

مجله ایمنی زیستی

دوره ۱۷، شماره ۱، بهار ۱۴۰۳

ISSN 2716-9804 الکترونیکی، ISSN 2717-0632 چاپی

## مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان

نوع مقاله: مروری

رضا کاظمی درسنگی

دانشجوی دکتری تخصصی نانوبیوتکنولوژی، مرکز علم و فناوری زیست شناسی، دانشگاه جامع امام حسین (ع)، تهران، ایران

darsanaki@hotmail.com

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۹/۱۶، تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۱/۰۳

صفحه ۷۷-۵۹

### چکیده

سیستم‌های هوش مصنوعی با تحلیل مقادیر عظیمی از داده‌های زیستی و پزشکی، امکان تسریع فرآیند کشف دارو، طراحی واکسن‌های مؤثر و بهینه‌سازی درمان‌ها را فراهم کرده‌اند. هوش مصنوعی به‌عنوان یک کاتالیزور قوی در کاهش فاصله بین درک بیماری‌ها و شناسایی عوامل درمانی بالقوه عمل می‌کند. مدل‌های یادگیری ماشین، به‌ویژه مدل‌های مبتنی بر یادگیری عمیق، برای پیش‌بینی تعاملات مولکولی، بهینه‌سازی پیوند دارو، توسعه واکسن و شبیه‌سازی پاسخ‌های بیولوژیکی استفاده می‌شوند که به کاهش زمان و هزینه‌های فرآیندهای سنتی کمک می‌کند. هوش مصنوعی با تجزیه و تحلیل سریع ساختارهای میکروبی به توسعه واکسن‌های هدفمند با کارایی بالاتر کمک می‌کند. همچنین، ابزارهای مبتنی بر هوش مصنوعی در طراحی درمان‌های شخصی‌سازی شده، با استفاده از داده‌های ژنتیکی و بالینی، به بهینه‌سازی درمان‌ها برای بیماران خاص کمک می‌کند. علاوه بر این، هوش مصنوعی توانایی پیش‌بینی و نظارت بر پیشرفت بیماری‌ها را افزایش داده و تشخیص زودهنگام و مداخله سریع‌تر را ممکن می‌سازد. هدف این مقاله مروری؛ بررسی کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان است.

واژه‌های کلیدی: دارو، درمان، واکسن، هوش مصنوعی

## مقدمه

در سال‌های اخیر، پیشرفت‌های چشمگیری در حوزه‌های بیوشیمی، زیست‌شناسی ساختاری، ایمونولوژی، میکروبیولوژی و ژنومیک صورت گرفته است. به‌طور همزمان، رشد قابل توجهی در علوم داده، انفورماتیک و هوش مصنوعی (artificial intelligence, AI) برای پردازش این حجم عظیم داده‌ها مشاهده می‌شود. نقطه تلاقی آزمایشگاه و علوم داده، بیوانفورماتیک است که با استفاده از ابزارهای محاسباتی به درک عمیق‌تر علوم زیستی کمک می‌کند (Thomas et al. 2022). هوش مصنوعی یکی از فناوری‌های کلیدی قرن ۲۱ است که در حال تغییر دادن جنبه‌های مختلف زندگی انسان‌ها است. با ادامه توسعه این فناوری، انتظار می‌رود که هوش مصنوعی در بهبود کیفیت زندگی و حل چالش‌های بزرگ بشری نقشی اساسی ایفا کند. هرچند که این امر نیازمند مدیریت دقیق و اصول اخلاقی قوی است (Mohseni and Ghorbani, 2024).

توسعه واکسن و دارو به‌عنوان یکی از ارکان اصلی تلاش‌های بهداشت عمومی شناخته می‌شود و نقشی حیاتی در مهار بیماری‌های عفونی و کاهش بیماری‌ها و مرگ‌ومیر جهانی دارد. بااین‌حال، روش‌های سنتی توسعه واکسن و دارو اغلب زمان‌بر، پرهزینه و ناکارآمد هستند. ظهور هوش مصنوعی عصر جدیدی را در طراحی

واکسن و دارو رقم زده است که فرصت‌های بی‌سابقه‌ای برای تسریع این فرآیند ارائه می‌دهد (Olawade et al. 2024). در سال‌های اخیر، هوش مصنوعی به‌ویژه از طریق یادگیری ماشین (machine learning) و یادگیری عمیق (deep learning) تحولی در توسعه واکسن، دارو، تشخیص بیماری‌ها و درمان آن ایجاد کرده است. این تکنولوژی‌ها به متخصصان پزشکی این امکان را داده‌اند که مدل‌های تشخیصی دقیق و قابل اعتماد برای انواع بیماری‌ها توسعه دهند. استفاده از هوش مصنوعی در تشخیص بیماری‌ها، امکان شناسایی زودهنگام، تشخیص دقیق و برنامه‌های درمانی شخصی‌سازی شده را فراهم کرده که بهبود نتایج بیمار را به دنبال خواهد داشت (Rehman et al. 2025). طی این مطالعه مروری کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان مورد بررسی قرار می‌گیرد.

## ابزارهای هوش مصنوعی

هوش مصنوعی به شبیه‌سازی هوش انسانی در ماشین‌هایی اشاره دارد که برنامه‌ریزی شده‌اند تا داده‌ها را به روشی مشابه انسان تجزیه و تحلیل و پردازش کنند. این اصطلاح به الگوریتم‌ها یا ماشین‌هایی اطلاق می‌شود که رفتارهایی مانند شناسایی الگوها، استنتاج و حل مسئله که به‌طور معمول با انسان‌ها مرتبط است، از خود نشان

"کاظمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

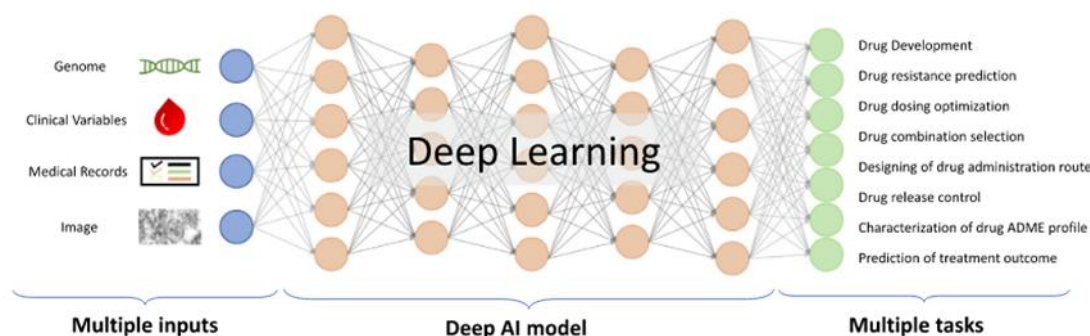
می‌دهند. در سال ۱۹۵۵، جان مک‌کارتی اصطلاح هوش مصنوعی را معرفی کرد و آن را به عنوان علم و مهندسی ساخت ماشین‌های هوشمند، به‌ویژه برنامه‌های کامپیوتری هوشمند تعریف نمود. امروزه، هوش مصنوعی در جنبه‌های مختلف زندگی ما ادغام شده است (Thomas et al. 2022).

