

УДК 378:004.8:614.2

Туреханова А.С., Токсанбаева Ж.С., Ибрагимова А.Г., Кулбаева М.М.  
**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В МЕДИЦИНЕ И  
ФАРМАЦИИ**

Южно-Казахстанская медицинская академия, г.Шымкент

Исследования по использованию ИИ в процессе разработки лекарственных препаратов показали, что применение ИИ значительно ускоряет и оптимизирует этапы открытия и тестирования препаратов. Анализ истории применения ИИ в фармакологии демонстрирует его роль в предсказании структуры белков, молекулярном моделировании, а также в анализе больших объемов данных о биологической активности соединений. Дальнейшее изучение и внедрение инновационных технологий ИИ в фармацевтическую индустрию обещает значительное повышение эффективности и безопасности лекарственных средств, способствуя улучшению здравоохранения и качества жизни. В статье говорится и о собственных путях использования искусственного интеллекта (ИИ) в научном и учебном процессах на кафедре фармакологии ЮКМА.

**Ключевые слова:** искусственный интеллект, фармакология, разработка лекарств, молекулярное моделирование, машинное обучение.

В последние годы искусственный интеллект (ИИ) стал играть все более важную роль в разных областях медицины, и клиническая фармакология не является исключением. ИИ обладает значительным потенциалом для преобразования этой сферы, предоставляя врачам и исследователям возможность принимать более обоснованные решения, оптимизировать процесс лечения и, в конечном итоге, повышать качество жизни пациентов. Вот некоторые из способов, как он может быть использован:

1. Анализ медицинских данных: ИИ может анализировать большие объемы данных о пациентах, включая историю болезни, результаты тестов, образование медицинских изображений и даже данные о геноме. Это помогает выявлять паттерны, предсказывать риски и разрабатывать персонализированные методы лечения [2,3].

2. Помощь в принятии решений: системы ИИ могут предоставлять врачам рекомендации по диагностике и лечению на основе анализа данных и медицинских исследований. Это помогает улучшить точность диагноза и эффективность лечения [4].

3. Моделирование лекарственных взаимодействий: ИИ может помочь в анализе лекарственных взаимодействий и предсказании возможных побочных эффектов при одновременном приеме нескольких препаратов [5].

4. Автоматизация процессов: использование ИИ может повысить эффективность и точность различных процессов в клинической фармакологии, таких как управление запасами лекарственных препаратов, оптимизация дозировок и т.д.

5. Разработка новых лекарств: с помощью ИИ можно ускорить процесс разработки новых лекарств, прогнозируя их эффективность и безопасность на основе анализа молекулярных структур и результатов клинических испытаний [6].

Таким образом, искусственный интеллект играет ключевую роль в улучшении качества здравоохранения и оптимизации процессов в клинической фармакологии.

### **Цель работы**

Исследование роли искусственного интеллекта (ИИ) в современной фармакологии с особым акцентом на процессах разработки составов лекарственных сборов и анализе истории применения ИИ в данной сфере.

### **Материал и методы**

Перед началом исследования в области применения искусственного интеллекта в фармакологии и разработке лекарственных сборов необходимо провести анализ существующей литературы. Для этого были использованы электронные базы данных, такие как PubMed, Google Scholar, ScienceDirect, а также актуальные научные журналы, отражающие последние тенденции в фармацевтической индустрии.

- **Сбор и анализ данных:** для анализа были отобраны научные статьи, обзоры и книги, охватывающие историю использования искусственного интеллекта в фармакологии, а также различные методики и подходы к разработке лекарственных средств. Критериями отбора были актуальность, научная значимость и достоверность источников;

- **Классификация данных:** полученные данные были классифицированы и систематизированы по следующим категориям: история использования искусственного интеллекта в фармакологии, основные этапы разработки лекарств, методы и технологии, применяемые в процессе, а также примеры успешных применений искусственного интеллекта в фармацевтической промышленности;

- **Сравнительный анализ:** для более глубокого понимания текущего состояния области и выявления трендов был проведен сравнительный анализ различных подходов к использованию искусственного интеллекта в фармакологии, а также рассмотрены ключевые преимущества и ограничения каждого из них;

### **Результаты и обсуждение**

Эпоха использования искусственного интеллекта в клинической фармакологии началась во второй половине XX века, параллельно с развитием компьютерных технологий и аналитических методов. В хронологии этого развития можно выделить следующие ключевые моменты:

1. В 1950-е годы в связи с появлением первых компьютеров начали разрабатываться примитивные методы искусственного интеллекта, включая символьные вычисления и экспертные системы;

2. В течение 1960-х и 1970-х годов появились первые компьютерные программы, моделирующие фармакокинетику и фармакодинамику, что способствовало углублению понимания воздействия лекарственных препаратов на организм;

