



Цифровая трансформация фармацевтической отрасли: роль искусственного интеллекта в фармации

Паршенков М.А.¹, Романов Ф.А.², Яворский А.Н.³

¹ ФГАОУ ВО «Московский научно-исследовательский онкологический институт им. П.А. Герцена», филиал ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр радиологии Минздрава России», Москва, Российская Федерация

² ФГБОУ ВО «Ярославский государственный медицинский университет», Ярославль, Российская Федерация

³ Ассоциация участников обращения лекарственных средств и изделий медицинского назначения «ЛЕКМЕДОБРАЩЕНИЕ», Москва, Российская Федерация

Аннотация

Обоснование. Цифровые технологии преобразуют фармацевтическую отрасль, трансформируя как производственные процессы, так и сам подход к разработке и применению лекарственных средств. Ключевую роль в цифровизации фармации играют искусственный интеллект, технологии машинного обучения, а также алгоритмы глубокого анализа данных.

Методология. В данном литературном обзоре мы использовали системный и структурный анализ; междисциплинарный подход, объединяющий методы контент-анализа научной литературы; изучение регуляторной документации; кейс-ориентированное моделирование.

Результаты. Установлено, что цифровые технологии оказывают существенное влияние на ключевые этапы жизненного цикла лекарственных препаратов в фармацевтической индустрии. Однако широкомасштабная цифровизация на данный момент затруднена рядом барьеров, представленных в нашей работе. Предложены направления преодоления этих ограничений (внедрение гибридных архитектур, развитие международных хранилищ обезличенных данных, интеграция цифровых модулей в программы подготовки специалистов).

Заключение. Цифровые технологии начинают формировать новые принципы функционирования фармацевтической отрасли. Однако для полноценного перехода от точечных достижений к устойчивой цифровой трансформации необходимы комплексные меры.

Ключевые слова: цифровые технологии; алгоритмы машинного обучения; искусственный интеллект; персонализированная медицина; фармация; адаптивные алгоритмы данных; фармацевтическая разработка; таргетная терапия; институциональные барьеры

Для цитирования: Паршенков М.А., Романов Ф.А., Яворский А.Н. Цифровая трансформация фармацевтической отрасли: роль искусственного интеллекта в фармации. *Пациентоориентированная медицина и фармация*. 2026;4(1):87-94. <https://doi.org/10.37489/2949-1924-0134>. EDN: IXLVGS.

Поступила: 20.12.2025. **В доработанном виде:** 25.01.2026. **Принята к печати:** 09.03.2026. **Опубликована:** 30.03.2026.

Digital transformation of the pharmaceutical industry: the role of artificial intelligence in pharmacy

Mikhail A. Parshenkov¹, Philip A. Romanov², Alexander N. Yavorsky³

¹ P.A. Herzen Moscow Cancer Research Institute, a branch of the National Medical Research Center of Radiology, Moscow, Russian Federation

² Yaroslavl State Medical University, Yaroslavl, Russian Federation

³ Association of Participants in the Circulation of Medicines and Medical Devices "LEKMEDOBRAZHENIE", Moscow, Russian Federation

Abstract

Background. Digital technologies are transforming the pharmaceutical industry, changing both manufacturing processes and the very approach to the development and use of medicines. Artificial intelligence, machine learning technologies, and deep data analysis algorithms play a key role in the digitalization of pharmacy.

Methods. In this literature review, we used systematic and structural analysis; an interdisciplinary approach combining methods of content analysis of scientific literature; study of regulatory documentation; and case-oriented modeling.

Results. It has been established that digital technologies have a significant impact on key stages of the drug life cycle in the pharmaceutical industry. However, large-scale digitalization is currently hampered by a number of barriers, which are presented in our work. We propose ways to overcome these limitations (introduction of hybrid architectures, development of international repositories of anonymized data, integration of digital modules into specialist training programs).

Conclusion. Digitalization is beginning to shape new principles for the functioning of the pharmaceutical industry. However, comprehensive measures are needed to make a full transition from isolated achievements to sustainable digital transformation.

