

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Nowoczesne zastosowania sztucznej inteligencji w modelowaniu biomolekuł , PG_00072664						
Kierunek studiów	Technologia chemiczna, Chemia, Biotechnologia, Inżynieria i technologie nośników energii, Korozja, Zielone technologie, InfoBioChem						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2026 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2026/2027				
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć					
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni				
Rok studiów	1	Język wykładowy	polski				
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS	3.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	zaliczenie				
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. inż. Jacek Czub					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	30.0	0.0	0.0	45
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach	Praca własna studenta	RAZEM		
	Liczba godzin pracy studenta	45	5.0	10.0	60		
Cel przedmiotu	<p>Przedmiot ma na celu zaprezentowanie oraz praktyczne wprowadzenie do narzędzi sztucznej inteligencji rozwijanych i wykorzystywanych współcześnie w bioinformatyce strukturalnej oraz chemii obliczeniowej. Studenci zrozumieją podstawy działania algorytmów uczenia głębokiego odpowiedzialne za sukces takich narzędzi jak AlphaFold czy RoseTTAFold, zapoznają się z koncepcjami odwrotnego fałdowania (inverse folding) oraz wypełniania (inpaintingu) białek, poznają modele fundamentalne umożliwiające reprezentację biomolekuł, związków małowcząsteczkowych czy genomów, a także wykorzystują interaktywne arkusze oraz serwery w celu praktycznego wykorzystania dostępnych narzędzi.</p>						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W01] rozpoznaje problemy współczesnej chemii, obejmujące właściwości oraz otrzymywanie związków chemicznych, niezbędne do dokonywania obliczeń, w tym obejmujące zależność struktury związku i jego reaktywność	zna i identyfikuje współczesne problemy badawcze bioinformatyki strukturalnej i chemii obliczeniowej możliwe do rozwiązania metodami AI; wyjaśnia zależności między sekwencją, strukturą, stabilnością, reaktywnością i oddziaływaniami cząsteczek a wynikami generowanymi przez narzędzia takie jak AlphaFold, RoseTTAFold, metody inverse folding/inpainting oraz potencjały neuronowe.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_W03] rozpoznaje i opisuje zjawiska z zakresu fizyki, obejmującą elementy mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędne do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania problemów technicznych	posiada niezbędną wiedzę do wyjaśnienia fizycznych założeń i ograniczenia metod AI stosowanych do modelowania struktur biomolekuł, konformerów, oddziaływań międzycząsteczkowych i energetyki molekularnej; interpretuje wyniki tych metod w odniesieniu do klasycznego i kwantowego opisu układów molekularnych.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_U04] opracowuje i przekazuje informacje techniczne w postaci dokumentów tekstowych, arkuszy kalkulacyjnych, wykresów, schematów technologicznych oraz prezentacji multimedialnych, oraz przygotowuje wystąpienie wraz z prezentacją multimedialną	opracowuje raport techniczno-naukowy i krótką prezentację dokumentującą wyniki miniprojektów; wykorzystuje tekst, tabele, wykresy i wizualizacje struktur molekularnych do przedstawienia danych wejściowych, zastosowanych metod, wyników oraz ograniczeń narzędzi AI do modelowania biomolekuł.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania
	[K7_U01] integruje i interpretuje informacje z literatury, baz danych i innych źródeł	pozyskuje, integruje i interpretuje informacje z literatury, baz danych strukturalnych, sekwencyjnych i chemicznych oraz serwerów AI; przygotowuje dane wejściowe, ocenia wiarygodność wyników i formułuje wnioski z predykcji modeli w ramach miniprojektów.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji
Treści przedmiotu	<p>Treści przedmiotu - wykład</p> <ul style="list-style-type: none"> • Problem zwijania białek i ewolucja prób jego rozwiązania: od podejść opartych na fizyce po przełom AlphaFold2 i nowe, generatywne metody wykorzystujące tzw. stabilną dyfuzję • Odwrotny problem zwijania białek. Podejścia wykorzystujące jednoczesną generację struktury i sekwencji • Przewidywanie struktury i konformerów dla kwasów nukleinowych, modyfikacji posttranslacyjnych i związków małocząsteczkowych • Przewidywanie zespołów kanonicznych biomakromolekuł: wyjście poza paradygmat pojedynczej struktury • Modele fundamentalne i uczenie reprezentacji w bio- i chemoinformatyce • Zastosowanie grafowych sieci neuronowych do przewidywania właściwości cząsteczek w oparciu o strukturę 3D • Potencjały neuronowe: fizyczne modele energetyki cząsteczek trenowane w celu przyspieszenia obliczeń kwantowochemicznych <p>Treści przedmiotu - laboratoria</p> <ul style="list-style-type: none"> • Nauka pracy z arkuszami Colab i kartami graficznymi • Minimalne podstawy biblioteki PyTorch • Praktyczne omówienie metod trenowania i wykorzystywania uprzednio trenowanych modeli • Cztery miniprojekty prowadzone w małych grupach: <ol style="list-style-type: none"> 1. Wykorzystanie serwerów do predykcji struktury białek i kwasów nukleinowych, w tym wpływu mutacji punktowych na stabilność makromolekuł 2. Projektowanie domen białkowych wiążących specyficznie wybrany cel makromolekularny 3. Nowoczesne metody dokowania i przewidywania oddziaływań w układach białko-białko, białko-ligand 4. Wykorzystanie i przebudowa istniejącej architektury uczenia głębokiego w celu zbudowania predyktora wybranej własności strukturalnej: miejsca wiązania jonów, kieszeni wiążącej ligand, mostków dwusiarczkowych 		
Wymagania wstępne i dodatkowe	<ul style="list-style-type: none"> • Znajomość języka programowania Python • Znajomość konceptualnych podstaw uczenia maszynowego i chemoinformatyki 		

Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	wykład: kolokwium końcowe	50.0%	25.0%
	laboratorium: cztery miniprojekty (raport)	50.0%	75.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Charles Ravarani, Natasha Latysheva: Deep Learning for Biology	
	Uzupełniająca lista lektur	Simon J.D. Prince: Understanding Deep Learning	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ul style="list-style-type: none"> • Jak uruchomić modele uczenia głębokiego wymagające znacznych zasobów obliczeniowych? • Jak zwalidować strukturalny model białka przewidziany przez algorytm uczenia głębokiego? • Jakie klasy problemów badawczych można dziś rozwiązywać z wykorzystaniem dostępnych narzędzi uczenia głębokiego? • Jakie bazy danych strukturalnych i sekwencyjnych można wykorzystać do zbierania danych wejściowych? Jak pobierać dane pojedynczo i w trybie wsadowym? • Jakie procedury pozwalają na przygotowanie czystych danych do trenowania modeli AI? • Wykorzystaj wybrany serwer do predykcji struktury w celu sprofilowania wrażliwości białka na mutacje. • Wybierz białko o znaczeniu biomedycznym i zaprojektuj domenę, która wiąże się w pobliżu miejsca aktywnego lub allosterycznego. • Scharakteryzuj wiązanie wybranego leku do ludzkiego białka hERG z wykorzystaniem metod dokowania opartych na stabilnej dyfuzji. • Przeprowadź w grupie czyszczenie danych, modyfikację kodu i trening dla zbudowania modelu predykcyjnego opartego na istniejących grafowych sieciach neuronowych. 		
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.