SMART Закупка

14 апреля 2021

Фармацевтические компании обращаются к искусственному интеллекту для ускорения разработки лекарств

Традиционный метод открытия новых лекарств начинается с тестирования многих десятков тысяч молекул-кандидатов. После кропотливого анализа в течение многих месяцев лишь некоторые из них считаются безопасными и достаточно эффективными, чтобы начать клинические испытания на людях.

Клинические испытания дороги и требуют поиска достаточного количества подходящих пациентов. Сами испытания требуют времени, и задержки из-за заметных побочных эффектов и возможных побочных реакций являются обычным явлением. Кроме того, компании должны инвестировать в оборудование для диагностики и мониторинга, а также в другие технологии.

По данным Statista, в 2019 году расходы фармацевтической отрасли на исследования и разработки составили 186 миллиардов долларов, а продажи фармацевтических препаратов в США к третьему кварталу 2019 года должны были достичь 491 миллиарда долларов .

Некоторые из аспектов разработки лекарств включают определение возможностей (или целей) для доставки лекарств, дизайн молекулы лекарственного средства, статистический анализ результатов, обнаружение пациентов и оборудование для мониторинга и программное обеспечение. Снижение стоимости и времени клинических испытаний позволит производителям доставлять новые лекарства быстрее и с меньшими затратами.

Искусственный интеллект (ИИ) сейчас используется многими фирмами в процессе разработки лекарств . В самом деле, его также можно косвенно использовать в параллельных усилиях, таких как анализ научных статей.

Несмотря на положительный эффект от использования ИИ, есть некоторые потенциальные недостатки. Могут возникнуть юридические проблемы в отношении «обучающих данных», используемых компонентами машинного обучения ИИ для обучения моделей. Некоторые наборы данных могут содержать явные или неявные предубеждения, такие как неслучайные наборы пациентов, ограниченные или отсутствующие категории или другие, например географически ориентированные.

Узнать больше: как ИИ меняет финансы, здравоохранение, HR и маркетинг.

Разработка лекарств получила удар в руку от ИИ
Boston Consulting Group считает, что следующим этапом цифровой трансформации станет масштабное внедрение ИИ. Это необходимо для того, чтобы фармацевтические компании оставались конкурентоспособными.

В 2019 году Eli Lilly заключила партнерское соглашение с Atomwise. Цель заключалась в том,

чтобы ускорить процесс открытия лекарств путем «оказания помощи академическим и коммерческим ученым в открытии новых лекарств». Технология, разработанная Atomwise, основана на сверточных нейронных сетях .

По словам Atomwise , «самая большая проблема на сегодняшний день в доклиническом открытии и разработке лекарств - это определение лекарства-кандидата, которое было бы одновременно эффективным и безопасным. Это проблема, с которой сталкиваются исследователи в каждой фармацевтической компании, большой или маленькой, а также в тысячах исследовательских институтов по всему миру. ... Наша технология использует статистический подход, который извлекает информацию из миллионов экспериментальных измерений сродства и тысяч белковых структур для прогнозирования связывания малых молекул с белками. Этот фундаментальный инструмент позволяет химикам заниматься обнаружением попаданий, оптимизацией лидов и прогнозированием токсичности с непревзойденной точностью и точностью ».

Консорциум по машинному обучению для фармацевтических открытий и синтезов (MLPDS) Массачусетского технологического института (MIT) обеспечивает обмен данными о дизайне молекул для нескольких фармацевтических компаний, таких как Eli Lilly, AstraZeneca и GlaxoSmithKline.

Другая компания, Insilico Medicine , использует ИИ как часть управляемого программным обеспечением конвейера для создания новых молекул для множества целей, специально разработанных для быстрого создания потенциальных лекарств. Insilico является мировым лидером в использовании искусственного интеллекта при открытии лекарств и опубликовала в Nature Biotechnology статью, в которой описывается использование своего продукта на основе искусственного интеллекта, который разработал несколько соединений для лечения таких заболеваний, как фиброз. Срок исполнения составил всего 21 день.

В 2020 году нью-йоркская компания Schrodinger при поддержке инвестора хедж-фонда Дэвида Шоу и Билла Гейтса стала публичной с целью использовать революционный ИИ в молекулярном моделировании с использованием машинного обучения и аналитики на основе физики. По заявлению компании, ее платформа стала отраслевым стандартом для молекулярного моделирования.