Keywords: digital technologies; machine learning algorithms; artificial intelligence; personalized medicine; pharmacy; adaptive data algorithms; pharmaceutical development; targeted therapy; institutional barriers

For citation: Parshenkov MA, Romanov PA, Yavorsky AN. Digital transformation of the pharmaceutical industry: the role of artificial intelligence in pharmacy. *Patient-oriented medicine and pharmacy*. 2026;4(1):87-94. <https://doi.org/10.37489/2949-1924-0134>. EDN: IXLVGS.

Received: 20.12.2025. Revision received: 25.01.2026. Accepted: 09.03.2026. Published: 30.03.2026.

Обоснование / Background

Цифровые технологии кардинально преобразуют фармацевтическую отрасль, трансформируя не только производственные процессы [1], но и сам подход к разработке и применению лекарственных средств (ЛС) [2]. Ключевую роль в столь стремительной трансформации играют искусственный интеллект (ИИ), технологии машинного обучения, а также алгоритмы глубокого анализа данных [3]. В Российской Федерации цифровизация рассматривается государством как приоритетный элемент технологического суверенитета и закреплена в Указе Президента РФ №490 (ред. 15.02.2024) «О развитии искусственного интеллекта в Российской Федерации» [4].

Если обратиться к мировым тенденциям, то можно отметить стремительный рост инвестиций в цифровые технологии: в 2023 году их объём составил, по различным оценкам, от 1,5 до 3,5 млрд долларов США, а к 2030 году прогнозируется увеличение вложений до 8–12 млрд [5].

Несмотря на впечатляющие успехи ИИ-решений во многих процессах фармацевтической отрасли (можно выделить, к примеру, автоматизацию регуляторных процедур [6], оптимизацию логистических цепочек лекарственного обеспечения [7], контроль качества и алгоритмическую поддержку фармакоэкономических решений [8]), их полноценное внедрение в реальную практику всё ещё остаётся серьёзным вызовом. Во многом эти трудности обусловлены рядом системных барьеров, тесно связанных со спецификой фармацевтической отрасли.

Чтобы восполнить выявленные пробелы, был проведён многоаспектный анализ национальных и международных подходов к применению цифровых технологий в сфере здравоохранения. В фокусе исследования оказались стратегии Европейского союза (European Medicines Agency; EMA),

Великобритании (Medicines and Healthcare products Regulatory Agency; MHRA), США (U.S. Food and Drug Administration; FDA), а также стран Евразийского экономического союза.

Цель / Objective

Целью нашего исследования является выявление роли цифровых технологий в фармацевтической сфере, а также формирование понимания ключевых вызовов.

Искусственный интеллект как технологический драйвер прогресса / Artificial intelligence as a technological driver of progress

Фармацевтическая отрасль вступает в эпоху глубокой цифровой трансформации, ключевым драйвером которой становится искусственный интеллект (ИИ) [9].

По сути, ИИ — это совокупность математических методов и вычислительных систем, способных выявлять скрытые закономерности в больших массивах данных и принимать решения на основе самообучающихся или адаптивных алгоритмов (см. рис. 1) [10]. ИИ включает широкий спектр инструментов: алгоритмы машинного обучения и нейронных сетей [11]; «экспертные» системы, которые представляют собой формализованные наборы правил (например, в виде цепочки «IF-THEN») и используют механизмы логического вывода для имитации рассуждений специалиста [12]; а также методы символической логики, позволяющие описывать и анализировать причинно-следственные зависимости в сложных процессах (например, в фармакокинетике или токсикологии) (см. рис. 2) [13]. Все эти инструменты нацелены на извлечение знаний из данных и поддержку принятия решений в условиях высокой сложности и неопределённости.

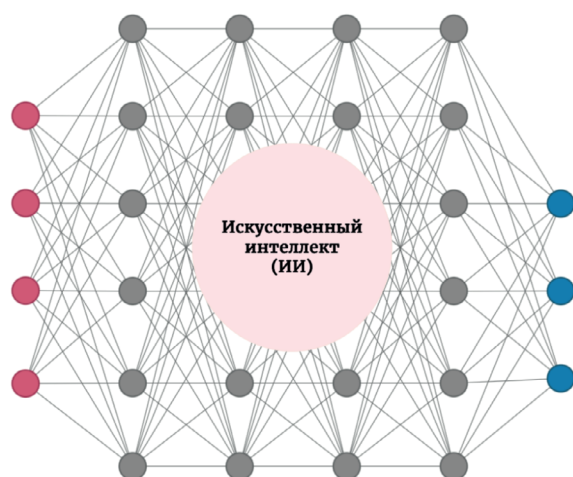


Рис. 1. Принцип функционирования нейросетевой архитектуры в составе модулей искусственного интеллекта (ИИ-модулей)

