Medical Science Journal of Islamic Azad University Vol. 34, No. 2, Summer 2024 REVIEW ARTICLE

The use of artificial intelligence (AI) in pharmacology and the process of drug discovery

Pouyan Pishva[1], Zahra Mousavi[1]

[1]Department of Pharmacology and Toxicology, Faculty of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, Tehran Medical Sciences, Islamic Azad University (IAUPS), Tehran, Iran

[Downloaded from tmuj.iautmu.ac.ir on 2026-06-28]

[DOR: 20.1001.1.10235922.1403.34.2.1.2]

[DOI: 10.61186/iau.34.2.105]

Abstract

Background: The invention of artificial intelligence has changed the way of life in general. Currently, artificial intelligence is used throughout the pharmacology research and the field of drug discovery, and this technology has the power to revolutionize the drug discovery process and improve efficiency, accuracy, and time of process.

Materials and methods: In this review article, the results of the published articles were systematically analyzed into the topics of artificial intelligence application in pharmacology, drug industry and drug discovery. The information obtained from the above articles was also classified and reviewed in the same order.

Results: The review of 88 revealed the benefits of using artificial intelligence including the expansion and improvement of structures in the drug design process (such as the drug INS018-055 for the treatment of pulmonary fibrosis), better prediction of the effect of the ligand on the receptor, and better cooperation of the health care providers. Disadvantages were the problems of scientific decision-making with artificial intelligence, ethical concerns in the field of pharmaceuticals and recognition of the limitations of approaches based on artificial intelligence. Strengthening neural networks of databases, integration of artificial intelligence with traditional experimental methods, as well as the use of in silico computer tools facilitate the possibility of solving problems.

Conclusion: The optimal use of artificial intelligence approaches will lead to the acceleration of the drug discovery process, therefore, it is necessary to carry out more studies related to the effect of artificial intelligence in pharmaceutical research.

Keywords: *Artificial intelligence, Pharmacology, Data analysis, Drug discovery.*

Cited as: Pishva P, Mousavi Z. The use of artificial intelligence (AI) in pharmacology and the process of drug discovery. Medical Science Journal of Islamic Azad University, Tehran Medical Branch 2024; 34(2): **105-111.**

Correspondence to: Zahra mousavi
Tel: *+98 09125081304*
E-mail: mosavi50@yahoo.com
ORCID ID: 0000-0001-6524-491X
Received: 19 Nov 2023; **Accepted:** 28 Dec 23

مجله علوم پزشکی دانشگاه آزاد اسلامی
دوره ۳۴، شماره ۲، تابستان ۱۴۰۳، صفحات ۱۰۵ تا ۱۱۱

Review Article

بررسی استفاده از هوش مصنوعی در داروشناسی و روند کشف دارو

سید پویان پیشوا[1]، زهرا موسوی[1]

[1]گروه فارماکولوژی و سم شناسی، دانشکده داروسازی و علوم دارویی، علوم پزشکی تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

چکیده

سابقه و هدف: *ابداع هوش مصنوعی شیوه زندگی را به طور کلی دستخوش تغییر کرده است. در حال حاضر هوش مصنوعی در سراسر زنجیره تحقیقات فارماکولوژی و حوزه کشف دارو استفاده می‌شود و این فن‌آوری توان لازم را دارد که فرآیند کشف دارو را متحول کند و کارایی، دقت و سرعت را بهبود ببخشد.*

روش بررسی: *در این مقاله مروری، نتایج مقالات منتشر شده دسته بندی و به طور نظام مند به گروه های کاربرد هوش مصنوعی در فارماکولوژی، صنعت دارو و کشف دارویی تقسیم شدند و مورد تحلیل قرار گرفتند. اطلاعات حاصل بدست آمده از مقالات فوق نیز به همین ترتیب طبقه بندی و مورد بررسی قرار گرفت.*

یافته‌ها: *یافته‌ها حاصل از بررسی ۸۸ مقاله، بیانگر آن است که مزایای استفاده از هوش مصنوعی عبارت از گستردگی و بهبود ساختارها در فرآیند طراحی دارو (مانند داروی INS018_055 برای درمان فیبروز ریوی)، پیش بینی بهتر اثر لیگاند بر رسپتور و همکاری بهتر تیم درمان هستند و مضراتی هم مانند مشکلات تصمیم‌گیری علمی با هوش مصنوعی، نگرانی‌های اخلاقی در حوزه داروسازی و شناخت محدودیت‌های رویکردهای مبتنی بر هوش مصنوعی مورد اشاره قرار گرفتند. تقویت شبکه‌های عصبی پایگاه داده‌ها، ادغام هوش مصنوعی با روش‌های تجربی سنتی و همچنین استفاده از ابزارهای درون رایانه‌ای In silico امکان حل مشکلات را تسهیل می‌کند.*