هوش مصنوعی شامل چندین روش، از جمله استدلال، نمایش دانش، جستجوی راه‌حل‌ها و به‌ویژه پارادایم بنیادی یادگیری ماشین است. یادگیری ماشین از الگوریتم‌هایی استفاده می‌کند که می‌توانند الگوها را در مجموعه‌ای از داده‌های طبقه‌بندی‌شده شناسایی کنند. یکی از زیرشاخه‌های یادگیری ماشین، یادگیری عمیق است که از شبکه‌های عصبی مصنوعی (artificial neural networks: ANNs) بهره می‌برد. این شبکه‌ها از گره‌های متصل به هم تشکیل شده‌اند که ورودی‌ها را دریافت کرده و به خروجی تبدیل می‌کنند (مشابه با نحوه انتقال ایمپالس‌های الکتریکی در مغز انسان). شبکه‌های MLP یا شبکه‌های پرسپترون چندلایه (multilayer perceptron) که نوعی از شبکه‌های عصبی مصنوعی هستند؛ کاربردهایی از جمله شناسایی الگو، کمک به بهینه‌سازی، شناسایی فرآیند و کنترل‌ها دارند و معمولاً از طریق روش‌های آموزش نظارت‌شده که فقط در یک جهت عمل

می‌کنند، آموزش داده می‌شوند و می‌توانند به عنوان طبقه‌بندی‌کننده‌های الگوهای جهانی استفاده شوند. شبکه‌های عصبی بازگشتی (recurrent neural networks: RNNs) نوعی از شبکه‌های عصبی مصنوعی هستند که به‌طور خاص برای پردازش داده‌های ترتیبی کاربرد داشته و قابلیت ذخیره‌سازی و به‌خاطر سپردن اطلاعات را دارند. شبکه‌های عصبی پیچشی (convolutional neural networks: CNNs) یکی از انواع پرکاربرد شبکه‌های عصبی مصنوعی هستند که برای پردازش داده‌هایی با ساختار شبکه‌ای، مانند تصاویر و ویدئوها، طراحی شده‌اند. این شبکه‌ها در پردازش تصاویر به دلیل توانایی‌شان در شناسایی الگوها بسیار قدرتمند هستند و همچنین در کاربردهای زیستی استفاده می‌شوند. شبکه‌های پیچیده‌تری مانند شبکه‌های کوهنون (Kohonen network) (یک نوع خاص از شبکه‌های عصبی مصنوعی است که برای خوشه‌بندی و کاهش ابعاد داده‌ها استفاده می‌شود و توانایی آن در ارائه تصویری ساده و قابل فهم از داده‌های پیچیده است)، شبکه‌های RBF (radial basis function networks) (نوعی از شبکه‌های عصبی مصنوعی است که از توابع پایه شعاعی به عنوان تابع فعال‌سازی در لایه‌های مخفی استفاده می‌کند. این شبکه به‌ویژه برای مسائل طبقه‌بندی و رگرسیون استفاده می‌شود)، شبکه‌های LVQ (learning

ورودی‌های متعدد (داده‌های ژنومی، متغیرهای بالینی، سوابق پزشکی و تصاویر پزشکی را پردازش کرده و وظایف مختلفی را در توسعه دارو و تحقیق پزشکی انجام دهند. چارچوب ورودی-خروجی چندگانه (MIMO: multiple inputs multiple outputs) در یادگیری عمیق، به دلیل ظرفیت اطلاعاتی بالای آن، یکی از مسیرهای آینده‌دار برای ارائه راهنمایی جامع‌تر در تحویل داروهای ضد عفونی‌کننده است. MIMO می‌تواند اطلاعات را از منابع متعدد ترکیب کند و بهترین نتایج را برای بیمار ارائه دهد. استفاده از چارچوب MIMO نیاز به انتخاب ویژگی، کاهش ابعاد یا انتخاب مدل ندارد. این روش می‌تواند از یک مدل واحد برای تمام وظایف در تحویل دارو استفاده کند که اجرای آن را در مراکز یا سایت‌های بالینی مختلف آسان می‌سازد (He et al. 2021) (شکل ۱).

(vector quantization) (نوعی شبکه عصبی مصنوعی است که برای خوشه‌بندی و طبقه‌بندی استفاده می‌شوند و در مسائل یادگیری بدون نظارت و نظارت‌شده کاربرد دارد)، شبکه‌های ضدپراگیشنی (radial basis function networks) و شبکه‌های ADALINE (adaptive linear neuron) وجود دارند که در مدل‌سازی سیستم‌ها، پردازش عملکردهای پیچیده مغز، شناسایی الگو و پردازش سیگنال‌های پیچیده استفاده می‌شوند. یکی از ابزارهای توسعه یافته بر اساس این شبکه‌ها، ابررایانه IBM Watson است که برای تحلیل اطلاعات پزشکی بیماران و پیشنهاد راهکارهای درمانی برای سرطان طراحی شده است. این سیستم همچنین قادر به تشخیص سریع بیماری‌ها، مانند سرطان سینه در ۶۰ ثانیه است (Paul et al. 2021). به طور کلی مدل‌های یادگیری عمیق در هوش مصنوعی می‌توانند



شکل ۱- چارچوب ورودی‌های متعدد، خروجی‌های متعدد (MIMO) با استفاده از روش‌های یادگیری عمیق (He et al. 2021)

"کازمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

### هوش مصنوعی انقلابی در کشف و توسعه دارو

صنعت داروسازی به عنوان یک حوزه حیاتی که نقش مهمی در نجات جان انسان‌ها ایفا می‌کند، در تلاش است تا پیشرفت خود را برای پاسخگویی به نیازها و انتظارات مشتریان با استفاده از روش‌های مختلف بهبود بخشد. این صنعت بر اساس نوآوری مداوم و پذیرش فناوری‌های جدید برای مواجهه با چالش‌های بهداشتی جهانی و پاسخگویی به شرایط اضطراری پزشکی، مانند پاندمی اخیر، فعالیت می‌کند (Vora et al. 2023). فرآیند سنتی کشف دارو یک تلاش پیچیده و چالش‌برانگیز است که ممکن است تا ۱۵ سال طول بکشد و هزینه‌ای بین ۱ تا ۲ میلیارد دلار برای هر داروی تأیید شده داشته باشد. این مسئله عمدتاً به دلیل نرخ بالای افت موفقیت و مدت زمان طولانی آزمایش‌های بالینی است. علی‌رغم سرمایه‌گذاری قابل توجه در منابع، تقریباً ۹۰ درصد از کاندیداهای دارویی حتی پس از پیشرفت به مرحله اول آزمایش بالینی، شکست می‌خورند. پیشرفت یک کاندید دارویی به مرحله اول آزمایش بالینی پس از بهینه‌سازی دقیق در مرحله پیش‌بالینی به عنوان یک دستاورد مهم برای شرکت‌های دارویی و موسسات علمی محسوب می‌شود (Rehman et al. 2025).

در سال‌های اخیر، دیجیتال‌سازی داده‌ها در بخش داروسازی به‌طور چشمگیری افزایش یافته

است. با این حال، این دیجیتال‌سازی با چالش‌هایی در زمینه جمع‌آوری، بررسی و به‌کارگیری این دانش برای حل مشکلات پیچیده بالینی همراه است. این امر استفاده از هوش مصنوعی را ضروری می‌کند، زیرا هوش مصنوعی می‌تواند حجم زیادی از داده‌ها را با خودکارسازی بیشتر مدیریت کند. هوش مصنوعی سیستمی است که از ابزارها و شبکه‌های پیشرفته استفاده می‌کند که می‌تواند شبیه‌سازی هوش انسانی باشد، بدون آنکه حضور فیزیکی انسان را به‌طور کامل جایگزین کند. هوش مصنوعی می‌تواند تصمیمات مستقلی برای دستیابی به اهداف خاص اتخاذ کند. کاربردهای آن به‌طور مداوم در حال گسترش در بخش داروسازی است (Paul et al. 2021).

در تحقیقات و توسعه دارو، کاربرد هوش مصنوعی، مرزهای پژوهش‌های سنتی را درنور دیده و راهکارهای جدیدی برای غلبه بر مشکل مقاومت دارویی فراهم کرده است. یادگیری ماشین به‌طور گسترده‌ای در کشف دارو استفاده می‌شود و الگوریتم‌هایی مانند یادگیری عمیق، شبکه بیزی (bayesian network: BN)، جنگل تصادفی (random forest: RF)، خوشه‌بندی و ماشین بردار پشتیبان (support vector machine: SVM) را به کار می‌گیرد. مدل‌های یادگیری عمیق حجم زیادی از داده‌ها را در وظایفی مانند تصویربرداری بالینی، اسکرینینگ مجازی (virtual screening: VS) و

پیش‌بینی‌های بیواکتیویته پردازش و تحلیل می‌کنند. شبکه‌های بیزی پیش‌بینی سمیت یا بیواکتیویته و پاسخ بیماران به درمان‌ها را انجام می‌دهند. مدل‌های جنگل تصادفی برای شناسایی اهداف مولکولی و انتخاب ویژگی‌ها استفاده می‌شوند. ماشین بردار پشتیبان یک الگوریتم یادگیری نظارت‌شده است که برای دسته‌بندی داده‌ها به گروه‌ها به کار می‌رود و کاربردهایی

مانند پیش‌بینی خواص فارماکوکینتیک، اسکرینینگ مجازی و پیش‌بینی سمیت دارد (Rehman et al. 2024). جدول شماره ۱ نقش هوش مصنوعی در کشف دارو که در بخش‌های مختلف از جمله طراحی دارو، سنتز شیمیایی، غربالگری دارو، پلی‌فارماکولوژی و استفاده مجدد از دارو را نشان می‌دهد (Paul et al. 2021).