Схема иллюстрирует архитектуру многослойной нейронной сети как одного из центральных элементов глубокого обучения. Входные данные проходят через скрытые слои, формируя между собой связи, управляемые центральным ИИ-модулем

Fig. 1. The principle of operation of neural network architecture as part of artificial intelligence modules (AI modules)

The diagram illustrates the architecture of a multi-layer neural network as one of the central elements of deep learning. Input data passes through hidden layers, forming connections between them that are controlled by the central AI module



Рис. 2. Архитектура основных компонентов и методов искусственного интеллекта (ИИ)

Fig. 2. Architecture of the main components and methods of artificial intelligence (AI)

Парадокс внедрения цифровых инструментов в фармацевтическую область / The paradox of introducing digital tools into the pharmaceutical sector

Практическое применение искусственного интеллекта в фармацевтической отрасли иллюстрирует парадокс современной цифровизации: локальные успехи соседствуют с серьёзными барьерами масштабирования. Наибольший прогресс зафиксирован в трёх ключевых направлениях разработки лекарственных средств (ЛВ): виртуальном скрининге молекул (позволяющем существенно ускорить поиск потенциальных кандидатов), моделировании фармакокинетических профилей и прогнозировании токсичности соединений. Всё это потенциально сокращает сроки и стоимость этапов R&D (от англ. *Research and Development*) [14, 15].

Одним из наиболее ярких примеров является опыт компании Insilico Medicine, которая в 2019 году с помощью платформы GENTRL (от англ. *Generative Tensorial Reinforcement Learning*) спроектировала, синтезировала и экспериментально подтвердила активность ингибиторов DDR1-киназы (от англ. *Discoidin Domain Receptor-1*) всего за 46 дней, тогда как традиционно аналогичный процесс занимает от нескольких месяцев до нескольких лет [16].

Однако потенциал цифровых технологических решений проявляется не только в области разработки и поиска новых молекул. Всё более заметную роль он начинает играть и в сфере фармаконадзора, прежде всего, в анализе больших массивов гетерогенных данных.

Традиционно выявление «сигналов безопасности» (сообщений потребителей или специалистов о нежелательных явлениях (НЯ) и нежелательных лекарственных реакциях (НЛР)) требовало длительного статистического анализа и экспертной оценки. Так, например, в 2015 году именно такой подход позволил обнаружить связь между применением ингибиторов SGLT2 (от англ. *sodium-glucose co-transporter 2*) и развитием диабетического кетоацидоза с нормогликемией (euDKA, от англ. *euglycemic diabetic ketoacidosis*) на основе данных FAERS (от англ. *FDA Adverse Event Reporting System*) [17]. Именно такие задачи сегодня становятся приоритетной зоной для применения ИИ — благодаря его способности автоматически обрабатывать текстовые данные, находить атипичные паттерны и ускорять обнаружение редких или слабых сигналов риска.

Помимо оптимизации отдельных этапов доклинической разработки, ИИ активно внедряется и в более тонкие процессы работы с целевыми молекулами, включая этапы «первичного попадания» (от англ. *hit discovery*) и так называемых «ведущих соединений» (*lead compounds*). Например,



при использовании методов *de novo*-дизайна алгоритмы ИИ не просто анализируют уже известные структуры, но и формируют новые, потенциально активные соединения. Так, исследование *Yu et al.* показало, как модель на основе вариационного автокодировщика (англ. *variational autoencoder*) с графовой структурой успешно использовала метод «перескока каркаса» (или *scaffold hopping*) для генерации 30 000 молекул, направленных на ингибирование киназы JAK1 (ключевой мишени воспалительных сигнальных путей). В результате работы были синтезированы 7 активных молекул, которые продемонстрировали биологическую активность в *in vitro* тестах [18].

