



PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE MINAS GERAIS

Bacharelado em Ciência da Computação

Lívia Câmara Xavier
Sophia Carrazza Ventorim de Sousa

**Simulação Quântica para a eficiência de fármacos na indústria
da Medicina por meio de Redes Neurais e Deep Learning**

Belo Horizonte

2021

Lívia Câmara Xavier
Sophia Carrazza Ventrone de Sousa

Simulação Quântica para a eficiência de fármacos na indústria da Medicina por meio de Redes Neurais e Deep Learning

Projeto de Pesquisa apresentado na disciplina Trabalho Interdisciplinar III - Pesquisa Aplicada do curso de Ciência da Computação da Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais.

Belo Horizonte

2021

RESUMO

Texto do resumo.

Palavras-chave: .

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	25
1.1	Objetivos	25
1.1.1	<i>Objetivos específicos</i>	25
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	26
2.1	Fundamentação teórica	26
2.2	Trabalhos relacionados	27
3	METODOLOGIA.....	28
3.1	Atividades a serem realizadas	28
3.1.1	<i>Atividade 1: xxxx</i>	28
3.1.2	<i>Atividade 2: xxxx</i>	28
3.1.3	<i>Atividade n: xxxx</i>	28
3.2	Cronograma	28
4	PRIMEIRO CAPÍTULO DE EXEMPLO.....	29
4.1	Primeira seção	29
4.1.1	<i>Primeira subseção</i>	30
4.2	Segunda seção	30
5	SEGUNDO CAPÍTULO DE EXEMPLO.....	31
6	OBSERVAÇÕES IMPORTANTES	33
	REFERÊNCIAS	34

1 INTRODUÇÃO

Contexto - dois a quatro parágrafos

Problema

Justificativa

Este trabalho está organizado da seguinte forma. A seção 1.1 asdadas dasda. O capítulo ?? apresenta o referencial teórico usado neste trabalho. O capítulo 3 descreve os procedimentos metodológicos ...

1.1 Objetivos

O objetivo geral deste projeto é desenvolver um pseudo-programa de simulação quântica para prever a eficiência de medicamentos e suplementos em pacientes, sem a necessidade de testes em humanos.

1.1.1 *Objetivos específicos*

Os objetivos específicos deste projeto são:

1. Verificar as possibilidades da criação de um algoritmo com computação quântica com a tecnologia disponível em larga escala em 2024.
2. Validar a precisão e confiabilidade do programa por meio de comparações com dados clínicos reais.
3. Criar uma interface simples e eficiente para permitir acessibilidade.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Um problema da atualidade é a lentidão e burocracia na produção de remédios, que se dá pela dificuldade nos testes e estudos de eficácia desses produtos. Isso pois, testes laboratoriais demandam muitos equipamentos caros e é demasiadamente difícil analisar se o medicamento realmente é eficaz a longo prazo ou se funciona somente a curto prazo, causando prejuízos adversos.

"A indústria farmacêutica tem enfrentado desafios significativos em relação ao tempo e ao custo associados à descoberta e produção de novos medicamentos. Os extensos testes laboratoriais e estudos clínicos necessários para garantir a eficácia e segurança dos medicamentos muitas vezes resultam em longos períodos de desenvolvimento e custos elevados, tornando a produção de novos medicamentos uma tarefa complexa e dispendiosa."(SNEADER, 2005).

2.1 Fundamentação teórica

Com base nisso, a utilização da simulação quântica se torna essencial, uma vez que o tempo e o custo do teste desses medicamentos será reduzido e trará resultados positivos para a população. Isso pode ser feito através da utilização da simulação quântica se torna essencial, uma vez que, com computadores como o D-Wave X2, de 2016, que é 100 milhões de vezes mais rápido que um PC convencional, o tempo e o custo da simulação de testagem destes medicamentos serão reduzidos e trarão resultados positivos para a população.

Logo, mesmo com diversas técnicas já implementadas, a simulação quântica ainda se mostra mais vantajosa, por sua rapidez e revolução na área da medicina, que é o foco pretendido para o desenvolvimento desta pesquisa.

A partir disso, o caminho de resolução utilizado para esse projeto é a construção de um modelo Deep Learning: um subcampo das redes neurais artificiais, um método de IA que pode ser usado para analisar grandes conjuntos de dados, e muito eficaz para identificar padrões complexos úteis no desenvolvimento de medicamentos, amplificado pela computação quântica.