جدول ۱- نقش هوش مصنوعی در کشف دارو (Paul et al. 2021)

|                                         |                                                    |
|-----------------------------------------|----------------------------------------------------|
| پیش‌بینی ساختار سه‌بعدی پروتئین هدف     | هوش مصنوعی در طراحی دارو                           |
| پیش‌بینی تعاملات دارو-پروتئین           |                                                    |
| پیش‌بینی فعالیت دارویی                  |                                                    |
| هوش مصنوعی در طراحی دارو به روش de novo |                                                    |
| طراحی مولکول‌های دارویی اختصاصی         | هوش مصنوعی در چندداروشناسی (polypharmacology)      |
| طراحی مولکول‌های دارویی چندهدفه         |                                                    |
| پیش‌بینی بازده واکنش                    | هوش مصنوعی در سنتز شیمیایی                         |
| پیش‌بینی مسیرهای بازسازی (رتروسنتز)     |                                                    |
| کسب بینش در مکانیسم واکنش‌ها            |                                                    |
| طراحی مسیر سنتزی با هوش مصنوعی          |                                                    |
| شناسایی اهداف درمانی                    | هوش مصنوعی در بازهدف‌گذاری دارو (drug repurposing) |
| پیش‌بینی کاربردهای درمانی جدید          |                                                    |
| پیش‌بینی سمیت                           | هوش مصنوعی در غربالگری دارو                        |
| پیش‌بینی فعالیت زیستی                   |                                                    |
| پیش‌بینی خواص فیزیکوشیمیایی             |                                                    |
| شناسایی و طبقه‌بندی سلول‌های هدف        |                                                    |

زمینه کشف دارو با استفاده از مدل‌ها و ابزارهای هوش مصنوعی به سرعت در حال تحول است و ابزارها و مدل‌های جدید به طور مداوم در حال توسعه هستند تا فرآیند کشف داروهای جدید را تسریع کنند. برخی از مدل‌های هوش مصنوعی محبوب مورد استفاده در کشف دارو در جدول ۲ آمده است (Vora et al. 2023).

"کازمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

جدول ۲- برخی از مدل‌های محبوب هوش مصنوعی در کشف دارو (Vora et al. 2023)

| کاربرد                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | مدل‌های هوش مصنوعی                                   |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|
| یک کتابخانه متن‌باز یادگیری ماشین است که برای تسهیل استفاده از تکنیک‌های یادگیری ماشین و هوش مصنوعی در زمینه‌های شیمی، کشف دارو، پیش‌بینی خواص مولکولی و بیوانفورماتیک طراحی شده است                                                                                                                                                                                                            | DeepChem.                                            |
| یک کتابخانه شیمی‌اطلاعات متن‌باز است که به طور گسترده‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرد و امکانات مختلفی برای مدیریت مولکول‌ها، جستجوی زیرساخت‌ها و محاسبه توصیف‌گرها ارائه می‌دهد. این کتابخانه می‌تواند با فریم‌ورک‌های یادگیری ماشین برای کاربردهای کشف دارو یکپارچه شود.                                                                                                                         | RDKit                                                |
| یک مدل یادگیری عمیق است که به‌طور خاص برای وظایف مرتبط با شیمی و کشف دارو طراحی شده است. این مدل مبتنی بر معماری BERT (نمایش‌های رمزگذاری دوطرفه از ترنسفورمرها) است که یک مدل پرکاربرد در پردازش زبان طبیعی است.                                                                                                                                                                               | ChemBERTa                                            |
| یک مدل یادگیری عمیق (شبکه عصبی کانولوشن گرافی) است که به‌طور خاص برای کار با داده‌های ساختار گراف، مانند گراف‌های مولکولی طراحی شده است. این مدل عملیات کانولوشن را مستقیماً بر روی داده‌های گراف اعمال می‌کند، این مدل در پیش‌بینی خواص مولکولی مانند بیواکتیویته و سمیت موفق بوده است.                                                                                                        | GraphConv                                            |
| نرم‌افزار داکینگ محبوب که از تکنیک‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی وابستگی اتصال مولکول‌های کوچک به اهداف پروتئینی استفاده می‌کند. این نرم‌افزار می‌تواند در غربالگری مجازی و بهینه‌سازی پیشرو برای کشف دارو کمک کند.                                                                                                                                                                           | AutoDock Vina                                        |
| یک مدل یادگیری عمیق که رشته‌های SMILES (یک روش ساده‌شده برای نوشتن ساختار یک مولکول با استفاده از کاراکترهای ASCII هستند) را به عنوان ورودی می‌گیرد و ساختارهای مولکولی را تولید می‌کند این سیستم به‌طور رایج برای ذخیره‌سازی و اشتراک‌گذاری اطلاعات شیمیایی در پایگاه‌های داده و نرم‌افزارهای شیمی محاسباتی استفاده می‌شود.                                                                    | SMILES Transformer                                   |
| یک مجموعه نرم‌افزاری جامع است که برای شیمی محاسباتی، مدل‌سازی مولکولی و کشف دارو استفاده می‌شود. این مجموعه شامل مجموعه‌ای از ابزارها و روش‌های پیشرفته برای شبیه‌سازی سیستم‌های مولکولی و تجزیه و تحلیل خواص آن‌ها است. این مجموعه شامل ماژول‌هایی برای مدل‌سازی مولکولی، غربالگری مجازی، طراحی دارو مبتنی بر لیگاند و ساختار و مدل‌سازی پیش‌بینی است.                                         | Schrödinger Suite                                    |
| این مدل از الگوریتم‌های یادگیری عمیق و مجموعه داده‌های بزرگ واکنش‌ها برای تولید نتایج ممکن واکنش‌ها استفاده می‌کند و به کشف فرآیندهای شیمیایی جدید و مسیرهای سنتزی کمک می‌کند. این پلتفرم از قدرت فناوری‌های هوش مصنوعی IBM برای تحلیل داده‌های شیمیایی وسیع استفاده می‌کند و بینش‌هایی فراهم می‌آورد که می‌توان از آن‌ها در زمینه‌های مختلفی مانند توسعه دارو، علم مواد و شیمی سنتزی بهره برد. | IBM RXN for Chemistry                                |
| این پایگاه داده که از پردازش زبان طبیعی و یادگیری ماشین استفاده می‌کند، داده‌های شیمیایی و بیولوژیکی را از ادبیات علمی استخراج می‌کند و اطلاعات ارزشمندی برای تحقیقات کشف دارو فراهم می‌آورد.                                                                                                                                                                                                   | scape-DB                                             |
| یک مدل پیشرفته یادگیری ماشین است که برای کشف دارو طراحی شده است. این مدل، یادگیری تقویتی (reinforcement learning) را با تکنیک‌های مولدی ترکیب می‌کند تا ساختارهای مولکولی جدید با خواص مورد نظر ایجاد کند و به‌ویژه در طراحی کاندیداهای دارویی جدید مفید است، زیرا ساختارهای مولکولی را بر اساس اهداف بیولوژیکی خاص یا خواص شیمیایی مطلوب بهینه‌سازی می‌کند.                                    | GENTRL (Generative Tensorial Reinforcement Learning) |

این تلاش‌ها و سایر تحقیقات نشان‌دهنده ظرفیت هوش مصنوعی برای بهبود کارایی و اثربخشی فرآیندهای کشف دارو هستند. با این حال، استفاده از هوش مصنوعی در توسعه ترکیبات بیواکتیو جدید بدون چالش و محدودیت نیست. ملاحظات اخلاقی باید در نظر گرفته شوند و تحقیقات بیشتری برای درک کامل مزایا و محدودیت‌های هوش مصنوعی در این زمینه نیاز است. با وجود این چالش‌ها، انتظار می‌رود که هوش مصنوعی به طور قابل توجهی در توسعه داروها و درمان‌های جدید در سال‌های آینده نقش ایفا کند (Blanco-Gonzalez et al. 2023).

