

# A gyógyszerkutatás alátámasztása számítástechnikával és mesterséges intelligenciával – Történeti áttekintés

A Neumann János Számítógép-tudományi Társaság Informatikatörténeti Fóruma (NJSZT iTF) és az Óbudai Egyetem rendezvénye az iTF Nagy Számítástechnikai Műhelyek sorozatában

Dátum: 2024. június 14. (péntek) 14 óra

Helyszín: Óbudai Egyetem (Budapest III. Bécsi út 96/B) F09 terem

Levezető elnök: Darvas Ferenc

## A program:

**Tick József:** Köszöntő 

**Darvas Ferenc:** A számítástechnika alkalmazása a hazai gyógyszerkutatásban – közel negyven év áttekintése  

**Dormán György:** Információ-robbanás a gyógyszerkémiában az elmúlt 40 évben: Kombinatorikus kémiától a kémiai genomikán át az áramlásos szintézisekig 

**Keserű György Miklós, Ferenczy György:** Mesterséges intelligencia a gyógyszerkutatásban  

---

# A számítástechnika alkalmazása a hazai gyógyszerkutatásban – közel negyven év áttekintése

**Dr. Darvas Ferenc**

NJSZT iTF & Óbudai Egyetem  
2024. június 14.




THALESNano



AgroThetis

# Célkitűzés, a szimpózium felépítése. Limitációk

- A rendezvény célkitűzése: átfogó történeti áttekintés két komplex terület gyömölcsöző kapcsolatáról, kitérve a jelen helyzet leírására, rámutatva a nyitott kérdésekre
- Saját előadás: átfogó kép adása, számítógépes, algoritmikus, adatbáziskezelési és MI vonatkozások hangsúlyozása. Törekvés a hazai eredmények nemzetközi fogadtatásának áttekintésére. Ma periférikus, de perspektivikus eredmények megemlítése: ürtechnológia, nanotechnológia, kutatási eszközökből termelőeszközök
- Dormán György előadása: az információrobbanás visszhangja a gyógyszerkutatásban
- Keserű György Miklós & Ferenczy György előadás: az MI alkalmazása as gyógyszerkutatásban, fókuszban a mai helyzetkép
- Limitációk: Alapfogalmak tisztázása, időkorlátok, hasonló hazai és nemzetközi összefoglalók hiánya – megértértést kérünk a t. hallgatóságtól



# Alapfogalmak: gyógyszerkutatás, mesterséges intelligencia

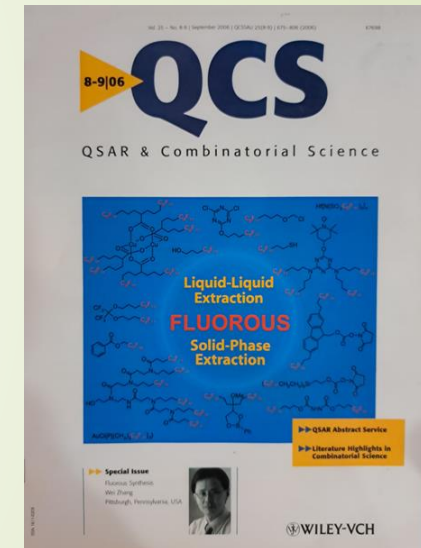
- **Gyógyszerhatóanyag ("hatóanyag"). Hatásvizsgálat:** preklinikai-klinikai szakaszok.
- **Empirikus jelleg:** Nincs átfogó modellünk a hatóanyag kémiai szerkezete és klinikai hatása közti egzakt kapcsolatra.
- **Preklinikai szakasz:** a hatóanyag szerkezetének + legfontosabb laterális tulajdonságainak "megtervezése".
- **Klinikai szakasz:** repurposing, új hatásterületi alkalmazás megtervezése.
- **Mesterséges intelligencia:** Vonatkozó EU szabályozás. Az előadásban: 1. logikai alapú, 2. sokváltozós analízis és neurális hálózatok, 3. generatív MI.

# Kezdetek: Kvantitatív hatás-szerkezet vizsgálatok, QSAR

- **A kémiai szerkezet a biológiai hatás kulcsa?** A. Crum-Brown, XIX. század, C. Hansch 1964, Hammett egyenlet LFER (harmincas évek) + regressziószámítás,
- **Regressziószámítási periódus:** C, Hansch és iskolája - LFER változók mellett kvantumkémiai paraméterek is 1970 után
- **Számítási nehézségek, biometria fejletlensége.....** Számítógépek megjelenése 1970 körül a területen;
- **Humán ellenállás** >> grafikus optimálási módszerek, szekvenciális simplex, "magyar módszer" 1974-től;
- **Sokváltozós analízises periódus 70-es évek közepe:** főkomponens- és faktoranalízis, NLM (mátrixalgebra, mat.stat);
- **Az első gyárközi adatbázis:** SzKI-MGYE-NIM 1980-tól, kiterjed növényvédőszer-kutatásra is;
- **A molekuláris modellezés megjelenése a számítógépes grafikával párhuzamosan** - viharos terjedés, "vizuális komponens".

# Az első mesterséges intelligencia alkalmazások: "logikai programozás", Prolog

- **Mi a logikai programozás? Előnyei, hátrányai?**
- **Imperial College, London és Bubánatvölgy, 1975 >>**  
magyar mesterséges intelligencia 1980-90
- **Első gyógyszerkutatói alkalmazások:** LFER  
paraméterek számítása (LogP) 1978
- **Első programok laterális modellekre:**  
gyógyszerinterakció (1976- Neumann előadás),  
metabolizmus (1986), toxicitás (1988),  
gyógyszerstabilitási melléktermékek



# Hazai és nemzetközi ipari áttekintés 1970-1990.

## A QSAR periódus vége

- A szakterület a 70-es évek közepére helyet kapott az iparban, évtized vége: összes nagyobb gyógyszergyár;
- Magyarország jó pozícióból indult, lendületes gyógyszeripari növekedés, világon 7. hely exporthányad tekintetében;
- Pozitív hozzáállás az új módszerek alkalmazásában, mindenhol helyi munkacsoport + MGYE rendezvények;
- Jó tudományos pozíció: 1978-ban az európai QSAR konferencia megrendezése, folyóirat- és szakegyesület indítása;
- Világelső adatbázis-kezelési koncepció, SzKI-Bayer szerződés 1981-ben;
- Az első mesterséges intelligencia alkalmazásokat értetlenség fogadja, azonban USA kormányzati szervek (EPA, FDA) felkarolják, hazai befektetés;
- Az 1990-es évekre a QSAR terület kifulladásra kerül, a gyógyszerkutatás digitalizációjának éllovasává a kombinatorikus kémia válik.

# A kombinatorikus kémia digitalizációja 1990-2010

- A gyógyszerkutatás szűk kapacitása a 80-as években a szintetizált és tesztelt vegyületszám volt. GyKI példája;
- A 80-as évek végére a számítástechnika és robotizáció fejlettsége lehetővé tette, hogy betörjön a gyógyszerkutatás területére is;
- Ehhez a szerveskémia tovább fejlődésére is szükség lett. Furka Árpád (ELTE) szerepe, ld. Dormán Gy. előadása;
- Szükség volt a QSAR modellek és tapasztalatok átvételére is, a tervezést a Free-Wilson módszer, az optimalást a szekvenciális szimplex is segítette;
- A robotizáció eredményeképpen a termelékenység 2-3 nagyságrenddel fokozódott, magyar cég (Comgenex) 5 fős robotos team 5k/hónap, GYKI 5k/50 év.





# A hatóanyagszintézis és hatóanyagnyilvántartás digitalizációja

- ▶ A több tízezres, majd több százezres gyógyszerhatóanyag-adatbázisok intelligens, integrált digitalizációt követeltek meg;
- ▶ A folyamat a szintézisek megtervezésével kezdődik, ehhez egyedi, majd kereskedelmi elérésű adatbázisok integrálódtak;
- ▶ A szintézis-protokoll felépítéséhez a kiindulási és célvegyületek fizikokémiai, és kvantumkémiai jellemzése tartozik;
- ▶ Ugyanezek a paraméterek - a szintézisek kísérleti eredményével együtt - segítik a szintézis optimálását is;
- ▶ Az optimálásban kezdetben automatikus regressziószámítás, majd MVA és deep learning segített, a Prolog programokat kisebb szakértői rendszerek és a paraméterszámítás automatizálására használták.



# A logikai alapú mestereges intelligencia alkalmazása

- A gyógyszerkutatóás horizontális és vertikális dimenziói;
- A Prolog alapú programok lehetővé tették a szintetizálásra kijelölt új vegyületek metabolizmus és toxicitási előrejelzését;
- Jelentős költség- és időmegtakarítás. Környezetvédelmi és agrokémiai kiterjesztés a 90-es, 2000-es években, űrtech: 2015<;
- Az első felhő-jellegű alkalmazás: grid rendszerek. Openmolgrid - több európai ország összefogásából.

# Hazai és nemzetközi ipari áttekintés 1990-2010.

## A kombinatorikus kémiai periódus vége



- A szakterület a 90-es évek közepére kapott helyet az iparban, amely intenzíven részt vett a szakterület fejlesztésében;
- Magyarországon gyógyszeripari privatizáció, kis "biotech" cégek megjelenése, állami és uniós segítség;
- Jó indulás a szakterületen, hazai az első kombikem cég Európában, 2010 körülre jelentős szektorrá növi ki magát;
- Jó tudományos pozíció: 199-ben-ban az első európai kombikem konferencia megrendezése, folyóirat- és szakegyesület indítása (SBS, kb. 2000 fő/24);
- A mesterséges intelligencia alkalmazásokat felkarolják, az MI jelleg mélyebb megértése és kihasználása nélkül. Kínai befektetés-invázió;
- A 2010-es évek közepére a kombinatorikus irányzat felszívódik a napi gyógyszerkutatói gyakorlatban, a gyógyszerkutató digitalizációjának éllovasává a komplex laborautomatizálás és az áramlós kémia válik.

