



Politechnika Łódzka

Wydział Fizyki Technicznej, Informatyki
i Matematyki Stosowanej

Informatyka Stosowana	Semestr I
Warsztaty Badawcze	2025/2026
dr hab. inż. Dariusz Puchała	Grupa 7

Sprawozdanie

Tytuł¹

Imię Nazwisko

Spis treści

1. Warsztaty 2	3
1.1. Tematyka	3
1.1.1. Argumenty	3
1.1.2. Rozwinięcie tematyki	3
1.2. Analiza literatury	5
1.3. Refleksja	6
2. Warsztaty 3	7
2.1. Wprowadzenie i problematyka	7
2.2. Rodzaje publikacji naukowych	7
2.3. Wybór literatury	8
2.4. Wkład w dziedzinę	9
Bibliografia	11
Spis rysunków	12

1. Warsztaty 2

1.1. Tematyka

Zastosowanie sztucznej inteligencji do przewidywania struktury molekularnej antybiotyków wobec konkretnych, wybranych bakterii zaklasyfikowanych przez WHO w 2024 roku jako te najbardziej zagrażające ludzkiemu życiu.

1.1.1. Argumenty

1. Tematyka związana z zastosowaniem sztucznej inteligencji ogólnie w medycynie staje się coraz częściej poruszana w artykułach naukowych ze względu na coraz lepsze algorytmy, umożliwiające uzyskanie bardzo dokładnych i precyzyjnych wyników.
2. Niezwykle ważna tematyka z powodu wzrastającej odporności wielu bakterii na aktualnie stosowane antybiotyki, która przyczynia się rocznie do ponad 1 mln śmierci na świecie oraz może przyczynić się do 2050 roku do nawet 10 mln śmierci rocznie.
3. Przewidywanie struktury molekularnej antybiotyków może przyczynić się do znacznego przyśpieszenia skomplikowanego i długotrwałego procesu ich odkrywania tradycyjnymi metodami, a w konsekwencji do zmniejszenia związanych z nim kosztów.
4. Możliwość przewidywania struktur molekularnych antybiotyków znacznie odmiennych od tych dotychczas znanych pozwala uniknąć redundancji, a w konsekwencji zredukować czas i środki finansowe poświęcane na odkrywanie nowych antybiotyków.

Na podstawie <https://www.nature.com/articles/s41598-025-91190-x>.

1.1.2. Rozwinięcie tematyki

1. Zastosowanie sieci neuronowych do przewidywania struktury molekularnej antybiotyków i porównanie wyników z konwencjonalnymi technikami uczenia maszynowego (np. las losowy, maszyna wektorów nośnych, naiwny klasyfikator Bayesa).
 - Konwencjonalne techniki uczenia maszynowego, choć umożliwiają przewidywanie struktury molekularnej antybiotyków, są ograniczone do stosunkowo wąskiego zakresu cech molekularnych przedstawianych za pomocą tzw. wektorów fingerprint (odzwierciedlenie obecności lub braku określonych grup funkcyjnych) i deskryptorów (odzwierciedlenie określonych właściwości fizykochemicznych), które muszą być wcześniej zdefiniowane przez człowieka, posiadającego wiedzę dziedzinową. W przeciwieństwie do technik konwencjonalnych, sieci neuronowe uczą

