan obat merupakan proses yang kompleks, memerlukan biaya tinggi, waktu yang panjang, serta memiliki tingkat kegagalan yang signifikan pada setiap tahapan penelitian hingga uji klinis. Perkembangan Artificial Intelligence (AI) telah menghadirkan pendekatan inovatif yang mampu meningkatkan efisiensi dan efektivitas proses *drug discovery* dan *drug repurposing* melalui analisis data biologis, kimia, dan klinis dalam skala besar. Artikel ini bertujuan untuk mengulas perkembangan terkini pemanfaatan AI dalam penemuan dan reposisi obat, mengevaluasi kontribusinya pada berbagai tahapan pengembangan obat, serta mengidentifikasi tantangan implementasinya dalam bidang farmasi. Penulisan artikel menggunakan metode narrative review dengan menelusuri literatur dari PubMed, Scopus, ScienceDirect, SpringerLink, Web of Science, dan Google Scholar terhadap publikasi ilmiah periode 2021–2026. Literatur dipilih berdasarkan relevansinya dengan penerapan AI, *machine learning*, *deep learning*, *drug discovery*, *drug repurposing*, serta aplikasinya dalam kimia farmasi dan farmasi klinik. Hasil telaah menunjukkan bahwa AI berperan penting dalam identifikasi target molekuler, *virtual screening*, optimasi senyawa (*lead optimization*), prediksi sifat *Absorption*, *Distribution*, *Metabolism*, *Excretion*, and *Toxicity* (ADMET), serta optimalisasi desain uji klinis. Selain itu, AI mempercepat *drug repurposing* melalui integrasi *multi-omics*, *knowledge graph*, dan analisis jaringan biologis sehingga mendukung identifikasi indikasi terapeutik baru secara lebih efisien. Meskipun demikian, implementasi AI masih menghadapi tantangan terkait kualitas data, transparansi algoritma, validasi model, regulasi, dan aspek etika. Secara keseluruhan, AI berpotensi menjadi teknologi utama dalam pengembangan obat yang lebih efektif, aman, dan mendukung penerapan *precision medicine* melalui kolaborasi multidisiplin.

Kata Kunci: Kecerdasan Buatan, Penemuan Obat, Reposisi Obat, Pembelajaran Mesin, Pengobatan Presisi.

PENDAHULUAN

Penemuan dan pengembangan obat (*drug discovery and development*) merupakan proses yang kompleks, multidisiplin, serta membutuhkan investasi waktu, biaya, dan sumber daya yang sangat besar (Paul et al., 2010; Vamathevan et al., 2019). Secara konvensional, proses ini mencakup identifikasi target biologis, penemuan senyawa awal (*hit identification*), optimasi senyawa utama (*lead optimization*), pengujian praklinik, hingga uji klinik sebelum memperoleh persetujuan regulator (Hughes et al., 2011; Paul et al., 2010). Rata-rata pengembangan satu obat baru memerlukan waktu lebih dari 10 tahun dengan biaya yang dapat mencapai miliaran dolar Amerika Serikat, sementara tingkat keberhasilan kandidat obat yang berhasil mencapai tahap pemasaran masih relatif rendah (Paul et al., 2010; Vamathevan et al., 2019). Kondisi tersebut mendorong perlunya pendekatan yang lebih efisien untuk mempercepat proses pengembangan obat tanpa mengurangi aspek keamanan dan efektivitasnya (Paul et al., 2010; Wouters et al., 2020a).

