

Яхъяев Арби Асламбекович

студент

Научный руководитель

Щербакова Ирина Викторовна

соискатель, магистр, старший преподаватель

ФГБОУ ВО «Саратовский государственный медицинский университет

им. В.И. Разумовского» Минздрава России

г. Саратов, Саратовская область

ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ НЕЙРОСЕТЕЙ В ПРОЦЕССЕ СОЗДАНИЯ ЛЕКАРСТВ

Аннотация: появившись сравнительно недавно, нейронные сети (НС) уже вносят внушительный вклад в решение задачи создания лекарств [1]. Особую роль на современном этапе они играют на этапе исследований. В связи с этим огромное значение имеет анализ возможностей применения нейросетей в процессе создания лекарств.

Ключевые слова: нейронные сети, нейросети, разработка лекарств, искусственный интеллект в медицине.

Разработка новых лекарств – важнейшая составляющая исследовательских процессов в такой важной сфере, как здравоохранение и медицина.

На пути разработки препаратов выделяются такие основные этапы, как зарождение идеи, синтез первых библиотек потенциально активных веществ, проведение клинических испытаний, выпуск готовых препаратов.

На любом из указанных этапов может возникнуть проблема [2], и машинные алгоритмы могут взять на себя часть работы по ее разрешению – к примеру, определить, какие из молекул с наибольшей вероятностью окажутся безопасными и эффективными для лечения человека. Способность выявлять паттерны позволяет быстро «просеивать» огромные объемы биохимических данных [3].

Искусственные нейросети (НС) представляют собой семейство компьютерных алгоритмов и составляют определенную подгруппу машинного обучения [4]. Структура НС, как правило, включает так называемый входной слой, несколько скрытых слоев, выходной слой [1]. Глубокие нейронные сети содержат большее количество скрытых слоев, в каждом из которых определенное число узлов, выступающих в качестве искусственных нейронов, и каждое соединение связано с весовыми коэффициентами [2].

В решении задачи создания лекарств использование методов машинного обучения позволяет обеспечить ключевые преимущества:

- высокая производительность в круглосуточном режиме;
- снижение затрат на проведение исследований вследствие меньшего числа физически тестируемых соединений;
- устранение нецелевых воздействий, зависимости от микробиоты кишечника и др. [5].

Известно, что структура химического соединения позволяет предсказывать его свойства – модели, позволяющие прогнозировать количественные характеристики биологической активности, определяются как Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR). Их основу составляет применение методов математической статистики и машинного обучения. Нейросеть AlphaFold способна предсказывать структуру белков, а платформа Deep Docking предоставляет возможность докинга – молекулярного моделирования, позволяющего предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и конформацию одной молекулы (лиганда) в сайте связывания другой (рецептора) [3; 6]. Молекулярный докинг обеспечивает ускорение скрининга с помощью QSAR-модели в 50–100 раз [1].

К настоящему времени установлено, что нейросеть GENTRL способна находить перспективные молекулы лекарств в течение трех недель, что в огромное количество раз быстрее «ручного» процесса разработки [7]. Project Saturn, предназначенный для открытия новых методов устранения последствий генетических мутаций, на данный момент протестировал 69 миллиардов моле-

кул олигонуклеотидов для создания библиотеки, включающей около тысячи соединений, экспериментально подтвержденных для терапевтического использования [1]. Нейронные сети «акцентируют свое внимание» на химических соединениях, релевантных биомишеням, что ведет к созданию с их использованием соответствующих молекул.

Многим студентам уже известны возможности нейросети ChatGPT для создания текстов и презентаций. Но этим возможности ChatGPT не ограничиваются: робот Coscientist, основанный на ChatGPT, автономно планирует и проводит сложные химические эксперименты, получая целевые соединения. На основе мощных языковых моделей (например, GPT-4) робот Coscientist ищет методики в интернете, а затем разрабатывает пути реакции для создания нужной молекулы. «Сотрудничество» специалистов по разработке лекарств с нейросетями позволит повысить эффективность этих процессов. Нейросети существенно ускоряют разработку новых препаратов с учетом подходов к улучшению их эффективности и снижению стоимости производства. Применение нейросетей меняет каждый этап процесса разработки – от поиска молекул-кандидатов до проведения клинических испытаний.

Подводя итог проведенному анализу, следует отметить, что нейросети обладают реальной прикладной значимостью, однако не могут полностью заменить человека в такой ответственной сфере, как создание лекарств. Они лишь помогают повысить производительность, избежать предвзятости и ошибок, вносимых человеческим фактором.

Список литературы

1. Чикунов И. Нейросети в химии и создании лекарств: от идеи до клинических испытаний / И. Чикунов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://knife.media/chemical-ai/> (дата обращения: 11.12.2025).
2. Исаков И.М. Перспективы внедрения искусственного интеллекта в медицине / И.М. Исаков, И.В. Щербакова // Week of Russian science (WeRuS-2024): сб. матер. XIII Всерос. недели науки с междунар. участием, посвящ. Национ. дню донора. – Саратов, 2024. – С.816–817. EDN RTIUYX

3. Баскин И.И. Применение искусственных нейронных сетей в химических и биохимических исследованиях / И.И. Баскин, В.А. Палюлин, Н.С. Зефиров // Вестник Московского ун-та. – 1999. – Т. 40. №5 – С. 323–326.
4. Изучение количественных соотношений структура – свойство методами линейного регрессионного анализа и нейронных сетей / С.В. Иванов, В.В. Трапеческий, О.С. Титова, Н.В. Столярова // Вестник Национал. Авиац. Ун-та. – 2007. – Т. 2. №32. – С. 96–99.
5. Нейронные сети как метод поиска зависимостей структура – свойство органических соединений / Н.М. Гальберштам, И.И. Баскин, В.А. Палюлин, Н.С. Зефиров // Успехи химии. – 2003. – Т. 72. №7. – С. 706–727. EDN HAWJGH
6. Поздеев Д.А. Возможности применения искусственных нейронных сетей в медицине (обзор литературы) / Д.А. Поздеев, Е.В. Шиляева, Э.П. Сорокин // Здоровье, демография, экология финно-угорских народов. – 2021. – №4. – С. 53–58. EDN JJOABR
7. Современные технологии фармакологических исследований: искусственные нейронные сети в создании лекарственных средств / М.А. Перфильев, П.М. Васильев, Д.В. Мальцев, М.О. Скрипка // Лекарственный вестник. – 2022. – Т. 23. №1. – С. 22–26. EDN QIFPVG