

UPORABNOST UMETNE INTELLIGENCE V SODOBNI FITOTERAPIJI

USABILITY OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN MODERN PHYTOTHERAPY

AVTORJA / AUTHORS:

viš. znan. sod. dr. Rade Injac, mag. farm.

izr. prof. dr. Nina Kočevar Glavač, mag. farm.

*Univerza v Ljubljani, Fakulteta za farmacijo,
Aškerčeva 7, 1000 Ljubljana*

NASLOV ZA DOPISOVANJE / CORRESPONDENCE:

E-mail: nina.kocevar.glavac@ffa.uni-lj.si



1 UVOD

Umetna inteligenca je področje računalništva, ki se ukvarja z razvojem sistemov, sposobnih opravljati naloge, ki obi-

POVZETEK

Integracija umetne inteligence v sodobno fitoterapijo nadgrajuje tradicionalne pristope proučevanja zdravilnih rastlin, saj ponuja napredna orodja za njihove raziskave, razvoj in klinično uporabo. Umetna inteligenca omogoča hitro in zanesljivo identifikacijo rastlinskih vrst, analizo bioaktivnih spojin, napovedovanje terapevtskih učinkov ter optimizacijo formulacij za ciljno usmerjene terapije. Razvija se tudi na področju personalizacije fitoterapije, katere cilj je z individualnim prilagajanjem zdravljenja glede na genetske, presnovne in okoljske dejavnike posameznika zagotoviti optimalen načrt zdravljenja oz. obravnave. Kljub nedvomnim prednostim pa se umetna inteligenca sooča tudi z izzivi, kot so neustrezna kakovost vhodnih in izhodnih podatkov, potreba po interdisciplinarnem sodelovanju ter etične in regulativne omejitve, ki trenutno njeno uporabo omejujejo. V članku naslavljamo ključne točke integracije umetne inteligence v sodobno fitoterapijo.

KLJUČNE BESEDE:

bioaktivne spojine, fitoterapija, umetna inteligenca, zdravilne rastline

ABSTRACT

The integration of artificial intelligence into modern phytotherapy enhances traditional approaches to the study of medicinal plants and provides advanced tools for their research, development and clinical application. Artificial intelligence facilitates the rapid and reliable identification of plant species, the analysis of bioactive compounds, predicts their therapeutic effects and optimises formulations for targeted treatments. Artificial intelligence also improves personalisation in phytotherapy by tailoring interventions to individual genetic, metabolic and environmental factors. Despite its undisputed benefits, artificial intelligence also faces challenges such as the insufficient quality of input and output data, the need for interdisciplinary collaboration, and ethical and regulatory issues that currently limit its use. In this article, we address the key points of integrating artificial intelligence into modern phytotherapy.

KEY WORDS:

artificial intelligence, bioactive compounds, medicinal plants, phytotherapy

čajno zahtevajo človeško inteligenco. Sem spadajo sposobnosti, kot so učenje, sklepanje, reševanje problemov, zaznavanje okolja in razumevanje naravnega jezika (1). Najstarejši zgodovinski mejnik razvoja umetne inteligence sega v petdeseta leta prejšnjega stoletja, ko je Alan Turing predstavil znameniti Turingov test, ki preverja, ali lahko stroj posnema človeško razmišljanje. Med odmevnejšimi preboji je tudi šahovski dvoboj iz leta 1997, ko je superračunalnik z imenom Deep Blue prvič premagal svetovnega prvaka Garija Kasparova. V zadnjih letih smo priča izjemnemu razmahu uporabe umetne inteligence v številnih gospodarskih sektorjih, medicini, izobraževanju itd., vključno z uporabo generativne umetne inteligence, ki je postala dostopna širši javnosti (1).

