



УДК 615.33
МРНТИ 76.31.29

К.А. АМАНКУЛОВА¹, Н.А. АБЛАКИМОВА^{1,2}

РОЛЬ AI В СОЗДАНИИ НОВЫХ АНТИБИОТИКОВ: ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

¹Западно-Казахстанский медицинский университет имени Марата Оспанова, Актобе, Казахстан

²Областной перинатальный центр, Актобе, Казахстан

Аманкулова К.А. – <https://orcid.org/0009-0006-5477-7335>

Аблакимова Н.Е. – <https://orcid.org/0000-0002-1100-2904>

Бибблиографиялық сілтеме:

Аманкулова КА, Аблакимова НЕ. Жаңа антибиотиктерді жасаудағы жасанды интеллекттің рөлі: әдеби шолу. *Гылым алиансы*. 2025;2(2):46-56

Citation:

Amankulova KA, Ablakimova NY. The Role of Artificial Intelligence in the Development of New Antibiotics: A Literature Review. *Gylum aliansy*. 2025;2(2):46-56

Бибблиографическая ссылка:

Аманкулова КА, Аблакимова НЕ. Роль AI в создании новых антибиотиков: литературный обзор. *Гылым алиансы*. 2025;2(2):46-56

Жаңа антибиотиктерді жасаудағы жасанды интеллекттің рөлі: әдеби шолу
К.А. Аманкулова¹, Н.Е. Аблакимова^{1,2}

¹Марат Оспанов атындағы Батыс Қазақстан медицина университеті, Ақтөбе, Қазақстан

²Облыстық перинаталдық орталық, Ақтөбе, Қазақстан

Антибиотиктерге төзімділік — бұл медицина мен ауыл шаруашылығында антибиотиктердің шамадан тыс және бақылаусыз қолданылуына байланысты туындаған жаһандық денсаулық сақтау үшін елеулі қауіп. Антимикробтық препараттарды дұрыс тағайындамау, медициналық мекемелердегі санитарлық нормалардың сақталмауы және қоршаған ортаның ластануы төзімді бактерия штаммдарының таралуына ықпал етеді.

Жаңа антибиотиктерді әзірлеу көптеген қиындықтарға тап болады, олардың қатарында төзімділіктің тез дамуы және тиімді қосылыстарды табудағы қиындықтар бар. Антибиотиктерді іздеудің дәстүрлі әдістері өз мүмкіндігін сарқып бітті, ал жүйелік биология мен антибиотиктерді ашу платформалары секілді заманауи технологиялар әлі де серпінді нәтиже берген жоқ.

Жасанды интеллект (ЖИ) жаңа бактерияға қарсы препараттарды әзірлеуде маңызды рөл атқарады. Терең оқыту алгоритмдері химиялық қосылыстарды талдап, олардың биологиялық белсенділігін болжайды. Мұндай мысалдардың бірі — бактерияларда төзімділік дамуын болдырмайтын ерекше әсер ету механизмі бар галицин препаратының ашылуы.

ЖИ сонымен қатар емдеу сызбаларын оңтайландырып, терапияны дербестендіреді және жанама әсерлер қауіпін азайтады. Дәрілік қосылыстардың виртуалды скринингі жаңа препараттарды әзірлеу процесін жеделдетіп, шығындарды азайтады және тиімділікті арттырады. Болашақ зерттеулер ЖИ үлгілерінің интерпретациясын жақсартуға бағытталады, бұл оларды медицинада неғұрлым дәл әрі қауіпсіз қолдануға мүмкіндік береді.

Негізгі сөздер: антибиотикрезистенттілік, антибиотиктер, жасанды интеллект, бактериялық инфекциялар, дәрілік препараттар, машиналық оқыту, фармакотерапия

The Role of Artificial Intelligence in the Development of New Antibiotics: A Literature Review

К.А. Amankulova¹, N.Y. Ablakimova²

¹Marat Ospanov West Kazakhstan Medical University, Aktobe, Kazakhstan

²Regional Perinatal Center, Aktobe, Kazakhstan

Antibiotic resistance poses a serious threat to global health, fueled by the widespread and often uncontrolled use of antibiotics in both medicine and agriculture. Factors such as inappropriate prescribing, poor compliance with sanitary standards in healthcare settings, and environmental pollution contribute to the emergence and spread of resistant bacterial strains.

Developing new antibiotics is increasingly challenging due to the rapid evolution of resistance and limited discovery of novel compounds. Traditional approaches have largely been exhausted, and although modern technologies such as systems biology and discovery platforms offer potential, they have yet to produce significant breakthroughs. Artificial intelligence (AI) is emerging as a transformative tool in the development of



Аманкулова
Камила Ахметовна.
e-mail: aktob.kami@gmail.com

Келін түсті/
Received/
Поступила:
24.03.2025

Басылымға қабылданды/
Accepted/
Принята к публикации:
03.05.2025

© 2025 The Authors
Published by Marat Ospanov
West Kazakhstan Medical University

antibacterial agents. Deep learning algorithms can analyze chemical structures and predict biological activity, as seen in the discovery of halicin, a compound with a novel mechanism that prevents resistance development. AI also facilitates the optimization of treatment regimens through personalized therapy, minimizing side effects. Additionally, virtual screening expedites drug discovery, reduces costs, and enhances efficiency. Future directions involve improving the transparency and interpretability of AI models to ensure safer clinical applications.

Keywords: antibiotic resistance, antibiotics, artificial intelligence, bacterial infections, medicinal products, machine learning, pharmacotherapy

Роль AI в создании новых антибиотиков: литературный обзор

К.А. Аманкулова¹, Н.А. Аблакимова^{1,2}

¹Западно-Казахстанский медицинский университет имени Марата Оспанова, Актобе, Казахстан

²Областной перинатальный центр, Актобе, Казахстан

Антибиотикорезистентность представляет серьезную угрозу глобальному здравоохранению, обусловленную чрезмерным и неконтролируемым использованием антибиотиков в медицине и сельском хозяйстве. Неправильное назначение антимикробных препаратов, несоблюдение санитарных норм в медицинских учреждениях и загрязнение окружающей среды способствуют распространению устойчивых штаммов бактерий.

Разработка новых антибиотиков сталкивается с многочисленными препятствиями, включая быстрое развитие резистентности и сложности в поиске эффективных соединений. Традиционные методы поиска антибиотиков исчерпали себя, а современные технологии, такие как системная биология и платформы для открытия антибиотиков, пока не обеспечили прорыва.

Искусственный интеллект (ИИ) играет ключевую роль в разработке новых антибактериальных препаратов. Алгоритмы глубокого обучения анализируют химические соединения, прогнозируя их биологическую активность. Одним из примеров является открытие галицина, обладающего уникальным механизмом действия, препятствующим развитию устойчивости у бактерий.

ИИ также оптимизирует схемы лечения, персонализируя терапию и снижая риск побочных эффектов. Виртуальный скрининг лекарственных соединений позволяет ускорить разработку новых препаратов, снижая затраты и повышая эффективность. Будущие исследования направлены на повышение интерпретируемости ИИ-моделей для более точного и безопасного применения в медицине.

Ключевые слова: антибиотикорезистентность, антибиотики, искусственный интеллект, бактериальные инфекции, лекарственные препараты, машинное обучение, фармакотерапия

Введение

Антибиотикорезистентность является одной из самых серьезных угроз глобальному здравоохранению. Быстрое развитие устойчивости патогенных микроорганизмов к существующим антибиотикам приводит к необходимости поиска новых эффективных антибактериальных средств. Ежегодно во всем мире из-за устойчивости к противомикробным препаратам (AMR) погибает не менее 700 000 человек [1]. В 2019 году Всемирная организация здравоохранения (ВОЗ) признала устойчивость к противомикробным препаратам (AMR) одной из десяти наиболее серьезных угроз для глобального здравоохранения из-за ее влияния на здоровье людей [2]. Без своевременных мер по созданию и разработке новых антибиотиков ожидается, что к 2050 году смертность от устойчивых инфекций достигнет 10 миллионов случаев в год [3]. Исследование, проведенное Нельсоном и соавторами, проанализировало затраты на здравоохранение, связанные с антибиотикорезистентными бактериальными инфек-

циями, и оценило стоимость их лечения как в амбулаторных, так и в стационарных условиях, превысившую 4,6 миллиарда долларов США в 2017 году [4]. Традиционные методы открытия антибиотиков требуют значительных временных и финансовых затрат, что замедляет процесс разработки. ИИ предлагает новые подходы к поиску и созданию антибиотиков, позволяя ускорить этот процесс и повысить его эффективность.