### هوش مصنوعی و توسعه واکسن

واکسن‌ها یکی از مهم‌ترین پیشرفت‌ها در تاریخ پزشکی بوده‌اند و نقشی حیاتی در نجات جان میلیون‌ها نفر و کاهش بار بیماری‌های عفونی در سراسر جهان ایفا کرده‌اند. مفهوم واکسیناسیون قدمتی چندصدساله داشته و سهم قابل توجهی در کنترل و ریشه‌کنی عوامل بیماری‌زای عفونی مختلف دارد. با این حال، روش‌های سنتی توسعه واکسن همواره با چالش‌هایی همراه بوده‌اند که کارایی و اثربخشی این فرآیند را محدود می‌کنند، این رویکرد متعارف شامل یک فرآیند کند و پرهزینه است که از جداسازی پاتوژن و شناسایی آنتی‌ژن تا فرمول‌بندی ایمونوژن و انجام

آزمایش‌های بالینی را در بر می‌گیرد. علی‌رغم پیشرفت‌های قابل توجه در بیوتکنولوژی، ایمنی‌شناسی و تولید واکسن، روش سنتی توسعه واکسن همچنان با چالش‌های متعددی همراه است. این فرآیند زمان‌بر، پرهزینه و اغلب ناکارآمد است و منجر به تأخیر در دسترسی و توزیع واکسن، به‌ویژه در طول شیوع یا پاندمی‌ها می‌شود. در سال‌های اخیر، ظهور هوش مصنوعی و تکنیک‌های محاسباتی چشم‌انداز توسعه واکسن را متحول کرده است. این فناوری‌های پیشرفته فرصت‌های بی‌سابقه‌ای را برای تسریع طراحی واکسن، بهینه‌سازی فرمولاسیون‌های ایمونوژن و پیش‌بینی پاسخ‌های ایمنی با دقت و کارایی بیشتر فراهم کرده‌اند (Kaushik et al. 2023; Olawade et al. 2024).

در سال ۲۰۱۹، یک آزمایش بالینی در ایالات متحده برای یک واکسن فصلی آنفلوانزا آغاز شد که یاور (adjuvant) آن توسط هوش مصنوعی شناسایی شده بود. در توسعه این واکسن، از ترکیبی از برنامه‌های هوش مصنوعی درون تراشه‌ای (*in silico*) (به آزمایش‌ها یا شبیه‌سازی‌هایی اطلاق می‌شود که از طریق مدل‌های کامپیوتری یا تکنیک‌های محاسباتی انجام می‌شوند، این اصطلاح به ویژه در رشته‌هایی مانند بیوانفورماتیک، کشف دارو، زیست‌شناسی مولکولی و ژنتیک استفاده می‌شود، جایی که

"کازمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

شبیه‌سازی‌های کامپیوتری می‌توانند فرآیندهای زیستی را مدل‌سازی کرده، رفتار مولکولی را پیش‌بینی کنند و داده‌های پیچیده را تحلیل کنند) استفاده شد تا یک توالی الیگونوکلوئوتیدی پیش‌بینی شود که بتواند به عنوان یک آگونیست (agonists) قوی گیرنده تول-لایک ۹ (TLR-9) انسانی در فرمولاسیون واکسن عمل کند. TLR-9 نقش مهمی در فعال‌سازی سیستم ایمنی ذاتی ایفا می‌کند و باعث القای بیان اینترفرون نوع I و سایر سایتوکاین‌هایی می‌شود که پاسخ‌های ایمنی تطبیقی را تقویت می‌کنند. یاور در فرمولاسیون واکسن در دو بخش طراحی شد: برنامه هوش مصنوعی synthetic chemist تقریباً ۱۰۱۶ الیگونوکلوئوتید مصنوعی مختلف را به صورت درون تراشه‌ای تولید کرد. این توالی‌ها توسط برنامه یادگیری ماشین SAM (search algorithm for ligands) که قبلاً با استفاده از انواع مختلف لیگاندهای شناخته‌شده TLR-9 آموزش داده شده

بود، برای فعالیت TLR-9 غربالگری شدند. غربالگری این تعداد عظیم از توالی‌های الیگونوکلوئوتیدی با استفاده از تکنیک‌های سنتی آزمایشگاهی ممکن بود دهه‌ها به طول انجامد، در حالی که این رویکرد مبتنی بر هوش مصنوعی توانست در عرض چند هفته بهترین کاندیدای آگونیست TLR-9 را شناسایی کند. این رویکرد مبتنی بر هوش مصنوعی نشان‌دهنده پتانسیل عظیمی در تسریع توسعه واکسن‌ها است و می‌تواند واکنش سریع‌تر و مؤثرتری در برابر بیماری‌های همه‌گیر در آینده ممکن سازد (Thomas et al. 2022). جدول شماره ۳ ابزارهای مختلف هوش مصنوعی را که در جنبه‌های مختلف توسعه واکسن از جمله پیش‌بینی اپی‌توپ، شناسایی مواد کمکی، طراحی ایمونوژن و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده می‌شوند را نشان می‌دهد (Olawade et al. 2024).

جدول ۳ - ابزارهای مختلف هوش مصنوعی و جنبه‌های مختلف توسعه واکسن (Olawade et al. 2024)

| ابزار هوش مصنوعی                                  | توصیف                                                                                                                                                                |
|---------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| یادگیری ماشین                                     | مانند درخت‌های تصمیم‌گیری و جنگل‌های تصادفی برای پیش‌بینی اپی‌توپ‌های آنتی‌ژنی، ارزیابی ایمنی‌زایی و اولویت‌بندی آنتی‌ژن‌ها بر اساس ویژگی‌های متنوع استفاده می‌شوند. |
| یادگیری عمیق                                      | مانند شبکه‌های عصبی کانولوشنی و شبکه‌های عصبی بازگشتی که برای پیش‌بینی مبتنی بر توالی، تاخوردگی پروتئین و شناسایی کاندیداهای واکسن استفاده می‌شوند.                  |
| مدل‌های مارکوف پنهان (hidden Markov models (HMMs) | مدل‌های احتمالاتی هستند که برای پیش‌بینی اپی‌توپ‌های لفسیت های B و T از طریق شناسایی موتیف‌های توالی و الگوهای ساختاری استفاده می‌شوند.                              |
| شبکه‌های عصبی                                     | مانند شبکه‌های عصبی پیش‌خور (feedforward) و شبکه‌های عصبی بازگشتی، برای پیش‌بینی اپی‌توپ، پیش‌بینی                                                                   |

|                                                                                                                                                                                                             |                                                               |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|
| تعاملات پروتئین-پروتئین و طراحی واکسن مبتنی بر ساختار استفاده می‌شوند.                                                                                                                                      |                                                               |
| مدل‌های تولیدی، مانند اتوانکودرهای واریاسیونال (variational autoencoders) و شبکه‌های مولد رقیب (generative adversarial networks)، برای طراحی ایمونوژن de novo و تولید کاندیداهای جدید واکسن به کار می‌روند. | مدل‌های تولیدی (generative models)                            |
| برای مطالعه رفتار دینامیکی و پایداری ساختاری ایمونوژن‌ها استفاده می‌شوند و به طراحی منطقی و بهینه‌سازی سازه‌های واکسن کمک می‌کنند.                                                                          | دینامیک مولکولی (molecular dynamics)                          |
| مانند داگینگ مولکولی و غربالگری مبتنی بر لیگاند، برای غربالگری مجموعه‌های بزرگ ترکیبات به کار می‌روند تا کاندیداهای بالقوه برای یاورها شناسایی شوند.                                                        | غربالگری مجازی (virtual screening)                            |
| روابط ساختاری-عملکردی مولکول‌های یاور را تحلیل می‌کنند و به طراحی منطقی و بهینه‌سازی فرمولاسیون‌های ادجوانت کمک می‌نمایند.                                                                                  | مدل‌های رابطه ساختار-عملکرد (structure-activity relationship) |

فناوری‌های هوش مصنوعی طراحی و نظارت بر آزمایش‌های بالینی را تسهیل می‌کنند و به توسعه واکسن کارآمدتر و کم‌هزینه‌تر کمک می‌کنند. در طول پاندمی COVID-19، هوش مصنوعی نقش محوری در تسریع توسعه واکسن‌های mRNA، مانند واکسن‌های Pfizer-BioNTech و Moderna، ایفا کرد که در زمان رکوردی با استفاده از طراحی آنتی‌ژن مبتنی بر هوش مصنوعی و بهینه‌سازی آزمایش‌های بالینی توسعه یافتند. جدول ۴ نیز مثال‌های از ابزارها و پلتفرم‌های نرم‌افزاری مبتنی بر هوش مصنوعی را که به طور معمول در توسعه واکسن استفاده می‌شوند، به همراه کاربردهای آن‌ها ارائه می‌دهد (Asediya et al. 2024; Olawade et al. 2024; Zhang et al. 2024).

