



Co-funded by
the European Union

Dirbtiniu intelektu paremta biotechnologija: naujų galimybių vaistų atradime atvėrimas



BIOS4YOU
AR 2.0

BIO-INSPIRED STEM TOPICS FOR ENGAGING YOUNG GENERATIONS
THANKS TO THE USE OF AUGMENTED REALITY

Project Number: 2023-1-DE03-KA220-SCH-000126516

"Funded by the European Union. Views and opinions expressed are however those of the author(s) only and do not necessarily reflect those of the European Union or the European Education and Culture Executive Agency (EACEA). Neither the European Union nor EACEA can be held responsible for them."





Turinys

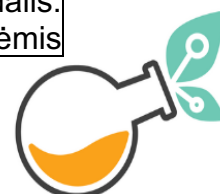
Išvada	4
1. Tyrinėjimas – Dirbtinio intelekto biotechnologijose pagrindai	5
1.1 Kas yra biotechnologija?	5
1.2 Kas yra dirbtinis intelektas (DI)?	5
1.3 Kaip dirbtinis intelektas skatina biotechnologijas?	5
1.4 Ar dirbtinis intelektas vaistų atradime keičia žaidimo taisykles?	5
2. Taikymas – papildytosios realybės vaidmuo dirbtinio intelekto valdomoje biotechnologijoje	6
2.1 Specifinės AR įrankių savybės ir tipai	6
2.2 Realios studijos ir praktiniai pratimai	7
3. Gilinimas – AR gilesniam mokymuisi ir įsitraukimui	7
3.1 Naudingų AR programėlių ir įrankių pavyzdžiai	7
3.2 Praktiniai integravimo į mokymosi patirtį pasiūlymai	7
Išvada	8
Literatūra	10





1 pav. Dirbtiniu intelektu paremta biotechnologija: naujų galimybių vaistų atradime atvėrimas.

Bendra mokymosi kelio tema	Dirbtinis intelektas biotechnologijose
Konkretus mokymosi vieneto pavadinimas	Dirbtiniu intelektu paremta biotechnologija: naujų galimybių vaistų atradime atvėrimas
Tikslinių vartotojų amžius	14–18 metų
Reikalavimai besimokančiajam	1. Pagrindinis aplinkos mokslo sąvokų supratimas (pvz., ekosistema, klimatas). Pagrindiniai raštingumo ir skaičiavimo įgūdžiai. Pagrindiniai IKT įgūdžiai. 2. Prieiga prie kompiuterio ar planšetinio kompiuterio su interneto ryšiu. 3. Noras naudotis skaitmeniniais įrankiais (papildytos realybės programėlėmis, „CoSpaces Edu“). 4. Ankstesnė programavimo ar papildytosios realybės (AR) kūrimo patirtis nereikalinga, nes „CoBlocks“ yra pritaikyta pradedantiesiems.
Mokymosi vieneto aprašymas	Šis mokymosi modulis suteikia išsamų įvadą į dirbtinį intelektą biotechnologijose ir, konkrečiau, į naujas galimybes vaistų atradimo srityje. Jis suskirstytas į tris dalis: „Tyrinėjimas“ supažindina su pagrindinėmis





