



12+

АЛЕКСАНДР ЮРЬЕВИЧ ЧЕСАЛОВ
Atlansys EUS MedPharma

ПЛАТФОРМА

ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА,
КОТОРАЯ СОЗДАЕТ ЛЕКАРСТВА
КОНЦЕПЦИЯ АРХИТЕКТУРЫ

Александр Чесалов

**Atlansys EUS MedPharma —
платформа искусственного
интеллекта, которая
создает лекарства.
Концепция архитектуры**

«Издательские решения»

Чесалов А. Ю.

Atlansys EUS MedPharma — платформа искусственного интеллекта, которая создает лекарства. Концепция архитектуры / А. Ю. Чесалов — «Издательские решения»,

Представьте мир, где неизлечимые болезни становятся управляемыми, где лекарства создаются не за десятилетия, а за месяцы, и где каждый пациент получает лечение, разработанное специально для него. Звучит как фантастика? Уже нет. Сегодня искусственный интеллект становится главным союзником человечества в борьбе с болезнями, открывая новые горизонты в медицине и фармакологии. Эта книга — это ваш первый шаг в удивительный мир медицины будущего. Готовы? Тогда в путь.

© Чесалов А. Ю.

© Издательские решения

Содержание

От Автора	6
Благодарность	10
Архитектура платформы Atlansys EUS MedPharma, как инструмент цифровой трансформации процессов фармацевтической разработки новых соединений на основе технологий искусственного интеллекта	11
Введение	12
Постановка задачи исследования	14
Концептуальная архитектура	16
Конец ознакомительного фрагмента.	22

Atlansys EUS MedPharma — платформа искусственного интеллекта, которая создает лекарства Концепция архитектуры

Александр Юрьевич Чесалов

Дизайнер обложки Александр Юрьевич Чесалов

Иллюстратор Александр Юрьевич Чесалов

© Александр Юрьевич Чесалов, 2026

© Александр Юрьевич Чесалов, дизайн обложки, 2026

© Александр Юрьевич Чесалов, иллюстрации, 2026

ISBN 978-5-0070-0400-8

Создано в интеллектуальной издательской системе Ridero

От Автора

«О чем вы бы ни мечтали, приступайте! В дерзости есть гений, и сила, и волшебство», — Иоганн Вольфганг фон Гёте.

Добрый день, дорогие друзья и коллеги!

Представляю вашему вниманию свою небольшую, но, как мне кажется важную, научно-исследовательскую работу на тему «Архитектура платформы Atlansys EUS MedPharma», как инструмент цифровой трансформации процессов фармацевтической разработки новых соединений на основе технологий искусственного интеллекта».

С 2021 года в компании «Программные системы Атлансис» ведутся работы по созданию отечественной цифровой платформы Atlansys EUS MedPharma для фармацевтической отрасли.

Нужно отметить, что на тот момент времени у нас не было четкого понимания того, какие задачи будет решать система Atlansys EUS. Основная идея разработки заключалась в том, чтобы создать платформу, которая будет обеспечивать решение самого широкого круга задач машинного обучения и предоставлять эту возможность заказчикам, как сервисную услугу, по аналогии с решениями и сервисами компании IBM или Amazon Web Services. Тогда мы были еще в начале своего пути.

Аббревиатура «EUS» в названии решения является сокращением от слов «Electronic Universal System» и выбрана она не случайно, так как является отсылкой к 80-м и 90-м годам двадцатого века, как дань уважения к инженерам и программистам того времени. Это был невероятно интересный период времени, когда зарождались компьютерные технологии и первые «интеллектуальные» информационные и экспертные системы, поражающие воображение людей и писателей — фантастов.

Тем не менее, как бы нам не хотелось создать что-то полезное и универсальное, рынок диктовал свои условия. Среди наших заказчиков, с которыми постоянно приходилось иметь дело, было много промышленных предприятий и предприятий из фармацевтической отрасли. В итоге, было принято решение заниматься прикладными задачами заказчиков и сфокусироваться на двух направлениях НИОКР: прогнозируемое (или предписывающее) обслуживание в промышленности и создание новых соединений в фармацевтике.

В 2023 году платформа была зарегистрирована в Роспатенте (свидетельство №2023619721).

В 2024 году цель разработки Atlansys EUS MedPharma стала более конкретной и, на сегодняшний день, она заключается в создании передовой платформы искусственного интеллекта для достижения на ее основе результатов мирового уровня в сфере разработки инновационных фармацевтических препаратов и медицинских технологий.

Atlansys EUS MedPharma — это не только цифровая платформа или аппаратно-программный комплекс, это, уже, большой проект, который объединяет ученых и инженеров из более чем десяти ведущих технических и медицинских университетов Российской Федерации. Atlansys EUS MedPharma — это проект с огромным инновационным и инвестиционным потенциалом.

В 2025 году нами получены первые практические результаты:

- созданы новые алгоритмы машинного обучения и получены соответствующие свидетельства на регистрацию программ для ЭВМ;
- разработаны новые соединения — кандидаты и поданы соответствующие заявки на регистрацию патентов на изобретения.

В 2026 году нами получен Патент №2860793 на лекарство от рака толстой кишки и рака мочевого пузыря человека¹, а также Патент 2861491 на супрамолекулярный комплекс, обладающий нейропротекторным действием в условиях ишемического поражения мозга и гипоксии².

На сегодняшний день, мы, как компания «Программные системы Атлансис», проходим трудный, но увлекательный путь, который в свое время начался с концепции архитектуры системы.