Другим наглядным примером служит работа *Jang et al.*, сосредоточенная на рецепторной тирозинкиназе FLT-3 (от англ. *FMS-like tyrosine kinase 3*), играющей ключевую роль в патогенезе острого миелоидного лейкоза. Используя глубокую генеративную модель, обученную на структурных элементах известных активных соединений, исследователи сгенерировали более 10 000 новых молекул. После ранжирования по показателям энергии связывания с мишенью (что было произведено на основе расчётов свободной энергии) одна из них была синтезирована и продемонстрировала высокую селективность к мутантной форме FLT-3. Несмотря на отсутствие полноценной проверки на здоровых клетках и ограниченный объём экспериментальной валидации, работа демонстрирует прикладной потенциал алгоритмов генеративного ИИ в разработке селективных таргетных ингибиторов [19].

Компьютерное прогнозирование спектров биологической активности позволяет осуществлять предварительный отбор молекул, с наибольшей вероятностью взаимодействующих с целевыми (on-target) мишенями, обуславливающими проявление необходимого фармакотерапевтического эффекта, и не взаимодействующих с нежелательными (off-target) мишенями, уже на ранних этапах фармацевтических исследований [20].

На основе цифровых технологий, помимо прогноза целевой фармакологической активности, производится оценка возможных токсических эффектов, а также расчёт фармакокинетических показателей ещё не синтезированных перспективных веществ [21].

Цифровые технологии уже сегодня позволяют не только ускорять ключевые этапы фармацевтической разработки, но и обеспечивают более индивидуализированный подход к решению сложных задач: от структурной модификации молекулярного скелета до подбора химических заместителей с учётом уникальных биологических мишеней и профилей фармакологической активности и безопасности.

Однако, несмотря на впечатляющие локальные достижения, лишь немногие препараты, открытые или разработанные с помощью инструментов ИИ, дошли до клинических испытаний на людях, при этом ни один из них не получил клинического одобрения [22].

Локальные успехи и глобальные ограничения / Local successes and global limitations

Несмотря на значительный прогресс, потенциал искусственного интеллекта в разработке лекарственных средств (ЛС) всё ещё ограничен рядом фундаментальных барьеров.

Один из наиболее обсуждаемых вызовов в литературе на сегодняшний день — это «глубина химического пространства», в пределах которого работают обученные модели. Генеративные алгоритмы, как правило, опираются на уже изученные структуры и молекулы, что снижает их потенциальную способность предлагать по-настоящему новые соединения за пределами известных фармакологических и химических классов [23, 24]. Эти обстоятельства особенно важно учесть при работе с новыми биологическими мишенями, где отсутствие достаточного объёма исходных данных является критически важным.

К числу других препятствий относится низкая воспроизводимость предлагаемых соединений: даже при наличии теоретически перспективных молекул остаётся нерешённой задача их синтеза. Проблема «синтезируемости» требует привлечения ретросинтетических систем и разработки новых метрик, учитывающих как доступность реагентов, так и стоимость синтеза [25]. В ряде современных исследований подчёркивается необходимость учитывать реальные условия органического синтеза уже на ранних этапах проектирования лекарственных молекул. Один из таких подходов основан на предварительном разбиении будущих соединений на структурные фрагменты — синтоны (от англ. *synthon*), которые могут быть собраны с помощью известных и воспроизводимых химических реакций. Такой подход позволяет существенно повысить синтетическую доступность создаваемых соединений и приблизить виртуальное моделирование к практическим возможностям лаборатории [26].

Отдельную сложность представляет формулирование критериев оценки эффективности методов искусственного интеллекта. На сегодняшний день не существует универсальных показателей, позволяющих сопоставить результаты таких моделей с данными, полученными с помощью традиционных подходов (например, методов высокопроизводительного скрининга). Это затрудняет

объективную оценку преимуществ цифровых технологий при практическом применении [27]. Кроме того, до сих пор остаётся открытым вопрос о том, какое количество соединений необходимо обчислить, чтобы с приемлемой вероятностью получить хотя бы одно вещество с подтверждённой биологической активностью, так называемое «первичное попадание» (от англ. *hit discovery*).