Sodobna fitoterapija je področje znanosti, ki raziskuje zdravilne rastline in njihove bioaktivne spojine, njihove mehanizme delovanja, učinkovitost in varnost za uporabo v medicinske namene ter temelji na izsledkih farmakoloških in kliničnih raziskav. V svojem ožjem, uporabnem pomenu pa definicija sodobne fitoterapije vključuje t. i. na dokazih temelječo uporabo rastlinskih pripravkov, vključno z zdravili rastlinskega izvora, pogosto kot del celostne obravnave bolezenskih stanj (2, 3).

Sodobno fitoterapijo je v zadnjem desetletju revolucionarno spremenila vključitev umetne inteligence, saj ponuja nove rešitve in izboljšuje učinkovitost tega področja tako na ravni bazičnih in kliničnih raziskav kot tudi na ravni izdelave zdravil in drugih pripravkov rastlinskega izvora (slika 1). V članku predstavljamo ključna področja, kjer umetna inteligenca povečuje uporabnost sodobne fitoterapije, in sicer prepo-

znavanje in razvrščanje rastlin, fitokemijsko karakterizacijo, napovedovanje terapevtskih učinkov in interakcij, personalizirano fitoterapijo, optimizacijo pridelave in žetve zdravilnih rastlin ter področje raziskav in razvoja.

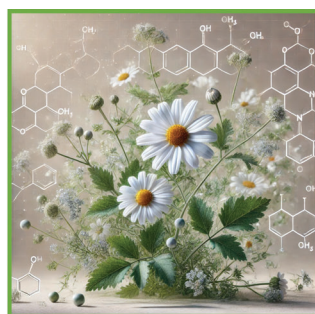
2 PREPOZNAVANJE IN RAZVRŠČANJE RASTLIN

Tradicionalne metode, kot so morfološke, anatomske in genetske analize, so bile dolgo časa osnova za proučevanje rastlinskih vrst. Vendar pa so te metode časovno potratne in zahtevajo visoko raven strokovnega znanja. Z vključevanjem umetne inteligence te omejitve hitro premagujemo in povečujemo zanesljivost in učinkovitost prepoznavanja in razvrščanja rastlin (4–6).

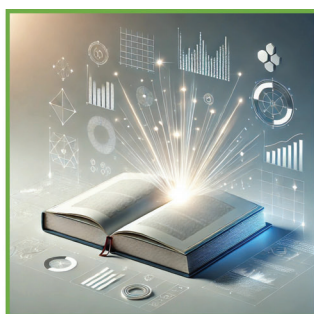
Uporaba umetne inteligence pri botanični identifikaciji temelji na algoritmih strojnega učenja in računalniškega vida, ki omogočajo analizo slik rastlin, vključno z listi, cvetovi, plodovi in drugimi morfološkimi značilnostmi. S pomočjo obsežnih podatkovnih baz slik in oznak algoritmi pridobijo sposobnost prepoznavanja različnih vrst rastlin in njihovih lastnosti (5, 6). Pri tem so še posebej učinkovite tehnike globokega učenja, kot so konvolucijske nevronske mreže (5).

Glavne prednosti uporabe umetne inteligence pri identifikaciji in razvrščanju rastlin so:

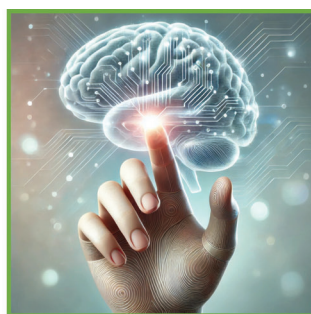
- samodejna prepoznavna vrst: umetna inteligenca analizira slike rastlin in določi pripadajočo vrsto (5);



RASTLINE IN SPOJINE



ZNANJE IN PODATKI



ANALIZA



KONČNA UPORABA

Slika 1: Shematska predstavitev uporabe umetne inteligence v sodobni fitoterapiji: od identifikacije rastlin in bioaktivnih spojin do izdelave pripravkov rastlinskega izvora in uporabe za zdravljenje. Sliko smo ustvarili z umetno inteligenco DALL·E 3 (OpenAI).