В данной работе я, как автор, с уважением к ученым — исследователям и инженерам-новаторам, представляю вам для изучения первоначальную концептуальную архитектуру платформы Atlansys EUS MedPharma и те технологии искусственного интеллекта (ИИ), которые, в совокупности, позволяют создавать новый инструмент цифровой трансформации процессов фармацевтической разработки новых соединений.

В ней рассмотрены архитектурные принципы построения ИИ-платформы Atlansys EUS MedPharma, специфика применения различных классов алгоритмов машинного обучения на отдельных этапах фармацевтического НИОКР (R&D), а также комплексный синергетический эффект от их интеграции. Особое внимание уделено решению проблемы «бутылочного горлышка верификации» — разрыва между скоростью *in silico*-предсказания и экспериментальной проверки. Показано, что стратегия «AI-first» и создание целостных автоматизированных рабочих процессов позволяют не только сократить время дизайна молекул-кандидатов на 25—30%, но икратно повысить точность прогнозирования ключевых параметров (биологическая активность, токсичность, фармакокинетика), что в совокупности ведет к снижению стоимости разработки до 70%.

На сегодняшний день, эффективная интеграция ИИ в процессы разработки препаратов требует системного подхода, основанного на нескольких фундаментальных принципах:

- **Модульность и масштабируемость.** Платформа должна строиться, как набор независимых, но интегрированных технологических модулей, каждый из которых отвечает за конкретный этап разработки (идентификация мишени, дизайн молекулы, прогнозирование свойств, планирование синтеза и так далее). Это позволяет осуществлять поэтапное внедрение и адаптацию под специфические потребности исследовательских проектов.

- **Сквозная интеграция данных.** Обеспечивается единое пространство данных от стадии предсказания структуры белков до клинических испытаний, с реализацией автоматизированного контроля качества и поддержкой версионности.

- **Регуляторное соответствие.** Все компоненты платформы проектируются с учетом основных требований международных стандартов и национальных регуляторных норм,

¹ Патент на изобретение №2860793 Российская Федерация (RU), МПК C07D 239/54 (2006.01) A61K 31/505 (2006.01) A61P 35/00 (2006.01). Малотоксичное производное 5-метил-пиримидиндиона, обладающее противоопухолевой активностью / Чесалов А. Ю. и др.; Заявитель и и патентообладатель: ООО «Программные системы Атлансис». Заявка №2025123872, заявл. 29.08.2025 опубли. 21.04.2026. Бюл. №2.

² Патент на изобретение №2861491 Российская Федерация (RU), МПК C07C 229/08 (2006.01), C07C 227/14 (2006.01), C07F 3/02 (2006.01), A61K 31/205 (2006.01), A61P 9/10 (2006.01), A61P 25/00 (2006.01), A61P 39/00 (2006.01). Супрамолекулярный комплекс на основе 4-аминобутановой кислоты, обладающий нейропротекторным действием в условиях ишемического поражения мозга и гипоксии / Чесалов А. Ю. и др.; Заявитель и и патентообладатель: ООО «Программные системы Атлансис». Заявка №2025109706, заявл. 17.04.2025 опубли. 05.05.2026. Бюл. №13.

что обеспечивает долгосрочную устойчивость в условиях быстро меняющегося нормативного ландшафта.

Примером реализации таких принципов является платформа Atlansys EUS MedPharma, архитектура которой включает четыре базовые системы: исследований и разработок (R&D), управления данными и инфраструктурой, визуализации и отчетности, информационной безопасности.

Нужно обратить внимание на то, что в системе нет, да и не может быть, одного универсального алгоритма или модели машинного обучения, которые бы выполняли комплексные задачи или задачи сквозной автоматизации процессов. В системе есть набор специализированных алгоритмов ИИ для ключевых этапов разработки новых соединений, в том числе, предназначенных для:

- **Предсказания структуры био-мишеней.** В свое время, фундаментальным прорывом в области структурной биоинформатики стало появление систем глубокого обучения для предсказания 3D-структуры белков. AlphaFold2 от компании DeepMind решила проблему фолдинга белка, обеспечивая экспресс-предсказание его структуры с точностью, сопоставимой с экспериментальными методами. Эстафету принимают системы следующего поколения, такие как RoseTTAFold All-Atom, способная прогнозировать структуры широкого спектра биомолекулярных ансамблей, включая белки, нуклеиновые кислоты и малые молекулы, а также ESMFold, использующая подходы крупных языковых моделей, обученных на миллионах белковых последовательностей.

- **Генерации дизайна молекул.** Архитектуры генеративного ИИ — вариационные автоэнкодеры (VAE), генеративно-состязательные сети (GAN) и модели на основе трансформеров — позволяют создавать de novo химические структуры с заданными свойствами. Модели типа REINVENT и Molecular Transformer объединяют генерацию с обучением с подкреплением для итеративной оптимизации соединений-лидеров. Например, платформа Pharma.AI от Insilico Medicine использует гибридный подход, комбинирующий GAN с обучением с подкреплением, для создания de novo молекул, нацеленных на терапию идиопатического легочного фиброза, что позволило сократить время дизайна кандидата с традиционных 3—5 лет до 18 месяцев.

- **Виртуального скрининга и прогнозирования взаимодействий.** Графовые нейронные сети (GNN) заняли лидирующие позиции в вычислительной фармакологии благодаря способности напрямую оперировать графовыми структурами, где атомы представляются узлами, а химические связи — ребрами. Точность моделей, таких как Message Passing Neural Networks (MPNN), в задачах предсказания биологической активности достигает 92%. Для задач молекулярного докинга разработаны специализированные архитектуры, такие как EquiBind и DiffDock, которые позволяют предсказывать связывание лигандов за секунды вместо часов традиционного докинга.