جدول ۴- ابزارها و پلتفرم‌های نرم‌افزاری مبتنی بر هوش مصنوعی در توسعه واکسن (Olawade et al. 2024)

| ابزار / نرم افزارهای هوش مصنوعی | توصیف                                                                                                                                                              |
|---------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Biopython                       | یک کتابخانه پایتون در زیست‌شناسی محاسباتی و بیوانفورماتیک برای وظایفی مانند تجزیه و تحلیل داده‌های ژنومی، هم‌راستایی توالی‌ها و زیست‌فیزیک ساختاری استفاده می‌شود. |
| PyRosetta                       | یک مجموعه ابزار مبتنی بر پایتون برای پیش‌بینی و طراحی ساختار پروتئین که بر پایه مجموعه مدل‌سازی مولکولی Rosetta ساخته شده است.                                     |
| Rosalind                        | یک پلتفرم آنلاین که چالش‌های حل مسائل بیوانفورماتیک و منابع آموزشی ارائه می‌دهد که برای آموزش در زمینه تجزیه و تحلیل توالی و پیش‌بینی اپی‌توپ مفید است.            |
| NetMHC                          | یک سرور وب برای پیش‌بینی پیوند پپتید به مولکول‌های کمپلکس اصلی سازگاری بافتی (MHC) که برای پیش‌بینی اپی‌توپ‌های لئوسیت T ضروری است.                                |

"کازمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآرانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

|                                                      |                                                                                                                                                                  |
|------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Docking Softwar                                      | نرم افزار داکینگ مولکولی که برای شبیه سازی تعاملات بین مولکول های کوچک و پروتئین های هدف استفاده می شود، برای غربالگری مجازی و شناسایی یاورها حیاتی است.         |
| TensorFlow / Keras                                   | دو فریم ورک محبوب یادگیری عمیق برای ساخت و آموزش شبکه های عصبی به طور گسترده ای برای پیش بینی اپی توپ مبتنی بر توالی و شناسایی کاندیداهای واکسن استفاده می شوند. |
| IEDB (immune epitope database and analysis resource) | یک پایگاه داده جامع و منبع تحلیلی برای پیش بینی اپی توپ و ویژگی شناسی اپی توپ های ایمنی.                                                                         |

## هوش مصنوعی و کاربردهای نوآرانه در درمان با

فاژ

تعاملات بین فاژ و باکتری استفاده می شود ( Qiu

et al. 2024).

باکتری *E. coli* دارای تنوع وسیعی در سطح ژنوم به دلیل انتقال افقی ژن از طریق فاژها و پلاسمیدها است. به همین دلیل، انتخاب فاژ برای این باکتری دشوار است، زیرا ایزوله های مختلف می توانند تفاوت های قابل توجهی در حساسیت به فاژ نشان دهند به دلیل تفاوت ها در عواملی که برای عفونت فاژ مهم هستند، از جمله پروفایل های گیرنده فاژ و مکانیسم های مقاومت. طی مطالعه ای نشان داده شده است یادگیری ماشین می تواند در طراحی درمان های بالینی با فاژ، به ویژه برای عفونت های مجاری ادراری ناشی از کولی باسیل مقاوم به چند دارو، کمک کند ( Keith et al. 2024). علاوه بر این، ابزاری به نام HostPhinder (بزاری مبتنی بر هوش مصنوعی است که برای پیش بینی میزبان های احتمالی فاژها طراحی شده است) قادر است جنس و گونه های میزبان فاژ را به ترتیب با دقت ۸۱ و ۷۴ درصد پیش بینی کند که توانایی این فناوری را در شناسایی اهداف درمانی نشان می دهد؛ بنابراین، کاربرد فاژها، چه به تنهایی

درمان با فاژ به دلیل مزایای بالقوه ای که در مقابله با عفونت های باکتریایی مقاوم به دارو دارد، مورد توجه جامعه علمی قرار گرفته است. با این حال، پیش بینی دقیق تعاملات پیچیده میان فاژها و پاتوژن ها و میزبان های هدف آن ها همچنان چالشی بزرگ محسوب می شود و مدل های هوش مصنوعی به عنوان ابزاری مهم برای غلبه بر این چالش به شمار می روند. فاژها می توانند در درمان عفونت های باکتریایی مفید باشند، اما برای مقابله با تنوع ژنتیکی گسترده بین فاژها و باکتری ها به مدل های درون سیلیکویی نیاز دارند. با وجود عملکرد پیش بینی قابل قبول، دامنه کاربرد رویکردهای کنونی به پیش بینی در سطح گونه محدود است که نمی تواند رابطه فاژها را در بین جهش های باکتریایی به طور دقیق پیش بینی کند. این امر توسعه درمان های فاژی مبتنی بر پیش بینی روابط فاژ-باکتری را محدود کرده است. به عنوان مثال، یک راهکار مبتنی بر یادگیری ماشین به نام راهکار محلی K-mer برای پیش بینی دقیق

و چه در ترکیب با عوامل ضد میکروبی، می تواند جایگزینی مؤثر برای درمان عفونت های ناشی از پاتوژن های مقاوم باشد. توسعه سریع فناوری هوش مصنوعی ظرفیت درمان با فاژ را با پیش بینی دقیق تعاملات پیچیده بین پاتوژن ها و فاژها افزایش می دهد و در نتیجه به طراحی درمان های شخصی سازی شده کمک می کند. این پیشرفت ها نه تنها توسعه درمان با فاژ را تسریع می کند، بلکه شانس موفقیت درمان را نیز افزایش می دهد (Bagdad and Miteva, 2024; Wei et al. 2024; Zhang et al. 2024).

### سیستم های پشتیبانی تصمیم گیری بالینی با کمک هوش مصنوعی

سیستم های پشتیبانی تصمیم گیری بالینی (clinical decision support systems) با کمک هوش مصنوعی ابزارهایی هستند که به پزشکان و کادر درمانی در تشخیص، درمان و تصمیم گیری بالینی کمک می کنند. این سیستم ها با تحلیل داده های بیمار، مقایسه آن ها با اطلاعات پزشکی موجود و استفاده از مدل های پیش بینی، به تصمیمات دقیق تر و سریع تر کمک می کنند (Elhaddad and Hamam, 2024).

هوش مصنوعی پتانسیل انقلابی در سیستم های پشتیبانی تصمیم گیری بالینی دارد و می تواند به بهبود ارائه خدمات درمانی کمک کند. فناوری های

هوش مصنوعی، به ویژه زمانی که در سیستم های پشتیبانی تصمیم گیری بالینی ادغام شوند، می توانند به پزشکان در بهبود دقت تشخیص، بهینه سازی تصمیمات درمانی و کاهش خطاها، به ویژه در محیط های پیچیده و داده محور، کمک کنند. مطالعات نشان داده اند که هوش مصنوعی می تواند در شناسایی زودهنگام بیماری ها، بهبود تصمیم گیری بالینی و کاهش خطاهای دارویی مؤثر باشد که به نوبه خود نتایج بیمار را بهبود می بخشد. با این حال، چالش هایی نظیر حفظ حریم خصوصی، امنیت داده ها و عدالت در دسترسی به خدمات همچنان وجود دارد که نیاز به توسعه و اصلاح مستمر این سیستم ها را نشان می دهد (Ouanes and Farhah, 2024).