Figure 1: Schematic representation of the use of artificial intelligence in modern phytotherapy: from the identification of plants and bioactive compounds to the manufacturing of herbal preparations and treatment. Image was generated with artificial intelligence DALL·E 3 (OpenAI).

- razvrščanje na osnovi genetskih podatkov: algoritmi obdelujejo genomske sekvence za razvrščanje rastlin in določijo njihovo evolucijsko sorodstvo (7);
- mobilne aplikacije za široko uporabo: aplikacije, kot so PI@ntNet®, Planta® in Biodiversa®, omogočajo uporabo enostavno prepoznajo rastline s fotografiranjem s pametnim telefonom.

Umetna inteligenca ima velik potencial zlasti v deželah, kot je Slovenija, kjer bogata biotska raznovrstnost zahteva oz. omogoča raznolike raziskave in stalno spremljanje rastlinskih sestojev. Botanični raziskovalci lahko z uporabo teh tehnologij izboljšajo kartiranje rastlinskih vrst, spremljanje invazivnih vrst in analizo ekosistemov.

Uporaba umetne inteligence pri prepoznavanju in razvrščanju rastlin je pomemben korak naprej tudi v raziskavah na področju sodobne fitoterapije, zlasti kliničnih raziskav. Kakovostna karakterizacija uporabljenega rastlinskega materiala (rastlinskih drog in rastlinskih izvlečkov) je namreč ključnega pomena za relevantnost rezultatov in kakovost raziskave.

Čeprav je tehnologija obetavna, pa prinaša tudi izzive in omejitve. Glavni so povezani z neustrezno kakovostjo podatkov (npr. nepopolne ali netočne podatkovne baze slik), omejenim dostopom do globalnih virov podatkov in potrebo po natančnejših algoritmi, ki bolje prepoznavajo tudi rastline v različnih okoljskih razmerah (5, 6). S povečanjem zanesljivosti in dostopnosti teh orodij bomo izboljšali razumevanje rastlinske raznovrstnosti, kar bo koristilo tako znanosti kot tudi ohranjanju narave.

3 ANALIZA RASTLINSKIH BIOAKTIVNIH SPOJIN IN FITOKEMIJSKA KARAKTERIZACIJA

Bioaktivne spojine iz rastlin, v angleškem izrazoslovju znane tudi kot fitokemikalije, so produkti rastlinskega metabolizma, ki izražajo pomembne farmakološke učinke. Rastlinske bioaktivne spojine imajo ključno vlogo tudi pri raziskavah na področjih farmacije in medicine, prehrane in kozmetike (7–9). Tradicionalne metode za njihovo analizo, kot so kromatografske in spektroskopske metode, predstavljajo temelj fitokemijske karakterizacije rastlinskega materiala, vendar zahtevajo veliko časa, specializirane opreme in strokovnega znanja (6). Sodobni pristopi, ki vključujejo umetno inteligenco, obetajo znatno izboljšanje učinkovitosti in zanesljivosti teh postopkov (8).

Uporaba umetne inteligence pri fitokemijski karakterizaciji temelji na algoritmi strojnega učenja in globokega učenja, ki omogočajo hitro obdelavo in analizo velikih količin podatkov. Spektralni podatki, pridobljeni s tehnikami, kot sta tekočinska kromatografija, sklopljena z masno spektrometrijo (LC-MS), in jedrska magnetna resonanca (NMR), se lahko obdelajo z umetno inteligenco za identifikacijo in razvrščanje spojin ter napovedovanje njihove bioaktivnosti (9).

Prednosti uporabe umetne inteligence vključujejo (8, 9):

- samodejno prepoznavanje bioaktivnih spojin: algoritmi hitro analizirajo spektre in predlagajo strukture spojin na podlagi primerjave s spojinami iz podatkovnih baz;
- napovedovanje bioaktivnosti: na osnovi molekulskih struktur modeli umetne inteligence napovejo terapevtski potencial spojin;
- optimizacija raziskovalnih procesov: algoritmi omogočajo zmanjšanje časa in stroškov, povezanih z analizami.