	klimato kaitos, ekosistemų ir atkūrimo sąvokomis. „Vykdymas“ gilinasi į bioįkvėpimą, parodydamas, kaip natūralūs procesai įkvepia sprendimus ir kaip papildytoji realybė (PR) gali vizualizuoti šiuos procesus ir poveikį, pagrįstą realaus pasaulio pavyzdžiais ir praktine veikla. „Tobulinimas“ pagrindžia PR pedagoginę naudą, pateikdamas naudingų PR taikymo pavyzdžių ir praktinių integravimo strategijų. Modulis baigiasi praktine užduotimi, kurios metu studentai naudoja žaidimo pagrindu sukurtą PR patirtį „Delightex“ platformoje, kad sustiprintų savo supratimą ir įsitraukimą į temą.
Tema: Dalyvaujančios šalys	Skaitmeninis raštingumas / informatika, menas ir dizainas, socialiniai mokslai, matematika, kalbų menai
Raktiniai žodžiai	Dirbtinis intelektas (DI) Biotechnologijos, vaistų atradimas, mašininis mokymasis (ML), gilusis mokymasis, taikinių identifikavimas, virtuali atranka, klinikinių tyrimų optimizavimas, vaistų paskirties pakeitimas Bioįkvėpimas, skaitmeninis raštingumas, papildytoji realybė (AR), žaidimų kūrimas.
Pagrindinės kvalifikacijos, įgūdžiai ir žinios, kurias galima įgyti	Įgūdžiai: ● Kritinis mąstymas: didelių duomenų rinkinių analizė siekiant nustatyti modelius ir daryti prognozes moksliniame kontekste. ● Problemų sprendimas: biologiškai įkvėptų koncepcijų taikymas vaistų atradimo iššūkiams spręsti, pavyzdžiui, vaistų kandidatų suderinimas su taikiniais. ● Skaitmeninis raštingumas: papildytosios realybės (AR) programų naršymas ir naudojimas. ● Mokslinis tyrimas: duomenų interpretavimas ir natūralių procesų (virtualių ar realių) stebėjimas. ● Bendravimas: sudėtingų sąvokų aiškinimas ir idėjų pristatymas. Žinios:





	• Pagrindinių biotechnologijų ir dirbtinio intelekto (DI) principų, įskaitant mašininį mokymąsi (ML) ir gilųjį mokymąsi, supratimas. • Supratimas, kaip dirbtinis intelektas yra integruojamas į įvairius vaistų kūrimo etapus – nuo taikinių identifikavimo ir virtualios patikros iki klinikinių tyrimų ir vaistų paskirties keitimo. • Atpažįstant iš gamtos gautus biologijos įkvėptus sprendimus. • Papildytosios realybės potencialo ir pritaikymo biomoksluose ir sveikatos moksluose supratimas.
Naudoti ištekliai ir didaktinės priemonės	Ištekliai: • Vadovėliai / Moksliniai straipsniai • Atvejų analizės • Interneto ištekliai • Nemokamos AR platformos („Delightex“) • Su AR suderinami įrenginiai (išmanieji telefonai / planšetiniai kompiuteriai)
Vertinimo kriterijai ir vertinimas	• Dalyvavimas: įsitraukimas į diskusijas ir veiklas visame skyriuje. • Veiklos užbaigimas: praktinio AR pratimo atlikimas • Sąvokų žemėlapis / minčių žemėlapis: vizualinio vaizdavimo, susiejančio klimato kaitą, ekosistemas, atkūrimo metodus ir biologiškai įkvėptus sprendimus, sukūrimas.

Įvadas

Tradicinės vaistų kūrimo paradigmos, kurioms būdingos sudėtingos eksperimentinės procedūros, didelis vaistų atsisakymo lygis ir ilgi terminai, yra iš esmės keičiamos pažangių skaičiavimo metodikų. Šiame modulyje bus paaiškinta, kaip dirbtinio intelekto algoritmai, pasitelkdami savo gebėjimą greitai analizuoti duomenis, atpažinti modelius ir prognozuoti modeliavimą, optimizuoja įvairius vaistų kūrimo etapus, taip didindami efektyvumą, tikslumą ir ekonomiškumą. Baigę šį modulį, besimokantieji turės išsamų supratimą apie sinergetinį dirbtinio intelekto ir biotechnologijų ryšį ir jo reikšmę terapinių inovacijų ateičiai.





1. Tyrinėjimas – Dirbtinio intelekto biotechnologijose pagrindai

1.1 Kas yra biotechnologija?

Biotechnologija yra biologijos sritis, apimanti gyvų sistemų ir organizmų naudojimą produktams kurti ar gaminti, arba „bet koks technologinis pritaikymas, kuriame naudojamos biologinės sistemos, gyvi organizmai ar jų dariniai produktams ar procesams gaminti ar modifikuoti konkrečiam naudojimui“ (Biologinės įvairovės konvencija, 1992 m.). Nuo senovinių praktikų, tokių kaip alaus darymas ir kepimas, iki šiuolaikinės genų inžinerijos ir vakcinų gamybos, biotechnologija turi ilgą biologinių procesų panaudojimo žmonių labui istoriją.