# Soros vs. párhuzamos kémia: az áramlásos kémiai megújítása: 2010-2024

- ▶ Történet: 1910-es évekre nyúlik vissza. Glaxo 70 év: régi szemlélet, hagyományos eszközök;
- ▶ Magyar feltalálók: a kombikem eszköztárának átültetése: robotizáció, optimalizálás, MI egy kis dobozban;
- ▶ Fókuszterület szerencsés kiválasztása: hidrogénezés, H-Cube. Batch: 8h, Flow: 3';
- ▶ Mintaként szolgált az egész iparágnak: hasonló készülékek tucatjai.



# Segítségnyújtás a formulációban: áramlásos nanotechnológiai formuláció


- Oldhatóság és felszívódás javítása;
- Nanoizálhatóság támogatása szakértői rendszerekkel és NN/mélytanulási algoritmusokkal;
- Közvetlenül az áramlásos gyártósorokhoz kapcsolható nanoizátorok.





# A szintézis és tesztelés integrálása, távszintetikus lehetőségek

- A 10-es évektől megjelent a szintézis, tisztítás és az analízis integrálása. Nehézségek, szakértői rendszerek;
- Ezzel egyidejűleg önoptimizáló rendszerek épültek ki. Vegyészekről gyakran megkövetelte a célfüggvény, a kiindulási paraméterek és a korlátozó feltételek definícióját, az egyszerűbb algoritmusok terjedtek el (Nelder-Mead).
- Tesztelés, tervezés és szintézis ciklusának automatizálása;
- Józan ész vs. MI: a "svájci robbanás". Célcégek tündöklése és bukása;
- Fél- és teljesen automatizált szintézis távolról.



# Tovább lépés a méretnövelés és a gyártás területére: a flottakoncepció

- Mintaigény a preklinikai és a klinikai fázisban. Ellátási kérdések;
- Méretnövelés (piloting): soros és párhuzamos lehetőségek;
- A flottakoncepció: nagyszámú párhuzamosan működő áramlásos reaktor központosított elosztott vezetéssel;
- Vezérléskomplexitási probléma. Generatív MI segíthet: komm. interface, multidiszciplináris interpretálási képesség;
- Perspektívák (USA): a felhasználás közelébe kihelyezett gyártóközpontok.

# Hazai és nemzetközi ipari áttekintés 2000-...

## Az áramlásos kémia felfutása

- ▶ A szakterület eleve ipari gyökerekből nőtt ki, a "befogadási ellenállás" kisebb volt, mint más szakterületeken;
- ▶ Magyarországon a fejlesztés eleve egy "biotech" cégből indult ki, állami és uniós segítséggel;
- ▶ Jó indulás a szakterületen, hazai a második áramlásos reaktor cég Európában, a szektor eddig is jelenetős növekedése gyorsul;
- ▶ Jó tudományos pozíció: 2004-ben-ban az első európai áramlásos konferencia megrendezése, folyóirat- (JFCh) és szakegyesület indítása (FCS, kb. 3000 fő/24);
- ▶ A mesterséges intelligencia alkalmazások háttérben maradnak. Kínai befektetés-invázió várható;
- ▶ A tavaly megkezdődött növekedés-gyorsulás motorja az eddigi laboratóriumi célú eszközök méretnövelési és termelési felhasználása.





## Záró gondolatok

- ▶ MI kitekintés: nagy fejlődés előtt állunk, tovább gyorsítja a gyógyszerkutatás fejlődését;
- ▶ Jövőre a Prolog 50 éves lesz, nagyon sok előnnyel jár majd a Prolog és a GAI házassága;
- ▶ Óriási lökést jelent majd a kvantumszámítógépek megjelenése;
- ▶ Félelem az MI-től - félelem a budapesti Villámos Vasuttól, 1897.





# Köszönetnyilvánítás:

Gyógyszeripar:

**Kisfaludy Lajos, Mészáros Zoltán, Pallos László, Náray-Szabó Gábor**

Számítástechnika:

**Szeredi Péter, Dömölki Bálint, Futó Iván**



**Köszönöm a figyelmet!**

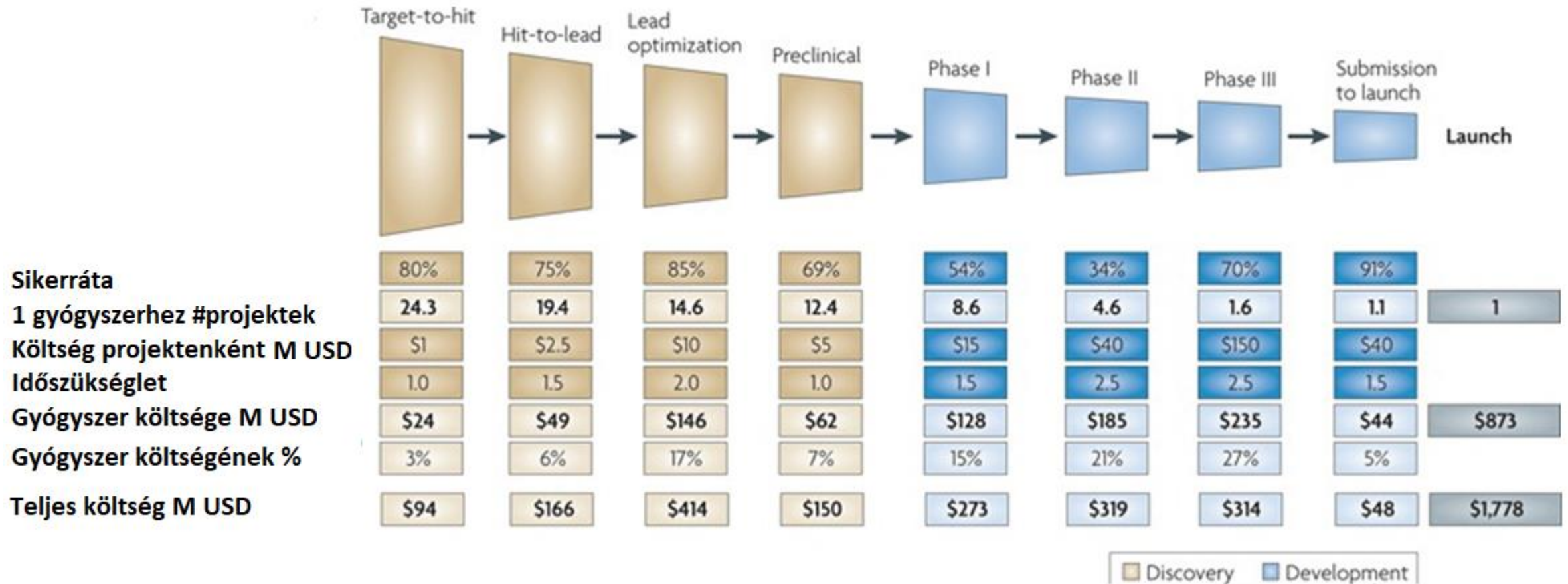
# Mesterséges intelligencia a gyógyszerkutatásban



Keserű György Miklós és Ferenczy György

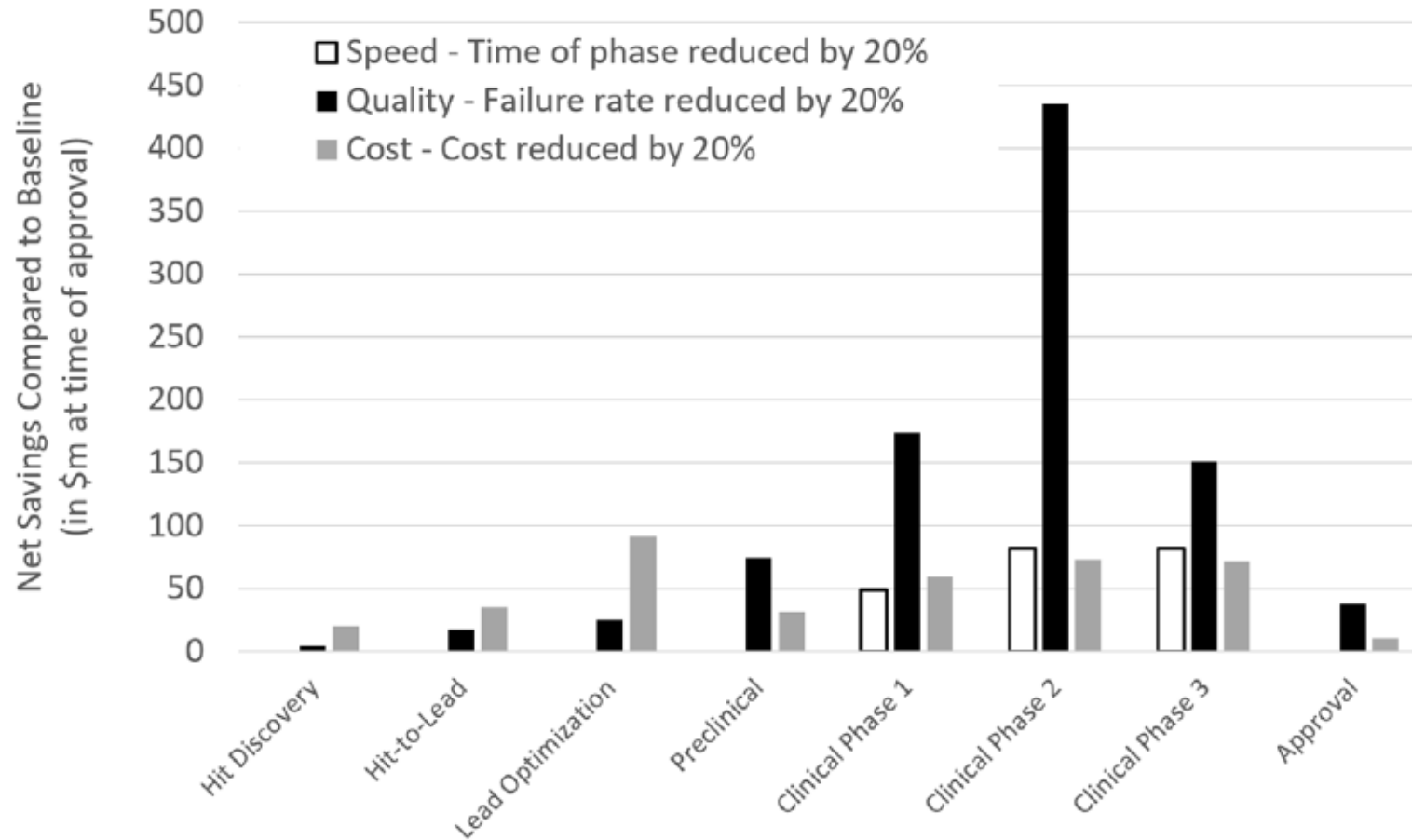
HUN-REN TTK

# A gyógyszerkutatás és fejlesztés folyamata



- Időben hosszú (13.5 év)
- Költséges (873 – 1778 M USD)
- Kockázatos (4% sikerráta)

# Hogyan javíthatunk a folyamaton?



- Költségek csökkentése ?
- Gyorsaság növelése ?
- A gyógyszerjelöltek minőségének javítása, azaz a kockázatok csökkentése !

