شنبه 15 فروردین 1405 - 06:34

هوش مصنوعی چراغ راه داروسازان

شرکت‌های داروسازی به‌طور فزاینده‌ای از هوش مصنوعی برای سرعت‌بخشیدن به کشف دارو استفاده می‌کنند. اما آیا هوش مصنوعی واقعا روند کشف داروهای جدید را متحول خواهد کرد یا مزایای آن بیش از حد بزرگ‌نمایی شده است؟

شرکت های داروسازی به طور فزاینده ای از هوش مصنوعی برای سرعت بخشیدن به کشف دارو استفاده می کنند. اما آیا هوش مصنوعی واقعا روند کشف داروهای جدید را متحول خواهد کرد یا مزایای آن بیش از حد بزرگ نمایی شده است؟

به گزارش ایسنا، کشف یک داروی جدید در گذشته بیش از یک دهه پژوهش و میلیاردها پوند سرمایه گذاری نیاز داشت. بسیاری از گزینه های دارویی در این مسیر شکست می خورند، به طوری که صنعت داروسازی تنها سالانه حدود ۵۰ تا ۶۰ میلیارد دلار برای آزمایش های ناموفق داروهای سرطان هزینه می کند. با این حال، الگوریتم های هوش مصنوعی می توانند زمان لازم برای شناسایی یک «ترکیب پیشرو» را به چند هفته و حتی چند روز کاهش دهند.

میکله وندروسکولو، استاد بیوفیزیک دانشگاه کمبریج، می گوید: ***اولین گام در کشف دارو شناسایی یک ترکیب موفق یا پیشرو است و این مرحله اکنون به طور کامل توسط هوش مصنوعی تسهیل شده است.***

به طور سنتی، کشف دارو با غربالگری «پُرظرفیت» یا در حجم بالا هزاران ترکیب شیمیایی آغاز می شود تا مشخص شود کدام یک به پروتئین هدف متصل می شود؛ فرایندی که می تواند تا دو سال طول بکشد. هوش مصنوعی می تواند این روند را به طور چشمگیری تسریع کند. بانک های اطلاعاتی شیمیایی حاوی داده های صدها هزار مولکول اند؛ از ساختار شیمیایی گرفته تا ویژگی های فیزیکی آن ها. بر اساس این اطلاعات، مدل های هوش مصنوعی می توانند با تحلیل سریع حجم عظیمی از داده ها پیش بینی کنند که یک مولکول چگونه به پروتئین هدف متصل می شود و میلیون ها گزینه بالقوه می توانند بررسی شوند و پژوهشگران می توانند روی امیدبخش ترین موارد تمرکز کنند.

وندروسکولو توضیح می دهد: ما اکنون دهه ها داده از مطالعات بلورنگاری پرتو ایکس و ریزطیف سنجی داریم. ساختار صدها هزار پروتئین را می شناسیم. هوش مصنوعی در یادگیری از این حجم عظیم داده ساختاری بسیار توانمند است.

توان غربالگری بالاتر

به گفته وندروسکولو، هوش مصنوعی اکنون به اندازه روش های آزمایشگاهی در پیش بینی ساختار پروتئین ها و نحوه تعامل مولکول های کوچک با آن ها دقیق است. اما این موضوع فقط درباره پروتئین هایی صدق می کند که تا می شوند و ساختار سه بعدی پایدار با حفره های اتصال دارند.

او می گوید: تعریف کلاسیک پروتئین ها این است که تا می شوند و سپس عملکرد دارند. اما حدود یک سوم پروتئین های انسانی این کار را نمی کنند. این پروتئین های «بی نظم از نظر ذاتی» شکل ثابتی ندارند، بنابراین ساختارشان با روش های معمول قابل تعیین نیست. بسیاری از آن ها در بیماری هایی مانند آلزایمر و پارکینسون نقش دارند و تا همین اواخر ساخت دارو برای آنها غیر ممکن تلقی می شد.

وندروسکولو و گروهش با کمک هوش مصنوعی روش جدیدی برای اتصال کشف کردند که در آن مولکول های کوچک نیازی به حفره اتصال ندارند. آن ها روی پروتئین آمیلوئید بتا، مرتبط با آلزایمر، تمرکز کردند. توده های این پروتئین پلاک هایی را تشکیل می دهند که اطراف نورون ها جمع می شوند و آن ها را از بین می برند.

در یک پژوهش، محققان با کمک هوش مصنوعی میلیون ها مولکول را غربال کردند و پنج ترکیب را شناسایی کردند. این ترکیبات به جای اتصال به یک حفره، پیرامون پروتئین «می رقصیدند» و سپس به آن متصل می شدند و مانع از تجمع آن می شدند.

جست وجوی ضدمیکروبی

توانایی هوش مصنوعی در پیش بینی اتصال مولکول ها به پروتئین ها در توسعه آنتی بیوتیک های جدید نیز به کار گرفته شده است. بسیاری از آنتی بیوتیک های فعلی بیش از ۵۰ سال پیش کشف شده اند و مقاومت باکتریایی، توسعه آن ها را دشوار کرده است.