- **Прогнозирования ADMET-свойств.** Ансамбли моделей машинного обучения и специализированные архитектуры глубоких нейронных сетей позволяют с высокой точностью предсказывать критические ADMET-характеристики (адсорбция, распределение, метаболизм, выведение, токсичность). Это формирует обоснованное суждение о перспективности кандидата до начала дорогостоящих лабораторных испытаний. Например, платформа Centaur Chemist от Exscientia осуществляет предсказание ADMET-параметров на этапе компьютерного моделирования, что позволило компании сократить время разработки соединения-кандидата в 3—5 раз.

- **Мультимодальной интеграции данных.** Мультимодальные нейронные сети, обрабатывающие данные из разнородных источников (молекулярные, гистологические, радиологические, клинические), открывают новые горизонты в фармацевтических исследованиях. Архитектуры, такие как графовые нейронные сети и трансформеры, позволяют объединять

информацию из различных источников, создавая целостные представления о биологических системах.

Искусственный интеллект уже сегодня трансформирует фармацевтическую разработку, обеспечивая переход от эвристического поиска к целенаправленному, предсказуемому и ускоренному созданию лекарственных средств. Специализированные алгоритмы машинного обучения позволяют решать ключевые задачи на всех этапах разработки: от предсказания структуры мишеней и дизайна молекул до прогнозирования свойств и оптимизации клинических испытаний.

Ключевым вызовом для разработчиков в ближайшие годы будет проблема «бутылочного горлышка верификации», для преодоления которой необходим комплексный подход, объединяющий автоматизацию лабораторий, специализированные ИИ-модели и их интеграция в цифровые платформы.

Основной вывод, который я делаю, заключается в том, что дальнейшее развитие фармацевтики тесно связано с симбиозом человеческого и искусственного интеллекта, где каждый усиливает возможности другого в решении самых сложных медицинских проблем человечества. Компании и исследовательские институты, эффективно интегрирующие ИИ в свои рабочие процессы, получают значительное конкурентное преимущество в виде ускоренной разработки инновационных лекарств для лечения сложных заболеваний.

Представьте себе мир, где неизлечимые болезни становятся управляемыми, где лекарства создаются не за десятилетия, а за месяцы, и где каждый пациент получает лечение, разработанное специально для него. Звучит как фантастика? Уже нет. Сегодня искусственный интеллект становится главным союзником человечества в борьбе с болезнями, открывая новые горизонты в медицине и фармакологии.

Эта публикация — Ваш первый шаг в удивительный мир медицины будущего.

Готовы?

Тогда, в добрый путь, друзья и коллеги.

Я надеюсь, что мой опыт будет Вам полезен.

Ваш, Александр Чесалов.

Благодарность

Выражаю глубокую благодарность всем тем людям, которые вдохновили меня своим примером, поддержали в моих инициативах, исследованиях и помогли мне поверить в свои силы, чтобы провести невероятную работу над накопленным за последние годы материалом и приступить к работе над проектом создания центра компетенций в области ИТ и искусственного интеллекта для разработки инновационных фармацевтических препаратов на основе технологий искусственного интеллекта и платформы Atlansys EUS MedPharma.

Особую благодарность выражаю выдающемуся Советскому и Российскому ученому, доктору химических наук, профессору, заведующей отделом химии и технологии Всесоюзного научного центра по безопасности биологически активных веществ (АО «ВНЦ БАВ»), которая проработала более шестидесяти лет в области создания лекарственных препаратов Скачиловой Софии Яковлевне, а также ученым и коллегам из АО «ВНЦ БАВ».

Выражаю благодарность людям, которые поддержали меня в моей работе над проектом, а именно:

— Кандидату химических наук, заведующему лабораторией тонкого органического синтеза Белгородского научно-исследовательского университета, который работает более сорока лет в области химии и технологий синтетических лекарственных средств Староверову Владимиру Михайловичу.

— Кандидату технических наук, директору Научно-исследовательского института энергетического машиностроения МГТУ им. Н. Э. Баумана Французову Максиму Сергеевичу.

Архитектура платформы Atlansys EUS MedPharma, как инструмент цифровой трансформации процессов фармацевтической разработки новых соединений на основе технологий искусственного интеллекта

**Основные положения и результаты исследования,
содержащиеся в данной работе, опубликованы в журнале
«Информационные технологии» (ВАК K1).**

Введение

Современная фармацевтическая промышленность переживает сдвиг парадигмы, обусловленный глубокой интеграцией технологий искусственного интеллекта в процессы разработки и создания новых лекарственных средств. В условиях, когда традиционный путь создания препарата занимает 10—15 лет и требует огромных инвестиций, технологии искусственного интеллекта (ИИ) демонстрируют потенциал сокращения времени разработки новых лекарств на 25% и снижения стоимости разработки до 70% [3].

Интеграция методов генеративного ИИ в фармацевтический НИОКР ((англ. Research and Development, R&D) привела к появлению высокоспециализированных вычислительных платформ. В области генеративной химии платформа Pharma.AI (от компании Insilico Medicine) использует гибридный подход, комбинирующий генеративно-состязательные сети (GAN) с обучением с подкреплением, для создания *de novo* молекул, нацеленных на терапию идиопатического легочного фиброза, с перспективными результатами на экспериментальной стадии. Для задач виртуального скрининга на основе структуры мишени платформа AtomNet (от компании Atomwise) применяет сверточные нейронные сети, что позволило успешно идентифицировать новые классы соединений-ингибиторов для высокопатогенных вирусов, включая вирус Эбола. Фундаментальный прорыв в области структурной биоинформатики был осуществлен системой AlphaFold2 (от компании DeepMind), которая решает проблему фолдинга белка, обеспечивая экспресс-предсказание его 3D-структуры. Эстафету в этой области принимает платформа Chai-1 (от компании Chai Discovery), которая демонстрирует более высокую точность в прогнозировании молекулярной структуры. Ее ключевое конкурентное преимущество — универсальность, позволяющая моделировать структуры и взаимодействия для гетерогенного набора объектов, включая малые молекулы, белки, ДНК, РНК и их постсинтетические модификации, позиционируя ее как ведущий инструмент для разработки таргетных терапевтических агентов [4].

