

Uczenie maszynowe

W ciągu ostatnich kilku lat, postępy w uczeniu maszynowym pozwoliły na przyspieszenie analizy dużych zbiorów danych. Algorytmy uczenia maszynowego szczególnie dobrze sprawdzają się w zadaniach wymagających rozpoznawanie obrazów i mowy oraz przetwarzaniu języka. Znalazły one również zastosowanie w obszarach nauk ścisłych takich jak chemia, biologia czy farmacja, gdzie mogą posłużyć do [1]:

- identyfikacji celów molekularnych przy projektowaniu leków,
- predykcji struktur białek oraz ich kompleksów,
- projektowania syntezy,
- predykcji właściwości związków chemicznych,
- predykcji oddziaływań pomiędzy ligandem a celem molekularnym,
- repozycjonowania leków.

Przełom w wykorzystaniu sztucznej inteligencji do predykcji struktur nastąpił w 2020 roku, gdy AlphaFold 2 wygrał 14-tą edycję konkursu CASP, w którym zespoły z całego świata usiłują przewidzieć nowe, nieupublicznione struktury białek [2]. AlphaFold 2 wykazał się zdecydowanie wyższą precyzją od innych zaprezentowanych metod, generując w niektórych przypadkach struktury niewiele odbiegające od eksperymentalnych [2]. Za swoje osiągnięcie w obszarze predykcji struktur białek, twórcy AlphaFold, Demis Hassabis oraz John Jumper, wspólnie z Davidem Baker, otrzymali Nagrodę Nobla. Sukces AlphaFold zainspirował rozwój kolejnych metod przewidywania struktur opartych na uczeniu maszynowym, takich jak RoseTTaFold [3] czy AlphaDesign [4].

Metody uczenia maszynowego są również stosowane w systemach wspomagania decyzji. Przy projektowaniu leków, takie systemy mogą służyć np. do predykcji czy cząsteczka będąca przedmiotem badań przedklinicznych będzie oddziaływać z danym celem molekularnym oraz do sprawdzenia możliwości wiązania poza celem. Do jednych z najbardziej znanych systemów decyzyjnych należy SwissTargetPrediction, który przewiduje prawdopodobieństwo wiązania

wybranej cząsteczki do ponad 3600 różnych białek, w tym ludzkich, mysich i szczurzych [5]. Istnieją również bardziej specyficzne systemy decyzyjne jak GPCRVS [6], [7] skupiające się wyłącznie na wybranej grupie białek, np. receptorach sprzężonymi z białkiem G (GPCR). Inne przykłady takich systemów decyzyjnych to pdCSM-GPCR [8], EnGCI [9] oraz DeepGPCR [10]. Identyfikacja *in silico* cząsteczek o wysokim prawdopodobieństwie wiązania z celem molekularnym umożliwia zaoszczędzenie czasu oraz środków finansowych na dalszych etapach badań przedklinicznych.

Literatura

- [1] K. Zhang *et al.*, “Artificial intelligence in drug development,” *Nat Med*, vol. 31, no. 1, pp. 45–59, Jan. 2025, doi: 10.1038/s41591-024-03434-4.
- [2] J. Jumper *et al.*, “Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold,” *Nature*, vol. 596, no. 7873, pp. 583–589, Aug. 2021, doi: 10.1038/s41586-021-03819-2.
- [3] M. Baek *et al.*, “Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network,” *Science*, vol. 373, no. 6557, pp. 871–876, Aug. 2021, doi: 10.1126/science.abj8754.
- [4] M. A. Jendrusch *et al.*, “AlphaDesign: a de novo protein design framework based on AlphaFold,” *Mol Syst Biol*, vol. 21, no. 9, pp. 1166–1189, Sep. 2025, doi: 10.1038/s44320-025-00119-z.
- [5] A. Daina, O. Michielin, and V. Zoete, “SwissTargetPrediction: updated data and new features for efficient prediction of protein targets of small molecules,” *Nucleic Acids Research*, vol. 47, no. W1, pp. W357–W364, Jul. 2019, doi: 10.1093/nar/gkz382.
- [6] D. Latek, K. Prajapati, P. Dragan, M. Merski, and P. Osial, “GPCRVS - AI-driven Decision Support System for GPCR Virtual Screening,” *International Journal of Molecular Sciences*, vol. 26, no. 5, 2025, doi: 10.3390/ijms26052160.
- [7] D. Latek, K. Prajapati, P. Dragan, M. Merski, and P. Osial, “GPCRVS - AI-driven decision support system for GPCR virtual screening,” *bioRxiv*, 2024, doi: 10.1101/2024.10.28.620626.
- [8] J. P. L. Velloso, D. B. Ascher, and D. E. V. Pires, “pdCSM-GPCR: predicting potent GPCR ligands with graph-based signatures,” *Bioinform Adv*, vol. 1, no. 1, p. vbab031, 2021, doi: 10.1093/bioadv/vbab031.
- [9] W. Liu, X. Li, B. Hang, and P. Wang, “EnGCI: enhancing GPCR-compound interaction prediction via large molecular models and KAN network,” *BMC Biol*, vol. 23, no. 1, p. 136, May 2025, doi: 10.1186/s12915-025-02238-3.
- [10] H. Zhang *et al.*, “Revolutionizing GPCR-ligand predictions: DeepGPCR with experimental validation for high-precision drug discovery,” *Brief Bioinform*, vol. 25, no. 4, p. bbae281, May 2024, doi: 10.1093/bib/bbae281.