

В пресс-службе университета ИТМО сообщили, что ученые вуза разработали алгоритм на основе искусственного интеллекта (ИИ), который значительно ускоряет поиск веществ для создания лекарств против аутоиммунных заболеваний. Метод сокращает время исследований с нескольких лет до нескольких дней.

Алгоритм предназначен для поиска ингибиторов белка Syk, играющего ключевую роль в развитии иммунной тромбоцитопении — заболевания, вызывающего нарушения свертываемости крови. С помощью технологии уже обнаружено 139 перспективных молекул-кандидатов для будущих препаратов.

Традиционные методы поиска требуют ручного тестирования тысяч соединений, что занимает годы. Новый подход автоматизирует процесс, используя машинное обучение для генерации молекул с заданными свойствами. Это особенно актуально, поскольку существующие препараты, такие как фостаматиниб, часто вызывают побочные эффекты, отметили в пресс-службе.

Разработка выполнена в Центре искусственного интеллекта в химии ИТМО. В ближайших планах ученых — экспериментальная проверка эффективности найденных соединений и адаптация метода для других терапевтических целей. Технология может революционизировать процесс создания лекарств, сделав его быстрее и экономичнее.