

Framework basado en Inteligencia Artificial para descubrir nuevos Medicamentos

Adolfo Centeno Tellez

Departamento de Ciencias Computacionales
Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey
Campus Puebla, Mexico

Gonzalo Aranda Abreu

Centro de Investigación en Ciencias Cerebrales
Universidad Veracruzana
Campus Xalapa, Mexico

March 1, 2021

Abstract

Este trabajo propone la creación de un marco de trabajo basado en Inteligencia Artificial para el descubrimiento de nuevos medicamentos, usando el método insilico.

1 Introduction

En la actualidad el uso de las grandes clusters de supercomputadoras, la inteligencia artificial particularmente el Deep Learning han ayudado en la generación de conocimiento nuevo en diversas áreas de la ciencia. El presente trabajo pretende usar redes neuronales artificiales del tipo Variational Autoencoders para el descubrimiento de nuevos medicamentos usando la base de datos MOSES como principal fuente de información para el entrenamiento.

2 Objetivo general

Construir un marco de trabajo para simular por computadora el diseno de farmacos nuevos, que incluya servidores en la nube, software, procesos, procedimientos

3 Objetivos especificos

1. Instalar configurar los servicios en servidores
2. Desarrollar y/o instalar software de IA para la simulacion insilico
3. Documentar los procesos para realizar las simulaciones
4. Validar el experimento contra otros modelos realizados in vitro, en animales, entre otros.
5. Publicar resultados

4 Cronograma de actividades

1. Investigar el estado del arte del modelo insilico y herramientas existentes (www.insilico.com)
2. Establecer modelo de computo en la nube para la instalacion y configuracion de las herramientas de software
3. Entrenamiento en herramientas tensorflow y keras basadas en python
4. Entrenamiento en redes neuronales VAN y modelos generativos (ejemplos con rostros, flores, aves, entre otros)
5. Instalacion del modelo de base de datos de moleculas MOSES (5,000,000 de medicamentos)
6. Instalar, configurar modelos existentes como el modelo GENTRL de la empresa china insilico.com.
7. Probar el modelo pharmaio

8. Probar el modelo pharmaio xxx
9. Seleccionar una caso de estudio para simular la generacion de un farmaco
10. Codificar las redes neuronales para conducir el experimento
11. Validar el experimento
12. Documentar procesos y resultados
13. Publicar hallazgos de la investigacion