Нельзя не учитывать и инфраструктурные сложности. Многие академические и коммерческие организации по-прежнему ограничены в доступе к вычислительным ресурсам, необходимым для реализации ИИ-методов в полной мере. Современные алгоритмы потребляют существенно больше вычислительной мощности по сравнению с классическими подходами к виртуальному скринингу, что ограничивает их применение в условиях бюджетных и технических ограничений [28].

С позиции общественной и профессиональной приемлемости, одним из серьёзных барьеров остаётся настороженное отношение со стороны медицинского сообщества. Это во многом обусловлено низкой прозрачностью большинства алгоритмов, особенно в клинически значимых ситуациях, когда речь идёт о безопасности пациента. Такая «непрозрачность» (в зарубежной литературе часто можно встретить употребление метафоры «чёрного ящика» для описания представленного барьера [29]) означает невозможность точно объяснить, на основании каких факторов система приняла то или иное решение. Дополнительные сложности вызывает валидация ИИ-алгоритмов, что дополнительно осложняет прохождение регуляторной экспертизы [15].

Несмотря на имеющиеся указанные барьеры, в фармацевтической отрасли на данный момент наметилась крайне положительная динамика в сторону их преодоления. Одним из актуальных направлений развития являются так называемые гибридные архитектуры, сочетающие алгоритмы машинного обучения с эвристическими (то есть правило-ориентированными) методами. Подобный подход позволяет на начальном этапе быстро отбирать потенциально активные соединения, далее уточнять их химическую структуру на основе анализа синтонов (структурных фрагментов, пригодных для синтеза), а в финальной фазе — проводить тонкую «настройку» молекулы с использованием технологий глубокого обучения [23, 27].

Особый интерес вызывает стратегия активного обучения (от англ. *active learning*), при которой экспериментальные данные последовательно включаются в тренировочные выборки. Это позволяет существенно сократить количество необходимых лабораторных исследований, как *in vitro*, так и *in vivo*

[11]. Искусственный интеллект активно применяется в разработке дизайна и проведении доклинических и клинических исследований новых лекарственных средств, от результатов которых зависит перспектива любой фармацевтической разработки [30–32].

Таким образом, устойчивое развитие цифровых технологий в фармацевтической области невозможно без системного подхода. Для надёжного внедрения искусственного интеллекта в рутинную практику необходима не только технологическая готовность, но и системная институциональная поддержка. К ключевым условиям следует отнести: разработку единых регуляторных стандартов, включение тематических блоков по цифровым технологиям в программы подготовки и повышения квалификации специалистов, организацию совместных исследований для проверки эффективности алгоритмов, а также создание международных архивов обезличенных медицинских данных, пригодных для обучения моделей с соблюдением этических норм. Только в таких условиях цифровые технологии смогут стать полноценным элементом фармацевтической практики: от этапа поиска обладающей заданными фармакологическими свойствами молекулы, получения доказательства качества, безопасности и эффективности лекарственного средства, организации системы лекарственного обеспечения и рационального медицинского применения лекарств.

Заключение / Conclusion

Цифровые технологии, прежде всего решения на основе искусственного интеллекта, перестают быть вспомогательным инструментом и начинают формировать новые принципы функционирования фармацевтической отрасли. Уже сегодня ИИ применяется на ключевых этапах жизненного цикла лекарств. Однако широкомасштабное внедрение таких решений сдерживается рядом факторов: дефицитом качественных данных, ограниченной воспроизводимостью моделей, отсутствием нормативной базы и общим отношением профессионального сообщества к новым технологиям.

Для перехода от точечных достижений к устойчивой цифровой трансформации необходимы комплексные меры (в том числе развитие регулируемой инфраструктуры, включение практических модулей в профессиональное образование, а также международное сотрудничество по вопросам ИИ). Только при таком подходе цифровизация сможет стать не технологическим экспериментом, а неотъемлемой частью фармацевтической практики, повышающей её эффективность, прозрачность и ориентированность на пациента.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Участие авторов

Все авторы внесли существенный вклад в подготовку работы, прочли и одобрили финальную версию статьи перед публикацией. Паршенков М. А. — сбор материала, обработка материала, написание текста, ответственность за целостность всех частей статьи; Романов Ф. А. — сбор материала, обработка материала, написание текста; Яворский А. Н. — концепция и дизайн исследования, анализ научных публикаций по теме исследования, редактирование.

