***Trabajo Práctico de Investigación***

***Sobre Inteligencia Artificial (IA)***

Materia: Laboratorio

Comisión: 1605

Tema: Redes Neuronales

Alumnos: Martínez Rafael, Bustamante Alfredo, Lo Re Agustin

Pregunta:

¿Se pueden utilizar redes neuronales para acelerar el proceso de descubrimiento de nuevos fármacos y reducir los costos? ¿Cuáles son las implicancias éticas de este desarrollo?

Metodología de investigación:

Revisión crítica de la literatura existente.

## Fuentes: <https://www.visium.ch/insights/articles/how-ai-powered-drug-development-is-reshaping-pharmaceutical-research/> (AB) **AI-Powered Future ofDrug Development**

Artificial intelligence is already transforming the drug development value chain, offering immense potential to increase efficiency, reduce costs, and speed up the discovery and development of life-saving drugs.

And while some pharma companies untangle AI's benefits quicker than others, by finding the balance between recognizing AI technologies' opportunities and its potential risks, it's only a matter of time until it is fully integrated into the drug development process.

<https://revistamedicina.net/index.php/Medicina/article/view/1652> (ALR)

<https://www.nature.com/articles/d43747-021-00045-7> (RM)

Ya desde 1970 los algoritmos de manejo de datos nos han estado ayudando como humanidad al desarrollo de nuevos fármacos. Procesando los datos ya obtenidos en experimentos anteriores, manejándolos con nuevos datos recopilados para predecir los resultados de experimentos novedosos.

Hasta ahora solo teníamos predicciones primitivas, pero con la ayuda de los nuevos modelos de procesamiento de datos y aprendizaje de las experimentaciones de estas, podemos tener datos certeros, disminuyendo la utilización de seres vivos para la investigación.

Hasta el año 2021 tenemos datos de experimentos para el avance en el comportamiento celular, para revelar avances en la interacción de estas y descubrir nuevos fármacos, sin necesidad de experimentar en seres vivos. Estos procedimientos son benévolos y además más rápidos en comparación a los métodos que se tenían antaño

Otros experimentos notables han sido:

* AstraZeneca y BenevolentAI en 2019 colaboraron en búsqueda de nuevos medicamentos para la enfermedad renal crónica y la fibrosis pulmonar idiopática.
* En 2020 Exscientia logro desarrollar un inhibidor selectivo de la recaptación de serotonina (ISRS) diseñado para tratar el trastorno obsesivo compulsivo (TOC)

Fuente: https://www.nature.com/articles/d43747-021-00045-7

Como nos ayudan las redes neuronales específicamente en estos descubrimientos:

Inspiradas en las redes de neuronas cerebrales, las redes neuronales computacionales funcionan de una manera similar, con nodos como neuronas y distintas capas de conocimiento y aprendizaje.

Son comparables a los árboles de decisión y, además, se activa una detrás de otra y en conjunto al mismo tiempo, dando como resultado un análisis de datos rápido y certero comparando varios datos.

Además de tener muchos datos de objetos de estudio e investigaciones previas en la historia de la humanidad, una IA de medicina y especifica a la creación de nuevos fármacos, tendrá resultados rápidos y humanos en pocos días, en vez de grandes experimentos que tardarían años.

Articulo: APLICACIONES DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN LA FARMACOLOGÍA BÁSICA Y CLÍNICA

La investigación farmaceutica se divide en dos categorias, preclínica y clínica.

La primera es la investigación en laboratorio de blancos biologicos terapéuticos y los compuestos con potencial farmacológico que sean seguros, no toxicos y capaces de alterar el comportamiento de dichos blancos a fin de alterar el curso de una enfermedad.

Sobre esta etapa de investigacion, la inteligencia artificial y las redes neuronales permiten la aceleración de los tiempos de identificación al permitir la automatización de tareas complejas y repetitivas como por ejemplo el modelamiento de proteínas. Específicamente, el algoritmo AlphaFold predice con una alta precision la estructura de una proteína. El algoritmo está entrenado con una base de datos de estructuras de proteínas determinadas experimentalmente. Con base en las distancias y ángulos de esas proteínas, y la secuencia de aminoácidos de la proteína de la cual queremos determinar la estructura, se genera un modelo tridimensional de la molécula objetivo con alta precisión.

La investigación clínica es el estudio sistemático científico realizado con medicamentos o productos biológicos sobre seres humanos voluntarios, sanos o enfermos, con el fin de descubrir o verificar sus efectos terapéuticos y/o identificar reacciones adversas y/o estudiar la absorción, distribución, metabolismo (biotransformación) y excreción de los principios activos con el objeto de establecer su eficacia y seguridad.

En este tipo de investigación, la inteligencia artificial mejora la reutilización o reposicionamiento de medicamentos a través de la reducción de los costos tradicionales y cuyo retorno monetario en I+D no hubiese sido rentable o atractivo para la industria farmacéutica.