

Лекарственные средства и медицинские технологии

Обзорная статья

УДК 615.1:004.896

doi:10.32687/1561-5936-2025-29-3-213-220

Основные области и перспективы использования искусственного интеллекта и машинного обучения для ускорения разработки новых лекарственных средств

Константин Александрович Кошечкин¹, Лариса Ивановна Лаврентьева²,
Филипп Александрович Романов³, Александр Николаевич Яворский⁴

¹Евразийская академия надлежащих практик, Москва, Россия;

^{2,3}Ярославский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения Российской Федерации, г. Ярославль, Россия;

⁴Ассоциация участников обращения лекарственных средств и изделий медицинского назначения «ЛЕКМЕДОБРАЩЕНИЕ», Москва, Россия

¹k.koshechkin@lpt.digital, <https://orcid.org/0000-0001-7309-2215>

²Lavl2004@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4381-9513>

³rfa2010@ya.ru, <https://orcid.org/0009-0008-6107-7585>

⁴200-31-11@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8631-0303>

Аннотация. Статья посвящена направлениям и перспективам использования искусственного интеллекта (ИИ) и машинного обучения (МО) в разработке новых лекарственных средств. Изложены инновационные подходы, которые кардинально трансформируют традиционные процессы поиска и создания лекарств. Представлены основные области применения ИИ/МО: идентификация и валидация биомисшеней, молекулярный дизайн, прогнозирование свойств лекарственных соединений, автоматизация лабораторных процессов. Приведены технологические решения в данной сфере, такие как платформы Direct-to-Biology, CRISPR-технологии, высокопроизводительная визуализация, генеративные модели ИИ. Ключевыми преимуществами внедрения ИИ/МО являются ускорение разработки лекарств, снижение затрат, повышение точности прогнозирования, расширение возможностей молекулярного дизайна. Для реализации этого потенциала необходимо продолжать инвестиции в технологии и подготовку специалистов междисциплинарного профиля. Интеграция ИИ в исследования открывает новые перспективы для создания инновационных, персонализированных методов лечения.

Ключевые слова: обзор, искусственный интеллект, машинное обучение, разработка лекарственных средств

Для цитирования: Кошечкин К. А., Лаврентьева Л. И., Романов Ф. А., Яворский А. Н. Основные области и перспективы использования искусственного интеллекта и машинного обучения для ускорения разработки новых лекарственных средств // Ремедиум. 2025. Т. 29, № 3. С. 213—220. doi:10.32687/1561-5936-2025-29-3-213-220

Medicines and medical technologies

Review article

Main areas and prospects for using artificial intelligence and machine learning to accelerate the development of new medicines

Konstantin Aleksandrovich Koshechkin¹, Larisa Ivanovna Lavrenteva², Philip Aleksandrovich Romanov³, Alexandr Nikolaevich Yavorsky⁴

¹Eurasian Academy of Good Practices, Moscow, Russia;

^{2,3}Yaroslavl State Medical University of the Ministry of Healthcare of the Russian Federation, Yaroslavl, Russia;

⁴Association of Participants in the Circulation of Medicines and Medical Devices, Moscow, Russia

¹k.koshechkin@lpt.digital, <https://orcid.org/0000-0001-7309-2215>

²Lavl2004@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4381-9513>

³rfa2010@ya.ru, <https://orcid.org/0009-0008-6107-7585>

⁴200-31-11@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8631-0303>

Annotation. The article is dedicated to the directions and prospects of using artificial intelligence (AI) and machine learning (ML) in the development of new medicines. Innovative approaches have been presented that radically transform traditional processes of drug discovery and development. The main applications of AI/ML are presented: target identification and validation, molecular design, prediction of drug compound properties, and laboratory process automation. Technological solutions in this field are presented, such as Direct-to-Biology platforms, CRISPR technologies, high throughput imaging, and generative AI models. The key advantages of implementing AI/ML include accelerating medicines development, reducing costs, enhancing prediction accuracy, and expanding molecular design capabilities. To realize this potential, it is necessary to continue investing in technology and training specialists with an interdisciplinary profile. The integration of AI into research opens up new prospects for developing innovative, personalized treatment methods.

Key words: overview, artificial intelligence, machine learning, medicines develop

For citation: Koshechkin K. A., Lavrenteva L. I., Romanov Ph. A., Yavorsky A. N. Main areas and prospects for using artificial intelligence and machine learning to accelerate the development of new medicines. *Remedium*. 2025;29(3):213–220. (In Russ.). doi:10.32687/1561-5936-2025-29-3-213-220

Введение

За последнее десятилетие искусственный интеллект ИИ (Artificial intelligence, AI) и машинное обучение МО (Machine learning, ML) стали основополагающими инструментами для ускорения разработки лекарственных средств (ЛС) и внедрения инноваций в фармацевтическое производство и медицинскую практику. Традиционные парадигмы разработки ЛС долгое время боролись с высокими затратами, длительными сроками и низкими показателями успеха. Применение ИИ и МО меняют эти показатели и их динамику, автоматизируя сложные научные процессы, улучшая результаты и ускоряя достижение целей. Благодаря усовершенствованному распознаванию образов, генеративным моделям и прогнозной аналитике алгоритмы ИИ и МО позволяют добиться результатов, которые ранее были невообразимы, обеспечивая мощную альтернативу трудоемким и длительным процессам [1].

