



УДК 004.8:615:338.45

<https://doi.org/10.20538/1682-0363-2026-3-179-183>

Искусственный интеллект в разработке лекарственных препаратов: от дизайна молекул к клинической фармакометрии

Галямова М.Р.¹, Валиева О.В.^{2,3}, Песков К.В.⁴, Кадуринов А.А.⁵, Кравцов К.М.¹

¹ Центр национальной технологической инициативы по направлению «Хелснет»
Россия, 630090, г. Новосибирск, ул. Николаева, 12

² Институт экономики и организации промышленного производства Сибирского отделения Российской академии наук (ИЭОПП СО РАН)
Россия 630090, г. Новосибирск, ул. Академика Лаврентьева, 17

³ Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НИ НГУ)
Россия, 630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 1

⁴ Первый Московский государственный медицинский университет им. И.И. Сеченова (Сеченовский Университет)
Россия, 119048, г. Москва, ул. Трубецкая, 8/2

⁵ Автономная некоммерческая организация (АНО) «Институт искусственного интеллекта»
Россия, 121170, г. Москва, Кутузовский пр., 32, к. 1

РЕЗЮМЕ

Цель – показать возможности использования искусственного интеллекта (ИИ) в фармакологии и разработке новых лекарственных препаратов. В исследовании рассматриваются ключевые технологические драйверы, сложившиеся на рынке генеративного проектирования и использования технологий искусственного интеллекта в медицине, динамика изменений мирового рынка ИИ-продуктов для разработки лекарственных препаратов, деятельность ведущих игроков и стартапов, а также правовые аспекты регулирования отрасли. Особое внимание уделено российскому рынку: уровню его зрелости, барьерам роста и практическим кейсам внедрения ИИ в период 2022–2025 гг.

Ключевые слова: искусственный интеллект, Drug Discovery, дизайн лекарств, фундаментальные модели, AlphaFold 3, регуляторика фармрынка, CDISC, фармакометрия, PBPK, QSP

Конфликт интересов. Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

Источники финансирования. Публикация подготовлена при поддержке Фонда «Научно-технологический парк Новосибирского Академгородка», участвующем в Национальной технологической инициативе при поддержке Фонда поддержки проектов Национальной технологической инициативы и Министерства промышленности и торговли Российской Федерации в рамках реализации Программы по развитию отдельного направления Национальной технологической инициативы «Хелснет».

Для цитирования: Галямова М.Р., Валиева О.В., Песков К.В., Кадуринов А.А., Кравцов К.М. Искусственный интеллект в разработке лекарственных препаратов: от дизайна молекул к клинической фармакометрии. *Бюллетень сибирской медицины*. 2026;25(3):179–183. <https://doi.org/10.20538/1682-0363-2026-3-179-183>.

Artificial Intelligence in Drug Development: From Molecular Design to Clinical Pharmacometrics

Galyamova M.R.¹, Valieva O.V.^{2,3}, Peskov K.V.⁴, Kadurin A.A.⁵, Kravtsov K.M.¹

¹ Center for the National Technology Initiative in the Healthnet Direction
12 Nikolaeva St., 630090 Novosibirsk, Russian Federation

² Institute of Economics and Industrial Engineering, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
17 Akademik Lavrentiev St., 630090 Novosibirsk, Russian Federation

³ National Research Novosibirsk State University (NR NSU)
1 Pirogov St., 630090 Novosibirsk, Russian Federation

⁴ Sechenov First Moscow State Medical University (Sechenov University)
8/2 Trubetskaya St., 119048 Moscow, Russian Federation

⁵ Artificial Intelligence Research Institute (AIRI)
Room 1 32 Kutuzovsky Ave., 121170 Moscow, Russian Federation

ABSTRACT

The **aim** was to demonstrate the potential of using artificial intelligence (AI) in pharmacology and the development of new drugs. This study reviews the key technological drivers shaping the market for generative design and AI applications in medicine, the dynamics of the global AI drug discovery market, the activities of leading players and startups, and the regulatory and legal aspects governing the industry. Particular focus is placed on the Russian market, including its maturity, growth barriers, and AI adoption case studies from 2022 to 2025.

Keywords: artificial intelligence, drug discovery, drug design, foundation models, AlphaFold 3, pharmaceutical regulation, CDISC, pharmacometrics, PBPK, QSP

Conflict of interest. The authors declare the absence of obvious or potential conflicts of interest related to the publication of this article.