# A kockázatcsökkentés lehetőségei

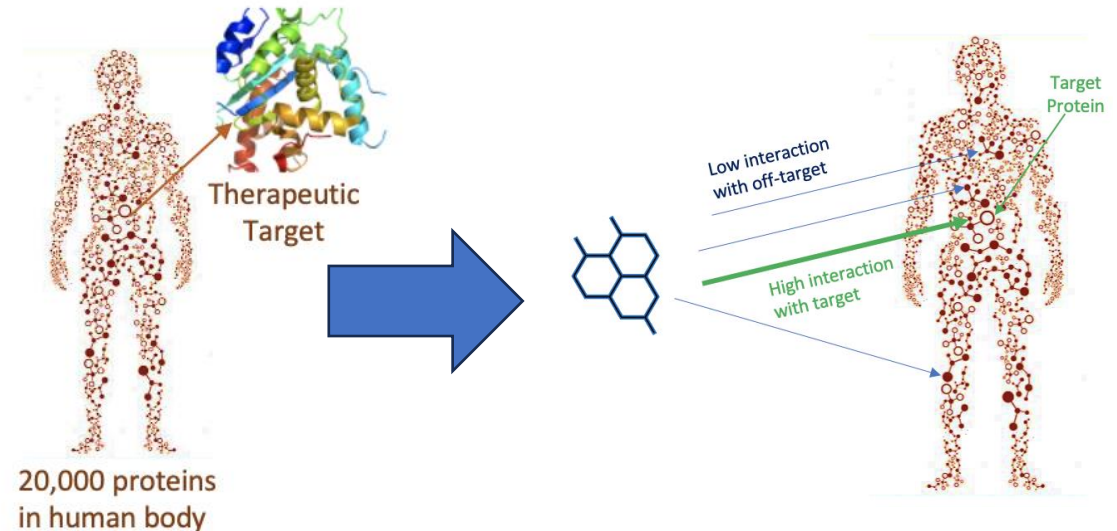
- Jobb minőségű gyógyszerjelöltek (jelenleg 4% sikerráta)
- Jobban validált gyógyszer-célpontok (jelenleg 5-10% validált)
- Jobb betegbeválasztási kritériumok (jelenleg 20-50% beválasztási veszteség)
- Jobb minőségű klinikai vizsgálatok (jelenleg 30% kiesés, 40% megfelelőség)



Jobb döntések születnek



Ehhez jobb minőségű adatok kellene



# Az adatok hozzáférhetősége

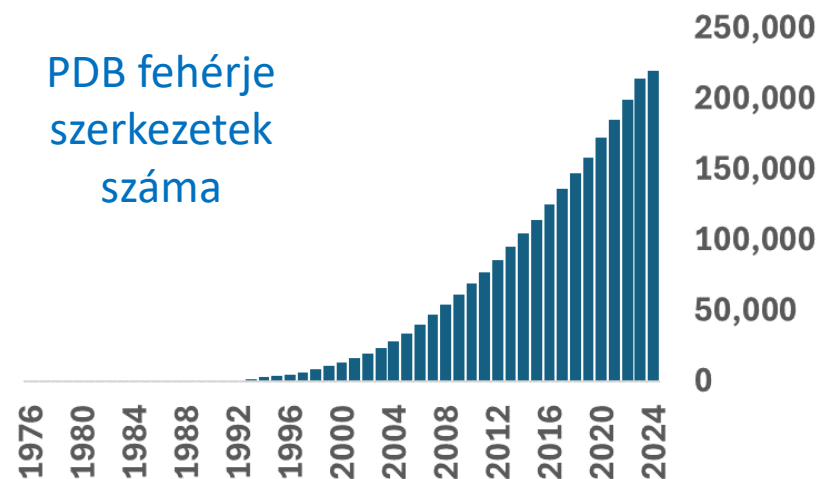
Adattípus	Adatpontok száma	Adatkészlet mérete (B)
Tesla szenzoradatok	$2 \times 10^7$	$10^{21}$
Gyógyszer szerű molekulák	$10^{63}$	
REAL gyógyszer szerű molekulák	$1.2 \times 10^9$	$10^{15}$
CAS fizikailag előállított molekulák	$2.8 \times 10^8$	
ZINC megvásárolható molekulák	$7.5 \times 10^6$	
ChEMBL biológiai adatok	$2 \times 10^7$	$10^9$
DrugBank forgalmazott gyógyszerek	13,548	
DrugMatrix genetikai adatkészlet	627	
SIDER mellékhatások	1430	
DILI gyógyszer-máj kölcsönhatások	1036	



# Adatbázisok fejlesztése és alkalmazása

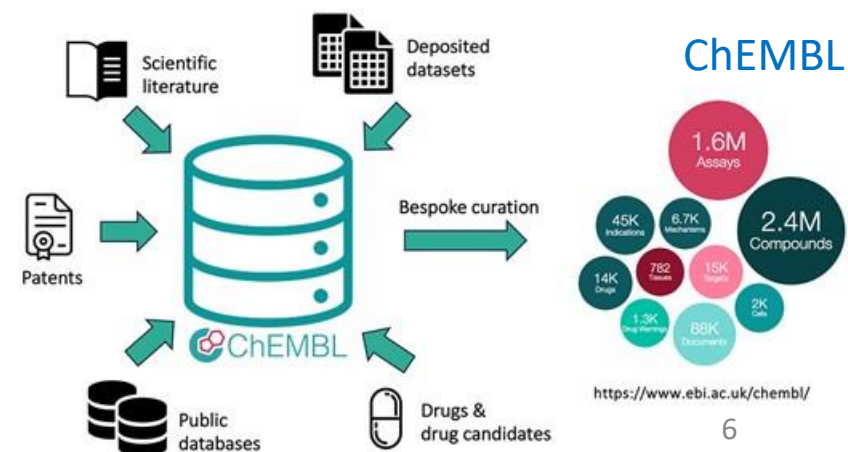
## • Adatbázisok

- PDB 1971: fehérje szerkezetek
  - >200K szerkezet 2024-ben
- CSD 1965: kis molekulák szerkezete
  - ~1300K szerkezet 2024-ben
- PubChem 2004: kémiai és biológiai adatok
  - 118,025K vegyület, 295,078K teszt 2024-ben
- ChEMBL 2008 (korábban StARlite): kémiai és biológiai adatok
  - 2400K vegyület, 1600K teszt 2024-ben



## • Adatbányászat

- Hasonló molekulák keresése
- Tulajdonságterek feltérképezése



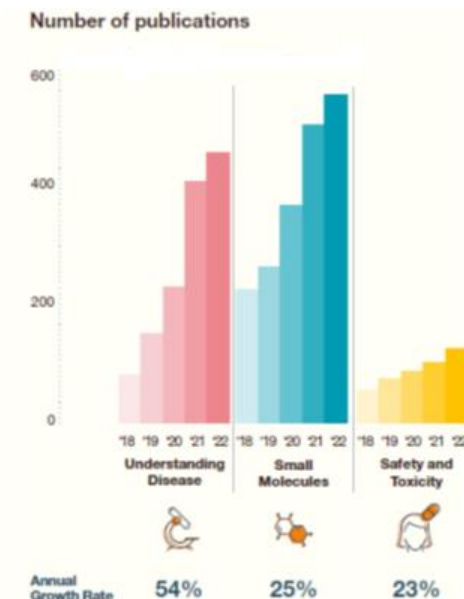
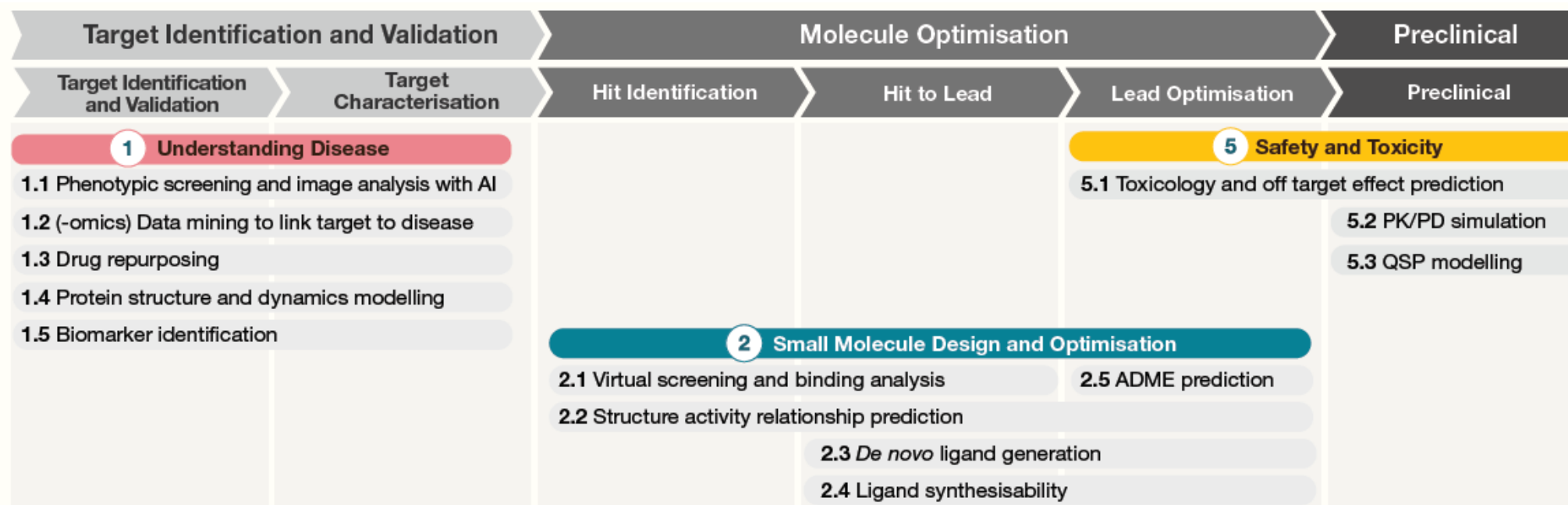
# Preklinikai MI alkalmazások