3. В 1980-е годы с развитием мощных компьютеров и методов машинного обучения стали возможны первые попытки использования искусственного интеллекта для анализа медицинских данных и прогнозирования результатов лечения;

4. С начала 1990-х по 2000-е годы активно развивались методы биоинформатики и компьютерного моделирования в фармакологии, что привело к созданию более точных и надежных моделей воздействия лекарственных препаратов;

5. В 2010-е годы с появлением обширных медицинских баз данных и развитием глубокого обучения и нейронных сетей искусственный интеллект стал неотъемлемой частью анализа медицинских изображений, диагностики и персонализированных методов лечения;

6. На сегодняшний день, в 2020-е годы, искусственный интеллект широко применяется в клинической фармакологии для обработки медицинских данных, принятия решений, разработки новых препаратов и оптимизации процессов здравоохранения. Вместе с этим продолжается интенсивное исследование и разработка новых методов и технологий в этой области [7,8].

В процессе разработки лекарственных средств искусственный интеллект находит широкое применение вместе с использованием различных методов и технологий. Вот несколько из них: анализ медицинских данных, моделирование молекулярной структуры, виртуальное скрининговое тестирование, прогнозирование свойств лекарств, персонализированная медицина.

Эти методы и технологии, основанные на искусственном интеллекте, значительно ускоряют процесс разработки лекарственных средств, делая его более эффективным и целенаправленным.

Несколько примеров успешного применения искусственного интеллекта в указанных областях:

1. Программа AlphaFold для предсказания структуры белков: AlphaFold, разработанная DeepMind (компания, принадлежащая Alphabet Inc.), использует нейронные сети для предсказания трехмерной структуры белков. Это имеет огромное значение для фармацевтической промышленности, так как понимание структуры белков позволяет более точно предсказывать их функции и последующие взаимодействия с лекарственными веществами;

2. Программы машинного обучения для поиска новых лекарственных соединений: проекты, такие как те, что разрабатываются компанией Insilico Medicine, используют

алгоритмы машинного обучения для анализа миллионов структурных данных и предсказания потенциально активных молекул. Это может значительно ускорить процесс поиска новых лекарств;

3. IBM Watson анализирует медицинские данные: IBM Watson Health используется для анализа данных о пациентах, результатов клинических испытаний и научных статей, помогая выявлять тенденции и прогнозировать эффективность лекарств.

4. Программы для индивидуализированной терапии: Некоторые компании, включая Novartis, используют алгоритмы машинного обучения для анализа генетических данных и других факторов, создавая персонализированные лекарственные схемы для пациентов с различными заболеваниями.

5. Платформы для виртуального скрининга молекул: Компании, например, Atomwise, предоставляют платформы для виртуального скрининга молекул с использованием искусственного интеллекта. Это позволяет исследователям быстро и эффективно идентифицировать потенциальные кандидаты на разработку новых лекарственных средств;

6. Berg Health для оптимизации антигипертензивных сборов: компания Berg Health разработала платформу, использующую искусственный интеллект для оптимизации состава и дозировки антигипертензивных сборов. Платформа учитывает различные факторы, такие как эффективность, безопасность, переносимость и стоимость сборов, чтобы создавать оптимальные терапевтические решения для пациентов;

7. Pfizer и искусственный интеллект: Pfizer, один из крупнейших мировых фармацевтических производителей, также внедряет технологии искусственного интеллекта. Например, они могут использовать алгоритмы машинного обучения для анализа больших объемов данных о клинических испытаниях и обобщения результатов, чтобы принимать более информированные решения в процессе разработки и тестирования лекарств.

Эти примеры демонстрируют широкий спектр использования искусственного интеллекта в фармацевтической промышленности, фармакологии и разработке различных препаратов, в том числе и составов лекарственных сборов.

На кафедре фармакологии, фармакотерапии и клинической фармакологии Южного Казахстанского Медицинского Академии (ЮКМА) активно внедряются инновационные подходы, основанные на применении ИИ, что позволяет значительно улучшить качество и эффективность научных исследований. Одним из направлений использования ИИ на кафедре фармакологии ЮКМА является разработка составов лекарственных сборов [1]. Процесс составления оптимального сочетания растительных компонентов для создания эффективного лекарственного сбора требует глубоких знаний в области фармакологии, биологии и химии, а

также значительных временных и финансовых затрат. Здесь ИИ приходит на помощь, облегчая и ускоряя процесс разработки.

Примером может служить разработка состава лекарственного антигипертензивного сбора, включающего такие растительные компоненты, как трава тимьяна ползучего, трава душицы лекарственной, цветки и листья тысячелистника, трава мелиссы лекарственной и пустырника пятилопастного. Применение ИИ в данном случае позволяет анализировать большие объемы данных о биологически активных веществах, их взаимодействиях и фармакологических свойствах, а также предсказывать возможные эффекты от их комбинаций. Это помогает оптимизировать состав сбора, достигая максимальной эффективности при минимальных затратах.