Финансирование

Работа выполнялась без спонсорской поддержки.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Паршенков Михаил Алексеевич — лаборант-исследователь, ФГАОУ ВО «Московский научно-исследовательский онкологический институт им. П. А. Герцена», филиал ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр радиологии», Москва, Российская Федерация

Автор, ответственный за переписку

e-mail: misjakj@gmail.com

ORCID ID: 0009-0004-7170-8783

РИНЦ SPIN-код: 7012-6284

Романов Филипп Александрович — аспирант кафедры управления и экономики фармации ФГБОУ ВО «Ярославский государственный медицинский университет», Ярославль, Российская Федерация

e-mail: rfa2010@ya.ru

ORCID ID: 0009-0008-6107-7585

Яворский Александр Николаевич — советник генерального директора, Ассоциация участников обращения лекарственных средств и изделий медицинского назначения «ЛЕКМЕДОБРАЩЕНИЕ», Москва, Российская Федерация

e-mail: 200-31-11@mail.ru

ORCID ID: 0000-0002-8631-0303

РИНЦ SPIN-код: 4864-9445

Список литературы / References

1. Аладышева Ж. И., Береговых В. В., Демина Н. Б. и др. Промышленная фармация. Путь создания продукта: монография / под ред. А. Л. Хохлова, Н. В. Пятигорской. — Москва; 2019. — 394 с. ISBN 978-5-907036-57-4. [Aladysheva Zh.I., Beregovykh V.V., Demina N.B. Industrial pharmacy.

Conflict of interests

The authors declare no conflict of interest.

Authors' participation

All authors made a significant contribution to the preparation of the work, read and approved the final version of the article before publication. Parshenkov MA — collection of material, processing the material, writing the text, responsibility for the integrity of all parts of the article; Romanov PA — collection of material, processing the material, writing the text, Yavorsky AN — research concept and design, analysis of relevant scientific publications on the research topic, editing.

Financing

The work was carried out without sponsorship.

ABOUT THE AUTHORS

Mikhail A. Parshenkov — laboratory researcher, P.A. Herzen Moscow Cancer Research Institute, a branch of the National Medical Research Center of Radiology, Moscow, Russian Federation

Corresponding author

e-mail: misjakj@gmail.com

ORCID ID: 0009-0004-7170-8783

RSCI SPIN-code: 7012-6284

Philip A. Romanov — Postgraduate student of the Department of Pharmacy Management and Economics, Yaroslavl State Medical University, Yaroslavl, Russian Federation

e-mail: rfa2010@ya.ru

ORCID ID: 0009-0008-6107-7585

Alexander N. Yavorsky — Advisor to the General Director, Association of Participants in the Circulation of Medicines and Medical Devices "LEKMEDOBRAZHENIE", Moscow, Russian Federation

e-mail: 200-31-11@mail.ru

ORCID ID: 0000-0002-8631-0303

RSCI SPIN-code: 4864-9445

The path of product creation: monograph. Edited by Khokhlov A.L., Pyatigorskaya N.V. Moscow; 2019. 394 p. (In Russ.).

2. Поройков В. В. Компьютерное конструирование лекарств: от поиска новых фармакологических веществ до системной фармаколо-