2.2 Trabalhos relacionados

Dessa forma, foi selecionado dois artigos: "An agent-based modeling and virtual reality application using distributed simulation: Case of a COVID-19 intensive care unit"(POSSIK et al., 2022), Esse artigo demonstra a necessidade da utilização da simulação 2d e 3d na área da saúde, principalmente pelo fato de permitir a realização de cálculos mais precisos e treinamentos de funcionários para lidar com diversas situações divergentes. E "Computational methods for the analysis and prediction of egfr-mutated lung cancer drug resistance: Recent advances in drug design, challenges and future prospects"(QURESHI et al., 2022), que mostra de fato como técnicas computacionais podem ser usadas no teste de identificação de células cancerígenas e eficiência de fármacos, incluindo a utilização do programa AlphaFold, o qual provou que, com a análise de uma grande quantidade de dados, é possível perceber o porquê de alguns remédios funcionarem para algumas pessoas e não para outras, por questões clínicas e genéticas. No entanto, por terem testado diversos métodos, os autores não conseguiram aprofundar de forma totalmente eficaz a ferramenta.

3 METODOLOGIA

Este capítulo Apresentar uma classificação da pesquisa.

3.1 Atividades a serem realizadas

Esta seção apresenta

3.1.1 *Atividade 1: xxxx*

Descrição

3.1.2 *Atividade 2: xxxx*

Descrição

3.1.3 *Atividade n: xxxx*

Descrição

3.2 Cronograma

Esta seção apresenta ... (Tabela 1).

Tabela 1 – Cronograma

	Meses 1-3	Meses 4-6	Meses 7-9	Meses 10-11
Pesquisa asdads	X	X		
Coleta de dados		X	X	
sdfsdf	X		X	X
nova linha	X		X	X

4 PRIMEIRO CAPÍTULO DE EXEMPLO

A seguir serão apresentados alguns comandos do LaTeX usados comumente para formatar textos de dissertação baseados na normalização da PUC (2011).

Para as citações a norma estabelece duas formas de apresentação. A primeira delas é empregada quando a citação aparece no final de um parágrafo. Neste caso, o comando `cite` é usado para formatar a citação em caixa alta, como é mostrado no exemplo a seguir. (DUATO; YALAMANCHILI; LIONEL, 2002).

Outra forma de apresentação da citação é a que ocorre no decorrer do texto, essa situação é exemplificada na próxima frase. Conforme Bjerregaard e Mahadevan (2006), o estudo mencionado revela progressos no desempenho dos processadores. Para a formatação da citação em caixa baixa deve ser usado o comando `citeonline`.

Nas citações que aparecem mais de uma referência as mesmas devem ser separadas por vírgulas, como neste exemplo. (KEYES, 2008; ZHAO, 2008; GANGULY et al., 2011). Se houver necessidade de especificar a página ou que foi realizada uma tradução do texto deve ser feito da seguinte maneira. (SASAKI et al., 2009, p. 2, tradução nossa). A citação direta deve ser feita de forma semelhante. “[...] A carga de trabalho de um sistema pode ser definida como o conjunto de todas as informações de entrada.” (MENASCE; ALMEIDA, 2002, p. 160).

O arquivo `dissertacao.bib` mostra exemplos de representação para vários tipos de referências (artigos de conferências, periódicos, relatórios, livros, dentre outros). Cada um desses tipos requer uma forma diferente de representação para que a referência seja formatada conforme as exigências da normalização.

4.1 Primeira seção

Para gerar a lista de siglas automaticamente deve ser usado o pacote *acronym*. Para tanto, toda vez que uma sigla for mencionada no texto deve ser usado o comando `ac{sigla}`. Dessa forma, se for a primeira ocorrência da sigla a mesma será escrita por extenso conforme descrição feita no arquivo `lista-siglas.tex`. Caso contrário, somente a sigla será mostrada. Ex

4.1.1 Primeira subseção

As enumerações devem ser geradas usando o pacote *compactitem*. Cada item deve terminar com um ponto final. Abaixo um exemplo de enumeração é apresentado:

- a) Coletar e analisar.
- b) Configurar e simular.
- c) Definir a metodologia.
- d) Avaliar o desempenho.
- e) Analisar e avaliar características.