**Заключение и выводы** использование ИИ в медицине и фармации приводит к перспективным изменениям в процессы разработки лекарственных средств. Развитие технологий машинного обучения и алгоритмов анализа данных позволяет фармацевтическим компаниям и исследовательским институтам существенно ускорить и оптимизировать этапы открытия и тестирования препаратов.

Основываясь на анализе истории применения ИИ в медицине, можно подытожить, что его роль в различных сферах постепенно расширяется. Прежде всего, ИИ используется для предсказания структуры белков и молекулярного моделирования, что позволяет ускорить процесс поиска потенциальных кандидатов на разработку лекарств. Кроме того, алгоритмы машинного обучения применяются для анализа больших объемов данных о биологической активности соединений, что позволяет выявлять новые перспективные направления исследований и оптимизировать составы различных лекарственных препаратов.

Внедрение ИИ на кафедре фармакологии ЮКМА подтверждает вышеизложенные тенденции. Подходы, основанные на использовании ИИ, не только значительно улучшают качество лекарственных средств, но и содействуют развитию новых методов исследований, способствуя тем самым улучшению образования в области медицины.

Таким образом, исследование роли ИИ в медицине и фармации показывает, что его внедрение в современную практику уже привело к значительным улучшениям в процессе разработки и применения лекарственных средств, а перспективы его применения в будущем выглядят обнадеживающе. Дальнейшее изучение и внедрение инновационных технологий ИИ в фармацевтическую индустрию обещает значительное повышение эффективности и безопасности лекарственных средств, что имеет важное значение для улучшения здравоохранения и качества жизни людей.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Туреханова А. С., Токсанбаева Ж.С., Ибрагимова А. Г. Исследования по разработке и научному обоснованию растительного сбора, обладающего антигипертензивными свойствами // Научная и инновационная терапия // 2023. №3. с. 113.
2. Nayarisseri A, Khandelwal R, Tanwar P, Madhavi M, Sharma D, Thakur G, Speck-Planche A, Singh SK. Artificial Intelligence, Big Data and Machine Learning Approaches in Precision Medicine & Drug Discovery. *Curr Drug Targets*. 2021;22(6):631-655. doi: 10.2174/1389450122999210104205732. PMID: 33397265.
3. Salas M, Petracek J, Yalamanchili P, Aimer O, Kasthuril D, Dhingra S, Junaid T, Bostic T. The Use of Artificial Intelligence in Pharmacovigilance: A Systematic Review of the Literature. *Pharmaceut Med*. 2022 Oct;36(5):295-306. doi: 10.1007/s40290-022-00441-z. Epub 2022 Jul 29. PMID: 35904529.
4. Hamet P, Tremblay J. Artificial intelligence in medicine. *Metabolism*. 2017 Apr;69S:S36-S40. doi: 10.1016/j.metabol.2017.01.011. Epub 2017 Jan 11. PMID: 28126242.
5. Chen S, Li T, Yang L, Zhai F, Jiang X, Xiang R, Ling G. Artificial intelligence-driven prediction of multiple drug interactions. *Brief Bioinform*. 2022 Nov 19;23(6):bbac427. doi: 10.1093/bib/bbac427. PMID: 36168896.
6. Gupta R, Srivastava D, Sahu M, Tiwari S, Ambasta RK, Kumar P. Artificial intelligence to deep learning: machine intelligence approach for drug discovery. *Mol Divers*. 2021 Aug;25(3):1315-1360. doi: 10.1007/s11030-021-10217-3. Epub 2021 Apr 12. PMID: 33844136; PMCID: PMC8040371.
7. Mintz Y, Brodie R. Introduction to artificial intelligence in medicine. *Minim Invasive Ther Allied Technol*. 2019 Apr;28(2):73-81. doi: 10.1080/13645706.2019.1575882. Epub 2019 Feb 27. PMID: 30810430.
8. Wang H, Fu T, Du Y, Gao W, Huang K, Liu Z, Chandak P, Liu S, Van Katwyk P, Deac A, Anandkumar A, Bergen K, Gomes CP, Ho S, Kohli P, Lasenby J, Leskovec J, Liu TY, Manrai A, Marks D, Ramsundar B, Song L, Sun J, Tang J, Veličković P, Welling M, Zhang L, Coley CW, Bengio Y, Zitnik M. Scientific discovery in the age of artificial intelligence. *Nature*. 2023 Aug;620(7972):47-60. doi: 10.1038/s41586-023-06221-2. Epub 2023 Aug 2. Erratum in: *Nature*. 2023 Sep;621(7978):E33. PMID: 37532811.