- гии. *Биомедицинская химия*. 2020; 66(1):30–41. DOI: 10.18097/PBMC20206601030. [Poroykov V.V. Computer-based drug design: from discovery of new pharmacological entities to systems pharmacology. *Biomeditsinskaya khimiya*. 2020;66(1):30–41. (In Russ.)].
3. Niazi SK, Mariam Z. Artificial intelligence in drug development: reshaping the therapeutic landscape. *Therapeutic Advances in Drug Safety*. 2025; 16:20420986251321704. DOI: 10.1177/20420986251321704.
 4. Указ Президента Российской Федерации от 10.10.2019 № 490 (ред. от 15.02.2024) «О развитии искусственного интеллекта в Российской Федерации». КонсультантПлюс. Электронный ресурс: <https://www.consultant.ru> (дата обращения: 02.07.2025). [Decree of the President of the Russian Federation No. 490 dated October 10, 2019 (amended 15.02.2024) «On the development of artificial intelligence in the Russian Federation». Electronic resource via ConsultantPlus (In Russ.) (accessed: 02/07/2025)].
 5. Grand View Research. Artificial Intelligence in Drug Discovery Market Size, Share & Trends Analysis Report by Application, by Region, and Segment Forecasts, 2022–2030. 2023. Электронный ресурс: <https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/artificial-intelligence-drug-discovery-market> (дата обращения: 06.07.2025).
 6. Boopathi LK, Raja N. Artificial Intelligence and Machine Learning: Enhancing the Future of Regulatory Affairs. *International Journal of Drug Regulatory Affairs*. 2024;12(4):53–60. DOI: 10.22270/ijdra.v12i4.718.
 7. Vora LK, Gholap AD, Jetha K, et al. Artificial Intelligence in Pharmaceutical Technology and Drug Delivery Design. *Pharmaceutics*. 2023 Jul 10;15(7):1916. doi: 10.3390/pharmaceutics15071916.
 8. Niazi SK. Regulatory Perspectives for AI/ML Implementation in Pharmaceutical GMP Environments. *Pharmaceutics (Basel)*. 2025 Jun 16;18(6):901. doi: 10.3390/ph18060901.
 9. Schuhmacher A, Gatto A, Hinder M, et al. The upside of being a digital pharma player. *Drug Discov Today*. 2020 Sep;25(9):1569–1574. doi: 10.1016/j.drudis.2020.06.002.
 10. Simmons AB, Chappell SG. Artificial intelligence: definition and practice. *IEEE Journal of Oceanic Engineering*. 1988;13(2):14–42. DOI: 10.1109/48.551.
 11. LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning. *Nature*. 2015 May 28;521(7553):436–44. doi: 10.1038/nature14539.
 12. Nau D. Expert computer systems. *Computers*. 1983; 16(2):63–85. DOI: 10.1109/MC.1983.1654302.
 13. Hartung T. ToxAIcology - The evolving role of artificial intelligence in advancing toxicology and modernizing regulatory science. *ALTEX*. 2023;40(4):559–570. doi: 10.14573/altex.2309191.
 14. Jarab AS, Abu Heshmeh SR, Al Meslamani AZ. Artificial intelligence (AI) in pharmacy: an overview of innovations. *J Med Econ*. 2023 Jan-Dec;26(1): 1261–1265. doi: 10.1080/13696998.2023.2265245.
 15. Peters AL, Buschur EO, Buse JB, Cohan P, Diner JC, Hirsch IB. Euglycemic Diabetic Ketoacidosis: A Potential Complication of Treatment With Sodium-Glucose Cotransporter 2 Inhibition. *Diabetes Care*. 2015 Sep;38(9):1687–93. doi: 10.2337/dc15-0843.
 16. Zhavoronkov A, Ivanenkov YA, Aliper A, et al. Deep learning enables rapid identification of potent DDR1 kinase inhibitors. *Nat Biotechnol*. 2019 Sep; 37(9):1038–1040. doi: 10.1038/s41587-019-0224-x.
 17. U.S. Food and Drug Administration. FDA revises labels of SGLT2 inhibitors for diabetes to include warnings about too much acid in the blood and serious urinary tract infections. FDA.gov. Электронный ресурс: <https://www.fda.gov/drugs/drug-safety-and-availability/fda-revises-labels-sglt2-inhibitors-diabetes-include-warnings-about-too-much-acid-blood-and-serious> (дата обращения: 17.07.2025).
 18. Yu Y, Xu T, Li J, et al. A Novel Scalarized Scaffold Hopping Algorithm with Graph-Based Variational Autoencoder for Discovery of JAK1 Inhibitors. *ACS Omega*. 2021 Aug 24;6(35):22945–22954. doi: 10.1021/acsomega.1c03613.
 19. Jang SH, Sivakumar D, Mudedla SK, et al. PCW-A1001, AI-assisted *de novo* design approach to design a selective inhibitor for FLT-3(D835Y) in acute myeloid leukemia. *Front Mol Biosci*. 2022 Nov 25;9:1072028. doi: 10.3389/fmolb.2022.1072028.
 20. Поройков В. В. Поиск новых фармакологических веществ на основе компьютерного прогнозирования спектров биологической активности. *Лаборатория и производство*. 2021;16(1):72–80. DOI: 10.32757/2619-0923.2021.1.16.72.80 [Poroykov V. V. Search for new pharmacological compounds based on computer-predicted biological activity spectra. *Laboratory and Production*. 2021;16(1):72–80. (In Russ.)].
 21. Васильев П.М., Голубева А.В., Королева А.Р., и др. Прогноз in silico токсикологических и фармакокинетических характеристик лекарственных соединений. *Безопасность и риск фармакотерапии*. 2023;11(4):390–408. doi: 10.30895/2312-7821-2023-11-4-390-408 [Vassiliev P.M., Golubeva A.V., Koroleva A.R., et al. In silico prediction of toxicological and pharmacokinetic characteristics of medicinal compounds. *Safety and Risk of Pharmacotherapy*. 2023;11(4):390–408 (In Russ.)].
 22. Wilczok D, Zhavoronkov A. Progress, Pitfalls, and Impact of AI-Driven Clinical Trials. *Clin Pharmacol Ther*. 2025 Apr;117(4):887–890. doi: 10.1002/cpt.3542.