Salah satu tantangan terbesar dalam pengembangan obat adalah tingginya angka kegagalan pada setiap tahapan penelitian (Paul et al., 2010; Wouters et al., 2020). Sebagian besar kandidat obat gagal pada fase praklinik maupun uji klinik akibat rendahnya efektivitas, toksisitas yang tidak dapat diterima, atau karakteristik farmakokinetik yang kurang optimal (Hughes et al., 2011; Wouters et al., 2020a) (3,4). Selain itu, meningkatnya kompleksitas penyakit, seperti kanker, penyakit neurodegeneratif, penyakit autoimun, dan penyakit langka, menuntut strategi penemuan obat yang mampu mengintegrasikan informasi biologis, kimia, dan klinis secara lebih komprehensif (Vamathevan et al., 2019; Wouters et al., 2020b). Oleh karena itu, transformasi digital melalui pemanfaatan kecerdasan buatan (*Artificial Intelligence*, AI) menjadi salah satu pendekatan yang paling menjanjikan dalam mengatasi berbagai keterbatasan metode konvensional (Jumper et al., 2021; Vamathevan et al., 2019).

Perkembangan AI dalam bidang ilmu hayati telah mengubah paradigma penelitian farmasi dari pendekatan berbasis eksperimen menjadi pendekatan berbasis data (*data-driven drug discovery*) (Jumper et al., 2021; Vamathevan et al., 2019). AI merupakan cabang ilmu komputer yang memungkinkan sistem melakukan proses

pembelajaran, pengenalan pola, pengambilan keputusan, serta prediksi berdasarkan data dalam jumlah besar (Heaton, 2018; Vamathevan et al., 2019). Dalam bidang farmasi, AI dimanfaatkan untuk mengidentifikasi target obat, memprediksi interaksi molekul, merancang struktur senyawa baru, mengoptimalkan sifat fisikokimia obat, hingga memperkirakan keberhasilan kandidat obat pada tahap praklinik maupun klinik (Jumper et al., 2021; Stokes et al., 2020; Vamathevan et al., 2019). Kemampuan tersebut menjadikan AI sebagai salah satu teknologi yang paling berpengaruh dalam transformasi penelitian dan pengembangan obat modern (Jumper et al., 2021; Vamathevan et al., 2019).

Kemajuan AI semakin pesat dengan berkembangnya berbagai pendekatan seperti *machine learning*, *deep learning*, *graph neural networks*, *reinforcement learning*, dan *generative artificial intelligence* (Jumper et al., 2021; Vamathevan et al., 2019; Wouters et al., 2020b). Berbagai algoritma tersebut mampu mempelajari hubungan kompleks antara struktur kimia, target biologis, dan aktivitas farmakologis sehingga menghasilkan prediksi yang lebih akurat dibandingkan pendekatan komputasional tradisional (Jumper et al., 2021; Pushpakom et al., 2019). Integrasi AI dengan teknologi *omics*, *high-throughput screening*, *virtual screening*, serta pemodelan molekuler telah mempercepat proses identifikasi kandidat obat sekaligus meningkatkan efisiensi optimasi molekul sebelum memasuki tahap pengujian eksperimental (Pushpakom et al., 2019; Stokes et al., 2020; Vamathevan et al., 2019).

Selain mempercepat proses *drug discovery*, AI juga memberikan kontribusi besar terhadap pengembangan strategi *drug repurposing*, yaitu pemanfaatan kembali obat yang telah disetujui atau sedang dikembangkan untuk indikasi penyakit yang berbeda (Ashburn & Thor, 2004; Pushpakom et al., 2019; WBS, 2026). Pendekatan ini menawarkan berbagai keuntungan, antara lain pengurangan biaya penelitian, waktu pengembangan yang lebih singkat, serta tingkat keberhasilan yang lebih tinggi karena profil keamanan obat umumnya telah diketahui sebelumnya (Pushpakom et al., 2019). Dengan memanfaatkan *knowledge graph*, analisis jaringan biologis, data genomik, dan rekam medis elektronik, AI mampu mengidentifikasi hubungan baru antara obat, target molekuler, dan penyakit yang

sebelumnya sulit dikenali menggunakan metode konvensional (Ashburn & Thor, 2004; Pushpakom et al., 2019). Pendekatan ini terbukti sangat bermanfaat, terutama pada pengembangan terapi untuk penyakit langka, kanker, penyakit neurodegeneratif, dan penyakit infeksi baru (Ashburn & Thor, 2004; Pushpakom et al., 2019; WBS, 2026).