Материалы и методы

Для подготовки настоящего литературного обзора был проведен целенаправленный поиск научной литературы в ведущих международных библиографических базах данных: Scopus, Web of Science, PubMed, а также дополнительно использовалась система Google Scholar для выявления актуальных публикаций, не индексируемых в основных источниках.

Поиск осуществлялся с применением комбинаций следующих ключевых слов и терминов (на английском языке): “artificial intelligence”, “AI”, “machine learning”, “deep learning”, “drug discovery”,

“antibiotics”, “antibacterial agents”, “new antibiotics”, “AI-driven drug development”.

Целью поиска было выявление актуальных публикаций, освещающих использование технологий ИИ на различных этапах разработки новых антибактериальных препаратов – от первичного скрининга соединений до клинических испытаний.

Отбор публикаций проводился по следующим критериям:

- статьи, опубликованные преимущественно за последние 5 лет;
- публикации, имеющие полный текст на английском языке;
- источники, содержащие данные о практическом применении ИИ в разработке антибиотиков;
- рецензируемые научные статьи, обзоры, мета-анализы, материалы конференций.

После отбора и анализа литературы были сгруппированы основные направления исследований и технологические подходы, представленные в текущем научном ландшафте.

Антибиотикорезистентность и необходимость поиска новых антибиотиков

Основными причинами развития антибиотикорезистентности являются чрезмерное использование антимикробных препаратов как в медицине, так и в сельском хозяйстве. Неправильное назначение антибиотиков, в том числе при вирусных инфекциях, способствует формированию устойчивых штаммов бактерий [5]. В медицинских учреждениях высокая плотность популяции бактерий облегчает их передачу в обществе, что ускоряет распространение устойчивости. Недостаточное соблюдение гигиенических норм и санитарных протоколов в больницах создает благоприятные условия для роста резистентных микроорганизмов [6].

Значительный вклад в проблему вносит бесконтрольное применение антибиотиков в животноводстве, что способствует передаче устойчивых бактерий через пищевые цепи. Международные путешествия и торговля также играют важную роль в распространении резистентных патогенов и генов устойчивости по всему миру [5]. В ряде регионов нехватка санитарных условий приводит к загрязнению водных ресурсов и распространению устойчивых бактерий через сточные воды. Кроме того, отсутствие своевременной и точной диагностики затрудняет рациональное использование антибиотиков, усиливая проблему антибиотикорезистентности [7].

Разработка новых антибактериальных препаратов остается сложной задачей из-за множества препятствий, ограничивающих появление эффективных антибиотиков. Одной из главных проблем является быстрое развитие антибиотикорезистентности, при котором бактерии адаптируются к существующим препаратам, снижая их эффективность. Это приводит к росту числа трудноизлечимых инфекций и увеличению смертности от бактериальных заболеваний [8].

Дополнительным вызовом становится высокая стоимость и длительность разработки новых антибио-

тиков. Процесс создания требует значительных финансовых вложений, а клинические испытания занимают годы, при этом многие соединения не проходят финальные этапы из-за недостаточной эффективности или побочных эффектов [9].

Современные технологии, включая ИИ и методы молекулярного моделирования, помогают ускорить процесс поиска перспективных соединений. Однако для успешной борьбы с резистентными бактериями необходимы комплексные стратегии, включающие рациональное использование антибиотиков и разработку новых терапевтических подходов [10].

Фармацевтические компании все реже инвестируют в разработку новых антибиотиков из-за высоких затрат и низкой коммерческой выгоды. В отличие от препаратов для лечения хронических заболеваний, антибиотики используются короткими курсами, что ограничивает их рыночный потенциал. Дополнительно проблема усугубляется развитием резистентности, из-за чего эффективность препаратов снижается, а их жизненный цикл на рынке сокращается. В результате фармкомпания предпочитают вкладывать средства в более прибыльные направления. Для решения этой проблемы требуются государственная поддержка, новые модели финансирования и стимулирующие программы, направленные на развитие инновационных антибактериальных средств [11].

Современные научные исследования в области антибактериальной терапии сталкиваются с серьезными вызовами. Бактерии развивают сложные защитные механизмы, которые затрудняют поиск новых терапевтических мишеней. Традиционные стратегии, основанные на подавлении синтеза клеточной стенки или белков, теряют эффективность, поскольку микроорганизмы быстро адаптируются к таким воздействиям. Это требует разработки новых подходов, направленных на уникальные биологические процессы бактерий. В частности, изучаются методы блокирования факторов вирулентности и регуляции генных механизмов устойчивости. Дальнейшие исследования и инновационные технологии помогут создать более эффективные способы борьбы с инфекциями [12].

Из-за сложности разработки новых антибиотиков ученые исследуют альтернативные методы борьбы с инфекциями. Среди перспективных направлений выделяются бактериофаги, антимикробные пептиды, генная терапия с использованием технологии CRISPR и иммуномодулирующие препараты. Эти инновационные подходы обладают высоким потенциалом, так как могут избирательно воздействовать на патогены, снижая риск резистентности. Однако их внедрение требует длительных исследований, масштабных клинических испытаний и строгой оценки безопасности. Несмотря на эти вызовы, развитие новых стратегий может значительно изменить подход к лечению бактериальных инфекций и стать ключевым решением в борьбе с антибиотикорезистентностью [13].

Для преодоления существующих вызовов необходим комплексный подход, включающий государ-

ственное финансирование, международное сотрудничество, стимулирование фармацевтических компаний и внедрение программ рационального использования антибиотиков. Только объединение усилий ученых, врачей и регуляторов позволит создать эффективные стратегии борьбы с бактериальными инфекциями в условиях растущей антибиотикорезистентности [14].

Систематические методы поиска антибиотиков, известные как платформы для открытия антибиотиков (Antibiotic Discovery Platforms, ADPs), которые привели к появлению основных классов антибиотиков и стали основой «золотого века» антибиотиков, оказались исчерпанными. Современные ADPs чаще приводят к повторному открытию уже известных соединений или не достигают стадии клинического применения, что снижает оптимизм, связанный с развитием новых технологий в эпоху геномики [15].

Современные технологии значительно расширили возможности изучения биологических процессов, изменив подход к поиску антибиотиков. Системная биология позволяет глубже понять механизмы взаимодействия бактерий с лекарственными веществами, что теоретически должно ускорять разработку новых препаратов. Однако на практике этот процесс становится все сложнее. Чем больше данных получают ученые, тем больше факторов необходимо учитывать при создании эффективных антибиотиков. Бактерии быстро адаптируются, и многие потенциальные соединения оказываются неэффективными. Поэтому, несмотря на технологический прогресс, поиск новых антибиотиков требует комплексного подхода и инновационных стратегий для преодоления возникающих трудностей [16].

ИИ в фармакологии: ключевые технологии

ИИ играет ключевую роль в разработке новых лекарств и поиске терапевтических мишеней. Современные алгоритмы позволяют не только анализировать молекулярные структуры и предсказывать биологическую активность соединений, но и учитывать индивидуальные особенности пациентов. Это привело к появлению моделей ИИ, способных прогнозировать реакцию организма на терапию, что способствует развитию персонализированной медицины [17].

Использование ИИ охватывает весь процесс – от первичного поиска лекарственных соединений до оптимизации схем лечения для конкретных пациентов. Анализ больших массивов данных позволяет выявлять закономерности, недоступные традиционным методам, что значительно ускоряет процесс разработки эффективных препаратов [18].

Персонализированные модели помогают врачам принимать обоснованные решения, снижая риск побочных эффектов и повышая эффективность терапии. Таким образом, интеграция ИИ в медицину открывает новые перспективы в создании инновационных подходов к лечению различных заболеваний [19].

Одним из ключевых направлений применения ИИ является виртуальный скрининг лекарственных соединений. Традиционные методы требуют длительных и дорогостоящих лабораторных испытаний, тогда как

ИИ способен моделировать взаимодействия молекул с биологическими мишенями, выявлять потенциально эффективные соединения и прогнозировать их фармакокинетические параметры. Это значительно сокращает затраты на разработку новых препаратов и повышает вероятность успешного клинического применения [20].