Узнать больше: может ли цепочка поставок Amazon в сфере здравоохранения подорвать отрасль?

ИИ меняет клинические испытания
Оксфордская компания Exscientia в сотрудничестве с японской фармацевтической фирмой Sumitomo Dainippon Pharma разработала разработанный искусственным интеллектом препарат для лечения обсессивно-компульсивного расстройства (ОКР), который в этом году войдет в клинические испытания на людях.

Общее время разработки было сокращено с четырех и более лет до 12 месяцев с использованием ИИ. Их алгоритмы смогли генерировать десятки миллионов потенциальных молекул и использовать модели машинного обучения (ML), чтобы решить, каких кандидатов синтезировать и тестировать.

IBM создала набор алгоритмов машинного обучения под названием RoboRXN . В этом пакете используется ИИ, он выполняется в облаке и может производить молекулы в удаленной лаборатории без вмешательства человека. Процесс полностью управляется данными. Как только в пакете машинного обучения будет достаточно данных, он сможет самостоятельно обнаружить, как создавать процедуры синтеза. Как создавался пакет - интересная история.

В 2017 году IBM начала разрабатывать модели машинного обучения для прогнозирования химических реакций. После первоначальной разработки и тестирования в конце 2018 года они запустили в IBM Cloud бесплатный сервис под названием RXN for Chemistry . По сути, он использует машинное обучение для прогнозирования наиболее вероятного результата химической реакции путем обучения большому количеству химических рецептов и обучения последовательностям шагов, которые могут создавать определенные молекулы. Спустя два года IBM заявляет, что RXN для химии «по-прежнему является наиболее эффективным методом искусственного интеллекта на основе данных для прогнозирования прямых реакций с точностью более 90%, входящей в первую 1-ю позицию… 15 000 пользователей сгенерировали более 760 000 прогнозов химических реакций с помощью машинного обучения. за последние два года ».

В 2019 году IBM в сотрудничестве с Пизанским университетом, Италия, интегрировала ретросинтетическую архитектуру в инструмент RXN и была представлена в Nature Communications .

Узнать больше: Соблюдение нормативных требований, аварийное восстановление и устойчивость бизнеса: облачные вычисления для здравоохранения

ИИ вторгается в разработку вакцин
ИИ может быть реализован как часть разработки, тестирования и внедрения вакцины. Алгоритмы машинного обучения могут быть обучены на исторических данных, используемых для разработки вакцины в случаях Эболы, H1N1 и различных вакцин против гриппа. Используя модели, обученные на этих данных, ИИ может помочь в анализе потенциальных молекул-кандидатов и создании рецептов их синтеза.

После первоначальных испытаний на животных ученые могут использовать ИИ для отбора, мониторинга и анализа данных клинических испытаний на людях. Наконец, ИИ - очевидный выбор для анализа результатов тестов и более поздних программ вакцинации для прогнозирования тенденций, выявления закономерностей и статистического анализа результатов.

Перед лицом глобальной угрозы IBM Watson Health развернула свою IBM Clinical Development (ICD), унифицированную облачную платформу управления данными для поддержки и масштабирования клинических испытаний COVID-19 в июне. «Пандемия COVID-19 представляет собой беспрецедентный глобальный кризис общественного здравоохранения, и растет чувство безотлагательности разработки безопасных и эффективных методов лечения, поскольку уровень инфицирования продолжает расти тревожными темпами», - сказала Мэри Варгезе Прести , вице-президент по наукам о жизни. IBM Watson Health.

Совершенно очевидно, что ИИ станет важным технологическим усовершенствованием не только для разработки лекарств, но и для других коммерческих и промышленных химических процессов . Но это не единственная его роль, которая может изменить правила игры.

ИИ можно использовать для создания автономной аппаратной и программной инфраструктуры, объединяющей локальные и удаленные базы данных, сетевые и облачные технологии. Это может быть особенно полезно во время текущей пандемии , поскольку работники могут оставаться дома, помогая алгоритмам искусственного интеллекта дистанционно прогнозировать и выполнять химические реакции и создание молекул.

Будущее здравоохранения вполне может зависеть от способности фармацевтических компаний сотрудничать с технологическими партнерами, хорошо разбирающимися в искусственном интеллекте.

Ссылка на статью: Фармацевтические компании обращаются к искусственному интеллекту для ускорения разработки лекарств