

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ**  
**НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
**імені О.О.Богомольця**  
**ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ**  
**КАФЕДРА ОРГАНІЗАЦІЇ ТА ЕКОНОМІКИ ФАРМАЦІЇ**

**ВИПУСКНА КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА**  
на тему «**Аналіз можливостей використання штучного інтелекту у**  
**фармації»**

**Виконав:** здобувач вищої освіти 5 курсу, групи 9802  
напряму підготовки 22 Охорони здоров'я  
спеціальність 226 Фармація, промислова фармація  
освітня програми Фармація  
***Юрчик Олександр Андрійович***

**Керівник:** кан.фарм.наук, доцент Шолойко Н.В.

**Рецензент:** кан.фарм.наук, доцент Підченко В.Т.

Київ-2024 рік

## **Перелік умовних позначень**

**Лікарський засіб – ЛЗ**

**Машинне навчання – МН**

**Штучний інтелект – ШІ**

## АНОТАЦІЯ

**Юрчик Олександр Андрійович**

**Аналіз можливостей використання штучного інтелекту у фармації**

**Ключові слова:** Штучний інтелект, машинне навчання, дослідження фармацевтична галузь, клінічні дослідження розробка нових лікарських засобів.

**Вступ.** Штучний інтелект (ШІ) стрімко розвивається, проникаючи в усі аспекти життя людини. Фармацевтична промисловість не є винятком. ШІ має потенціал революціонізувати цю сферу, пропонуючи інноваційні рішення для низки проблем, з якими вона стикається.

**Матеріали і методи.** Статті з авторитетних наукових журналів, присвячені дослідженням та практичним застосуванням ШІ у фармації. Аналіз літератури, вивчення випадків та порівняльний аналіз є методами, що були використані.

**Результати.** ШІ нині вже використовується в різних сферах охорони здоров'я, але існує багато бар'єрів для ефективного впровадження та використання. Впровадження ШІ у фармацевтичну практику потребує чітких регуляторних норм та правил. Органам державної влади, які регулюють фармацевтичну діяльність, необхідно розробити відповідні регуляторні рамки, щоб гарантувати безпеку та ефективність використання ШІ у цій сфері.

**Висновки.** Дослідивши історію ШІ встановили, що шлях від його зародження до сучасних досягнень був переповнений періодами розвитку, занепаду та відродження, починаючи з перших спроб у 1950-х роках, коли дослідники вбачали в цьому лише питання часу, але ранні системи виявилися примітивними, що спричинило занепад у 1970-х роках; відродження ШІ настав у 1980-х роках завдяки новим методам, зокрема машинному навчанню, що дозволило створити складніші системи.

Проаналізувавши, як ШІ використовується у медицині та фармації встановили, що він може значно прискорити та покращити процес розробки

нових ліків, автоматизуючи такі завдання, як аналіз даних, моделювання молекул, та скринінг потенційних кандидатів, допомагає дослідникам виявляти нові біологічні мішені для терапії, що може призвести до розробки більш ефективних ліків для різних захворювань, може допомогти прогнозувати ймовірність успіху того чи іншого методу лікування для конкретного пацієнта, що дозволить лікарям приймати більш обґрунтовані рішення.

Дослідили проблеми ШІ для його інтеграції у медицину. Існує безліч методів МН, які можна використати у розробці ліків, але разом з величезними можливостями використання ШІ виникають й етичні міркування. Важливо, щоб розробка та використання ШІ у цій сфері відбувалися з дотриманням етичних принципів, таких як справедливість, прозорість, та відповідальність. Також потрібно пам'ятати про упередженість алгоритмів ШІ, що може призвести до дискримінації пацієнтів. Медичні дані пацієнтів є конфіденційними, і їх необхідно захищати від несанкціонованого доступу. Як і в Україні, так і в інших країнах необхідно розробити чіткі етичні рекомендації та правила щодо використання ШІ у фармації, щоб гарантувати, що його використання буде приносити користь людям, а не шкодити їм.

Проаналізувавши державну стратегію ШІ в Україні з'ясували, що у 2021 році Україна ухвалила Національну стратегію розвитку штучного інтелекту до 2030 року, яка визначає мети та пріоритети розвитку ШІ в країні на наступне десятиліття. Основні цілі стратегії включають зайняття Україною лідерських позицій у галузі розробки та застосування ШІ, сприяння розвитку інноваційної екосистеми ШІ, підвищення конкурентоспроможності української економіки через ШІ та поліпшення якості життя українців за допомогою цієї технології. Пріоритетні напрямки розвитку ШІ охоплюють охорону здоров'я, освіту, державне управління, економіку та безпеку. Стратегія передбачає реалізацію кроків, таких як створення сприятливого регуляторного середовища для розвитку ШІ, інвестування в дослідження та розробки ШІ, підготовка кваліфікованих кадрів у цій сфері та підвищення

обізнаності про ШІ серед населення. Національна стратегія розвитку ШІ до 2030 року є амбітним планом, який може значно змінити Україну. Однак важливо враховувати, що успішна реалізація цієї стратегії потребуватиме значних зусиль та ресурсів з боку держави, бізнесу та наукової спільноти.

## SUMMARY

**Yurchyk Oleksandr Andriyovych**

**Analysis of the possibilities of using artificial intelligence in pharmacy**

**Keywords:** Artificial intelligence, machine learning, research.

**Introduction.** Artificial intelligence (AI) is developing rapidly, penetrating all aspects of human life. The pharmaceutical industry is no exception. AI has the potential to revolutionize this field by offering innovative solutions to a number of problems it faces.

**Materials and methods.** Articles from reputable scientific journals on research and practical application of AI in pharmacy. Literature review, case studies, and comparative analysis are the methods used.

**Results.** AI is already being used in various areas of healthcare, but there are many barriers to effective implementation and use. The introduction of AI into pharmaceutical practice requires clear regulations and rules. The government authorities regulating pharmaceutical activities need to develop an appropriate regulatory framework to ensure the safety and effectiveness of AI in this area.

**Conclusions.** Researching the history of AI found that the path from its inception to today's achievements was full of periods of development, decline and revival, starting with the first attempts in the 1950s, when researchers saw it as only a matter of time, but early systems turned out to be primitive, which caused the decline in the 1970s; the renaissance of AI came in the 1980s thanks to new techniques, particularly machine learning, which enabled the creation of more complex systems.

Analyzing how AI is used in medicine and pharmacy found that it can significantly speed up and improve the process of developing new drugs by automating tasks such as data analysis, molecular modeling, and screening potential candidates, helping researchers discover new biological targets for therapy, which can lead to the development of more effective drugs for various diseases, can help predict the probability of success of a particular method of treatment for a particular patient, allowing doctors to make more informed decisions.

We studied the problems of AI for its integration into medicine. There are many AI methods that can be used in drug development, but along with the enormous possibilities of using AI come ethical considerations. It is important that the development and use of AI in this field takes place in compliance with ethical principles such as fairness, transparency, and accountability. It is also necessary to remember the bias of AI algorithms, which can lead to discrimination of patients. Patient medical information is confidential and must be protected from unauthorized access. Both in Ukraine and in other countries, it is necessary to develop clear ethical guidelines and regulations regarding the use of AI in pharmacy to ensure that its use will benefit people and not harm them.

After analyzing the state strategy of AI in Ukraine, it was found that in 2021, Ukraine adopted the National Strategy for the Development of Artificial Intelligence until 2030, which defines the goals and priorities of the development of AI in the country for the next decade. The main goals of the strategy include Ukraine taking a leadership position in the field of AI development and application, promoting the development of an innovative AI ecosystem, increasing the competitiveness of the Ukrainian economy through AI, and improving the quality of life of Ukrainians with the help of this technology. The priority areas of AI development include health care, education, public administration, economy and security. The strategy involves the implementation of steps such as creating a favorable regulatory environment for the development of AI, investing in research and development of AI, training qualified personnel in this field, and raising awareness of AI among the population. The National Strategy for the Development of AI until 2030 is an ambitious plan that can significantly change Ukraine. However, it is important to consider that the successful implementation of this strategy will require significant efforts and resources from the state, business and scientific community.

Зміст	
Вступ	9
РОЗДІЛ 1 ІСТОРІЯ СТВОРЕННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ	11
1.1 Зародження та дозрівання штучного інтелекту	11
1.2 Розквіт та зима штучного інтелекту	14
1.3 Відродження штучного інтелекту	16
Висновки до розділу 1	18
РОЗДІЛ 2 ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ ЯК МАШИННЕ НАВЧАННЯ ТА ЙОГО ВИКОРИСТАННЯ У МЕДИЦИНІ	19
2.1 Алгоритм роботи машинного навчання	19
2.2 Машинне навчання у відкритті ліків	21
2.3 Штучний інтелект у відкритті ліків	23
2.4 Виклики для інтеграції технологій ШІ	28
Висновки до розділу 2	29
РОЗДІЛ 3 ЕТИЧНІ АСПЕКТИ ТА МАЙБУТНЄ ШІ В УКРАЇНІ	31
3.1 Етичні питання штучного інтелекту в медицині та охороні здоров'я	31
3.2 Національна стратегія розвитку штучного інтелекту до 2030 року	35
ВИСНОВКИ	41
Список використаної літератури	43



## Вступ

**Актуальність.** Розробка нових лікарських засобів може коштувати мільярди доларів і займати більше десяти років. Це робить фармацевтичну промисловість однією з найдорожчих у світі. ШІ може допомогти значно скоротити ці витрати, автоматизуючи завдання, такі як аналіз даних, моделювання молекул, та скринінг потенційних кандидатів. Це може призвести до більш доступних ліків для пацієнтів, а також до більших інвестицій у дослідження нових методів лікування.