سزار د لا فوئنته از دانشگاه پنسیلوانیا بیش از یک دهه است که با هوش مصنوعی، پایگاه های ژنتیکی را برای یافتن مولکول های ضدمیکروبی جست وجو می کند. او حتی دی ان ای نئاندرتال ها و گونه های منقرض شده را بررسی کرده و پپتیدی به نام نئاندرتالین-۱ یافته که در موش ها مؤثر بوده است.

در ادامه، پژوهشگران از دل گونه های باستانی هزاران ترکیب امیدوارکننده آنتی بیوتیکی یافتند که درصد قابل توجهی از آن ها در آزمایش ها توان مقابله با باکتری های بیماری زا را نشان دادند

مراحل بعدی کشف دارو

کشف ترکیب اولیه تنها بخشی از مسیر است.

به گفته وندروسکولو، بیشتر داروها در مرحله کشف اولیه شکست نمی خورند. مشکل اصلی در سمیت، اثربخشی و تعیین دوز مناسب برای انسان است.

برخی شرکت ها معتقدند هوش مصنوعی می تواند این بخش ها را هم بهبود بخشد. شرکت داروسازی لنترن فارما (Lantern Pharma) با استفاده از هوش مصنوعی نشان داد دارویی که در گذشته شکست خورده بود، در گروه خاصی از بیماران (غیرسیگاری ها) بسیار مؤثر عمل می کند.

هوش مصنوعی نشان داد تومورهای ریه در غیرسیگاری ها از نظر ژنتیکی کاملا با سیگاری ها متفاوت است و دارو می تواند گیرنده های خاصی را هدف قرار دهد که در این بیماران بیش ازحد بیان می شوند.

مدیرعامل این شرکت معتقد است هوش مصنوعی می تواند زمان تعیین جایگاه بالینی دارو را تا ۷۵ درصد کاهش دهد، سمیت را پیش بینی کند، عبور از سد خونی-مغزی را تخمین بزند و حتی کارآزمایی های بالینی را هدفمندتر کند.

تردیدها همچنان باقی است

با وجود این، برخی دانشمندان در استفاده از هوش مصنوعی تردید دارند. با اینکه از میانه دهه ۲۰۱۰ شرکت ها از هوش

مصنوعی استفاده می کنند، هنوز هیچ داروی کاملا مبتنی بر هوش مصنوعی مرحله سوم کارآزمایی را با موفقیت طی نکرده است.
وندروسکولو می گوید: هنگامی که داده ها زیاد باشند، هوش مصنوعی عالی عمل می کند، اما وقتی داده ها کم باشد، چندان مفید نخواهد بود.
او پیش بینی سمیت دارو در انسان را از جمله نمونه هایی می داند که هوش مصنوعی پیشرفت چندانی در آن نداشته است و در این مورد می گوید: یک ترکیب می تواند به میلیون ها روش مختلف سمی باشد. اینجاست که هیاهوی هوش مصنوعی با واقعیت روبه رو می شود. باید بدانیم هوش مصنوعی دقیقا کدام مشکلات را می تواند حل کند و از پس کدام یک بر نخواهد آمد.
هوش مصنوعی تصویری امیدبخش از آینده پزشکی ترسیم می کند؛ آینده ای که در آن می تواند سال ها جست وجوی فرساینده برای یافتن یک داروی مؤثر را به چند هفته یا حتی چند روز کاهش دهد. جایی که پیش تر دانشمندان باید در میان هزاران ترکیب شیمیایی حدس و گمان های خود را به کار می گرفتند، اکنون الگوریتم ها با سرعتی باورنکردنی امیدوارکننده ترین گزینه ها را پیش چشم آن ها می گذارند.
هوش مصنوعی نه تنها در باز کردن قفل رازهای پروتئین هایی که زمانی دارو ساختن برای آنها غیر ممکن تصور می شد نقش داشته، بلکه حتی از دل ژنوم موجودات منقرض شده و مولکول هایی که هرگز در طبیعت وجود نداشته اند، سرنخ هایی برای ساخت آنتی بیوتیک های جدید بیرون کشیده است. با این حال، مسیر تبدیل یک کشف آزمایشگاهی به دارویی که جان انسان ها را نجات دهد، همچنان طولانی و پر از عدم قطعیت است. سمیت دارو، دوز مناسب و موفقیت در آزمایش های بالینی، چالش هایی هستند که هنوز به طور کامل در اختیار هوش مصنوعی قرار نگرفته اند.
در نهایت، **هوش مصنوعی قرار نیست جای دانشمندان را بگیرد، بلکه قرار است چراغی در دست آن ها باشد؛** چراغی که مسیر تاریک و پرپیچ وخم کشف دارو را روشن تر کند، سرعت آن را افزایش دهد و از هزینه های آن بکاهد. امیدی تازه برای روزی که یافتن درمان بیماری ها دیگر به سال ها انتظار و میلیاردها دلار هزینه وابسته نباشد.

منابع:

مجله دسترسی باز جاما نتورک

مجله نیچر میکروبیولوژی
مجله سل
وبسایت سوسای