Source of financing. This publication was prepared with the support of the Foundation «Science and Technology Park of Novosibirsk Akademgorodok», which participates in the National Technology Initiative, with the support of the Foundation for the Support of National Technology Initiative Projects and the Ministry of Industry and Trade of the Russian Federation, as part of the implementation of the Program for the Development of the 'HealthNet' (Helsnet) direction of the National Technology Initiative.

For citation: Galyamova M.R., Valieva O.V., Peskov K.V., Kadurin A.A., Kravtsov K.M. Artificial Intelligence in Drug Development: From Molecular Design to Clinical Pharmacometrics. *Bulletin of Siberian Medicine*. 2026;25(3):179–183. <https://doi.org/10.20538/1682-0363-2026-3-179-183>.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей публикации систематизированы ключевые результаты отраслевого отчета 2026 г., посвященного трансформации мирового и российского рынков искусственного интеллекта (ИИ) в фармакологии и разработке лекарственных средств (Drug Discovery) [1]. Отчет детально рассматривает глобальные технологические тренды на рынке использования больших языковых моделей в разработке новых лекарственных препаратов, структуры мирового и российского рынка ИИ, драйверы роста и барьеры развития, объемы инвестиций и динамику. Особое внимание уделено библиографическому анализу источников ведущих мировых научных журна-

лов, входящих в базу данных Nature, и выявлению основных трендов в публикационной активности и приоритетов в глобальных научных исследованиях за последние 5 лет. Ознакомиться с полным текстом отчета можно по ссылке <https://healthnet.academpark.com/analytics/ii-v-farmakologii-i-drug-discovery/>

ГЛОБАЛЬНЫЕ ТРЕНДЫ

Вектор технологических трендов использования ИИ в разработке лекарств смещается от отдельных точечных моделей к платформенным подходам, которые можно масштабировать на разные задачи внутри цепочки поиска и разработки лекарств [2]. Центральным технологическим трендом стал рост

количества и качества моделей-основ (foundation models), обучаемых на больших массивах химических, биологических и текстовых данных и дообучаемых под конкретные R&D-задачи, включая поиск мишеней, генерацию и оптимизацию молекул, прогнозирование свойств и рисков [3]. На практике это ведет к унификации ядра моделей и ускоряет перенос методов между терапевтическими областями, однако усиливает требования к качеству данных и валидации результатов на экспериментальных наборах.

При этом наблюдается быстрая эволюция данных моделей и основанных на них методов в сторону мультимодальности. Мировой тренд заключается в объединении нескольких типов данных в одной архитектуре и единой логике предобучения: химические структуры и реакции, последовательности и структуры белков, omics-профили, изображения (включая клеточные и гистологические), а также клинические признаки [4]. В обзорах 2025–2026 гг. мультимодальные предобученные модели описываются как новый базовый слой для задач drug discovery, поскольку они позволяют согласованно извлекать признаки из разных источников и повышать переносимость моделей на новые проекты [5, 6]. Это важно для задач, где один тип данных дает неполную картину, например при поиске мишеней и объяснении механизма действия либо при выборе биомаркеров, где требуется связать молекулярный уровень с клиническими проявлениями.

Отдельным драйвером развития стала структурная революция в вычислительной биологии, которая напрямую влияет на продукты для discovery. Разработка модели Alpha Fold 3 и публикации в Nature закрепили тренд на более универсальное предсказание структурных комплексов и взаимодействий, включая случаи, когда в систему входят разные типы биомолекул [7]. Для практики разработки лекарств это означает рост качества и скорости этапов, связанных с построением гипотез о связывании, рациональном дизайне и приоритизации серий молекул.

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА РЫНКА РАЗРАБОТКИ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИИ

Мировой рынок ИИ-продуктов для разработки лекарственных препаратов целесообразно рассматривать в разрезе двух крупных сегментов, динамика которых формируется разными типами задач и данных. Первый сегмент, AI-driven drug discovery и drug design, объединяет решения для генерации, отбора и оптимизации кандидатов, а также прогнозирования свойств и рисков (включая ADMET и безопасность) на ранних стадиях, где ключевым результатом являются более быстрые и качественные циклы выбора

и доработки молекул. Второй сегмент включает решения для клинического контура, ориентированные на поддержку проектирования исследований, набора пациентов и мониторинга, где рост спроса связан с масштабированием клинических данных, усложнением протоколов и необходимостью повышать эффективность клинической разработки за счет аналитики и автоматизации процессов принятия решений.

