

کشف دارو و هوش مصنوعی؛ مزایا و چالش‌های پیش‌رو

سعید عاقبت‌بخیر (دانشجوی دکتری)*

۱ - دانشکده داروسازی، دانشگاه علوم پزشکی تهران، تهران، ایران

سعید عاقبت‌بخیر: saeedaghebat@gmail.com

چکیده

هدف: کشف دارو فرآیندی پیچیده و زمان‌بر است که به منابع قابل توجهی نیاز دارد. هدف از این مطالعه بررسی پتانسیل هوش مصنوعی در کشف دارو است.

روش جستجو: پایگاه‌های اطلاعاتی مختلفی از جمله PubMed، Scopus و Web of Science برای مقالات منتشر شده بین سال‌های ۲۰۱۵ تا ۲۰۲۲ در مورد نقش هوش مصنوعی در کشف دارو جستجو شدند. معیار ورود مقالات به مطالعه استفاده از هوش مصنوعی در کشف داروهای جدید بود.

یافته‌ها: ما چندین مطالعه را شناسایی کردیم که اثربخشی هوش مصنوعی را در کشف دارو نشان داد. استفاده از تکنیک‌های هوش مصنوعی برای پیش‌بینی میل اتصال مولکول‌های کوچک به پروتئین‌های هدف، شناسایی اهداف دارویی جدید، و بهینه‌سازی کاندیدهای دارویی به کار گرفته شده است. استفاده از هوش مصنوعی هم‌چنین زمان و هزینه مرتبط با کشف دارو را به میزان قابل توجهی کاهش داده است. در حالی که هوش مصنوعی در کشف داروها نویدبخش بوده است، هنوز چندین چالش وجود دارد که باید مورد توجه قرار گیرد. یکی از چالش‌های اصلی کمبود داده‌های با کیفیت بالا است. مجموعه داده‌های کشف دارو اغلب کم و مغرضانه هستند. چالش دیگر تفسیرپذیری مدل‌های هوش مصنوعی است.

نتیجه‌گیری: استفاده از تکنیک‌های هوش مصنوعی می‌تواند منجر به کشف داروهای جدیدی شود که مؤثرتر بوده و عوارض جانبی کمتری دارند. داروی DSP-1181 که با استفاده از هوش مصنوعی (AI) ایجاد شده است، وارد فاز یک کارآزمایی بالینی برای درمان اختلال وسواس فکری-اجباری (OCD) شده است. DSP-1181 آگونیست گیرنده سروتونین ۵-HT_{1A} با اثر طولانی و قوی است. با این حال، هنوز چندین چالش وجود دارد که باید قبل از این که هوش مصنوعی به ابزار اصلی در کشف دارو تبدیل شود، مورد توجه قرار گیرد. تحقیقات بیشتری برای رسیدگی به این چالش‌ها و درک کامل پتانسیل هوش مصنوعی در کشف دارو مورد نیاز است.

واژه‌های کلیدی: هوش مصنوعی، کشف دارو، AI، دارو



Drug discovery and artificial intelligence; Advantages and challenges ahead

Saeed Aghebat-Bekheir (PhD student)^{1*}

1- School of Pharmacy, Tehran University of Medical Sciences, Tehran, Iran

Saeed Aghebat-Bekheir: saeedaghebat@gmail.com

Introduction: Drug discovery is a complex and time-consuming process that requires significant resources. The purpose of this study is to investigate the potential of artificial intelligence in drug discovery

Search Method: Various databases, including PubMed, Scopus, and Web of Science, were searched for articles published between 2015 and 2022 on AI's role in drug discovery. The criteria for entering the articles into the study were the use of artificial intelligence such as machine learning and deep learning in the discovery of new drugs.

Results: In our review, we identified several studies that demonstrated AI's effectiveness in drug discovery. The use of AI techniques has been applied to predicting the binding affinity of small molecules to target proteins, identifying novel drug targets, designing new drug molecules, and optimizing drug candidates. Using AI has also reduced the time and cost associated with drug discovery significantly. While AI has shown promise in drug discovery, there are still several challenges that need to be addressed. One of the main challenges is the lack of high-quality data. Drug discovery datasets are often small and biased, which can limit the effectiveness of AI techniques. Another challenge is the interpretability of AI models.

Conclusion: AI has the potential to revolutionize the drug discovery process. The use of AI techniques can lead to the discovery of new drugs that are more effective and have fewer side effects. DSP-1181, which was created using artificial intelligence (AI), has entered a Phase I clinical trial for the treatment of obsessive-compulsive disorder (OCD). DSP-1181 is a long-acting, potent serotonin 5-HT_{1A} receptor agonist. However, there are still several challenges that need to be addressed before AI can become a mainstream tool in drug discovery. Further research is needed to address these challenges and to fully realize the potential of AI in drug discovery.

Keywords: Artificial Intelligence, Drug Discovery, AI, Drug

