



UNIVERSITÀ DI PISA

INTELLIGENZA ARTIFICIALE PER IL DRUG DISCOVERY

TIZIANO TUCCINARDI

Anno accademico 2023/24
CdS CHIMICA E TECNOLOGIA
FARMACEUTICHE
Codice 401CC
CFU 3

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
INTELLIGENZA ARTIFICIALE PER IL DRUG DISCOVERY	CHIM/08	LEZIONI	29	TIZIANO TUCCINARDI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze

Lo studente avrà acquisito conoscenze in merito alle tecniche avanzate di intelligenza artificiale per il Drug Design.

Modalità di verifica delle conoscenze

La valutazione delle conoscenze acquisite sarà operata mediante la conduzione di un approfondimento svolto durante il corso, oppure la stesura di una relazione e/o una prova scritta

Capacità

Lo studente saprà utilizzare software per studi computazionali

Modalità di verifica delle capacità

La verifica delle capacità sarà operata mediante la conduzione di un approfondimento svolto durante il corso, oppure la stesura di una relazione e/o una prova scritta

Comportamenti

Lo studente potrà acquisire e/o sviluppare capacità di problem-solving e imparare ad utilizzare applicativi scientifici informatici

Modalità di verifica dei comportamenti

Durante le sessioni di laboratorio saranno valutati i risultati ottenuti dalle attività svolte

Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Chimica Farmaceutica di base

Indicazioni metodologiche

- modo in cui si svolgono le lezioni: lezioni frontali, con ausilio di slide a disposizione degli studenti
- modo in cui si svolgono le esercitazioni in aula/laboratorio: esercitazioni singole utilizzando i PC dell'aula informatica
- tipo di strumenti di supporto: sito web (moodle)
- tipo di uso del sito di elearning del corso: scaricamento materiali didattici, comunicazioni docente-studenti, formazione di gruppi di lavoro
- tipo di interazione tra studente e docente: uso di ricevimenti, uso della posta elettronica, telefono, skype, teams
- uso parziale o totale di lingue diverse dall'italiano: uso della lingua inglese

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Sebbene nessun singolo farmaco sia stato progettato esclusivamente con tecniche informatiche, il contributo di questi metodi per la scoperta di



UNIVERSITÀ DI PISA

farmaci è indiscutibile. Tutte le principali aziende farmaceutiche e biotecnologiche del mondo utilizzano strumenti di progettazione computazionale. In particolare, nel campo della scoperta e sviluppo di farmaci, recentemente vengono applicate tecniche di intelligenza artificiale. I metodi per la progettazione di bersagli farmacologici e la scoperta di nuovi farmaci ora combinano abitualmente algoritmi di machine learning e deep learning per migliorare l'efficienza, l'efficacia e la qualità dei risultati sviluppati. La generazione e l'incorporazione di big data, attraverso tecnologie come l'high-throughput screening e l'analisi computazionale dei database utilizzati per la scoperta di lead e target, ha aumentato l'affidabilità delle tecniche incorporate di machine learning e deep learning. Il corso mira a fornire agli studenti una conoscenza avanzata dell'intelligenza artificiale nell'area della scoperta di farmaci. Dopo aver terminato il corso, gli studenti acquisiranno familiarità con una gamma di metodi computazionali basati su ligandi e strutture e saranno in grado di eseguire attività di modellazione computazionale utilizzando software all'avanguardia.

Bibliografia e materiale didattico

Non viene consigliato alcun testo, ma il materiale necessario verrà reso disponibile durante lo svolgimento del modulo

Modalità d'esame

L'esame sarà costituito da un approfondimento svolto durante il corso, la stesura di una relazione e/o una prova scritta

Pagina web del corso

<https://moodle.farm.unipi.it/course/view.php?id=334>

Altri riferimenti web

www.mmvsl.it

Ultimo aggiornamento 02/08/2023 16:54