- się optymalnych reprezentacji molekularnych dla konkretnego zadania predykcyjnego w sposób automatyczny.
- Sieci neuronowe nie tylko przewyższają konwencjonalne techniki uczenia maszynowego w wielu zadaniach związanych z przewidywaniem właściwości fizykochemicznych i biologicznych, lecz także są bardziej odporne na zmiany i lepiej uogólniają się na przestrzenie chemiczne wykraczające poza te, na których model był pierwotnie trenowany.
 - Sieci neuronowe umożliwiają odkrywanie antybiotyków o odmiennej strukturze w porównaniu do aktualnie stosowanych antybiotyków (np. halicyna i wiele innych).
 - Odkrycie nowego antybiotyku po 30 latach stagnacji w tym obszarze (konkretnie halicyny, charakteryzującej się odmienną strukturą molekularną w porównaniu z aktualnie stosowanymi antybiotykami oraz działaniem bakteriobójczym wobec szerokiego spektrum patogenów) zostało dokonane dzięki zastosowaniu głębokich sieci neuronowych (ang. deep neural network) istotna wskazówka, że do przewidywania antybiotyków przeciwko innym bakteriom warto zawsze zastosować sieci neuronowe.
 - Porównanie różnych technik uczenia maszynowego może umożliwić dodatkowe lepsze zrozumienie, które z nich charakteryzują się największą generalizacją, dokładnością i precyzją.
2. Zastosowanie filtrów przy przewidywaniu struktury molekularnej antybiotyków, dotyczących m.in. różnorodności strukturalnej, występowania w naturze, trudności i kosztów syntezy, a także przewidywanej toksyczności wobec komórek ludzkich.
- Dodatkowe filtry umożliwiają:
 - znaczne zredukowanie liczby przewidzianych struktur molekularnych, których może być niekiedy nawet od kilku do kilkudziesięciu tysięcy (konsekwencja przeprowadzania predykcji na zbiorach, zawierającym od kilku milionów do kilku bilionów danych);
 - wyeliminowanie struktur, które na etapie testów na zwierzętach mogłyby wykazać wysoką toksyczność wobec komórek, co w konsekwencji przyczynia się do oszczędności czasu i kosztów całego procesu;
 - ustalenie priorytetowych struktur molekularnych, które mogą być poddane najpierw testom na zwierzętach, a następnie badaniom klinicznym.
 - Filtr dotyczący przewidywania toksyczności wobec komórek ludzkich może umożliwić zastąpienie niektórych aktualnie stosowanych antybiotyków na mniej szkodliwe.
 - Filtr dotyczący różnorodności strukturalnej może zmniejszyć problem dereplikacji oraz zwiększyć prawdopodobieństwo odkrycia antybiotyku (np. halicyna) charakteryzującego się zupełnie nowym mechanizmem bakteriobójczego działania.

1.2. Analiza literatury

1. "A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery"
 - Artykuł naukowy przedstawiający przełomowe odkrycie pierwszego nowego antybiotyku po 30 latach (halicyny, charakteryzującej się odmienną strukturą molekularną w porównaniu z aktualnie stosowanymi antybiotykami) poprzez przeprowadzenie najpierw analizy wielu różnych zbiorów danych z zastosowaniem głębokich sieci neuronowych, a następnie testów laboratoryjnych, które potwierdziły działanie bakteriobójcze.
 - Artykuł zawiera dokładne informacje dotyczące poszczególnych etapów przeprowadzonych analiz, które mogą być przydatne w celu porównania wyników własnych przeprowadzonych badań.
 - Artykuł został opublikowany w 2020 roku w czasopiśmie Cell, którego współczynnik impact factor jest bardzo wysoki i wynosi ok. 45,5.
 - Artykuł został napisany przez 18 pracowników z USA i Kanady z tytułem doktora lub profesora, specjalizujących się w wielu różnych dziedzinach, w tym farmacji, genetyki, biotechnologii i sztucznej inteligencji.
 - Liczba cytowań artykułu wynosi 1,312.
2. "Artificial Intelligence (AI) Applications in Drug Discovery and Drug Delivery: Revolutionizing Personalized Medicine"
 - Artykuł przeglądowy omawiający zastosowanie sztucznej inteligencji w odkrywaniu nowych leków i systemów dostarczania leków, zawiera: analizę zagadnienia z kilku różnych stron (np. walidacji, optymalizacji i konkretnych baz danych), także wiele konkretnych przykładów.
 - Artykuł został opublikowany niedawno, tj. w sierpniu 2024 roku, w związku z tym zawiera wiele aktualnych informacji.
 - Artykuł został opublikowany w czasopiśmie pharmaceuticals, którego współczynnik impact factor wynosi ok. 4,9.
 - Artykuł został napisany przez 8 pracowników naukowych z 3 różnych krajów (Wielka Brytania, Hiszpania, Indie) z tytułem doktora lub profesora, specjalizujących się w wielu różnych dziedzinach, w tym farmacji, nanomedycynie, druku 3D oraz chemii polimerów i peptydów.
 - Liczba cytowań artykułu wynosi 44.
3. "Artificial intelligence to deep learning: machine intelligence approach for drug discovery"
 - Artykuł przeglądowy omawiający bardziej szczegółowo zastosowanie sztucznej inteligencji w odkrywaniu nowych leków – porusza dodatkowo tematykę związaną m.in. z analizą danych ekspresji genów i mutacji, optymalizacją dawkowania, znajdowaniem nowych zastosowań istniejących już leków, oraz symulacją dynamiki molekularnej.
 - Artykuł zawiera m.in. informacje o różnych bazach danych medycznych i chemicznych oraz narzędziach (np. AlphaFold do predykcji struktury peptydów)
 - Artykuł został opublikowany w 2021 roku w czasopiśmie Molecular Diversity, którego współczynnik impact factor wynosi ok. 3,8.