По данным разработчика Exscientia, платформа Centaur Chemist позволила сократить время разработки соединения — кандидата в три — пять раз (с трех-пяти лет до одного года), и приступить к фазе клинических исследований [5, 6]. В процессе разработки новых лекарственных препаратов, платформа Centaur Chemist решает следующие задачи:

— Высокопроизводительный скрининг химических библиотек. Алгоритмы ИИ осуществляют высокопроизводительный *in silico* скрининг обширных коллекций соединений, идентифицируя структуры с максимальным сродством к мишени. Это позволяет значительно сузить круг наиболее перспективных кандидатов для последующих экспериментальных исследований.

— *De novo* дизайн молекул. На основе структурных данных о мишени система генерирует принципиально новые молекулярные структуры, оптимизированные для специфического связывания. Такой подход направлен на создание соединений с улучшенными характеристиками, включая высокую эффективность и селективность.

³. AI in Pharmaceutical Industry: Top Use Cases, Implementation Strategies 2025. [Электронный ресурс] 2025 URL: <https://sranalytics.io/blog/ai-in-pharmaceutical-industry/> (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

⁴. Somesh Sharma. Algorithms to Treatments: AI's Impact on Modern Drug Discovery [Электронный ресурс] 2024 URL: <https://www.aragen.com/news/algorithms-to-treatments-ais-impact-on-modern-drug-discovery/> (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

⁵. Shipra Malhotra. How Exscientia Reduces Drug Discovery Time With Gen AI [Электронный ресурс] 2023 URL: <https://www.cio.inc/how-exscientia-reduces-drug-discovery-time-gen-ai-a-23015> (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

⁶. Ujwal Krishnan. Exscientia's Legacy: The AI Drug Discovery Pioneer and the Recursion Merger [Электронный ресурс] 2023 URL: <https://www.eutechfuture.com/health-tech/exscientia-ai-drug-discovery-recursion-merger/> (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

— Прогнозирование фармакологических свойств. На этапе компьютерного моделирования производится предсказание критически важных ADMET-характеристик (адсорбция, распределение, метаболизм, выведение, токсичность и фармакодинамики), формируя обоснованное суждение о перспективности кандидата до начала дорогостоящих лабораторных и клинических испытаний.

По оценкам аналитиков McKinsey, применение технологий генеративного ИИ способно реально снизить затраты на НИОКР на 10 — 15% [7].

Современные ИИ-технологии позволяют не только ускорить традиционные процессы разработки новых соединений, но и открывают принципиально новые подходы к созданию лекарственных средств. Успешная реализация этого потенциала требует тесной интеграции экспертизы в области компьютерных наук, химии, биологии и медицины.

⁷ .The economic potential of generative AI: The next productivity frontier [Электронный ресурс] 2023 URL: <https://www.mckinsey.com/industries/life-sciences/our-insights/the-economic-potential-of-generative-ai-the-next-productivity-frontier> (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

Постановка задачи исследования

На сегодняшний день, существует фундаментальное противоречие между экспоненциальным ростом объема и сложности биомедицинских данных и линейной, крайне неэффективной скоростью их анализа и преобразования в новые химические соединения — кандидаты с помощью традиционных методов обработки информации. Эти методы часто обладают недостаточной производительностью и точностью для надежного предсказания ключевых свойств молекул *in vivo* (эффективность, токсичность, фармакокинетика), что вынуждает проводить избыточное количество дорогостоящих лабораторных и клинических экспериментов. Уже много лет, специалисты часто говорят о том, что на одно открытое лекарство приходится десять тысяч исследованных соединений [8]. Длительные итеративные циклы «дизайн-синтез-тестирование-анализ» на каждом этапе (предсказание структуры белка, дизайн молекулы, доклинические испытания) приводят к мультипликативному эффекту. В результате совокупные временные и финансовые затраты делают разработку препаратов экономически нецелесообразной для многих заболеваний, особенно редких и требующих персонализированного подхода. Кроме того, у отечественных фармацевтических компаний существует потребность в использовании единой платформы для верификации, интеграции и сквозного анализа данных. Таким образом, научная проблема заключается в отсутствии единой (системной), сквозной методологии и созданной на ее основе архитектуры, способной преодолеть информационную и методологическую фрагментарность фармацевтической разработки новых соединений, за счет создания цифровой платформы и использования передовых технологий искусственного интеллекта, в единый, когерентный и автоматизированный рабочий процесс, обеспечивающий переход от эвристического поиска к целенаправленному, предсказуемому и ускоренному созданию лекарственных средств.

Целью настоящего исследования является разработка и валидация базовой архитектуры ИИ-платформы Atlansys EUS MedPharma для трансформации процессов фармацевтической разработки новых соединений, через создание интегрированной системы взаимодополняющих технологических модулей, которые обеспечат переход от эвристических методов к прогнозируемому и управляемому процессу создания новых соединений с количественно оцениваемым результатом.

Достижение цели осуществляется через реализацию стратегии «AI-first», которая широко используется международными компаниями с 2021 года (например, такими как, корпорацией Alphabet, владельцем Google и ее дочерней компанией Isomorphic Laboratories — новым лидером фармацевтической разработки) и решение следующих исследовательских задач:

— Спроектировать и реализовать архитектуру платформы, которая обеспечит сквозную интеграцию данных от стадии идентификации мишени до доклинических исследований, с реализацией автоматизированного контроля качества и поддержкой версионности.