## Jobb gyógyszer-célpontok azonosítása

- Lehetséges gyógyszer-célpontok előrejelzése
- Potenciális gyógyszer-célpontok validálása

## Jobb gyógyszerjelöltek azonosítása

- Lehetséges ligandumok előrejelzése
- Ligandumok szintézisének javítása
- Ligandumok optimalálása



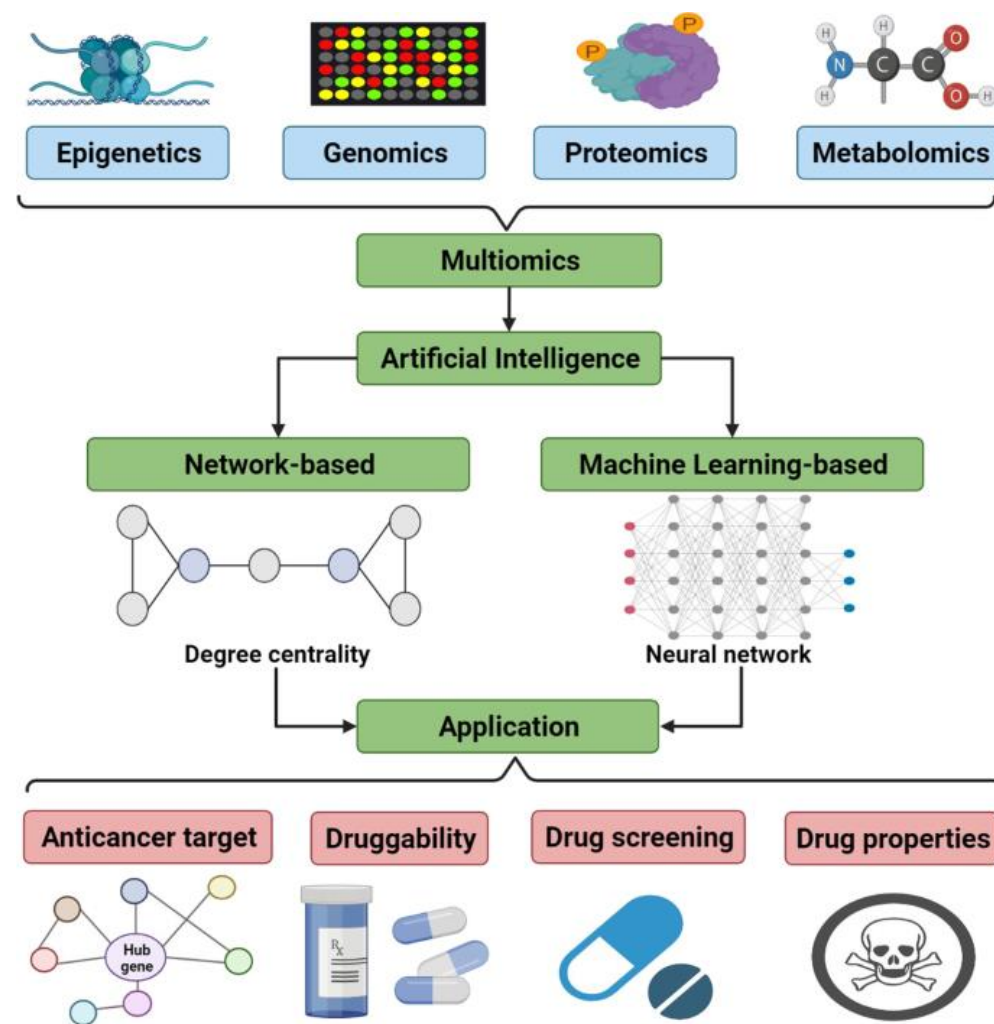
# Gyógyszercélpontok azonosítása és validálása 1.

- Célkitűzések

- Hatásmechanizmus előrejelzése
- Fenotípusos hatás előrejelzése
- In vivo PoC hatás előrejelzése

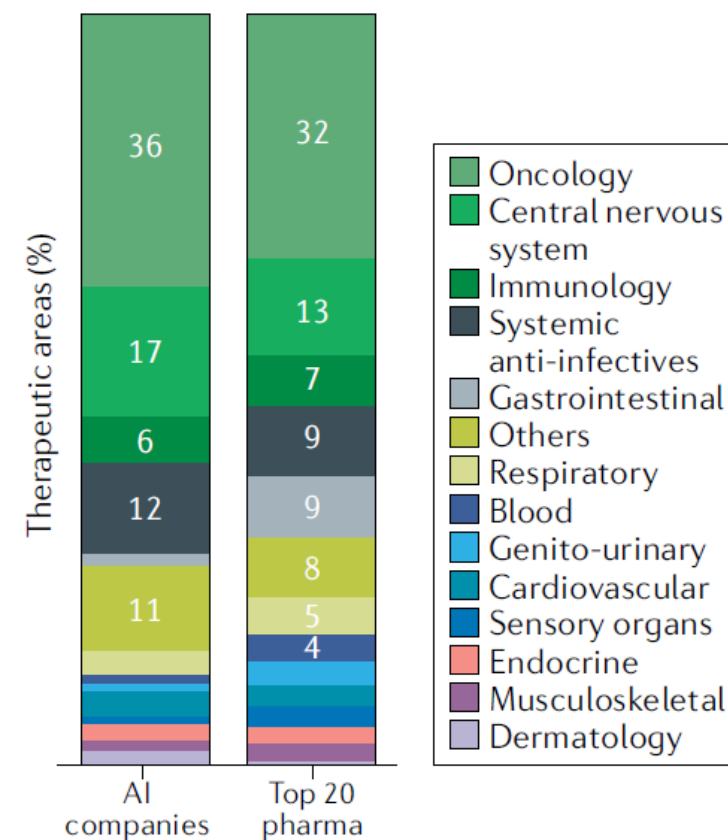
- Adatforrások

- Genome wide association studies
- Funkcionális genomikai DB
- CRISPR, siRNA, KO adatkészletek
- 3D modellekből származó adatok
- In vivo adatok



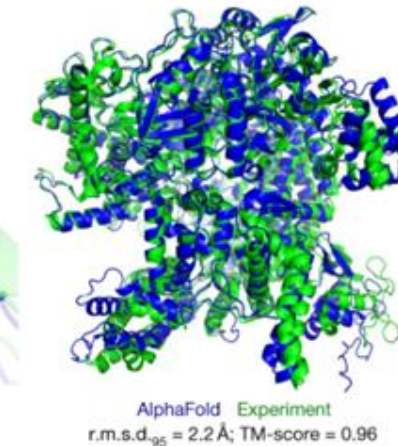
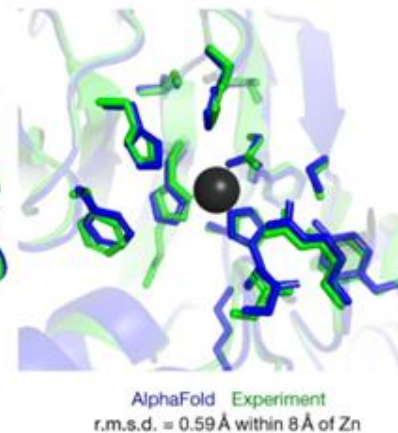
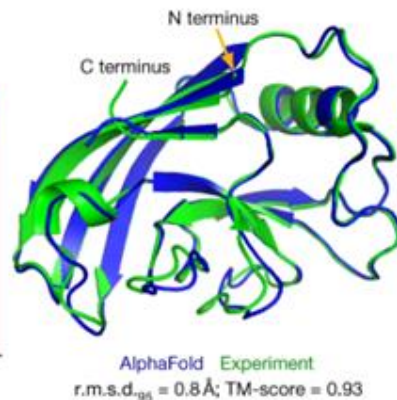
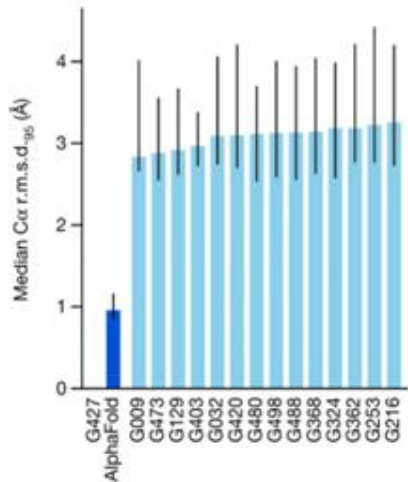
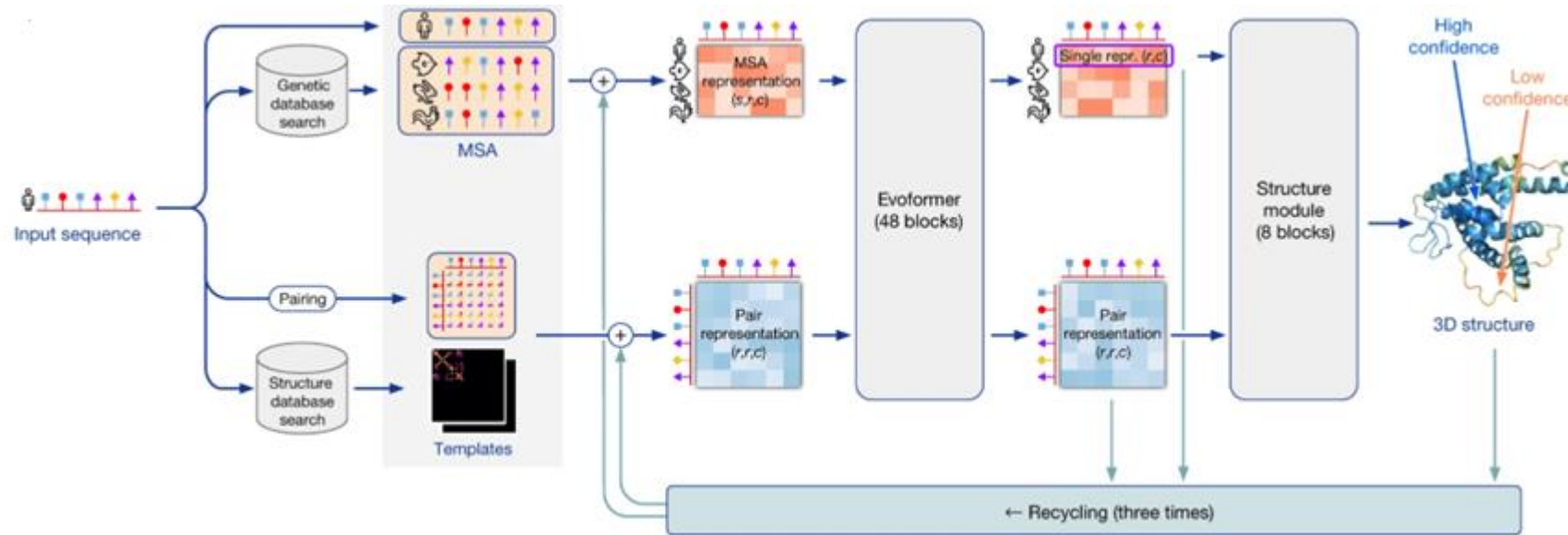
# Gyógyszercélpontok azonosítása és validálása 2.

