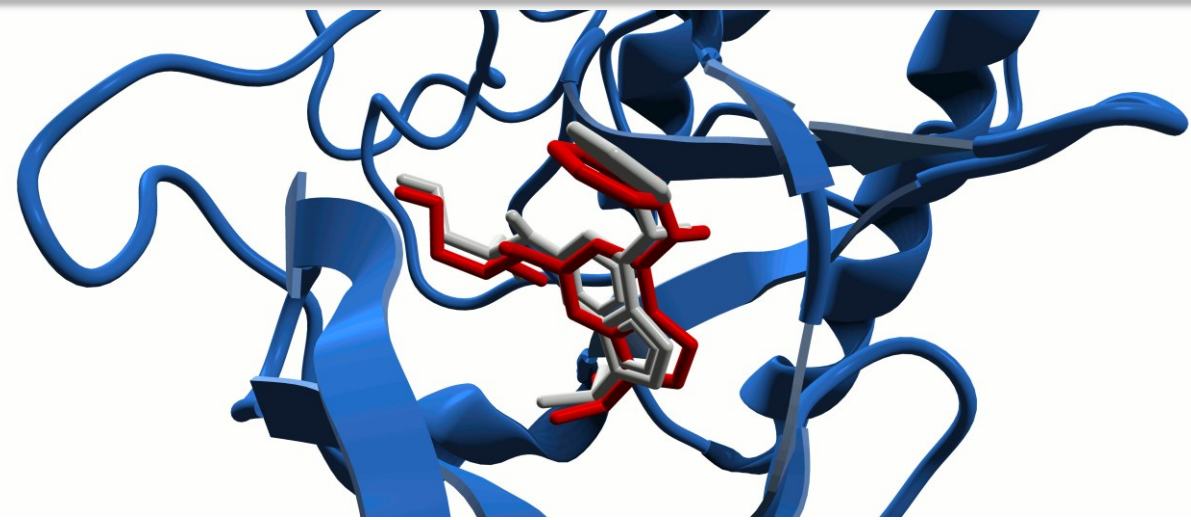


# Introdução à Inteligência Artificial

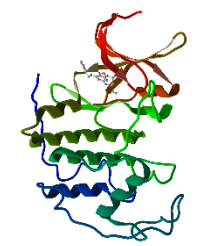
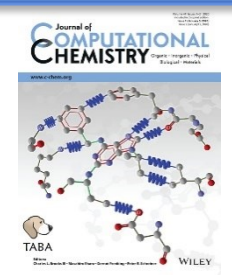
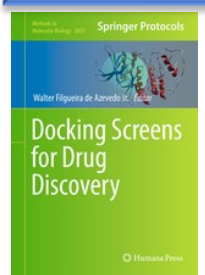


**Prof. Dr. Walter F. de Azevedo, Jr.**  
[walter@azevedolab.net](mailto:walter@azevedolab.net)

- [Biography 01](#) ♥
- [Biography 02](#) ♥
- [Biography 03](#) ♥
- [Biography 04](#) ♥

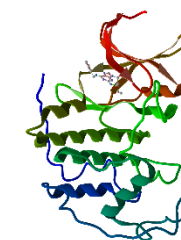
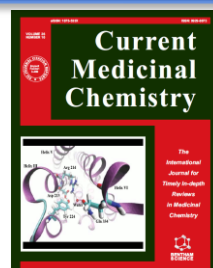
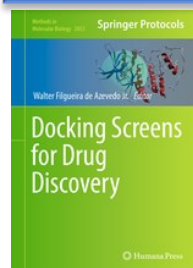


Frontiers Section Editor (Bioinformatics and Biophysics) for the [Current Drug Targets](#) ISSN: 1873-5592  
 Section Editor (Bioinformatics in Drug Design and Discovery) for the [Current Medicinal Chemistry](#) ISSN: 1875-533X