ИИ играет ключевую роль в создании новых лекарственных соединений, обеспечивая их оптимальную структуру. Современные алгоритмы машинного обучения анализируют молекулярные свойства веществ, предсказывая их токсичность, побочные эффекты и возможные взаимодействия с другими препаратами. Такой подход позволяет выявлять потенциально опасные соединения на ранних стадиях разработки, снижая вероятность неудач в клинических испытаниях. В результате фармацевтические компании могут быстрее и эффективнее разрабатывать безопасные и действенные препараты, сокращая затраты и ускоряя их вывод на рынок, что делает инновационные лекарства доступнее для пациентов [21].

ИИ активно используется в системной биологии для анализа сложных биологических процессов и выявления скрытых закономерностей в молекулярных механизмах. Это открывает новые возможности в медицине, особенно в сфере персонализированной терапии. Применение ИИ позволяет учитывать индивидуальные особенности пациента, такие как генетические факторы, метаболизм и состояние иммунной системы, при выборе антибиотиков и других препаратов. Такой подход способствует повышению эффективности лечения, снижению риска побочных эффектов и развитию целенаправленных терапевтических стратегий, что делает медицину более точной и безопасной для каждого пациента [22].

Применение ИИ в фармакологии значительно оптимизирует процесс поиска и разработки новых антибиотиков. Это позволяет сократить время исследований, снизить финансовые затраты и повысить эффективность работы ученых. Кроме того, ИИ способствует увеличению вероятности успешного создания инновационных препаратов, способных справляться с проблемой устойчивости бактерий к существующим лекарствам. Такой подход открывает новые возможности для борьбы с антибиотикорезистентностью и обеспечивает более точечное и результативное лечение инфекционных заболеваний [23].

Применение ИИ в открытии новых антибиотиков

ИИ играет важную роль в разработке новых антибиотиков, особенно в условиях растущей антибиотикорезистентности. Современные алгоритмы анализируют огромные базы данных химических соединений, предсказывая их антибактериальные свойства. Одним из ярких примеров стало открытие антибиотика галицина (Halicin) исследователями Массачусетского технологического института (MIT). Благодаря ИИ удалось выявить это соединение среди тысяч потенциальных кандидатов, ускорив процесс поиска эффективного лекарства. Такие технологии позволяют

находить новые терапевтические решения быстрее и точнее, что значительно повышает шансы на борьбу с устойчивыми штаммами бактерий [24].

Галицин является ингибитором с-Jun N-конечной протеинкиназы (JNK) и обладает уникальным антибактериальным механизмом. Он нарушает трансмембранный электрохимический градиент, активирует бактериальные гены, регулирующие гомеостаз железа, и вызывает дисбаланс pH через мембрану бактериальных клеток, что приводит к прекращению их роста. Благодаря такому механизму бактериям может быть сложно выработать устойчивость к препарату. Это открытие продемонстрировало потенциал ИИ в репозиционировании уже одобренных лекарств для борьбы с инфекциями, включая многорезистентные бактериальные штаммы (MDR) [25].

Отдел медицинской микробиологии и инфекционных заболеваний Медицинского центра Лейденского университета провело исследование которое показало что Галицин, который впервые идентифицированный с помощью методов глубокого обучения, продемонстрировал широкоспектральную антибактериальную активность, включая эффективность против устойчивых к карбапенемам Enterobacteriaceae, мультирезистентных *Acinetobacter baumannii* (*A. baumannii*) и *Pseudomonas aeruginosa*, а также способность разрушать биопленки, что делает его перспективным кандидатом для лечения катетер-ассоциированных инфекций [26].

В 2021 году исследователи Университета Торонто обнаружили новый перспективный антибиотик – абауцин. Он продемонстрировал высокую эффективность против супербактерии *A. baumannii*, одной из наиболее устойчивых к существующим методам лечения. Несмотря на то, что препарат находится на ранних этапах разработки, его потенциал в борьбе с лекарственно-устойчивыми инфекциями вызывает большой интерес у ученых. Использование ИИ в процессе поиска помогло ускорить идентификацию этого соединения, что подчеркивает важность новых технологий в создании инновационных антибиотиков для борьбы с угрозами антимикробной резистентности [27].

Деметоксикуркумин – инновационный препарат, созданный с использованием ИИ, продемонстрировал высокую эффективность против различных штаммов *A. baumannii*. Исследования подтвердили его действенность как в виде монотерапии, так и в комбинации с колистином. Кроме того, соединение обладает антивирулентными свойствами, уменьшая способность бактерий взаимодействовать с клетками хозяина. Этот механизм снижает патогенность инфекции, что делает деметоксикуркумин перспективным кандидатом для борьбы с лекарственно-устойчивыми патогенами. Применение ИИ в разработке новых антибиотиков открывает возможности для более точного и быстрого поиска эффективных терапевтических решений [28].

Автоматизированное проектирование лекарств становится ключевой технологией в фармацевтиче-

ской индустрии, позволяя ускорить разработку новых препаратов и снизить финансовые затраты. Благодаря росту вычислительных мощностей за последнее десятилетие методы молекулярного моделирования достигли высокой точности, что значительно повысило эффективность поиска перспективных соединений. ИИ и машинное обучение помогают прогнозировать биологическую активность молекул, их безопасность и возможные взаимодействия, сокращая необходимость в длительных лабораторных экспериментах. Эти технологии открывают новые возможности для создания инновационных лекарств, делая процесс их вывода на рынок более быстрым и экономически выгодным [29].

Молекулярное моделирование – это компьютерный метод, используемый для определения правильной позы связывания комплекса «белок-лиганд» и оценки его прочности с помощью различных функций ранжирования, при этом процесс требует высокоточных структур белков (рентгеноструктурный анализ, ЯМР (Ядерно магнитный резонанс) или гомологическое моделирование), а благодаря современным биоинформатическим инструментам, таким как Swiss Model, Phyre, i-TASSER, AlphaFold и RoseTTAFold, стало возможным предсказывать 3D-структуры белков с высокой точностью, что открывает новые перспективы для разработки лекарств *in silico* [30] the application of computer-aided drug design has been recognized as a powerful technology in the drug discovery pipeline. In accelerating drug discovery, molecular modeling techniques have experienced considerable growth in computational capabilities over the last decade. Pharmaceutical companies and academic research organizations are currently using various computational modeling techniques to lower the cost and time required for the discovery of an effective drug. In this article, we focus on reviewing three key components of molecular modeling (Molecular Docking, Molecular Dynamics, and ADMET modeling).

Современные методы машинного обучения активно применяются в разработке предсказательных моделей для медицины и фармацевтики. Среди наиболее эффективных алгоритмов выделяются метод опорных векторов (SVM), искусственные нейронные сети (ANNs), дерево решений (DT) и случайные леса (RF). Эти методы позволяют анализировать большие объемы данных, выявлять сложные закономерности и строить точные прогнозы [31].

SVM эффективны при работе с небольшими выборками, обеспечивая высокую точность классификации. ANNs способны моделировать нелинейные зависимости, что делает их полезными для задач распознавания структурных особенностей молекул. DT и RF широко используются для построения интерпретируемых моделей, позволяя выявлять ключевые факторы, влияющие на биологическую активность соединений. Благодаря этим методам значительно ускоряется процесс анализа данных, что делает их незаменимыми инструментами в научных исследованиях и разработ-

ке новых лекарственных препаратов [32].

Преимущества и вызовы применения ИИ в разработке антибиотиков

ИИ способствует открытию и разработке новых антибактериальных препаратов, применяя прогнозное и вычислительное моделирование, что ускоряет процесс создания лекарств и помогает снизить затраты. Благодаря методам глубокого обучения можно анализировать обширные библиотеки химических соединений, выявляя те, которые обладают потенциальной антибактериальной активностью. Эти технологии также позволяют прогнозировать успешность новых препаратов на более поздних стадиях разработки, уменьшая риски и финансовые затраты, связанные с фармацевтическими исследованиями [33].

Использование ИИ в создании антибиотиков знаменует собой революционный подход, позволяющий оперативно и точно выявлять новые соединения с уникальными механизмами действия. Такой метод не только сокращает сроки разработки препаратов, но и улучшает их направленность на резистентные штаммы бактерий, что существенно повышает эффективность лечения. Более того, углубленное изучение принципов действия этих антибиотиков, созданных с применением ИИ, играет ключевую роль в оптимизации их клинического применения и разработке профилактических мер для предотвращения дальнейшего роста устойчивости микроорганизмов [34].