Первый сегмент, по оценкам разных аналитических агентств, уже имеет серьезный объем и высокую динамику спроса, но разброс оценок остается существенным из-за различий в границах сегмента. В качестве ориентиров возможно привести несколько оценок. Например, Arizton Advisory & Intelligence оценивают объем так: порядка 1,71 млрд долл. в 2024 г. с ростом до 8,52 млрд долл. к 2030 г. [8]. Другие источники оценивают рынок выше. Global Market Insights Inc. приводит следующие данные: около 3,6 млрд долл. в 2024 г. с прогнозом дальнейшего ускоренного роста в последующие годы [9].

Второй сегмент, сегмент решений для клинического контура, включает ИИ-продукты, которые применяются в клинической разработке для поддержки проектирования исследований, подбора и удержания пациентов, выбора центров, мониторинга качества и безопасности, а также для более эффективной работы с растущими массивами клинических и цифровых данных. По оценкам аналитических источников, сегмент уже имеет самостоятельный масштаб. Например, Markets and Markets оценивает рынок AI in clinical trials в 1,35 млрд долл. в 2024 г. с прогнозом 2,75 млрд долл. к 2030 г. [10].

БАРЬЕРЫ РОСТА И ТОЧКИ РАЗВИТИЯ

Ключевой барьер роста российского рынка связан с данными и их промышленной пригодностью. Для задач discovery и preclinical критичны большие массивы воспроизводимых экспериментальных данных, но на практике они остаются фрагментированными по организациям и проектам, с неоднородными протоколами и ограниченной сопоставимостью, что снижает переносимость моделей и удлиняет цикл внедрения [11]. В клиническом контуре проблема еще острее: качество и полнота электронных медицинских данных ограничивают масштабируемую аналитику и обучение моделей, а высокая доля неупорядоченных записей требует значительных затрат на структурирование и контроль качества, что прямо отмечается в обсуждениях формирования рынка медицинских данных в России [12].

К еще одному барьеру можно отнести отсутствие нормативно закреплённого стандарта представления индивидуальных данных клинических исследова-

ний. В отличие от FDA и EMA, где обязательны форматы CDISC SDTM/ADaM (с 2016 и 2023 г.), российские досье содержат лишь агрегированные таблицы и PDF-отчеты. Это блокирует автоматизированную верификацию, метаанализ, развитие ИИ-инструментов и интеграцию с данными реальной клинической практики.

Третий серьезный барьер относится к регуляторно-правовой среде и режимам доступа к информации. Медицинские данные и сведения, составляющие врачебную тайну, могут передаваться и использоваться в исследованиях при соблюдении строгих условий, включая согласие и иные основания, что повышает транзакционные издержки на получение данных, юридическую проработку и построение комплаенс-контуров.