نتیجه‌گیری: *استفاده بهینه از رویکردهای هوش مصنوعی به تسریع فرآیند کشف دارو منتهی خواهد شد؛ از این رو انجام مطالعات بیشتر مرتبط با تاثیر هوش مصنوعی در تحقیقات دارویی امری ضروری است.*

واژگان کلیدی: *داروشناسی، ارزیابی اطلاعات، هوش مصنوعی، کشف دارو.*

مقدمه

امروزه هوش مصنوعی کاربردهای متنوعی در حوزه دارو ، به ویژه داروشناسی پیدا کرده‌است. در حوزه فارماکولوژی، پیش‌بینی تاثیر ساختارها بر گیرنده‌ها و اتصال لیگاندها و گیرنده‌ها براساس شباهت ساختاری و سینتیک آن و همچنین در حوزه سم‌شناسی، پیش‌بینی نتایج سمی و پیامدهای احتمالی یک مولکول مورد بررسی قرار گرفته‌است (۱ ، ۲).

هوش مصنوعی ماشینی است که می‌تواند رفتار انسان را در ارزیابی اطلاعات تقلید کند. ارزیابی زبانی و استدلالی از جمله راهبردهای به کار رفته توسط هوش مصنوعی است (۳). هوش مصنوعی از مجموعه خاصی از قواعد محاسباتی برای تصمیم‌گیری در زمینه درمان استفاده می‌کند. هوش مصنوعی به همین دلیل از مبانی آماری گسترده‌ای استفاده می‌کند و قادر است قابلیت‌های مختلف انسانی از جمله ادراک، کسب دانش، تحلیل و ارایه را به شیوه‌ای پیچیده به اجرا درآورد (۴). آموزش اطلاعات از طریق سازماندهی متناسب پایگاه داده‌ها صورت می‌گیرد. یک پایگاه اطلاعاتی بزرگ می تواند توسط هوش مصنوعی مورد استفاده قرار گیرد، و اگر این پایگاه دانش

آدرس نویسنده مسئول: تهران، دانشگاه آزاد اسلامی، علوم پزشکی تهران ، دانشکده داروسازی و علوم دارویی، گروه فارماکولوژی- سم شناسی، زهرا موسوی (**email:** mosavi50@yahoo.com)
ORCID ID: 0000-0001-6524-491X
تاریخ دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۸/۲۸
تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۲/۱۰/۷

[Downloaded from tmuj.iautmu.ac.ir on 2026-06-28]
[DOR: 20.1001.1.10235922.1403.34.2.1.2]
[DOI: 10.61186/iau.34.2.105]

چند برابر شود، ممکن است نتایج مفید تری برای استفاده کنندگان فراهم شود (۲).

سیستم مطالعه و یادگیری عمیق از جمله استانداردهای کنترل رکوردها از کاربردهای این فن‌آوری نوین است. دانش ماشینی به مدل های الگوریتمی کمک می کند و ارزیابی آماری را با استفاده از آماره های محدود انجام می دهد. یادگیری عمیق با الگوها و شبکه گفتگو از آمار و خروجی معادلاتی با مدل‌های زبانی سر و کار دارد (۵).

آگاهی و شناخت عمیق هوش مصنوعی روشی است که در زندگی عادی به کار می‌رود؛ به عنوان مثال، زمانی که عبور از خیابان تصمیم گیری می‌شود، برآورد بسیار خوبی از تصمیم نهایی به دست خواهد آمد. در نتیجه علوم دارویی نیز از این قاعده مستثنی نیست و می توان از یادگیری عمیق برای روش‌های تشخیصی و درمانی استفاده کرد. هوش مصنوعی، اشتباهات کمتری را در کشف تشخیص آسیب‌شناسی و عکس برداری از پرتونگاری‌ها نشان می‌دهد. کشف و طراحی دارو، توسعه محصول، توسعه فرآیند تولید، تعیین دوز، شخصی سازی داروها، تصویربرداری علمی، تحلیل الگوی بیان ژن، پیش‌بینی اپیدمی بیماری، نانوپزشکی، نانوانفورماتیک و غیره از جمله کاربردهای این فناوری است (۸-۶).

هوش مصنوعی را می‌توان توسط کارکنان تیم بالینی از جمله پزشکان، داروسازان، محققان، مدیران سازمانی، قانون گذاران و بسیاری دیگر برای حل مساله و تصمیم گیری مورد استفاده قرار داد.

نیاز به تجزیه و تحلیل تاثیر هوش مصنوعی بر تحقیقات و همچنین جمع اوری اطلاعات برای تحقیق در مورد تاثیر ان احساس می‌شود(۱۰).