В обзоре ELRIG Drug Discovery [2] продемонстрировано, как подходы на основе ИИ применяются в таких областях, как поиск биомолекул, молекулярный дизайн лигандов, высокопроизводительный скрининг и предиктивное моделирование эффективности и безопасности лекарств. Например, использование ИИ для оптимизации высокопроизводительного скрининга и автоматизации выявления фенотипических признаков позволяет исследователям эффективно извлекать значимые данные из обширных биологических наборов данных, выявляя перспективные соединения с беспрецедентной скоростью и точностью [3]. Между тем, модели молеку-

лярного дизайна и оптимизации на основе МО позволяют ученым исследовать химическое пространство за пределами традиционных границ, создавая новые биомолекулы с повышенной стабильностью и функциональностью [4].

Эти достижения подчеркивают переход к итеративному, ориентированному на анализ больших данных подходу к разработке ЛС, где ИИ и МО облегчают быстрое тестирование гипотез и быстрый выход на молекулы-кандидаты. Представлены примеры, как ИИ интегрирован в итеративные циклы экспериментов, сочетая лабораторные анализы с прогностическими моделями, которые постоянно уточняют гипотезы [5]. Эта система с замкнутым циклом повышает прогностическую эффективность моделей, обеспечивая эффективный путь к валидации и снижая вероятность отказов на поздних стадиях. Такие подходы позволяют исследователям не только ускорить разработку ЛС, но и решать важнейшие задачи в области персонализированной медицины (Personalized medicine) путем моделирования сложных взаимодействий в биологических системах.

Интегрируя ИИ/МО в процесс разработки ЛС, исследователи теперь могут прогнозировать и оптимизировать показатели эффективности и безопасности молекул-кандидатов на ранних стадиях поиска. Происходит радикальная трансформация традиционного конвейера разработки ЛС, с переходом на современную модель, в которой вычислительные прогнозы направляют усилия химической лаборатории позволяя быстро переводить результаты *in silico* в результаты *in vitro*.

Основные области применения ИИ и МО в разработке лекарств

Direct-to-Biology: платформа со сверхвысокой пропускной способностью для быстрого обнаружения. В сфере современного поиска ЛС высокопроизводительная химия стала ключевым инструментом, позволяющим специалистам проводить эксперименты в беспрецедентных масштабах. Примером такого инструмента является инновационная платформа Direct-to-Biology (D2B), целью которой является ускорение открытия таргетных деградеров белков (TPD), в частности химер, нацеленных на протеолиз (Proteolysis targeting chimera, PROTAC).

Эта платформа обладает уникальными возможностями для трансформации традиционного подхода к процессу разработки ЛС [6]. Платформа D2B облегчает оценку сырых реакционных смесей непосредственно в анализах деградации белков клеток, что позволяет быстро генерировать данные и принимать обоснованные решения. Платформа была разработана для поддержки нескольких химических превращений, эффективно выступая в качестве универсального набора инструментов для D2B-химии, который может адаптироваться к различным направлениям поиска.

Интегрируя высокопроизводительный скрининг с биологической оценкой в режиме реального времени, платформа D2B не только ускоряет идентификацию перспективных молекул-кандидатов в ЛС, но и обеспечивает немедленную обратную связь с оценкой биологической значимости тестируемых соединений. Этот итеративный цикл экспериментов и анализа имеет решающее значение в современных условиях, когда скорость и эффективность получения результатов имеют первостепенное значение.

Идентификация и валидация мишени при разработке ЛС. Идентификация и валидация биомишени для ЛС всегда были критически важным, при этом ресурсоемким шагом в разработке ЛС. Достижения в области МО и методов на основе технологии редактирования генома CRISPR (Clustered regularly interspaced short palindromic repeats) трансформируют эту стадию, позволяя точно нацеливаться на гены и биомолекулы, играющие роль в этиологии и патогенезе заболеваний [7]. Благодаря сочетанию функциональной геномики и высокопроизводительной аналитики данных ученые теперь могут идентифицировать и проверять молекулярные мишени с беспрецедентной точностью, увеличивая вероятность открытия нового фармакологического эффекта. Отдельные примеры использования модели МО и скрининг по технологии CRISPR для оптимизации этого важного этапа открытий представлены в публикациях [8, 9].

В частности, показано, как технология CRISPR в сочетании с алгоритмами МО делает идентификацию и проверку целей более эффективными и масштабируемыми. При традиционном подходе исследователи могут оценить тысячи кандидатов в искомые гены с помощью различных скрининговых анализов, что является дорогостоящим и трудоемким процессом. Однако с помощью функциональной ге-

номики на основе CRISPR можно нокаутировать или модулировать определенные гены в нескольких клеточных линиях, а затем анализировать полученные фенотипические изменения. Наблюдая за последствиями этих модификаций, исследователи получают представление о том, какие гены, вероятно, управляют фенотипами заболеваний, сужая круг потенциальных терапевтических мишеней.

В частности, используется матричный подход CRISPR, который позволяет заглушать отдельные генные мишени одну за другой с высокой пропускной способностью. Это позволяет точно контролировать условия эксперимента и фенотипические показатели для каждого гена, что облегчает связывание функций конкретных генов с фенотипическими признаками, связанными с заболеванием. Затем в игру вступают модели МО для анализа разнообразия фенотипических характеристик генов, генерируемых технологией CRISPR. Обработывая эти данные, алгоритмы МО могут обнаруживать закономерности и ранжировать кандидатов в искомые гены на основе их потенциала в качестве биомишени для ЛС. Эти модели не только ускоряют процесс идентификации биомишени, но и обеспечивают более высокий уровень точности, фокусируясь на генах с наиболее высоким терапевтическим потенциалом.