در تحقیقی نشان داده شده است که سیستم های پشتیبانی تصمیم گیری بالینی مبتنی بر پردازش زبان طبیعی (NLP) توانایی استخراج اطلاعات حیاتی از سوابق الکترونیکی سلامت بیمار برای تسهیل انجام وظایف مهم پشتیبانی تصمیم گیری را دارند (Berge et al. 2023). با این حال، دستیابی به نتایج دقیق و قابل تفسیر در حوزه پزشکی بسیار حیاتی است، اما این امر به دلیل وجود ناسازگاری ها و نادرستی ها در سوابق الکترونیکی واقعی سلامت بیمار، چالش برانگیز است. علاوه بر این، آزمایش چنین سیستم های مبتنی بر یادگیری ماشین در عمل بالینی توجه کمی را جلب کرده

"کازمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

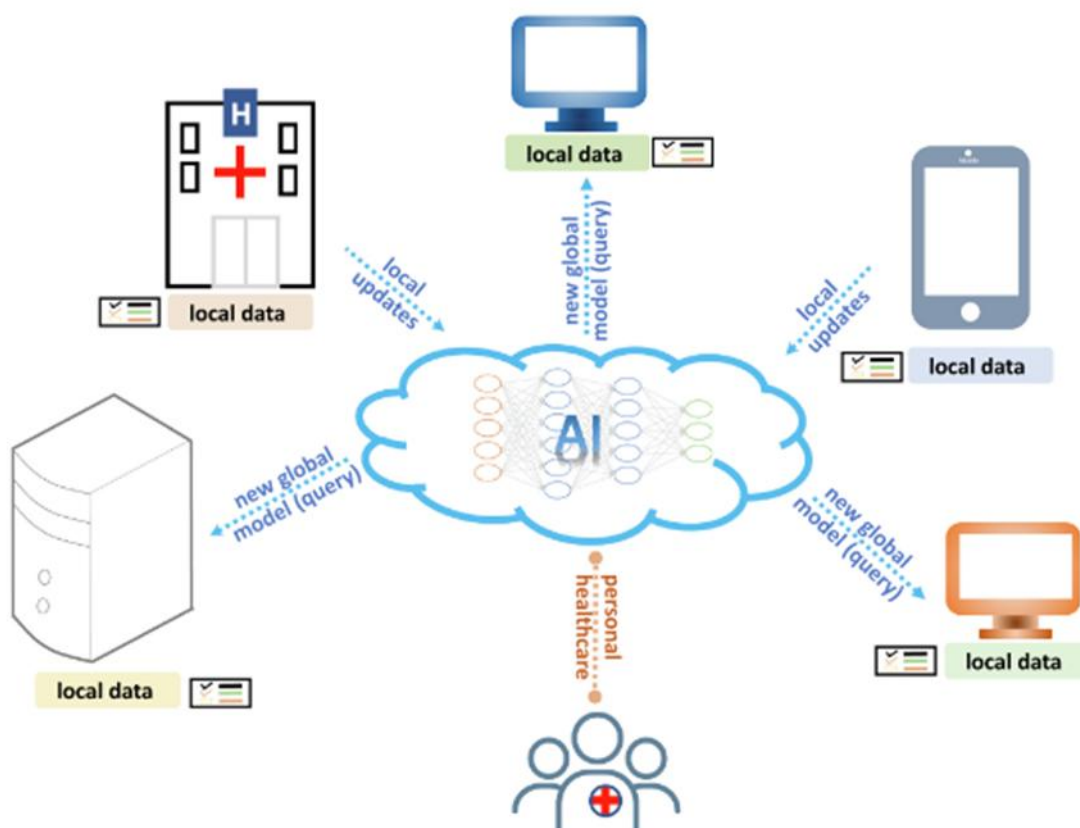
است و هنوز توسط پزشکان برای استفاده منظم پذیرفته نشده‌اند (Berge et al. 2023).

زمان‌بندی مؤثر داروهای ضد میکروبی یکی از عوامل تعیین‌کننده در میزان مرگ‌ومیر در مدیریت بیماری‌های عفونی، به‌ویژه در شوک سپتیک (septic shock) است. تشخیص زودهنگام نه تنها باعث کاهش پیش‌آگهی نامطلوب ناشی از تأخیر در درمان می‌شود، بلکه به جلوگیری از مداخلات پزشکی غیرضروری و کاهش هزینه‌های درمان کمک کرده و به‌طور قابل‌توجهی نرخ بقا و کیفیت زندگی بیماران را بهبود می‌بخشد. با توجه به تأکید روزافزون بر درمان‌های فردی و پزشکی دقیق، پیشرفت هوش مصنوعی نه تنها نوآوری‌های پزشکی را ترویج می‌کند، بلکه می‌تواند رویکردهای موجود در تشخیص و درمان را متحول کند. در تشخیص و درمان بیماری‌های عفونی باکتریایی، هوش مصنوعی و یادگیری ماشین برای ساده‌سازی فرآیند، ساده‌سازی فرآیندهای کاری پزشکان و دیگر کادر درمانی، بهبود کیفیت تصمیم‌گیری و توسعه گزینه‌های درمانی فردی‌شده به کار گرفته می‌شوند. به‌عنوان نمونه، مدل‌های یادگیری ماشین برای تشخیص عفونت ویروس سنسیشیال تنفسی و سیاه‌سرفه در کودکان با ترکیب علائم بالینی و نتایج آزمایشگاهی موفق عمل کرده‌اند. مدل‌های LightGBM (یک پیاده‌سازی منبع‌باز، توزیع‌شده و

با عملکرد بالا از گریدینت بوستینگ است که به منظور سرعت و کارایی با داده‌های بزرگ طراحی شده است.) و سایر مدل‌های یادگیری ماشین بر اساس شاخص‌های بالینی مهمی مانند جنسیت و سن در پیش‌بینی علل تب‌های بدون علت کلاسیک (FUO: fever of unknown origin) در بیماران تأثیرگذار بوده‌اند. همچنین، مدل‌های یادگیری ماشین می‌توانند به سرعت ریسک عفونت MRSA (*Staphylococcus methicillin-resistant aureus*) را در بیماران مبتلا به پنومونی از جامعه ارزیابی کرده و تسهیل‌کننده تجویز درمان‌های ضد میکروبی هدفمند باشند. یادگیری فدرال (federated learning) یک روش یادگیری ماشین است که در مطالعات مربوط به سوابق پزشکی به مدل‌ها اجازه می‌دهد تا به‌صورت غیرمتمرکز آموزش ببینند، به طوری که داده‌ها در دستگاه‌های محلی (مانند گوشی‌های موبایل، لپ‌تاپ‌ها یا دستگاه‌های دیگر) نگهداری می‌شوند و نیازی به ارسال داده‌های حساس به سرور مرکزی نیست. این روش، از روش‌های نویدبخش برای حل مشکل داده‌های کم‌حجم است که در مکان‌های مختلف قرار دارند و متعلق به نهادهای متفاوتی هستند. برخلاف روش‌های سنتی که این مشکل را با متمرکز کردن داده‌ها حل می‌کنند. این مدل زمانی کاربرد دارد که به دلیل مسائل حریم خصوصی امکان به اشتراک‌گذاری داده‌ها بین

ارسال کنند. سپس سرور این اطلاعات را از تمام منابع محلی جمع‌آوری کرده و برای بهبود مدل هوش مصنوعی از آن استفاده می‌کند (He et al., 2021).

بیمارستان‌های محلی وجود ندارد. با توجه به شکل ۲، سرور ابری می‌تواند مدل هوش مصنوعی را به بیمارستان، سایت یا دستگاه محلی ارسال کند. این نهادهای محلی می‌توانند مدل را اجرا کنند و اطلاعات به‌روزرسانی شده را به سرور



شکل ۲- چارچوب یادگیری فدرال: مدل هوش مصنوعی در فضای ابری ذخیره می‌شود و به داده‌های محلی ارسال می‌گردد، سپس به‌روزرسانی‌های محلی را جمع‌آوری کرده و مدل را بهبود می‌بخشد (He et al., 2021).