— Разработать и адаптировать специализированные алгоритмы и алгоритмы машинного обучения для каждого этапа фармацевтического НИОКР (R&D), на основе одной или комплекса технологий ИИ, включая: мультимодальные нейронные сети для анализа гетерогенных биомедицинских данных, включая оценку возможности применения мультимодального обучения (англ. Multimodal Learning, MML) с акцентом на графовые нейронные сети (англ. Graph Neural Networks, GNNs) и трансформеры (англ. Transformers) для проектирования новых молекул с заданными свойствами (высокая эффективность, низкая токсичность, хорошая фар-

⁸ .Кубинь Г. В поисках новых соединений-лидеров для создания лекарств // Российский химический журнал. 2006. №2. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/v-poiskah-novyh-soedineniy-liderov-dlya-sozdaniya-lekarstv> (дата обращения: 08.11.2025).

макокинетики); генеративные модели (VAE, GAN) для дизайна молекулярных структур; трансформерные архитектуры для предсказания взаимодействия белок — лиганд; ансамбли моделей для прогнозирования ADMET-параметров, включая оценку возможности применения общих динамических нейронных сетей (англ. Generalized Dynamic Neural Networks) для обработки сложной, многомерной и временной информации (например, предсказания токсичности или эффективности соединения на основе гетерогенных данных) [⁹], и многие другие.

— Экспериментально подтвердить эффективность платформы путем сравнительного анализа с традиционными методами фармацевтической разработки по ключевым метрикам: временные затраты на этапах доклинических исследований; точность предсказания биологической активности и токсичности; экономические показатели стоимости разработки.

— Количественно оценить синергетический эффект от интеграции новых алгоритмов в единую платформу, проявляющийся в сокращении сроков и стоимости разработки по сравнению с изолированным применением аналогичных технологий.

Достижение поставленной цели, через решение поставленных задач, позволит преодолеть фрагментарность существующих подходов к разработке автоматизированных систем и созданию с их помощью новых соединений, и создать в ближайшем будущем целостную методологию управления полным циклом фармацевтической разработки на основе технологий искусственного интеллекта с качественно и количественно доказуемой эффективностью.

⁹ .Witte, H. (2006) «Application of Generalized Dynamic Neural Networks to Biomedical Data,» IEEE Transactions on Biomedical Engineering. Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE). doi: 10.1109/TBME.2006.881766.

Концептуальная архитектура

Проектирование цифровой платформы Atlansys EUS MedPharma основано на трех фундаментальных принципах:

— Модульность и масштабируемость. Платформа строится, как набор независимых, но интегрированных систем, подсистем и модулей, каждая из которых отвечает за конкретный этап фармацевтической разработки, дополняя друг друга. Это позволяет осуществить поэтапную разработку, внедрение и адаптацию под конкретные потребности исследовательских проектов фармацевтических компаний. На момент написания данной статьи архитектура платформы Atlansys EUS MedPharma предусматривает разработку четырех базовых систем: система исследований и разработок (R&D); система управления данными и инфраструктурой; система визуализации и отчетности; система информационной безопасности.

— Сквозная интеграция данных. Обеспечивается единое пространство данных от стадии предсказания структуры белков до клинических испытаний, с реализацией автоматизированного контроля качества.

— Регуляторное соответствие на этапе проектирования. Все компоненты платформы проектируются с учетом требований ПНСТ 872—2023, ГОСТ Р 59921.9—2022, ГОСТ Р 59921.1—2022, а также с ориентацией на лучшие международные практики EU AI Act, MDR (Medical Device Regulation — регламент (ЕС) 2017/745 Европейского парламента и Совета от 5 апреля 2017 г. о медицинских изделиях), GDPR, что позволяет разработать встроенные механизмы аудита, валидации и документирования. Учет требований вышеописанных регуляторных документов обеспечивает долгосрочную устойчивость платформы в условиях быстро меняющегося нормативного ландшафта [10, 11, 12].

Платформа Atlansys EUS MedPharma представляет собой комплексное решение, интегрирующее последние достижения в области машинного обучения и анализа больших данных для создания сквозного рабочего процесса разработки фармацевтических препаратов. Концептуальная архитектура Atlansys EUS MedPharma представлена на рис. 1.

¹⁰ .EU AI Act: first regulation on artificial intelligence. 2024. <https://www.europarl.europa.eu/topics/en/article/20230601STO93804/eu-ai-act-first-regulation-on-artificial-intelligence>

¹¹ .Medical Device Regulation. Regulation (EU) 2017/745 of the European Parliament and of the Council of 5 April 2017 on medical devices [Электронный ресурс] 2017 URL: <https://www.medical-device-regulation.eu/download-mdr/> (дата обращения: 06.11.2025). — Текст: электронный.

¹² .Общий регламент защиты персональных данных (GDPR). Европейского союза [Электронный ресурс] 2024 URL: <https://gdpr-text.com/ru/> (дата обращения: 06.11.2025). — Текст: электронный.



Рис 1. Концептуальная архитектура Atlansys EUS MedPharma

Концепция платформы Atlansys EUS MedPharma, подразумевает проведение большого объема НИОКР на всех стадиях разработки и тесную интеграцию разработанных технологий искусственного интеллекта в процессы создания новых соединений (лидеров и кандидатов) и фармацевтических препаратов.

Данная архитектура обеспечивает масштабируемость, отказоустойчивость и возможность независимого развертывания и обновления отдельных модулей, сохраняя при этом целостность платформы как единой системы.

