

Laboratories brAIInworks

AI a jej miesto v bioinformatike

Čo sa deje v ľudskom tele

wehi.tv
DrewBerry

Eukaryotická bunka

Human cell
x10,000



Čo vidíme my

```
sliacky@athena: ~/test  
(base) sliacky@athena:~/test$ |
```

Ako pracujeme

Research literatúry

Formulácia experimentu

Úprava a čistenie dát

Analýza dát

Tvorba a tréovanie modelov

Analýza výstupov, predikcie

Potvrdenie/zamietnutie hypotéz

Vizualizácia výstupov/aplikácie

Na čo sa zameriavame

Zameranie výskumu a spolupráce

Včasná detekcia

- Veľké dáta, vysvetliteľná AI a data mining
- *In silico* zisťovanie génov, genomické a klinické štúdie

Odpoveď na liečbu

- *In silico* určenie liečiv a cielená liečba
- Modelovanie štruktúry nádoru pomocou AI a vytváranie digitálneho tieňa

Ciele liečby

Včasná detekcia

- Určenie časového rámca kľúčových udalostí v živote tumoru, pre-klinická diagnóza
- Precision medicine: Odporúčania založené na AI pre najlepší priebeh liečby. Prediktívna medicína.

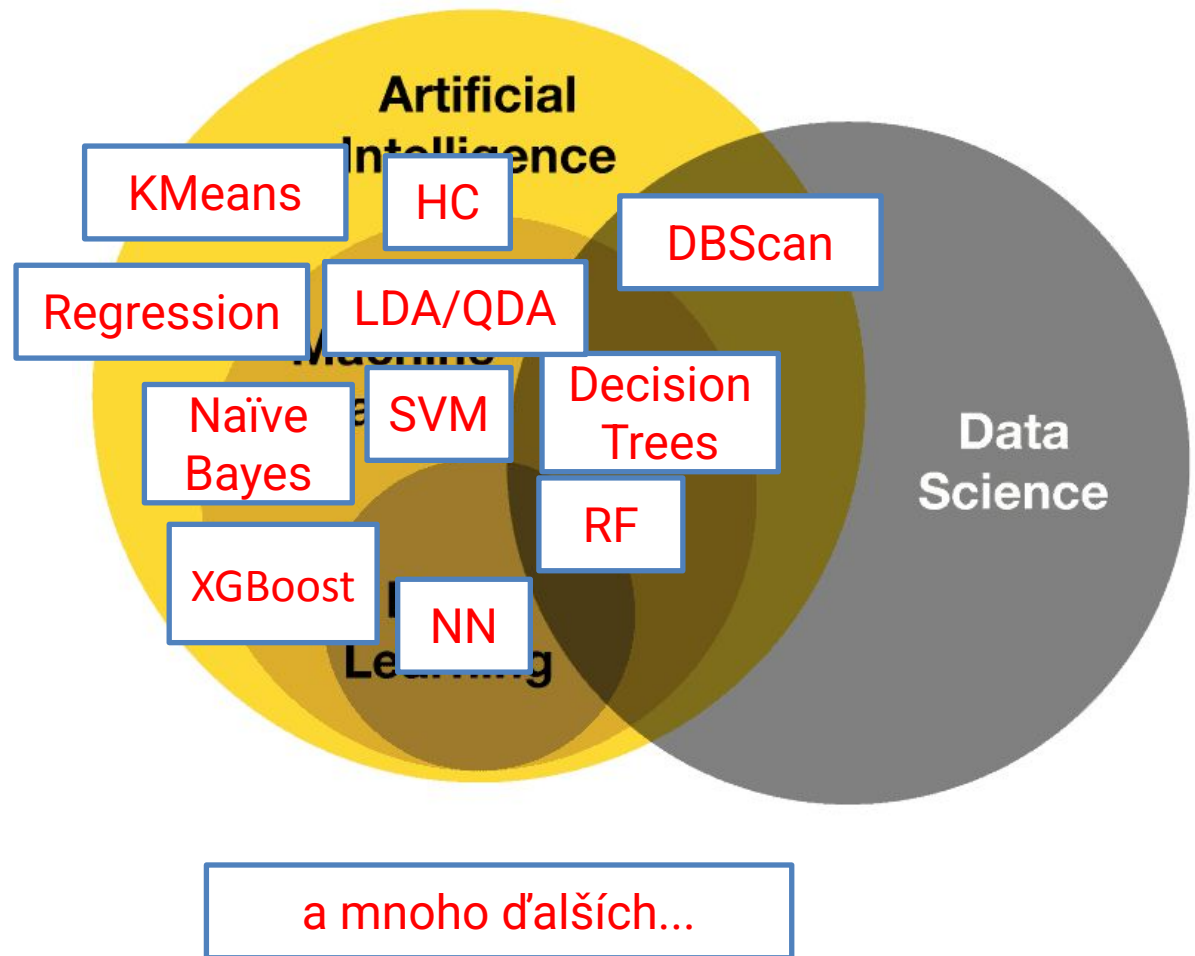
Stanovenie diagnózy

Prognosis

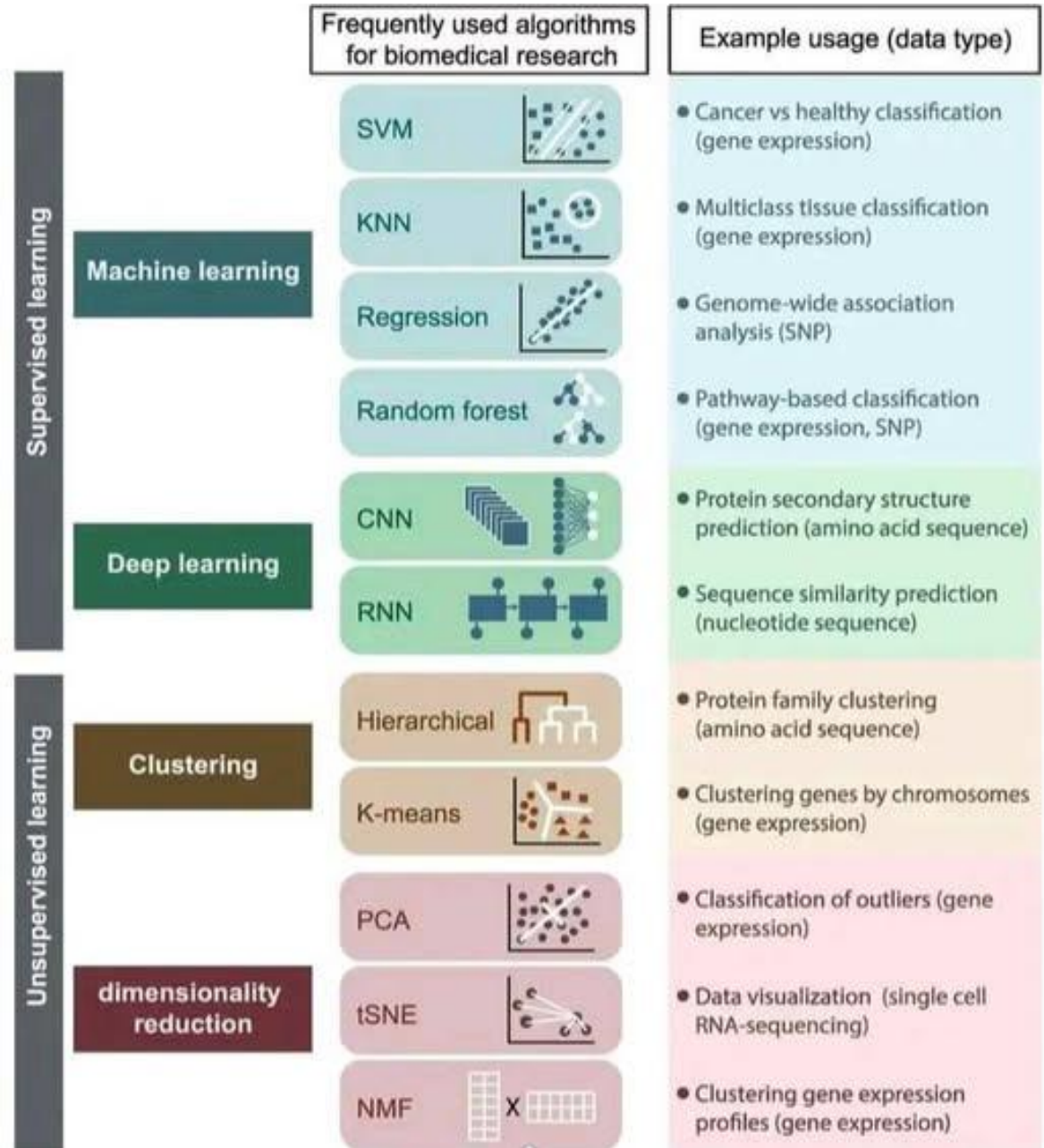
Ukážky aplikací

- Nástroj na analýzu mutačných signatúr: <http://147.175.151.109/>
- Metagenomika: <http://147.175.151.131/>