کرده‌اند و پتانسیل تغییر روش‌های سنتی تشخیص و درمان را دارا هستند (Zhang et al., 2024).

### ارتباط بین میکروبیوم و بیماری‌ها

میکروبیوم‌ها نقش مهمی در تأثیرگذاری بر سلامت انسان و بروز بیماری‌ها دارند، بدن انسان میزبان

به‌طورکلی، مدل‌های یادگیری ماشین با موفقیت برای بهبود دقت تشخیص و پیش‌بینی خطر بیماری در تصمیم‌گیری‌های بالینی استفاده شده‌اند و نسبت به روش‌های سنتی دقت و کارایی بهتری نشان می‌دهند. فناوری‌های هوش مصنوعی و یادگیری ماشین موجی از نوآوری پزشکی را ایجاد

"کازمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

مجموعه‌ای متنوع از میکروارگانسیم‌هاست که رابطه همزیستی با سلامت انسان دارند. به عنوان مثال، اختلال در ترکیب میکروبی روده می‌تواند منجر به شرایط التهابی مانند کولیت اولسراتیو و سرطان کولورکتال شود. بیماری‌هایی همچون آترواسکلروز، دیابت و چاقی با عدم توازن در میکروبیوتای روده مرتبط بوده‌اند. از این رو، اهمیت پیش‌بینی ارتباطات بین میکروارگانسیم‌های خاص و بیماری‌ها به میان می‌آید. برخی بیماری‌ها می‌توانند بر جوامع میکروبی بدن انسان تأثیر بگذارند. بررسی تغییرات در این جوامع می‌تواند به پیش‌بینی بیماری‌ها و توسعه درمان‌های خاص برای شرایط میکروبیوم هر فرد کمک کند و فرصت جدیدی برای پژوهش‌های آینده فراهم آورد (Xu et al. 2020).

هوش مصنوعی تاکنون نقش مهمی در پیشرفت تحلیل داده‌های میکروبیوم ایفا کرده است؛ به عنوان مثال، با افزایش کیفیت ژنوم‌های میکروبی استخراج‌شده از نمونه‌های بیماران و بهبود شناسایی میکروب‌ها، ژن‌ها و مسیرهای متابولیکی جدید. همچنین، این فناوری به طور گسترده در مراحل پیش‌پردازش تحلیل‌های مرتبط با میکروبیوم، مانند تشخیص تاکسونومی و انتخاب ویژگی‌ها؛ استفاده می‌شود. علاوه بر این، هوش مصنوعی در شناسایی بیومارکرها برای کشف دارو، طبقه‌بندی و شناسایی پاتوژن‌ها و پیش‌بینی

حساسیت به بیماری، پیشرفت آن و پاسخ به درمان بر اساس ترکیبات میکروبی (مانند میکروبیوم روده) پیشرفت‌هایی به همراه داشته است (Probul et al. 2024). روش‌هایی مانند یادگیری عمیق، جنگل تصادفی، ماشین‌های بردار پشتیبان، الگوریتم‌های خوشه‌بندی، شبکه‌های عصبی گراف برای طبقه‌بندی نمونه‌های میکروبیوم و پیش‌بینی فنوتیپ‌های میزبان با دقت بالا استفاده شده‌اند (D'Urso and Broccolo, 2024). طی تحقیقی از طبقه‌بندی جنگل تصادفی برای پیش‌بینی ویژگی‌های میزبان از داده‌های میکروبیوم روده استفاده شد که نتایج مطلوبی داشت (Pasolli et al. 2016). در تحقیق دیگری دانشمندان از خوشه‌بندی *k-means* برای شناسایی انتروتیپ‌های متمایز در میکروبیوم روده انسان استفاده کردند که نتایج رضایت‌بخش بود (Knights et al. 2014). در همین راستا تعدادی از محققین مدلی مبتنی بر شبکه‌های عصبی گراف توسعه دادند که قادر است الگوهای هم‌زیستی میکروبی و روابط عملکردی را از داده‌های متاژنومی پیش‌بینی کند (Pasolli et al. 2016). طی تحقیق دیگری دانشمندان با استفاده از KATZH-MDA، یک روش نوین برای پیش‌بینی ارتباطات بین میکروبیوم انسانی و بیماری‌های غیرعفونی ارائه کردند. این روش با استفاده از ماتریس‌های تشابه هسته‌ای بر اساس پروفایل‌های تعاملی بیماری‌ها و میکروب‌ها، به بهبود پیش‌بینی

### نتیجه گیری

روش های مبتنی بر هوش مصنوعی، از قبیل استفاده از الگوریتم های یادگیری ماشینی به منظور پیش بینی ساختارهای مولکولی و تعاملات بین دارویی برای شناسایی داروهای ایمن تر، تحلیل داده های بزرگ ژنتیکی و متابولیکی مطالعات پیش بالینی برای شناسایی عوارض جانبی احتمالی، استفاده از الگوریتم های هوش مصنوعی برای پیش بینی خطرات و عوارض جانبی داروها و واکسن ها قبل از آزمایش های بالینی امیدهای بسیاری برای تسریع طراحی واکسن ها و داروها ایجاد کرده اند. این ابزارها همچنین کاربردهای بالقوه ای در تشخیص عفونت و تعیین پیش آگهی دارند. با توسعه بیشتر این ابزارها و افزایش پیچیدگی و سرعت عملکرد آن ها، استفاده گسترده تر از این تکنیک ها به طور حتم در آینده افزایش خواهد یافت. با این حال، همانطور که هوش مصنوعی نقش فعال تری در تصمیم گیری پزشکی ایفا می کند، باید به مسائل اخلاقی مانند محرمانگی بیمار، تعصبات، امنیت داده ها، شفافیت، دسترسی و نظارت انسانی پرداخته شود. با توجه به پتانسیل این حوزه، انتظار می رود که به یکی از اجزای کلیدی هر برنامه مقابله با بیماری ها و پاندمی ها در آینده تبدیل شود و نقش مهم تری در طراحی سریع تر و دقیق تر داروها و واکسن ها ایفا کند.

ارتباطات کمک می کند (Chen et al. 2017)؛ همچنین یاتسونکو و همکاران با موفقیت توانستند از روش جنگل تصادفی برای طبقه بندی دقیق نمونه های جامعه میکروبی انسان استفاده کنند. این روش در شناسایی واحدهای طبقه بندی عملیاتی (OTUs) یا گونه هایی که به عنوان عوامل تمایز بین گروه ها عمل می کنند، مؤثر بود (Yatsunenکو et al. 2012). این مطالعات نشان می دهد که برخی بیماری ها می توانند بر جوامع میکروبی بدن انسان تأثیر بگذارند. بررسی تغییرات در این جوامع می تواند به پیش بینی بیماری ها و توسعه درمان های خاص برای شرایط میکروبیوم هر فرد کمک کند و فرصت جدیدی برای پژوهش های آینده فراهم آورد (Xu et al. 2020). در مقایسه با پیشرفت های هوش مصنوعی در سایر زمینه های بهداشتی مانند تصویربرداری پزشکی و رادیومیکس، مراقبت های بهداشتی مرتبط با میکروبیوم تا حدودی عقب تر است. عواملی مانند کمبود داده های باکیفیت کافی برای مقابله با ناهمگونی فردی و جغرافیایی در میکروبیوم انسانی سالم، نبود توضیحات عملکردی واضح و کمبود استانداردسازی میان مؤسسات از جمله دلایل این مسئله هستند (Probul et al. 2024).

