



# SimTec

SIMPÓSIO DOS  
PROFISSIONAIS DA  
UNICAMP

9ª edição – 18 a 19 de novembro de 2024

DOI: 10.20396/simtec.v9.2024.11174

Eixo 2 - Desenvolvimento de Ensino, Pesquisa, Extensão e Inovação

## IA GENERATIVA PARA CONSTRUÇÃO DE UM MODELO DE CÁLCULO PARA PROSPECÇÃO DE MOLÉCULAS BIOATIVA

\*Alessandra Rodrigues Cardoso Padovam, Gilberto Carlos Franchi Junior

Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Faculdade de Ciências Médicas

[lecardos@unicamp.br](mailto:lecardos@unicamp.br)\*

**Introdução:** A integração entre o conhecimento humano e o uso da Inteligência Artificial (IA) possibilita a agilidade e precisão para rotinas laboratoriais de pesquisa. **Objetivo:** Determinar a concentração inibitória (IC50)[1] de uma droga experimental por meio de uma curva sigmóide. **Metodologia:** Utilizamos a IA generativa do Chat GPT[2] para auxiliar na criação de uma rotina automatizada em Python, que realiza a leitura de arquivos XLS gerados pela leitora de ELISA. Em laboratório, os experimentos foram conduzidos em placas de 96 poços (12 colunas x 8 linhas). A cada 3 colunas foram depositados diferentes tipos de células cancerígenas compondo 4 conjuntos. Em linha, foram combinadas diferentes concentrações de drogas, sendo a última o controle. Após 48 horas de contato com a droga, as células foram submetidas a ensaio colorimétrico revelando absorbâncias em relação às diferentes concentrações da droga. O código Python, converte os valores em porcentagem de inibição em relação ao controle, gera três curvas sigmóides e calcula o IC50 de cada curva, a média e desvio padrão relacionadas ao tipo celular. A partir dos valores de IC50 calculados, gera 4 gráficos relativos a cada tipo de célula e uma tabela com os resultados. **Resultados:** Desenvolvimento rápido de rotina uma estável que substitui cálculos em softwares onerosos e trabalhosos para obter o IC50. **Conclusão:** Os códigos apresentados pelo GPT foram adaptados por especialistas com conhecimento prévio sobre programação e contexto farmacológico, resultando em um produto replicável para laboratórios que utilizam o IC50 como métrica de ensaios com drogas.

**Palavras-chave:** IA Generativa. Python. IC50. Descoberta de medicamentos.

### Referências:

Arokia Femina, T et al. *Non-uniformity in in vitro drug-induced cytotoxicity as evidenced by differences in IC50 values - implications and way forward*. Journal of pharmacological and toxicological methods vol. 119 (2023): 107238. doi:10.1016/j.vascn.2022.107238.

CAMPESATO, Oswald. *Python 3 and Machine Learning Using ChatGPT / GPT-4*. Boston, Estados Unidos: Mercury Learning And Information, 2024. 268 p.