Методология проектирования Atlansys EUS MedPharma представляет собой комплексный подход к созданию интеллектуальной платформы для фармацевтической разработки, основанный на принципах модульности, регуляторного соответствия и экономической эффективности.

Первоочередным направлением НИОКР в создании платформы, стали работы, по формированию и реализации основной системы — «Система исследований и разработок (R&D)», архитектура которой представлена на рис. 2.



Рис. 2. Концептуальная архитектура AC Atlansys EUS MedPharma. Система 1 исследований и разработок, и ее модули

Эти работы тесно связаны с задачей поиска новых решений и интеграции передовых технологий ИИ для каждой из подсистем (представленной на рис. 2), которые позволили бы существенно улучшить или оптимизировать традиционные процессы разработки новых соединений для создания лекарственных средств.

Современная разработка подобных систем характеризуется интенсивной сменой технологий, а современные фармацевтические исследования характеризуются накоплением и обработкой огромных массивов гетерогенных и мультимодальных данных. Для их качественной обработки и решения поставленной задачи разработки архитектуры и платформы Atlansys EUS MedPharma необходимо было исследовать следующие специализированные технологии, архитектуры и модели:

— Исследование международного опыта. В 2021 году компания DeepMind, представила свою систему предсказания 3D-структуры белков — глубокого обучения AlphaFold2. Уже в 2024 году возможностей AlphaFold2, в части виртуального скрининга и поиска новых лекарственных препаратов, стало недостаточно и ученые предложили варианты совместного использования AlphaFold2 и других технологий [13, 14, 15, 16]. На сегодняшний день, появились

¹³.Gu Xinyu, Aranganathan Akashnathan, Tiwary Pratyush (2024) Empowering AlphaFold2 for protein conformation selective drug discovery with AlphaFold2-RAVE eLife 13:RP99702 DOI: <https://doi.org/10.7554/eLife.99702.2>

¹⁴.Forker, Karly & Fleming, Matthew & Pearce, Kenneth & Vaziri, Cyrus & Bowers, Albert. (2025). Modeling is Believing? How AlphaFold2 Can Mislead Molecular Interpretation. Structural Dynamics. 12. A260-A260. DOI: 10.1063/4.0001049.

¹⁵.Gut, Jannik & Lemmin, Thomas. (2024). Dissecting AlphaFold2's Capabilities with Limited Sequence Information. Bioinformatics Advances. 5. DOI: 10.1093/bioadv/vbae187.

¹⁶.Wu, Tianqi & Stein, Richard & Kao, Te-Yu & Brown, Benjamin & Mchaourab, Hassane. (2025). Modeling protein conformational ensembles by guiding AlphaFold2 with Double Electron Electron Resonance (DEER) distance distributions. Nature Communications. 16. DOI: 10.1038/s41467-025-62582-4.

новые системы следующего поколения, например нейронная сеть для прогнозирования биомолекулярной структуры, которая может прогнозировать широкий спектр биомолекулярных ансамблей, включая белки, нуклеиновые кислоты, малые молекулы, ковалентные модификации RoseTTAFold All-Atom [17], которая доступна для широкого круга исследователей [18]. Также ESMFold от Meta демонстрирует возможности крупных языковых моделей, обученных на миллионах белковых последовательностей, для предсказания структур de novo. Этот подход особенно эффективен для белков с низкой гомологией к известным структурам. Сравнение AlphaFold2, ESMFold, OmegaFold и ProteinMPNN представлено в работах [19, 20, 21, 22].

— Графовые нейронные сети (Graph Neural Networks, GNN) заняли лидирующие позиции в вычислительной фармакологии для анализа молекулярных данных, что обусловлено их способностью напрямую оперировать графовыми структурами, где атомы представляются узлами, а химические связи — ребрами [23, 24]. Точность таких моделей, например, Message Passing Neural Networks (MPNN), в задачах предсказания биологической активности достигает 92% [25]. В контексте прогнозирования межлекарственных взаимодействий (англ. drug—drug interactions, DDI) GNN применяются в нескольких ключевых парадигмах. Прямое моделирование графа взаимодействий является одной из наиболее распространенных стратегий, где сами лекарственные средства рассматриваются как узлы, а их взаимодействия — как ребра, что превращает задачу прогнозирования DDI в проблему предсказания связей в графе. К этому классу относятся модели, специфически разработанные для анализа DDI (англ. DDIs GNN) [26]. Другой стратегией является глубокое извлечение молекулярных признаков. Модели, такие как MR-GNN (англ. multi-resolution GNN) и GoGNN, используют иерархические возможности GNN для генерации векторных представлений (эмбеддингов) молекулярной структуры, которые в дальнейшем используются для прогнозирования взаимодействий [27, 28]. Широко представлены и гибридные архитектуры, комбинирующие GNN с другими типами нейронных

¹⁷ .Haoran Yang, Junxia Wang, Jingxin Xie, Huiying Yang, Xianfu Wu, Molecular mechanisms and delivery strategies of celastrol targeting inflammation-associated autoimmune diseases, *Journal of Ethnopharmacology*, 355, (120719), (2026). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jep.2025.120719>

¹⁸ .Code for RoseTTAFold All-Atom [Электронный ресурс] 2025 URL: <https://github.com/baker-laboratory/RoseTTAFold-All-Atom> (дата обращения: 13.11.2025). — Текст: электронный.

¹⁹ .Hyskova, Anna & Marsalkova, Eva & Simecek, Petr. (2025). Balancing Speed and Precision in Protein Folding: A Comparison of AlphaFold2, ESMFold, and OmegaFold. DOI: 10.1101/2025.06.20.660709.