- Artykuł został napisany przez 5 z Indii z tytułem doktora lub profesora, specjalizujących się w biotechnologii.
- Liczba cytowań artykułu wynosi 796.

1.3. Refleksja

1. Rozpowszechnianie i popularyzowanie wiedzy naukowej (pod warunkiem, że wiedza ta jest dla wszystkich darmowa)
 - Zwiększanie poziomu wiedzy i świadomości w społeczeństwie.
 - Przyspieszenie rozwoju nauki i technologii przydatnej społeczeństwu.
 - Tworzenie baz danych, stanowiących podstawę kolejnych nowych badań.
2. Weryfikowanie badań
 - Weryfikowanie metodologii i wyników badań przez recenzentów w celu oceny ich rzetelności i jakości.
 - Powtarzanie, weryfikowanie i rozwijanie badań przez innych pracowników naukowych.
 - Zwiększanie wiarygodności i sprzyjanie postępowi naukowemu poprzez weryfikację i dalsze rozwijanie.
3. Zwiększenie rozpoznawalności pracownika naukowego
 - Budowanie reputacji naukowej poprzez publikowanie efektów pracy badawczej (również w krajach mniej zamożnych).
 - Zwiększanie szans na współpracę, udział w projektach i konferencjach dzięki większej rozpoznawalności w środowisku naukowym.
 - Rozwój kariery naukowej poprzez i poszerzanie kompetencji poprzez regularne publikowanie artykułów.
4. Praktyczne zastosowanie wyników badań
 - Zastosowanie niektórych rozwiązań z artykułów naukowych w m.in. przemyśle i medycynie.
 - Transfer technologii i współpraca między jednostkami naukowymi a sektorem gospodarczym w celu komercjalizacji wyników badań.
 - Poprawa poziomu życia społeczeństwa.
5. Obowiązek wobec finansowania badań
 - Zapewnienie dostępu do wyników badań finansowanych ze środków publicznych lub grantów.
 - Umożliwienie społeczeństwu korzystania z efektów badań, które współfinansuje.
 - Wzmacnianie przejrzystości i odpowiedzialności pracowników naukowych wobec instytucji wspierających badania.

2. Warsztaty 3

2.1. Wprowadzenie i problematyka

Prowadzenie badań ukierunkowanych na odkrycie nowych struktur antybiotyków jest ważne ze względu na zdolność bakterii do przekazywania genu odporności na antybiotyki. Prowadzi to do lekooporności i obniża skuteczność funkcjonujących na rynku leków. Rozszerzanie wiedzy dotyczącej możliwych rozwiązań tego problemu nie leży w interesie firm farmaceutycznych, dlatego ważne jest, aby tematyka ta była podejmowana przez instytuty badawcze. Wcześniejsze próby skupiały się na analizie molekularnych struktur cząsteczek i przebadanych już antybiotyków. Było to jednak niewystarczające, ponieważ wśród podobnych struktur przez wiele lat nie znaleziono nowej cząsteczki spełniającej wymagania. Dlatego konieczne stało się poszukiwanie wśród niekonwencjonalnych struktur molekularnych.

Z uwagi na ogromny rozmiar przestrzeni możliwych rozwiązań (ponad 107 milionów cząsteczek), aby odkryć nowe struktury cząsteczek o pożądanych właściwościach konieczne jest zastosowanie metod uczenia maszynowego. Po nauczaniu modelu z uwzględnieniem kluczowych parametrów przeszukiwane są bazy struktur cząsteczek chemicznych pod kątem występowania tych cech. Takie podejście pozwoliło na odkrycie hialicyny – nowego antybiotyku i stanowiło przełom w badaniach nad nowymi strukturami molekularnymi antybiotyków.