Pri uporabi umetne inteligence za vrednotenje rastlinskih bioaktivnih spojin je pomembno opozoriti na izzive, kot so kakovost vhodnih podatkov, omejen dostop do obsežnih podatkovnih baz in potreba po interdisciplinarnem pristopu med znanstveniki (8).

4 NAPOVEDOVANJE TERAPEVTSKIH UČINKOV BIOAKTIVNIH SPOJIN

Bioaktivne spojine iz rastlin imajo velik potencial za razvoj novih zdravil in terapevtskih strategij. Zaradi njihove kemijske raznolikosti in kompleksnosti je raziskovanje njihovih terapevtskih učinkov zahtevno in dolgotrajno. Umetna inteligenca pa prinaša nove priložnosti za hitrejše in natančnejše napovedovanje njihovega biološkega delovanja in terapevtskega potenciala (10–12).

Umetna inteligenca uporablja algoritme strojnega učenja, ki obdelujejo obsežne podatkovne baze molekulskih struktur in profilov bioaktivnosti. Ti algoritmi identificirajo vzorce in odnose med kemijskimi lastnostmi spojin in njihovimi terapevtskimi učinki. Med ključne tehnologije spadajo globoko učenje, molekulsko modeliranje in simulacije interakcij med ligandi in tarčnimi beljakovinami (10–12).

Prednosti uporabe umetne inteligence pri napovedovanju terapevtskih učinkov bioaktivnih spojin so:

- hitro presejanje spojin: algoritmi analizirajo na tisoče bioaktivnih spojin in prednostno razvrstijo tiste z največjim terapevtskim potencialom (10);

- napovedovanje mehanizmov delovanja: umetna inteligenca omogoča simulacijo interakcij spojin z biološkimi tarčami, kar pomaga razumeti njihovo delovanje na molekularni ravni (11);
- odkrivanje novih terapevtskih indikacij: algoritmi predlagajo nove uporabe za že znane rastlinske zdravilne učinkovine (12).

Med ključnimi izzivi teh pristopov velja izpostaviti potrebo po dostopu do kakovostnih podatkovnih baz, pomanjkanje standardizacije rastlinskega materiala in potrebo po validaciji napovedovanja na podlagi eksperimentalnih podatkov (12, 13).

5 PERSONALIZIRANA FITOTERAPIJA

Kot velja za klasične (pol)sintezne zdravilne učinkovine, se lahko odziv posameznika močno razlikuje tudi pri učinkovinah v pripravkih rastlinskega izvora zaradi genetskih, presnovnih in okoljskih dejavnikov. Umetna inteligenca se intenzivno razvija tudi na tem področju in odpira priložnosti uporabe personalizirane fitoterapije, ki temelji na prilagajanju zdravljenja specifičnim potrebam posameznika (13–15). Kako umetna inteligenca omogoča personalizirano fitoterapijo? Umetna inteligenca uporablja podatke, kot so genomski profil, anamneza, prehranjevalne navade in življenjski slog, na podlagi katerih oblikuje optimalen načrt zdravljenja oz. obravnave. Algoritmi strojnega učenja pri tem analizirajo velike količine podatkov in iščejo vzorce, ki povezujejo rastlinske bioaktivne spojine s posameznikovimi potrebami (13).

