ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В РАЗРАБОТКЕ НОВЫХ ЛЕКАРСТВ

Абдивохидов Камронбек Акмалович – студент
Солиев Содикбек Шерзодович – студент
Иброхимов Мухаммадали Абдухалилович – студент
Ташкентский государственный медицинский университет (Ташкент, Узбекистан)

Аннотация. *Современное развитие фармакологии невозможно представить без внедрения цифровых технологий, в частности — искусственного интеллекта (ИИ) и машинного обучения (МО). Эти технологии позволяют ускорить процесс создания лекарств, повысить точность прогнозирования их свойств и сократить затраты на исследования. В статье рассматриваются основные направления применения ИИ и МО в фармакологической науке, успешные примеры их внедрения, а также проблемы и перспективы дальнейшего развития.*

Ключевые слова*: искусственный интеллект, машинное обучение, фармакология, лекарственные средства, разработка, клинические исследования.*

USING ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND MACHINE LEARNING IN DRUG DEVELOPMENT

Kamronbek Akmalovich Abdivohidovich – student
Soliev Sodikbek Sherzodovich – student
Ibrokhimov Mukhammadali Abdukhalilovich – student
Tashkent state medical university (Tashkent, Uzbekistan)

Abstract. *The modern development of pharmacology is unimaginable without the introduction of digital technologies, particularly artificial intelligence (AI) and machine learning (ML). These technologies accelerate drug discovery, improve the accuracy of predicting drug properties, and reduce research costs. This article discusses the main applications of AI and ML in pharmacological science, successful examples of their implementation, as well as the challenges and prospects for further development.*

Keywords: *artificial intelligence, machine learning, pharmacology, drugs, development, clinical trials.*

DORI VOSITALARINI ISHLAB CHIQISHDA SUN’IY INTELLEKT VA MASHINAVIY O‘RGANISHDAN FOYDALANISH

Kamronbek Akmalovich Abdivohidov – talaba
Soliyev Sodiqbek Sherzod o‘g‘li – talaba
Ibroximov Muhammadali Abduxalil o‘g‘li – talaba
Toshkent davlat tibbiyot universiteti (Toshkent, O‘zbekiston)

Annotatsiya. *Farmakologiyaning zamonaviy rivojlanishini raqamli texnologiyalar, xususan, sun'iy intellekt (AI) va mashinaviy o'rganish (ML) joriy etilmasdan tasavvur qilib bo'lmaydi. Ushbu texnologiyalar dori vositalarini kashf etishni tezlashtiradi, dori xususiyatlarini bashorat qilishning aniqligini oshiradi va tadqiqot xarajatlarini kamaytiradi. Ushbu maqolada farmakologiya fanida AI va MLning asosiy qo'llanilishi, ularni amalga oshirishning muvaffaqiyatli misollari, shuningdek, keyingi rivojlanish uchun qiyinchiliklar va istiqbollar muhokama qilinadi.*

Kalit so‘zlar: *sun’iy intellekt, mashinaviy o‘rganish, farmakologiya, dorilar, ishlanmalar, klinik sinovlar.*

Введение.

Разработка новых лекарственных средств — один из самых трудоёмких и дорогостоящих процессов современной науки. В среднем путь от идеи до готового препарата занимает 10–15 лет и требует инвестиций, превышающих миллиарды долларов. Несмотря на масштабные затраты, лишь малая часть потенциальных соединений достигает стадии регистрации и поступает на рынок.

Традиционные подходы к созданию лекарств основаны на длительных экспериментах, химическом синтезе и клинических испытаниях. Однако с ростом объёма биомедицинской информации и развитием вычислительных технологий возникает возможность автоматизировать и оптимизировать многие этапы разработки. В этом контексте искусственный интеллект (ИИ) и машинное обучение (МО) становятся мощными инструментами современной фармакологии.

ИИ позволяет анализировать большие массивы данных, выявлять скрытые закономерности и моделировать взаимодействие лекарственных веществ с биомишенями. Машинное

обучение, в свою очередь, даёт возможность алгоритмам самостоятельно «обучаться» на основе накопленных данных и улучшать точность прогнозов без прямого вмешательства человека.

Исторические предпосылки внедрения искусственного интеллекта в фармакологию

Применение вычислительных методов в фармацевтических исследованиях началось ещё в 1980-е годы, когда появились первые программы для моделирования химических структур. Однако полноценное использование искусственного интеллекта стало возможным только с развитием технологий больших данных (Big Data) и нейронных сетей в XXI веке.

В 2010-х годах произошёл качественный скачок — фармацевтические компании начали активно внедрять ИИ для анализа клинических данных, поиска новых мишеней и оптимизации синтеза молекул. Ключевую роль сыграли успехи в области глубокого обучения (deep learning), которые позволили создавать модели, имитирующие работу человеческого мозга.

С этого времени искусственный интеллект стал неотъемлемой частью фармакологической науки, обеспечивая переход от эмпирического поиска к точным предсказательным моделям.

Принципы работы искусственного интеллекта и машинного обучения

Искусственный интеллект — это совокупность методов и алгоритмов, позволяющих компьютеру решать задачи, требующие человеческого мышления: анализ, распознавание, прогнозирование, принятие решений. Машинное обучение — ключевое направление ИИ, основанное на обучении моделей на больших массивах данных.

Основные типы машинного обучения:

1.Обучение с учителем (Supervised Learning) — используется для прогнозирования свойств молекул на основе известных данных.