از این رو، در این مقاله ارزیابی، تلاش شده‌است تا با تحلیل مطالعات انجام‌شده در مورد فن‌آوری هوش مصنوعی به ویژه در حوزه داروشناسی، یافته‌های پژوهشگران به طور نظام مند بررسی شود.

داروشناسی

هوش مصنوعی در علم فارماکولوژی به طور گسترده‌ای مورد توجه قرار گرفته‌است. هوش مصنوعی با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی و شناخت عمیق می‌تواند کاربردهای جدیدی را در تحقیقات دارویی ارائه نماید. نرم‌افزاری که می‌تواند در سطحی پیچیده تجزیه و تحلیل تصاویر رادیولوژی، ارزیابی بیماری‌های قلبی و بررسی خطاهای نسخه‌نویسی را انجام دهد (۱۱،۱۲). نرم‌افزارهای مبتنی بر هوش مصنوعی می‌توانند به عنوان یک مشاور شخصی، پیشنهاداتی را برای مبتلایان و یا مصرف کنندگان مواد مخدر فراهم آورند (۱۳). بخش مهم در فرآیند بهبود دارو، بررسی عناصر درمانی آن است. هر گونه شکست در این مرحله یک ضرر برای سیستم مالی و همچنین اتلاف زمان است. بنابراین، هر گونه شکست در سطح درمان افراد بیمار و نظارت ناکارمد نیز می تواند منجر به تلفات چشمگیر شود. بنابراین، برای ارتقای این بررسی‌ها، فناوری مبتنی بر هوش مصنوعی و با امکان پیش‌بینی صحیح‌تر در سطح طراحی پدیدار شده است (۱۴،۱۵). تداخلات دارویی یکی از مهم‌ترین مشکلات بیماران است. با استفاده از هوش مصنوعی پس از بررسی شرح‌حال بیمار، می‌توان بهترین دارو را برای بیمار تجویز کرد و یا اعتبار آن را تایید کرد. این فناوری برای عملکردهای تحقیقاتی برای تولید دارو استفاده می شوند که می توانند اثرات کارآزمایی بالینی را پیش بینی کنند که ۰۵۵_۰۱۸INS برای اولین بار، دارویی طراحی شده توسط هوش مصنوعی است که برای درمان فیبروز ریوی ایدیوپاتیک وارد مرحله میانی آزمایش علمی شده و برای شروع بخش دوم کارآزمایی بالینی تاییدیه دریافت کرده‌است(۱۶). این سیستم میتواند استانداردها را بدون پروتکل‌های پیچیده برای مرتب‌سازی و تجزیه و تحلیل پروفایل‌ها ترکیبات برای یافته‌های علمی برخی از مدل‌های مبتنی بر(Deep Learning (DL ، اندازه‌گیری کند. هدف از پیشرفت‌های متعدد ایجاد یک چارچوب مجازی برای دسته بندی یافته‌های فیزیولوژیکی و پاتولوژیک به منظور تقلید از ساخت یک سیستم است که ممکن است به طبقه بندی رژیم‌های دارویی، پیش‌آگهی و بهبود اثربخشی درمان کمک کند (۱۷). هدف اصلی در فارماکولوژی، اتصال لایه‌های تحلیلی مبتنی بر تکنیک توسعه دارو است، که جمع‌آوری یافته های وابسته را در هر مرحله ممکن می سازد، اما دامنه کاربردی هوش مصنوعی (ML(Machine Learning در سطوح گوناگون را دشوار می‌سازد (۱۸). رویکردهای جدید ممکن است با ادغام داده‌های چندوجهی مرتبط با سن و جنس را تسهیل کند که به روش‌های ساده، کم تهاجمی و مقرون به صرفه برای ردیابی نشانگرهای زیستی یکپارچه پیری در انسان و انجام تجزیه و تحلیل ویژگی‌های متقاطع منجر می‌شود (۴۰).

صنعت داروسازی

قرارگیری اطلاعات روش ساخت و مدیریت آنها در داخل ساختار شبکه‌ها و ابزارهای هوش مصنوعی می‌تواند منجر به افزایش بهره‌وری و رضایت از محصول در کارخانه های دارویی شود (۱۹). به عنوان مثال، با استفاده از مفاهیم طراحی امکان

[Downloaded from tmuj.iautmu.ac.ir on 2026-06-28]
[DOR: 20.1001.1.10235922.1403.34.2.1.2]
[DOI: 10.61186/iau.34.2.105]

شناسایی و پیش بینی اثر عوامل موثر در خط تولید محصولات دارویی امکان پذیر است.