Кроме того, скрининг CRISPR, усиленный МО, может выявить сложные генетические взаимодействия, вроде феномена синтетической летальности, которые трудно обнаружить с помощью обычных методов. Синтетическая летальность — это ситуация, когда комбинации двух генетических изменений приводит к гибели клеток (в то время как каждое изменение по отдельности не приводит к этому). Идентифицируя эти взаимодействия, исследователи могут точно определить молекулярные мишени, которые особенно уязвимы в раковых клетках, что обеспечивает поиск специфичных противоопухолевых веществ и открывает перспективу разработки более эффективной таргетной терапии [10].

Интеграция технологий МО и CRISPR в идентификацию и валидацию целей является примером того, как разработка новых ЛС развивается в сторону системных подходов, основанных на больших данных.

Проектирование и оптимизация молекул с помощью ИИ. Дизайн и оптимизация молекул имеют решающее значение для создания ЛС с высокой эффективностью, специфичностью и минимальными побочными эффектами. Традиционные подходы основаны на комбинировании 20 аминокислот, встречающихся в природе, что ограничивает химическое и функциональное разнообразие потенциальных биомолекул. Прорывы в синтетической биологии и молекулярном дизайне на основе ИИ раздвигают эти границы, позволяя создавать биомолекулы со свойствами, выходящими за рамки естественных ограничений. Примером такого подхода является работа компании Constructive Bio [11].

Биотехнологи Constructive Bio используют ИИ для разработки белков, которые включают некано-

нические аминокислоты (Non-canonical amino acid, ncAAs), добавляя новые химические функции, которые невозможны с естественными белками. Это расширенное химическое пространство позволяет создавать белки с повышенной стабильностью, улучшенным сродством связывания и уникальными биохимическими свойствами, которые открывают возможность бороться с ранее неизлечимыми заболеваниями [12]. Передовая геновая инженерия используется для точного изменения последовательностей ДНК, предоставляет полный контроль над аминокислотным составом полученных белков. Перепиывая геномы и используя живые клетки в качестве «биофабрик», возможно производить эти инженерные биомолекулы в больших масштабах, открывая классы ЛС с новыми фармакологическими эффектами.

Модели молекулярного дизайна на основе ИИ демонстрируют, как различные аминокислотные последовательности и изменения структуры влияют на поведение белка: его сворачивание, стабильность и аффинность связывания с конкретными молекулярными мишенями. Используя обширные наборы данных о белковых структурах и взаимодействиях, модели ИИ учатся предсказывать, какие молекулярные модификации приведут к желаемым фармакологическим свойствам. Подобный подход ускоряет разработку новых белков и повышает точность за счет прогнозирования структурных и функциональных характеристик сложных биомолекул до их синтеза.

Подход Constructive Bio включает итеративные циклы проектирования под руководством ИИ и экспериментальной проверки. Например, модели ИИ могут предложить сотни вариантов белка с потенциальным сродством связывания с рецептором-мишенью. Затем эти конструкции синтезируются, тестируются и оцениваются. Экспериментальные результаты используются в моделях ИИ, уточняя прогнозы и совершенствуя следующий цикл молекулярного дизайна, что существенно сокращает время и затраты на разработку ЛС.

Другим подходом в использовании ИИ является генерация оптимизированных пептидов с определенными свойствами, такими как повышенная биодоступность или устойчивость к ферментативной деградации. Например, модели ИИ могут предлагать модификации пептидных цепей, которые улучшают их стабильность в организме человека или повышают их специфичность для молекулярных мишеней, что позволяет решить проблемы их деградации и быстрого клиренса *in vivo*. Корректировка с использованием ИИ оптимизирует пептиды так, чтобы они дольше сохраняли свою фармакологическую активность, повышая их клиническую эффективность.

Применение ИИ в молекулярном дизайне распространяется на адаптацию биомолекул для лечения сложных заболеваний, требующих высокоспецифичных вмешательств. Обладая способностью прогнозировать и точно настраивать молекулярные взаимодействия на атомном уровне, модели ИИ по-

могают разрабатывать ЛС, которые нацелены на патогенетические механизмы заболеваний, сводя к минимуму побочные эффекты. Эта точность особенно ценна в таких областях, как онкология и нейробиология, где терапевтическая эффективность зависит от избирательного взаимодействия с определенными типами клеток или белков [13].

Данные исследования подчеркивают фундаментальный сдвиг в процессе разработки ЛС, где ИИ не только ускоряет оптимизацию структуры молекул-кандидатов, но и расширяет область их возможного терапевтического применения, в том числе для тяжелых и редких (орфанных) заболеваний.

Автоматизация и робототехника в лабораторных условиях. Автоматизация и робототехника трансформируют подход к управлению высокопроизводительным скринингом и другими повторяющимися задачами в условиях лабораторий. В исследовании [14] показана растущая роль систем на основе ИИ в оптимизации производительности лаборатории и обеспечении согласованности сложных экспериментальных процедур.