1.2 Kas yra dirbtinis intelektas (DI)?

Dirbtinis intelektas (DI) – tai kompiuterinių sistemų, galinčių atlikti užduotis, kurioms paprastai reikalingas žmogaus intelektas, kūrimą. Šios užduotys apima mokymąsi, samprotavimą, problemų sprendimą, suvokimą ir kalbos supratimą. Pagrindinis DI pogrupis yra **mašininis mokymasis (ML)**, kai algoritmai mokosi iš duomenų be aiškaus programavimo. **Gilusis mokymasis**, pažangesnė ML forma, naudoja sudėtingus neuroninius tinklus didžiuliams duomenų kiekiams apdoroti, imituodamas žmogaus smegenų struktūrą.

1.3 Kaip dirbtinis intelektas skatina biotechnologijas?

Dirbtinio intelekto ir biotechnologijų integracija, dažnai vadinama dirbtinio intelekto varoma biotechnologija, žymi paradigmos pokytį gyvybės moksluose. Dirbtinio intelekto gebėjimas analizuoti didžiulius, sudėtingus duomenų rinkinius, nustatyti modelius ir daryti prognozes keičia įvairias biotechnologijų taikymo sritis – nuo genomo sekoskaitos iki personalizuotos medicinos (Asad ir Zulfiqar, 2024).

1.4 Ar dirbtinis intelektas vaistų atradime keičia žaidimo taisykles?

Vaistų atradimas yra puikus pavyzdys, kaip dirbtinis intelektas daro didelę įtaką. Tradiciškai šis procesas reikalauja daug išteklių, užima daug laiko ir pasižymi dideliu nesėkmės rodikliu. Dirbtinis intelektas keičia kiekvieną etapą, pagerindamas efektyvumą, sumažindamas sąnaudas ir sėkmės rodiklius (Pušcašu ir kt., 2025). Štai kaip dirbtinis intelektas spartina vaistų atradimą:

- **Greitesnis taikinių identifikavimas:** dirbtinis intelektas greitai analizuoja biologinius duomenis (genomiką, proteomiką), kad galėtų greitai nustatyti su liga susijusius terapinius taikinius, sutrumpindamas pradinį paieškos etapą.





- **Pagreitintas virtualus patikrinimas:** dirbtiniu intelektu paremti skaičiavimo modeliai greitai virtualiai patikrina milijardus cheminių junginių, numatydami, kurie iš jų greičiausiai jungsis prie konkretaus ligos taikinio. Tai labai pagreitina potencialių vaistų kandidatų identifikavimą, palyginti su fiziniais tyrimais (Marins ir kt., 2024).
- **Efektyvus vaistų kūrimas:** dirbtinis intelektas, įskaitant generatyvinį dirbtinį intelektą, nuo nulio kuria naujas molekulinės struktūras, optimizuodamas jas norimam biologiniam aktyvumui ir tobulindamas esamus vaistų kandidatus, siekdamas pagerinti veiksmingumą ir saugumą.
- **Patobulintas ADMET prognozavimas:** dirbtinio intelekto modeliai tiksliai prognozuoja vaisto absorbciją, pasiskirstymą, metabolizmą, išsiskyrimą ir toksiškumą (ADMET) ankstyvoje stadijoje. Tai leidžia tyrėjams greitai išfiltruoti kenksmingus ar neveiksmingus junginius, užkertant kelią brangiai kainuojantiems gedimams vėlesniuose etapuose.
- **Optimizuoti klinikiniai tyrimai:** dirbtinis intelektas analizuoja pacientų duomenis, kad efektyviai nustatytų tinkamus tyrimo dalyvius ir sukurtų tikslingesnius protokolus. Jis taip pat prognozuoja atsakymus ir stebi rezultatus realiuoju laiku, todėl greičiau įtraukiami pacientai, trumpėja tyrimų trukmė ir padidėja sėkmės rodikliai.
- **Greitas vaistų panaudojimas naujam tikslui:** dirbtinio intelekto algoritmai greitai nustato naujus esamų vaistų terapinius panaudojimo būdus, analizuodami didelius patvirtintų vaistų ir ligų informacijos duomenų rinkinius, taip paspartindami gydymo prieinamumą.

