

Научная статья



DOI: 10.55959/MSU2073-2643-21-2025-4-102-118

ИНТЕГРАЦИЯ ИИ В ЖИЗНЕННЫЙ ЦИКЛ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ПРОДУКЦИИ: ОТ НИОКР ДО ПРОИЗВОДСТВА И БЕЗОПАСНОСТИ

Фань Фэнхуэй

Honghui Pharmaceutical Technology (Пекин), Пекин, Китай; Гонконгский научно-исследовательский технологический институт, Гонконг, Китай; Пекинский университет (Институт Боя), Пекин, Китай
fenghuiiffh@163.com

Цяо Цюань

Исследовательский центр права человека, Сычуаньский университет, г. Чэнду, Китай; Гонконгский научно-исследовательский технологический институт, Гонконг, Китай; Пекинский университет (Институт Боя), Пекин, Китай
qiaojuanscu@163.com

Аннотация. Искусственный интеллект (ИИ) трансформирует жизненный цикл фармацевтических препаратов — от открытия до производства и надзора за безопасностью. В процессе открытия ИИ ускоряет идентификацию мишеней, молекулярный дизайн и перепрофилирование (например, барицитиниб; рентосертиб), в то время как опыт DSP-1181 подчеркивает риск структурного консерватизма. В клинических разработках ИИ поддерживает стратификацию пациентов, проектирование, основанное на цифровых двойниках и автоматизированный анализ, повышая статистическую мощность и скорость работы. В производстве предиктивная аналитика, компьютерное зрение и документирование с помощью графов знаний повышают качество и производительность. Фармаконадзор выигрывает от обработки естественного языка (NLP), позволяющей обнаруживать сигналы и автоматизировать рабочий процесс. Появляющиеся возможности использования в разработке антител и персонализированной терапии расширяют сферу применения, но реальные преимущества зависят от качества данных, скрупулезной проверки, прозрачности и соответствия нормативным требованиям (включая доказательства реального мира).

Ключевые слова: фармаконадзор на основе искусственного интеллекта; разработка лекарственных препаратов на основе искусственного ин-

теллекта; персонализированная терапия; испытания, оптимизированные искусственным интеллектом; цифровые близнецы; повторное назначение лекарств; молекулярный дизайн; стратификация пациентов.

Для цитирования: Фань Ф., Цяо Ц. Интеграция ИИ в жизненный цикл фармацевтической продукции: от НИОКР до производства и безопасности // Вестник Московского университета. Серия 21. Управление (государство и общество). 2025. Т. 22. № 4. С. 102–118.

Дата поступления в редакцию: 13.10.2025

INTEGRATING AI INTO THE PHARMACEUTICAL LIFECYCLE: FROM R&D TO MANUFACTURING AND SAFETY

Fan F.

Honghui Pharmaceutical Technology (Beijing) Co., Ltd., Beijing, China; Hong Kong Research Institute of Technology, Hong Kong, China; Boya Institute, Peking University, Beijing, China
fenghuiiffh@163.com

Qiao J.

Sichuan University, Chengdu, China; Hong Kong Research Institute of Technology, Hong Kong, China; Boya Institute, Peking University, Beijing, China
qiaojuanscu@163.com

Abstract. Artificial Intelligence (AI) is transforming the pharmaceutical lifecycle — from discovery to manufacturing and safety oversight. In discovery, AI accelerates target identification, molecular design, and repurposing (e.g., baricitinib; rentosertib), while the DSP-1181 experience highlights the risk of structural conservatism. In clinical development, AI supports patient stratification, digital-twin-informed design, and automated analysis, improving statistical power and operational speed. In manufacturing, predictive analytics, computer vision, and knowledge-graph-assisted documentation enhance quality and throughput. Pharmacovigilance benefits from natural language processing (NLP) — enabled signal detection and workflow automation. Emerging uses in antibody engineering and personalized therapy broaden its scope, but real-world benefit hinges on data quality, rigorous validation, transparency, and regulatory alignment (including real-world evidence).

Key words: AI-based pharmacovigilance; AI-driven drug development; AI-enabled personalized therapy; AI-optimized trials; Digital twins; Drug repurposing; Molecular design; Patient stratification.

Введение

ИИ-технология меняет жизненный цикл фармацевтических препаратов — от открытия и молекулярного дизайна до клинической разработки, производства и выстраивания постмаркетинговой безопасности. В проведенном обзоре рассматривается применение ИИ на различных этапах жизненного цикла фармацевтических препаратов, включая открытие, повторное назначение, разработку и аналитику испытаний (например, подходы «цифровых двойников»). Также рассматриваются вопросы качества производства, документации, рабочих процессов фармаконадзора и новые приложения в области разработки антител и персонализации данных. Данные взяты из нормативных документов, раскрытия промышленной информации и рецензируемых исследований, опубликованных в период с 2020 по 2025 г. В статье обобщены последние тематические исследования и выделены открытые методологические и управленческие вопросы, касающиеся масштабирования пилотных проектов до надежных системных возможностей.

ИИ ускоряет открытие лекарств: открытие новой эры эффективных исследований и разработок

Традиционное открытие лекарств сталкивается с постоянными проблемами, связанными с выявлением клинически значимых целей и их подтверждением в разумные сроки. ИИ, используя машинное обучение (ML), глубокое обучение (DL) и масштабные биомедицинские данные, включая геномику, протеомику и метаболомику, изменил этот ландшафт, позволив точно предсказывать цели, связанные с заболеваниями, так, что традиционные подходы не могут с этим сравниться. Один из знаковых примеров произошел в начале пандемии COVID-19. Британская компания BenevolentAI быстро использовала свою платформу искусственного интеллекта и граф биомедицинских знаний для определения ключевых факторов хозяина, участвующих в инфекции SARS-CoV-2, включая жизненный цикл вируса, рецепторы клеток хозяина и цитокиновые пути.

Работа была сосредоточена на рецептор-опосредованном эндоцитозе через ACE2-позитивные AT2-клетки¹.