В современных лабораториях повторяющиеся процессы, такие как пипетирование, обработка проб и сбор данных, отнимают значительное количество времени и ресурсов. Роботизированные системы на базе ИИ берут на себя эти задачи, выполняя их с высокой степенью точности и воспроизводимости, что позволяет сосредоточиться на интерпретации данных и принятии стратегических решений, а не на ручном выполнении повторяющейся работы.

Робототехника также сводит к минимуму человеческие ошибки. Например, ручная обработка сотен или тысяч образцов с точными измерениями занимает много времени и подвержена рискам ошибок. Роботы, оснащенные передовыми датчиками и алгоритмами ИИ, могут эффективно выполнять эти процессы с высокой точностью, сохраняя целостность данных и обеспечивая высокое качество результатов [15].

Кроме того, интеграция ИИ с робототехникой способствует созданию гибких рабочих процессов, которые адаптируются к требованиям проекта. Например, системы планирования на основе ИИ управляют несколькими экспериментами одновременно, оптимизируя пространство и время. Эта адаптивность особенно ценна в лабораториях, проводящих высокопроизводительные анализы, где скорость обработки образцов напрямую влияет на скорость достижения результата [16].

По мере внедрения этих технологий, ученые получают больше возможностей для уточнения гипотез, применения инновационных экспериментальных подходов и более быстрого принятия решений. Благодаря робототехнике на основе ИИ, отвечающей за операционную сторону, исследователи могут масштабировать проекты и быстро проверять гипотезы; создается среда для совместной работы, в которой человеческий опыт и точность ИИ и роботов объединяются, ускоряя открытия в области разра-

ботки новых ЛС и повышая производительность лаборатории [17].

Применение ИИ/МО для разработки лекарственных средств. Интеграция ИИ и МО в разработку ЛС представляет собой революционный скачок в области биохимии. Этот процесс особенно заметен в области разработки и применения новых методов ИИ/МО при поиске низкомолекулярных ЛС [18].

Значительные успехи достигнуты благодаря подходам глубокого обучения в молекулярном дизайне *de novo*. Модели глубокого обучения обладают способностью генерировать совершенно новые молекулярные структуры, оптимизирующие желаемые биологические свойства, что позволяет быстро идентифицировать перспективные молекулы-кандидаты в ЛС. Этот метод выходит за рамки традиционного дизайна, исследуя химическое пространство более всесторонне, что способствует созданию инновационных соединений [19].

Используя алгоритмы ИИ, исследователи могут прогнозировать возможные пути синтеза новых молекул, оптимизируя переход от проектирования к производству. Прогностические модели, основанные на ИИ, могут оценивать различные факторы, такие как доступность реагентов и условия реакции и предлагать оптимальные пути синтеза, что облегчает продвижение молекул-кандидатов в ЛС в процессе поиска.

Повышается роль ИИ/МО в крупномасштабном прогнозировании биологических свойств. Эти прогностические модели позволяют оценивать и прогнозировать критические фармакокинетические и фармакодинамические свойства новых химических соединений, что способствует принятию обоснованных решений на ранних этапах процесса разработки новых ЛС. Точно прогнозируя, как молекула будет вести себя в биологических системах, исследователи могут отдавать приоритет молекулам-кандидатам с более высокими шансами на успех в клинических испытаниях, тем самым оптимизируя распределение ресурсов и сроки разработки.

Использование потенциала ИИ важно также для более глубокого понимания взаимосвязи между молекулярной структурой и биологической активностью молекул.

Модели МО для идентификации мишеней в иммуноонкологии. Достижения науки в области иммуноонкологии произвели революцию в лечении рака, в частности, благодаря появлению ингибиторов иммунных контрольных точек (Checkpoint inhibitor, CPI), которые значительно улучшили выживаемость пациентов при различных типах опухолей. Тем не менее, только 20—40% пациентов получают пользу от этих методов лечения, что подчеркивает высокую потребность поиска новых биомишеней для ЛС. Результаты исследований демонстрируют потенциал МО для решения этой задачи на основе новых знаний в области вычислительной биологии, иммуноонкологической биоинформатики и идентификации биологических мишеней действия ЛС [20].

Традиционные экспериментальные модели на животных часто не в состоянии отразить сложную

динамику иммунного ответа в опухолях. В этом контексте использование образцов биоматериала пациентов становится мощной альтернативой для поиска биомишеней. Исследование мультиомиксного профиля полученных в клинике образцов опухолевых тканей улучшает понимание факторов, влияющих на эффективность иммунотерапии. Например, идентификация времени мутаций опухоли в качестве значимого предиктора ответа CPI подтвердила гипотезу неоантигена. Используя мультиомиксные характеристики опухолевой ткани пациента, можно создать комплексную платформу анализа данных, которая может идентифицировать следующее поколение биомишеней для иммунотерапии рака.

Центральное место в этом подходе занимает моделирование противоопухолевого иммунного ответа с помощью вычислительных методов. На эффективность иммунного ответа влияет несколько факторов, в том числе наличие иммуногенных HLA-представленных пептидов, инфильтрация функциональных иммунных клеток в микроокружение опухоли и продолжающийся прайминг Т-клеток во вторичных структурах. Эти процессы регулируются сетью костимулирующих молекул, что дополняет системное понимание механизма иммунотерапии [21].

Для достижения этой цели используют классические статистические методы наряду с передовыми методами МО, что позволяет идентифицировать новые мишени для потенциальных иммуноонкологических ЛС. Разрабатывая прогностические модели, которые включают в себя мультиомиксные данные и сложные биологические взаимодействия, это исследование прокладывает путь к более эффективным иммунотерапевтическим стратегиям, направленным на расширение популяции пациентов, которым необходимы данные ЛС [22].