Процес розробки нових ЛЗ є тривалим, що призводить до затримки надходження нових методів лікування до пацієнтів. Це може мати серйозні наслідки для людей, які страждають від серйозних захворювань. ШІ може допомогти скоротити цей час, використовуючи такі методи, як машинне навчання та обчислення на основі штучних нейронних мереж. Це може призвести до більш швидкого розробки нових ліків та методів лікування, що може врятувати життя людей.

Багато захворювань, таких як рак, є складними та важкими для лікування. Це робить розробку нових методів лікування для цих захворювань надзвичайно складною та дорогою. ШІ може допомогти виявити нові мішені для лікування та розробити персоналізовані методи лікування для окремих пацієнтів. Це може призвести до більш ефективних методів лікування, які можуть значно покращити життя людей з цими захворюваннями.

У фармацевтичній промисловості накопичується величезна кількість даних, таких як дані про клінічні дослідження, геномні дані та дані про електронні медичні записи. Ці дані можуть бути використані для покращення процесу розробки нових ліків, але їх аналіз є надзвичайно складним та трудомістким. ШІ може допомогти аналізувати ці дані для виявлення нових закономірностей та тенденцій, які можуть бути використані для розробки нових ліків та методів лікування. Це може призвести до більш ефективних та персоналізованих методів лікування для пацієнтів.

**Мета та завдання дослідження.** Комплексне дослідження та аналіз можливостей використання штучного інтелекту (ШІ) у фармацевтичній галузі. Систематизувати та узагальнити актуальні наукові дослідження та практичні приклади застосування ШІ у фармації. Оцінити потенційний вплив ШІ на фармацевтичну промисловість.

**Завдання дослідження:**

Дослідити ідеї ШІ, шляхи та спроби його створення;

Проаналізувати, як ШІ використовується у медицині та фармації;

Дослідити проблеми ШІ для його інтеграції у медицину

Проаналізувати державну стратегію ШІ в Україні.

**Методи дослідження.** аналітичний, співставлення, узагальнення описовий.

Актуальність, мета роботи та завдання зумовили її **структуру**. Випускна кваліфікаційна робота складається з вступу, 3-х розділів, 9 підрозділів, висновків та списку використаних джерел.

## **РОЗДІЛ 1 ІСТОРІЯ СТВОРЕННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ**

### **1.1 Зародження та перші кроки штучного інтелекту**

ШІ - це галузь, що поєднує в собі комп'ютерні науки, математику, філософію та інші дисципліни для створення машин, які можуть виконувати інтелектуальні завдання. Це охоплює широкий спектр методів та технологій, включаючи:

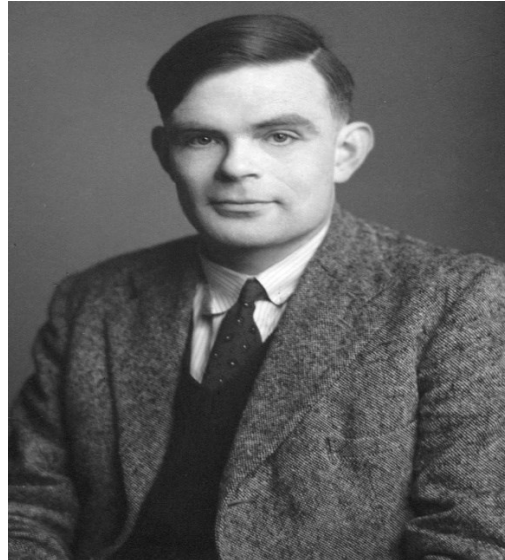
#### **Зародження ідеї:**

Ідею створення штучних істот, які володіють людським розумом, можна простежити ще з давніх часів. Міфи та легенди про големів, автоматів та інших подібних творінь свідчать про прагнення людей створити машини, які могли б думати та діяти самостійно.

Філософи Античності, такі як Аристотель, розмірковували над природою розуму та можливостями його відтворення у штучних системах. Ці ранні ідеї заклали фундамент для подальшого розвитку штучного інтелекту (ШІ) як наукової дисципліни.

#### **Перші кроки:**

1940-ві та 1950-ті роки стали свідками зародження ШІ як наукової дисципліни. Цей період характеризувався бурхливим розвитком комп'ютерних технологій, що відкрило нові можливості для дослідження штучного інтелекту. [1]



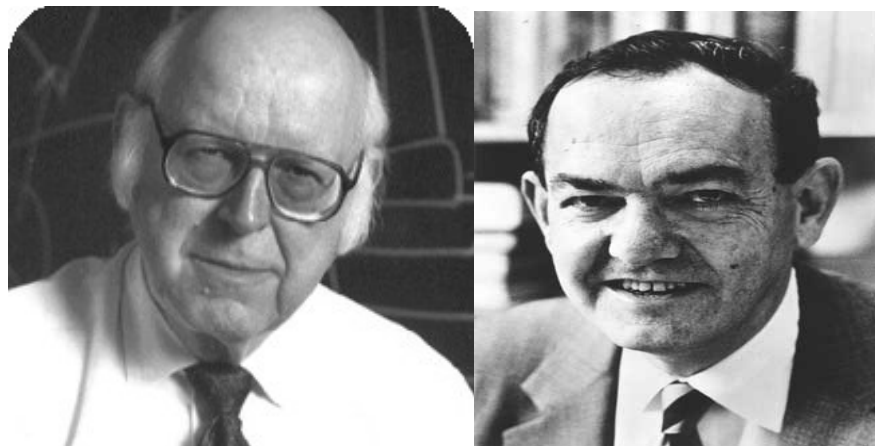
**Рисунок 1.1** Алан Тюрінг

**1943 рік:** Алан Тюрінг публікує роботу "Обчислювальні машини та інтелект", де він описує теоретичну модель штучного інтелекту. Він припустив, що будь-яку алгоритмічну задачу, яку може виконати людина, може виконати й машина. Також він запропонував **тест Тюрінга:** Цей тест, який з часом став широко відомим, пропонує спосіб визначити, чи може машина мислити як людина. Тест полягає у тому, що спостерігач спілкується з двома учасниками через текстовий канал (через комп'ютер). Один учасник - це людина, а інший - машина. Спостерігач повинен визначити, який з учасників є машиною, а який - людиною, задаючи різноманітні питання. Якщо машина може переконливо виграти цей тест, то вона вважається "мислячою машиною" або машинним інтелектом. Тест Тюрінга й досі використовується як міра здатності машин до розумного мислення. [2]



**Рисунок 1.2 Учасники Дартмутської конференції**

**1956 рік:** На Дартмутській конференції офіційно введено термін "штучний інтелект". Ця подія знаменувала собою народження ШІ як окремої наукової дисципліни.



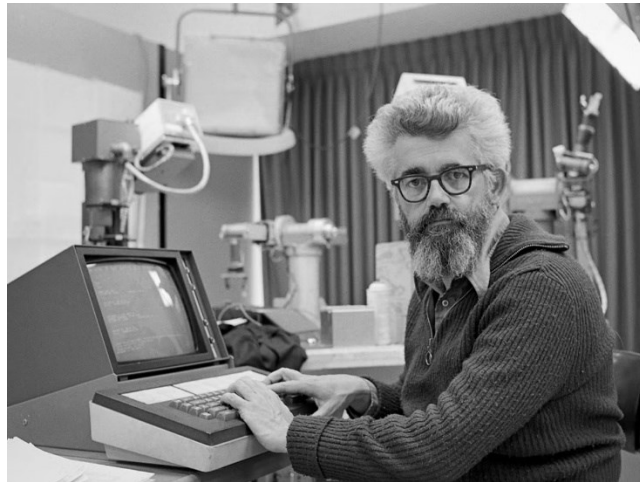
**Рисунок 1.3 Алан Ньюелл і Герберт Саймон**

**1957 рік:** Алан Ньюелл і Герберт Саймон, два американські вчені, створили **General Problem Solver (GPS)**, яка вважається першою програмою штучного інтелекту. **GPS** мав на меті бути універсальним розв'язувачем проблем, здатним вирішувати широкий спектр логічних задач. Він використовував символічну логіку та метод пошуку в глибину, щоб знайти шлях до розв'язання проблеми. Спочатку GPS аналізував задачу і розбивав її на більш прості підзадачі. Потім він використовував оператори - конкретні дії або правила, які можна застосувати для кожної підзадачі, щоб наблизитися до розв'язку. Однак GPS може мати проблеми з складними задачами, де потрібно

багато дій для досягнення цілі, а також він не завжди бере до уваги контекст або обставини, які можуть впливати на розв'язок. [3-4]

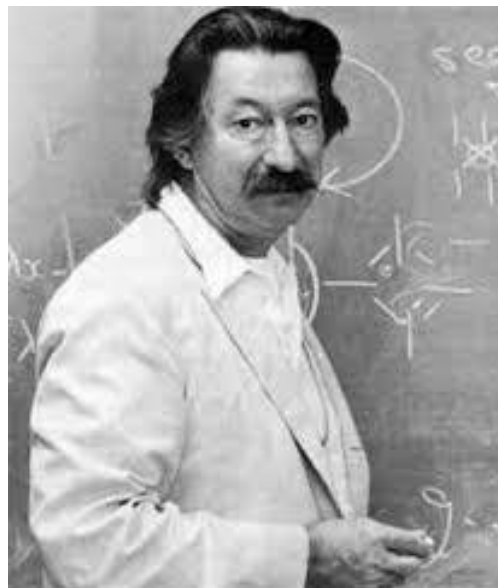
## 1.2 Розквіт штучного інтелекту (1957-1974)

Цей період характеризувався бурхливим розвитком ШІ. Дослідники розробили нові методи та алгоритми, які дозволили комп'ютерам виконувати все складніші завдання.