Первые расчеты и данные *in vitro* позволили предположить, что барицитиниб может ингибировать AAK1 и GAK, а его ингибирование JAK1/2 может ослабить гипервоспаление. Последующий клинический консенсус подчеркнул, что преобладающим механизмом пользы у госпитализированных пациентов является JAK-опосредованная иммуномодуляция; вопрос о том, является ли ингибирование AAK1/GAK *in vivo* фармакологически значимым при терапевтической экспозиции, остается предметом научных дискуссий. Основываясь на этой информации, весь процесс — от механических выводов до определения приоритетности барицитиниба — был завершен компанией BenevolentAI примерно за 48 часов. Барицитиниб был включен в клиническое испытание АСТТ-2 под руководством NIAID, где он показал значительное преимущество у госпитализированных пациентов с COVID-19 в сочетании с ремдезивиром (сокращение времени до выздоровления по сравнению с одним ремдезивиром). 19 ноября 2020 г. Управление по контролю качества пищевых продуктов и лекарственных средств США выдало разрешение на экстренное применение (EUA) барицитиниба в комбинации с ремдезивиром у некоторых госпитализированных пациентов², а в мае 2022 г. предоставило полное разрешение на применение барицитиниба для лечения некоторых госпитализированных взрослых пациентов с COVID-19³.

Следующий шаг связан с разработкой молекулярного дизайна и оптимизации его действия. Помимо повторного использования, искусственный интеллект теперь способствует открытию лекарств и оптимизации молекул, сокращая сроки разработки, которые традиционно составляют более десяти лет. Например, рентосертиб (INS018_055; также ISM001-055), антифибротический низкомолекулярный ингибитор TNIK, был разработан Insilico Medicine

¹ Richardson P., Griffin I., Tucker C., Smith D., Oechsle O., Phelan A., Stebbing J., Feliciano P. Baricitinib as potential treatment for 2019-nCoV acute respiratory disease // *The Lancet*. 2020. Vol. 395(10223). P. e30–e31. DOI: 10.1016/S0140-6736(20)30304-4

² U.S. Food and Drug Administration. Coronavirus (COVID-19) Update: FDA Authorizes Drug Combination for Treatment of COVID-19. 19 November 2020 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.fda.gov/news-events/press-announcements/coronavirus-covid-19-update-fda-authorizes-drug-combination-treatment-covid-19> (дата обращения: 26.12.2025).

³ U.S. Food and Drug Administration. Olumiant (baricitinib) for the treatment of COVID-19 in hospitalized adults requiring supplemental oxygen, non-invasive or invasive mechanical ventilation, or ECMO. 10 May 2022 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.fda.gov/media/143825/download> (дата обращения: 26.12.2025).

с использованием их генеративной платформы искусственного интеллекта PandaOmics и спроектирован с помощью Chemistry42, что является примером ускоренной разработки лекарств. Программа, начатая в 2019 г. с помощью интеграции мультиомики, моделирования биологических сетей и литературных данных, выявила TRAF2 и NCK-взаимодействующую киназу (TNIK) в качестве биологически значимой, но ранее недостаточно изученной мишени при идиопатическом легочном фиброзе (ИЛФ). После определения приоритетности мишени компания Chemistry42 создала селективные ингибиторы TNIK, оптимизировав взаимодействие АТФ-сайтов, что позволило получить рентосертиб с мощной антифибротической активностью в доклинических моделях. Клинический прогресс был быстрым: первая доза для человека была применена в конце 2021 г., фаза 1 была завершена в начале 2023 г. с благоприятными данными по безопасности, а фаза 2a началась в середине 2023 г. В 2024 г. спонсор объявил о положительных итоговых результатах фазы 2a⁴, а в 2025 г. были опубликованы механистические и клинические данные⁵. Эта траектория охватывает быстрое выдвижение целей, ускоренную оптимизацию ведущих препаратов и эффективный выход на клинические испытания, что подчеркивает способность ИИ сокращать сроки НИОКР на ранних стадиях и одновременно повышать точность молекулярного дизайна.

Примеры с барицитинибом и рентосертибом иллюстрируют два взаимодополняющих аспекта применения ИИ в фармацевтических инновациях: быстрое перепрофилирование существующих лекарств в чрезвычайных ситуациях и ускоренный *de novo* дизайн новых молекул для лечения сложных заболеваний. Оба случая подчеркивают способность ИИ интегрировать разнородные биомедицинские данные, выявлять скрытые мишени и оптимизировать молекулы-кандидаты с беспрецедентной эффективностью. Эти достижения означают смену парадигмы открытия лекарств, пере-

⁴ Insilico Medicine. Insilico Medicine announces positive topline results of ISM001-055 for the treatment of idiopathic pulmonary fibrosis (IPF) developed using generative AI. 12 November 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.prnewswire.com/news-releases/insilico-medicine-announces-positive-topline-results-of-ism001-055-for-the-treatment-of-idiopathic-pulmonary-fibrosis-ipf-developed-using-generative-ai-302302583.html> (дата обращения: 26.12.2025).

⁵ Xu Z., Ren F., Wang P., Cao J., Tan C., Ma D., Zhao L., Dai J., Ding Y., Fang H., Li H., Liu H., Luo F., Meng Y., Pan P., Xiang P., Xiao Z., Rao S., Satler C., Liu S., Lv Y., Zhao H., Chen S., Cui H., Korzinkin M., Gennert D., Zhavoronkov A. A generative AI-discovered TNIK inhibitor for idiopathic pulmonary fibrosis: A randomized phase 2a trial. August 2025 [Электронный ресурс]. URL: <https://doi.org/10.1038/s41591-025-03743-2> (дата обращения: 26.12.2025).

ход от трудоемких процессов проб и ошибок к интеллектуальным, управляемым данными рабочим процессам, способным изменить разработку терапии⁶.