Таким образом, интеграция МО в идентификацию мишеней для иммуноонкологии не только улучшает понимание опухолево-иммунных взаимодействий, но и способствует открытию инновационных биомишеней для ЛС.

Биомедицинские базовые модели для ускорения разработки ЛС за счет идентификации и оптимизации целей. Применение биомедицинских базовых моделей ИИ (Biomedical Foundation Models — BFM) [23] в ходе разработки ЛС способно улучшать процессы идентификации и оптимизации целей и обеспечить интеграцию различных наборов данных для ускорения получения результатов [24].

Базовые модели используют огромные объемы биомедицинских данных для фиксации и анализа сложных закономерностей и взаимосвязей. В отличие от обычных моделей BFM обучаются на обширных, разнообразных наборах данных, охватывающих различные биомедицинские области. Это позволяет им изучать обобщенные представления, которые могут быть точно настроены для определения конкретных последующих задач, таких как прогнозирование реакции на ЛС, классификация подтипов заболеваний и выявление новых биомишеней.

Следует особо отметить многогранность применения BFM в разработке ЛС, в том числе способность интегрировать мультиомиксные данные, включая геномику, протеомику и транскриптомику, наряду с традиционными фармакологическими технологиями скрининга малых молекул. Этот интегративный подход позволяет использовать весь спектр доступной биологической информации, способствуя более полному пониманию механизмов заболевания и терапевтических мишеней.

Одно из ключевых преимуществ BFM заключается в их способности генерировать *de novo* малые молекулы и конструировать новые последовательности аминокислот в полипептидной цепи белковых молекул, особенно в контексте разработки антител. Используя BFM, исследователи могут исследовать обширные химические пространства и идентифицировать соединения с искомыми свойствами.

Применение BFM представляет собой значительный шаг вперед в области разработки ЛС. Обеспечивая интегративный анализ мультиомиксных данных и облегчая идентификацию и оптимизацию биомишеней для ЛС, BFM готовы ускорить разработку новых методов лечения, трансформируя биомедицину и прокладывая путь к более эффективным стратегиям лечения в будущем.

Содействие разработке ЛС с помощью платформ на основе ИИ в Insilico Medicine. Использование потенциала ИИ помогает оптимизировать проблемы, свойственные традиционным процессам разработки новых ЛС, включая длительные сроки, высокие затраты и низкие показатели успеха при выводе молекул-кандидатов на рынок[25]. Чтобы решить эти проблемы, компания Insilico Medicine[26] разработала две специализированные инновационные платформы ИИ: PandaOmics[27] и Chemistry42[28]. Эти платформы используют передовые технологии, такие как глубокие генеративные модели, обучение с подкреплением и преобразователи, что позволяет оптимизировать подход к разработке новых ЛС. PandaOmics фокусируется на поиске новых мишеней с использованием передовых методов анализа данных для идентификации и валидации терапевтических мишеней, в то время как Chemistry42 предназначен для создания новых молекулярных структур с желаемыми свойствами.

Примером является исследование новой терапевтической мишени, гена кодирующего киназу зародышевого центра TNK (TRAF2 and NCK-interacting protein kinase), которая была идентифицирована с использованием этих платформ ИИ. Соответствующий низкомолекулярный ингибитор, разработанный с помощью методов генеративного ИИ, успешно прошел фазу II клинических испытаний для лечения идиопатического легочного фиброза. Этот случай иллюстрирует потенциал ИИ для создания новых молекул-кандидатов, которые могут удовлетворить сложные требования клинической практики[29].

Платформы на основе ИИ революционизируют традиционный подход к разработке новых ЛС, упрощая сквозные процессы, которые объединяют

идентификацию биомишеней, синтез и отбор оптимальных лигандов и доклинические исследования молекул-кандидатов. Используя возможности современных методов машинного обучения, компания Insilico Medicine стремится значительно сократить время и ресурсы, необходимые для разработки новых молекул-кандидатов лечения, тем самым ускоряя доступность новых методов лечения для пациентов[30].

Интеграция платформ на основе ИИ, таких как PandaOmics и Chemistry42, представляет собой прогрессивный подход, потенциально меняющий будущее открытия и разработки ЛС.

Интеграция ИИ и итеративных экспериментов в разработке ЛС в области нейробиологии. Компания Recursion[5] сконцентрировала усилия на разработку новых методов лечения, направленных на улучшение результатов лечения за счет интеграции высокопроизводительной визуализации и моделей, управляемых ИИ.

Речь идет о создании итерационных циклов, которые связывают эксперименты в «мокрой лаборатории» с прогнозами машинного обучения в «сухой лаборатории». Такой взаимосвязанный подход позволяет с большей точностью ориентироваться в сложных вопросах нейробиологии. Объединяя возможности интегрированного конвейера экспериментов и прогностического моделирования, команда Recursion продвигается к формированию индустриальной среды для разработки ЛС, которая может адаптироваться к текущим результатам исследований и учиться на них.

С этой целью компания Recursion создала свою инновационную платформу — Phenomics Maps of Biology and Chemistry[31], которая облегчает идентификацию новых терапевтических мишеней и ускоряет отбор молекул-кандидатов в ЛС. Итеративные эксперименты и МО обеспечивают более точное прогнозирование эффективности и безопасности новых ЛС, позволяют сократить сроки их разработки и, тем самым, прокладывают путь к инновационным методам лечения, которые могут значительно улучшить качество жизни пациентов, страдающих от неврологических расстройств.