Prednosti uporabe umetne inteligence v personalizirani fitoterapiji so (13–15):

- individualiziran pristop: na podlagi podatkov o genih in metabolizmu posameznika umetna inteligenca priporoči rastlinske bioaktivne spojine oz. zdravilne učinkovine, ki bodo najbolj učinkovite;
 - optimizacija odmerkov: algoritmi prilagodijo odmerke rastlinskih pripravkov glede na posameznikove značilnosti v presnovi ali morebitne interakcije z drugimi zdravili;
 - prepoznavanje kontraindikacij: umetna inteligenca identificira možne alergijske reakcije in druge neželene učinke.
- Poleg izzivov zbiranja kakovostnih podatkov in integracije različnih podatkovnih virov nas umetna inteligenca v personalizirani fitoterapiji postavlja tudi pred izzive etičnih in

regulativnih vprašanj, kot so varovanje osebnih podatkov ter pridobivanje soglasij in pristranskost algoritmov v primeru deležnikov (npr. podjetij), ki prispevajo svoje podatke (13, 16).

Vključevanje umetne inteligence v razvoj personalizirane fitoterapije ima trenutno največji potencial zlasti v državah, kjer ima fitoterapija dolgo tradicijo uporabe v tradicionalni ali sodobni medicini.

6 NAPOVEDOVANJE INTERAKCIJ

Interakcije med klasičnimi zdravili in pripravki oz. zdravili rastlinskega izvora (17–19) so pomemben vidik varne uporabe fitoterapije zlasti pri pacientih, ki uporabljajo več zdravil oz. pripravkov hkrati. Rastline vsebujejo številne bioaktivne spojine, ki lahko vplivajo na farmakokinetiko (absorpcijo, porazdeljevanje, metabolizem, izločanje) in farmakodinamiko (mehanizme delovanja) zdravil. Umetna inteligenca omogoča napovedovanje teh interakcij, kar prispeva k zmanjšanju tveganj in izboljšanju varnosti zdravljenja (17–19). Pri tem uporablja algoritme strojnega učenja za analizo obsežnih podatkovnih baz, ki vključujejo kemijske strukture, molekulske tarče, farmakološke lastnosti in znane interakcije (17). Tehnologije, kot so modeli globokega učenja in molekularno sidranje, omogočajo simulacijo interakcij med rastlinskimi bioaktivnimi spojinami in klasičnimi učinkovinami na molekularni ravni.

Prednosti uporabe umetne inteligence pri napovedovanju interakcij so:

- zgodnje odkrivanje tveganj: algoritmi prepoznajo rastlinske bioaktivne spojine, ki vstopajo v interakcije z določenimi zdravili (18);
- napovedovanje mehanizmov interakcij: umetna inteligenca omogoča razumevanje, kako rastlinske spojine vplivajo na encime, receptorje in druge molekulske tarče, povezane z zdravili (18);
- optimizacija terapij: s pomočjo napovedi lahko zdravniki prilagodijo odmerke zdravil ali predlagajo alternativne rastlinske pripravke (19).

Eden ključnih izzivov napovedovanja interakcij s pomočjo umetne inteligence je pomanjkanje celovitih podatkov o interakcijah. Poleg tega je treba razviti standardizirane pristope za validacijo ustreznosti napovedi umetne inteligence (17).



7 PRIDELAVA IN ŽETEV ZDRAVILNIH RASTLIN

Zdravilne rastline oz. rastlinske droge in izvlečki so osnovna surovina za proizvodnjo zdravil in drugih pripravkov rastlinskega izvora. Proizvajalci se že v začetni fazi proizvodnje srečajo z izzivi zagotavljanja učinkovitosti, varnosti in kakovosti, saj vsebnost rastlinskih učinkovin in t. i. analizičnih markerjev variira glede na številne okoljske dejavnike, čas žetve in postopke nadaljnje obdelave. Umetna inteligenca ponuja inovativne rešitve za optimizacijo gojenja in spravila zdravilnih rastlin, s čimer pomaga pri doslednem zagotavljanju visoke kakovosti in učinkovitosti rastlinskih pripravkov kot tudi večjo trajnost proizvodnje zdravilnih rastlin (20–22). Pri tem umetna inteligenca uporablja in analizira podatke o pridelovalnih pogojih, kot so sestava tal, podnebni dejavniki, namakalni režimi in čas žetve. Na podlagi teh informacij algoritmi strojnega učenja napovejo optimalne razmere za rast rastlin ter določijo najboljši čas za spravilo, ko je koncentracija bioaktivnih spojin najvišja (20–21).