**Рисунок 1.4 Джон Маккарті**

**1957 рік:** Джон Маккарті розробив мову програмування Lisp, яка стала однією з найпопулярніших мов для програмування ШІ. Це мова програмування, яка використовується для розв'язання складних завдань у галузі штучного інтелекту. Вона відома своєю гнучкістю та можливістю працювати зі списками даних.[5]



**Рисунок 1.5 Джозеф Вейценбаум**

**1965:** Джозеф Вейценбаум створив програму ELIZA, яка могла імітувати розмову з людиною. ELIZA використовувала обробку природної мови для імітації розмови з людиною. Користувач вводив текст, а ELIZA відповідала, використовуючи правила, які шукали ключові слова та фрази у введеному тексті. ELIZA не була розумною, але їй вдалося переконати багатьох людей, що вона дійсно може вести розмову. Це було пов'язано з тим, що ELIZA використовувала психотерапевтичні методи, такі як активне слухання та перефразування, що робило її здатною співпереживати та розуміти емоції користувача. Однак ELIZA не могла розуміти значення слів або фраз, не могла вести глибокі або змістовні розмови, часто повторювалася або давала безглузді відповіді. [6]



**Рисунок 1.6** Террі Виноград

**1970 рік:** Террі Виноград розробив систему SHRDLU, яка була програмою обробки природної мови (NLP-Natural language processing), яка могла розуміти та генерувати просту англійську мову. Вона працювала в віртуальному світі кімнати з блоками та об'єктами, і могла виконувати команди, такі як "Візьми червоний блок і поклади його на куб". SHRDLU використовувала граматику та семантику для аналізу речень, планування дій та їх виконання у віртуальному світі. Однак SHRDLU мала обмеження у роботі з складними реченнями та можливістю навчання на помилках. Назва SHRDLU утворена від ETAOIN SHRDLU - так розташовані алфавітні клавіші на лінотипах (набірна машина). [7]

### **ШІ-зима (1975-1980):**

Незважаючи на ранні успіхи, 1970-ті роки принесли розчарування. Через перебільшенні очікування, технічні обмеження та відсутності єдиної теорії ШІ, яка б пояснювала, як створювати інтелектуальні машини з'явився такий період як "ШІ-зима". Обмеження тогочасних комп'ютерів та недосконалість методів ШІ призвели до застою в дослідженнях.

**1974 рік:** Едвард Фейгенбаум публікує свою роботу "The AI Winter", де він описує проблеми, з якими зіткнулася сфера ШІ.

**1975 рік:** Через усі виниклі проблеми Британія оголошує про скорочення фінансування досліджень ШІ.

**1980 рік:** Цей рік став знаменним для штучного інтелекту (ШІ) проведенням Міжнародної конференції з ШІ в Тбілісі, Грузія. Ця конференція вважається офіційною ознакою закінчення ШІ-зими. Конференція зібрала понад 300 дослідників ШІ з усього світу, які представили свої останні досягнення в цій галузі. Її успіх продемонстрував, що інтерес до ШІ відновлюється, і що дослідники впевнені в його потенціалі. [8,9]

### **1.3 Відродження штучного інтелекту (1980-ті - теперішній час)**

З появою нових комп'ютерних технологій та нових підходів до ШІ дослідження почали відновлюватися. Цей період характеризується розвитком нових методів ШІ, таких як машинне навчання та штучні нейронні мережі.



**Рисунок 1.7** Едвард Фейгенбаум та Фредерік Джефкінс

**1980 рік:** Едвард Фейгенбаум та Фредерік Джефкінс створюють систему MYCIN, яка могла діагностувати інфекційні захворювання. MYCIN



працювала, використовуючи правила на основі знань від досвідчених інфекціоністів. Ці правила описували, як різні симптоми та фактори ризику пов'язані з різними інфекціями. Система використовувала ці правила для постановки діагнозу та рекомендування курсу лікування. [10]

**1986 рік:** Террі Віноград розробив систему SHRDLU 2.0, вона розширила можливості свого попередника, додавши здатність виконувати дії в реальному часі. Вона могла не тільки розуміти та генерувати мову, але й планувати та виконувати дії з блоками у віртуальному світі відповідно до інструкцій користувача.



**Рисунок 1.8 IBM Deep Blue проти Гаррі Каспарова**

**1997 рік:** IBM Deep Blue перемагає чемпіона світу з шахів Гаррі Каспарова. Deep Blue, розроблений компанією IBM, був суперкомп'ютером, який мав значну обчислювальну потужність. Він аналізував мільйони шахових позицій за секунду. ШІ досяг рівня, коли може конкурувати з людьми в складних іграх, таких як шахи. Однак перемога Deep Blue також викликала суперечки. Деякі люди стверджували, що це не була справжня перемога над людським інтелектом, оскільки Deep Blue просто використовував свою обчислювальну потужність, щоб обіграти Каспарова. Інші ж вважали, що це був значний крок вперед для ШІ і провісник майбутнього, в якому машини зможуть перевершити людей у багатьох аспектах. [11]

## **Висновок до розділу 1**

Штучний інтелект пройшов довгий шлях з часів свого зародження в 1950-х роках. Процес розвитку ШІ мав як свої падіння, так і етапи швидкого зростання, на це вплинула низка факторів. Зі зростання потужності комп'ютерів, появою нових ідей та теорій, нових сфер застосування розвиток ШІ значно прискорився. Сьогодні ШІ є однією з найдинамічніших сфер досліджень, з потенціалом змінити світ на краще, його використання потребує відповідального підходу та етичних міркувань, щоб гарантувати користь для людства.

## РОЗДІЛ 2 ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ ЯК МАШИННЕ НАВЧАННЯ ТА ЙОГО ВИКОРИСТАННЯ У МЕДИЦИНІ

### 2.1 Алгоритм роботи машинного навчання

Машинне навчання (МН) - це метод штучного інтелекту, який використовує алгоритми для автоматичного навчання на даних без чіткого програмування.

Алгоритми машинного навчання - це математичні моделі, які навчаються на даних, щоб виконувати завдання без чіткої програми. Їх використовують у багатьох сферах, включаючи комп'ютерний зір, обробку природної мови, прогнозування та робототехніку.

**Процес машинного навчання** в медицині включає певні етапи:

- **Збір та підготовка даних:** електронні медичні записи (історія хвороби, діагнози, призначені ліки, результати лабораторних досліджень, дані про госпіталізацію), генетичні дані (геномні послідовності, дані про експресію генів, епігенетичні маркери), дані з різних джерел (лікарні, дослідницькі центри, біобанки). Проводиться нормалізація та стандартизація даних, щоб привести їх до спільного масштабу.

- **Вибір алгоритму машинного навчання:**

- **Класифікація** - це завдання, яке полягає у віднесенні даних до однієї з кількох категорій. Наприклад, алгоритм машинного навчання може використовуватися для класифікації електронних листів як спаму або не спаму, або для класифікації зображень як котів або собак. У медицині застосовується для діагностики захворювань, прогнозування ризику розвитку захворювань або розподілу пацієнтів на групи.

- **Прогнозування** - це завдання передбачення майбутнього значення на основі наявних даних. Використовується для прогнозування результатів лікування, ризику виникнення ускладнень або рецидиву захворювання.

- **Кластеризація** - це завдання групування даних на основі схожості. Використовується для ідентифікації груп пацієнтів з подібними характеристиками або для виявлення нових підгруп захворювань.

- **Обробка природної мови** - це поле штучного інтелекту, яке стосується взаємодії між комп'ютерами та людською мовою. Використовується для аналізу медичних текстів, таких як звіти про патологію, медичні записи або наукові статті.

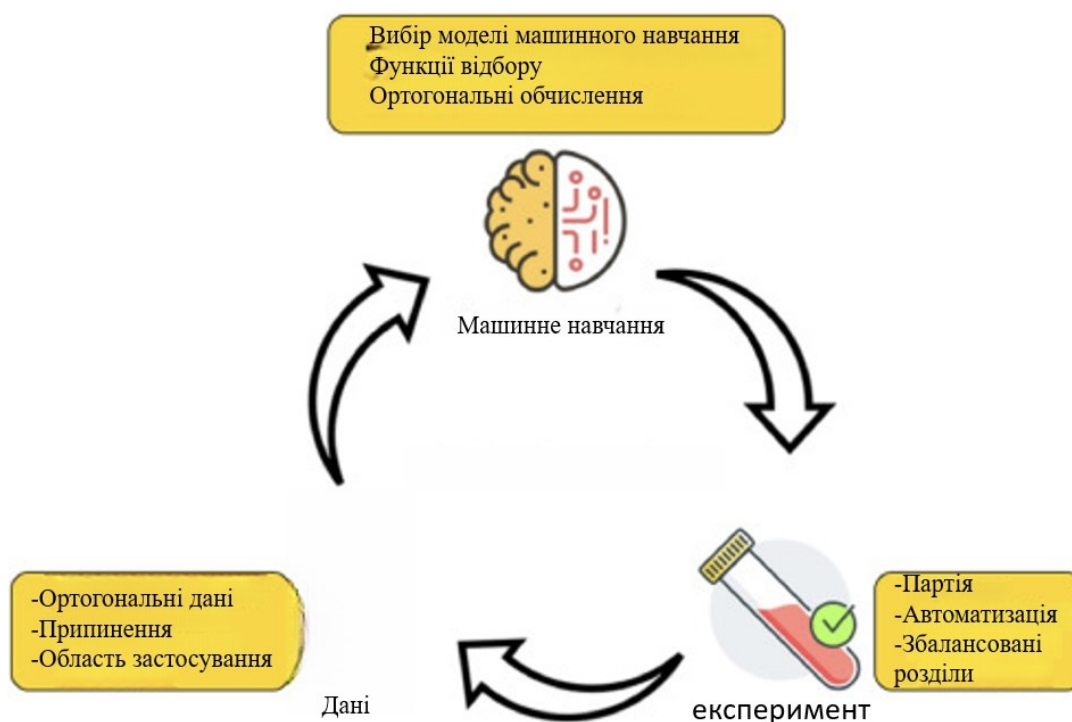
- **Навчання моделі:**

Вибраний алгоритм машинного навчання навчається на підготовленому наборі даних. Модель використовує складні математичні методи для виявлення закономірностей та зв'язків у даних. Під час навчання модель постійно оптимізується за допомогою процесу, який називається зворотнім поширенням помилки (алгоритм, який використовується для навчання штучних нейронних мереж під наглядом). Цей процес мінімізує помилку моделі та покращує її здатність робити точні прогнози або приймати правильні рішення.