ИИ-технология как альтернатива испытаниям на животных: на пути к этической и основанной на данных оценке безопасности

Испытания на животных традиционно занимали центральное место в оценке безопасности лекарств, однако обостряющиеся этические проблемы и технологический прогресс ускоряют переход к принципу «3R» — замена, сокращение и усовершенствование. ИИ стал одной из движущих сил этого перехода, позволяя применять более этические и эффективные подходы к доклиническим исследованиям.

Ярким примером является AnimalGAN, разработанная Управлением по контролю за продуктами и лекарствами США⁷. Используя генеративные состязательные сети, обученные на данных более 6000 крыс и 1300 условий лечения, модель генерирует реалистичные синтетические данные о животных, охватывающие 38 показателей патологии. AnimalGAN продемонстрировала точность, сопоставимую с реальными экспериментами, и даже превзошла 12 известных моделей QSAR⁸. Крупномасштабное моделирование на «виртуальных крысах» воспроизвело оценки токсичности, соответствующие человеческим показателям, что подчеркивает потенциал модели для надежной оценки безопасности.

Параллельные инициативы развиваются по всему миру. Например, в рамках проекта «Виртуальный второй вид» создается модель собаки с искусственным интеллектом на основе исторических токсикологических данных, что позволит заменить собак в качестве второго вида при проведении нормативных испытаний на безопасность⁹.

⁶ Drug Discovery Online. AI in drug discovery and development — will it live up to the hype? 2023 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.drugdiscoveryonline.com/doc/ai-in-drug-discovery-and-development-will-it-live-up-to-the-hype-0001> (дата обращения: 26.12.2025).

⁷ U.S. Food and Drug Administration. AnimalGAN initiative. 26 November 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.fda.gov/about-fda/nctr-research-focus-areas/animalgan-initiative> (дата обращения: 26.12.2025).

⁸ Chen X., Roberts R., Liu Z., Tong W. A generative adversarial network model alternative to animal studies for clinical pathology assessment // Nature Communications. 2023. Vol. 14. Article 7141. DOI: 10.1038/s41467-023-42933-9

⁹ National Centre for the Replacement, Refinement & Reduction of Animals in Research. £1.6M awarded to develop a Virtual Second Species. 13 March 2023

Все эти усилия в совокупности иллюстрируют роль ИИ как основного фактора, способствующего внедрению новых методик (NAM). Генерируя синтетические, но биологически релевантные данные, ИИ закладывает основу для постепенного отказа регулирующих органов от требований к тестированию на животных. Созданная парадигма подчеркивает значимость для человека, научную строгость и этическую ответственность, что знаменует собой значительный шаг на пути к более устойчивой и гуманной экосистеме разработки лекарств.

ИИ оптимизирует клинические испытания: продвижение НИОКР с точностью и эффективностью

Эффективный отбор пациентов играет ключевую роль в успехе клинических испытаний, особенно при гетерогенных заболеваниях, таких как COVID-19, онкология или аутоиммунные расстройства. Традиционные методы отбора пациентов часто не позволяют выявить подгруппы, которые с наибольшей вероятностью принесут пользу, что приводит к затягиванию сроков испытания и повышению риска провала испытаний. ИИ, особенно ML, меняет этот процесс, используя электронные медицинские карты (EHR), регистры испытаний и наборы данных о биомаркерах для выявления когорты с высокой вероятностью ответа.

Ярким примером может служить работа Центра оценки и исследования лекарственных средств (CDER) Управления по контролю качества пищевых продуктов и лекарственных препаратов США во время пандемии COVID-19¹⁰. Исследователи изучали анакинру (Anakinra), антагонист рецептора интерлейкина-1, который потенциально мог смягчить цитокиновые бури в тяжелых случаях. Однако клиническая польза была ограничена подгруппой пациентов. Повышение уровня растворимого рецептора активатора плазминогена урокиназного типа (suPAR) было определено как биомаркер, предсказывающий прогрессирование заболевания, но коммерческого теста в США не было. Чтобы преодолеть это ограничение, FDA разработало ML-модель, способную косвенно оценивать риск, ассоциированный с suPAR, на основе регулярно

[Электронный ресурс]. URL: <https://nc3rs.org.uk/news/ps16m-awarded-develop-virtual-second-species> (дата обращения: 26.12.2025).

¹⁰ Liu Q., Nair R., Huang R., Zhu H., Anderson A., Belen O., Tran V., Chiu R., Higgins K., Chen J., He L., Doddapaneni S., Huang S.-M., Nikolov N.P., Zineh I. Using machine learning to determine a suitable patient population for anakinra for the treatment of COVID-19 under the Emergency Use Authorization // *Clinical Pharmacology & Therapeutics*. 2024. Vol. 115(4). P. 1004–1016. DOI: 10.1002/cpt.3191

собираемых клинических показателей, таких как маркеры воспаления и жизненные показатели.

Модель надежно стратифицировала пациентов, позволяя выявить тех, кто с наибольшей вероятностью ответит на анакинру. Этот случай иллюстрирует способность ИИ повышать эффективность набора испытуемых, согласовывать участников испытания с механизмом действия препарата и повышать статистическую мощность исследования. В более широком смысле стратификация с помощью ИИ ускоряет набор участников, сокращает количество ручных проверок и повышает показатели успешности испытаний. Ожидается, что по мере развития интеграции данных и интерпретируемости моделей такие подходы станут стандартной практикой при разработке испытаний, особенно для сложных и гетерогенных заболеваний.

