

PredictRx: Инструмент поддержки принятия решений на базе ИИ для молекулярного скрининга при подборе лекарств от рака молочной железы

Источник: Frontiers in AI — Medicine

Оригинал: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/frai.2026.1881187>

диагностика

машинное обучение

онкология

поддержка принятия решений

фармацевтика

Введение

Рак молочной железы остается одной из ведущих причин смертности от онкологических заболеваний во всем мире, и поиск эффективных комбинаций лекарственных препаратов является важнейшим требованием в фармацевтических исследованиях. Интеграция **искусственного интеллекта (AI — Artificial Intelligence)** в процессы обработки больших объемов химических и биологических данных объединяет молекулярное представление, прогностическое моделирование и структурированную поддержку в рамках единого доступного инструмента, что ускоряет идентификацию кандидатов на ранних стадиях исследований рака молочной железы, способствуя при этом воспроизводимости, прозрачности и ориентированности на пользователя.

Цель

Настоящее исследование сосредоточено на разработке и проектировании «PredictRx» — инструмента поддержки принятия решений на базе искусственного интеллекта, призванного помочь практикующим

медицинским работникам анализировать комбинации лекарственных средств, которые могут быть использованы для пациентов с раком молочной железы.

Методология

PredictRx был разработан с использованием молекулярных дескрипторов, физико-химических свойств и наборов данных о взаимодействии лекарственных средств, собранных из общедоступных биомедицинских баз данных. Инструмент объединяет в общей сложности шесть методов обучения с учителем и без учителя для изучения структурного сходства между соединениями и прогнозирования потенциальных взаимодействий лекарств при раке молочной железы. Различные методы машинного обучения, включая **Random Forest** (Случайный лес), **Support Vector Machine** (Метод опорных векторов), **Logistic Regression** (Логистическая регрессия), **K-Means Clustering** (Кластеризация методом К-средних), **DBSCAN** (Плотностная пространственная кластеризация с шумоподавлением) и **Agglomerative Clustering** (Агломеративная кластеризация), применялись для анализа структурного сходства и прогнозирования потенциальных взаимодействий лекарств и паттернов синергии. Эффективность моделей оценивалась с использованием матрицы классификации, **Silhouette Score** (Коэффициента силуэта), индекса **Calinski-Harabasz** и индекса **Davies-Bouldin**. Инструмент был развернут в виде доступного через браузер веб-приложения для взаимодействия и визуализации в режиме реального времени.

Результаты

Результаты показывают, что **Random Forest** обладает самой высокой точностью прогностической эффективности, равной 1, а агломеративная кластеризация обеспечила наиболее высокие показатели (Silhouette Score: 0,6946; индекс Davies-Bouldin: 0,2457). Текущий инструмент был развернут как доступный через браузер веб-инструмент с возможностью взаимодействия и визуализации результатов в режиме реального времени. PredictRx представляет собой уникальный, простой в использовании и интерпретируемый инструмент скрининга, ориентированный на анализ совместимости и синергии лекарственных средств. Исследовательский анализ данных (EDA) дополнительно выявил, что молекулярная масса, липофильность и структурное сходство являются важными факторами, способствующими прогнозированию совместимости лекарств.

Заключение

PredictRx демонстрирует, как прогностическое моделирование на базе AI может ускорить молекулярный скрининг и поиск лекарственных средств для лечения рака молочной железы на ранних стадиях. Объединяя кластеризацию, классификацию, молекулярное представление и визуализацию в единую интерпретируемую платформу, данная технология способствует эффективной идентификации подходящих комбинаций лекарств и предлагает масштабируемую основу для будущих фармацевтических исследований с помощью ИИ.

Перевод выполнен: 28.07.2026 | ai4med.ru

Машинный перевод. Рекомендуем сверять с оригиналом при клиническом использовании.