- **Оцінка та розгортання моделі:** Після навчання моделі необхідно провести її оцінку на нових даних, щоб переконатися, що вона може адекватно працювати з ними. Для цього використовуються різні метрики, такі як точність, чутливість, специфічність та **AUC (Area Under Curve)**, або площа під кривою ROC, - це міра, яка використовується для оцінки продуктивності моделей класифікації. Вона показує, наскільки добре модель розрізняє два класи (наприклад, здорових і хворих людей) на основі ймовірності того, що вона правильно класифікує людину як хвору (чутливість) в залежності від ймовірності того, що модель помилково класифікує здорову людину як хвору. Якщо модель не показує задовільних результатів, її можна перенавчити на більшому обсязі даних або іншим алгоритмом. У разі успішної оцінки модель може бути розгорнута для використання у реальному середовищі, наприклад, для підтримки клінічних рішень або автоматизації медичних завдань. Важливо постійно моніторити та оновлювати модель на основі нових даних, щоб забезпечити її актуальність та ефективність. [12-18]

## 2.2 Машинне навчання у відкритті ліків

Використання машинного навчання зростає в різних сферах фармацевтичної промисловості, включно з відкриттям ліків, що дозволяє покращити галузь загалом. Досягнення машинного навчання демонструє зростання кількості компаній, у структурі бізнесу яких МН є ключовим. Вони заявили, що методи машинного навчання також досліджувалися великими фармацевтичними компаніями для використання в дослідженні та розробці ліків. Ступінь можливостей машинного навчання та його корисність у сфері відкриття ліків; тому вкрай важливо, щоб це було включено в майбутні досягнення в галузі відкриття ліків. Мета полягає в тому, щоб використовувати високопродуктивні технології скринінгу, щоб мінімізувати, якщо не виключити, необхідність живих випробувань на тваринах. Ці дослідження демонструють, що машинне навчання є надзвичайно корисним інструментом у відкритті ліків.



**Рисунок 2.1 Машинне навчання у відкритті ліків**

Рисунок показує спрощений цикл подій, які відбуваються під час впровадження машинного навчання у фармацевтичній промисловості, зокрема в секторах розробки та виробництва цієї галузі, а також показує, як функціонує машинне навчання в цілому. Дані складаються з різних компонентів, таких як

ортогональні дані (різні дані: жінка, чоловік) та область застосування та дані завершення або припинення циклу. Ці дані вводяться в попередньо розроблений алгоритм, який враховує вибір моделі, функції вибору та ортогональні обчислення. Алгоритм генерує результати, а також поетапний підхід до покращення поточної методології та процедур, щоб зробити їх більш ефективними та надійними. Потім техніка модифікується, і цикл повторюється, доки не буде розроблено та виготовлено кінцевий продукт.

Дослідження G-білкового рецептора демонструє як машинне навчання можна інтегрувати в розпізнавання ліганду G-білкового рецептора, що є ключовою частиною процесу відкриття ліків. Мета дослідження полягала в тому, щоб визначити, чи зможе машинне навчання замінити стару технологію, яка використовується в експериментах із пригнічення сигналу рецептора морської міноги (вид безщелепних що веде паразитичний спосіб життя), використовуючи ці експерименти для перехресної перевірки результатів, отриманих за допомогою алгоритму машинного навчання. Результати показали, що новий алгоритм може замінити стару технологію ідентифікації характеристик інших молекул.

На цьому не зупинились та провели ще одне дослідження, яке показало корисність машинного навчання. Мета дослідження полягала в тому, щоб визначити, чи може алгоритм машинного навчання ідентифікувати рецептори з правильними відповідними лігандами серед інших сполук або речовин. Результати показали, що алгоритм машинного навчання мав кращу продуктивність, ніж стандартний механізм ідентифікації. Це також показало, що машинне навчання можна використовувати для інших цілей, таких як створення молекулярних баз даних і бібліотек і визначення фармакокінетичних властивостей нових ліків.

Інше дослідження, яке підтверджує цінність машинного навчання, мало на меті визначити, чи можна інтегрувати та застосувати алгоритми машинного навчання та глибоке навчання (нейронні мережі) для аналізу відновлювальних і виправних ефектів різних препаратів на гени. Результати показали, що

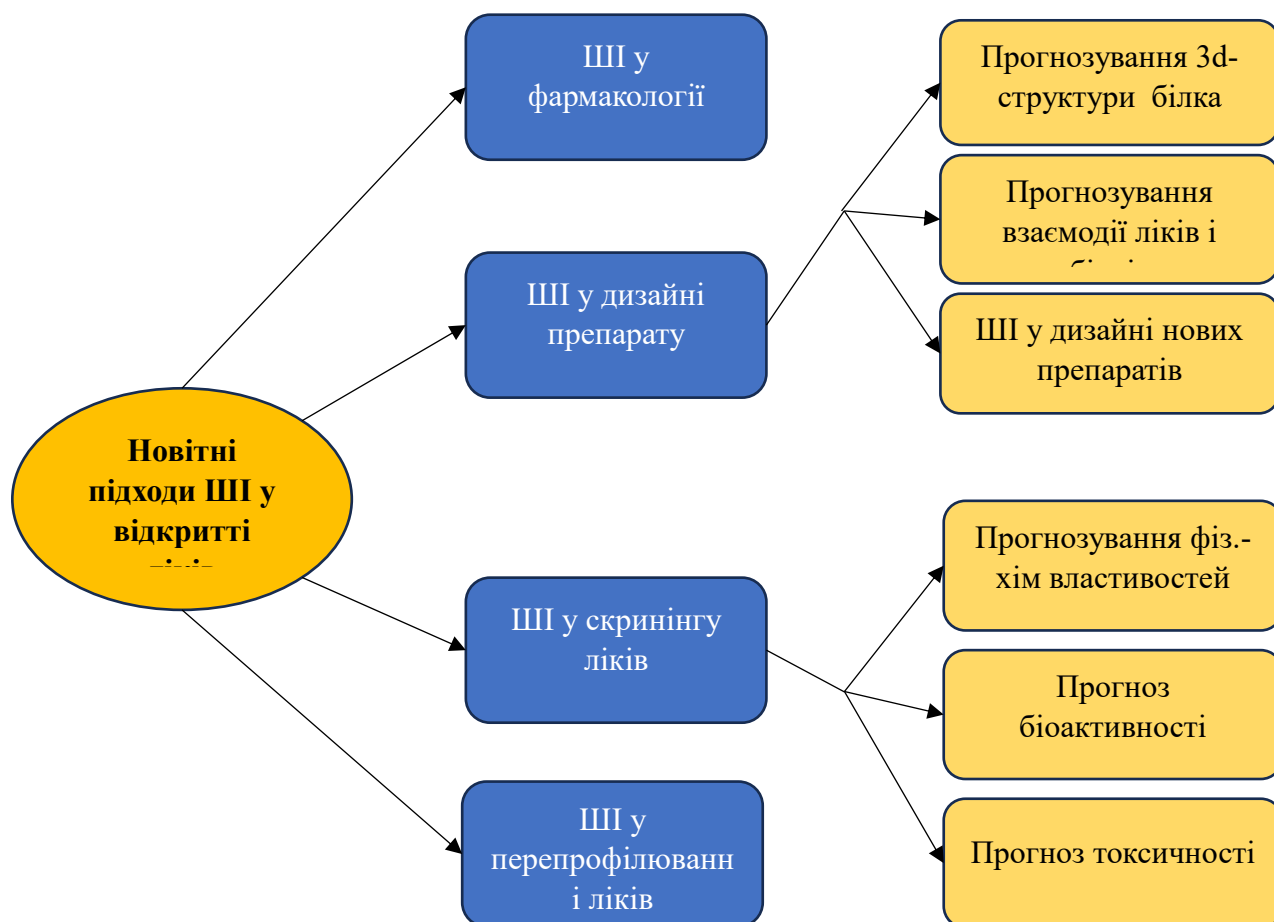
точність передбачень категорій ліків різко зросла порівняно з базовою моделлю, і вони були класифіковані точніше, що дало вищий відсоток точності. Отже, вища точність показує, що інтеграція нейронних мереж глибокого навчання з алгоритмами машинного навчання підвищила ефективність цієї системи класифікації та точніше класифікувала ліки з різними фармакодинамічними та фармакокінетичними властивостями. [19-23]

### **2.3 Штучний інтелект у відкритті ліків**

Збільшення обчислювальної потужності та розробка інноваційних методів у сфері штучного інтелекту можуть бути використані для реформування процесів відкриття та розробки ліків. Фармацевтична промисловість стикається з падінням ефективності програм удосконалення ліків і одночасним зростанням витрат на дослідження та розробки. Останніми роками відбулося радикальне розширення оцифрування інформації у фармацевтичній промисловості; Ефективне отримання, дослідження та застосування цієї інформації для вирішення складних клінічних проблем є актуальною проблемою. Завдяки оновленій комп'ютеризації ШІ може працювати з величезними обсягами інформації. Він також може інтегрувати та використовувати алгоритми машинного навчання для підвищення ефективності та продуктивності.

### **Рисунок 2.2. Застосування штучного інтелекту у відкритті ліків**

Розробку ліків можна розділити на чотири частини: дизайн ліків, фармакологія, перепрофілювання ліків і скринінг ліків. ШІ використовується переважно для прогнозування властивостей ліків, що може зменшити потребу в клінічних випробуваннях і живих учасників дослідження, що було б вигідно



як з фінансової, так і з етичної точки зору.