Prednosti uporabe umetne inteligence (20–22):

- natančno spremljanje pogojev rasti: senzorji in algoritmi umetne inteligence spremljajo vlago, temperaturo, pH tal in druge ključne dejavnike ter predlagajo optimizacijo pogojev v realnem času;
- napovedovanje optimalnega časa žetve: na podlagi podatkov o rasti in fitokemijskih analizah umetna inteligenca določi čas, ko zdravilne učinkovine dosežejo največjo koncentracijo;
- zmanjšanje stroškov in odpadkov: s prilagoditvijo pridelovalnih postopkov umetna inteligenca zmanjša porabo virov, kot so voda, gnojila in energija, ter zmanjša tveganje za izgubo pridelka.

Primeri uporabe umetne inteligence za optimizacijo gojenja rastlin in s tem kakovosti rastlinskih drog se že pojavljajo v praksi (21):

- sistem pametnega kmetovanja: umetna inteligenca omogoča spremljanje rasti rastlin in samodejno prilagajanje pogojev za rast;
- optimizacija vsebnosti bioaktivnih spojin: algoritmi napovejo, kako pridelovalne metode vplivajo na vsebnost ključnih spojin, kot so alkaloidi, flavonoidi in hlapne spojine (eterična olja).

Za prihodnost posebej pomembna je integracija teh tehnologij v manjših ekoloških kmetijah, kjer je optimizacija virov ključnega pomena. Glavni izzivi vključujejo visoke stro-

ške uvajanja tehnologije in potrebo po specifičnih podatkovnih bazah za lokalne rastlinske vrste. Kljub temu razvoj umetne inteligence obljublja povečanje učinkovitosti in trajnosti pridelave zdravilnih rastlin, kar bo prispevalo k boljši konkurenčnosti na globalnem trgu (21).

8 RAZISKAVE IN RAZVOJ

Podobno kot na številnih drugih področjih farmacije in medicine se tudi v fitoterapiji sodobne raziskave soočajo z izzivi, kot so kompleksnost rastlinskih spojin, dolgotrajni laboratorijski postopki in visoki stroški razvoja (23). Umetna inteligenca prinaša preboj na tem področju z avtomatizacijo procesov, analizo velikih količin podatkov in napovedovanjem terapevtskega potenciala rastlinskih bioaktivnih spojin, pri čemer je ključna tudi integracija drugih znanstvenih ved, kot so npr. bioinformatika, kemoinformatika, kemometrika in farmakologija (23–26).

Prednosti uporabe umetne inteligence na področju raziskav in razvoja so (23, 25):

- hitrejša identifikacija bioaktivnih spojin: algoritmi analizirajo obsežne baze podatkov kemijskih struktur in predlagajo spojine s potencialnimi terapevtskimi lastnostmi;
- razvoj novih formulacij: s pomočjo optimizacijskih algoritmov umetna inteligenca priporoča idealne kombinacije rastlinskih izvlečkov za specifične bolezni.

Znanstveniki raziskujejo naslednje praktične aplikacije umetne inteligence s področja raziskav in razvoja (23):

- virtualni presejalni postopki: umetna inteligenca nadomešča tradicionalne metode presejanja spojin z računalniškimi simulacijami, kar znatno skrajša čas raziskav;
- razumevanje kompleksnih mehanizmov sinergizma: umetna inteligenca razkriva, kako več bioaktivnih spojin deluje sinergistično za izboljšanje učinkovitosti;
- odkrivanje novih indikacij bioaktivnih snovi: algoritmi analizirajo obstoječe podatke o zdravilnih rastlinah in predlagajo nove terapevtske uporabe.

