



IA GENERATIVA PARA CONSTRUÇÃO DE UM MODELO DE CÁLCULO PARA PROSPECÇÃO DE MOLÉCULAS BIOATIVAS

*Alessandra Rodrigues Cardoso Padovam, Gilberto Carlos Franchi Junior

Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
Faculdade de Ciências Médicas
lecardos@unicamp.br*

Eixo 2

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

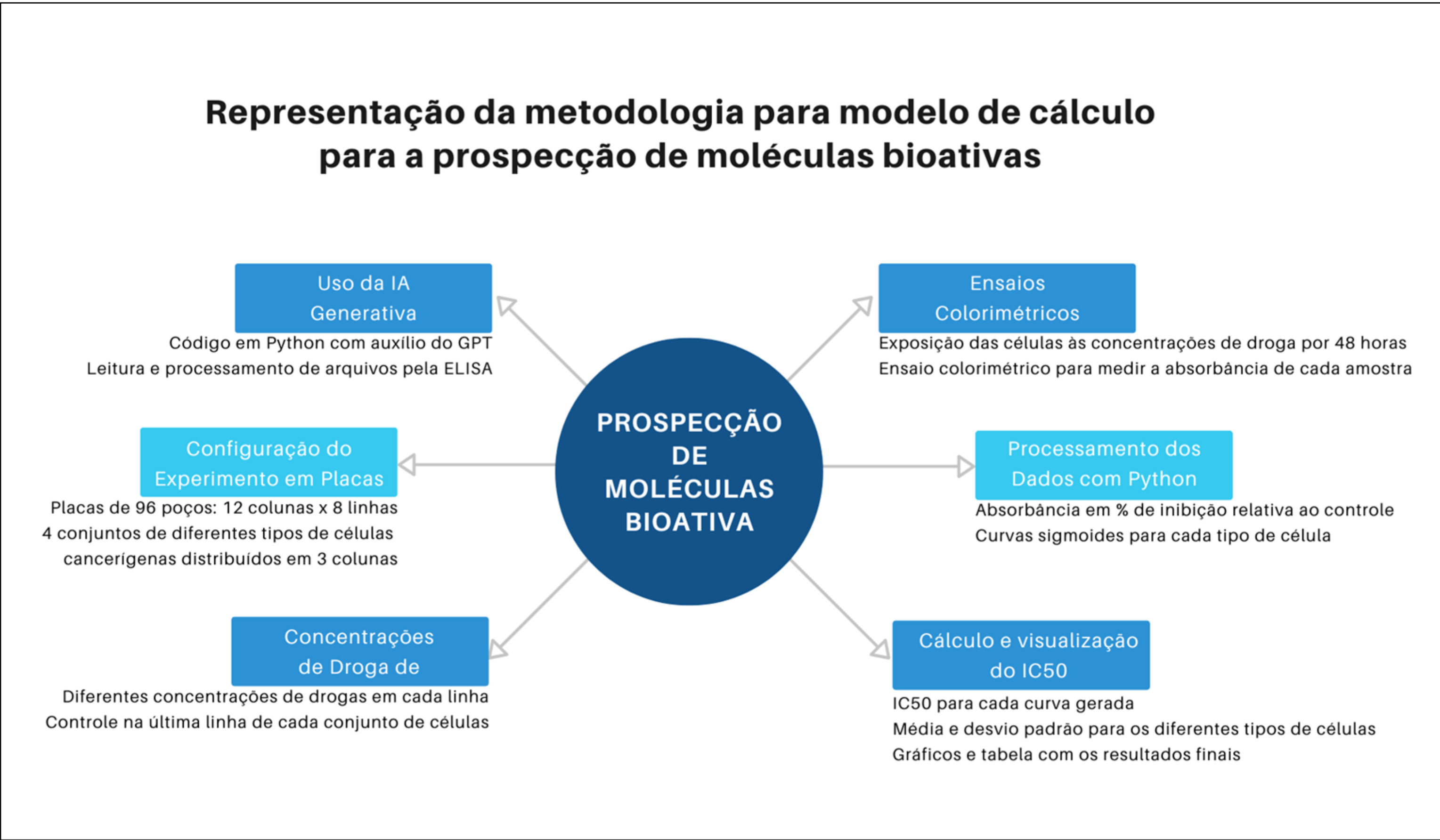
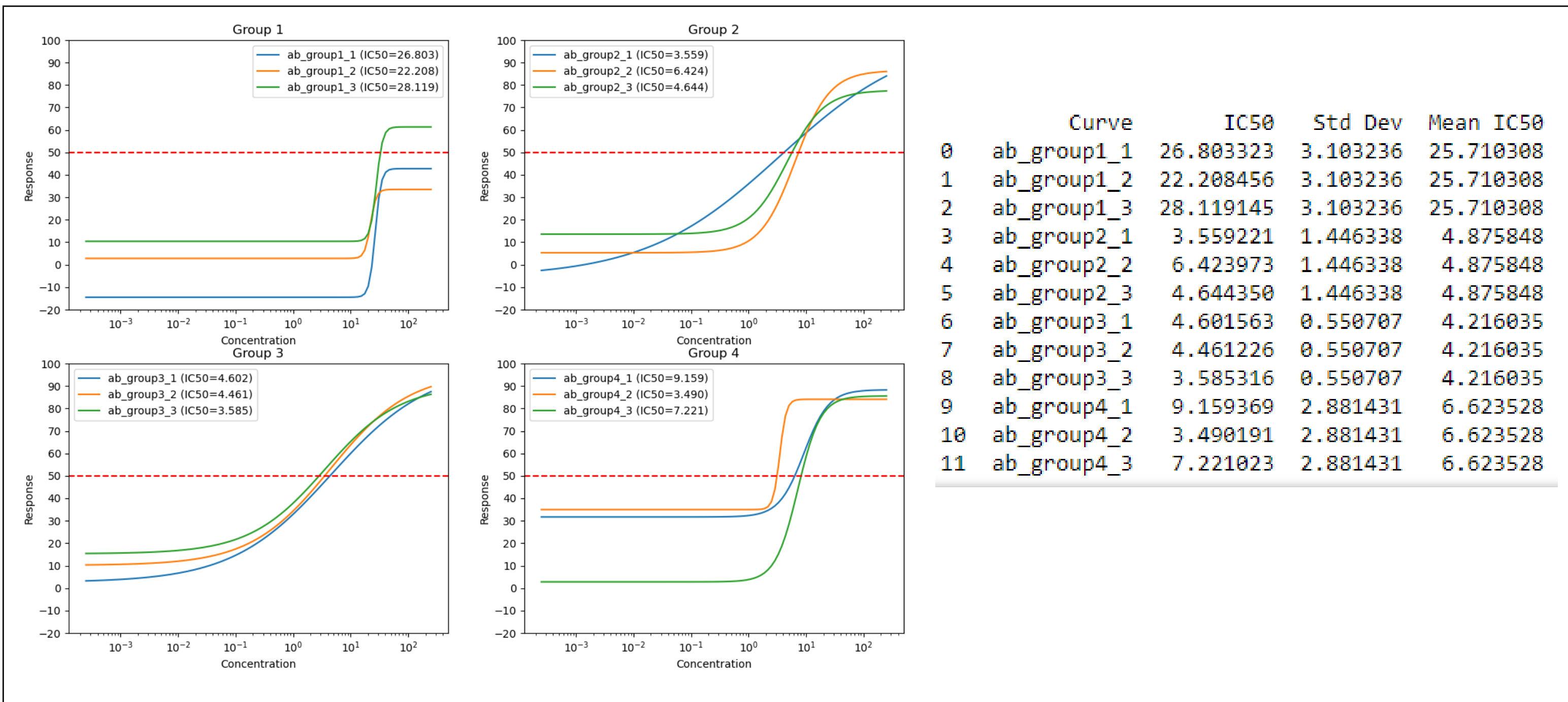
Determinar a concentração inibitória (IC50) de uma droga experimental por meio de uma curva sigmoide.

Metodologia

Utilizamos a IA generativa do Chat GPT 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 sigmoides 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 uma rotina 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 o contexto farmacológico, resultando em um produto replicável para laboratórios que utilizam o IC50 como métrica de ensaios com drogas.

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.