

WYKŁAD Z CYKLU „CIEKAWA CHEMIA”

SZTUCZNA INTELIGENCJA NA TROPIE LEKÓW

dr Przemysław Miszta

WYDZIAŁ CHEMII UW

czwartek, 24 IV 2025

godzina 16:00

Sztuczna Inteligencja (**AI - *Artificial Intelligence***) to chyba najbardziej popularne hasło ostatnich miesięcy. Króluje ono w mediach społecznościowych, a znaczny wzrost zainteresowania tą tematyką jest obserwowany w wypowiedziach nie tylko naukowców, ale także prawników czy polityków. Według ekspertów w ciągu 10 lat AI zrewolucjonizuje wiele dziedzin nauki, techniki ale także będzie miała ogromny wpływ na nasze codzienne życie. Warto dodać, że aż dwie nagrody Nobla w 2024, z fizyki i z chemii, zostały przyznane za prace bardzo mocno związane i wykorzystujące AI. Zatem z pewnością nie dziwi fakt, że obecnie wiąże się ogromne nadzieje w wykorzystaniu AI w medycynie, mimo, że ten ogromny obszar wiedzy był rozwijany wiele tysięcy lat wcześniej, gdy jeszcze nie tylko o komputerach ale także o elektryczności nikt nie miał pojęcia. Obecny poziom medycyny to wypadkowa wielu niezliczonych doświadczeń, nieskończonej liczby obserwacji, gdyż ludzkość przecież od zarania dziejów nękały różnorodne choroby powodowane przez czynniki, takie jak grzyby, bakterie czy wirusy i po dzień dzisiejszy trwa nieustanna wojna między ludźmi a drobnoustrojami, którą na razie, jako gatunek, dzięki naszej wiedzy, wygrywamy. Początkowo ta wiedza była czerpana z obserwacji przyrody i owocowała tajemniczymi miksturami tworzonymi przeważnie na bazie fauny i flory przez jeszcze bardziej tajemnicze postaci, które niejednokrotnie, mimo swych umiejętności były raczej niezbyt przyjaźnie traktowane przez swoje społeczności. Ale to właśnie dzięki ich wiedzy, zdobywanej często przez obserwacje, nierzadko metodami prób i błędów, przekazywanej z pokolenia na pokolenie można dzisiaj mówić o medycynie jako nauce. To różnie zwani w różnych kulturach znachorzy czy szamani, tworzyli mikstury i przepisy, obecnie powszechnie zwane lekami. Na przestrzeni dziejów, mimo nierównej walki, podczas których ludzkość przegrywała wielkie bitwy, takie jak epidemie dżumy, ospy prawdziwej, cholery czy grypy, które potrafiły nawet trzykrotnie zmniejszyć liczbę ludności na świecie, ludzkość przetrwała i cały czas doskonaliła swoje metody obrony przed drobnoustrojami chorobotwórczymi. Wiek XIX i XX przynosi w tej dziedzinie wielkie odkrycia takie jak rozpowszechnienie szczepionki przeciw ospie (Edward Jenner – 1796), opracowanie szczepionki przeciw wściekliźnie (Ludwik Pasteur – 1885), odkrycie pierwszego antybiotyku penicyliny (Sir Alexander Fleming -1928), odkrycie struktury DNA (James D. Watson i Frances H.C. Crick – 1953), czy wreszcie odczytanie ludzkiego genomu (2003), z których



ludzkość korzysta po dzień obecny. Wraz z ogromnym wzrostem wiedzy na temat chorób, postępował jeszcze większy i coraz szybszy rozwój technologiczny, który pozwalał stosować coraz to bardziej zaawansowane metody poszukiwania nowych sposobów diagnostyki, metod leczenia czy leków. Obecnie standardem w diagnostyce medycznej stały się takie urządzenia jak EKG, USG, X-RAY, CT, NMR czy PET. Wraz z technologią przyszła także rewolucja w metodach poszukiwania leków nowej generacji. Obecnie nowe leki, powstające w oparciu o stosowane dawniej metody prób i błędów, czy też bardziej zaawansowane metody obserwacyjne należą do rzadkości, gdyż w większości przypadków poszukiwanie nowego leku zaczyna się od przeszukania komputerowej bazy danych ZINC, która na dzień dzisiejszy zawiera ponad 760 mln różnorodnych związków, które mogą stać się potencjalnymi lekami. Obecnie ludzkość mimo swojej ogromnej wiedzy, bez pomocy komputera nie jest w stanie w logicznym czasie przeszukać całej bazy zdeponowanych związków. Komputer nie tylko staje się nieodzownym narzędziem w pierwszym etapie badań, ale także przyczynia się w znacznym stopniu do znalezienia odpowiedzi na kolejne pytania pojawiające się w kolejnych etapach poszukiwania leku. Oczywiście, jak na razie, zastosowanie komputerów nie zastąpi badań klinicznych, ale dzięki stworzonym przez naukowców narzędziom, takich jak naukowe bazy danych (UNIPROT, PDB, GPCRdb), czy specjalistyczne programy (Schrödinger, AMBER CHARMM, NAMD, YASARA, VMD, PyMOL) można w znacznym stopniu przyspieszyć proces poszukiwania leku i wśród miliona związków wskazać akurat te o ogromnym potencjale medycznym. Dodatkowo od kilku lat obserwuje się, i to z dobrym skutkiem, zastosowanie AI do poszukiwania nowych leków. Za przykład może posłużyć opracowanie eksperymentalnego leku na idiopatyczne zwłóknienie płuc przez firmę Insilico Medicine. Warto też dodać, że od kilku już lat działają różne naukowe serwisy komputerowe wykorzystujące AI, takie jak chociażby AlphaFold, przewidujący strukturę 3D białek na podstawie ich sekwencji, za który w 2024 autorzy otrzymali nagrodę Nobla (Demis Hassabis, John Jumper i David Baker). Jak widać obecnie poszukiwanie nowych leków może odbywać się nawet bez wychodzenia z domu, po prostu poprzez wykorzystywanie, czy też tworzenie oprogramowania opartego na AI. Obecnie obserwuje się dynamiczne przyspieszenie rozwoju metod AI. Ciekawe co by na obecny, dynamiczny postęp w naukach medycznych pomyślał teraz Fleming, który jak sam twierdził, przez przypadek odkrył penicylinę w swoim laboratorium. Może zastanowiłby się, jaka jest szansa, czy w najbliższym czasie AI odkryje poszukiwany od zarania dziejów eliksir nieśmiertelności, aby raz na zawsze wygrać swoisty wyścig zbrojeń z chorobami, czy też przyczyni się do zagłady ludzkości. Można więc podjąć próbę odpowiedzi na pytanie, jakie więc możliwości drzemią w metodach AI w dziedzinie medycyny. Może po prostu będzie możliwe stworzenie nowych leków tylko przez AI zupełnie bez udziału człowieka i tych metod nie będziemy nawet w stanie zrozumieć. Wiek XXI będzie z pewnością należał do AI. Wiek XXI z pewnością będzie należał do AI.