Menimo, da bi lahko uvedba umetne inteligence v slovenski farmaciji, kjer se fitoterapija razvija kot pomembno področje farmacije oz. medicine, pospešila raziskave lokalnih zdravilnih rastlin, izboljšala kakovost izdelkov domače proizvodnje in povečala konkurenčnost na evropskem in mednarodnem trgu.

Med glavnimi izzivi so pomanjkanje standardiziranih podatkovnih baz, potreba po validaciji napovedi umetne inteli-

gence v laboratorijskih pogojih in visoki začetni stroški uva-
janja tehnologije (23).

9 SKLEP

Umetna inteligenca predstavlja pomemben potencial za izboljšanje uporabnosti fitoterapije v sodobni medicini. Omogoča namreč nadaljnji razvoj področij fitokemijske analize, nadzora kakovosti, kliničnih raziskav in personaliziranega zdravljenja. Vendar pa uresničitev tega potenciala zahteva tudi celovito reševanje izzivov in omejitev, ki jih prinaša umetna inteligenca. Med temi je ključno vprašanje kakovosti in razpoložljivosti podatkov: visokokakovostni in celoviti podatki so ključni za učinkovito učenje modelov umetne inteligence. V fitoterapiji so takšni podatki pogosto razdrobljeni ali nepopolni (npr. pomanjkljivi ali odsotni podatki o botanični identifikaciji rastlinskih vrst, kemizmu rastlinskih izvlečkov, zasnovi kliničnih raziskav). Standardizacija praks zbiranja in deljenja podatkov je bistvenega pomena za premagovanje te ovire. Druga ključna tema izzivov in omejitev so etične dileme, ki so trenutno najbolj aktualne v povezavi s personalizirano fitoterapijo, ter potreba po interdisciplinarnem sodelovanju strokovnjakov. Prepričani smo, da bo imela ob nadaljnjem razvoju tehnologij umetna inteligenca prelomno vlogo v prihodnosti fitoterapije, da bo spodbujala inovacije in izboljšala zdravstveno oskrbo ter prispevala tudi k razvoju farmacevtske znanosti in industrije ter vodila h končnemu cilju izboljšanja človeškega zdravja.