Искусственный интеллект улучшает набор пациентов, а его сочетание с технологией цифровых двойников меняет моделирование и дизайн испытаний. Цифровые двойники — виртуальные копии пациентов или популяций, созданные на основе мультиомических, клинических и физиологических данных, позволяют исследователям прогнозировать реакцию до фактического набора пациентов, тем самым поддерживая оценку сценариев и принятие решений, а также снижая затраты и риски. Фармацевтические компании проводят пилотные проекты и постепенно масштабируют эти подходы. Например, компания Sanofi публично сообщила о применении количественной системной фармакологии (QSP) и цифровых двойников пациентов в программе лечения астмы для прогнозирования результатов фазы 1b конкретного нового соединения, что позволило существенно ускорить оценку сценариев и принятие решений¹¹. Кроме того, компании Bayer и AstraZeneca в партнерстве с Altis Labs разработали цифровых двойников на базе ИИ, которые на основе обучения на реальных наборах данных прогнозируют выживаемость в онкологии, а также обеспечивают динамическую стратификацию и улучшение представленности недостаточно изученных субпопуляций¹².

¹¹ Sanofi. Digital “Twinning”: Clinical Trials Powered by AI. 22 May 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.sanofi.com/en/magazine/our-science/digital-twinning-clinical-trials-ai> (дата обращения: 26.12.2025).

¹² Altis Labs launches digital twins for clinical trials with global biopharmaceuticals & leading research institutions. 23 August 2023 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.altislabs.com/news/altis-labs-launches-digital-twins-for-clinical-trials-with-global-biopharmaceuticals-leading-research-institutions> (дата обращения: 26.12.2025).

Несмотря на эти достижения, проблемы остаются. Очень важны высококачественные и разнообразные данные о пациентах, однако пробелы, особенно в отношении этнических меньшинств или педиатрических групп, чреваты риском встраивания предвзятости. Регулирующий контроль также предъявляет высокие требования: протоколы валидации, стандарты соответствия и требования к отказоустойчивости должны быть гораздо строже, чем в потребительском ИИ, учитывая потенциальные последствия неправильных рекомендаций. Тем не менее, оптимизм преобладает. Потoki данных с носимых устройств, генеративный синтез данных и адаптивные механизмы обучения обещают возможность репрезентативного моделирования, ускоренное уточнение моделей и более безопасную и эффективную клиническую разработку.

Помимо набора и моделирования, ИИ революционизирует анализ данных после испытаний. В ходе клинических испытаний генерируются обширные и разнородные наборы данных от лабораторных анализов до записей о симптомах, которые сложно интерпретировать вручную. ИИ позволяет проводить автоматизированный многомерный анализ для выявления скрытых тенденций в эффективности и безопасности.

Инструменты NLP еще больше оптимизируют отчетность, преобразуя необработанные данные испытаний в структурированные документы для регулирующих органов и спонсоров. Автоматизированное создание отчетов об испытаниях не только сокращает время и трудозатраты, но и повышает последовательность и точность, обеспечивая надежную доказательную базу для принятия регуляторных решений.

ИИ постепенно формируется как ключевая сила на всех этапах клинических испытаний: выявление нужных пациентов (стратификация на основе ИИ), прогнозирование результатов испытаний до набора участников (с использованием цифровых двойников) и обеспечение эффективной оценки и отчетности (аналитика на основе НЛП).

Несмотря на продолжающееся существование технических и нормативных проблем, в частности, связанных с разнообразием данных и соблюдением требований, совокупный потенциал этих технологий позволяет ускорить, повысить безопасность и сделать клинические исследования более инклюзивными. В конечном счете испытания, оптимизированные с помощью ИИ, способны переосмыслить фармацевтические исследования и разработки, повысить точность, сократить отсев и ускорив путь от открытия до терапевтического эффекта.

ИИ-технология повышает эффективность производства: автоматизация и интеллект стимулируют технологическое обновление фармацевтических предприятий

В фармацевтическом производстве обеспечение стабильного качества продукции имеет решающее значение. Компания Amgen стала пионером в использовании компьютерного зрения на основе искусственного интеллекта для автоматизированного контроля шприцев и флаконов. После многолетней проверки в Управлении по контролю за продуктами и лекарствами США около 95% соответствующих продуктов компании теперь выпускается с помощью автоматизированного визуального контроля, что значительно сокращает количество ошибок, связанных с человеческим фактором, и повышает эффективность¹³.

Не ограничиваясь контролем качества, объединение технологий искусственного интеллекта и цифрового двойника преобразует производственные процессы. Компания Amgen создала цифровые модели прогнозирования для своих ключевых операционных подразделений, позволяющие проводить виртуальное моделирование, оптимизирующее процессы и поддерживающее принятие решений в области прогнозируемого технического обслуживания. Эти модели помогают заблаговременно выявлять неисправности оборудования, сокращая время простоя и повышая производительность.

ИИ также вносит изменения в нормативную документацию. В компании Amgen семантические графы знаний помогают составлять заявки на получение биологических лицензий (BLA), особенно в разделах, посвященных химии, производству и контролю (CMC). ИИ также автоматизирует ответы на запросы информации (RFI) и запросы котировок (RFQ), извлекая важное содержание из больших наборов документов и создавая готовые к представлению результаты¹⁴. Такая автоматизация упрощает соблюдение требований и снижает операционные усилия.

В совокупности эти приложения демонстрируют, как автоматизация на основе искусственного интеллекта, предиктивная ана-

¹³ *Proffitt A.* Amgen's AI futures: Digital twins, unstructured data, human review. 3 September 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.bio-itworld.com/news/2024/09/03/amgen-s-ai-futures-digital-twins-unstructured-data-human-review> (дата обращения: 26.12.2025).

¹⁴ *Ahluwalia K., Abernathy M.J., Beierle J., Cauchon N.S., Cronin D., Gaiki S., Leonard A., Mady P., McGorry M., Sugrue-Richards K., Xue G.* The future of CMC regulatory submissions: Streamlining activities using structured content and data management // *Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2022. Vol. 111(5). P. 1232–1244. DOI: 10.1016/j.xphs.2021.09.046

литика и интеллектуальная документация переосмысливают фармацевтическое производство, делая процессы более надежными, гибкими и лучше приспособленными к регуляторным требованиям.