Для ясності треба розглянути дослідження, які підтримують у своєму висновку інтеграцію ШІ в процедуру відкриття ліків для підвищення ефективності, точності та продуктивності.

Автори дослідження «Модифіковані ультразвуком полісахариди: огляд структури, фізико-хімічних властивостей, біологічної активності та застосування в харчових продуктах» Жунбінь Цуй та Фан Чжу мали на меті визначити, чи може ШІ передбачити фізико-хімічні властивості (розчинність, коефіцієнт розподілу, константу дисоціації) різних ліків, за допомогою нейронної мережі ResNet. Збільшений вихід і скорочений час екстракції полісахаридів з різних джерел показали, що ця мережа точніше



прогнозувала розчинність молекул порівняно з іншими моделями, не заснованими на ШІ. Це показало, що штучний інтелект можна інтегрувати в процедуру розробки ліків, щоб підвищити її ефективність.

Друге дослідження «Віртуальний скринінг на основі глибокого навчання для відкриття нових інгібіторів SARS-CoV-2 (Важкий Гострий Респіраторний Синдром Коронавірус 2)», що демонструє підвищення ефективності за допомогою штучного інтелекту, показало здатність штучного інтелекту передбачати активність різних синтезованих молекул. Мета полягала в тому, щоб визначити, чи можна підвищити точність процесу скринінгу ліків за допомогою ШІ, щоб зробити процес більш надійним. Дослідники зібрали набір даних з 35 000 хімічних сполук та їх активності проти SARS-CoV-2. Вони використали ШІ щоб прогнозувати активність сполук на основі їх структури. Потім модель використовували для скринінгу мільйонів нових сполук. Найперспективніші сполуки були протестовані *in vitro* на їх активність проти вірусу SARS-CoV-2. У результаті виявили 12 нових сполук, які ефективно інгібували вірус *in vitro*. Деякі з цих сполук виявилися більш потужними, ніж існуючі інгібітори SARS-CoV-2. Це дослідження демонструє, що ШІ може бути потужним інструментом для скринінгу нових ліків. Виявлені нові сполуки є перспективними кандидатами на подальшу розробку як нових методів лікування COVID-19. [24-32]

У останньому дослідженні статті «Порівняння методів машинного навчання (МН) для прогнозування мішеней ліків та прогнозування взаємодії ліків з мішенями», використали 5 методів МН (табл.2.1.).

**Таблиця 2.1**

**Методи МН**

Метод	К-найближчі сусіди (KNN)	Наївний байесів класифікатор	Дерева рішень	Підтримка векторів (SVM)	Лінійні класифікатори
-------	--------------------------	------------------------------	---------------	--------------------------	-----------------------

Суть методу	Класифікує нові дані на основі схожості з найближчими точками в наборі даних навчання	Класифікує дані на основі ймовірності того, що вони належать до певного класу	Представляє собою ієрархічну структуру, де кожен вузол відповідає рішенню, а гілки - можливим результатам	Знаходить гіперплощину (плоска поверхня) в багатовимірному просторі, яка найкраще розділяє дані на два класи.	Використовують лінійну функцію для розділення даних на два або більше класів
Переваги	Простий у розумінні та реалізації;  Не потребує попередньої обробки даних;  Може використовуватися для класифікації та регресії;  Ефективний для задач з великою кількістю ознак	Легко зрозуміти та реалізувати;  Не потребує попередньої обробки даних;  Ефективний для задач з великою кількістю ознак;  Може використовуватися для багатокласової класифікації	Легко візуалізувати;  Не потребують попередньої обробки даних;  Можуть обробляти категоріальні дані без необхідності їх перетворення в числовий формат;  Можуть прогнозувати більше двох класів	Можуть обробляти дані з великою кількістю атрибутів;  Знаходять гіперплощину, яка найкраще розділяє дані, навіть якщо дані нелінійні;  Менш чутливі до шуму та помилок у даних, ніж інші методи	Легко візуалізувати;  Можуть добре працювати з невеликими наборами даних;  Швидкі та невибагливі до обчислення
Недоліки	Чутливий до шуму в даних;  Може бути дорогим в обчислюванні	Припущення про незалежність ознак може	Якщо дерево занадто детальне, воно може добре підходити до	Можуть бути складними для обчислення	Якщо дані нелінійні, лінійна функція може не зможти

	для великих наборів даних	бути неточним  Чутливий до шуму в даних  Може бути неефективним для задач з невеликою кількістю даних	навчальних даних, але погано узагальнюватис я на нових даних  Можуть бути чутливі до шуму та помилок у даних.  Невеликі зміни в даних можуть призвести до значних змін у дереві.	Ефективність SVM залежить від вибору ядра, яке використовується для обчислення подібності між точками даних  Можуть бути складними для інтерпретації	їх добре розділити  Можуть бути чутливі до шуму та помилок у даних  Можуть бути нестійкими до вибору атрибутів
--	---------------------------	---	--	--	--

Автори використовували програму штучного інтелекту eToxPred для прогнозування рівнів токсичності різних синтетичних і біологічних сполук, щоб пришвидшити існуючий процес і скасувати вимогу до клінічних випробувань. Результати показали, що модель штучного інтелекту могла точно передбачити токсичні властивості більш ніж у 72% випадків із загальною частотою помилок лише 4%, що було достатньо точним, щоб потенційно замінити клінічні випробування. [33-42]

#### 2.4 Виклики для інтеграції технологій ШІ

Незважаючи на досягнення технологій ШІ та МН, реалізованих у фармацевтичній промисловості, все ще існує багато проблем щодо впровадження та інтеграції цих технологій у процес відкриття ліків зокрема та у фармацевтичну промисловість загалом.

Однією з проблем є неефективна інтеграція даних. Ця проблема є результатом різноманітності, яка існує між наборами даних. Ці набори даних необхідно збирати та порівнювати для ефективного аналізу, але наразі не існує встановленого методу для цього. Це потрібно перед початком процесу пошуку ліків, оскільки без належного форматування даних вихідні дані алгоритмів машинного навчання будуть неточними. Тому потрібні більш ефективні методи для інтеграції наявних даних у банки даних до початку процесу відкриття ліків.

Іншою проблемою є нестабільність професій і кваліфікації: багато людей, які зараз працюють у фармацевтичній промисловості, не мають необхідних навичок або кваліфікації, необхідних для роботи з системами ШІ. Багато людей володіють наукою про дані, а інші - молекулярною хімією та біологією, але мало хто є експертами в обох сферах, маючи правильну комбінацію навичок для застосування ШІ у фармацевтичному контексті. Наразі не існує єдиної платформи чи плану навчання для підготовки спеціалістів для комбінації цих навичок.

Третя, але пов'язана з цим проблема - це скептицизм щодо машинного навчання та штучного інтелекту у фармацевтичній промисловості через брак розуміння методології алгоритмів, відомий як феномен «чорної скриньки», і відсутність довіри до отриманих результатів. Ті, хто налаштований скептично, не хочуть використовувати дані, отримані за допомогою ШІ та МН, що також стримує індустрію.

Ця недовіра до штучного інтелекту призводить до іншої проблеми: брак фінансування для розвитку штучного інтелекту у фармацевтичній галузі, як це було у період ШІ-зими. Скептицизм щодо ролі та результатів штучного інтелекту та машинного навчання в процесах розробки ліків призводить до вагань інвестувати гроші в цю технологію. Це, в свою чергу, може призвести до повільніших і менш ефективних досліджень і розробок порівняно з їхнім потенціалом, що призведе до зменшення досягнень, пов'язаних зі штучним інтелектом, у фармацевтичній промисловості. Це різні бар'єри, які стоять на

шляху справжнього розвитку, і це виклики, які необхідно подолати, щоб штучний інтелект був інтегрований швидше і якісніше у процеси розробки ліків.

Таким чином, багато факторів впливають на успішну інтеграцію ШІ та МН у відкриття та розробку ліків, а також у фармацевтичну промисловість для фармакології, дизайну ліків, скринінгу ліків та їх перепрофілювання. [30]

## Висновки до розділу 2

Основний потенціал штучного інтелекту у фармацевтичній промисловості полягає у зниженні витрат і підвищенні ефективності. Великі дослідження показали, що динамічне навчання може розрізнити дуже точні моделі ШІ, використовуючи половину або менше інформації, ніж традиційні підходи штучного інтелекту та вибірки інформації. Хоча причина такої підвищеної продуктивності не до кінця зрозуміла, виявляється, що зменшення кількості повторень і схильності, а також отримання більш важливої інформації для подолання обмежень у виборі є ключовими компонентами для покращення.

Методи МН можуть керувати складним аналізом використовуючи величезні обсяги інформації без ручного введення. Поєднання машинного навчання з людськими навичками та досвідом є перспективним способом для координації численних сховищ даних. Дивуюча здатність ШІ обробляти інформацію надала новий напрямок у комп'ютеризації плану лікування, що є швидшим способом ніж би це зробила людина. З подальшим збором клінічних даних і вдосконаленням обчислень штучного інтелекту очікується, що інновації штучного інтелекту уможливлять багато аспектів відкриття та розробки ліків і стануть стандартною комп'ютерною стратегією планування лікування. Скоординований розвиток механізації та інновацій в результаті комбінування технологій має призвести до прогресу в медицині в результаті покращеного аналізу великих і складних наборів даних. Це буде необхідно,

щоб скоротити цикли розробки ліків, зменшити витрати та підвищити рівень успішності: кінцева мета впровадження ІІІ в цьому контексті.