نرم افزارهای خاصی که ممکن است قادر بـه تصـمیم‌گیری در درجه اول براساس یافته های علمی از پیش تعیین‌شده باشند، ممکـن اسـت در مـواردی همـراه بـا طراحـی و بهینه‌سـازی فرمولاسیون داروها، یا حتی با اتصال نرم افزار بـه یـک پایگـاه داده، اطلاعـات ایـن پایگـاه را از منظـر دانـش فنـی درک و استنتاج کنند (۲۰). حلالیت، نفوذپذیری و پایداری شکل دارو را می توان بـا اسـتفاده از هـوش مصـنوعی در داخـل شـرکت داروسازی اندازه‌گیری کرد (۲۱). هوش مصنوعی با اسـتفاده از فناوری نانو کارکرد درمانی مناسبی خواهـد داشـت. نمونـه آن استفاده از ریزتراشه‌ها و نانوربات‌ها برای انتقال و رسـاندن دارو در بیماری‌های مزمن مانند دیابـت اسـت کـه آن را مـی‌تـوان توسعه داد (۲۲). هوش مصـنوعی بـا پـردازش ایـن اطلاعـات، نتیجه ای ارائه می‌دهد که کدام دارو و کارآزمایی بـالینی بـرای هر بیمار با خصوصیات منحصر بـه فـرد وی بـا بررسـی بانـک نمونه های ژنتیکی خواهد بود.

کشف دارو

بهبود هوش مصنوعی به دلیل استفاده بهتـر از منـابع موجـود، می تواند تاثیر بسزایی در کشف و بهبود داروها داشته‌اسـت. بـا کمک نرم‌افزار و الگـوریتم هـای مبتنـی بـر هـوش مصـنوعی، موسسات تحقیقاتی می‌توانند هزینه‌های مربـوط بـه اثربخشـی لیگاند دارو در گیرنده را پیش‌بینی کنند و کاهش دهنـد (۲۳). ناکارآمدی داروی طراحی‌شده و هزینـه بـالای فرآینـد و روش کشف دارو با استفاده هوش مصنوعی تغییر خواهد کرد، چنـان کـه ایـن فنـاوری از سـطح یـافتن سـاختارهای جدیـد بـرای غربـالگری و پـردازش آنهـا و تشـخیص اتصـالات مولکـول بـه گیرنده آغاز می‌شود و می‌تواند مدت طولانی مطالعات و توسعه دارو را کوتاه کند (۲۴). علاوه بر این، مولکول به‌دست‌آمده کـه امکان دارد با شکست در مطالعات علمی مواجه شود با استفاده از هوش مصـنوعی ایـن خطـر بـه حـداقل رسـیده و ریسـک سرمایه‌گذاری در مطالعات را کـاهش می‌دهـد و بهبـود پـیش بینی و بهینه‌سازی اثرات را فراهم خواهد ساخت. با اسـتفاده از داکینگ مولکولی، یافتن شکل مطلوب در پایگاه‌های اطلاعـاتی و اندازه‌گیری برهمکنش دارو - گیرنـده بـا اسـتفاده از برنامـه نرم‌افزاری و انتظار تاثیر آن در گیرنده امکـان پـذیر اسـت، بـه طوری که ترکیب موثرتر را از نظر اثر بخشـی و کـاهش اثـرات جانبی پیدا می کند (۲۵). یکی از فرصت‌های اصلی ایجاد شده با هوش مصنوعی در کشف دارو، استفاده مجدد از ساختارهای دارویی و خصوصیات فیزیکوشـیمیایی آنهـا بـا بهـره گیـری از مجموعه داده‌های فراوانی است که از آزمایش‌های بیان ژن در دسترس است. هوش مصنوعی به طور جـامع بـرای طراحـی و افزایش مسیر تشخیص، مداخله درمـانی و پـیش بینـی مـورد استفاده قرار می گیرد. این مسیر باعث شناسایی عوامـل خطـر برای بیماری هـای پیچیـده ماننـد سـرطان، بـا انـدازه گیـری تغییرپذیری در ژنها و عملکرد آنها شده است. همچنین از ایـن روش برای کشف بیومارکرها استفاده می شـود کـه مـی توانـد برای طبقه بندی بیمـار براسـاس خطـرات احتمـالی بیمـاری، پیش بینی و یا پاسخ به درمـان بـه کـار گرفتـه شـود. توسـعه نشانگرهای زیستی(بیومارکرها) و حتی طراحی جدید رمزگـذار خودکار برای نسل جدید ترکیبات ضد سـرطانی امیدوارکننـده است (۴۰).

مواد و روشها

مطالعات گوناگونی در مورد کارایی هوش مصنوعی در حوزه فارماکولوژی و سم شناسی انجام شده است.