ИИ-технология обеспечивает безопасность лекарств: укрепление фармаконадзора и оценка рисков

Надзор за безопасностью лекарственных средств сталкивается с беспрецедентной нагрузкой, связанной с объемом данных: ежегодно FDA получает более двух миллионов сообщений о неблагоприятных событиях. Для решения этой проблемы агентство развивает фармаконадзор на основе ИИ. Одной из ключевых инициатив является платформа визуализации информации (InfoViP), которая использует НЛП и МЛ для оптимизации процесса рассмотрения индивидуальных отчетов о безопасности (ICSR) и усиления выявления сигналов о неблагоприятных лекарственных реакциях¹⁵. Автоматизируя эти трудоемкие процессы, InfoViP расширяет возможности FDA по раннему, оперативному и систематическому выявлению сигналов о неблагоприятных лекарственных реакциях.

ИИ также вносит изменения в стратегии оценки и снижения рисков (REMS), представляющие собой системные регуляторные механизмы обеспечения безопасного использования лекарств с высоким риском. В 2021 г. FDA финансировало MITRE для разработки прототипа с открытым исходным кодом на основе FHIR для интеграции REMS в клинические и аптечные рабочие процессы¹⁶. Такая интеграция позволит врачам выполнять обязательства по REMS в рамках своего клинического рабочего процесса, повышая уровень соответствия, снижая административную нагрузку и улучшая обмен данными.

В совокупности эти разработки подчеркивают растущую роль ИИ в постмаркетинговой безопасности лекарств. Сочетая фармаконадзор на основе НЛП с интеллектуальной интеграцией REMS, регуляторы и регулирующие органы движутся к созданию более проактивной, автоматизированной и взаимодействующей экосистемы безопасности, которая защищает пациентов и одновременно упрощает надзор.

¹⁵ Kreimeyer K., Spiker J., Dang O., De S., Ball R., Botsis T. Deduplicating the FDA adverse event reporting system with a novel application of network-based grouping // Journal of Biomedical Informatics. 2025. Vol. 165. Article 104824. DOI: 10.1016/j.jbi.2025.104824

¹⁶ Neyarapally G.A., Millikan E.D., Manzo C. Implementation and integration of risk evaluation and mitigation strategies into the health care system // Applied Clinical Informatics. 2023. Vol. 14(2). P. 354–355. DOI: 10.1055/s-0043-1767683

Прорывы в разработке антител на основе искусственного интеллекта: точный дизайн и высокоэффективный скрининг

ИИ находится в процессе трансформации конвейеров обнаружения антител, тесно интегрируя ДЛ, анализ одиночных клеток и крупномасштабное молекулярное моделирование. Компания Celsius Therapeutics (позже приобретенная AbbVie) использовала анализ одной клетки + МЛ для идентификации TREM1 как ключевого механистического драйвера воспаления слизистой оболочки, что позволило перевести препарат CEL383 в I фазу лечения воспалительного заболевания кишечника (ВЗК)¹⁷. Платформа Unigen™ компании CompuGen объединила вычислительные методы с экспертной оценкой для открытия новых контрольных точек ILDR2 и PVRIG, что дало возможность получить бапотулимаб и COM-701, причем бапотулимаб был лицензирован компанией Bayer, а COM-701 продвигался через клиническую оценку в самой компании CompuGen¹⁸. DIS® компании HiFiBio объединяет технологии работы с одиночными клетками с аналитикой искусственного интеллекта и предлагает первые в своем классе антитела, уже вошедшие в фазу 1 клинических испытаний¹⁹. Компания Hummingbird Bioscience объединила свою систему mAbHits с модулем искусственного интеллекта mAbPredictAI для картирования функциональных областей белка, в результате чего были получены три первых в своем классе антитела, показавшие безопасность и предварительную эффективность²⁰. Компания BiologicDesign использует запатентованные модели искусственного интеллекта и наборы данных об антителах для разработки молекул с новыми функциями, таких как AU-007, которая перепрограммирует активность интерлейкина-2 для лечения рака и в настоящее время находится в фазе 2 испыта-

¹⁷ AbbVie acquires Celsius Therapeutics. 27 June 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://news.abbvie.com/2024-06-27-AbbVie-Acquires-Celsius-Therapeutics> (дата обращения: 26.12.2025).

¹⁸ CompuGen Ltd. Pipeline. б. г. [Электронный ресурс]. URL: <https://cgen.com/pipeline/> (дата обращения: 26.12.2025).

¹⁹ HiFiBio Therapeutics. HiFiBio Therapeutics to present Phase 1 clinical trial data for two novel immuno-oncology agonists at the 2024 annual meeting of the American Society of Clinical Oncology. 24 May 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://hifibio.com/hifibio-therapeutics-to-present-phase-1-clinical-trial-data-for-two-novel-immuno-oncology-agonists-at-the-2024-annual-meeting-of-the-american-society-of-clinical-oncology/> (дата обращения: 26.12.2025).

²⁰ Hummingbird Bioscience. Pipeline. б. г. [Электронный ресурс]. URL: <https://hummingbirdbioscience.com/pipeline/> (дата обращения: 26.12.2025).

ний²¹. Generate Biomedicines тесно связывает ML с экспериментами для разработки кандидатов, таких как GB-0895 (анти-TSLP), исследуемый при астме²². Другим ярким примером является платформа STEAD компании GV20, которая напрямую извлекает последовательности антител из наборов данных РНК-секвенирования опухолей, что позволяет быстро сопоставить мишени и антитела *in silico*. Благодаря этой стратегии был создан GV20-0251, полностью человеческий Fc-инертный IgG1, нацеленный на IGSF8, который в настоящее время проходит фазу 1/2A испытаний для лечения солидных опухолей²³.

Во всех этих случаях ИИ неизменно сокращает сроки открытия, повышает качество кандидатов и позволяет исследовать новые мишени. Эта область демонстрирует решительный сдвиг, конструирование антител больше не ограничивается методом проб и ошибок, а все больше направляется прогностическим интеллектом, основанным на данных. Эта конвергенция структурной биологии и передовых алгоритмов предвещает новую эру точной терапии антителами.