## РОЗДІЛ 3: ЕТИЧНІ АСПЕКТИ ТА МАЙБУТНЄ ШІ В УКРАЇНІ

### 3.1 Етичні питання застосування штучного інтелекту в медицині та охороні здоров'я

Програми штучного інтелекту в охороні здоров'я буквально змінили сферу медицини, включаючи візуалізацію та електронні медичні записи, лабораторну діагностику, лікування, підвищення обізнаності лікарів, відкриття нових ліків, забезпечення профілактичної та точної медицини, обширний аналіз біологічних даних, прискорення всіх процесів загалом для організацій охорони здоров'я. Однак ця галузь науки стикається з різними етичними та правовими проблемами. Незважаючи на величезні успіхи ШІ у покращенні процесу лікування, він доступний не для всіх суспільств. Багато країн із низьким рівнем доходу та країн, що розвиваються, досі не мають доступу до новітніх технологій. Слід зазначити, що етичні дилеми, конфіденційність і захист даних, інформована згода, медичні консультації, емпатія та співчуття — це різноманітні виклики, з якими ми стикаємося під час використання ШІ. Тому перед інтеграцією штучного інтелекту в систему охорони здоров'я практикуючі лікарі та спеціалісти повинні розглянути всі чотири принципи медичної етики, включаючи автономію, доброчинність, нешкідливість і справедливість у всіх аспектах охорони здоров'я.

**Конфіденційність і захист даних.** Загальний регламент захисту даних (General Data Protection Regulation) був вперше прийнятий Європейським Союзом, він вніс зміни до законодавства про конфіденційність в інших країнах, таких як США та Україна. Згідно з регламентом, усі особисті дані та діяльність іноземних спільнот і компаній обробляються обробником даних або контролером, що базується на профспілці, щоб захистити інформацію фізичних осіб із належним захистом. Роль штучного інтелекту в охороні здоров'я полягає в аналізі даних про здоров'я споживачів і зображень медичних пристроїв, покращенні діагностики, а також у корисній ролі в прискоренні дослідницької діяльності в галузі охорони здоров'я. Також,

соціальні медіа, як частина ШІ, відіграють важливу роль у поширенні новин про здоров'я чи медичних порад, особливо під час пандемій. Але, водночас, виникають проблеми:

- У сфері охорони здоров'я чинних законів недостатньо для захисту даних про здоров'я людини.
- Клінічні дані, зібрані роботами, можуть бути зламані та використані для зловмисних цілей, які мінімізують конфіденційність і безпеку.
- Деякі соціальні мережі збирають і зберігають великі обсяги даних користувачів, наприклад дані про психічне здоров'я окремих осіб, без їхньої згоди, що може бути корисним у маркетингу, рекламі та продажах цих компаній. Цим може займатися МЕТА, ТІСТОК та інші соціальні мережі.
- Деякі легальні та нелегальні компанії продають дані клієнтів фармацевтичним і біотехнологічним компаніям. До прикладу Apple продає данні своїх клієнтів вже давно.

**Інформована згода та автономія.** Інформована згода — це процес спілкування між пацієнтом і постачальником медичних послуг, який включає здатність приймати рішення та компетентність, документування інформованої згоди та етичне розкриття інформації. Згідно з визначенням етичної відповідальності, пацієнти мають право бути поінформованими про свої діагнози, стан здоров'я, процес лікування, терапевтичний успіх, результати аналізів, витрати, частку медичного страхування чи іншу медичну інформацію, і будь-яка згода має бути конкретною для цілі, бути вільно наданим і недвозначним. Занепокоєння щодо цієї проблеми також зросло з появою штучного інтелекту в програмах охорони здоров'я. За принципом автономності:

- Усі особи мають право отримати інформацію та поставити запитання перед процедурами та лікуванням.



- Пацієнти повинні бути в змозі знати про процес лікування, ризики скринінгу та візуалізації, аномалії збору даних, помилки програмування, конфіденційність даних і контроль доступу, збереження значної кількості генетичної інформації, отриманої за допомогою генетичного тестування.
- Пацієнти можуть відмовитися від лікування, яке лікар вважає доцільним.
- Пацієнти мають право знати, хто повинен нести відповідальність у разі несправності чи помилок цих роботизованих медичних пристроїв. Відповідь є важливою як для прав пацієнтів, так і для ринку медичної праці.

**Соціальна прірва та справедливість.** Ще одна проблема, яка загрожує суспільству після розвитку штучного інтелекту, – це проблема соціальної прірви. У всіх країнах світу з кожним розвитком, відкриттям і винаходом люди стикаються з більшою соціальною нерівністю та меншою соціальною справедливістю. Хоча ШІ покращує доступ до додаткової інформації про науку та технології, світові події, зміни клімату та політику в усьому світі, він посилює соціальну нерівність, як зазначено нижче:

- Автоматизація та розвинута економіка збільшили розрив між країнами, що розвиваються, та розвиненими країнами.
- Багато людей будуть втрачати роботу, оскільки роботи ростуть і розвиваються.
- Бухгалтери та менеджери в різних громадах можуть втратити роботу із збільшенням автоматизованих систем, а також буде значне зниження зарплат.
- Поява хірургічних роботів і роботів-медсестер у сфері охорони здоров'я, які працюють замість хірургів і доглядають за пацієнтами замість медсестер, загрожує їхнім майбутнім можливостям роботи.

**Медична консультація, емпатія та співчуття.** Інтеграція штучного інтелекту з усіма сферами охорони здоров'я здається важкою та неможливою.

Через унікальні людські емоції людина та медичні роботи можуть не розвиватися разом за короткий час. Лікарі та інші медичні працівники повинні звертатися за консультацією до своїх колег або надавати їм консультації, що неможливо в автономних (роботизованих) системах. З іншого боку, здається малоймовірним, що пацієнти приймуть медичні відносини «машина-людина» замість «людина-людина». Очікується, що лікарі та медсестри надаватимуть лікування в атмосфері співчуття та співчуття, що значно вплине на процес одужання пацієнтів. Цього не можна досягти за допомогою роботів-лікарів і медсестер. Пацієнти втратять співчуття, доброзичливість і належну поведінку, коли мають справу з роботами-лікарями та медсестрами, оскільки ці роботи не володіють такими людськими якостями, як співчуття. Це один з найбільш значущих негативних аспектів штучного інтелекту в медичній науці. Наприклад:

- В акушерстві та гінекології будь-яке клінічне обстеження вимагає почуття співчуття та емпатії, чого неможливо досягти за допомогою лікарів-роботів.
- Діти зазвичай відчувають страх або тривогу, коли вони відвідують медичні заклади та зустрічаються з фахівцями. Їхніми поведінковими проявами є відсутність співпраці, замкнутість і агресія, які можуть бути неконтрольованими за допомогою нової роботизованої системи медицини.
- Використання медичних роботів у психіатричних лікарнях може негативно вплинути на пацієнтів із серйозними психічними розладами.

Швидкий розвиток ШІ у клінічній та біомедичній сферах вважається чудовим підходом у багатьох сферах, який може збільшити професіоналів у системі охорони здоров'я. Тим не менш, незважаючи на великий потенціал і прогрес ШІ в галузі медицини та охорони здоров'я, це досягнення висунуло нові вимоги в галузі медичної етики. Отже, ми повинні усвідомлювати, що його негативні сторони можуть переважити його переваги. Щоб подолати цю

проблему, експерти повинні враховувати гуманність і етику в цьому відношенні. [43-46]

### **3.2 Національна стратегія розвитку штучного інтелекту до 2030 року**

Україна має багату історію та сильну традицію досліджень та розробок у галузі штучного інтелекту (ШІ). Ще в 1960-х роках у країні було засновано кілька науково-дослідних інститутів, які зосередилися на цій галузі. Ці інститути зробили значний внесок у розвиток теорії ШІ, а також розробили ряд практичних застосувань ШІ.

**Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України:** Цей інститут є одним із провідних науково-дослідних інститутів у галузі ШІ в Україні. Він проводить фундаментальні та прикладні дослідження в таких галузях, як машинне навчання, обробка природної мови, комп'ютерне бачення та робототехніка. [47]

**Харківський національний університет радіоелектроніки:** Цей університет має сильну школу ШІ, яка веде дослідження в таких галузях, як експертні системи, розпізнавання образів та прийняття рішень.

**Київський національний університет імені Тараса Шевченка:** Цей університет має кафедру штучного інтелекту, яка проводить дослідження в таких галузях, як машинне навчання, обробка природної мови та інтелектуальні системи підтримки прийняття рішень. [48-49]

Українські вчені проводять активні дослідження в галузі машинного навчання, зосереджуючись на таких темах, як глибоке навчання, навчання з підкріпленням та обчислення на основі графів. Також активно працюють у галузі обробки природної мови, проводять дослідження в галузі комп'ютерного бачення, розробляючи нові методи для таких завдань, як розпізнавання об'єктів, сегментація зображень та відстеження об'єктів.

У 2020 році уряд затвердив **Національну стратегію розвитку штучного інтелекту до 2030 року**. Визначено проблеми, які потрібно вирішити, а саме:

- Низький рівень цифрової грамотності населення. Більшість людей не розуміють, як працює ІІІ, його можливості, ризики та етичні аспекти використання.
- Відсутність чіткої правової бази. Не існує законодавства, яке б регулювало розробку та використання ІІІ в різних сферах, що створює невизначеність та ризики.
- Недостатнє інвестування. Рівень інвестицій у розробку технологій ІІІ та дослідження в цій галузі в Україні значно нижчий, ніж у розвинених країнах.
- Низький рівень підготовки кадрів. Не вистачає фахівців з розробки, впровадження та експлуатації систем ІІІ.
- Проблеми з кібербезпекою. Існують ризики несанкціонованого втручання в роботу систем ІІІ та витоку даних.
- Недосконалість механізмів прийняття управлінських рішень. Застарілі та неефективні системи управління в державних органах заважають впровадженню ІІІ.
- Відсутність етичних норм. Немає чітких правил та принципів, які б гарантували етичне та відповідальне використання ІІІ.
- Ризики зростання безробіття. Автоматизація багатьох завдань за допомогою ІІІ може призвести до втрати робочих місць.
- Невикористання ІІІ в судовій практиці. ІІІ може суттєво покращити роботу судів, але наразі він не використовується.