2.2. Rodzaje publikacji naukowych

Wybrane oryginalne artykuły naukowe (research)

- “A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery” [1]
- “Antibiotic discovery with artificial intelligence for the treatment of *Acinetobacter baumannii* infections” [2]

Wybrane artykuły przeglądowe (review)

- “Artificial Intelligence (AI) Applications in Drug Discovery and Drug Delivery: Revolutionizing Personalized Medicine” [3]
- “Artificial intelligence to deep learning: machine intelligence approach for drug discovery” [4]

Publikacje naukowe mogą mieć charakter oryginalny lub przeglądowy. W pierwszym przypadku autorzy przedstawiają swoje oryginalne dokonania w danej dziedzinie wraz ze szczegółowym opisem wykorzystanej metodyki oraz uzyskanych wyników. Każdy etap badania jest dokładnie udokumentowany co pozwala innym badaczom na odtworzenie eksperymentu w takich samych warunkach. Struktura artykułów naukowych jest zgodna ze strukturą IMRAD: wstęp (introduction), metody (methods), wyniki i dyskusja (results

and discussion). Artykuły przeglądowe skupiają się na ogólnym kierunku badań w wybranej tematyce. Autorzy korzystając z oryginalnych artykułów naukowych porównują wyniki badań i analizują je. Opisują kierunek badań, dokonania w wybranej dziedzinie oraz stan aktualnej wiedzy. Mają bardziej holistyczny charakter a co za tym idzie metodyka jest omówiona w sposób skrótowy. Artykuły przeglądowe to przekrój przez najważniejsze odkrycia w dziedzinie. Stanowią zatem dobry początek zaznajamiania się z nową tematyką np. w ramach przeglądu literaturowego do pracy naukowej.

W przypadku wybranych artykułów tematyka skupia się na wykorzystaniu metod uczenia maszynowego do odkrywania nowych struktur molekularnych antybiotyków dla bakterii uznanych za stanowiące największe zagrożenie dla zdrowia i życia człowieka. Artykuły przeglądowe opisują w jaki sposób na przestrzeni lat różne metody uczenia maszynowego od prostych algorytmów, przez deep learning po sztuczną inteligencję były wykorzystywane do znajdowania nowych substancji leczniczych. Wskazują one w jakich przypadkach i z jakim skutkiem każda z metod znajdowała zastosowanie. Stanowią wprowadzenie do uczenia maszynowego i są bazą dla bardziej dokładnego researchu, zapoznają z tematyką i praktycznym wykorzystaniem technik. Oryginalne artykuły naukowe zawierają szczegółowe informacje dotyczące warunków i wyników eksperymentu co jest pomocne w prowadzeniu własnych badań w wybranej dziedzinie.

2.3. Wybór literatury

- Zgodność z tematyką badań - publikacja powinna odnosić się do postawionego problemu badawczego tj. przewidywania struktury molekularnej antybiotyków za pomocą metod uczenia maszynowego. Zawężenie dziedziny poszukiwań pozwala na szybsze zdobycie wiedzy w tym zakresie oraz znalezienie artykułów najlepiej odpowiadającym potrzebom badacza.
- Sprawdzone i wiarygodne źródło - publikacja powinna zostać opublikowana w uznanym czasopiśmie naukowym lub wydawnictwie np. Elsevier, Springer, IEE. Takie źródła publikują pozycje rzetelnie recenzowane i skontrolowane pod względem adekwatnej metodologii, oryginalności i wiarygodności wyników. Treści można szukać poprzez bazy i biblioteki oferujące dostęp do artykułów naukowych takie jak ScienceDirect. Dodatkowo dorobek naukowy autorów publikacji można sprawdzić za pomocą systemu ORCID.
- Reprezentuje aktualny stan wiedzy - data wydania publikacji jest ważna ze względu na postęp techniczny w dziedzinach takich jak informatyka i biomedycyna. Wiedza szybko ulega dezaktualizacji, nowe metody są wypracowywane, które lepiej odpowiadają aktualnym potrzebom badaczy i pozwalają uzyskać lepsze wyniki. W tym przypadku są to nowoczesne techniki uczenia maszynowego opierające się o uczenie głębokie i metody sztucznej inteligencji do przeszukiwania licznych baz danych ze strukturami molekularnymi wybierając te predysponujące to hamowania rozwoju bakterii.

- Wartość naukowa i Impact Factor - wskaźnik liczby cytowań pozwala na ocenę wpływu czasopisma i publikacji na wybraną dziedzinę nauki. Wybranie publikacji o wysokim współczynniku wskazuje na to, że publikacja została dobrze przyjęta w środowisku naukowym, jest często cytowana i wywarła istotny wpływ na dziedzinę. Dla wybranych artykułów IF wynosił 3.8, 4.8, 45.
- Znaczenie i przełomowość badania - warto wybierać publikacje, które wniosły istotny wkład w rozwój wybranej tematyki, zapoczątkowały nowy kierunek badań lub opisują przełomowe odkrycie (np. Odkrycie hialicyny). Dzięki temu uwzględnia się pozycje kluczowe i znaczące dla danej dziedziny.

