

Разработка новых лекарств традиционно занимает много времени и требует значительных финансовых вложений. Однако ученые Университета Ватерлоо создали искусственный интеллект (ИИ) Imagand, который может значительно ускорить этот процесс.

Imagand — это генеративная модель ИИ, способная анализировать уже существующие данные о лекарствах и предсказывать их свойства. Модель обучалась на данных о ранее проверенных препаратах, что позволило ей точно предсказывать важные характеристики лекарств, подтвержденные лабораторными исследованиями.

Исследования, опубликованные на платформе arXiv, демонстрируют, как машинное обучение может ускорить процесс создания новых препаратов. Обычная разработка лекарства требует огромных затрат — от 2 до 3 миллиардов долларов и занимает более десяти лет. С помощью ИИ этот процесс можно значительно сократить и удешевить.

Основной задачей исследователей является нахождение способов, как искусственный интеллект может помочь в быстром тестировании миллионов молекул и их взаимодействии с различными мишениями. Это позволяет ускорить выбор наиболее перспективных кандидатов.

Кроме того, одним из главных вызовов в разработке медикаментов является понимание того, как лекарство воздействует на организм и как оно может взаимодействовать с другими препаратами. Imagand может помочь в предсказании таких взаимодействий, что позволит избежать нежелательных побочных эффектов и улучшить точность медицинских рекомендаций.