

**ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ АЛГОРИТМІВ ШТУЧНОГО
ІНТЕЛЕКТУ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ТА ВІДСТЕЖЕННЯ
ПОБІЧНИХ ЕФЕКТІВ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ**

Швиденко А.О.

Науковий керівник – к.т.н., доц. Сердюк Н.М.

Харківський національний університет радіоелектроніки, каф. КІТС, м.

Харків, Україна

e-mail: alina.shvydenko@nure.ua

This work studies the use of artificial intelligence (AI) algorithms for predicting and monitoring the side effects of medicinal drugs. The first algorithm considers the use of a Geometric Self Expressive Model (GSEM) with data from the SIDER and OFFSIDES databases. In GSEM, the focus is on a matrix approach to predict the likelihood of drug side effects. It is also proposed to use the AI algorithm in post-clinical observation and in collecting patient data from social networks and forums for discussion. This research demonstrates the potential of AI as a complement to traditional methods with the aim of enhancing the safety of medical treatment.

Для кожного нового лікарського засобу виникає необхідність у виявленні його побічних ефектів. Задля їх виявлення лікарський засіб проходить стадії передклінічних та клінічних досліджень, під час яких вчені спостерігають за впливом засобу на контрольні групи [3]. Проте, через обмеження в часі та у виборі учасників контрольних груп, такі дослідження можуть виявити лише частину побічних ефектів. Багато ж інших побічних ефектів виявляються вже після надходження препарату до медичних закладів шляхом відстеження звернень пацієнтів.

Використання алгоритмів штучного інтелекту (ШІ) для прогнозування можливих побічних ефектів лікарських засобів ще до їх надходження до медичних закладів може значно покращити результати досліджень, а отже, й підвищити безпечність препарату.

З такою ціллю розроблені спеціалізовані системи машинного навчання. У статті [2] міжнародна група дослідників створила та використала розумну технологію під назвою геометрична модель, що саморозвивається (Geometric Self Expressive Model - GSEM) для навчання ШІ. Як результат, було виявлено 904 побічних ефектів на 505 лікарських засобів.

Вхідними даними є матриця препаратів/побічних ефектів. Навпроти кожного препарату (рядку) стоять одиниці для тих побічних ефектів (колонок), що були виявлені під час клінічних досліджень, усі інші клітинки заповнюються нулями. Вихідними даними є така сама матриця препаратів/побічних ефектів, за тією відмінністю, що вихідна матриця замість нульових значень містить вірогідності того, що конкретний препарат може мати певний побічний ефект.

Для навчання таких алгоритмів використовуються дані із відкритих медичних джерел, таких як SIDER та OFFSIDES. Ці бази даних містять обширні дані про побічні ефекти препаратів отримані під час клінічних досліджень та після виходу препарату на ринок відповідно. Інформація про ліки, що включають їх хімічну структуру, а також анатомічну та терапевтичну класифікацію отримується за допомогою використання DrugBank, MACCS та RDKit.

На основі вихідних даних та отриманих даних про ліки і побічні ефекти, є можливим розрахувати значення, що являють собою математичні моделі саморепрезентації лікарських засобів та побічних ефектів. Ці дві моделі дають змогу розрахувати вихідну шукану матрицю вірогідностей.

Алгоритми ШІ також можуть бути використані для покращення спостереження за препаратом, що вже знаходиться у використанні. До описаної системи машинного навчання можна додати нові дані, отримані вже після клінічних досліджень, що дає можливість скорегувати прогнози.

Іншим корисним вектором використання автоматичних систем та ШІ можуть бути спеціалізовані системи для допомоги у зборі нових даних про побічні ефекти ліків, що перебувають у використанні. Велика кількість пацієнтів при зіткненні з неочікуваними побічними ефектами часто обговорюють їх на форумах чи у групах в соціальних мережах. Ці дані можуть автоматично збиратися, використовуючи ШІ для виявлення та класифікації [1]. Після цього, також при його використанні, зібрані дані можуть оброблятися з цілями відокремлення ключових даних, таких як: вік та стать пацієнта, обставини та опис ефекту. Оброблені дані можуть бути відправлені вченим для подальшого дослідження.

Використання алгоритмів ШІ у прогнозуванні побічних ефектів лікарських засобів має великий потенціал для підвищення безпеки пацієнтів і ефективності лікування. Розглянуті алгоритми ШІ можуть слугувати доповненням до основного способу виявлення побічних ефектів.

Список використаних джерел:

1. AI in pharma: quickly predict drug side effect in 2024. *DevsData LLC - Premium IT Recruitment Agency and Software Development Services*. URL: <https://devsdata.com/artificial-intelligence-pharma-drug-side-effect/> (date of access: 21.02.2024).

2. Galeano D., Paccanaro A. Machine learning prediction of side effects for drugs in clinical trials. *Cell reports methods*. 2022. Vol. 2, no. 12. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2667237522002557> (date of access: 22.02.2024).

3. Inside clinical trials: testing medical products in people. *U.S. Food and Drug Administration*. URL: <https://www.fda.gov/drugs/information-consumers-and-patients-drugs/inside-clinical-trials-testing-medical-products-people> (date of access: 22.02.2024).