برای جستجوی مقالات از سایت‌های معتبر علمی Pubmed، Scopus و Science Direct به عنوان منبع جستجو استفاده شد. کلمات کلیدی مانند artificial intelligence، insillico pharmacology و drug discovery مورد استفاده قرار گرفت. یافته‌های حاصل از بررسی ۸۸ مقاله که به طور نظام مند به گروه های کاربرد هوش مصنوعی در فارماکولوژی، صنعت دارو و کشف دارویی تقسیم شدند مورد تحلیل قرار گرفتند. اطلاعات حاصل بدست آمده از مقالات فوق نیز به همین ترتیب طبقه بندی و مورد بررسی قرار گرفت.

بحث

مدل‌های هوش مصنوعی می‌توانند مولکول‌های جدیدی را به سرعت و به طور موفقیت آمیزی پیدا کنند که دیر یا زود از طریق مجموعه عظیمی از پردازش اطلاعات، به داروی کارآمد تبدیل شوند. کشف و توسعه دارو با استفاده از روش‌های مرسوم می‌تواند با نمونه‌های توسعه طولانی و قیمت‌های بالا بسیار پیچیده باشد(۲۶). با پیشرفت در هوش مصنوعی و فن‌آوری مجازی، محققان رویکردهای جدیدی را برای تصمیم‌گیری دقیق در مورد اثربخشی ترکیباتی که بیش‌ترین کارایی و کم‌ترین اثرات جنبه را دارند، پیدا می‌کنند.

شناخت ترکیبات موثر در زمینه داروهای تجویزی، سپس برای سرعت بخشیدن فرآوری این دارو و در نهایت پیش‌بینی

[Downloaded from tmuj.iautmu.ac.ir on 2026-06-28]
[DOR: 20.1001.1.10235922.1403.34.2.1.2]
[DOI: 10.61186/iau.34.2.105]

اثربخشی آن، رویکرد جدیدی است که با کمک هوش مصنوعی امکان پذیر است (۲۷).

هوش مصنوعی در کنار بهینه‌سازی گردش کار، راهنمای تفسیر، کیفیت بالا و کارایی، به بهبود مداخلاتی در جهت افزایش گردش کار و عملکرد کلی مراحل طراحی کمک می‌کند. نکته مهم در طراحی هوش مصنوعی این است که چگونه این نسخه یاد می‌گیرد تا واکنش‌های زیرساختی را تجزیه و تحلیل کند؛ واکنش‌های متعددی که می‌تواند بین ساختارهای ترکیبات دارویی و گیرنده‌های درون چارچوب مشخص رخ دهد (۲۸). برای گسترش هوش مصنوعی، یافته های عمیق‌تر در مورد شکل ترکیبات و گیرنده‌ها برای دقیق‌تر کردن کارکرد هوش مصنوعی استفاده می‌شود (۲۹).

شبکه دو خطی به سیستم اجازه می‌دهد تا تعاملات را از طریق زیرساخت‌ها تحلیل کند. هوش مصنوعی تاثیر گسترده‌ای در داروشناسی و کشف دارو دارد با مزایای متعدد به همراه سرعت بخشیدن به سیستم پردازش داده و به اشتراک گذاری پروتکل‌های منابع تحلیل داده که سرعت بیشتری به پردازش می دهد. نقش هوش مصنوعی در علوم دارویی طیف گسترده‌ای از استراتژی‌های بالینی مرتبط با کشف و بهبود اثر دارو را پوشش می‌دهد، که شامل استفاده از استراتژی‌های تحلیلی مانند تشخیص گذاری و تفسیراشعه ایکس، ECG و تصویربرداری هیستوپاتولوژیکی از جمله تکنیک های قابل استفاده است. هوش مصنوعی در تولید دارو مورد استفاده قرار می‌گیرد. هوش مصنوعی همچنین برای پیش‌بینی حفاظت، کارایی و تعیین پارامترهای فارماکوکینتیک مولکول‌های دارویی به کار می‌رود. علاوه بر این در داروشناسی، از هوش مصنوعی برای مشاهده هدفمندسازی دارو، نگاهی کلی به فرایندها و تولید روش مطالعاتی با تقلید رفتار انسان در انجام مطالعات و واقعی سازی تطبیقی نتایج استفاده می‌شود (۳۰ و ۳۱). به همین ترتیب AIکاربرد خود را در استفاده از QSAR و غربال گری دیجیتال افزایش داده است و نیز انتظار می‌رود که روش GAN داروی مجازی به عنوان یک طرح مولکولی جدید برای شیمی دارویی عرضه شود(۳۲). تاکنون، روشهای کاربردی هوش مصنوعی به طور موثری با ترکیب داکینگ مولکولی و غربالگری in vivo، در شرایط آزمایشگاهی به کار گرفته شده‌است (۳۳، ۳۴). زمانی که ساختار سه‌بعدی ترکیب هدف در دسترس باشد، امکان غربالگری اولیه مناسب وجود دارد. به طور کلی بر مبنای این ایده است که اگر ساختارها قابل‌مقایسه باشند، نتایج ممکن است قابل تطبیق و امکان اندازه گیری کمی پیوندها و نوع آنها وجود داشته باشد که روند طراحی دارو، سنتز شیمیایی، و آزمایشات آزمایشگاهی مربوط به ساختار آلی به طور قابل ملاحظه‌ای کوتاه‌تر و دقیق‌تر می‌شود (۳۵).