2. Taikymas – papildytosios realybės vaidmuo dirbtinio intelekto valdomoje biotechnologijoje

2.1 Specifinės AR įrankių savybės ir tipai

Šiam tikslui skirta AR programa būtų daugiau nei vizualizacijos įrankis; tai būtų dinamiška platforma atradimams, projektavimui ir problemų sprendimui. Pagrindinės funkcijos ir įrankiai galėtų būti šie:

- **3D modelių vizualizavimas:** leidžia studentams sąveikauti su molekulių, atomų, baltymų ir antikūnų 3D modeliais.
- **Interaktyvūs „kas būtų, jeigu“ scenarijai:** vartotojai galėtų manipuluoti vaistų kintamaisiais (pvz., toksiškumu) ir matyti AR prognozuojamą poveikį molekulėms.
- **Modeliavimas:** studentų patalpinimas į skirtingas virtualias aplinkas, siekiant stebėti įvairių kintamųjų poveikį vaistų atradimui (pvz., stebėti, kaip baltymas reaguoja į vaistą).





2.2 Realios studijos ir praktiniai pratimai

Buvo atliktas vaizdo tyrimas, kuriame dalyvavo 18 Ciuricho mokytojų rengimo universiteto būsimų vidurinių mokyklų mokytojų. Šiame tiriamajame tyrime molekulinės naršyklės įrankis „Molegram-Scientist“ buvo naudojamas bendradarbiaujant mokymosi modulyje su papildytosios realybės (AR) ausinėmis „HoloLens“. Analizė rodo, kad mokymosi užduotys buvo atliekamos susikaupus, nors AR ausinės buvo naujos ir todėl galėjo blaškyti dėmesį. Jų naudojimo paprastumas pasirodė esąs priimtinas. Buvo plačiai naudojami intuityvūs sąveikos metodai, pavyzdžiui, judėjimas klasėje ar bendradarbiavimas su kitais vartotojais. Apskritai išvados rodo, kad AR technologija atrodo tinkama bendradarbiaujant mokymosi moduliams ir reikalauja tolesnio tyrimo (Furrer ir kt., 2023).

3. Gilinimas – AR gilesniam mokymuisi ir įsitraukimui

3.1 Naudingų AR programėlių ir įrankių pavyzdžiai

Įvairūs papildytosios realybės įrankiai gali gerokai pagerinti mokymosi patirtį ekosistemų atkūrimo srityje, suteikdami įtraukiančius ir interaktyvius būdus tyrinėti sudėtingas aplinkos sąvokas. Štai pavyzdys:

„Delightex“ („CoSpaces Edu“):

[Delightex](#) leidžia vartotojams kurti interaktyvius 3D virtualius pasaulius ir vėliau juos patirti papildytoje arba virtualioje realybėje. Jame yra vilkimo ir numetimo sąsaja bei vizualiai blokais pagrįsta kodavimo kalba („CoBlocks“), todėl jis yra labai prieinamas mokiniams ir mokytojams, neturintiems ankstesnės programavimo patirties. Jis siūlo nemokamą versiją su pagrindinėmis funkcijomis. Mokiniai gali kurti ir kurti savo virtualias ekosistemas, imituoti aplinkos pokyčius ir vizualizuoti atkūrimo pastangas. Kūrybinė laisvė suteikia mokiniams galimybę tapti turinio kūrėjais, o ne tik vartotojais.

3.2 Praktiniai integravimo į mokymosi patirtį pasiūlymai

Šių AR įrankių integravimas į mokymo programą gali gerokai sustiprinti mokinių ryšį su ekosistemų atkūrimu ir padėti efektyviau kaupti žinias:

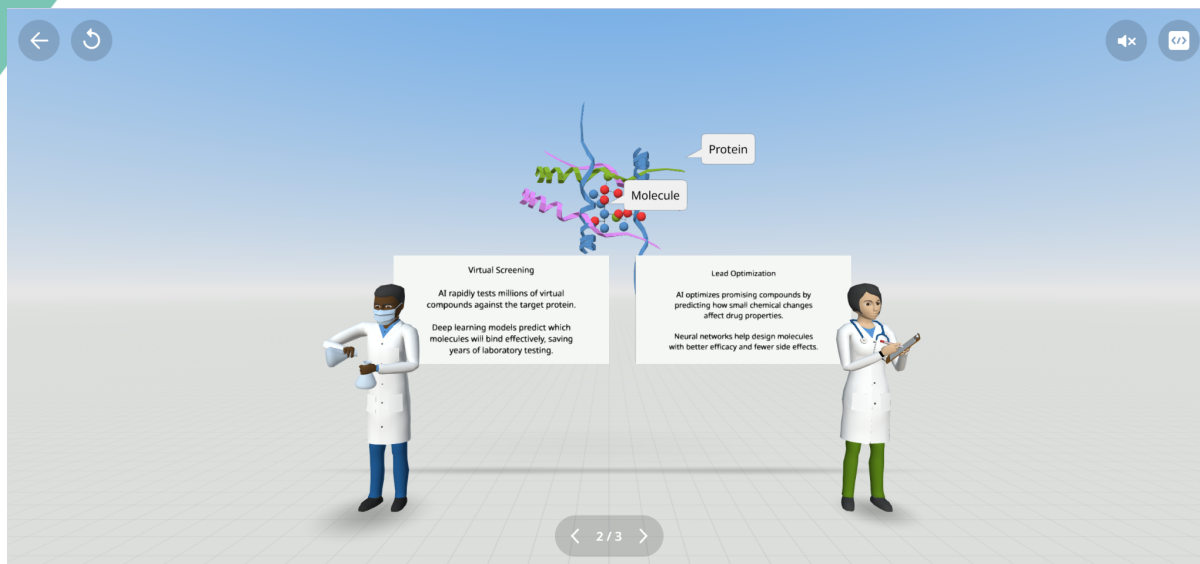
Pratimas: DI „Drug Matchmaker“ papildytos realybės programėlė.

DI „Drug Matchmaker“ papildytos realybės programėlėje mokiniai interaktyvioje „Delightx“ scenoje tyrinėja supaprastintą vaistų atradimo procesą. Jie vadovauja virtualiam „DI“, kuris naudoja pagrindinę kodavimo logiką, kad nustatytų tinkamą vaisto





molekulę, kuri jungtųsi su ligos taikiniu. Mokiniam testuojant skirtingas molekules, programėlė vizualiai demonstruoja molekulinės sąveikos 3D formatu, parodydama, kaip teisingi atitikmenys sudaro stabilius ryšius ir kaip neteisingi pasirinkimai neveikia. Užduoties pabaigoje mokiniai įgyja praktinį supratimą apie molekulinės sąveikas, vaistų taikinį ir DI vaidmenį vaistų atradime, susiedami abstrakčias biologines ir chemines sąvokas su interaktyviu, vaizdiniu ir praktiniu mokymusi.



2 pav. Dirbtinio intelekto vaistų atitikmenų kūrimo AR programėlė

Apdairiai integruodami papildytąją realybę į mokymo programą, pedagogai gali sukurti dinamišką, įtraukiančią mokymosi patirtį, kuri ne tik sustiprina mokinių ryšį su ekosistemų atkūrimu, bet ir suteikia jiems žinių bei įrankių, reikalingų aktyviai dalyvauti aplinkos tvarkyme.

Išvada

Šiame mokymosi skyriuje pateikta išsami apžvalga apie tai, kaip dirbtinis intelektas keičia biotechnologijas, ypatingą dėmesį skiriant jo didelei įtakai vaistų kūrimui. Mes nagrinėjome pagrindines dirbtinio intelekto ir biotechnologijų koncepcijas, gilinomės į praktinį dirbtinio intelekto taikymą vaistų kūrimo spartinimui ir matėme, kaip bioįkvėpimo principai ir toliau vadovauja inovacijoms. Be to, pabrėžėme papildytosios realybės (AR) transformacinį potencialą kaip galingą edukacinę priemonę, galinčią sudėtingas molekulinės sąvokas padaryti prieinamas, interaktyvias ir labai įtraukias besimokantiesiems.





