



Inteligência Artificial Aplicada à Área de Drug Discovery

Arthur Alves Cerveira
aacerveira@inf.ufpel.edu.br



Arthur Cerveira

- Mestrando em **Computação** na Universidade Federal de Pelotas
- Membro do **Hub de Inovação em Inteligência Artificial** desde 2021
- Atualmente pesquisando técnicas de IA aplicadas à área de drug discovery





Como IA é aplicada em Drug Discovery

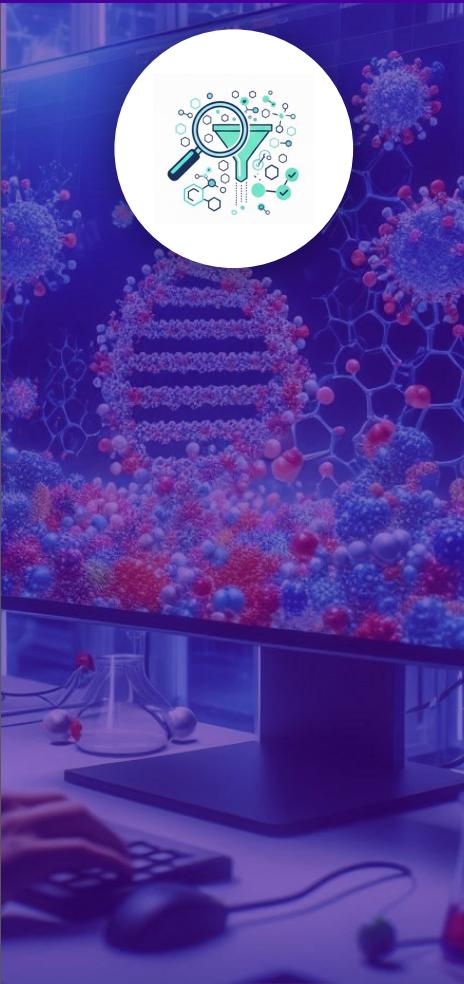
Técnicas de IA são frequentemente adotadas para acelerar os estágios iniciais do processo de descoberta de fármacos [1]

Virtual Screening



de novo Molecular Design





Virtual Screening

- Consiste em usar modelos de IA e técnicas computacionais para processar grandes bases de dados moleculares
- A ideia aqui é filtrar apenas compostos que exibem propriedades moleculares desejadas dentro dessas bases
- **Porém, existem limitações:** só é possível identificar moléculas já previamente conhecidas, que estão presentes nessas bases de dados utilizadas



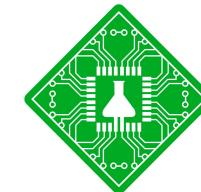
de novo Molecular Design

- No *de novo Molecular Design*, técnicas de inteligência artificial são utilizadas para gerar novas moléculas
- Nessa abordagem, é possível direcionar esse processo de geração para otimizar propriedades terapêuticas desejadas
- Dentre as principais estratégias utilizadas, temos:
 - **Algoritmos Evolutivos**
 - **Redes Neurais Generativas:** transformers, RNNs, modelos de difusão, muitas vezes otimizados com aprendizado por reforço



Modelos de IA são capazes de desenvolver novos medicamentos?

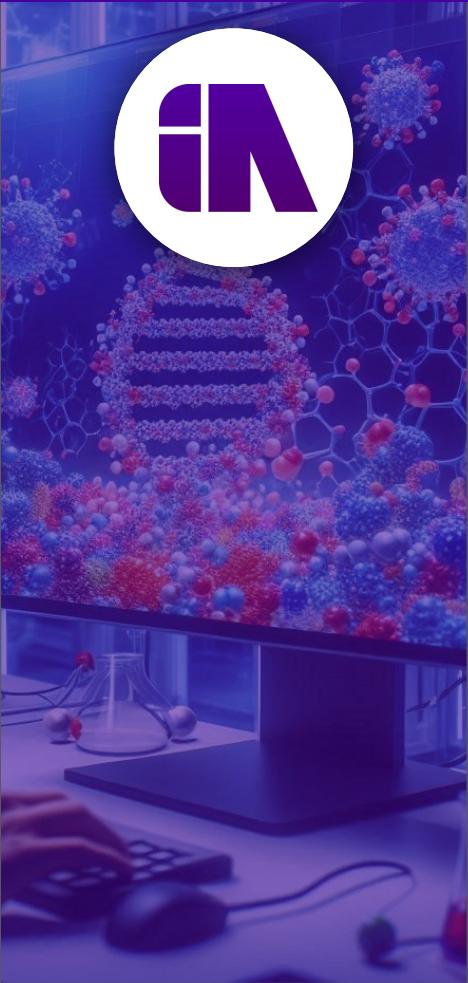
- Modelos generativos para design molecular ainda estão em estágio emergente na indústria de fármacos
- Embora métodos computacionais já tenham gerado terapias aprovadas, nenhum fármaco totalmente desenvolvido por IA chegou à fase 3 de ensaios clínicos
- Candidatos promissores, como o *rentosertib* da *InSilico Medicine*, estão se aproximando desse marco [4]





Modelos de IA são capazes de desenvolver novos medicamentos?

- Evidências iniciais indicam maior taxa de sucesso em fase 1 para moléculas descobertas por IA, diminuindo a eliminação inicial de candidatos
- Automação, aprendizado de máquina e modelos generativos estão acelerando o processo de descoberta de fármacos.
- A expectativa é que o papel da IA continue crescendo e transformando o desenvolvimento de medicamentos nos próximos anos



O que eu venho trabalhando

CoMPO-GPT: Cross-Attention Conditioning for Multi-target Molecular Design in Generative Models

Novo método de design molecular condicional para gerar moléculas multi-alvo

Enhancing Graph Neural Networks for Multi-Target Activity Prediction Through Multi-Task Learning and Knowledge Distillation

Aprimora modelos de predição de atividade molecular multi-alvo

Revealing Token-Level Importance in Conditional Molecular Design Through Kullback–Leibler Divergence

Método de explicabilidade para métodos de design molecular condicional

Participação em eventos e apresentação de trabalhos





Futuras perspectivas de pesquisa

- Uso de arquiteturas de redes neurais mais modernas e novos métodos de otimização para molecular design
- Desenvolvimento de técnicas que incorporem representações multi-modais em drug discovery
- Comparação entre diferentes representações moleculares, abordagens de geração de moléculas, métodos de otimização dos modelos

Referências

- [1] [Artificial intelligence in drug discovery: recent advances and future perspectives](#)
 - [2] [QSAR-Based Virtual Screening: Advances and Applications in Drug Discovery](#)
 - [3] [GuacaMol: Benchmarking Models for De Novo Molecular Design](#)
 - [4] [A generative AI-discovered TNK inhibitor for idiopathic pulmonary fibrosis: a randomized phase 2a trial](#)
-