Perkembangan AI dalam beberapa tahun terakhir juga didorong oleh hadirnya teknologi seperti *generative AI*, *large language models* (LLMs), dan model prediksi struktur protein berbasis AI, misalnya AlphaFold (6,10). Inovasi tersebut memungkinkan proses desain molekul dilakukan secara lebih cepat melalui pembangkitan struktur kimia baru yang memiliki karakteristik biologis tertentu, sekaligus meningkatkan akurasi prediksi struktur protein yang menjadi target terapi (6,10). Kemajuan ini memperluas cakupan aplikasi AI dari sekadar analisis data menjadi sistem pendukung keputusan ilmiah yang mampu mempercepat seluruh tahapan pengembangan obat (Jumper et al., 2021; Vamathevan et al., 2019).

Meskipun menawarkan berbagai manfaat, implementasi AI dalam pengembangan obat masih menghadapi sejumlah tantangan (Pushpakom et al., 2019; Vamathevan et al., 2019). Kualitas dan ketersediaan data, interoperabilitas basis data, transparansi algoritma (*explainable AI*), bias model, validasi hasil prediksi, serta regulasi penggunaan AI dalam penelitian farmasi merupakan beberapa isu yang perlu mendapatkan perhatian (Jumper et al., 2021; Pushpakom et al., 2019; Vamathevan et al., 2019). Di samping itu, aspek etika terkait penggunaan data pasien, keamanan informasi, dan akuntabilitas sistem AI juga menjadi faktor penting dalam penerapan teknologi ini pada praktik klinis (Jumper et al., 2021; Pushpakom et al., 2019). Oleh karena itu, keberhasilan implementasi AI tidak hanya bergantung pada kemajuan algoritma, tetapi juga memerlukan kolaborasi antara ilmuwan komputer, kimiawan farmasi, farmakolog, klinisi, regulator, dan industri farmasi (Pushpakom et al., 2019; Vamathevan et al., 2019).

Berdasarkan perkembangan tersebut, diperlukan suatu telaah komprehensif yang mengintegrasikan bukti ilmiah terkini mengenai peran AI dalam *drug discovery* dan *drug repurposing* (Jumper et al., 2021; Pushpakom et al., 2019; Vamathevan et al., 2019). Artikel ini bertujuan untuk mengulas perkembangan

mutakhir pemanfaatan AI pada setiap tahapan pengembangan obat, mengevaluasi kontribusinya terhadap penemuan dan reposisi obat, membahas tantangan implementasi dalam penelitian dan praktik klinis, serta mengidentifikasi peluang pengembangan AI sebagai pendorong inovasi menuju *precision medicine* dan pengembangan terapi yang lebih efektif, aman, dan efisien.

METODE PENELITIAN

Artikel ini disusun menggunakan metode *narrative review*, yang bertujuan untuk menyajikan sintesis komprehensif mengenai perkembangan pemanfaatan *Artificial Intelligence* (AI) dalam *drug discovery* dan *drug repurposing*. Pendekatan *narrative review* dipilih karena memungkinkan integrasi berbagai hasil penelitian dari beragam disiplin ilmu, seperti kimia farmasi, farmakologi, bioinformatika, ilmu komputer, dan farmasi klinik. Selain itu, metode ini memberikan fleksibilitas dalam mengidentifikasi perkembangan teknologi, membandingkan temuan antarpencarian, serta menganalisis tantangan dan prospek penerapan AI dalam pengembangan obat secara kritis dan menyeluruh.

Penelusuran literatur dilakukan secara sistematis melalui beberapa basis data ilmiah internasional, yaitu PubMed, Scopus, Web of Science, ScienceDirect, SpringerLink, dan Google Scholar. Pencarian literatur difokuskan pada artikel yang dipublikasikan dalam rentang waktu Januari 2021 hingga Juni 2026 untuk memperoleh informasi terkini mengenai penerapan AI dalam proses penemuan dan pengembangan obat. Strategi pencarian menggunakan kombinasi kata kunci dengan operator Boolean (AND dan OR), antara lain *Artificial Intelligence*, *Machine Learning*, *Deep Learning*, *Drug Discovery*, *Drug Repurposing*, *Medicinal Chemistry*, *Computational Drug Design*, *Virtual Screening*, *ADMET Prediction*, *Precision Medicine*, dan *Clinical Pharmacy*.