**Для подолання викликів та ефективного впровадження ІІІ в Україні планують вжити певних заходів:**

**1. Підвищення цифрової грамотності.** Проведення масштабної інформаційної кампанії для ознайомлення населення з основами ІІІ, його можливостями, ризиками та етичними аспектами використання. Залучення до цієї кампанії міністерств, органів влади, освітніх закладів, громадських організацій та ЗМІ. Використання різноманітних каналів комунікації, таких як

телебачення, радіо, інтернет, соціальні мережі, друковані ЗМІ та тематичні заходи.

**2. Створення чіткої правової бази.** Розробка та прийняття законодавства про ШІ, яке б чітко регулювало його розробку, впровадження та використання в різних сферах. Цей закон має визначити права та обов'язки учасників процесу, встановити принципи етичного використання ШІ, а також передбачити механізми державного контролю та нагляду. Залучення до розробки законодавства експертів з різних галузей, представників бізнесу, громадських організацій та широкої громадськості.

**3. Збільшення інвестицій.** Спрямування значних державних та приватних інвестицій у дослідження та розробку технологій ШІ. Створення сприятливого інвестиційного клімату для розвитку ШІ-стартапів та інноваційних компаній. Запровадження програм грантової підтримки наукових досліджень та розробок у галузі ШІ.

**4. Підготовка кадрів.** Модернізація освітніх програм у вищих навчальних закладах для підготовки фахівців з розробки, впровадження та експлуатації систем ШІ. Створення профільних курсів та програм підвищення кваліфікації для фахівців різних галузей. Залучення до освітнього процесу провідних експертів з галузі ШІ з України та зарубіжних країн.

**5. Кібербезпека.** Підвищення рівня кібербезпеки інформаційних систем для захисту від кібератак та витоків даних. Впровадження сучасних методів та технологій захисту інформації. Підготовка фахівців з кібербезпеки та підвищення їх кваліфікації.

**6. Модернізація державного управління.** Впровадження ШІ-рішень для покращення роботи державних органів та надання послуг населенню. Покращення ефективності прийняття управлінських рішень за допомогою ШІ. Зменшення бюрократії та корупції за допомогою ШІ-систем.

**7. Етичні норми.** Розробка та прийняття етичних норм використання ШІ, які б гарантували його відповідальне та справедливе використання. Ці норми мають ґрунтуватися на принципах поваги до прав людини,

недопущення дискримінації, прозорості та підзвітності. Залучення до розробки етичних норм експертів з етики, права, філософії та інших галузей.

**8. Дослідження впливу ШІ на ринок праці.** Проведення досліджень впливу ШІ на ринок праці та визначення ризиків втрати робочих місць. Розробка заходів щодо мінімізації цих ризиків, таких як перекваліфікація та перепідготовка кадрів, створення нових робочих місць. Надання соціальної підтримки людям, які втратили роботу через автоматизацію.

**9. Впровадження ШІ в судовій практиці.** Використання ШІ-систем для покращення роботи судів, таких як автоматизація рутинних завдань, аналіз судових рішень, виявлення фальсифікацій. Підвищення прозорості та доступності судової системи за допомогою ШІ. Забезпечення етичного та відповідального використання ШІ в судовій практиці.

#### **Мета, принципи та напрямки реалізації концепції.**

Метою є забезпечити задоволення прав та інтересів людей (ШІ має використовуватися на благо суспільства, не порушуючи прав та свобод людини), побудувати конкурентоспроможну економіку (Україна прагне стати лідером у розробці та впровадженні ШІ-технологій), вдосконалити системи публічного управління (ШІ може зробити роботу державних органів більш ефективною та прозорою).

Україна приєдналася до рекомендацій Організації економічного співробітництва та розвитку (ОЕСР) з питань ШІ, які ґрунтуються на таких принципах:

- Інклюзивність: ШІ має сприяти добробуту всіх людей.
- Повага до прав людини: ШІ має використовуватися з дотриманням верховенства права, основоположних прав і свобод людини.
- Захист персональних даних: ШІ-системи повинні відповідати вимогам законодавства про захист персональних даних.
- Прозорість: Інформація про ШІ-системи має бути доступною та зрозумілою.

- Безпечність: ШІ-системи повинні бути надійними та безпечними протягом усього їх життєвого циклу.

- Відповідальність: Розробники, впровадники та користувачі ШІ-систем повинні нести відповідальність за їх належне функціонування.

Концепція визначає пріоритетні напрямки розвитку ШІ в Україні:

- Зайняття лідируючих позицій на світовому ринку ШІ.
- Участь у міжнародних ініціативах у формуванні стратегій розвитку, регулювання та стандартизації ШІ.

- Впровадження ШІ в усіх сферах життя для покращення освіти, економіки, держуправління, кібербезпеки, оборони та інших сфер.

- Забезпечення доступу розробникам до необхідних даних та ресурсів.

- Підтримка досліджень, тобто Україна буде інвестувати в дослідження ШІ для покращення його можливостей.

- Підготовка кадрів фахівців з ШІ для задоволення потреб ринку.

- Захист інформаційного простору від кібератак.

- Застосування ШІ в правоохоронній сфері, а саме ШІ може допомогти у ресоціалізації (приспособлення людини до життя в новому співтоваристві) засуджених та запобігти повторному скоєнню злочинів.

- Гармонізація законодавства, що означає що Україна приведе своє законодавство про ШІ у відповідність до міжнародних стандартів.

Реалізація Концепції передбачена до 2030 року. Це амбітна задача, але Україна має всі ресурси та потенціал для її успішного виконання. Реалізація Концепції ШІ принесе збільшення кваліфікованих фахівців, покращить наукові дослідження, збільшить продуктивність підприємств, зміцнить кібербезпеку, поліпшить управлінські рішення та державну політику. Тільки за умови відповідального підходу ШІ зможе стати потужним інструментом для розвитку України та покращення життя її громадян. [50]

Висновки до розділу 3

Штучний інтелект є однією з найбільш перспективних технологій сучасності, яка може внести значний вклад у розвиток України у різних сферах. В економіці ШІ може допомогти удосконалити процеси управління бізнесом, прогнозування попиту на товари та послуги, оптимізацію ланцюга постачання та багато іншого. Це сприятиме підвищенню продуктивності та конкурентоспроможності підприємств. У сфері освіти ШІ може допомогти індивідуалізувати процес навчання, надавати доступ до якісної освіти в онлайн форматі, а також сприяти розвитку нових методів оцінювання знань. Це дозволить покращити якість освіти та забезпечити доступ до неї для більш широкого кола людей. У медицині ШІ може допомогти у покращенні діагностики захворювань, розробці ефективних методів лікування та прогнозуванні розвитку хвороб. Це допоможе підвищити ефективність медичних послуг та покращити результати лікування пацієнтів. Проте разом з потенціалом ШІ приходять і етичні ризики. Важливо забезпечити прозорість та відповідальність у використанні цих технологій, захист персональних даних, уникнення дискримінації та упередженості в алгоритмах, забезпечення безпеки та надійності систем ШІ, а також вирішення питань, пов'язаних із впливом на ринок праці. Тому важливо розвивати та впроваджувати штучний інтелект в Україні з урахуванням цих етичних аспектів, щоб забезпечити сталий та позитивний розвиток країни в цифрову епоху.



## Висновки

Дослідивши історію ШІ встановили, що шлях від його зародження до сучасних досягнень був переповнений періодами розвитку, занепаду та відродження, починаючи з перших спроб у 1950-х роках, коли дослідники вбачали в цьому лише питання часу, але ранні системи виявилися примітивними, що спричинило занепад у 1970-х роках; відродження ШІ настав у 1980-х роках завдяки новим методам, зокрема машинному навчанню, що дозволило створити складніші системи.

Проаналізувавши, як ШІ використовується у медицині та фармації встановили, що він може значно прискорити та покращити процес розробки нових ліків, автоматизуючи такі завдання, як аналіз даних, моделювання молекул, та скринінг потенційних кандидатів, допомагає дослідникам виявляти нові біологічні мішені для терапії, що може призвести до розробки більш ефективних ліків для різних захворювань, може допомогти прогнозувати ймовірність успіху того чи іншого методу лікування для конкретного пацієнта, що дозволить лікарям приймати більш обґрунтовані рішення.

Дослідили проблеми ШІ для його інтеграції у медицину. Існує безліч методів МН, які можна використати у розробці ліків, але разом з величезними можливостями використання ШІ виникають й етичні міркування. Важливо, щоб розробка та використання ШІ у цій сфері відбувалися з дотриманням етичних принципів, таких як справедливість, прозорість, та відповідальність. Також потрібно пам'ятати про упередженість алгоритмів ШІ, що може призвести до дискримінації пацієнтів. Медичні дані пацієнтів є конфіденційними, і їх необхідно захищати від несанкціонованого доступу. Як і в Україні, так і в інших країнах необхідно розробити чіткі етичні рекомендації та правила щодо використання ШІ у фармації, щоб гарантувати, що його використання буде приносити користь людям, а не шкодити їм.