سوء تعبیر از یافته‌ها و سوء تفاهم در مورد تولید DL تهدیدی جدی برای کاربرد هوش مصنوعی به عنوان راهنمای شخصی سازی درمان دارویی از نظر نوع دارو و بهترین دوز دارو است (۳۶). تکنیک‌های هوش مصنوعی به طوری پیشرفت داشته است که امکان استفاده از آنها در شرایط واقعی برای کمک به تصمیم‌گیران انسانی وجود دارد. با استفاده از هوش مصنوعی مراحل کلیدی طراحی کارآزمایی بالینی را از آماده‌سازی ابتدایی مطالعه تا زمان اجرا به سمت بهبود موفقیت کارآزمایی تغییر دهد، بنابراین مشقت تحقیق و توسعه دارویی را کاهش می‌دهد و حصول نتیجه مطلوب تسهیل می‌شود (۱۲). در مطالعات زیستی پایه، معیارهای عدم قطعیت به محققان کمک می‌کنند تا بین قواعد واقعی درون داده‌ها و الگوهای نادرست یا نامطمئن تمایز قایل شوند. عدم قطعیت معرفتی، معیاری از عدم قطعیت تقریبی مدل، همراه با ساختار و پارامترهای آن است. دلیل آن عدم وجود آموزشی کافی است، به طوری که قادر خواهیم بود با ورود بیشتر اطلاعات، وقوع آن را کاهش داد. در ارزیابی عدم قطعیت، عدم قطعیت مشاهدات را به دلیل کمبود داده‌های موجود تعریف می‌کنند. هنوز مشکلات زیادی از جمله قابلیت تفسیر پایین مدل‌ها و مدیریت سوابق محدود و ترکیبی در محیط‌های پویا وجود دارد (۳۷، ۳۸). مسائل تفسیرپذیر اهمیت زیادی دارند، زیرا انتخاب درمان به طور قابل توجهی پر ریسک است و اطمینان به صحت تفسیر آن دشوار است. هم‌کاری متقابل میان متخصصان انسانی و ساختارهای مبتنی بر DL به نظر می‌رسد که اثرات خوبی برای رفع بسیاری از مشکلات داشته باشد (۳۹). مسائل اخلاقی نیز در این زمینه بسیار مهم هستند و ممکن است به طور جدی استفاده و انتشار یافته‌های مجازی مرتبط با سلامتی را محدود کند.

هم اکنون استفاده از فن‌آوری هوش مصنوعی با مشکلات زیادی مواجه است. شاید مهم‌ترین مساله در این زمینه دیدگاه سنتی و کمبود آشنایی با پیشرفت‌های اخیر فن‌آوری در زمینه هوش مصنوعی و ظرفیت انتظارات بیش از حد آن‌ها در خصوص موضوعات داروسازی باشد. استفاده از هوش مصنوعی می‌تواند مفید یا مضر باشد. در این مقاله نگاهی به برخی فرصت‌ها و چالشهای پیش روی استفاده از هوش مصنوعی را تبیین کرده‌ایم.

[Downloaded from tmuj.iautmu.ac.ir on 2026-06-28]
[DOR: 20.1001.1.10235922.1403.34.2.1.2]
[DOI: 10.61186/iau.34.2.105]

فواید آن عبارت از توسعه و بهبود سیستم‌ها در روش طراحی دارو و پیش‌بینی اثر لیگاند در گیرنده و هم‌کاری بیشتر کادر درمان، و حل مشکلات انتخاب‌های داروهای تجویزی در حوزه مطالعات بالینی هستند. از جمله چالش‌ها می‌توان به مشکلات اخلاقی، عدم اشنایی محققین و پیچیدگی طراحی مدل‌های پایش اطلاعات اشاره داشت.

گسترش و بهینه سازی شبکه‌های عصبی پایگاه داده‌ها، از جمله راه‌های افزایش دقت سیستم است. ادغام هوش مصنوعی با روش‌های تجربی سنتی و استفاده هم‌زمان از کاربر و هوش مصنوعی در تحقیقات از خطاهای احتمالی می‌کاهد. همچنین استفاده از ابزارهای درون رایانه‌ای In silico در طراحی و بهینه سازی ساختار داروهایی که در حال گذراندن مراحل طراحی و غربالگری هستند مفید واقع خواهد شد.