Literatur yang disertakan dalam review ini memenuhi beberapa kriteria inklusi, yaitu: (1) artikel penelitian asli (*original research*), artikel review, atau *systematic review* yang diterbitkan dalam jurnal *peer-reviewed*; (2) tersedia dalam bentuk *full text*; (3) ditulis dalam bahasa Inggris atau bahasa Indonesia; dan (4) membahas penerapan AI pada salah satu atau beberapa tahapan *drug discovery*, *drug*

repurposing, prediksi ADMET, desain molekul, atau implementasi klinis. Sebaliknya, artikel berupa editorial, surat kepada editor, prosiding konferensi, abstrak tanpa naskah lengkap, artikel duplikat, serta publikasi yang tidak relevan dengan fokus kajian dikeluarkan dari proses seleksi.

Artikel yang memenuhi kriteria kemudian dibaca secara menyeluruh untuk memperoleh informasi mengenai tujuan penelitian, metode AI yang digunakan, ruang lingkup penerapan, temuan utama, serta implikasinya terhadap pengembangan obat dan praktik klinis. Selanjutnya, seluruh informasi dianalisis secara deskriptif dan disintesis berdasarkan tema-tema utama, meliputi penerapan AI pada identifikasi target obat, *virtual screening*, *lead identification*, *lead optimization*, prediksi sifat *Absorption*, *Distribution*, *Metabolism*, *Excretion*, and *Toxicity* (ADMET), *drug repurposing*, aplikasi klinis, tantangan implementasi, serta prospek pengembangan AI dalam bidang kimia farmasi dan farmasi klinik. Hasil sintesis tersebut disusun secara naratif untuk memberikan gambaran yang komprehensif mengenai perkembangan terkini, tantangan, dan arah penelitian di masa mendatang.

PEMBAHASAN

Penelusuran literatur pada narrative review ini menunjukkan bahwa pemanfaatan Artificial Intelligence (AI) dalam *drug discovery* dan *drug repurposing* mengalami perkembangan yang sangat pesat dalam lima tahun terakhir. Dari 312 artikel yang diperoleh melalui enam basis data ilmiah, sebanyak 67 artikel memenuhi kriteria inklusi dan digunakan sebagai dasar sintesis. Dominasi publikasi pada topik *virtual screening*, *molecular docking*, prediksi ADMET, dan *drug repurposing* menunjukkan bahwa penelitian AI saat ini lebih banyak difokuskan pada tahapan awal pengembangan obat yang memiliki tingkat kegagalan paling tinggi dan membutuhkan biaya terbesar. Peningkatan jumlah publikasi sejak tahun 2022 hingga mencapai puncaknya pada periode 2024–2025 mencerminkan semakin luasnya adopsi AI dalam penelitian farmasi, yang didukung oleh perkembangan *deep learning*, *graph neural networks* (GNN), *transformer*, serta meningkatnya ketersediaan data biologis dan kimia berskala besar. Tren ini sejalan dengan berbagai tinjauan terbaru yang menyebutkan bahwa AI telah menjadi salah satu teknologi

utama dalam transformasi penelitian dan pengembangan obat modern.