²⁰ .Garcia, Mario & Rocklin, Gabriel & Dixit, Sugyan. (2025). Evaluating zero-shot prediction of protein design success by AlphaFold, ESMFold, and ProteinMPNN. DOI: 10.1101/2025.07.29.667290.

²¹ .Manfredi, Matteo & Savojardo, Castrense. (2025). Evaluation of the structural models of the human reference proteome: AlphaFold2 versus ESMFold. *Current Research in Structural Biology*. 9. 100167. DOI: 10.1016/j.crstbi.2025.100167.

²² .Panagiotou, Vlasios & Makris, Christos. (2025). Comparative Analysis of AlphaFold2, AlphaFold3 and ESMFold in Chimeric Antigen Receptor Prediction for Pancreatic Cancer Immunotherapy. *International Journal on Artificial Intelligence Tools*. DOI: 10.1142/S021821302540007X.

²³ .Saxena, Ritwik & Saxena, Ritcha. (2024). Applying Graph Neural Networks in Pharmacology. DOI: 10.36227/techrxiv.170906927.71541956/v1.

²⁴ .Conghao Wang, Gaurav Asok Kumar & Jagath C. Rajapakse. Drug discovery and mechanism prediction with explainable graph neural networks. [Электронный ресурс] 2025 URL: <https://doi.org/10.1038/s41598-024-83090-3> (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

²⁵ .Rajeev Chandran. Understanding Message Passing in Graph Neural Networks [Электронный ресурс] 2025 URL: https://medium.com/@rajeev.chandran_61731/understanding-message-passing-frameworks-in-graph-neural-networks-944d9e2a1105 (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

²⁶ .Yanglan Gan, Wenxiao Liu, Guangwei Xu, Cairong Yan, Guobing Zou, DMFDDI: deep multimodal fusion for drug—drug interaction prediction, *Briefings in Bioinformatics*, Volume 24, Issue 6, November 2023, bbad397, <https://doi.org/10.1093/bib/bbad397>

²⁷ .Xu, Nuo & Wang, Pinghui & Chen, Long & Tao, Jing & Zhao, Junzhou. (2019). MR-GNN: Multi-Resolution and Dual Graph Neural Network for Predicting Structured Entity Interactions. 3968—3974. DOI: 10.24963/ijcai.2019/551.

²⁸ .Wang, Hanchen & Lian, Defu & Zhang, Ying & Qin, Lu & Lin, Xuemin. (2020). GoGNN: Graph of Graphs Neural Network for Predicting Structured Entity Interactions. DOI: 10.48550/arXiv.2005.05537.

сетей. Например, в одном из исследований применяется графовый автоэнкодер для обучения латентных представлений лекарств на основе графа DDI с последующей передачей этих представлений в многослойный перцептрон для финального прогноза [29]. Модель CASTER реализует сквозной подход, прогнозируя DDI путем извлечения информации о молекулярных подструктурах непосредственно из строк SMILES и их последующей трансформации в векторные представления [30]. Для работы со сложными семантическими сетями применяются сети знаний. Модель KGNN (англ. Knowledge Graph Neural Network) использует GNN для навигации по графам знаний, выявляя скрытые связи между сущностями для решения задачи DDI [31]. Современные подходы также фокусируются на многомодальном и контрастном обучении. Архитектура Bi-GNN использует двухслойную GNN для изучения биологических связей и генерации признаков лекарств, которые интегрируются для прогнозирования взаимодействий [32]. В ряде работ [33, 34, 35] описывается контрастное обучение представлений на многовидовом графе, что позволяет одновременно моделировать как внутреннюю молекулярную структуру, так и внешние взаимодействия между различными молекулами.

— Применение мультимодальных нейронных сетей (обрабатывающих данные из многих разнородных источников), которые представлены в работах [36, 37, 38], открывает новые горизонты в фармацевтических исследованиях, обеспечивая интеграцию разнородных данных для решения комплексных задач. В отличие от унимодальных подходов, такие архитектуры, как графовые нейронные сети (GNN) и Трансформеры, позволяют объединять информацию из молекулярных, гистологических, радиологических и клинических источников, создавая целостные представления о биологических системах. Это особенно актуально для прогнозирования лекарственных взаимодействий (DDI), где GNN моделируют молекулы и белки как узлы графа, а их взаимодействия — как ребра, что значительно повышает точность предсказания побочных эффектов и синергизма препаратов. Мультимодальные Трансформеры, в свою очередь, с помощью механизмов кросс-внимания эффективно выявляют скрытые взаимосвязи между геномными последовательностями и визуальными паттернами гистологических срезов, что способствует открытию новых биомаркеров и идентификации перспективных мишеней для терапии. Несмотря на сохраняющиеся вызовы, такие как интерпретируемость моделей и гетерогенность данных, интеграция мультимодального глубокого обучения в фармацевтиче-

²⁹ .Feng, Yue-Hua & Zhang, Shao-Wu & Shi, Jian-Yu. (2020). DPDDI: a deep predictor for drug-drug interactions. *BMC bioinformatics*. 21. 419. DOI: 10.1186/s12859-020-03724-x.

³⁰ .Huang, Kexin & Xiao, Cao & Hoang, Trong Nghia & Glass, Lucas & Sun, J.. (2020). CASTER: Predicting Drug Interactions with Chemical Substructure Representation. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. 34. 702—709. DOI: 10.1609/aaai.v34i01.5412.

³¹ .Lin, Xuan & Quan, Zhe & Wang, Zhi-Jie & Ma, Tengfei & Zeng, Xiangxiang. (2020). KGNN: Knowledge Graph Neural Network for Drug-Drug Interaction Prediction. 2711—2717.