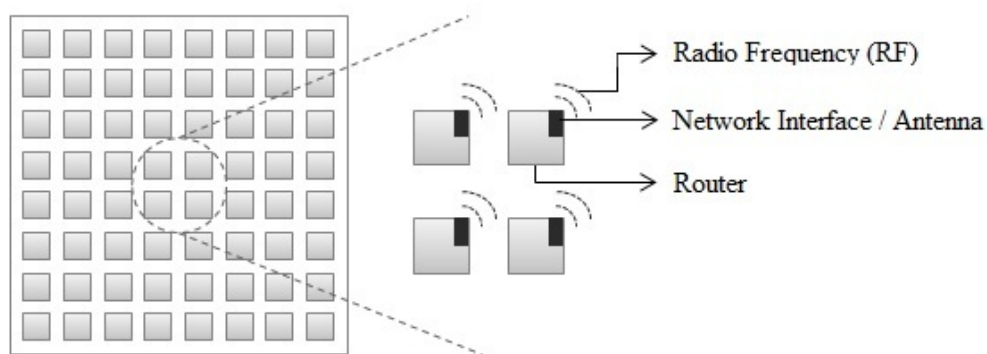
4.2 Segunda seção

Para referenciar um capítulo, seção ou subseção basta definir um label para o mesmo e usar o comando `ref` para referenciá-lo no texto. Exemplo: Como pode ser visto no Capítulo 4 ou na Seção 4.1.

5 SEGUNDO CAPÍTULO DE EXEMPLO

As figuras devem ser apresentadas pelos comandos abaixo. O parâmetro *width* determina o tamanho que a figura será exibida. No parâmetro *caption* o texto que aparece entre colchetes será o exibido no índice de figuras e o texto contido entre chaves será exibido na legenda da figura. Para citar a figura o comando *ref* deve ser usado juntamente com o *label*, como é mostrado nesse exemplo da Figura 1.

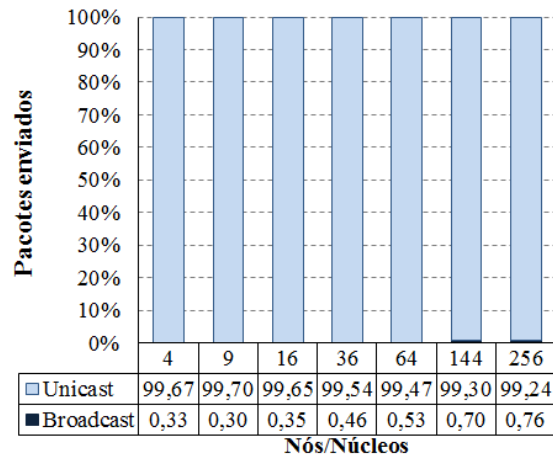
Figura 1 – Principais componentes de WiNoCs



Fonte: (OLIVEIRA et al., 2011)

Os comandos abaixo são usados para apresentação de gráficos. A diferença está apenas na definição do tipo “grafico” que permite a adição dos itens no índice de gráficos de forma automática. Os parâmetros são semelhantes aos usados para representação de figuras. O parâmetro *width* determina o tamanho do gráfico. O texto entre colchetes no *caption* será o exibido no índice de gráficos e o texto contido entre chaves será exibido na legenda.

Gráfico 1 – Percentual de pacotes enviados



Fonte: Dados da pesquisa

Um exemplo de criação de tabela é mostrado a seguir. As colunas são separadas por elementos & e as linhas por duas barras invertidas. Os comandos *hline* e *|* definem a criação de linhas e colunas para separar os conteúdos, respectivamente. A tabela pode ser referenciada usando o comando *ref* juntamente com o label, como na Tabela 2.

Tabela 2 – Parâmetros definidos por classe

<i>Benchmark</i>	Parâmetro	Classe S	Classe W	Classe A	Classe B	Classe C	Classe D
BT	<i>Grid</i>	12^3	24^3	64^3	102^3	162^3	408^3
CG	Linhas	1400	7000	14000	75000	150000	1500000
EP	Pares	2^{24}	2^{25}	2^{28}	2^{30}	2^{32}	2^{36}
FT	<i>Grid</i>	64^3	$128^2 * 32$	$256^2 * 128$	$512 * 256^2$	512^3	$2048 * 1024^2$
IS	Chaves	2^{16}	2^{20}	2^{23}	2^{25}	2^{27}	2^{31}
LU	<i>Grid</i>	12^3	33^3	64^3	102^3	162^3	408^3
MG	<i>Grid</i>	32^3	128^3	256^3	256^3	512^3	1024^3
SP	<i>Grid</i>	12^3	36^3	64^3	102^3	162^3	408^3