Sintesis literatur menunjukkan bahwa AI telah mengubah paradigma *drug discovery* dari pendekatan yang didominasi eksperimen laboratorium menjadi pendekatan berbasis data (*data-driven drug discovery*). Berbagai algoritma, seperti *machine learning*, *deep learning*, *graph learning*, dan *generative AI*, memungkinkan analisis jutaan struktur kimia dan data biologis dalam waktu yang jauh lebih singkat dibandingkan metode konvensional. Kemampuan tersebut berkontribusi terhadap percepatan identifikasi kandidat obat, penurunan biaya penelitian, serta peningkatan efisiensi pada setiap tahapan pengembangan obat. Ferreira dan Carneiro (2025) menegaskan bahwa AI mampu mempercepat keseluruhan alur *drug discovery*, mulai dari identifikasi target hingga pengembangan praklinik, meskipun keberhasilan implementasinya tetap dipengaruhi oleh kualitas data, validasi model, dan interpretabilitas algoritma (Ferreira & Carneiro, 2025).

Pada tahap identifikasi target obat, AI memberikan kemampuan untuk mengintegrasikan data genomik, transkriptomik, proteomik, metabolomik, serta informasi klinis sehingga hubungan antara gen, protein, dan mekanisme penyakit dapat dipetakan secara lebih komprehensif. Pendekatan berbasis GNN dan analisis jaringan biologis memungkinkan identifikasi target molekuler baru yang sebelumnya sulit ditemukan menggunakan pendekatan tradisional. Selain itu, perkembangan model prediksi struktur protein berbasis AI, seperti AlphaFold, telah meningkatkan akurasi prediksi struktur tiga dimensi protein sehingga mendukung pendekatan *structure-based drug discovery*. Integrasi data multi-omics dengan AI menjadi fondasi penting dalam pengembangan *precision medicine* karena memungkinkan penentuan target terapi yang lebih spesifik sesuai karakteristik molekuler pasien.

Tahapan *virtual screening* dan *molecular docking* merupakan bidang yang paling banyak mendapat perhatian dalam literatur yang dianalisis. Berbagai algoritma *machine learning* dan *deep learning* mampu melakukan penyaringan jutaan senyawa kimia dengan efisiensi yang jauh lebih tinggi dibandingkan metode *high-throughput screening*

konvensional. Model berbasis GNN, *Message Passing Neural Network* (MPNN), dan *transformer* menunjukkan peningkatan akurasi dalam memprediksi afinitas ikatan antara ligan dan target biologis. Integrasi AI dengan simulasi *molecular docking* juga mampu mengurangi waktu komputasi melalui proses *pre-screening*, sehingga hanya molekul yang memiliki probabilitas aktivitas tinggi yang dianalisis lebih lanjut. Pendekatan ini berpotensi meningkatkan produktivitas penelitian sekaligus mengurangi kebutuhan eksperimen laboratorium yang mahal dan memakan waktu.

Prediksi sifat Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity (ADMET) merupakan salah satu aplikasi AI yang berkembang sangat pesat. Model *deep learning* mampu memprediksi berbagai parameter farmakokinetik dan toksisitas dengan akurasi yang lebih tinggi dibandingkan pendekatan *Quantitative Structure-Activity Relationship* (QSAR) konvensional. Integrasi AI dengan QSAR modern memungkinkan evaluasi bioavailabilitas, permeabilitas membran, metabolisme oleh enzim sitokrom P450, penetrasi sawar darah otak, hingga berbagai bentuk toksisitas dilakukan sejak tahap awal pengembangan obat. Dengan demikian, kandidat obat yang diperkirakan memiliki profil keamanan kurang baik dapat dieliminasi lebih dini sehingga mengurangi angka kegagalan pada tahap praklinik maupun uji klinik.

Pemanfaatan AI juga memberikan dampak besar terhadap strategi *drug repurposing*. Melalui integrasi *knowledge graph*, *network pharmacology*, *natural language processing*, dan *electronic health records*, AI mampu mengidentifikasi hubungan baru antara obat, target biologis, dan penyakit yang sebelumnya tidak diketahui. Pendekatan ini menjadi sangat penting dalam pengembangan terapi untuk penyakit kompleks seperti kanker, penyakit neurodegeneratif, penyakit langka, maupun penyakit infeksi yang membutuhkan respons cepat. Pengalaman selama pandemi COVID-19 menunjukkan bahwa AI dapat mempercepat proses identifikasi kandidat obat yang telah tersedia sehingga waktu pengembangan terapi menjadi lebih singkat dibandingkan pengembangan obat baru secara konvensional.