## References

## فهرست منابع

- Asediya VS, Anjaria PA, Mathakiya RA, Koringa PG, Nayak JB, Bisht D, Fulmali D, Patel VA, Desai DN. 2024.** Vaccine development using artificial intelligence and machine learning: A review. *International Journal of Biological Macromolecules*, 136643. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.136643>.
- Bagdad Y and Miteva MA. 2024.** Recent applications of artificial intelligence in discovery of new antibacterial agents. *Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry*. 17: 139-157. <https://doi.org/10.2147/AABC.S484321>.
- Berge GT, Granmo OC, Tveit TO, Munkvold BE, Ruthjersen AL, Sharma J. 2023.** Machine learning-driven clinical decision support system for concept-based searching: a field trial in a Norwegian hospital. *BMC Medical Informatics and Decision Making*. 23(5): <https://doi.org/10.1186/s12911-023-02101-x>.
- Blanco-Gonzalez A, Cabezon A, Seco-Gonzalez A, Conde-Torres D, Antelo-Riveiro P, Pineiro A, Garcia-Fandino R. 2023.** The role of AI in drug discovery: challenges, opportunities, and strategies. *Pharmaceuticals*. 16(6): 891. <https://doi.org/10.3390/ph16060891>.
- Chen X, Huang YA, You ZH, Yan GY, Wang XS. 2017.** A novel approach based on KATZ measure to predict associations of human microbiota with non-infectious diseases. *Bioinformatics*. 33(5): 733-739. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btw715>.
- D'Urso F and Broccolo F. 2024.** Applications of artificial intelligence in microbiome analysis and probiotic interventions—An overview and perspective based on the current state of the Art. *Applied Sciences*. 14(19): 8627. <https://doi.org/10.3390/app14198627>.
- Elhaddad M and Hamam S. 2024.** AI-Driven clinical decision support systems: an ongoing pursuit of potential. *Cureus*. 16(4): E57728. <https://doi.org/10.7759/cureus.57728>.
- He S, Leanse LG, Feng Y. 2021.** Artificial intelligence and machine learning assisted drug delivery for effective treatment of infectious diseases. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 178: 113922. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2021.113922>.
- Kaushik R, Kant R, Christodoulides M. 2023.** Artificial intelligence in accelerating vaccine development-current and future perspectives. *Frontiers in Bacteriology*. 2: 1258159. <https://doi.org/10.3389/fbri.2023.1258159>.
- Keith M, de la Torriente AP, Chalka A, Vallejo-Trujillo A, McAteer SP, Paterson GK, Low AS, Gally DL. 2024.** Predictive phage therapy for Escherichia coli urinary tract infections: Cocktail selection for therapy based on machine learning models. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 121(12): e2313574121. <https://doi.org/10.1073/pnas.2313574121>.
- Knights D, Ward TL, McKinlay CE, Miller H, Gonzalez A, McDonald D, Knight R. 2014.** Rethinking "enterotypes". *Cell Host & Microbe Forum*. 16(4): 433-437. <https://doi.org/10.1016/j.chom.2014.09.013>.
- Mohseni P and Ghorbani A. 2024.** Exploring the synergy of artificial intelligence in microbiology: Advancements, challenges, and future prospects. *Computational and Structural Biotechnology Reports*. 1: 100005. <https://doi.org/10.1016/j.csbr.2024.100005>.
- Olawade DB, Teke J, Fapohunda O, Weerasinghe K, Usman SO, Ige AO, David-Olawad AC. 2024.** Leveraging artificial intelligence in vaccine development: A narrative review. *Journal of Microbiological Methods*. 224: 106998. <https://doi.org/10.1016/j.mimet.2024.106998>.
- Ouanes K and Farhah N. 2024.** Effectiveness of artificial intelligence (AI) in clinical decision support systems and care delivery. *Journal of Medical Systems*. 48(74): <https://doi.org/10.1007/s10916-024-02098-4>.
- Pasolli E, Truong DT, Malik F, Waldron L, Segata N. 2016.** Machine learning meta-analysis of large metagenomic datasets: tools and biological insights. *PLoS Computational Biology*. 12(7): e1004977. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1004977>.

- Paul D, Sanap G, Shenoy S, Kalyane D, Kalia K, Tekade RK. 2021.** Artificial intelligence in drug discovery and development. *Drug Discovery Today*. 26(1): 80-93. <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2020.10.010>.
- Probul N, Huang Z, Saak CC, Baumbach J, List M. 2024.** AI in microbiome-related healthcare. *Microbial Biotechnology*. 17: e70027. <https://doi.org/10.1111/1751-7915.70027>.
- Qiu J, Nie W, Ding H, Dai J, Wei Y, Li D, Zhang Y, Xie J, Tian X, Wu N, Qiu T. 2024.** PB-LKS: a python package for predicting phage-bacteria interaction through local K-mer strategy. *Briefings in Bioinformatics*. 25(2): <https://doi.org/10.1093/bib/bbae010>.
- Rehman AU, Li M, Wu B, Ali Y, Rasheed S, Shaheen S, Zhang J. 2025.** Role of artificial intelligence in revolutionizing drug discovery. *Fundamental Research*. 5(3): 1273-1287. <https://doi.org/10.1016/j.fmre.2024.04.021>.
- Thomas S, Abraham A, Baldwin J, Piplani S, Petrovsky N. 2022.** Artificial intelligence in vaccine and drug design. In: Thomas S (Ed.) *Vaccine design: Methods in molecular biology*. Humana, New York, USA. 131-146.
- Vora LK, Gholap AD, Jetha K, Thakur RRS, Solanki HK, Chavda VP. 2023.** Artificial intelligence in pharmaceutical technology and drug delivery design. *Pharmaceutics*. 15(7): 1916. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15071916>.
- Wei T, Lu C, Du H, Yang Q, Qi X, Liu Y, Jiang N. 2024.** DeepPBI-KG: a deep learning method for the prediction of phage-bacteria interactions based on key genes. *Briefings in Bioinformatics*. 25(6): bbae484. <https://doi.org/10.1093/bib/bbae484>.
- Xu X, Xie Z, Yang Z, Li D, Xu X. 2020.** A t-SNE based classification approach to compositional microbiome data. *Frontiers in Genetics*. 11: 620143. <https://doi.org/10.3389/fgene.2020.620143>.
- Yatsunenkov T, Rey FE, Manary MJ, Trehan I, Dominguez-Bello MG, Contreras M, Magris M, Hidalgo G, Baldassano RN, Anokhin AP, Heath AC, Warner B, Reeder J, Kuczynski J, Caporaso JG, Lozupone CA, Lauber C, Clemente JC, Knights D, Gordon JL. 2012.** Human gut microbiome viewed across age and geography. *Nature*. 486: 222-227. <https://doi.org/10.1038/nature11053>.
- Zhang X, Zhang D, Zhang X, Zhang X. 2024.** Artificial intelligence applications in the diagnosis and treatment of bacterial infections. *Frontiers in Microbiology*. 15: 1449844. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2024.1449844>.

## A Review of Innovative Applications of Artificial Intelligence in the Development of Drug, Vaccine, and Treatment

Reza Kazemi Darsanaki\*

Ph.D. Student, Nanobiotechnology, Biology Research Centre, Imam Hossein University, Tehran, Iran  
[darsanaki@hotmail.com](mailto:darsanaki@hotmail.com)

### Abstract

In genetically modified organisms (GMOs), the genome structure is artificially manipulated to achieve desirable traits such as pest and herbicide resistance, drought tolerance, or increased yield. The development and widespread cultivation of these plants in the last three decades, and the significance of verifying and quantifying authorized events in food and feed, have driven the development of rapid, accurate, and sensitive detection methods. Although PCR-based methods are frequently utilized for GMO detection, limitations such as the need for complex equipment, time-intensive procedure, and high costs have made their use challenging in some cases. Therefore, alternative methods for identifying and

"کاظمی درسنگی، مروری بر کاربردهای نوآورانه هوش مصنوعی در توسعه دارو، واکسن و درمان"

quantifying genetically modified organisms are necessary. In this context, DNA biosensors have emerged as promising tools for specific and quantitative detection of nucleotide sequences. DNA biosensors operate based on the specific interaction between a single-stranded DNA probe immobilized on the sensor surface and a complementary target sequence. This DNA hybridization event produces a detectable signal that can be measured using an optical, electrochemical, or piezoelectric transduction. Recent advancements in nanotechnology and biosensor development hold the potential to enhance the sensitivity, specificity, and speed of DNA biosensors, paving the way for their broader application.

**Keywords:** Drug, Treatment, Vaccine, Artificial Intelligence