متاسفانه کاربرد نتایج اطلاعات تحقیقات در زمینه هوش مصنوعی به طور سیستماتیک مورد تجزیه و تحلیل قرار نگرفته است. اگر چنین مطالعاتی را بتوان از طریق ساختارهای مبتنی بر هوش مصنوعی تکمیل کرد، نتایج خوبی برای پزشکان داروسازان و محققین و مدیران به عنوان ابزار ضروری به ارمغان می‌آورد. بررسی حاضر نشان می‌دهد که استفاده بهینه از روش‌های هوش مصنوعی باعث تسریع در فرایند کشف دارو می‌شود.

REFERENCES

1. Chopra H, Baig AA, Gautam RK, Kamal MA. Application of Artificial Intelligence in Drug Discovery. Curr Pharm Des 2022;28:2690-2703

2. Sandeep Ganesh G, Kolusu AS, Prasad K, Samudrala PK, Nemmani KVS. Advancing health care via artificial intelligence: From concept to clinic. Eur J Pharmacol 2022;934:175320.

3. Li S, Chen J, Hu Y, Ye M. Editorial: Network pharmacology and AI. J Ethnopharmacol 2023;307:116260.

4. Badillo S, Banfai B, Birzele F, Davydov II, Hutchinson L, Kam-Thong T, et al. An Introduction to Machine Learning. Clin Pharmacol Ther 2020 Apr;107:871-885.

5. Smith GF. Artificial Intelligence in Drug Safety and Metabolism. Methods Mol Biol 2022;2390:483-501.

6. Murali K, Kaur S, Prakash A, Medhi B. Artificial intelligence in pharmacovigilance: Practical utility. Indian J Pharmacol 2019;51:373-376.

7. Johnson M, Patel M, Phipps A, van der Schaar M, Boulton D, Gibbs M. The potential and pitfalls of artificial intelligence in clinical pharmacology. CPT Pharmacometrics Syst Pharmacol 2023;12:279-284.

8. Romm EL, Tsigelny IF. Artificial Intelligence in Drug Treatment. Annu Rev Pharmacol Toxicol 2020;60:353-369.

9. van der Lee M, Swen JJ. Artificial intelligence in pharmacology research and practice. Clin Transl Sci 2023;16:31-36.

10. Basile AO, Yahi A, Tatonetti NP. Artificial Intelligence for Drug Toxicity and Safety. Trends Pharmacol Sci 2019;40:624-635.

11. Kumar M, Nguyen TPN, Kaur J, Singh TG, Soni D, Singh R, et al. Opportunities and challenges in application of artificial intelligence in pharmacology. Pharmacol Rep 2023;75:3-18.

12. Lin E, Lin CH, Lane HY. Precision Psychiatry Applications with Pharmacogenomics: Artificial Intelligence and Machine Learning Approaches. Int J Mol Sci 2020;21:969.

13. Cascella M, Schiavo D, Cuomo A, Ottaiano A, Perri F, Patrone R, et al. Artificial Intelligence for Automatic Pain Assessment: Research Methods and Perspectives. Pain Res Manag 2023;2023:6018736.

14. Bender A, Cortes-Ciriano I. Artificial intelligence in drug discovery: what is realistic, what are illusions? Part 2: a discussion of chemical and biological data. Drug Discov Today 2021;26:1040-1052.

15. Ballester PJ, Stevens R, Haibe-Kains B, Huang RS, Aittokallio T. Artificial intelligence for drug response prediction in disease models. Brief Bioinform 2022;23:bbab450.

16. Poalelungi DG, Musat CL, Fulga A, Neagu M, Neagu AI, Piraianu AI, et al. Advancing Patient Care: How Artificial Intelligence Is Transforming Healthcare. J Pers Med 2023;13:1214.

17. Rashid MBMA, Chow EK. Artificial Intelligence-Driven Designer Drug Combinations: From Drug Development to Personalized Medicine. SLAS Technol 2019;24:124-125.

18. Mukherjee K. 40 Years of Trends in Pharmacological Sciences: Blending Man and Machine. Trends Pharmacol Sci 2019;40:541-542.

[Downloaded from tmuj.iautmu.ac.ir on 2026-06-28]
[DOR: 20.1001.1.10235922.1403.34.2.1.2]
[DOI: 10.61186/iau.34.2.105]

19. Wang W, Ye Z, Gao H, Ouyang D. Computational pharmaceutics - A new paradigm of drug delivery. J Control Release 2021;338:119-136.