- Előny
  - Nagyszámú kapcsolt biológiai adat
- Korlátok
  - Splice változatok, aktivációs állapot, sejt típus,...
  - Betegség – fehérje asszociáció érvényessége
- MI hatása a célpont választásra
  - Nincsen változás a domináns terápiás területekben



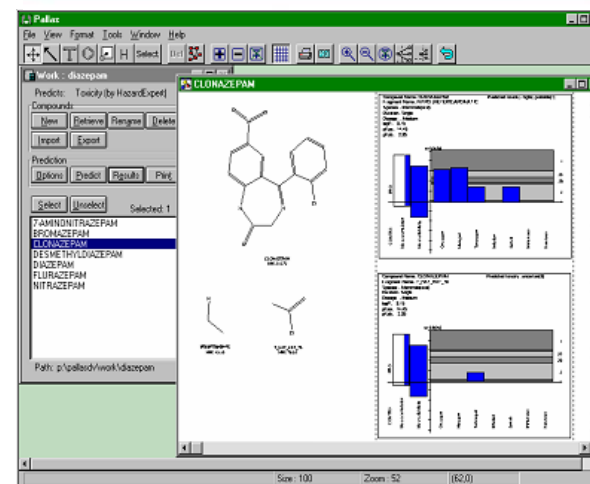
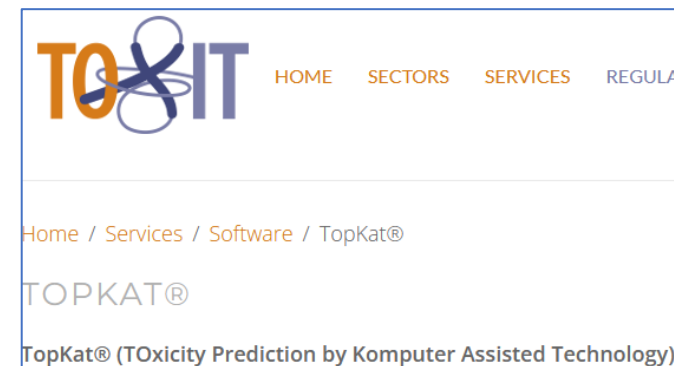
# Gyógyszercélpontok szerkezetének előrejelzése

- AlphaFold – Google DeepMind majd a funkció predikciója



# Gyógyszerjelöltek azonosítása – a kezdetek

- QSAR
  - Biológiai hatás előrejelzés
  - Hansch 1961
    - Biológiai hatás - fizikai-kémiai tulajdonságok
  - Free Wilson 1964
    - Biológiai hatás – szerkezeti paraméterek
- „Szakértői rendszerek”
  - Metabolizmus előrejelzés
    - METEOR
  - Toxicitás előrejelzése
    - DEREK, StAR, TOPKAT
  - CompuDrug '80-as évektől
    - MetabolExpert
    - HazardExpert

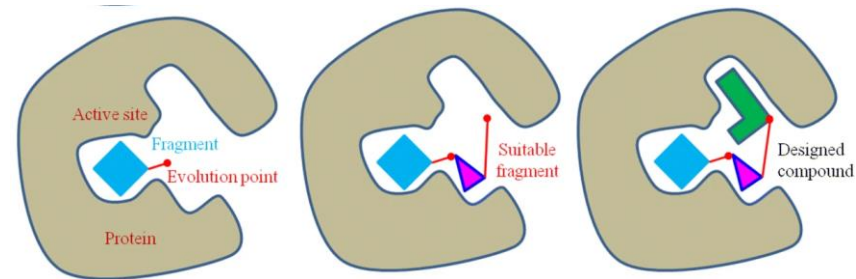


# Gyógyszerjelöltek azonosítása napjainkban

- Virtuális szűrés fehérje szerkezettel: kísérleti vizsgálatra válogatás
  - “hagyományosan:” néhány millió vegyületből
  - MI-vel támogatva: Néhány milliárd vegyületből – kémia tér ( $\sim 10^{63}$ ) lefedettsége nő

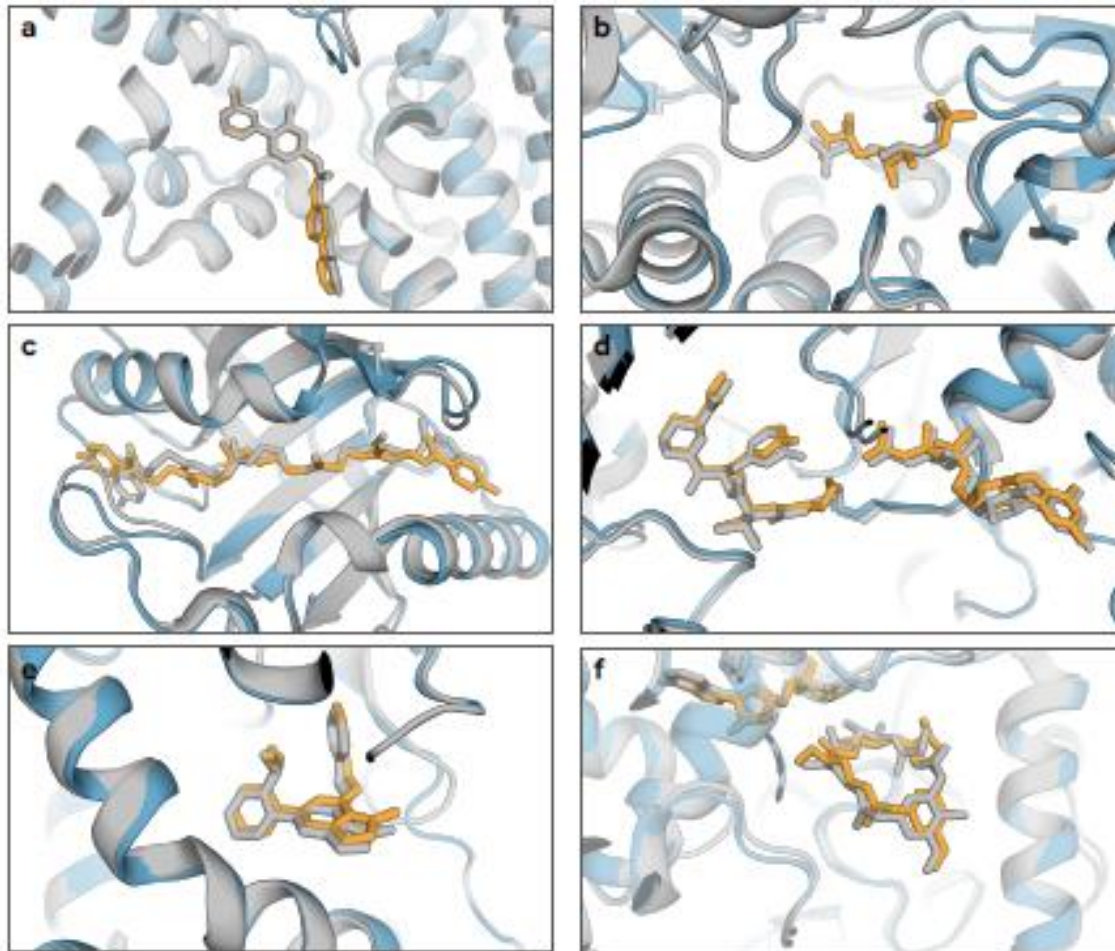


- De novo tervezés
  - Kívánt tulajdonságú vegyület keresése a kémiai térben
    - Kötődés, gyógyszeryszerűség, szintetizálhatóság