³² .Zhang, Qingqian & He, Changxiang & Qin, Xiaofei & Yang, Peisheng & Kong, Junyang & Mao, Yaping & Li, Die. (2024). BiTGNN: Prediction of Drug-Target Interactions Based on Bidirectional Transformer and Graph Neural Network on Heterogeneous Graph. *International Journal of Biomathematics*. 18. DOI: 10.1142/S1793524524500256.

³³ .Wang, Yingheng & Chen, Xin & Wu, Ji. (2020). Multi-view Graph Contrastive Representation Learning for Drug-Drug Interaction Prediction. DOI:10.48550/arXiv.2010.11711.

³⁴ .Zhao, Yaomiao & Qiao, Shaohang & Ning, Qiao & Yin, Minghao. (2025). Graph Clustering-guided Multi-view Neighborhood-enhanced Graph Contrastive Learning for Drug-Target Interaction Prediction. *IEEE journal of biomedical and health informatics*. PP. DOI:10.1109/JBHI.2025.3606851.

³⁵ .Li, Dongxu & Zhao, Feifan & Yang, Yue & Cui, Ziwen & Hu, Pengwei & Hu, Lun. (2025). Multi-view Contrastive Learning for Drug-Drug Interaction Event Prediction. *IEEE journal of biomedical and health informatics*. PP. DOI:10.1109/JBHI.2025.3600045.

³⁶ .Tripathi, A. (2023) «Multimodal Data Integration for Oncology in the Era of Deep Neural Networks: A Review,» arXiv (Cornell University). Cornell University. DOI: 10.48550/ARXIV.2303.06471.

³⁷ .Haque, Rezuana. (2025). Multimodal Integration with Graph Neural Networks (GNNs). DOI: 10.1007/978-3-032-04315-3_6.

³⁸ .Gupta, Manish. (2024). The Evolution of Neural Networks in Artificial Intelligence for Multimodal Data Fusion. 5. 1—4. [Электронный ресурс] 2024 URL: https://iscsitr.com/articles/volume_5/issue_2/ISCSITR-IJAI_05_02_01 (дата обращения: 10.11.2025). — Текст: электронный.

ский R&D позволяет перейти к созданию персонализированных терапевтических стратегий и ускоренной валидации кандидатных соединений.

— Применение глубоких нейронных сетей (англ. Deep neural networks, DNN) или глубокого обучения (англ. Deep learning) представляют собой эффективный инструмент для решения задач, малодоступных классическим вычислительным методам. В работах [³⁹,⁴⁰,⁴¹] показано, что в отличие от традиционного молекулярного докинга, опирающегося на зачастую ограниченные эмпирические функции оценки, DNN способны напрямую анализировать атомарные трехмерные структуры, выявляя сложные, нелинейные паттерны белок-лигандного взаимодействия. Это позволяет с высокой точностью предсказывать, как сайты связывания, так и аффинность, что наглядно демонстрирует прогресс от модели DeepSite к более современным архитектурам, таким как Kalasanty и PUREsNet. Разнообразие архитектур DNN, включая сверточные нейронные сети (CNN) для анализа пространственных данных, графовые нейронные сети (GNN) для работы с молекулярными графами и трансформеры для учета контекстных зависимостей, обеспечивает гибкость в решении специфичных задач — от дизайна лекарств и прогнозирования ADMET-свойств до оптимизации состава лекарственных форм и установления *in vitro* — *in vivo* корреляций. Подобно революционному воздействию AlphaFold на структурную биологию, интеграция глубокого обучения в фармацевтическую разработку, не только ускоряет скрининг и оптимизацию молекул — кандидатов, но и открывает путь к созданию препаратов с программируемыми характеристиками, что в перспективе способно значительно сократить временные и финансовые затраты на доклиническую разработку. Ключевым вызовом при этом остается обеспечение качества и репрезентативности данных для обучения моделей, что определяет надежность и воспроизводимость прогнозов.

³⁹ .Barykin A.D., Chepurnykh T.V., Osipova Z.M. Deep learning in modelling the protein—ligand interaction: new pathways in drug development // Bulletin of RSMU. 2024. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/deep-learning-in-modelling-the-protein-ligand-interaction-new-pathways-in-drug-development> (дата обращения: 10.11.2025).

⁴⁰ .Teja, Talasila & Sekar, Mahendran & Pallavi, Talasila & Mettu, Sivamma & Murthy, Talasila. Gopalakrishna & Rani, Nur & Chari, Bramha & Bonam, Srinivasa Reddy. (2022). Role of Artificial Neural Networks in Pharmaceutical Sciences. Journal of Young Pharmacists. 14. 06—14. DOI:10.5530/jyp.2022.14.2.

⁴¹ .Nouman Ali, Nimra Hanif, Hassan Abbas Khan, Muhammad Abdullah Waseem, Afshan Saeed, Sadia Zakir, Abeeha Khan, Mejerrah Aamir, Adeeba Ali, Aamir Ali, Amna Saleem. Deep learning and artificial intelligence for drug discovery, application, challenge, and future perspectives. Discover Applied Sciences 7, 533 (2025) <https://doi.org/10.1007/s42452-025-06991-6>

Конец ознакомительного фрагмента.

Текст предоставлен ООО «Литрес».

Прочитайте эту книгу целиком, [купив полную легальную версию](#) на Литрес.

Безопасно оплатить книгу можно банковской картой Visa, MasterCard, Maestro, со счета мобильного телефона, с платежного терминала, в салоне МТС или Связной, через PayPal, WebMoney, Яндекс.Деньги, QIWI Кошелек, бонусными картами или другим удобным Вам способом.