Fonte: Adaptado de (NPB, 2011)

6 OBSERVAÇÕES IMPORTANTES

Este documento foi compilado em ambiente linux (Ubuntu 10.04) usando o programa Kile - an Integrated LaTeX Environment - Version 2.0.85. Para correta formatação os seguintes arquivos do pacote *abntex* devem ser alterados.

a) Arquivo abnt.cls

No Ubuntu o arquivo fica armazenado em */usr/share/texmf/tex/latex/abntex*. Comentar a linha 967: Linha comentada para reduzir o espaçamento entre o topo da página e o título. Alterar a linha 1143: Parâmetro alterado de 30pt para -30pt para reduzir o espaçamento entre o top da página e o título do apêndice. Alterar a linha 985: Parâmetro alterado de 0pt para -30pt para reduzir o espaçamento entre o top da página e o título. Alterar a linha 991: Parâmetro alterado de 45pt para 30pt para reduzir o espaçamento entre o texto e o título.

b) Arquivo acronym.sty

No Ubuntu o arquivo fica armazenado em */usr/share/texmf-texlive/tex/latex/acronym*. Alterar a linha 225: Inserir o separador – entre acrônimo/descrição e remover o negrito com o *normalfont*.

REFERÊNCIAS

- BJERREGAARD, T.; MAHADEVAN, S. A survey of research and practices of network-on-chip. **Computing Surveys**, ACM, New York, USA, v. 38, n. 1, p. 1–51, Jun. 2006. ISSN 0360-0300.
- DUATO, J.; YALAMANCHILI, S.; LIONEL, N. **Interconnection networks: an engineering approach**. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2002. 515 p. ISBN 1558608524.
- GANGULY, A. et al. Scalable hybrid wireless network-on-chip architectures for multi-core systems. **Journal Transactions on Computers**, IEEE Computer Society, Los Alamitos, USA, v. 60, n. 10, p. 1485–1502, 2011. ISSN 0018-9340.
- KEYES, R. W. Moore’s law today. **Circuits and Systems Magazine**, IEEE Computer Society, Los Alamitos, USA, v. 8, n. 2, p. 53–54, 2008.
- MENASCE, D. A.; ALMEIDA, V. A. F. **Planejamento de capacidade para serviços na web: métricas, modelos e métodos**. Rio de Janeiro: Campus, 2002. 472 p. ISBN 8535211020.
- NPB. **NAS Parallel Benchmarks**. Disponível em <http://www.nas.nasa.gov/publications/npb.html>. Acesso em jun. 2011.
- OLIVEIRA, P. A. C. et al. Performance evaluation of winocs for parallel workloads based on collective communications. In: IADIS APPLIED COMPUTING, 8., 2011, Rio de Janeiro, Brasil. **Proceedings...** Rio de Janeiro: IADIS Applied Computing, 2011. p. 307–314.
- POSSIK, J. et al. An agent-based modeling and virtual reality application using distributed simulation: Case of a covid-19 intensive care unit. **IEEE TRANSACTIONS ON ENGINEERING MANAGEMENT**, IEEE, 2022.
- QURESHI, R. et al. Computational methods for the analysis and prediction of egfr-mutated lung cancer drug resistance: Recent advances in drug design, challenges and future prospects. **IEEE/ACM TRANSACTIONS ON COMPUTATIONAL BIOLOGY AND BIOINFORMATICS**, IEEE, v. 20, n. 1, p. 238–255, 2022.
- SASAKI, N. et al. A single-chip ultra-wideband receiver with silicon integrated antennas for inter-chip wireless interconnection. **Journal of Solid-State Circuits**, IEEE Computer Society, Los Alamitos, USA, v. 44, n. 2, p. 382–393, Feb. 2009. ISSN 0018-9200.
- SNEADER, W. **DRUG DISCOVERY: A HISTORY**. Chichester, England: John Wiley & Sons, 2005.

ZHAO, D. Ultraperformance wireless interconnect nanonetworks for heterogeneous gigascale multi-processor SoCs. In: 2TH WORKSHOP ON CHIP MULTIPROCESSOR, MEMORY SYSTEMS AND INTERCONNECTS, 3., 2008, Beijing, China. **Proceedings...** Beijing: CMP-MSI, 2008. p. 1–3.