Персонализированная терапия с использованием ИИ: точное сопоставление пациентов и методов лечения

ИИ ускоряет внедрение точной медицины в практику, особенно для хронических заболеваний с выраженной индивидуальной вариабельностью, таких как ревматоидный артрит (РА). Исследование 2022 г., опубликованное в журнале *Arthritis Care & Research*, показало, как ИИ может направлять терапевтические решения²⁴.

²¹ Aulos Bioscience presents new Phase 2 data for AU-007 demonstrating continued strong anti-tumor activity in advanced cancers at AACR Annual Meeting, 29 April 2025 [Электронный ресурс]. URL: <https://aulosbio.com/aulos-bioscience-presents-new-phase-2-data-for-au-007-demonstrating-continued-strong-anti-tumor-activity-in-advanced-cancers-at-aacr-annual-meeting/> (дата обращения: 26.12.2025).

²² Generate Biomedicines. Our pipeline. б. г. [Электронный ресурс]. URL: <https://generatebiomedicines.com/pipeline> (дата обращения: 26.12.2025).

²³ GV20 Therapeutics. GV20 Therapeutics presents updated phase 1 monotherapy data on GV20-0251 at the ASCO Annual Meeting 2025. 2 June 2025 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.gv20tx.com/news/details/20250602> (дата обращения: 26.12.2025).

²⁴ *Myasoedova E., Athreya A.P., Crowson C.S., Davis J.M., Warrington K.J., Walchak R.C., Carlson E., Kalari K.R., Bongartz T., Tak P.P., van Vollenhoven R.F., Padyukov L., Emery P., Morgan A., Wang L., Weinshilboum R.M., Matteson E.L.* Toward individualized prediction of response to methotrexate in early rheumatoid arthritis: A pharmacogenomics-driven machine learning approach // *Arthritis Care & Research*. 2022. Vol. 74(6). P. 879–888. DOI: 10.1002/acr.24834

Проанализировав 160 генетических локусов, связанных с РА, вместе с демографическими и клиническими характеристиками, исследователи разработали прогностическую модель, которая предсказывала реакцию пациента на метотрексат. Точность модели составила 76% после трех месяцев лечения, в то время как при использовании обычных клинических оценок она достигла лишь 55%. Ключевыми предикторами оказались конкретные варианты, включая rs12446816 и аллели в гене АТ1С. Это первое подтвержденное доказательство того, что искусственный интеллект может помочь в подборе терапии РА, что позволяет предположить, что в будущем врачи смогут определять эффективные методы лечения до их назначения, сводя к минимуму метод проб и ошибок, избегая ненужных побочных эффектов и приближаясь к действительно индивидуальной медицинской помощи.

Разработка лекарств с помощью искусственного интеллекта: уроки неудачного клинического испытания, касающиеся инноваций и структурного разнообразия

Препарат DSP-1181, разработанный совместно компаниями Sumitomo Pharma и Exscientia, стал одной из первых молекул, разработанных искусственным интеллектом и прошедших испытания на людях. Платформа Centaur Chemist™ компании Exscientia обеспечила создание молекул, моделирование ADME и предупреждения о токсичности, а итеративный цикл разработки и проверки, проводимый раз в две недели, позволил сократить отбор кандидатов до 12 месяцев. Препарат перешел к испытаниям фазы 1 в 2020 г., продемонстрировав эффективность процесса проектирования, основанного на искусственном интеллекте²⁵.

Однако DSP-1181 был отменен после фазы 1, несмотря на благоприятный профиль безопасности, что подчеркивает, что ускоренная разработка ИИ сама по себе не гарантирует клинического успеха²⁶. Последующий анализ показал, что DSP-1181 и родственные молекулы, созданные ИИ, имеют большое структурное сходство с галоперидолом, что говорит о том, что ИИ в первую очередь

²⁵ Sumitomo Dainippon Pharma Co., Ltd. Sumitomo Dainippon Pharma and Exscientia joint development new drug candidate created using artificial intelligence (AI) begins clinical study. 30 January 2020 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.sumitomo-pharma.com/news/20200130.html> (дата обращения: 26.12.2025).

²⁶ *Niazi S.K.* Artificial intelligence in small-molecule drug discovery: A critical review of methods, applications, and real-world outcomes // *Pharmaceuticals*. 2025. Vol. 18(9). Article 1271. DOI: 10.3390/ph18091271

оптимизировал работу в рамках известных скаффолдов, а не исследовал новое химическое пространство²⁷. Такой структурный консерватизм, вероятно, ограничивает клиническую эффективность и степень дифференциации результатов.

Несмотря на неудачу, этот случай подчеркивает стратегическую ценность ИИ для ускорения открытий и снижения затрат. Обе компании продолжают расширять свои линейки: Sumitomo Pharma продвигает кандидаты DSP-0038 и DSP-2342 для лечения нервно-психических расстройств, а Exscientia продвигает онкологические программы, такие как GTAEXS617 (ингибитор CDK7) и EXS4318 (ингибитор PKC θ), и сотрудничает с Sanofi по нескольким молекулам, созданными на основе ИИ. Exscientia и Recursion завершили объединение бизнеса в ноябре 2024 г. с целью консолидации активов в области ИИ, а о ходе интеграции было сообщено позднее²⁸.

Опыт DSP-1181 свидетельствует как о перспективах, так и об осторожности: ИИ может радикально ускорить ранние исследования и разработки, но будущий успех зависит от выхода за рамки оптимизации на основе скаффолдов и изучения новых химических пространств для создания действительно дифференцированных терапевтических препаратов.