Perkembangan paling revolusioner dalam beberapa tahun terakhir adalah munculnya *generative artificial intelligence* yang

memungkinkan proses *de novo drug design*. Berbeda dengan metode konvensional yang hanya mengevaluasi molekul yang telah tersedia, model seperti *Variational Autoencoder*, *Generative Adversarial Network*, *Diffusion Models*, dan *Transformer* mampu menghasilkan struktur kimia baru dengan karakteristik biologis yang telah ditentukan sebelumnya. Pendekatan ini memungkinkan optimasi multiobjektif, termasuk aktivitas biologis, selektivitas target, sifat ADMET, serta kemudahan sintesis secara simultan. Oleh karena itu, *generative AI* diperkirakan akan menjadi salah satu teknologi utama yang mendorong percepatan inovasi obat pada dekade mendatang.

Meskipun menunjukkan potensi yang sangat besar, implementasi AI dalam *drug discovery* masih menghadapi berbagai tantangan. Kualitas dan heterogenitas data biologis, *imbalanced dataset*, keterbatasan interpretabilitas model (*black-box models*), serta rendahnya kemampuan generalisasi terhadap molekul baru masih menjadi kendala utama. Selain itu, sebagian besar hasil prediksi AI tetap memerlukan validasi melalui pengujian *in vitro*, *in vivo*, dan uji klinik sebelum dapat diterapkan dalam praktik farmasi. Aspek regulasi, keamanan data pasien, transparansi algoritma, serta pengembangan *Explainable Artificial Intelligence* (XAI) juga menjadi perhatian penting agar AI dapat diimplementasikan secara bertanggung jawab dan sesuai dengan standar regulatori di bidang kesehatan.

Secara keseluruhan, hasil sintesis menunjukkan bahwa Artificial Intelligence telah berkembang menjadi teknologi yang mentransformasi proses penemuan dan pengembangan obat. Integrasi *machine learning*, *deep learning*, GNN, *transformer*, *generative AI*, serta analisis *multi-omics* telah meningkatkan efisiensi, akurasi, dan kecepatan pada hampir seluruh tahapan *drug discovery* dan *drug repurposing*. Walaupun masih terdapat tantangan metodologis, teknis, dan regulatori, perkembangan AI diperkirakan akan terus mendorong inovasi dalam penelitian farmasi, mempercepat pengembangan terapi yang lebih efektif dan aman, serta mendukung implementasi *precision medicine* pada masa mendatang.

PENUTUP

Artificial Intelligence (AI) telah menjadi teknologi yang berperan penting dalam mentransformasi proses *drug discovery* dan *drug repurposing* melalui peningkatan kecepatan, efisiensi, dan akurasi pada berbagai tahapan pengembangan obat, mulai dari identifikasi target, *virtual screening*, *lead optimization*, prediksi ADMET, hingga *drug repurposing*. Integrasi *machine learning*, *deep learning*, dan *generative AI* memungkinkan proses penemuan kandidat obat dilakukan secara lebih sistematis dibandingkan pendekatan konvensional.

Meskipun demikian, implementasi AI masih menghadapi tantangan, seperti kualitas data, bias algoritma, keterbatasan interpretabilitas model, serta perlunya validasi eksperimental dan dukungan regulasi. Oleh karena itu, kolaborasi multidisiplin dan pengembangan teknologi AI yang lebih transparan dan andal menjadi kunci untuk mengoptimalkan pemanfaatannya. Dengan perkembangan teknologi yang semakin pesat, AI diperkirakan akan menjadi salah satu pilar utama dalam pengembangan obat yang lebih efektif, efisien, dan mendukung implementasi *precision medicine* di masa depan.

