



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

CLMCU IN CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE

CORSI A SCELTA - ANNO ACCADEMICO 2024/2025

MODULO DI PROPOSTA

Nome del docente: Stefano Moro

qualifica: Professore Ordinario

SSD: CHIM08/INF01

Dipartimento: Scienze del Farmaco (DSF)

Titolo del corso a libera scelta (in italiano): **INTRODUZIONE AI METODI DI INTELLIGENZA ARTIFICIALE NELL'AMBITO DELLE SCIENZE DEL FARMACO**

Titolo del corso a libera scelta (in inglese): *Introduction to artificial intelligence methods in the field of pharmaceutical sciences*

Lingua di erogazione: *italiano*

Anno/semestre e periodo di svolgimento del corso proposto: 4 anno/secondo semestre

Obiettivi didattici:

Gli obiettivi didattici del corso mira a fornire agli studenti una comprensione approfondita delle applicazioni dell'IA nel settore farmaceutico. Gli studenti acquisiranno conoscenze teoriche e pratiche sull'utilizzo dell'IA per la scoperta, lo sviluppo e l'ottimizzazione di farmaci, nonché per la medicina personalizzata e la gestione dei dati clinici.

Il corso utilizzerà una combinazione di lezioni frontali (5 CFU), esercitazioni pratiche con software e piattaforme specifiche per l'IA in farmaceutica e discussioni in aula (1 CFU). Gli studenti saranno incoraggiati a lavorare su progetti pratici e a collaborare tra loro per approfondire le competenze acquisite.

Descrizione dei contenuti (PROGRAMMA):



Introduzione all'Intelligenza Artificiale e concetti fondamentali

- Definizione di Intelligenza Artificiale e la sua importanza nelle Scienze del Farmaco
- Tipi di IA: Apprendimento Supervisionato, Apprendimento Non Supervisionato, Apprendimento Profondo (Deep Learning), Reti Neurali
- Applicazioni dell'IA nel settore farmaceutico

Strumenti di Apprendimento Automatico per la Scoperta di Farmaci

- Metodi IA-driven di screening virtuale e di progettazione razionale di farmaci (docking molecolare e dinamica molecolare)
- Metodi IA-driven per la previsione dell'attività biologica/farmacologica/tossicologica (regressione e classificazione)

Intelligenza Artificiale nella progettazione e sintesi di farmaci

- Generazione di molecole mediante reti neurali (IA-driven de novo design)
- Ottimizzazione di candidati farmaci basata su algoritmi genetici e ricerca evolutiva

Medicina personalizzata e IA

- Concetti di medicina personalizzata e precisione terapeutica
- Utilizzo di IA per identificare biomarcatori predittivi di risposta al trattamento
- Adattamento delle terapie attraverso l'analisi di dati genetici e clinici

Analisi dei Big Data in Farmaceutica

- Gestione, analisi e integrazione di dati clinici, genomici e molecolari
- Ruolo dell'IA nella tracciabilità e nel monitoraggio dei dati
- Privacy e sicurezza dei dati nell'utilizzo dell'IA nel settore farmaceutico

Intelligenza Artificiale e medicina predittiva

- Sistemi di supporto decisionale clinico basati su IA
- Previsione di eventi avversi legati ai farmaci attraverso l'IA
- Analisi predittiva per l'efficacia del trattamento

Etica, Regolamentazione e Impatto Sociale dell'IA nelle Scienze del Farmaco

- Implicazioni etiche dell'utilizzo dell'IA nella scoperta e sviluppo di farmaci
- Regolamentazione dei farmaci generati da algoritmi di IA
- Considerazioni sull'equità e l'accessibilità nel contesto dell'IA farmaceutica

Progetti e applicazioni pratiche dell'IA in Farmaceutica

- Progetto finale basato sull'IA per la scoperta o l'ottimizzazione di farmaci
- Presentazione dei progetti e discussione in aula



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

- Possibili sviluppi futuri nell'IA per le Scienze del Farmaco

Requisiti richiesti agli Studenti per la partecipazione (eventuali propedeuticità):

Nessun particolare requisito è richiesto per la frequenza del corso

Modalità di valutazione dei prerequisiti (se previsti):

-

Modalità di svolgimento della prova finale:

La prova finale consisterà nel redigere una relazione in merito ad un progetto che verrà svolto in maniera autonoma dallo studente e che utilizzerà i software che sono stati utilizzati durante la sessione di esercitazioni.