Заключение

ИИ-технология перестраивает жизненный цикл создания лекарственных препаратов от открытия и испытаний до производства и обеспечения безопасности. Достигнутые результаты реальны, однако носят условный характер, пример DSP-1181 показывает, что скорость без новизны и строгости не обеспечивает трансляции в клинический успех. Граница — это интеграция данных, процессов и управления. Организации должны создавать высококачественные мультимодальные данные и воспроизводимые конвейеры, использовать интерпретируемые, перспективно проверенные модели,

²⁷ CAS Insights. AI drug discovery: Assessing the first AI-designed drug candidates to go into human clinical trials. 23 September 2022 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.cas.org/resources/cas-insights/ai-drug-discovery-assessing-the-first-ai-designed-drug-candidates-to-go-into-human-clinical-trials> (дата обращения: 26.12.2025).

²⁸ Recursion Pharmaceuticals, Inc. Recursion and Exscientia, two leaders in the AI drug discovery space, have officially combined to advance the industrialization of drug discovery. 20 November 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.globenewswire.com/news-release/2024/11/20/2984282/0/en/Recursion-and-Exscientia-two-leaders-in-the-AI-drug-discovery-space-have-officially-combined-to-advance-the-industrialization-of-drug-discovery.html> (дата обращения: 26.12.2025).

согласованные с нормативными требованиями, и сочетать автоматизацию с человеческим надзором и доказательствами реального мира (real-world evidence). При правильном подходе ИИ становится инфраструктурой, сокращающей циклы, повышающей качество и позволяющей применять более безопасные и инклюзивные методы лечения.

Литература

AbbVie acquires Celsius Therapeutics. 27 June 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://news.abbvie.com/2024-06-27-AbbVie-Acquires-Celsius-Therapeutics> (дата обращения: 26.12.2025).

Ahluwalia K., Abernathy M.J., Beierle J., Cauchon N.S., Cronin D., Gaiki S., Lennard A., Mady P., McGorry M., Sugrue-Richards K., Xue G. The future of CMC regulatory submissions: Streamlining activities using structured content and data management // *Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2022. Vol. 111(5). P. 1232–1244. DOI: 10.1016/j.xphs.2021.09.046

Altis Labs launches digital twins for clinical trials with global biopharmaceuticals & leading research institutions. 23 August 2023 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.altislabs.com/news/altis-labs-launches-digital-twins-for-clinical-trials-with-global-biopharmaceuticals-leading-research-institutions> (дата обращения: 26.12.2025).

Aulos Bioscience presents new Phase 2 data for AU-007 demonstrating continued strong anti-tumor activity in advanced cancers at AACR Annual Meeting. 29 April 2025 [Электронный ресурс]. URL: <https://aulosbio.com/aulos-bioscience-presents-new-phase-2-data-for-au-007-demonstrating-continued-strong-anti-tumor-activity-in-advanced-cancers-at-aacr-annual-meeting/> (дата обращения: 26.12.2025).

CAS Insights. AI drug discovery: Assessing the first AI-designed drug candidates to go into human clinical trials. 23 September 2022 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.cas.org/resources/cas-insights/ai-drug-discovery-assessing-the-first-ai-designed-drug-candidates-to-go-into-human-clinical-trials> (дата обращения: 26.12.2025).

Chen X., Roberts R., Liu Z., Tong W. A generative adversarial network model alternative to animal studies for clinical pathology assessment // *Nature Communications*. 2023. Vol. 14. Article 7141. DOI: 10.1038/s41467-023-42933-9

CompuGen Ltd. Pipeline. 6. г. [Электронный ресурс]. URL: <https://cgen.com/pipeline/> (дата обращения: 26.12.2025).

Drug Discovery Online. AI in drug discovery and development — will it live up to the hype? 5 January 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.drugdiscoveryonline.com/doc/ai-in-drug-discovery-and-development-will-it-live-up-to-the-hype-0001> (дата обращения: 26.12.2025).

Generate Biomedicines. Our pipeline. 6. г. [Электронный ресурс]. URL: <https://generatebiomedicines.com/pipeline> (дата обращения: 26.12.2025).

GV20 Therapeutics. GV20 Therapeutics presents updated phase 1 monotherapy data on GV20-0251 at the ASCO Annual Meeting 2025. 2 June 2025 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.gv20tx.com/news/details/20250602> (дата обращения: 26.12.2025).

HiFiBio Therapeutics. HiFiBio Therapeutics to present Phase 1 clinical trial data for two novel immuno-oncology agonists at the 2024 annual meeting of the American Society of Clinical Oncology. 24 May 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://hifibio.com/hifibio-therapeutics-to-present-phase-1-clinical-trial-data-for-two-novel-immuno-oncology-agonists-at-the-2024-annual-meeting-of-the-american-society-of-clinical-oncology/> (дата обращения: 26.12.2025).

Hummingbird Bioscience. Pipeline. б. г. [Электронный ресурс]. URL: <https://hummingbirdbioscience.com/pipeline/> (дата обращения: 26.12.2025).

Insilico Medicine. Insilico Medicine announces positive topline results of ISM001-055 for the treatment of idiopathic pulmonary fibrosis (IPF) developed using generative AI. 12 November 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.prnewswire.com/news-releases/insilico-medicine-announces-positive-topline-results-of-ism001-055-for-the-treatment-of-idiopathic-pulmonary-fibrosis-ipf-developed-using-generative-ai-302302583.html> (дата обращения: 26.12.2025).