20. Damiati SA. Digital Pharmaceutical Sciences. AAPS PharmSciTech 2020;21:206.

21. Persidis A, Persidis A. Artificial intelligence for drug design. Nat Biotechnol 1997;15:1035-6.

22. Chan HCS, Shan H, Dahoun T, Vogel H, Yuan S. Advancing Drug Discovery via Artificial Intelligence. Trends Pharmacol Sci 2019;40:592-604.

23. Zhavoronkov A, Vanhaelen Q, Oprea TI. Will Artificial Intelligence for Drug Discovery Impact Clinical Pharmacology? Clin Pharmacol Ther 2020;107:780-785.

24. Asl BA, Mogharizadeh L, Khomjani N, Rasti B, Pishva SP, Akhtari K, et al. Probing the interaction of zero valent iron nanoparticles with blood system by biophysical, docking, cellular, and molecular studies. Int J Biol Macromol 2018 1;109:639-650.

25. Yang X, Wang Y, Byrne R, Schneider G, Yang S. Concepts of Artificial Intelligence for Computer-Assisted Drug Discovery. Chem Rev 2019;119:10520-10594.

26. Munteanu CR, Dorado J, Pazos A. Artificial intelligence techniques in medicinal chemistry. Curr Top Med Chem 2013;13:525.

27. Duch W, Swaminathan K, Meller J. Artificial intelligence approaches for rational drug design and discovery. Curr Pharm Des 2007;13:1497-508.

28. Farghali H, Kutinová Canová N, Arora M. The potential applications of artificial intelligence in drug discovery and development. Physiol Res 2021;70:S715-722.

29. Noor F, Asif M, Ashfaq UA, Qasim M, Tahir Ul Qamar M. Machine learning for synergistic network pharmacology: a comprehensive overview. Brief Bioinform 2023;24:bbad120.

30. Liu Q, Huang R, Hsieh J, Zhu H, Tiwari M, Liu G, et al. Landscape Analysis of the Application of Artificial Intelligence and Machine Learning in Regulatory Submissions for Drug Development From 2016 to 2021. Clin Pharmacol Ther 2023;113:771-774.

31. Trajanov D, Trajkovski V, Dimitrieva M, Dobreva J, Jovanovik M, Klemen M, et al. Review of Natural Language Processing in Pharmacology. Pharmacol Rev 2023;75:714-738.

32. Muratov EN, Bajorath J, Sheridan RP, Tetko IV, Filimonov D, Poroikov V, et al. QSAR without borders. Chem Soc Rev 2020;49:3525-3564.

33. Iman M, Shafaroodi H, Davood A, Abedini M, Pishva P, Taherkhani M, et al. Design and Synthesis of 2-(Arylmethylideneamino) Isoindolines as New Potential Analgesic and Anti-Inflammatory Agents: A Molecular Hybridization Approach. Curr Pharm Des 2016;22:5760-5766.

34. Asl BA, Mogharizadeh L, Khomjani N, Rasti B, Pishva SP, Akhtari K, et al. Probing the interaction of zero valent iron nanoparticles with blood system by biophysical, docking, cellular, and molecular studies. Int J Biol Macromol 2018;109:639-650.

35. Sarkar C, Das B, Rawat VS, Wahlang JB, Nongpiur A, Tiewsoh I, et al. Artificial Intelligence and Machine Learning Technology Driven Modern Drug Discovery and Development. Int J Mol Sci 2023;24:2026.

36. Huang Y, Li C, Shi D, Wang H, Shang X, Wang W, et al. Integrating oculomics with genomics reveals imaging biomarkers for preventive and personalized prediction of arterial aneurysms. EPMA J 2023;14:73-86.

37. Schneider G, Clark DE. Automated De Novo Drug Design: Are We Nearly There Yet? Angew Chem Int Ed Engl 2019;58:10792-10803.

38. Zagotto G, Bortoli M. Drug Design: Where We Are and Future Prospects. Molecules 2021;26:7061.

39. Rudmann D, Albretsen J, Doolan C, Gregson M, Dray B, Sargeant A, et al. Using Deep Learning Artificial Intelligence Algorithms to Verify N-Nitroso-N-Methylurea and Urethane Positive Control Proliferative Changes in Tg-RasH2 Mouse Carcinogenicity Studies. Toxicol Pathol 2021;49:938-949.

40. Putin E, Mamoshina P, Aliper A, Korzinkin M, Moskalev A, Kolosov A, et al. Deep biomarkers of human aging: Application of deep neural networks to biomarker development. Aging (Albany NY) 2016;8:1021-33.

[Downloaded from tmuj.iautmu.ac.ir on 2026-06-28]

[DOR: 20.1001.1.10235922.1403.34.2.1.2]

[DOI: 10.61186/iau.34.2.105]