Заключение

Интеграция ИИ и МО в разработку ЛС открыла новую эру в развитии биомедицины, характеризующуюся беспрецедентной эффективностью и революционными инновациями. Проблемы, которые долгое время преследовали традиционную разработку ЛС — высокие затраты, длительные сроки и низкие показатели успеха — решаются с помощью методологий ИИ и МО, которые улучшают технологические процессы и оптимизируют принятие решений. Ведущие биофармацевтические инновационные компании в настоящее время используют эти технологии на различных этапах разработки ЛС, от идентификации и валидации биомишеней до молекулярного дизайна лигандов и прогностического моделирования фармакологических эффектов.

Итеративные подходы, основанные на ИИ и МО, позволяют исследователям генерировать и экспериментально проверять биомедицинские гипотезы в режиме реального времени. Эта система образует конвейер разработки ЛС замкнутого цикла, который ускоряет процесс открытия новых биорецепторов, обеспечивает подбор комплементарных им лигандов и разработку на их основе молекул-кандидатов в ЛС, предназначенных для персонализированного лечения тяжелых заболеваний.

Оценивая перспективы использования ИИ и МО, можно заключить, что эти прорывные технологии в ближайшие годы могут стать мегатрендом науки, и приведут к радикальному изменению традиционной парадигмы биомедицины и биофармации, на основе которой сегодня происходит поиск, изучение, производство и внедрение ЛС в медицинскую практику.

Для реализации этой перспективы, решающее значение имеет концентрация усилий и приток инвестиций в развитие технологии ИИ и МО, а также подготовка специалистов, которые способны применять новые междисциплинарные подходы к решению задачи инновационного развития фармацевтического сектора здравоохранения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Simonyan K., Zisserman A. Very deep convolutional networks for large-scale image recognition. *arXiv preprint arXiv:1409.1556*. 2014.
2. Drug Discovery — ELRIG [Electronic resource]. URL: <https://elrig.org/portfolio/drug-discovery-2024/> (accessed: 02th January 2025).
3. Sheikh M, Iqra F, Ambreen H, Pravin KA, Ikra M, Chung YS Integrating artificial intelligence and high-throughput phenotyping for crop improvement. *J. Integr. Agric.* 2024;(23):1787—1802.
4. Fang S, Wei R, Cui Y, Su L. Advancing AI protein structure prediction and design: from amino acid “bones” to new era of all-atom “flesh”. *Green Carbon*. 2024;(2):209—210.
5. Pioneering TechBio Solutions in Drug Discovery. Recursion [Electronic resource]. Available from: <https://www.recursion.com/> (Accessed: 02th January 2025).
6. Stevens R, Bendito-Mol E, Battersby DJ, Miah AH, Wellaway N, Law RP at all. Integrated Direct-to-Biology Platform for the Nanoscale Synthesis and Biological Evaluation of PROTACs. *Journal of medicinal chemistry*. 2022;66(22):15437—15452. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.3c01604
7. Abbasi AF, Asim MN, Dengel A. Transitioning from wet lab to artificial intelligence: a systematic review of AI predictors in CRISPR. *J Transl Med*. 2025;23(1):153. DOI: 10.1186/s12967-024-06013-w
8. Advancing Gene Editing with ePscas9 Technology [Electronic resource]. Available from: <https://www.astrazeneca.com/what-science-can-do/topics/clinical-innovation/advancing-gene-editing-with-epscas9-technology.html> (Accessed: 02th January 2025).
9. Degtev D, Bravo J, Emmanouilidi A, Zdravković A, Choong O, Touza J et al. Engineered PsCas9 enables therapeutic genome editing in mouse liver with lipid nanoparticles. *Nature Communications*. 2024;15(1):1—15.
10. On the CRISPR horizon: democratising access to genome-editing technologies. Available from: <https://www.drugtargetreview.com/article/107337/on-the-crispr-horizon-democratising-access-to-genome-editing-technologies/> (Accessed: 02th January 2025).
11. Constructive Bio. Available from: <https://www.constructive.bio/> (Accessed: 02th January 2025).
12. Chen L, Xin X, Zhang Y, Li S, Zhao X, Li S. et al. Advances in Biosynthesis of Non-Canonical Amino Acids (ncAAs) and the Methods of ncAAs Incorporation into Proteins. *Molecules*. 2023;28(18):6745.
13. Chen Y, Jin S, Zhang M, Hu Y, Wu KL, Chung A. et al. Unleashing the potential of noncanonical amino acid biosynthesis to create cells with precision tyrosine sulfation. *Nat Commun*. 2022;(13):5434.