Kreimeyer K., Spiker J., Dang O., De S., Ball R., Botsis T. Deduplicating the FDA adverse event reporting system with a novel application of network-based grouping // *Journal of Biomedical Informatics*. 2025. Vol. 165. Article 104824. DOI: 10.1016/j.jbi.2025.104824

Liu Q., Nair R., Huang R., Zhu H., Anderson A., Belen O., Tran V., Chiu R., Higgins K., Chen J., He L., Doddapaneni S., Huang S.-M., Nikolov N.P., Zineh I. Using machine learning to determine a suitable patient population for anakinra for the treatment of COVID-19 under the Emergency Use Authorization // *Clinical Pharmacology & Therapeutics*. 2024. Vol. 115(4). P. 1004–1016. DOI: 10.1002/cpt.3191

Myasoedova E., Athreya A.P., Crowson C.S., Davis J.M., Warrington K.J., Walchak R.C., Carlson E., Kalari K.R., Bongartz T., Tak P.P., van Vollenhoven R.F., Padyukov L., Emery P., Morgan A., Wang L., Weinshilboum R.M., Matteson E.L. Toward individualized prediction of response to methotrexate in early rheumatoid arthritis: A pharmacogenomics-driven machine learning approach // *Arthritis Care & Research*. 2022. Vol. 74(6). P. 879–888. DOI: 10.1002/acr.24834

National Centre for the Replacement, Refinement & Reduction of Animals in Research. £1.6 M awarded to develop a Virtual Second Species. 13 March 2023 [Электронный ресурс]. URL: <https://nc3rs.org.uk/news/ps16m-awarded-develop-virtual-second-species> (дата обращения: 26.12.2025).

Neyarapally G.A., Millikan E.D., Manzo C. Implementation and integration of risk evaluation and mitigation strategies into the health care system // *Applied Clinical Informatics*. 2023. Vol. 14(2). P. 354–355. DOI: 10.1055/s-0043-1767683

Niazi S.K. Artificial intelligence in small-molecule drug discovery: A critical review of methods, applications, and real-world outcomes // *Pharmaceuticals*. 2025. Vol. 18(9). Article 1271. DOI: 10.3390/ph18091271

Proffitt A. Amgen's AI futures: Digital twins, unstructured data, human review. 3 September 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.bio-itworld.com/news/2024/09/03/amgen-s-ai-futures-digital-twins-unstructured-data-human-review> (дата обращения: 26.12.2025).

Recursion Pharmaceuticals, Inc. Recursion and Exscientia, two leaders in the AI drug discovery space, have officially combined to advance the industrialization of drug discovery. 20 November 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.globenewswire.com/news-release/2024/11/20/2984282/0/en/Recursion-and-Exscientia-two-leaders-in-the-AI-drug-discovery-space-have-officially-combined-to-advance-the-industrialization-of-drug-discovery.html> (дата обращения: 26.12.2025).

Richardson P., Griffin I., Tucker C., Smith D., Oechsle O., Phelan A., Stebbing J., Feliciano P. Baricitinib as potential treatment for 2019-nCoV acute respiratory disease // *The Lancet*. 2020. Vol. 395(10223). P. e30–e31. DOI: 10.1016/S0140-6736(20)30304-4

Sanofi. Digital “Twinning”: Clinical Trials Powered by AI. 22 May 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.sanofi.com/en/magazine/our-science/digital-twinning-clinical-trials-ai> (дата обращения: 26.12.2025).

Sumitomo Dainippon Pharma Co., Ltd. Sumitomo Dainippon Pharma and Exscientia joint development new drug candidate created using artificial intelligence (AI) begins clinical study. 30 January 2020 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.sumitomo-pharma.com/news/20200130.html> (дата обращения: 26.12.2025).

U.S. Food and Drug Administration. Coronavirus (COVID-19) Update: FDA Authorizes Drug Combination for Treatment of COVID-19. 19 November 2020 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.fda.gov/news-events/press-announcements/coronavirus-covid-19-update-fda-authorizes-drug-combination-treatment-covid-19> (дата обращения: 26.12.2025).

U.S. Food and Drug Administration. Olumiant (baricitinib) for the treatment of COVID-19 in hospitalized adults requiring supplemental oxygen, non-invasive or invasive mechanical ventilation, or ECMO. 10 May 2022 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.fda.gov/media/143825/download> (дата обращения: 26.12.2025).

U.S. Food and Drug Administration. AnimalGAN initiative. 26 November 2024 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.fda.gov/about-fda/nctr-research-focus-areas/animalgan-initiative> (дата обращения: 26.12.2025).

Xu Z., Ren F., Wang P., Cao J., Tan C., Ma D., Zhao L., Dai J., Ding Y., Fang H., Li H., Liu H., Luo F., Meng Y., Pan P., Xiang P., Xiao Z., Rao S., Satler C., Liu S., Lv Y., Zhao H., Chen S., Cui H., Korzinkin M., Gennert D., Zhavoronkov A. A generative AI-discovered TNiK inhibitor for idiopathic pulmonary fibrosis: A randomized phase 2a trial. August 2025 [Электронный ресурс]. URL: <https://doi.org/10.1038/s41591-025-03743-2> (дата обращения: 26.12.2025).

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность профессору Наталии Сергеевне Григорьевой, факультет государственного управления, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова за профессиональную помощь в подготовке русскоязычной версии данной рукописи.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ:

Фань Фэнхуэй — PhD; главный научный директор, Honghui Pharmaceutical Technology (Beijing) Co., Ltd., Пекин, Китай; профессор, Гонконгский научно-исследовательский технологический институт, Гонконг, Китай; приглашенный профессор, Институт Боя Пекинского университета, Пекин, Китай; e-mail: fenghuihf@163.com

Цяо Цзюань — PhD; специальный исследователь, Исследовательский центр права человека, Сычуаньский университет, Чэнду, Китай; профессор, Гонконгский научно-исследовательский технологический институт, Гонконг, Китай; приглашенный профессор, Институт Боя Пекинского университета, Пекин, Китай; e-mail: qiaojuanscu@163.com

ABOUT THE AUTHORS:

Fan Fenghui — PhD; Chief Scientific Officer, Honghui Pharmaceutical Technology (Beijing) Co., Ltd., Beijing, China; Professor, Hong Kong Research Institute of Technology, Hong Kong, China; Visiting Professor, Boya Institute, Peking University, Beijing, China; e-mail: fenghuihf@163.com

Qiao Juan — PhD; Special researcher, Human Rights Law Research Center, Sichuan University, Chengdu, China; Professor, Hong Kong Research Institute of Technology, Hong Kong, China; Visiting Professor, Boya Institute, Peking University, Beijing, China; e-mail: qiaojuanscu@163.com