23. Lee S, Jo J, Hwang SJ. Exploring chemical space with score-based out-of-distribution generation. *arXiv preprint*. 2023. arXiv:2206.07632. DOI: 10.48550/arXiv.2206.07632.
24. Ciepliński T, Danel T, Podlowska S, Jastrzębski S. Generative Models Should at Least Be Able to Design Molecules That Dock Well: A New Benchmark. *J Chem Inf Model*. 2023 Jun 12;63(11):3238-3247. doi: 10.1021/acs.jcim.2c01355.
25. Stanley M, Segler M. Fake it until you make it? Generative de novo design and virtual screening of synthesizable molecules. *Curr Opin Struct Biol*. 2023 Oct;82:102658. doi: 10.1016/j.sbi.2023.102658.
26. Gao W, Coley CW. The Synthesizability of Molecules Proposed by Generative Models. *J Chem Inf Model*. 2020 Dec 28;60(12):5714-5723. doi: 10.1021/acs.jcim.0c00174.
27. Yu J, Wang D, Zheng M. Uncertainty quantification: Can we trust artificial intelligence in drug discovery? *iScience*. 2022 Jul 21;25(8):104814. doi: 10.1016/j.isci.2022.104814.
28. Wu K, Xia Y, Deng P, et al. TamGen: drug design with target-aware molecule generation through a chemical language model. *Nat Commun*. 2024 Oct 29;15(1):9360. doi: 10.1038/s41467-024-53632-4.
29. Chan B. Black-box assisted medical decisions: AI power vs. ethical physician care. *Med Health Care Philos*. 2023 Sep;26(3):285-292. doi: 10.1007/s11019-023-10153-z.
30. Кошечкин К.А., Свистунов А.А., Лебедев Г.С., Фартушный Э.Н. Практика применения систем на основе искусственного интеллекта в сфере обращения лекарственных средств. *Вестник Росздравнадзора*. 2022;(3):27–33. [Koshechkin K. A., Svistunov A. A., Lebedev G. S., Fartushny E. N. Application of AI-based systems in the field of medicinal product circulation. *Bulletin of Roszdravnadzor*. 2022;(3):27–33. (In Russ.)].
31. Свечкарева И. Р., Гусев А. В., Колбин А. С. Перспективы искусственного интеллекта в доклинических и клинических исследованиях. *Клиническая фармакология и терапия*. 2025;(1):14–19. DOI: 10.32756/0869-5490-2025-1-14-19 [Svechkaeva I. R., Gusev A. V., Kolbin A. S. Prospects for artificial intelligence in preclinical and clinical research. *Clinical Pharmacology and Therapy*. 2025;(1):14–19. (In Russ.)].
32. Zhang K, Yang X, Wang Y, et al. Artificial intelligence in drug development. *Nat Med*. 2025 Jan;31(1):45-59. doi: 10.1038/s41591-024-03434-4.