Благодаря значительным преимуществам ИИ, исследование мощных химических соединений теперь возможно с беспрецедентной скоростью по сравнению с традиционными методами. Это приводит к сокращению затрат на исследования и разработку лекарственных средств, а также повышает вероятность успешного прохождения клинических испытаний. Стремительное развитие ИИ в сочетании с эпохой больших данных, включающей обширные массивы информации из высокопроизводительных технологий и геномных/экспрессионных баз данных, способствует ускоренному появлению новых химических соединений с уникальными механизмами действия [35].

Два недавних научных исследования описывают применение методов ИИ для быстрого предсказания трёхмерной структуры белков, используя исключительно их аминокислотные последовательности в линейном формате [36, 37].

На протяжении истории рациональный процесс открытия лекарств использовал различные методы машинного интеллекта для оптимизации традиционных экспериментов, которые требуют значительных временных и финансовых затрат. В последние десятилетия были разработаны компьютерные инструменты, такие как количественное моделирование связи между структурой и биологической активностью, позволяющие оперативно и экономично выявлять перспективные биологически активные молекулы среди множества потенциальных соединений. Со временем, с переходом процесса открытия лекарств в эпоху «больших данных», методы машинного обучения (ML) эво-

люционировали в глубинное обучение, предоставляя мощные и эффективные инструменты для обработки огромных массивов данных, возникающих в результате современных исследовательских подходов [38].

Таким образом, компьютерные методы разработки лекарств превратились в перспективную и эффективную технологию, способную ускорить, удешевить и повысить результативность процесса создания новых препаратов [39].

Как отмечается в исследовании, проведенном в Стэнфорде, прогнозы моделей машинного обучения для эмпирического назначения антибиотиков сопоставляются с решениями, принятыми медицинскими специалистами. В ходе анализа были сравнения между предсказанным выбором антибиотиков на начальном этапе инфекции и фактическими данными о резистентности, полученными впоследствии из результатов бактериологических исследований. Авторы подчеркивают, что такие модели способны не только корректно подбирать антибиотики с учетом профиля устойчивости, но и в ряде случаев превосходят врачебные решения, выбирая препараты более узкого спектра. Это, в свою очередь, свидетельствует о потенциальных возможностях повышения безопасности лечения и улучшения стратегии антибиотикотерапии. Кроме того, отмечается, что аналогичные подходы уже реализуются в виде локально адаптированных и оптимизированных инструментов в различных медицинских учреждениях [40].

ИИ вносит новые вызовы в области безопасности данных и защиты конфиденциальности. Медицинская информация представляет особую ценность и подвержена риску утечек, поэтому киберпреступники часто делают её своей целью. В связи с этим обеспечение сохранности и конфиденциальности медицинских записей становится приоритетной задачей [41].

Еще одной значимой проблемой являются этические аспекты, поскольку методы, основанные на ИИ, могут вызывать вопросы о справедливости и возможной предвзятости. Например, если обучающие данные содержат предвзятость или недостаточно репрезентативны, это может привести к неточным и несправедливым прогнозам. Поэтому важно учитывать этические нормы и добросовестный подход при применении ИИ в разработке новых терапевтических соединений [42].

Развитие технологий ИИ порождает новые вызовы, связанные с обработкой данных. Одной из проблем является чрезмерная подгонка, возникающая, когда алгоритм выявляет несущественные взаимосвязи между характеристиками пациента и результатами. Это происходит при наличии большого количества переменных, влияющих на прогноз, что снижает точность предсказаний. В результате модель может показывать высокую эффективность на обучающем наборе данных, но давать неточные прогнозы в реальных условиях. [43].

Перспективы развития

Будущие направления исследований и усовершенствование алгоритмов ИИ охватывают широкий

спектр задач, направленных на повышение эффективности, интерпретируемости и безопасности систем ИИ. Современные модели машинного обучения уже достигли значительных успехов в различных областях, но остаются вызовы, требующие дальнейшего совершенствования [44].

Одним из ключевых направлений является разработка более прозрачных и объяснимых моделей ИИ. Большинство современных алгоритмов, особенно глубокие нейронные сети, работают как «черные ящики», что затрудняет интерпретацию их решений. Исследования в области объяснимого ИИ (Explainable AI) направлены на создание методов, позволяющих понять, на каких факторах основаны выводы модели. Это особенно важно в медицинских, юридических и финансовых приложениях, где обоснованность решений критически важна [45].

Еще одним приоритетным направлением является разработка энергоэффективных алгоритмов. Современные модели, такие как GPT (Generative Pretrained Transformer) и другие трансформеры, требуют огромных вычислительных ресурсов. Оптимизация архитектур нейросетей и использование методов компрессии данных позволят снизить энергопотребление и расширить применение ИИ в мобильных и встроженных устройствах [46].

Кроме того, растет интерес к автономному обучению (Self-Supervised Learning), которое позволяет моделям обучаться на больших объемах неразмеченных данных. Это особенно актуально для областей, где получение размеченных данных дорого или затруднительно [47].

Также важное место занимает разработка надежных механизмов защиты ИИ от атак и манипуляций, включая противодействие фальсифицированным данным и обеспечение конфиденциальности [48].

Будущее ИИ тесно связано с интеграцией инновационных подходов, направленных на баланс между мощностью алгоритмов, их безопасностью и доступностью для общества [49].

Интеграция ИИ с лабораторными методами открывает новые перспективы в диагностике, анализе данных и оптимизации работы лабораторий. Современные алгоритмы машинного обучения и обработки данных позволяют повысить точность исследований, сократить время выполнения тестов и минимизировать влияние человеческого фактора [50].

Одним из ключевых направлений является автоматизация анализа лабораторных данных. ИИ может обрабатывать результаты биохимических, гематологических и микробиологических исследований, выявляя закономерности и аномалии, которые сложно заметить при ручной обработке. Это особенно актуально при интерпретации сложных диагностических тестов, таких как генетический анализ и спектрометрические исследования [51].

Еще одной важной областью является прогнозирование и раннее выявление заболеваний. На основе больших объемов исторических данных ИИ может

предсказывать риски развития патологий, анализируя биомаркеры и клинические показатели. Это позволяет врачам принимать превентивные меры и корректировать лечение на ранних стадиях [52].

ИИ также может использоваться для оптимизации работы лабораторий, включая управление запасами реагентов, планирование загрузки оборудования и контроль качества анализов. Автоматизированные системы способны снижать вероятность ошибок, возникающих из-за человеческого фактора, и обеспечивать стандартизацию процессов [53].

Кроме того, развитие технологий компьютерного зрения позволяет ИИ анализировать микроскопические изображения, улучшая диагностику инфекционных и онкологических заболеваний. Алгоритмы способны распознавать паттерны и аномалии в тканях, крови и других биологических образцах с высокой точностью [54].

Интеграция ИИ с лабораторными методами способствует повышению эффективности диагностики, улучшению качества медицинских услуг и ускорению научных открытий в области биомедицины [55].

Развитие ИИ в медицине открывает широкие возможности для диагностики, лечения и управления пациентами. Однако его применение связано с рядом этических и регуляторных вопросов, которые требуют особого внимания со стороны разработчиков, медицинских работников и государственных органов [56].

Одним из ключевых этических вопросов является защита персональных данных пациентов. Медицинские ИИ-системы обрабатывают большие объемы информации, включая чувствительные сведения о здоровье, что повышает риск утечек и неправомерного использования данных. Для обеспечения конфиденциальности необходимо применять передовые методы шифрования и анонимизации информации [57].

Еще одной важной проблемой является прозрачность и объяснимость решений, принимаемых ИИ. Многие алгоритмы, особенно глубокие нейросети, функционируют как «черные ящики», что затрудняет интерпретацию их выводов. Это может привести к утрате доверия со стороны врачей и пациентов. Разработка методов Explainable AI позволит повысить прозрачность и обоснованность решений [58].

Кроме того, ИИ-системы могут демонстрировать скрытые предвзятости (bias) в зависимости от используемых данных. Если алгоритмы обучены на нерепрезентативных выборках, они могут давать некорректные результаты для определенных групп пациентов. Это особенно критично в таких сферах, как онкология, кардиология и фармакология, где точность диагностики и лечения имеет жизненно важное значение [59].

Использование ИИ в медицинской практике требует четкого регулирования для обеспечения безопасности пациентов. В разных странах применяются различные подходы к сертификации и лицензированию ИИ-систем. Например, в США регулирование осуществляется Управлением по контролю за продуктами

и лекарствами (FDA), а в Европе – в рамках Регламента по медицинским устройствам (MDR) [60].