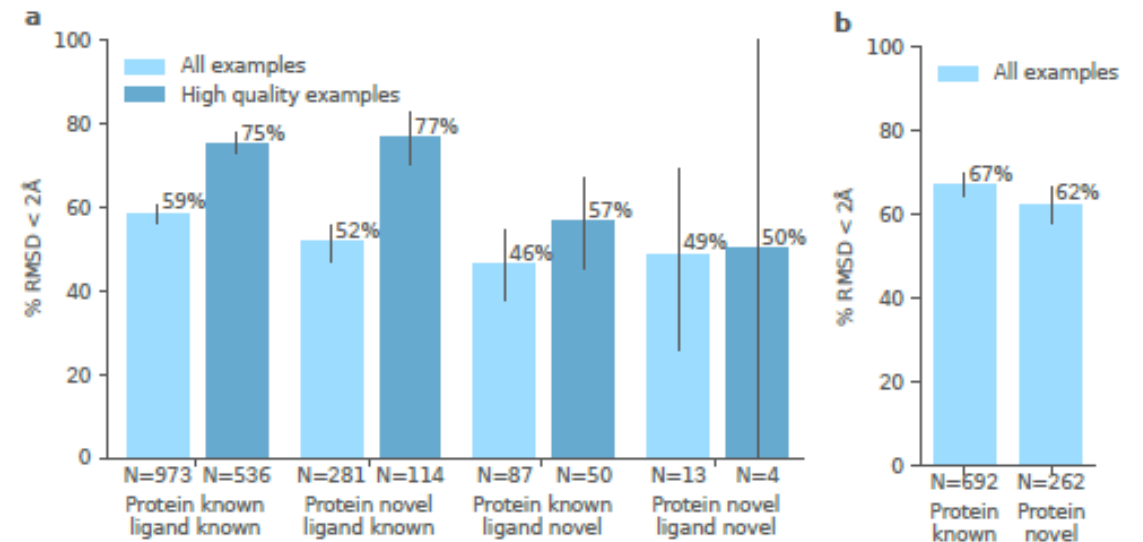


- „Repurposing”
  - Létező gyógyszer más terápiás célra

# Gyógyszerjelöltek azonosítása – a jövő



AlphaFold 3.0





# Gyógyszerjelöltek optimalizálása

In vitro modell	In vivo
Aktivitás a célfehérjén	Hatékonyságot farmakokinetika modulálja
Fizikai-kémiai tulajdonságok	Befolyásolja az abszorpciót, metabolizmust, ...
Farmakokinetikai modellek: mikroszomális stabilitás, CYP gátlás,..	Részben tükrözik szövetek és szervek komplex válaszát
Toxicitás: hERG, DILI, Ames,...	Terápiás index

- Az in vitro modellek végpontjainak előrejelzése MI-vel javítható
- Az előrejelzés hasznossága a modellek relevanciájától függ

# Az optimálás gyakorlata

- Többdimenziós optimálási feladat
- Az ADMET optimálás összetett folyamat
  - Enzimek, transzporterek, utak, szervek
  - Kor, nem, genetika, egészségi állapot
- Adatok:
  - in vivo - kevés
  - In vitro – releváns modell?
  - Feltételes (dózis függő, ...)
  - Nem homogén
  - Részben publikus
  - Lokális modellek állíthatók fel
  - Eloszlás ismeretlen, extrapolálás bizonytalan
- Validálás, előrejelzés kérdéses

## Optimálandó tulajdonságok

Hatás

Mellékhatás

Felszívódás (A)

Eloszlás (D)

Metabolizmus (M)

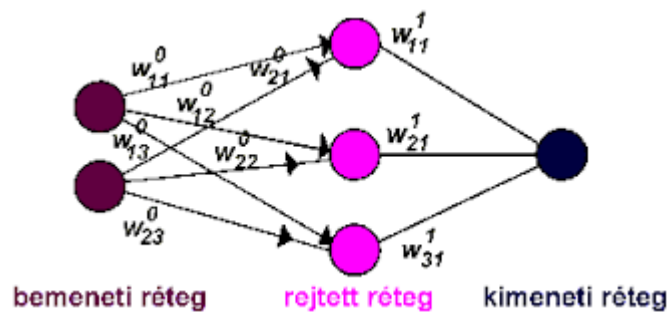
Kiürülés (E)

Toxicitás (T)

...

# Példa: Központi idegrendszeri aktivitás előrejelzés

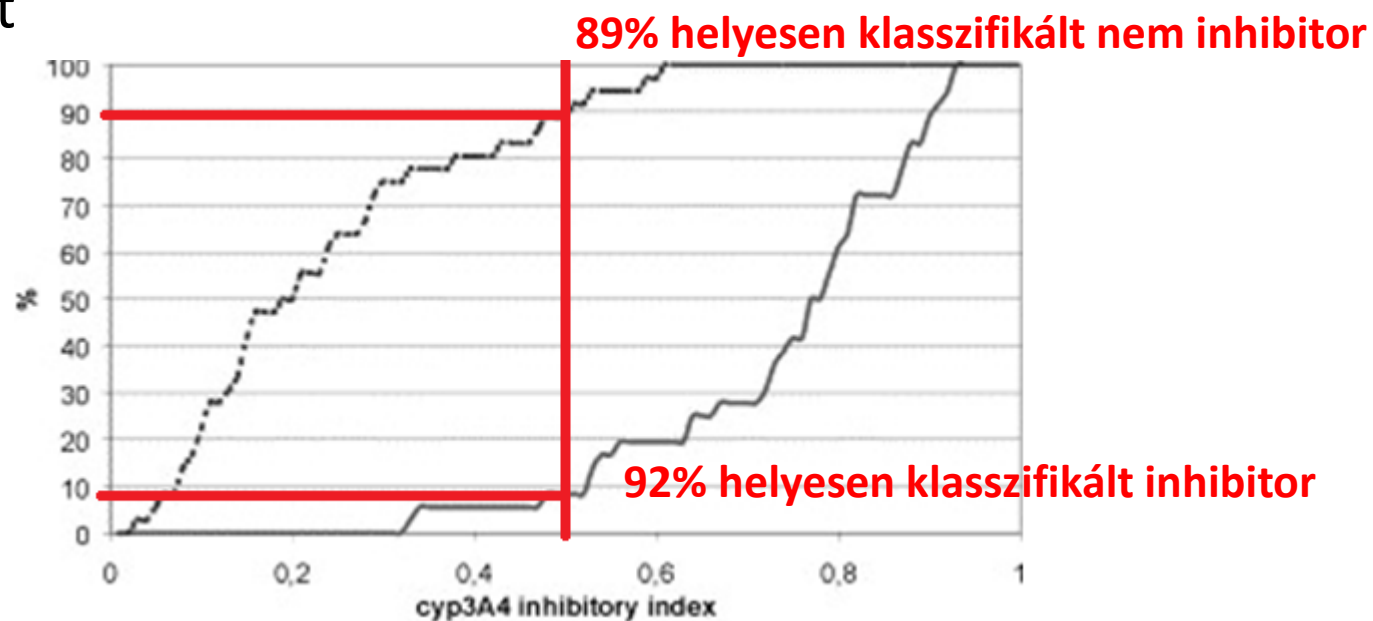
- Központi idegrendszeri (CNS) aktivitás – vér- agy gát áthaladás
- Előrecsatolt neurális hálózat (992x31x1) a CNS aktív vegyületek azonosítására
- Molekula reprezentáció: ujjlenyomat
- Molekula hasonlóság alapú előrejelzés nem hatékony
- Tanító készlet: 3500 molekula
- Teszt készlet: 3500 molekula
- Tanítás
  - hiba-visszaterjesztés
  - 2000 ciklus
  - Tanítási ráta: 0,2



CNS aktivitás	Előrejelző képesség (%)
Antidepresszáns	87,5
Hányáscsillapító	81,3
Antipszichotikum	90,4
Anxyolitikum	81,6
Dopaminerg	98,2
Muskarinerg	96,2
Szerotoninerg	93,0
<b>Összesen</b>	<b>89,9</b>

# Példa: Citokróm P450 inhibitor azonosítás

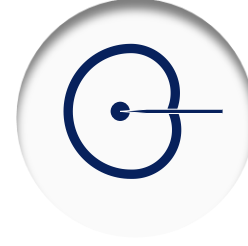
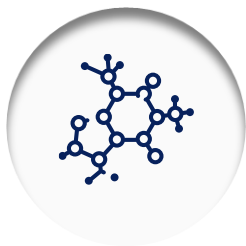
- Citokróm P450 3A4 inhibitor – gyógyszer-gyógyszer kölcsönhatásért felelős
- Előrecsatolt neurális hálózat (992x31x1) az inhibitorok azonosítására
- Molekula reprezentáció: ujjlenyomat
- Tanító készlet: 109 molekula
- Teszt készlet: 36 molekula
- Tanítás
  - hiba-visszaterjesztés
  - 2000 ciklus
  - Tanítási ráta: 0,2



- 92% helyesen klasszifikált inhibitor
- 89% helyesen klasszifikált nem inhibitor

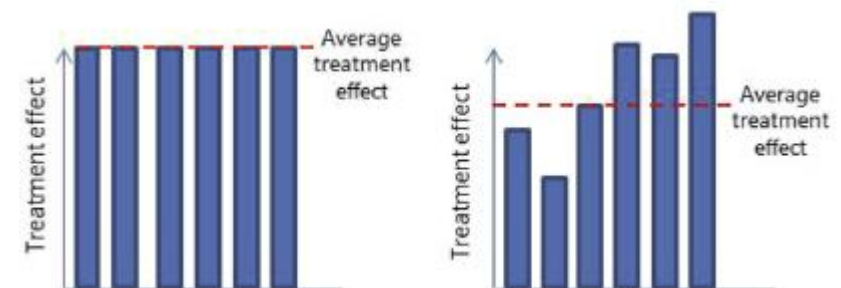
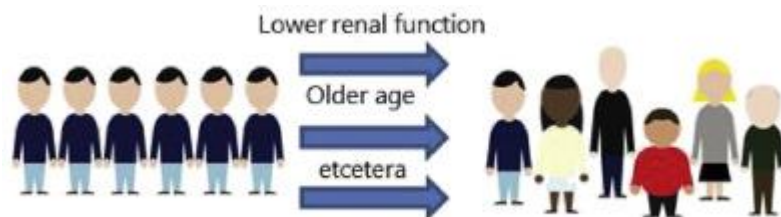
# A preklinikai MI módszerek korlátai

