



# Inteligência Artificial Aplicada à Área de Drug Discovery

---

Arthur Alves Cerveira  
[aacerveira@inf.ufpel.edu.br](mailto: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



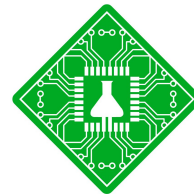
## de novo Molecular Design

- 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](#)
-