10 LITERATURA

- Russell S, Norvig P. *Artificial intelligence: A modern approach*. 4th ed. Hoboken: Pearson; 2020.
- Li FS, Weng JK. Demystifying traditional herbal medicine with modern approach. *Nat Plants*. 2017 Jul 31;3:17109.
- Koonrungsesomboon N, Sakuludomkan C, Na Takuathung M, Klinjan P, Sawong S, Perera PK. Study design of herbal medicine clinical trials: a descriptive analysis of published studies investigating the effects of herbal medicinal products on human participants. *BMC Complement Med Ther*. 2024 Nov 8;24(1):391.
- Terzi DS. Effect of different weight initialization strategies on transfer learning for plant disease detection. *Plant Pathol*. 2024 Dec;73(9), 2325–43.
- Wäldchen J, Mäder P. Plant species identification using computer vision techniques: A systematic literature review. *Arch Comput Methods Eng*. 2018 Jan;25(2):507–43.
- Goëau H, Bonnet P, Joly A. Plant identification based on noisy web data: The amazing performance of deep learning (LifeCLEF 2017). *Conference and Labs of the Evaluation Forum*; 2017 [cited 2025 Jan 20]. Available from: https://ceur-ws.org/Vol-1866/invited_paper_9.pdf
- Zhang A, Sun H, Yan G, Wang P, Wang X. Mass spectrometry-based metabolomics: applications to biomarker and metabolic pathway research. *Biomed Chromatogr*. 2016 Jan;30(1):7–12.
- Pillai N, Dasgupta A, Sudsakorn S, Fretland J, Mavroudis PD. Machine learning guided early drug discovery of small molecules. *Drug Discov Today*. 2022 Aug;27(8):2209–15.
- Saldivar-González FI, Aldas-Bulos VD, Medina-Franco JL, Plisson F. Natural product drug discovery in the artificial intelligence era. *Chem Sci*. 2021 Dec 13;13(6):1526–46.
- Zhavoronkov A. Artificial intelligence for drug discovery, biomarker development, and generation of novel chemistry. *Mol Pharm*. 2018 Oct;15(10), 4311–3.
- Duan FL, Duan CB, Xu HL, Zhao YZ, Sukhbaatar O, Gao J, et al. AI-driven drug discovery from natural products. *Advanced Agrochem*. 2024 Sep;3(3):185–7.
- Yoo S, Yang HC, Lee S, Shin J, Min S, Lee E, et al. A deep learning-based approach for identifying the medicinal uses of plant-derived natural compounds. *Front Pharmacol*. 2020 Nov 30;11:584875.
- Chu H, Moon S, Park J, Bak S, Ko Y, Youn BY. The use of artificial intelligence in complementary and alternative medicine: A systematic scoping review. *Front Pharmacol*. 2022 Apr 1;13:826044.
- Ekins S. The next era: Deep learning in pharmaceutical research. *Pharm Res*. 2016 Nov;33(11):2594–603.
- Ng JY, Cramer H, Lee MS, Moher D. Traditional, complementary, and integrative medicine and artificial intelligence: Novel opportunities in healthcare. *Integr Med Res*. 2024 Mar;13(1):101024.
- Johnson KB, Wei WQ, Weeraratne D, Frisse ME, Misulis K, Rhee K, et al. Precision medicine, AI, and the future of personalized health care. *Clin Transl Sci*. 2021 Jan;14(1):86–93.
- Blanco-González A, Cabezon A, Seco-González A, Conde-Torres D, Antelo-Riveiro P, Piñeiro Á, et al. The role of AI in drug discovery: Challenges, opportunities, and strategies. *Pharmaceuticals*. 2023;16(6):891.
- Zhao Y, Yin J, Zhang L, Zhang Y, Chen X. Drug-drug interaction prediction: Databases, web servers and computational models. *Brief Bioinform*. 2023 Nov 22;25(1):bbad445.
- Zhang Y, Man Ip C, Lai YS, Zuo Z. Overview of current herb-drug interaction databases. *Drug Metab Dispos*. 2022 Jan;50(1):86–94.
- Mana AA, Allouhi A, Hamrani A, Rehman S, el Jamaoui I, Jayachandran K. Sustainable AI-based production agriculture: Exploring AI applications and implications in agricultural practices. *Smart Agr Technol*. 2024;7:100416.
- Khanna A, Jain S, Maheshwari P. Precision agriculture for medicinal plants: A conjunction of technologies. 2022 International Conference on Electrical and Computing Technologies and Applications (ICECTA), Ras Al Khaimah, United Arab Emirates. 2022; 300–304 [cited 2025 Jan 20]. Available from: <http://doi.org/10.1109/ICECTA57148.2022.9990401>
- Singh H, Bharadvaja N. Treasuring the computational approach in medicinal plant research. *Prog Biophys Mol Biol*. 2021 Sep;164:19–32.



23. Mullooney MW, Duncan KR, Elsayed SS, Garg N, van der Hooft JJJ, Martin NI, et al. Artificial intelligence for natural product drug discovery. *Nat Rev Drug Discov.* 2023 Nov;22(11):895–916.
24. Yoo S, Yang HC, Lee S, Shin J, Min S, Lee E, et al. A deep learning-based approach for identifying the medicinal uses of plant-derived natural compounds. *Front Pharmacol.* 2020 Nov 30;11:584875.
25. Kim E, Choi AS, Nam H. Drug repositioning of herbal compounds via a machine-learning approach. *BMC Bioinformatics.* 2019 May 29;20(Suppl 10):247.
26. Topol EJ. High-performance medicine: the convergence of human and artificial intelligence. *Nat Med.* 2019 Jan;25(1):44–56.