Один из главных регуляторных вопросов – определение ответственности за ошибки ИИ. Если алгоритм допустил ошибку в диагностике или назначении лечения, остается открытым вопрос: кто несет ответственность – разработчик, врач или медицинское учреждение? Решение этой проблемы требует четких правовых норм [61].

Также важно учитывать, что внедрение ИИ в медицину должно сопровождаться постоянным мониторингом его эффективности и безопасности. Регуляторы требуют проведения клинических испытаний для подтверждения надежности ИИ-систем, аналогично лекарственным препаратам [62].

Таким образом, успешная интеграция ИИ в медицинскую сферу возможна только при соблюдении этических принципов, строгих стандартов безопасности и прозрачных регуляторных норм [63].

Выводы

Антибиотикорезистентность является актуальной проблемой глобального здравоохранения, связанной с чрезмерным и нецелесообразным использованием антибактериальных препаратов в медицинской практике и сельском хозяйстве. Разработка новых антибакте-

риальных средств сопровождается рядом трудностей, включая высокую скорость формирования устойчивости микроорганизмов и снижение эффективности традиционных методов поиска лекарственных соединений.

Использование современных технологий, таких как ИИ, позволяет автоматизировать и ускорить процессы скрининга и оптимизации потенциальных антибактериальных агентов за счёт анализа больших массивов данных и моделирования антибактериальной активности соединений. Примером применения ИИ в данной сфере является идентификация молекулы галицина, обладающей активностью против мультирезистентных штаммов бактерий.

Перспективы развития в данной области включают улучшение алгоритмов ИИ, повышение прозрачности и интерпретируемости моделей, а также применение многокомпонентных стратегий поиска новых антибактериальных препаратов. Интеграция ИИ в процессы разработки лекарственных средств представляет собой инструмент, способствующий повышению эффективности подходов к борьбе с бактериальными инфекциями и минимизации риска формирования устойчивости.

Список литературы:

- Chinemerem Nwobodo D, Ugwu MC, Oliseloke Anie C, Al-Ouqailli MT, Chinedu Ikem J, Victor Chigozie U, Saki M. Antibiotic resistance: The challenges and some emerging strategies for tackling a global menace. *J Clin Lab Anal.* 2022;36(9):e24655. doi: 10.1002/jcla.24655.
- Amin D, Garzón-Orjuela N, Garcia Pereira A, Parveen S, Vornhagen H, Vellinga A. Artificial intelligence to improve antibiotic prescribing: a systematic review. *Antibiotics.* 2023;12(8):1293. doi: 10.3390/antibiotics12081293.
- Sirwan Khalid Ahmed, Safin Hussein, Karzan Qurbani, Radhwan ussein Ibrahim, Abdulmalik Fareeq, Kochr Mahmood Ali. Antimicrobial resistance: Impacts, challenges, and future prospects. *Journal of Medicine, Surgery, and Public Health.* 2024;2:100081. doi: 10.1016/j.gmedi.2024.100081.
- Nelson RE, Hatfield KM, Wolford H, Samore MH, Scott RD, Reddy SC, et.al. National estimates of healthcare costs associated with multidrug-resistant bacterial infections among hospitalized patients in the United States. *Clin Infect Dis.* 2021;72:17–26. doi: 10.1093/cid/ciaa1581.
- Griffith M, Postelnick M, Scheetz M. Antimicrobial stewardship programs: methods of operation and suggested outcomes. *Expert Rev Anti Infect Ther.* 2012;10(1):63–73. doi: 10.1586/eri.11.153.
- Pakyz AL, MacDougall C, Oinonen M, Polk RE. Trends in antibacterial use in US academic health centers: 2002 to 2006. *Arch Intern Med.* 2008;168(20):2254–60. doi: 10.1001/archinte.168.20.2254.
- Victor LY. Guidelines for hospital-acquired pneumonia and health-care-associated pneumonia: a vulnerability, a pitfall, and a fatal flaw. *Lancet Infect Dis.* 2011;11(3):248–52. doi: 10.1016/S1473-3099(11)70005-6.
- Елизарова М, Уразова К, Ермашов С, Пронькин Н. Искусственный интеллект в медицине. *Int J Prof Sci.* 2021;5(5):81–5. <https://cyberleninka.ru/article/n/iskusstvennyy-intellekt-v-medsine-2/viewer>
- Галагудза М, Торопова Я, Конради А. Применение искусственного интеллекта в экспериментальной медицине и в разработке новых лекарственных препаратов. *Российский*

Spisok literatury:

- Chinemerem Nwobodo D, Ugwu MC, Oliseloke Anie C, Al-Ouqailli MT, Chinedu Ikem J, Victor Chigozie U, Saki M. Antibiotic resistance: The challenges and some emerging strategies for tackling a global menace. *J Clin Lab Anal.* 2022;36(9):e24655. doi: 10.1002/jcla.24655.
- Amin D, Garzón-Orjuela N, Garcia Pereira A, Parveen S, Vornhagen H, Vellinga A. Artificial intelligence to improve antibiotic prescribing: a systematic review. *Antibiotics.* 2023;12(8):1293. doi: 10.3390/antibiotics12081293.
- Sirwan Khalid Ahmed, Safin Hussein, Karzan Qurbani, Radhwan ussein Ibrahim, Abdulmalik Fareeq, Kochr Mahmood Ali. Antimicrobial resistance: Impacts, challenges, and future prospects. *Journal of Medicine, Surgery, and Public Health.* 2024;2:100081. doi: 10.1016/j.gmedi.2024.100081.
- Nelson RE, Hatfield KM, Wolford H, Samore MH, Scott RD, Reddy SC, et.al. National estimates of healthcare costs associated with multidrug-resistant bacterial infections among hospitalized patients in the United States. *Clin Infect Dis.* 2021;72:17–26. doi: 10.1093/cid/ciaa1581.
- Griffith M, Postelnick M, Scheetz M. Antimicrobial stewardship programs: methods of operation and suggested outcomes. *Expert Rev Anti Infect Ther.* 2012;10(1):63–73. doi: 10.1586/eri.11.153.
- Pakyz AL, MacDougall C, Oinonen M, Polk RE. Trends in antibacterial use in US academic health centers: 2002 to 2006. *Arch Intern Med.* 2008;168(20):2254–60. doi: 10.1001/archinte.168.20.2254.
- Victor LY. Guidelines for hospital-acquired pneumonia and health-care-associated pneumonia: a vulnerability, a pitfall, and a fatal flaw. *Lancet Infect Dis.* 2011;11(3):248–52. doi: 10.1016/S1473-3099(11)70005-6.
- Elizarova MI, Urazova KM, Ermashov SN. Artificial intelligence in medicine. *Int J Prof Sci.* 2021;5(5):81–5. <https://cyberleninka.ru/article/n/iskusstvennyy-intellekt-v-medsine-2/viewer> (in Russian)
- Galagudza M, Toropova YA, Konradi A. Primeneniye iskusstvennogo intellekta v eksperimental'noy meditsine i v razrabotke novykh lekarstvennykh preparatov. *Rossiyskiy Zhurnal Personalizirovannoy Meditsiny.* 2025;5(1):58–65.