- A ligandumok lehetséges kölcsönhatását nem csak a gyógyszercélponttal, hanem minden lehetséges kölcsönható partnerrel kellene előre jelezni (fehérje, RNS, DNS stb.)
- A gyógyszercélpont expressziójának lokalizációját és esetleges változását is figyelembe kellene venni
- A ligandumoknak el kell jutniuk a hatás helyére, ezért in vivo PK előrejelzés is szükséges lenne



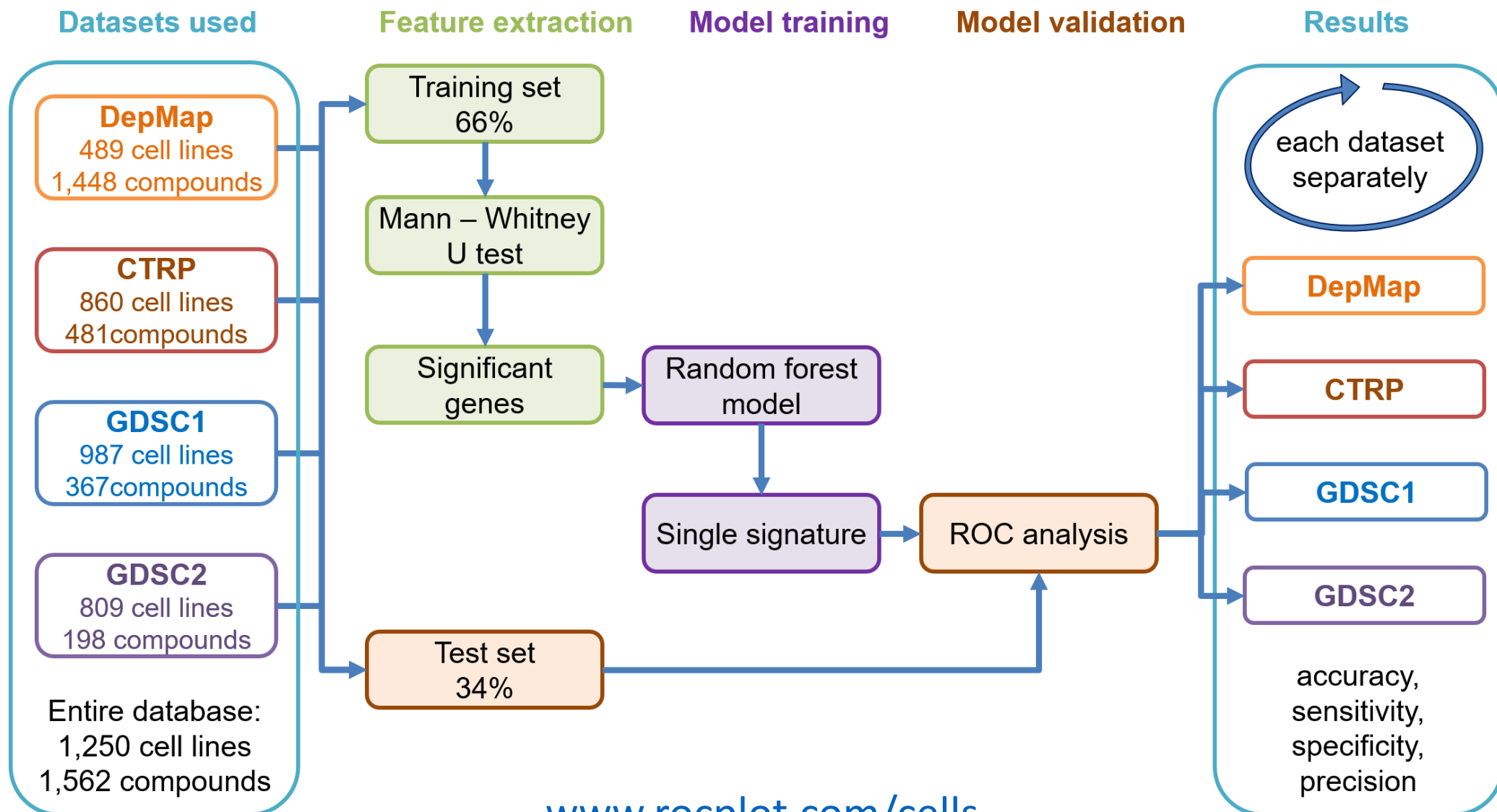
# Klinikai AI alkalmazások

- Célkitűzések
  - Jobb betegbeválasztási kritériumok
  - Jobb minőségű klinikai vizsgálatok
- A rendelkezésre álló klinikai adatok mennyisége nem elégséges
- A klinikai adatok hozzáférhetősége sokszor nem biztosított
- A klinikai adatok megbízhatósága és reprodukálhatósága sokszor kérdéses
- A valós kezelési körülmények között keletkező adatok gyűjtése nem megoldott, minősége, megbízhatósága, standardizáltsága és struktúráltsága kérdéses





# Gépi tanulás génlistákkal: melyik tumor lesz érzékeny a kezelésre

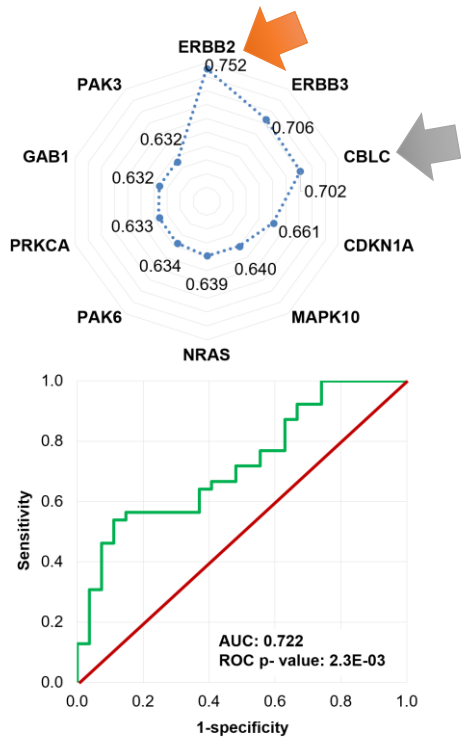


[www.rocplot.com/cells](http://www.rocplot.com/cells)

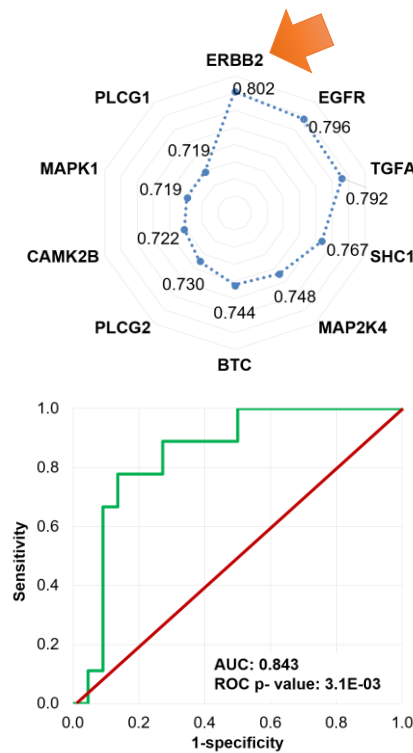
# Érzékenység Trastuzumab kezelésre – ERBB2