14. Automating Discovery: Laboratory Automation, High Throughput Experimentation, Diagnostics and Laboratory Robotics/AI. Available from: <https://eu-robotics.net/2024-09-fil-white-paper-launched-on-lab-robotics/> (accessed: 02th January 2025).
15. Towards a research roadmap for laboratory robotics — 2024 — Wiley Analytical Science. Available from: <https://analyticalscience.wiley.com/content/article-do/towards-research-roadmap-laboratory-robotics> (accessed: 02th January 2025).
16. Royall P. Using Robotics in Laboratories During the COVID-19 Outbreak: A Review. *IEEE Robotics & Automation Magazine*.
17. 12641 PDFs | Review articles in LABORATORY AUTOMATION. Available from: <https://www.researchgate.net/topic/Laboratory-Automation/publications> (accessed: 02th January 2025).
18. Li H, Li T, Quang D, Guan Y. Network Propagation Predicts Drug Synergy in Cancers. *Cancer Res*. 2018;78(18):5446—5457.
19. Bestas B, Wimberger S, Degtev D, Madsen A, Rottner FA., Karlsson F. at al. A Type II-B Cas9 nuclease with minimized off-targets and reduced chromosomal translocations in vivo. *Nat Commun*. 2023;14(1):5474.
20. Reimagining Drug Discovery Process with AI — Isomorphic Labs. Available from: <https://www.isomorphiclabs.com/> (Accessed: 02th January 2025).
21. Roerden M, Castro AB, Cui Y, Harake N, Kim B, Dye J, Roerden M et al. Neoantigen architectures define immunogenicity and drive immune evasion of tumors with heterogenous neoantigen expression. *J Immunother Cancer*. 2024;12(11):e010249.
22. Litchfield K, Augustine M, Nene N, Fu H, Pinder C, Ligamari L et al. Immunotherapy drug target identification using machine learning and patient-derived tumour explant validation. Biomedical Foundation Models — IBM Research [Internet]. 2024 Nov; Available from: <https://research.ibm.com/projects/biomedical-foundation-models>. DOI:10.21203/rs.3.rs-5499857/v1
23. Biomedical Foundation Models — IBM Research [Electronic resource]. URL: <https://research.ibm.com/projects/biomedical-foundation-models> (accessed: 02.01.2025).
24. United Kingdom — IBM Research. Available from: <https://research.ibm.com/labs/uk> (accessed: 02th January 2025).
25. Aliper A, Plis S, Artemov A, Ulloa A, Mamoshina P, Zhavoronkov A. Deep Learning Applications for Predicting Pharmacological Properties of Drugs and Drug Repurposing Using Transcriptomic Data. *Mol Pharm*. 2016;13(7):2524—2530. DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.6b00248
26. Insilico Medicine. Available from: <https://insilico.com/> (Accessed: 02th January 2025).
27. Kanya P, Ozerov IV, Pun FW, et al. PandaOmics: An AI-Driven Platform for Therapeutic Target and Biomarker Discovery. *J Chem Inf Model*. 2024;64(10):3961—3969. DOI: 10.1021/acs.jcim.3c01619
28. Ivanenkov YA, Polykovskiy D, Bezrukov D, et al. Chemistry42: An AI-Driven Platform for Molecular Design and Optimization. *J Chem Inf Model*. 2023;63(3):695—701. DOI: 10.1021/acs.jcim.2c01191
29. Lu M, Yin J, Zhu Q, Lin G, Mou M, Liu F, et al. Artificial Intelligence in Pharmaceutical Sciences. Engineering [Internet]. 2023 Aug [cited 2024 Jul 4]; 27: 37—69. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2095809923001649>.
30. Levin JM, Oprea TI, Davidovich S, Clozel T, Overington J, Vanhaelen Q et al. Artificial intelligence, drug repurposing and peer review. *Nat Biotechnol*. 2020;38(10):1127—1131. DOI: 10.1038/s41587-020-0686-x
31. RXRX3: Phenomics Map of Biology. Available from: <https://www.rxxr.ai/rxxr3> (Accessed: 02th January 2025).

REFERENCES

1. Simonyan K., Zisserman A. Very deep convolutional networks for large-scale image recognition. *arXiv preprint arXiv:1409.1556*. 2014.
2. Drug Discovery — ELRIG [Electronic resource]. URL: <https://elrig.org/portfolio/drug-discovery-2024/> (accessed: 02th January 2025).
3. Sheikh M, Iqra F, Ambreen H, Pravin KA, Ikra M, Chung YS Integrating artificial intelligence and high-throughput phenotyping for crop improvement. *J. Integr. Agric.* 2024;(23):1787—1802.
4. Fang S, Wei R, Cui Y, Su L. Advancing AI protein structure prediction and design: from amino acid “bones” to new era of all-atom “flesh”. *Green Carbon*. 2024;(2):209—210.
5. Pioneering TechBio Solutions in Drug Discovery. Recursion [Electronic resource]. Available from: <https://www.recursion.com/> (Accessed: 02th January 2025).