Fazė	Aprašymas
Tyrinėjimas	- Tyrimai ir atradimai: supažindinkite studentus su molekulinės biologijos, vaistų atradimo ir dirbtinio intelekto pagalba atliekamo prognozavimo principais. Paaiškinkite, kaip vaistai sąveikauja su ligų taikiniai ir molekulinio jungimosi pagrindus.
	- Turinio kūrimas: pateikite įtraukiantį vaizdinį turinį, trumpus skaitymus ir animacijas, rodančias molekulinę struktūrą, ligų taikinius ir dirbtinio intelekto sprendimų priėmimo logiką.
	- Poreikių analizė: įvertinkite mokinių ankstesnės chemijos, biologijos ir skaičiavimo mąstymo žinias, kad pritaikytumėte papildytosios realybės (AR) veiklas ir viktorinos klausimus.
Taikymas	- Mokymo programos įgyvendinimas: susieti teorines molekulinę sąveiką, vaistų taikymo ir dirbtinio intelekto logikos sąvokas su praktiniais papildytosios realybės pratimais. Studentai sužinos, kaip skirtingos molekulės gali prisijungti (arba nesisijungti) prie ligos taikinių ir kaip dirbtinio intelekto algoritmai padeda numatyti teisingus atitikmenis.
	- Interaktyvūs pratimai: Naudodami papildytosios realybės programėlę „The AI Drug Matchmaker“, mokiniai vadovauja virtualiam DI, kad šis parinktų tinkamas vaistų molekules konkrečioms ligų taikiniams. Realio laiko 3D vizualizacijos rodo molekulių sąveiką ir jungčių stabilumą.
	- Atsiliepimų rinkimas: mokiniai apmąsto savo pasirinkimus, aptaria rezultatus su bendraamžiais ar mokytojais ir lygina skirtingas veiksmingo vaistų kūrimo strategijas.
Gilinimas	- AR integracija: AR programėlė vizualizuoja molekulių jungimosi sąveikas 3D formatu, todėl abstraktūs biocheminiai procesai tampa apčiuopiami ir interaktyvūs.
	- Interaktyvus mokymasis:
	Žaidimo turinys: -
	AR pagrindu atliekami vertinimai: tradicinius testus pakeiskite interaktyviais vertinimais, kuriuose studentai demonstruoja molekulinę sąveiką, vaistų atradimo principų ir dirbtinio intelekto pagalba atliekamų prognozavimo procesų supratimą.





Literatūra

Furrer, F., Bühler, W., Wyss, C., Degonda, A. ir Hiss, JA (2023). Mokymasis su papildytosios realybės technologijomis in der Hochschule: Erkenntnisse einer Videostudie mit angehenden Sekundarlehrpersonen. MedienPädagogik: Zeitschrift für Theorie und Praxis der Medienbildung, 51, 87-113.

Wang, Y., ir Li, G. (2020). Papildytosios realybės taikymas gamtos mokslų ugdyme: sisteminė apžvalga. „Journal of Educational Technology & Society“, 23(3), 108–122.

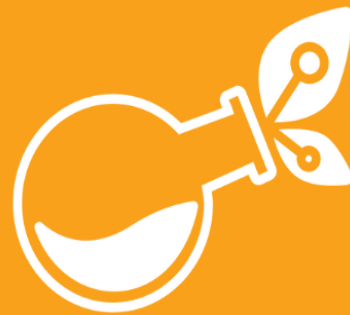
Azuma, RT, Bailiot, Y., Behringer, R., Feiner, S., Julier, S. ir MacIntyre, B. (2001). Naujausi papildytosios realybės pasiekimai. IEEE kompiuterinė grafika ir taikymai, 21(6), 34–47.

Wu, HK, Lee, SWY, Chang, HY ir Liang, JC (2013). Dabartinė papildytosios realybės švietime padėtis, galimybės ir iššūkiai. Kompiuteriai ir švietimas, 62, 41–49.





Co-funded by
the European Union



BIOS4YOU

AR 2.0

BIO-INSPIRED STEM TOPICS FOR ENGAGING YOUNG GENERATIONS
THANKS TO THE USE OF AUGMENTED REALITY

Project Number: 2023-1-DE03-KA220-SCH-000126516

Funded by the European Union. Views and opinions expressed are however those of the author(s) only and do not necessarily reflect those of the European Union or the European Education and Culture Executive Agency (EACEA). Neither the European Union nor EACEA can be held responsible for them.