2.Обучение без учителя (Unsupervised Learning) — применяется для кластеризации химических соединений и выявления закономерностей.

3.Глубокое обучение (Deep Learning) — работа с нейронными сетями, анализ изображений и молекулярных структур.

4.Обучение с подкреплением (Reinforcement Learning) — помогает моделям улучшать стратегию действий, например, при подборе оптимальной структуры соединения.

Применение ИИ на этапах разработки лекарственных средств

Разработка препарата включает несколько последовательных стадий, на каждой из которых ИИ и МО находят практическое применение.

1. Поиск и валидация лекарственных мишеней

ИИ анализирует геномные и протеомные базы данных, выявляя связи между генами, белками и заболеваниями. Это позволяет быстрее находить потенциальные биомишени для воздействия лекарством.

2. Виртуальный скрининг и молекулярное моделирование

Современные алгоритмы способны анализировать миллионы химических структур и предсказывать их активность. Это значительно сокращает количество лабораторных экспериментов.

Этап	Традиционный метод	С использованием ИИ
Время анализа	1–2 года	2–3 месяца
Количество соединений	~1 млн	>100 млн
Стоимость	Очень высокая	В 5–10 раз ниже

3. Оптимизация клинических испытаний

ИИ помогает формировать группы пациентов, прогнозировать эффективность и побочные эффекты, анализировать результаты в реальном времени. Это повышает точность и безопасность исследований.

4. Персонализированная фармакотерапия

На основе генетических и метаболических данных пациента ИИ предлагает индивидуальные схемы лечения и дозировки, минимизируя побочные реакции.

Современные примеры применения ИИ в фармацевтике

1. DeepMind (Великобритания) — проект AlphaFold предсказывает трёхмерную структуру белков, что значительно ускоряет открытие мишеней.

2. Insilico Medicine (Гонконг) — за 18 месяцев разработала молекулу для лечения лёгочного фиброза, используя ИИ-модели.

3. Atomwise (США) — применяет глубокие нейронные сети для анализа химических структур и прогнозирования их активности.

4. Pfizer и IBM Watson — используют ИИ для анализа клинических данных и выявления оптимальных комбинаций терапии.

5. BenevolentAI — занимается «переназначением» существующих препаратов (drug repurposing) с помощью ИИ.

Преимущества внедрения ИИ в фармакологию

• Сокращение сроков разработки: с 10–15 лет до 3–5 лет.

• Снижение затрат: до 60–70 % по сравнению с традиционными подходами.

• Повышение точности прогнозов: ИИ выявляет токсичность и побочные эффекты на ранних стадиях.

• Расширение возможностей анализа данных: обработка миллионов параметров в считанные часы.

• Развитие персонализированной медицины: выбор препаратов под конкретного пациента.

Этические и правовые аспекты применения ИИ

Несмотря на огромный потенциал, использование ИИ в фармакологии связано с рядом проблем:

• Конфиденциальность данных: медицинская информация требует защиты от несанкционированного доступа.

• Ответственность за решения: кто несёт ответственность, если алгоритм допустил ошибку?

• Прозрачность алгоритмов: часто ИИ функционирует как «чёрный ящик», и понять, почему он принял то или иное решение, сложно.

• Необходимость международных стандартов для регулирования и сертификации ИИ-систем.

Перспективы развития ИИ в фармакологии

Будущее фармакологической науки тесно связано с цифровыми технологиями. Ожидается, что в ближайшие годы ИИ будет интегрирован во все этапы разработки и производства лекарств.

Перспективные направления:

• Создание гибридных систем ИИ с элементами объяснимости (Explainable AI).

• Использование роботизированных лабораторий, управляемых ИИ.

• Применение генеративных моделей для синтеза новых молекул.

• Объединение ИИ и биоинформатики для анализа многомерных данных.

• Разработка международных стандартов этики и безопасности использования ИИ.

Заключение.

Искусственный интеллект и машинное обучение стали важнейшими инструментами современной фармакологии. Они позволяют не только ускорить процесс разработки лекарственных средств, но и повысить точность прогнозов, минимизировать побочные эффекты и снизить затраты.

Современные успехи ИИ, такие как предсказание структуры белков и автоматизация скрининга, доказывают, что фармакология будущего будет основана на тесном взаимодействии человека и машины. Несмотря на существующие этические и правовые вызовы, дальнейшая интеграция ИИ в медицину неизбежна и откроет новые горизонты в борьбе с заболеваниями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Jumper J. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. Nature, 2021.

2. Zhavoronkov A. Artificial intelligence for drug discovery, biomarker development, and generation of novel chemistry. ACS Medicinal Chemistry Letters, 2020.

3. Walters W.P., Murcko M.A. Assessing the impact of generative AI on drug discovery. Nature Biotechnology, 2023.

4. Segler M.H.S. et al. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI. Nature, 2018.

5. Vamathevan J. et al. Applications of machine learning in drug discovery and development. Nature Reviews Drug Discovery, 2019.

6. Schneider G. Automating drug discovery. Nature Reviews Drug Discovery, 2018.

7. Mak K.-K., Pichika M.R. Artificial intelligence in drug development: present status and future prospects. Drug Discovery Today, 2019.

8. Ching T., Himmelstein D.S. Opportunities and obstacles for deep learning in biology and medicine. J. R. Soc. Interface, 2018.

9. Insilico Medicine. AI-powered drug discovery. Company Report, 2023.

10. BenevolentAI. Artificial intelligence in target discovery and drug repurposing. 2022

11. https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov

12. https://www.sciencedirect.com