6. Stevens R, Bendito-Mol E, Battersby DJ, Miah AH, Wellaway N, Law RP et al. Integrated Direct-to-Biology Platform for the Nano-scale Synthesis and Biological Evaluation of PROTACs. *Journal of medicinal chemistry*. 2022;66(22):15437—15452. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.3c01604
7. Abbasi AF, Asim MN, Dengel A. Transitioning from wet lab to artificial intelligence: a systematic review of AI predictors in CRISPR. *J Transl Med*. 2025;23(1):153. DOI: 10.1186/s12967-024-06013-w
8. Advancing Gene Editing with ePscas9 Technology [Electronic resource]. Available from: <https://www.astrazeneca.com/what-science-can-do/topics/clinical-innovation/advancing-gene-editing-with-epscas9-technology.html> (Accessed: 02th January 2025).
9. Degtev D, Bravo J, Emmanouilidi A, Zdravković A, Choong O, Touza J et al. Engineered PsCas9 enables therapeutic genome editing in mouse liver with lipid nanoparticles. *Nature Communications*. 2024;15(1):1—15.
10. On the CRISPR horizon: democratising access to genome-editing technologies. Available from: <https://www.drugtargetreview.com/article/107337/on-the-crispr-horizon-democratising-access-to-genome-editing-technologies/> (Accessed: 02th January 2025).
11. Constructive Bio. Available from: <https://www.constructive.bio/>. (Accessed: 02th January 2025).
12. Chen L, Xin X, Zhang Y, Li S, Zhao X, Li S. et al. Advances in Biosynthesis of Non-Canonical Amino Acids (ncAAs) and the Methods of ncAAs Incorporation into Proteins. *Molecules*. 2023;28(18):6745.
13. Chen Y, Jin S, Zhang M, Hu Y, Wu KL, Chung A. et al. Unleashing the potential of noncanonical amino acid biosynthesis to create cells with precision tyrosine sulfation. *Nat Commun*. 2022;(13):5434.
14. Automating Discovery: Laboratory Automation, High Throughput Experimentation, Diagnostics and Laboratory Robotics/AI. Available from: <https://eu-robotics.net/2024-09-fll-white-paper-launched-on-lab-robotics/> (accessed: 02th January 2025).
15. Towards a research roadmap for laboratory robotics — 2024 — Wiley Analytical Science. Available from: <https://analyticalscience.wiley.com/content/article-do/towards-research-roadmap-laboratory-robotics> (accessed: 02th January 2025).
16. Royall P. Using Robotics in Laboratories During the COVID-19 Outbreak: A Review. *IEEE Robotics & Automation Magazine*.
17. 12641 PDFs | Review articles in LABORATORY AUTOMATION. Available from: <https://www.researchgate.net/topic/Laboratory-Automation/publications> (accessed: 02th January 2025).
18. Li H, Li T, Quang D, Guan Y. Network Propagation Predicts Drug Synergy in Cancers. *Cancer Res*. 2018;78(18):5446—5457.
19. Bestas B, Wimberger S, Degtev D, Madsen A, Rottner FA., Karlsson F. et al. A Type II-B Cas9 nuclease with minimized off-targets and reduced chromosomal translocations in vivo. *Nat Commun*. 2023;14(1):5474.
20. Reimagining Drug Discovery Process with AI — Isomorphic Labs. Available from: <https://www.isomorphiclabs.com/> (Accessed: 02th January 2025).
21. Roerden M, Castro AB, Cui Y, Harake N, Kim B, Dye J, Roerden M et al. Neoantigen architectures define immunogenicity and drive immune evasion of tumors with heterogenous neoantigen expression. *J Immunother Cancer*. 2024;12(11):e010249.
22. Litchfield K, Augustine M, Nene N, Fu H, Pinder C, Ligamari L et al. Immunotherapy drug target identification using machine learning and patient-derived tumour explant validation. *Biomedical Foundation Models — IBM Research* [Internet]. 2024 Nov; Available from: <https://research.ibm.com/projects/biomedical-foundation-models>. DOI:10.21203/rs.3.rs-5499857/v1
23. Biomedical Foundation Models — IBM Research [Electronic resource]. URL: <https://research.ibm.com/projects/biomedical-foundation-models> (accessed: 02.01.2025).
24. United Kingdom — IBM Research. Available from: <https://research.ibm.com/labs/uk> (accessed: 02th January 2025).
25. Aliper A, Plis S, Artemov A, Ulloa A, Mamoshina P, Zhavoronkov A. Deep Learning Applications for Predicting Pharmacological Properties of Drugs and Drug Repurposing Using Transcriptomic Data. *Mol Pharm*. 2016;13(7):2524—2530. DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.6b00248
26. Insilico Medicine. Available from: <https://insilico.com/> (Accessed: 02th January 2025).
27. Kamyra P, Ozerov IV, Pun FW, et al. PandaOmics: An AI-Driven Platform for Therapeutic Target and Biomarker Discovery. *J Chem Inf Model*. 2024;64(10):3961—3969. DOI: 10.1021/acs.jcim.3c01619
28. Ivanenkov YA, Polykovskiy D, Bezrukov D, et al. Chemistry42: An AI-Driven Platform for Molecular Design and Optimization. *J Chem Inf Model*. 2023;63(3):695—701. DOI: 10.1021/acs.jcim.2c01191
29. Lu M, Yin J, Zhu Q, Lin G, Mou M, Liu F, et al. Artificial Intelligence in Pharmaceutical Sciences. *Engineering* [Internet]. 2023 Aug [cited 2024 Jul 4]; 27: 37—69. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2095809923001649>.
30. Levin JM, Oprea TI, Davidovich S, Clozel T, Overington J, Vanhaelst Q et al. Artificial intelligence, drug repurposing and peer review. *Nat Biotechnol*. 2020;38(10):1127—1131. DOI: 10.1038/s41587-020-0686-x
31. RXRX3: Phenomics Map of Biology. Available from: <https://www.rxrx.ai/rxrx3> (Accessed: 02th January 2025).

Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article.

The authors declare no conflicts of interests.

Статья поступила в редакцию 27.02.2025; одобрена после рецензирования 18.04.2025; принята к публикации 13.08.2025.

The article was submitted 27.02.2025; approved after reviewing 18.04.2025; accepted for publication 13.08.2025.