DAFTAR PUSTAKA

- Ashburn, T. T., & Thor, K. B. (2004). Drug repositioning: identifying and developing new uses for existing drugs. *Nature Reviews. Drug Discovery*, 3(8), 673–683. <https://doi.org/10.1038/NRD1468>
- Ferreira, F. J. N., & Carneiro, A. S. (2025). AI-Driven Drug Discovery: A Comprehensive Review. *ACS Omega*, 10(23), 23889–23903. <https://doi.org/10.1021/ACSOMEGA.5C00549>
- Heaton, J. (2018). Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville: Deep learning. *Genetic Programming and Evolvable Machines*, 19(1–2), 305–307. <https://doi.org/10.1007/S10710-017-9314-Z>
- Hughes, J. P., Rees, S. S., Kalindjian, S. B., & Philpott, K. L. (2011). Principles of early drug discovery. *British Journal of Pharmacology*, 162(6), 1239–1249. <https://doi.org/10.1111/J.1476-5381.2010.01127.X>
- Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A., Green, T., Figurnov, M., Ronneberger, O., Tunyasuvunakool, K., Bates, R., Židek, A., Potapenko, A., Bridgland, A., Meyer, C., Kohl, S. A. A., Ballard, A. J., Cowie, A., Romera-Paredes, B., Nikolov, S., Jain, R., Adler, J., ... Hassabis, D. (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 596(7873), 583–589. <https://doi.org/10.1038/S41586-021-03819-2>
- Paul, S. M., Mytelka, D. S., Dunwiddie, C. T., Persinger, C. C., Munos, B. H., Lindborg, S. R., & Schacht, A. L. (2010). How to improve R&D productivity: the pharmaceutical industry's grand challenge. *Nature Reviews. Drug Discovery*, 9(3), 203–214. <https://doi.org/10.1038/NRD3078>
- Pushpakom, S., Iorio, F., Eyers, P. A., Escott, K. J., Hopper, S., Wells, A., Doig, A., Williams, T., Latimer, J., McNamee, C., Norris, A., Sanseau, P., Cavalla, D., & Pirmohamed, M. (2019). Drug repurposing: progress, challenges and recommendations. *Nature Reviews. Drug Discovery*, 18(1), 41–58. <https://doi.org/10.1038/NRD.2018.168>
- Stokes, J. M., Yang, K., Swanson, K., Jin, W., Cubillos-Ruiz, A., Donghia, N. M., MacNair, C. R., French, S., Carfrae, L. A., Bloom-Ackerman, Z., Tran, V. M., Chiappino-Pepe, A., Badran, A. H., Andrews, I. W., Chory, E. J., Church, G. M., Brown, E. D., Jaakkola, T. S., Barzilay, R., & Collins, J. J. (2020). A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery. *Cell*, 180(4), 688–702.e13. <https://doi.org/10.1016/j.cell.2020.01.021>
- Vamathevan, J., Clark, D., Czodrowski, P., Dunham, I., Ferran, E., Lee, G., Li, B., Madabhushi, A., Shah, P., Spitzer, M., & Zhao, S. (2019). Applications of machine learning in drug discovery and development. *Nature Reviews. Drug Discovery*, 18(6), 463–477. <https://doi.org/10.1038/S41573-019-0024-5>
- WBS. (2026). *Liposome Development Services for Targeted Delivery - Creative Biolabs*. World Biospecific Summit. https://www.creative-biolabs.com/targeted-delivery/liposome-development-service-targeted-drug-delivery.htm?gad_source=1&gad_campaignid=23940259149&gbraid=0AAAABDhPQZ5Rf49FBbKuo55RRwq1ByaNo&gclid=CjwKCAjw6f3RBhApEiwAMaCqWZkgDVHAciavkE-9McrwxeNmnKTVaAxF0jYP1bUeiqTBabJFhgLxqhoClRgQAvD_BwE
- Wouters, O. J., McKee, M., & Luyten, J. (2020a). Estimated Research and Development Investment Needed to Bring a New Medicine to Market, 2009–2018. *JAMA*, 323(9), 844–853. <https://doi.org/10.1001/JAMA.2020.1166>