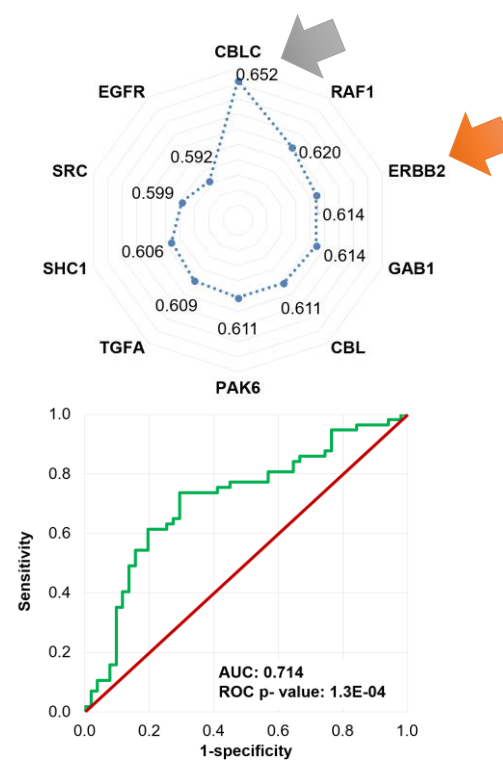
## DepMap



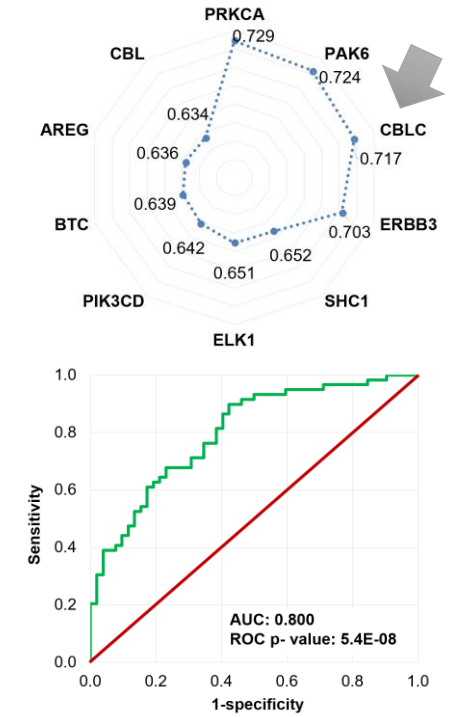
## GDSC1



## GDSC2



## CTRP

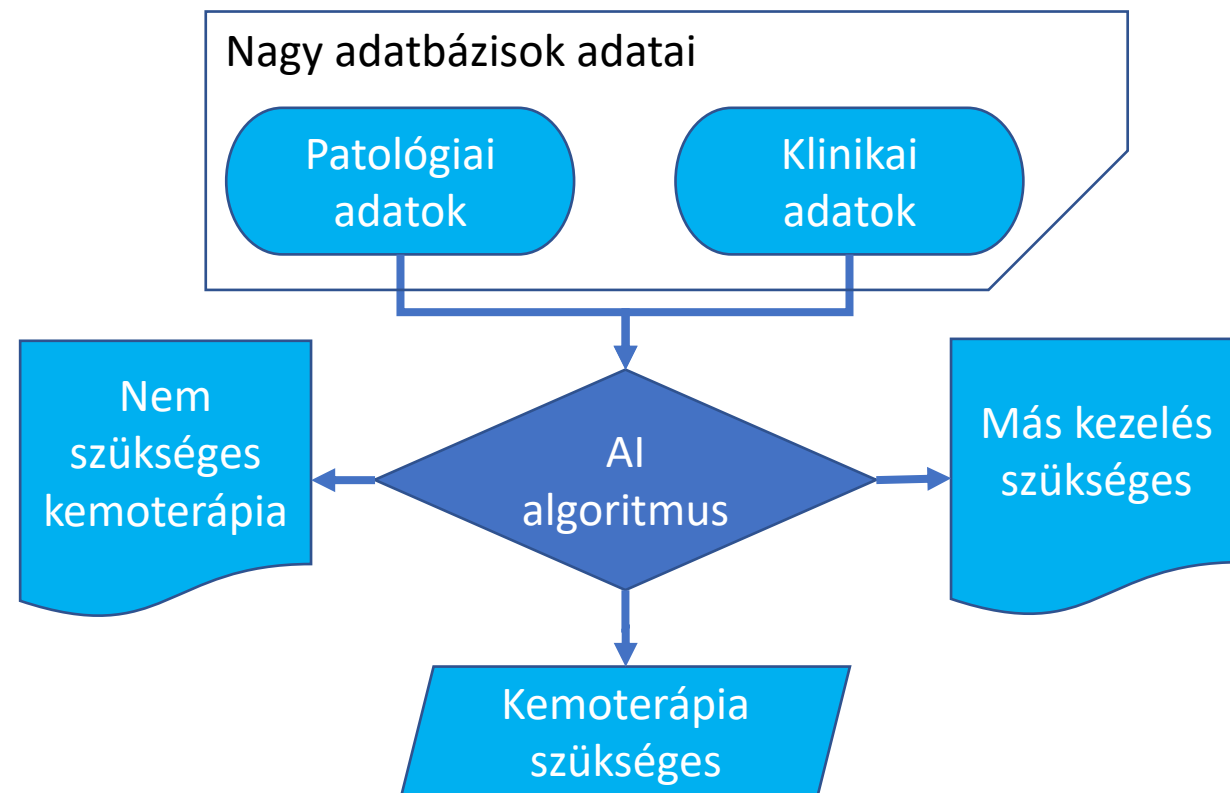




# Leghatékonyabb kezelés kiválasztása



**Cél:** Egy olyan MI modell felállítása, amely emlőtumor esetén személyre szabott túlélési és kezelési becslést tud adni ismert **klinikai és patológiai adatok** alapján.



# ADATBÁZIS



SEER adatbázis  
(2000 utáni betegek)



Nyers adat  
Változók: 39

Sor: **1,154,395**



Feldolgozott adatok

Változók :21

Beteg: **1,026,409**

Kor < 18  
N= 53

Túlélés  
hossz= 0  
N=14,948

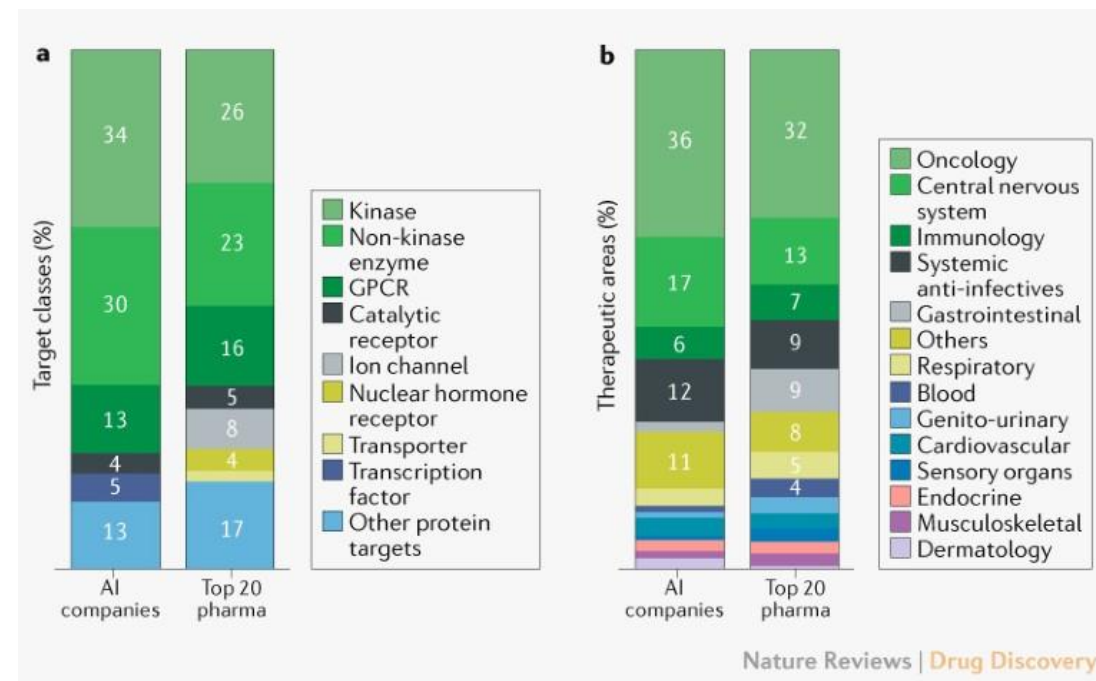
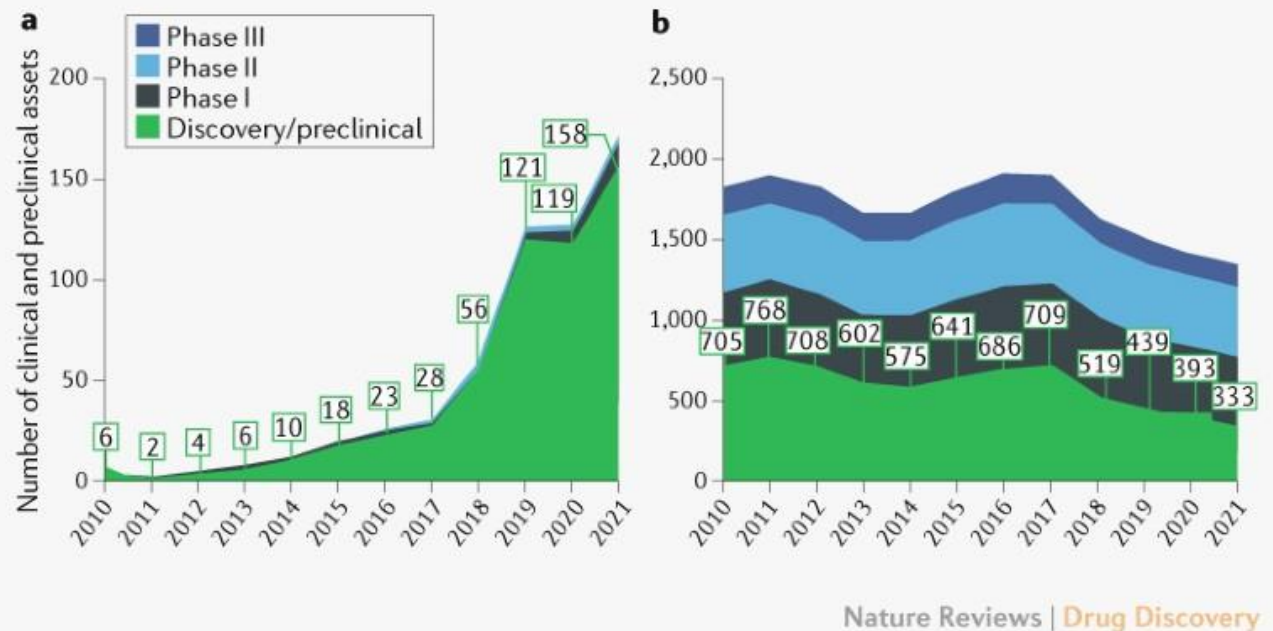
Túlélés flag,  
hiányos dátumok  
N= 60,988

Duplikátumok  
N= 59,369

kizárva

Kombinált változók	Eredeti változók
STAGE	4
SIZE	3
GRADE	3
T	4
M	4
5	18

# Mit mutat a valóság?



- Az MI módszerek jelenlegi alkalmazása gyógyszerfejlesztésben
  - Elsősorban a preklinikai szakaszra korlátozódik
  - A legtöbb esetben onkológiai és immunológiai indikációkban ismertebb célpontokon
- MI alapon fejlesztett gyógyszerek a klinikán
- Mi alapon fejlesztett gyógyszer nincsen a piacon

# Összefoglalás

- A ma AI-nak nevezett eszközök (gépi tanulás, mélytanulás, mesterséges ideghálózatok, stb.) már évtizedek óta rendelkezésre állnak, ezeket jelenleg is óriáscégek fejlesztik
- Az érdemi használathoz nagy mennyiségű és jó minőségű adatra van szükség
- Ez jelenleg csak a gyógyszerfejlesztés korai stádiumában áll rendelkezésre
  - Nagyszámú adat in vitro modellekre
  - MI eszközökkel az in vitro modellek végpontjainak előrejelzése javítható
- Ezért helyesebb ligandum fejlesztésről mintsem gyógyszerfejlesztésről beszélni



# Összefoglalás

- Ugyanakkor viszont a fejlődés iránya egyértelmű: az AI alkalmazások előtt nyitva az út, amint megfelelő mennyiségű és minőségű hozzáférhető adat lesz
  - Preklinika: Releváns végpontok és kísérleti modellek alkalmazása
  - Klinika: EESZT, Nemzeti Rákregiszter, ELIXIR nemzetközi adatbázisfejlesztések
- Ezért ma a legfontosabb feladat az adatforrások konszolidációja