Проаналізувавши державну стратегію ШІ в Україні з'ясували, що у 2021 році Україна ухвалила Національну стратегію розвитку штучного

інтелекту до 2030 року, яка визначає мети та пріоритети розвитку ШІ в країні на наступне десятиліття. Основні цілі стратегії включають зайняття Україною лідерських позицій у галузі розробки та застосування ШІ, сприяння розвитку інноваційної екосистеми ШІ, підвищення конкурентоспроможності української економіки через ШІ та поліпшення якості життя українців за допомогою цієї технології. Пріоритетні напрямки розвитку ШІ охоплюють охорону здоров'я, освіту, державне управління, економіку та безпеку. Стратегія передбачає реалізацію кроків, таких як створення сприятливого регуляторного середовища для розвитку ШІ, інвестування в дослідження та розробки ШІ, підготовка кваліфікованих кадрів у цій сфері та підвищення обізнаності про ШІ серед населення. Національна стратегія розвитку ШІ до 2030 року є амбітним планом, який може значно змінити Україну. Однак важливо враховувати, що успішна реалізація цієї стратегії потребуватиме значних зусиль та ресурсів з боку держави, бізнесу та наукової спільноти.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Штучний Інтелект про себе, корупцію та майбутнє. Посилання: [kyiv1](#)
2. Stanford Encyclopedia of Philosophy. Author and Citation Information for "The Turing Test". ([plato.stanford.edu](#))
3. Nils J. Nilsson. The Quest for Artificial Intelligence 2009.
4. Report on a general problem-solving program. Proceedings of the International Conference on Information Processing. pp. 256–264. ([bitsavers.org](#).)
5. History of Lisp. ([jmc.stanford.edu](#))
6. Joseph Weizenbaum. Computer Power and Human Reason: From Judgment to Calculation (1976).
7. SHRDLU: An early natural-language understanding computer program. ([indiaai.gov.in](#).)
8. BROKEN PROMISES & EMPTY THREATS: THE EVOLUTION OF AI IN THE USA, 1956-1996. ([technologystories.org](#).)
9. Nils J. Nilsson. Artificial Intelligence: A New Synthesis.
10. Edward Feigenbaum. ([schneppat.com](#).)
11. What is the history of artificial intelligence. ([www.tableau.com](#).)
12. Cell Reports Methods. ([www.ncbi.nlm.nih.gov](#).)
13. Schuhmacher, A., Gatto, A., Kuss, M., Gassmann, O., and Hinder, M. (2021). Big Techs and startups in pharmaceutical R&D – a 2020 perspective on artificial intelligence. *Drug Discov. Today* 26, 2226–2231. (<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2021.04.028>.)
14. Paul, D., Sanap, G., Shenoy, S., Kalyane, D., Kalia, K., and Tekade, R.K. (2021). Artificial intelligence in drug discovery and development. *Drug Discov. Today* 26, 80–93. (<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2020.10.010>).
15. Vougas, K., Sakellaropoulos, T., Kotsinas, A., Foukas, G.-R.P., Ntargaras, A., Koinis, F., Polyzos, A., Myriantopoulos, V., Zhou, H., Narang, S., et al. (2019). Machine learning and data mining frameworks for predicting drug response in cancer: an overview and a novel in silico screening process based on association rule

- mining. *Pharmacol. Ther.* 203, 107395. (<https://doi.org/10.1016/j.pharmthera.2019.107395>.)
16. Sakellaropoulos, T., Vougas, K., Narang, S., Koinis, F., Kotsinas, A., Polyzos, A., Moss, T.J., Piha-Paul, S., Zhou, H., Kardala, E., et al. (2019). A deep learning framework for predicting response to therapy in cancer. *Cell Rep.* 29, 3367–3373.e4. (<https://doi.org/10.1016/j.celrep.2019.11.017>.)
17. Kuenzi, B.M., Park, J., Fong, S.H., Sanchez, K.S., Lee, J., Kreisberg, J.F., Ma, J., and Ideker, T. (2020). Predicting drug response and synergy using a deep learning model of human cancer cells. *Cancer Cell* 38, 672–684.e6. (<https://doi.org/10.1016/j.ccell.2020.09.014>.)
18. Born, J., Manica, M., Oskooei, A., Cadow, J., Markert, G., and Rodríguez Martí'nez, M. (2021). PaccMannRL: de novo generation of hit-like anticancer molecules from transcriptomic data via reinforcement learning. *iS-cience* 24, 102269. (<https://doi.org/10.1016/j.isci.2021.102269>)
19. AT Greenhill, BR. Edmunds. A primer of artificial intelligence in medicine. *Tech Innov Gastrointest Endosc*, 22 (2) (2020), pp. 85-89, ([10.1016/j.tgie.2019.150642](https://doi.org/10.1016/j.tgie.2019.150642).)
20. P Solanki, D Baldaniya, D Jogani. Artificial intelligence: new age of transformation in petroleum upstream. *Pet Res* (2021), ([10.1016/j.ptlrs.2021.07.002](https://doi.org/10.1016/j.ptlrs.2021.07.002)).
21. A Kshirsagar, M. Shah. Anatomized study of security solutions for multimedia: deep learning-enabled authentication, cryptography and information hiding. *Adv Secur Solut Multimed* (2021), ([10.1088/978-0-7503-3735-9CH7](https://doi.org/10.1088/978-0-7503-3735-9CH7)).
22. CC. Anthony. Big data in medicine: the upcoming artificial intelligence. *Prog Pediatr Cardiol*, 43 (2016), pp. 91-94, ([10.1016/j.ppedcard.2016.08.021](https://doi.org/10.1016/j.ppedcard.2016.08.021).)
23. AH Göller, L Kuhnke, F Montanari. Bayer's in silico ADMET platform: a journey of machine learning over the past two decades. *Drug Discov Today*, 25 (9) (2020), pp. 1702-1709, ([10.1016/j.drudis.2020.07.001](https://doi.org/10.1016/j.drudis.2020.07.001))

24. Sarang Narkhede. Understanding AUC - ROC Curve. (towardsdatascience.com.)
25. E. Ahmadi. The effect of ultrasound treatment on some properties of methylcellulose films. (2011)
26. R. Azizi. Ultrasound assisted-viscosifying of kappa carrageenan without heating. (2016)
27. L. Bai. Comparison of emulsifying properties of food-grade polysaccharides in oil-in-water emulsions: Gum Arabic, beet pectin, and corn fiber gum. (2017)
28. M.S. Belluzo. Ultrasonic compatibilization of polyelectrolyte complex based on polysaccharides for biomedical applications. (2016)
29. V.J. Bulbul. Effect of cold plasma treatment on xanthan gum properties. *Polymer Testing* (2019)
30. Veer Patel, Manan Shah. Artificial intelligence and machine learning in drug discovery and development. (www.sciencedirect.com.)
31. Rongbin Cui, Fan Zhu. Ultrasound modified polysaccharides: A review of structure, physicochemical properties, biological activities and food applications. (www.sciencedirect.com.)
32. Daniil Polykovskiy, Alexander Zhebrak, Dmitry Vetrov, Yan Ivanenkov, Vladimir Aladinskiy, Polina Mamoshina, Marine Bozdaganyan, Alexander Aliper, Alex Zhavoronkov, Artur Kadurin. Entangled Conditional Adversarial Autoencoder for de Novo DrugDiscovery. (pubs.acs.org.)
33. Limeng Pu, Misagh Naderi, Tairan Liu, Hsiao-Chun Wu, Supratik Mukhopadhyay & Michal Brylinski. eToxPred: a machine learning-based approach to estimate the toxicity of drug candidates. (bmcpharmacoltoxicol.biomedcentral.com.)
34. DiMasi JA, Grabowski HG, Hansen RW. Innovation in the pharmaceutical industry: new estimates of R&D costs. *J Health Econ.* 2016;47:20–33.

35. Paul SM, Mytelka DS, Dunwiddie CT, Persinger CC, Munos BH, Lindborg SR, Schacht AL. How to improve R&D productivity: the pharmaceutical industry's grand challenge. *Nat Rev Drug Discov*. 2010;9:203–14.
36. Hung CL, Chen CC. Computational approaches for drug discovery. *Drug Dev Res*. 2014;75:412–8.
37. Sliwoski G, Kothiwale S, Meiler J, Lowe EW Jr. Computational methods in drug discovery. *Pharmacol Rev*. 2014;66:334–95.
38. Acharya C, Coop A, Polli JE, Mackerell AD Jr. Recent advances in ligand-based drug design: relevance and utility of the conformationally sampled pharmacophore approach. *Curr Comput Aided Drug Des*. 2011;7:10–22.
39. Yang SY. Pharmacophore modeling and applications in drug discovery: challenges and recent advances. *Drug Discov Today*. 2010;15:444–50.
40. Perkins R, Fang H, Tong W, Welsh WJ. Quantitative structure-activity relationship methods: perspectives on drug discovery and toxicology. *Environ Toxicol Chem*. 2003;22:1666–79.
41. Chevillard F, Kolb P. SCUBIDOO: a large yet screenable and easily searchable database of computationally created chemical compounds optimized toward high likelihood of synthetic tractability. *J Chem Inf Model*. 2015;55:1824–35.
42. Liu T, Naderi M, Alvin C, Mukhopadhyay S, Brylinski M. Break down in order to build up: decomposing small molecules for fragment-based drug design with eMolFrag. *J Chem Inf Model*. 2017;57:627–31.
43. Dariush D. Farhud and Shaghayegh Zokaei. Ethical Issues of Artificial Intelligence in Medicine and Healthcare. ([www.ncbi.nlm.nih.gov](http://www.ncbi.nlm.nih.gov).)
44. Varkey B. (2021). Principles of Clinical Ethics and Their Application to Practice. *Med Princ Pract*, 30:17–28.
45. Jahn WT. (2011). The 4 basic ethical principles that apply to forensic activities are respect for autonomy, beneficence, nonmaleficence, and justice. *J Chiropr Med*, 10:225–6.

46. Farhud DD, Nickzat N, Mahmoodi M. (1970). Views of group of phisicians, nurces and midwives on ethical principles in medical genetics, in Tehran. Iran J Public Health, 1970;28(1–4).
47. Васюхін М. І. Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова - колиска мікроелектронної бази комп'ютерних систем.
48. В. В. Скопенко, О. В. Третьак, В. І. Андрейцев. Наука в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка на зламі тисячоліть.
49. І. В. Вербa. Історія Київського університету.
50. Про схвалення Концепції розвитку штучного інтелекту в Україні.  
(zakon.rada.gov.ua.)