- Журнал Персонализированной Медицины*. 2025;5(1):58–65. doi: 10.18705/2782-3806-2025-5-1-58-65
10. Frieri M, Kumar K, Boutin A. Antibiotic resistance. *J Infect Public Health*. 2017;10(4):369–78. doi: 10.1016/j.jiph.2016.08.007.
 11. C Actis G. The gut microbiome. *Inflamm Allergy-Drug Targets Former Curr Drug Targets-Inflamm AllergyDiscontinued*. 2014;13(4):217–23. doi: 10.2174/1871528113666140623113221.
 12. MacGowan A, Macnaughton E. Antibiotic resistance. *Medicine (Baltimore)*. 2017;45(10):622–8. doi.org/10.1016/j.mpmed.2017.07.006.
 13. Carson CF, Riley TV. Non-antibiotic therapies for infectious diseases. *Commun Dis Intell Q Rep*. 2003;27. doi: 10.33321/cdi.2003.27.38.
 14. Sun S, Chen X. Mechanism-guided strategies for combating antibiotic resistance. *World J Microbiol Biotechnol*. 2024;40(10):295. doi: 10.1007/s11274-024-04106-8.
 15. Ribeiro da Cunha B, Fonseca LP, Calado CR. Antibiotic discovery: where have we come from, where do we go? *Antibiotics*. 2019;8(2):45. doi: 10.3390/antibiotics8020045.
 16. Rabaan, A.A.; Alhumaid, S.; Mutair, A.A.; Garout, M.; Abulhamayel, Y.; Halwani, M.A.; Alestad, J.H.; Bshabshe, A.A.; Sulaiman, T.; AlFonaisan, M.K.; et al. Application of Artificial Intelligence in Combating High Antimicrobial Resistance Rates. *Antibiotics* 2022, 11, 784. doi: 10.3390/antibiotics11060784
 17. Lau HJ, Lim CH, Foo SC, Tan HS. The role of artificial intelligence in the battle against antimicrobial-resistant bacteria. *Curr Genet*. 2021;67(3):421–9. doi: 10.1007/s00294-021-01156-5.
 18. Wong F, de la Fuente-Nunez C, Collins JJ. Leveraging artificial intelligence in the fight against infectious diseases. *Science*. 2023;381(6654):164–70. doi: 10.1126/science.adh1114.
 19. Van der Lee M, Swen JJ. Artificial intelligence in pharmacology research and practice. *Clin Transl Sci*. 2023;16(1):31–6. doi: 10.1111/cts.13431.
 20. Heikamp K, Bajorath J. The future of virtual compound screening. *Chem Biol Drug Des*. 2013;81(1):33–40. doi: 10.1111/cbdd.12054.
 21. Andersen ME, Krewski D. Toxicity testing in the 21st century: bringing the vision to life. *Toxicol Sci*. 2009;107(2):324–30. doi: 10.1093/toxsci/kfn255.
 22. Russo G, Reche P, Pennisi M, Pappalardo F. The combination of artificial intelligence and systems biology for intelligent vaccine design. *Expert Opin Drug Discov*. 2020;15(11):1267–81. doi: 10.1080/17460441.2020.1791076.
 23. Branda F. The impact of artificial intelligence in the fight against antimicrobial resistance. *Infect Dis*. 2024;56(6):484–6. doi: 10.1080/23744235.2024.2331255.
 24. Zhang M, Lin S, Han L, Zhang J, Liu S, Yang X, Wang R, Yang X, Yi Y. Safety and efficacy evaluation of halicin as an effective drug for inhibiting intestinal infections. *Front Pharmacol*. 2024;15:1389293. doi: 10.3389/fphar.2024.1389293
 25. Farha MA, Brown ED. Unconventional screening approaches for antibiotic discovery. *Ann N Y Acad Sci*. 2015;1354(1):54–66. doi: 10.1111/nyas.12803.
 26. Bouhrour N, van der Reijden TJ, Voet MM, Schonkeren-Ravensbergen B, Cordfunke RA, Drijfhout JW, Bendali F, Nibbering PH. Novel antibacterial agents SAAP-148 and halicin combat Gram-negative bacteria colonizing catheters. *Antibiotics*. 2023;12(12):1743. doi: 10.3390/antibiotics12121743.
 27. Liu G, Catacutan DB, Rathod K, Swanson K, Jin W, Mohammed JC, Chiappino-Pepe A, Syed SA, Fragis M, Rachwalski K. Deep learning-guided discovery of an antibiotic targeting *Acinetobacter baumannii*. *Nat Chem Biol*. 2023;19(11):1342–50. doi: 10.1038/s41589-023-01349-8.
 28. Boulaamane Y, Panadero IM, Hmadcha A, Rey CA, Baammi S, Allali AE, Maurady A, Smani Y. Antibiotic discovery with artificial intelligence for the treatment of *Acinetobacter baumannii* infections. *mSystems*. 2024;9(6):e00325-24. doi:10.1128/msystems.00325-24.
 29. Bohr H. Drug discovery and molecular modeling using artificial intelligence. *B: Artificial Intelligence in Healthcare*. Elsevier. 2020: 61–83. doi:10.1016/B978-0-12-818438-7.00003-4.
 30. Adelusi TI, Oyedele AQK, Boyenle ID, Ogunlana AT, Adeyemi RO, Ukachi CD, et al. Molecular modeling in drug discovery. *Inform Med Unlocked*. 2022;29:100880. www.sciencedirect.com/science/article/pii/S235291482200034X
 - doi:10.18705/2782-3806-2025-5-1-58-65. (in Russian)
 10. Frieri M, Kumar K, Boutin A. Antibiotic resistance. *J Infect Public Health*. 2017;10(4):369–78. doi: 10.1016/j.jiph.2016.08.007.
 11. C Actis G. The gut microbiome. *Inflamm Allergy-Drug Targets Former Curr Drug Targets-Inflamm AllergyDiscontinued*. 2014;13(4):217–23. doi: 10.2174/1871528113666140623113221.
 12. MacGowan A, Macnaughton E. Antibiotic resistance. *Medicine (Baltimore)*. 2017;45(10):622–8. doi.org/10.1016/j.mpmed.2017.07.006.
 13. Carson CF, Riley TV. Non-antibiotic therapies for infectious diseases. *Commun Dis Intell Q Rep*. 2003;27. doi: 10.33321/cdi.2003.27.38.
 14. Sun S, Chen X. Mechanism-guided strategies for combating antibiotic resistance. *World J Microbiol Biotechnol*. 2024;40(10):295. doi: 10.1007/s11274-024-04106-8.
 15. Ribeiro da Cunha B, Fonseca LP, Calado CR. Antibiotic discovery: where have we come from, where do we go? *Antibiotics*. 2019;8(2):45. doi: 10.3390/antibiotics8020045.
 16. Rabaan, A.A.; Alhumaid, S.; Mutair, A.A.; Garout, M.; Abulhamayel, Y.; Halwani, M.A.; Alestad, J.H.; Bshabshe, A.A.; Sulaiman, T.; AlFonaisan, M.K.; et al. Application of Artificial Intelligence in Combating High Antimicrobial Resistance Rates. *Antibiotics* 2022, 11, 784. doi: 10.3390/antibiotics11060784
 17. Lau HJ, Lim CH, Foo SC, Tan HS. The role of artificial intelligence in the battle against antimicrobial-resistant bacteria. *Curr Genet*. 2021;67(3):421–9. doi: 10.1007/s00294-021-01156-5.
 18. Wong F, de la Fuente-Nunez C, Collins JJ. Leveraging artificial intelligence in the fight against infectious diseases. *Science*. 2023;381(6654):164–70. doi: 10.1126/science.adh1114.
 19. Van der Lee M, Swen JJ. Artificial intelligence in pharmacology research and practice. *Clin Transl Sci*. 2023;16(1):31–6. doi: 10.1111/cts.13431.
 20. Heikamp K, Bajorath J. The future of virtual compound screening. *Chem Biol Drug Des*. 2013;81(1):33–40. doi: 10.1111/cbdd.12054.
 21. Andersen ME, Krewski D. Toxicity testing in the 21st century: bringing the vision to life. *Toxicol Sci*. 2009;107(2):324–30. doi: 10.1093/toxsci/kfn255.
 22. Russo G, Reche P, Pennisi M, Pappalardo F. The combination of artificial intelligence and systems biology for intelligent vaccine design. *Expert Opin Drug Discov*. 2020;15(11):1267–81. doi: 10.1080/17460441.2020.1791076.
 23. Branda F. The impact of artificial intelligence in the fight against antimicrobial resistance. *Infect Dis*. 2024;56(6):484–6. doi: 10.1080/23744235.2024.2331255.
 24. Zhang M, Lin S, Han L, Zhang J, Liu S, Yang X, Wang R, Yang X, Yi Y. Safety and efficacy evaluation of halicin as an effective drug for inhibiting intestinal infections. *Front Pharmacol*. 2024;15:1389293. doi: 10.3389/fphar.2024.1389293
 25. Farha MA, Brown ED. Unconventional screening approaches for antibiotic discovery. *Ann N Y Acad Sci*. 2015;1354(1):54–66. doi: 10.1111/nyas.12803.
 26. Bouhrour N, van der Reijden TJ, Voet MM, Schonkeren-Ravensbergen B, Cordfunke RA, Drijfhout JW, Bendali F, Nibbering PH. Novel antibacterial agents SAAP-148 and halicin combat Gram-negative bacteria colonizing catheters. *Antibiotics*. 2023;12(12):1743. doi: 10.3390/antibiotics12121743.
 27. Liu G, Catacutan DB, Rathod K, Swanson K, Jin W, Mohammed JC, Chiappino-Pepe A, Syed SA, Fragis M, Rachwalski K. Deep learning-guided discovery of an antibiotic targeting *Acinetobacter baumannii*. *Nat Chem Biol*. 2023;19(11):1342–50. doi: 10.1038/s41589-023-01349-8.
 28. Boulaamane Y, Panadero IM, Hmadcha A, Rey CA, Baammi S, Allali AE, Maurady A, Smani Y. Antibiotic discovery with artificial intelligence for the treatment of *Acinetobacter baumannii* infections. *mSystems*. 2024;9(6):e00325-24. doi:10.1128/msystems.00325-24.
 29. Bohr H. Drug discovery and molecular modeling using artificial intelligence. *B: Artificial Intelligence in Healthcare*. Elsevier. 2020: 61–83. doi:10.1016/B978-0-12-818438-7.00003-4.
 30. Adelusi TI, Oyedele AQK, Boyenle ID, Ogunlana AT, Adeyemi RO, Ukachi CD, et al. Molecular modeling in drug discovery. *Inform Med Unlocked*. 2022;29:100880. www.sciencedirect.com/science/article/pii/S235291482200034X
 31. Serafim MSM, Kronenberger T, Oliveira PR, Poso A, Honorio KM,