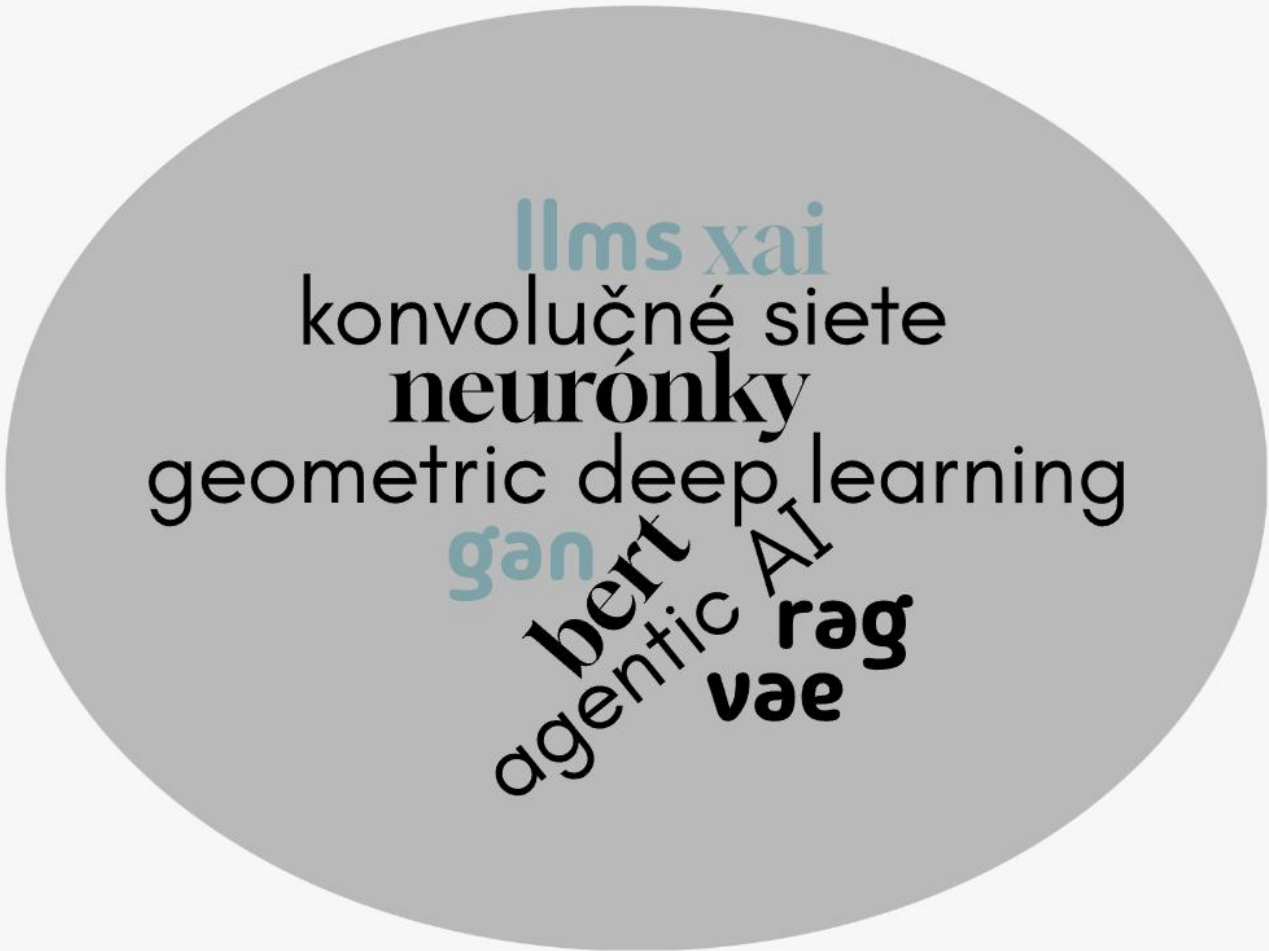
Čo
znamená,
keď sa
povie AI



Ako použijeme AI v bioinformatike



Buzzwords



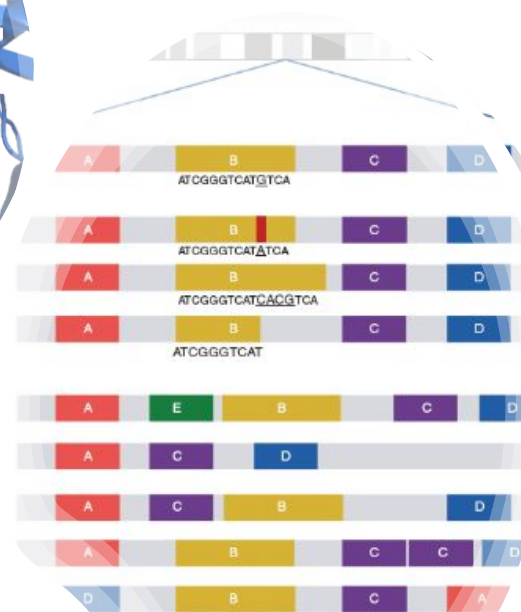
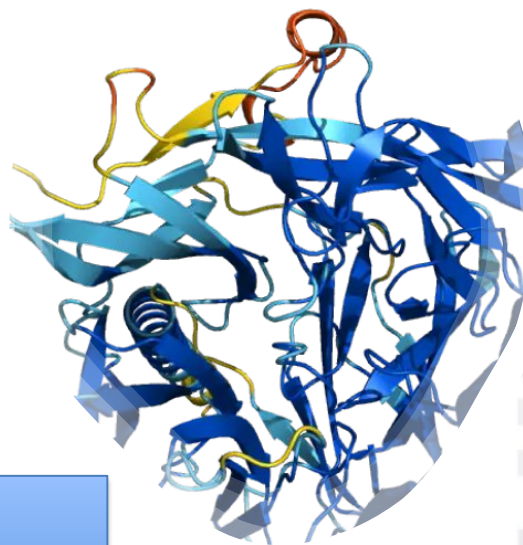
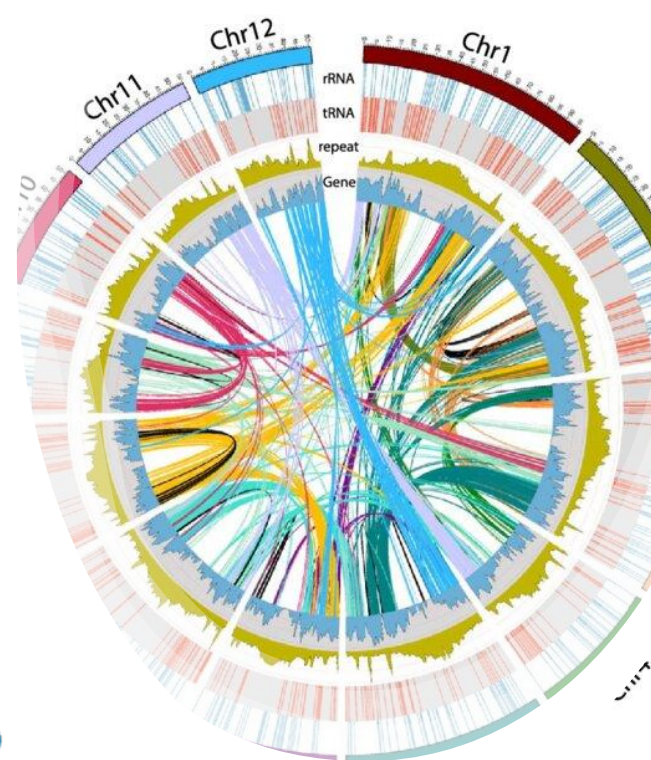
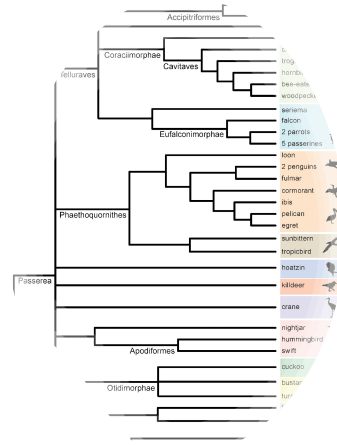
A word cloud of AI buzzwords is displayed within a light gray oval. The words are arranged in a circular pattern, with some words appearing larger and more prominent than others. The words include:

- llms xai
- konvolučné siete
- neurónky
- geometric deep learning
- gan
- bert
- agent AI
- rag
- vae

Akýkoľvek model použijeme, kľúčová je pre nás
vysvetliteľnosť (explainability)

Bez AI to už dnes nejde

- Analýza štrukturálnych zmien v genóme
- Predikovanie 3D štruktúry proteínov
- Evolučné vzťahy / fylogenetické stromy
- Analýza variantov
- Génová expresia



Prakticky nepredstaviteľné bez aktuálnej výpočtovej sily a moderných softvérových aplikácií

Kedy bioinformatika zlyháva

- Neúplne dáta, malé kohorty pacientov, nekvalitné dáta
- Nejednoznačnosť dát
- Často nie sú ustálené štandardy = rôzne softvéry, rôzne výstupy
- Nedostatočná interpretabilita a vysvetliteľnosť = „môžete nasadiť pacientovi liečbu, ktorej nerozumiete?“
- Aktuálny stav poznania

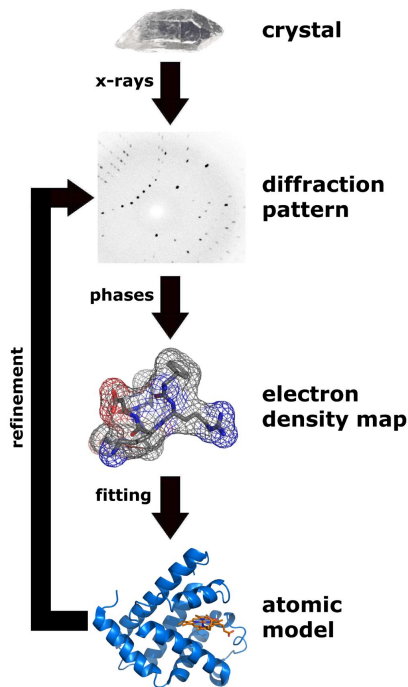
AlphaFold 2

Prelomový model
DeepMind od Googlu

Predikcia proteínov so
špičkovou presnosťou¹

Limity: flexibilita,
interakcie, membránové
proteíny

Ako sme sa sem dostali



Braggov zákon a
röntgenová kryštalografia

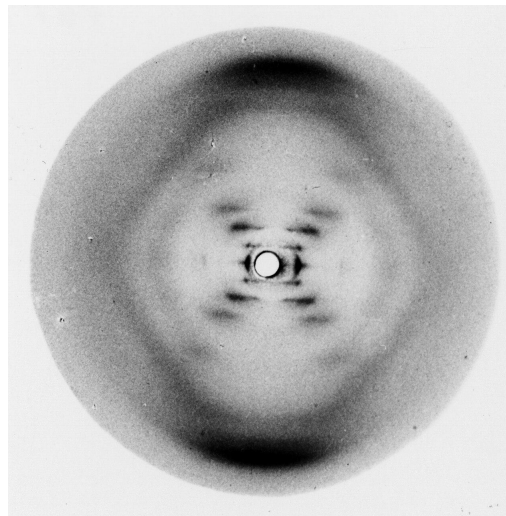
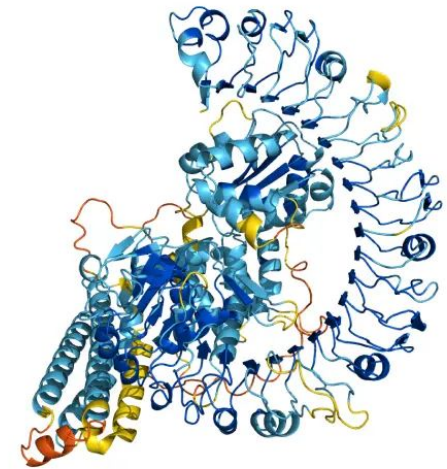


Photo 51 ako základ pre
určenie štruktúry DNA



Softvér na predikovanie
3D štruktúry AlphaFold 2

Aj vy môžete predikovať štruktúru proteínu

- Databáza génov:
<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
- AlphaFold server online:
<https://alphafoldserver.com/>