



PUC Minas

IA aplicada à descoberta DE NOVOS MEDICAMENTOS

Discentes: Felipe R. Mizher, Paulo Gabriel O. Leite

Docente: Maury Meirelles

SÚMARIO

1. Introdução
2. Referencial Teórico
3. Trabalhos Relacionados
4. Metodologia
5. Resultados Esperados
6. Conclusão



INTRODUÇÃO

Contexto:

- IA: Tecnologia de impacto global e análise de Big Data (genômica e registros clínicos).
- Medicina de Precisão: Personalização baseada no perfil genético.

Montivação:

- **Tempo:** 10 a 15 anos para um novo fármaco chegar ao mercado.
- **Falhas:** ~90% de taxa de falha em testes clínicos.
- **Custo:** Processo tradicional é extremamente caro e ineficiente.

INTRODUÇÃO

Objetivo geral:

- Investigar a aplicação atual da IA na pesquisa de novos medicamentos.
- Identificar técnicas (Machine Learning, Deep Learning).
- Apontar casos de sucesso e expectativas futuras.

Justificativa:

- **Fragmentação:** Conhecimento disperso entre TI, Biologia e Farmácia.
- **Necessidade:** Consolidar informações sobre modelos complexos (GANs, Modelagem Preditiva).
- **Contribuição:** Servir de referência estratégica para novos pesquisadores.



REFERENCIAL TEÓRICO

Conceitos Fundamentais

Tecnologias Chaves



CONCEITOS FUNDAMENTAIS

- **IA Aplicada:** Reprodução de raciocínio e aprendizado para otimizar tarefas.
- **Medicamentos:** Substâncias utilizadas para prevenir, tratar ou aliviar sintomas de doenças.

TECNOLOGIAS CHAVES

- **Deep Learning (DL):** Redes neurais que aprendem representações complexas para reconhecer padrões e prever interações moleculares
- **GANs (Generative Adversarial Networks):** Modelo onde duas redes competem (geradora vs. discriminadora) para criar novas estruturas químicas e moléculas.



TRABALHOS RELACIONADOS

- Relatório de Visão de Futuro da Saúde Digital - CBTT| Q. B4
- A GAN-Based Data Augmentation Method for Mitigating Class Imbalance Problem in Histopathological Image Classification - IEEE| Q. A2
- Autonomous Drug Discovery With Parallel Intelligence - IEEE| Q. B2
- Inteligência Artificial e Medicina: Luiz Carlos Lobo - RBEM | Q. A
- O papel da inteligencia artificial na descoberta e desenvolvimento de fármacos - BJIHS| Q. B3
- A Extração de Entidades Nomeadas em Bulas de Medicamentos e em Relatos de Casos Clínicos - SBCAS| Q. B3



METODOLOGIA

- A pesquisa possui natureza aplicada, pois busca compreender como técnicas de Inteligência Artificial podem contribuir para a descoberta de novos medicamentos, unindo teoria e aplicações práticas na área farmacêutica.
- Quanto aos objetivos, trata-se de um estudo exploratório e descritivo: exploratório por aprofundar o entendimento sobre o tema e identificar métodos e tendências na literatura; e descritivo por organizar e apresentar de forma clara as informações coletadas.





METODOLOGIA

- O desenvolvimento do estudo envolveu duas principais etapas:
 - Levantamento e seleção de materiais, realizado em bases científicas como a IEEE e outras fontes da área médica.
 - Análise e síntese dos conteúdos, organizando as informações coletadas em temas como métodos utilizados, vantagens, desafios e resultados encontrados na literatura.



RESULTADOS ESPERADOS

- Redução significativa de tempo e custo nas etapas iniciais de descoberta de fármacos por meio de algoritmos de IA.
- Aumento da precisão na identificação de moléculas promissoras, com maior eficiência na triagem e seleção.
- Maior segurança no desenvolvimento, com modelos preditivos capazes de antecipar falhas clínicas e riscos toxicológicos.



CONCLUSÃO

A REVISÃO REALIZADA MOSTRA QUE A INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL ESTÁ TRANSFORMANDO PROFUNDAMENTE A DESCOBERTA E O DESENVOLVIMENTO DE NOVOS FÁRMACOS. AS TÉCNICAS ANALISADAS — COMO DEEP LEARNING, GANS E MODELOS PREDITIVOS — DEMONSTRAM GRANDE POTENCIAL PARA ACELERAR PROCESSOS, REDUZIR CUSTOS E AUMENTAR A PRECISÃO NA IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS PROMISSORES. AO CONSOLIDAR ESTUDOS RELEVANTES E DESTACAR DESAFIOS E TENDÊNCIAS, ESTE TRABALHO OFERECE UMA VISÃO CLARA DO ESTADO ATUAL DA ÁREA E REFORÇA O PAPEL ESTRATÉGICO DA IA COMO IMPULSIONADORA DA INOVAÇÃO FARMACÊUTICA.



OBRIGADO!