31. Serafim MSM, Kronenberger T, Oliveira PR, Poso A, Honorio KM, Mota BEF, Maltarollo VG. The application of machine learning techniques to innovative antibacterial discovery and development. *Expert Opin Drug Discov.* 2020;15(10):1165–80. doi: 10.1080/17460441.2020.1776696.
32. Dara, S., Dhamercherla, S., Jadav, S.S. et al. Machine Learning in Drug Discovery: A Review. *Artif Intell Rev* 55, 1947–1999 (2022). doi: 10.1007/s10462-021-10058-4
33. Branda F, Scarpa F. Implications of artificial intelligence in addressing antimicrobial resistance: Innovations, global challenges, and healthcare's future. *Antibiotics.* 2024;13(6):502. doi: 10.3390/antibiotics13060502.
34. Yönden Z, Reshadi S, Hayati AF, Hooshair MH, Ghasemi S, Yönden H, Daemi A. Reviewing on AI-Designed Antibiotic Targeting Drug-Resistant Superbugs by Emphasizing Mechanisms of Action. *Drug Dev Res.* 2025;86(1):e70066. doi: 10.1002/ddr.70066.
35. Liu, GY., Yu, D., Fan, MM. et al. Antimicrobial resistance crisis: could artificial intelligence be the solution?. *Military Med Res* 11, 7 (2024). doi: 10.1186/s40779-024-00510-1
36. Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 596, 583–589 (2021). doi: 10.1038/s41586-021-03819-2
37. Baek M, DiMaio F, Anishchenko I, Dauparas J, Ovchinnikov S, Lee GR, Wang J, Cong Q, Kinch LN, Schaeffer RD. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science.* 2021;373(6557):871–6. doi: 10.1126/science.abj8754.
38. Lamberti MJ, Wilkinson M, Donzanti BA, Wohlhieter GE, Parikh S, Wilkins RG, Getz K. A study on the application and use of artificial intelligence to support drug development. *Clin Ther.* 2019;41(8):1414–26. doi: 10.1016/j.clinthera.2019.05.018.
39. Roscher R, Bohn B, Duarte MF, Garcke J. Explainable machine learning for scientific insights and discoveries. *Ieee Access.* 2020;8:42200–16. <https://ieeexplore.ieee.org/document/9007737>
40. Chang A, Chen JH. BSAC Vanguard Series: Artificial intelligence and antibiotic stewardship. *J Antimicrob Chemother.* 2022;77(5):1216–7. doi: 10.1093/jac/dkac096.
41. Baowaly MK, Lin CC, Liu CL, Chen KT. Synthesizing electronic health records using improved generative adversarial networks. *J Am Med Inform Assoc.* 2019;26(3):228–41. doi: 10.1093/jamia/ocy142.
42. Kleinberg J. Inherent trade-offs in algorithmic fairness. *ACM SIGMETRICS Performance Evaluation Review,* 2018; 46 (1): 40 doi: 10.1145/3292040.3219634
43. Neill DB. Using artificial intelligence to improve hospital inpatient care. *IEEE Intell Syst.* 2013;28(2):92–5. <https://www.cs.cmu.edu/~neill/papers/iee-is2013.pdf>
44. Zhang C, Lu Y. Study on artificial intelligence: The state of the art and future prospects. *J Ind Inf Integr.* 2021;23:100224. doi: 10.1016/j.jii.2021.100224.
45. Mishra S. Artificial intelligence: A review of progress and prospects in medicine and healthcare. *J Electron Electromed Eng Med Inform.* 2022;4(1):1–23. doi: 10.35882/jeeemi.v4i1.1
46. Sheliemina N. The use of artificial intelligence in medical diagnostics: Opportunities, prospects and risks. *Health Econ Manag Rev.* 2024;5(2):104–24. doi: 10.61093/hem.2024.2-07.
47. Khan T, Ahmad MM, Munir MU, Bukhari SNA, Naveed MA. Prospects of Artificial Intelligence in the Improvement of Healthcare Professions: A Review. *J Pharm.* 2024;4(1):129–37. doi.org/10.31436/jop.v4i1.238.
48. Zhang Y, Ding X, Hu F. Application and Development Prospect of Artificial Intelligence and Big Data in Medical and Health Field. *B IOP Publishing.* 2020:012108. doi: 10.1088/1742-6596/1621/1/012108.
49. Koçak B, Ponsiglione A, Stanzione A, Bluethgen C, Santinha J, Ugga L, Huisman M, Klontzas ME, Cannella R, Cuocolo R. Bias in artificial intelligence for medical imaging: fundamentals, detection, avoidance, mitigation, challenges, ethics, and prospects. *Diagn Interv Radiol.* 2025;31(2):75. doi: 10.4274/dir.2024.242854.
50. Gennatas ED, Chen JH. Artificial intelligence in medicine: past, present, and future. *B: Artificial intelligence in medicine. Elsevier.* 2021:3–18. doi:10.1016/B978-0-12-821259-2.00001-6.
51. Briganti G, Le Moine O. Artificial intelligence in medicine: today and tomorrow. *Front Med.* 2020;7:509744. doi: 10.3389/fmed.2020.00027.
52. Mota BEF, Maltarollo VG. The application of machine learning techniques to innovative antibacterial discovery and development. *Expert Opin Drug Discov.* 2020;15(10):1165–80. doi: 10.1080/17460441.2020.1776696.
32. Dara, S., Dhamercherla, S., Jadav, S.S. et al. Machine Learning in Drug Discovery: A Review. *Artif Intell Rev* 55, 1947–1999 (2022). doi: 10.1007/s10462-021-10058-4
33. Branda F, Scarpa F. Implications of artificial intelligence in addressing antimicrobial resistance: Innovations, global challenges, and healthcare's future. *Antibiotics.* 2024;13(6):502. doi: 10.3390/antibiotics13060502.
34. Yönden Z, Reshadi S, Hayati AF, Hooshair MH, Ghasemi S, Yönden H, Daemi A. Reviewing on AI-Designed Antibiotic Targeting Drug-Resistant Superbugs by Emphasizing Mechanisms of Action. *Drug Dev Res.* 2025;86(1):e70066. doi: 10.1002/ddr.70066.
35. Liu, GY., Yu, D., Fan, MM. et al. Antimicrobial resistance crisis: could artificial intelligence be the solution?. *Military Med Res* 11, 7 (2024). doi: 10.1186/s40779-024-00510-1
36. Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 596, 583–589 (2021). doi: 10.1038/s41586-021-03819-2
37. Baek M, DiMaio F, Anishchenko I, Dauparas J, Ovchinnikov S, Lee GR, Wang J, Cong Q, Kinch LN, Schaeffer RD. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science.* 2021;373(6557):871–6. doi: 10.1126/science.abj8754.
38. Lamberti MJ, Wilkinson M, Donzanti BA, Wohlhieter GE, Parikh S, Wilkins RG, Getz K. A study on the application and use of artificial intelligence to support drug development. *Clin Ther.* 2019;41(8):1414–26. doi: 10.1016/j.clinthera.2019.05.018.
39. Roscher R, Bohn B, Duarte MF, Garcke J. Explainable machine learning for scientific insights and discoveries. *Ieee Access.* 2020;8:42200–16. <https://ieeexplore.ieee.org/document/9007737>
40. Chang A, Chen JH. BSAC Vanguard Series: Artificial intelligence and antibiotic stewardship. *J Antimicrob Chemother.* 2022;77(5):1216–7. doi: 10.1093/jac/dkac096.
41. Baowaly MK, Lin CC, Liu CL, Chen KT. Synthesizing electronic health records using improved generative adversarial networks. *J Am Med Inform Assoc.* 2019;26(3):228–41. doi: 10.1093/jamia/ocy142.
42. Kleinberg J. Inherent trade-offs in algorithmic fairness. *ACM SIGMETRICS Performance Evaluation Review,* 2018; 46 (1): 40 doi: 10.1145/3292040.3219634
43. Neill DB. Using artificial intelligence to improve hospital inpatient care. *IEEE Intell Syst.* 2013;28(2):92–5. <https://www.cs.cmu.edu/~neill/papers/iee-is2013.pdf>
44. Zhang C, Lu Y. Study on artificial intelligence: The state of the art and future prospects. *J Ind Inf Integr.* 2021;23:100224. doi: 10.1016/j.jii.2021.100224.
45. Mishra S. Artificial intelligence: A review of progress and prospects in medicine and healthcare. *J Electron Electromed Eng Med Inform.* 2022;4(1):1–23. doi: 10.35882/jeeemi.v4i1.1
46. Sheliemina N. The use of artificial intelligence in medical diagnostics: Opportunities, prospects and risks. *Health Econ Manag Rev.* 2024;5(2):104–24. doi: 10.61093/hem.2024.2-07.
47. Khan T, Ahmad MM, Munir MU, Bukhari SNA, Naveed MA. Prospects of Artificial Intelligence in the Improvement of Healthcare Professions: A Review. *J Pharm.* 2024;4(1):129–37. doi.org/10.31436/jop.v4i1.238.
48. Zhang Y, Ding X, Hu F. Application and Development Prospect of Artificial Intelligence and Big Data in Medical and Health Field. *B IOP Publishing.* 2020:012108. doi: 10.1088/1742-6596/1621/1/012108.
49. Koçak B, Ponsiglione A, Stanzione A, Bluethgen C, Santinha J, Ugga L, Huisman M, Klontzas ME, Cannella R, Cuocolo R. Bias in artificial intelligence for medical imaging: fundamentals, detection, avoidance, mitigation, challenges, ethics, and prospects. *Diagn Interv Radiol.* 2025;31(2):75. doi: 10.4274/dir.2024.242854.
50. Gennatas ED, Chen JH. Artificial intelligence in medicine: past, present, and future. *B: Artificial intelligence in medicine. Elsevier.* 2021:3–18. doi: 10.1016/B978-0-12-821259-2.00001-6.
51. Briganti G, Le Moine O. Artificial intelligence in medicine: today and tomorrow. *Front Med.* 2020;7:509744. doi: 10.3389/fmed.2020.00027.
52. Seifert R, Weber M, Kocakavuk E, Rischpler C, Kersting D. Artificial