Четвертый барьер – кадровый и организационный. Для устойчивого внедрения ИИ в разработку лекарств нужны междисциплинарные команды с компетенциями в вычислительной химии, биологии, клинических исследованиях, data science, инженерии данных, но дефицит таких специалистов в фарминдустрии остается серьезным и не может быть покрыт в краткосрочном периоде.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Глобальный ландшафт использования искусственного интеллекта в фармакологии характеризуется переходом к фундаментальным мультимодальным моделям, закрытым гибридным лабораториям и жесткой регуляторной формализации (ICH M15, гайдлайны FDA). Российский сектор обладает высоким научным потенциалом и успешными примерами индустриально-академической кооперации, однако успешная реализация отечественных разработок упирается в организационно-институциональные и технологические барьеры. Ключевыми приоритетами государственной политики, позволяющими внедрять ИИ в фармацевтический и медицинский секторы, должны стать: принудительная стандартизация биомедицинских данных (внедрение CDISC), принятие национальных стандартов валидации ИИ-моделей (ГОСТ Р) и создание сквозных платформ, объединяющих генеративную химию с RBPK/QSP-моделированием. Данный шаг позволит обеспечить технологический суверенитет и конкурентоспособность отечественной фармразработки на мировом рынке.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Отраслевой аналитический отчет «Исследование использования искусственного интеллекта (ИИ) в фармакологии и Drug Discovery». Инфраструктурный центр НТИ «Хелснет», Фонд «Технопарк Академгородка», Новосибирск, 2026. URL: https://healthnet.academpark.com/wp-content/uploads/2026/07/otchet_ii_dragdizajn_itog_ispr_dop_24_07_2026.pdf
2. Hasselgren C., Oprea T.I. Artificial intelligence for drug discovery: are we there yet? *Annu. Rev. Pharmacol. Toxicol.* 2024;64(1):527–550. DOI: 10.1146/annurev-pharmtox-040323-040828.
3. Delile J., Mukherjee S., Mueller J., Khalil I., Zhukov L., Meier C. Foundation models in drug discovery: Phenomenal growth today, transformative potential tomorrow? *Drug Discov. Today*. 2025;30(12):104518. DOI: 10.1016/j.dru-dis.2025.104518.
4. Shanker V.R., Bruun T.U.J., Hie B.L., Kim P.S. Unsupervised evolution of protein and antibody complexes with a structure-informed language model. *Science*. 2024;385(6704):46–53. DOI: 10.1126/science.adk8946.
5. Wang X., Wang C., Ji B., Wang J., Zheng M., Song L. et al. Multimodal pre-training models of molecular representation for drug discovery. *Nati. Sci. Rev.* 2026;13(1):nwaf495. DOI: 10.1093/nsr/nwaf495.
6. Bhushan A., Misra P. Unlocking the potential: multimodal AI in biotechnology and digital medicine – economic impact and ethical challenges. *NPJ Digit. Med.* 2025;8(1):619. DOI: 10.1038/s41746-025-01992-6.
7. Abramson J., Adler J., Dunger J., Evans R., Green T., Pritzel A., Ronneberger O. et al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. *Nature*. 2024;630(8016):493–500. DOI: 10.1038/s41586-024-07487-w.
8. AI In Drug Discovery Market Size, Share, & Trends Analysis Report By Application, Therapeutic Area, Drug Type, Technology, End-User, Geography- Industry Analysis, Growth, Revenue, Opportunities, Latest AI Trends. URL: <https://www.arizton.com/market-reports/ai-in-drug-discovery-market>
9. Artificial Intelligence in Drug Discovery Market Size & Share 2026-2035. URL: <https://www.gminsights.com/industry-analysis/ai-in-drug-discovery-market>
10. AI in Clinical Trials Market: Growth, Size, Share, and Trends. <https://www.marketsandmarkets.com>. AI in Clinical Trials Market. URL: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/ai-in-clinical-trials-market-42687548.html>
11. ПАСПОРТ Стратегии цифровой трансформации отрасли «Здравоохранение» до 2024 года и на плановый период до 2030 года. URL: <http://government.ru/docs/all/153077/>
12. Владимир Воскобоев: искусственный интеллект может сделать медицину более человечной. *Медвестник*. 26.12.2025. URL: https://medvestnik.ru/content/articles/vladimir-voskoboev-iskusstvennyi-intellekt-mojet-sdelat-medicinu-bolee-chelovechnoi.html?utm_source=chatgpt.com

Информация об авторах

Галямова Мария Рашитовна – руководитель, Центр национальной технологической инициативы по направлению «Хелснет», г. Новосибирск, Россия, maria@mgalyamova.ru

Валиева Ольга Владимировна – канд. экон. наук, ст. науч. сотрудник, ИЭОПП СО РАН; доцент, кафедра менеджмента, НИИ НГУ, г. Новосибирск, o_valieva@mail.ru, <http://orcid.org/0000-0002-7831-0581>

Песков Кирилл Витальевич – канд. биол. наук, руководитель Центра математического моделирования в разработке лекарств, Сеченовский Университет, г. Москва, peskov_k_v@staff.sechenov.ru, <http://orcid.org/0000-0003-0678-5729>

Кадури Артур Аликович – директор Центра ИИ-разработки новых лекарственных препаратов, АНО «Институт искусственного интеллекта», г. Москва, Kadurin@airi.net, <http://orcid.org/0000-0003-1482-9365>

Кравцов Константин Михайлович – эксперт, Центр национальной технологической инициативы по направлению «Хелснет», г. Новосибирск, kkravtsov.14@gmail.com

(✉) **Валиева Ольга Владимировна**, o_valieva@mail.ru

Дата поступления 09.06.2026