

Symulacje, język potoczny i AI w służbie antynowotworowej medycyny przyszłości

Diagnostyka raka – szczególnie ta w trakcie trwania terapii – odgrywa kluczową rolę w skutecznym jego leczeniu. Odpowiednie zaplanowanie terapii pozwala nie tylko ograniczyć ryzyko nawrotu choroby, ale również zminimalizować skutki uboczne, zwłaszcza w przypadku terapii oszczędzających, których celem jest zachowanie jak największej ilości zdrowej tkanki i funkcji narządów. Dlatego, głównym celem współczesnej onkologii jest przewidywanie, jak guz będzie się rozwijał po zastosowaniu terapii antynowotworowej i jak najlepiej dopasować leczenie do indywidualnej sytuacji pacjenta. Coraz większą rolę w tym procesie odgrywają metody sztucznej inteligencji wspomagane obliczeniami, które pozwalają prognozować przebieg choroby i reakcje na różne schematy leczenia. Niestety, precyzyjne i jednocześnie szybkie symulowanie złożonych procesów biologicznych wciąż stanowi poważne wyzwanie. To właśnie jedno z kluczowych wąskich gardeł w rozwoju tzw. medycyny predykcyjnej — czyli takiej, która nie tylko leczy, ale też przewiduje rozwój choroby i dostosowuje terapię z wyprzedzeniem.

Projekt, nad którym pracujemy, podejmuje się rozwiązania tego problemu poprzez stworzenie nowej generacji modeli obliczeniowych do szybkiego modelowania ewolucji guzów przy użyciu sztucznej inteligencji (AI). Nasze podejście opiera się na metodach hybrydowych — łączących uczenie maszynowe (modele bazujące na danych) z klasyczną symulacją opartą na wiedzy biologicznej i modelach matematycznych. Jednym z kluczowych elementów innowacyjnych będzie tu opracowanie tzw. architektur generatywnych typu enkoder–procesor–dekoder wykorzystujące najnowocześniejsze modele bazujące na tzw. głębokich sieciach neuronowych. Umożliwią one tworzenie modeli, które potrafią łączyć skąpe dane z praktyki klinicznej z bogatymi, sztucznie wygenerowanymi danymi z symulacji komputerowych. Efektem będzie system zdolny do przewidywania rozwoju nowotworu w różnych wariantach leczenia.

Żeby umożliwić szersze zastosowanie takich modeli – nie tylko przez informatyków i biologów systemowych, ale też przez lekarzy – wprowadzimy także interfejs oparty na języku naturalnym. Wykorzystamy do tego nowoczesne modele językowe (LLM – *Large Language Models*) oraz podejście RAG (*Retrieval-Augmented Generation*), które połączy wiedzę z różnych dziedzin: onkologii, farmakologii i modelowania komputerowego. Efektem naszego projektu będzie nowatorski system: **Language-Driven Therapy Design (LDTD)** – czyli projektowanie terapii wspomagane językiem naturalnym. Lekarze i badacze będą mogli za pomocą zwykłych komend w języku potocznym tworzyć, analizować i modyfikować spersonalizowane formy leczenia raka przy pomocy symulacji komputerowej.