52. Seifert R, Weber M, Kocakavuk E, Rischpler C, Kersting D. Artificial intelligence and machine learning in nuclear medicine: future perspectives. *B Elsevier*. 2021;170–7. doi: 10.1053/j.semnuclmed.2020.08.003.
53. Buch VH, Ahmed I, Maruthappu M. Artificial intelligence in medicine: current trends and future possibilities. *Br J Gen Pract*. 2018;68(668):143–4. doi: 10.3399/bjgp18X695213.
54. Jassar S, Adams SJ, Zarzecny A, Burbridge BE. The future of artificial intelligence in medicine: medical-legal considerations for health leaders. *B SAGE Publications Sage CA: Los Angeles, C*. 2022;185–9. doi: 10.1177/08404704221082069.
55. Saboury B, Morris M, Siegel E. Future directions in artificial intelligence. *Radiol Clin*. 2021;59(6):1085–95. doi: 10.1016/j.rcl.2021.07.008.
56. Thomas LB, Mastorides SM, Viswanadhan NA, Jakey CE, Borkowski AA. Artificial intelligence: review of current and future applications in medicine. *Fed Pract*. 2021;38(11):527. doi: 10.12788/fp.0174.
57. Noorbakhsh-Sabet N, Zand R, Zhang Y, Abedi V. Artificial intelligence transforms the future of health care. *Am J Med*. 2019;132(7):795–801. doi: 10.1016/j.amjmed.2019.01.017.
58. Hamet P, Tremblay J. Artificial intelligence in medicine. *Metabolism*. 2017;69:S36–40. doi: 10.1016/j.metabol.2017.01.011.
59. Patel VL, Shortliffe EH, Stefanelli M, Szolovits P, Berthold MR, Bellazzi R, Abu-Hanna A. The coming of age of artificial intelligence in medicine. *Artif Intell Med*. 2009;46(1):5–17. doi: 10.1016/j.artmed.2008.07.017.
60. Lewis SJ, Gandomkar Z, Brennan PC. Artificial Intelligence in medical imaging practice: looking to the future. *J Med Radiat Sci*. 2019;66(4):292–5. doi: 10.1002/jmrs.369.
61. Lanzagorta-Ortega D, Carrillo-Pérez DL, Carrillo-Esper R. Artificial intelligence in medicine: present and future. *Gac Médica México*. 2022;158:17–21. doi: 10.24875/GMM.M22000688.
62. Kaul V, Enslin S, Gross SA. History of artificial intelligence in medicine. *Gastrointest Endosc*. 2020;92(4):807–12. doi: 10.1016/j.gie.2020.06.040.
63. Schwalbe N, Wahl B. Artificial intelligence and the future of global health. *The Lancet*. 2020;395(10236):1579–86. doi: 10.1016/S0140-6736(20)30226-9.
- intelligence and machine learning in nuclear medicine: future perspectives. *B Elsevier*. 2021:170–7. doi: 10.1053/j.semnuclmed.2020.08.003.
53. Buch VH, Ahmed I, Maruthappu M. Artificial intelligence in medicine: current trends and future possibilities. *Br J Gen Pract*. 2018;68(668):143–4. doi: 10.3399/bjgp18X695213.
54. Jassar S, Adams SJ, Zarzecny A, Burbridge BE. The future of artificial intelligence in medicine: medical-legal considerations for health leaders. *B SAGE Publications Sage CA: Los Angeles, C*. 2022:185–9. doi: 10.1177/08404704221082069.
55. Saboury B, Morris M, Siegel E. Future directions in artificial intelligence. *Radiol Clin*. 2021;59(6):1085–95. doi: 10.1016/j.rcl.2021.07.008.
56. Thomas LB, Mastorides SM, Viswanadhan NA, Jakey CE, Borkowski AA. Artificial intelligence: review of current and future applications in medicine. *Fed Pract*. 2021;38(11):527. doi: 10.12788/fp.0174.
57. Noorbakhsh-Sabet N, Zand R, Zhang Y, Abedi V. Artificial intelligence transforms the future of health care. *Am J Med*. 2019;132(7):795–801. doi: 10.1016/j.amjmed.2019.01.017.
58. Hamet P, Tremblay J. Artificial intelligence in medicine. *Metabolism*. 2017;69:S36–40. doi: 10.1016/j.metabol.2017.01.011.
59. Patel VL, Shortliffe EH, Stefanelli M, Szolovits P, Berthold MR, Bellazzi R, Abu-Hanna A. The coming of age of artificial intelligence in medicine. *Artif Intell Med*. 2009;46(1):5–17. doi: 10.1016/j.artmed.2008.07.017.
60. Lewis SJ, Gandomkar Z, Brennan PC. Artificial Intelligence in medical imaging practice: looking to the future. *J Med Radiat Sci*. 2019;66(4):292–5. doi: 10.1002/jmrs.369.
61. Lanzagorta-Ortega D, Carrillo-Pérez DL, Carrillo-Esper R. Artificial intelligence in medicine: present and future. *Gac Médica México*. 2022;158:17–21. doi: 10.24875/GMM.M22000688.
62. Kaul V, Enslin S, Gross SA. History of artificial intelligence in medicine. *Gastrointest Endosc*. 2020;92(4):807–12. doi: 10.1016/j.gie.2020.06.040.
63. Schwalbe N, Wahl B. Artificial intelligence and the future of global health. *The Lancet*. 2020;395(10236):1579–86. doi: 10.1016/S0140-6736(20)30226-9.