2.4. Wkład w dziedzinę

Wkład oryginalny dla każdej z wybranych publikacji

- “A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery” [1] Badacze wykorzystując metody uczenia głębokiego odkryli nowy antybiotyk - hialicynę o odmienniej strukturze molekularnej od dotychczas dostępnych i przebadanych antybiotyków. Badanie to zapoczątkowało nowy kierunek badań - wykorzystanie metod uczenia maszynowego do znajdowania cząsteczek o bakteriobójczych predyspozycjach. Pozwala to na skrócenie czasu badań laboratoryjnych oraz poszerzenie obszaru poszukiwań o nowe, dotychczas niebadane cząsteczki. Artykuł ten był przełomowy ze względu na wykorzystane w badaniu metody oraz ogromny sukces odkrycia nowego antybiotyku skierowanego na bakterie *Escherichia coli*, co przyczynia się do walki z postępującą lekoopornością bakterii na powszechnie dostępne antybiotyki. Został uznany i pozytywnie przyjęty w środowisku badaczy i jest szeroko cytowany.
- “Antibiotic discovery with artificial intelligence for the treatment of *Acinetobacter baumannii* infections” [2] Artykuł ten opisuje wykorzystanie metod sztucznej inteligencji do odkrycia nowego antybiotyku na bakterie *Acinetobacter baumannii* - groźny lekooporny szczep występujący w szpitalach wywołujący szpitalne zapalenie płuc. Stosując analizę QSAR (Quantative Structure-Activity Relationship) przeanalizowali ponad 11 tysięcy związków chemicznych pochodzenia naturalnego w celu określenia ich biologicznej aktywności względem bakterii. Badacze skupili się na znalezieniu odpowiedniego związku do wytworzenia stabilnej membrany, która hamowałaby zdolność bakterii do namnażania, adhezji oraz powodowałaby śmierć komórki. Udało się wytypować związek o podanych właściwościach, który zapowiada się obiecująco w badaniach *in vitro*. Odkrycie to stanowi krok w kierunku nowego leku na jeden z najgroźniejszych szczepów bakterii.
- “Artificial Intelligence (AI) Applications in Drug Discovery and Drug Delivery: Revolutionizing Personalized Medicine” [3] Autorzy artykułu analizują wykorzystanie sztucznej inteligencji w przemyśle farmaceutycznym. Zwracają uwagę na jej wpływ w przyspieszenie badań i odkryć nowych leków, potencjał na tworzenie personalizowanych produktów leczni-

czych i monitorowanie ich bezpieczeństwa w procesach klinicznych. Artykuł stanowi przegląd dotychczasowego wykorzystania sztucznej inteligencji, które zrewolucjonizowało dotychczasowy przemysł farmaceutyczny. W kontekście wybranego tematu, zastosowania skupiają się wokół algorytmów pozwalających na szybsze przeszukanie przestrzeni rozwiązań pod kątem struktury molekularnej, fizykochemicznych właściwości cząsteczki oraz oddziaływań międzycząsteczkowych. Badacze zauważają możliwość zastosowania generatywnych sieci współzawodniczących (GAN) do odkrywania nowych struktur cząsteczek leków o zwiększonej selektywności i wzmocnionym działaniu. Dodatkowo rozwiązania bazujące na AI takie jak Atomwise czy BenevolentAI pozwalają na wybranie cząsteczek o największym prawdopodobieństwie sukcesu w badaniach klinicznych co znacząco skraca czas potrzebny do wprowadzenia nowego produktu na rynek oraz pozwala zaoszczędzić koszty produkcji, życie zwierząt oraz zasoby firmy. Badacze zwracają uwagę na zagrożenia wynikające z wykorzystywania sztucznej inteligencji takie jak kwestie etyki i prywatności oraz konstruowania i rozumienia modeli.

- “Artificial intelligence to deep learning: machine intelligence approach for drug discovery” [4] Artykuł ten stanowi wprowadzenie do metod uczenia głębokiego i sztucznej inteligencji wykorzystywanych do projektowania i odkrywania nowych substancji leczniczych. Opisywane są techniki stosowane w konkretnych etapach procesu wraz z konkretnymi publicznymi zasobami. Badacze wskazują tutaj na konkretne implementacje algorytmów wraz z dostępnymi narzędziami i repozytoriami. Stanowi to bardzo dobry punkt startowy dla własnych badań nad strukturą molekularną leków.

Bibliografia

Spis rysunków