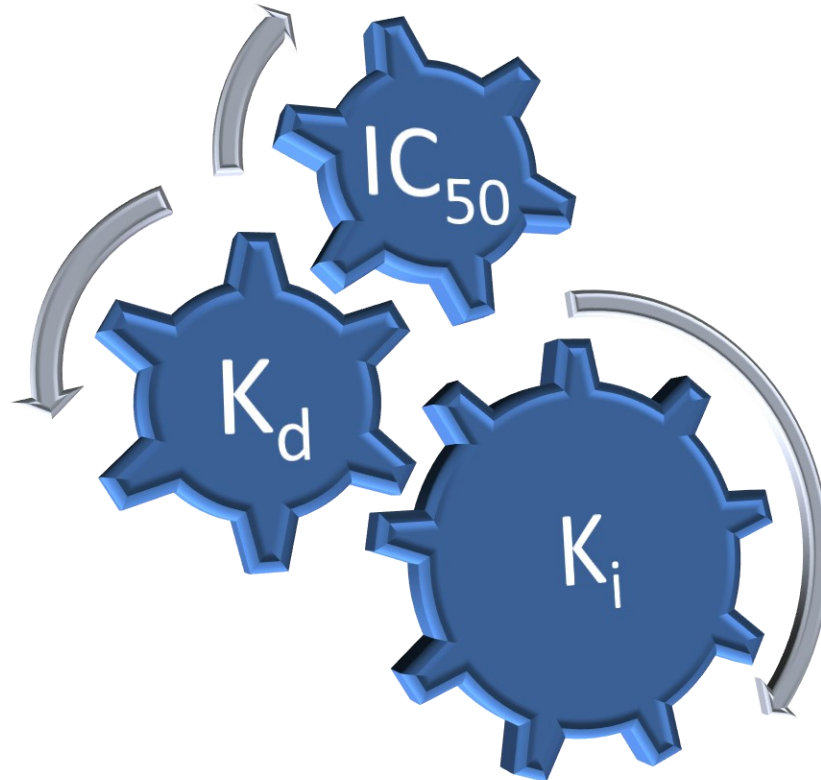
# Conteúdo

- [Resumo](#)
- [Chave de Fenda Phillips e Matemática](#)
- [Inteligência Artificial](#)
- [Aprendizado de Máquina Supervisionado](#)
- [Modelos de Regressão](#)
- [Métricas](#)
- [Apresentação da Singularidade Tecnológica](#)
- [Aumento da Expectativa de Vida](#)
- [Singularidade Tecnológica](#)
- [Referências](#)



## Resumo

- Inteligência artificial tem grande potencial de gerar modelos computacionais para o estudo da vida. Especificamente, uma subárea da inteligência artificial chamada de aprendizado de máquina tem se mostrado útil na modelagem de sistemas biológicos. Dados genômicos, proteômicos, metabolômicos entre outros fornecem uma base sólida que pode ser usada para gerar previsões do comportamento de sistemas biológicos.
- Especificamente para descoberta de fármacos, a informação sobre estrutura tridimensional junto com os dados de afinidade de ligantes por proteínas nos permitem gerar modelos de aprendizado de máquina que estimam interação proteína-ligante.



## Chave de Fenda Phillips e a Matemática

Nas últimas décadas a educação brasileira tem sofrido uma queda de qualidade no ensino de matemática e ciências naturais. Há diversas causas para esse declínio que fogem ao objetivo desta disciplina discutir, mas podemos destacar que ele pode ser superado. Muitos estudantes têm medo da matemática e pior ainda pensam que não precisam dela. Esse medo traz a uma situação preocupante, conteúdos que levem ao uso de um conceito matemático simples são ignorados pelos estudantes, causando o negacionismo do conhecimento. Assim, quanto mais cedo os estudantes superarem esse preconceito, melhor será o processo da sua formação acadêmica. Os estudantes devem ver a matemática como uma chave de fenda Phillips. Não precisam se apaixonar pela chave Phillips, só saber usá-la.

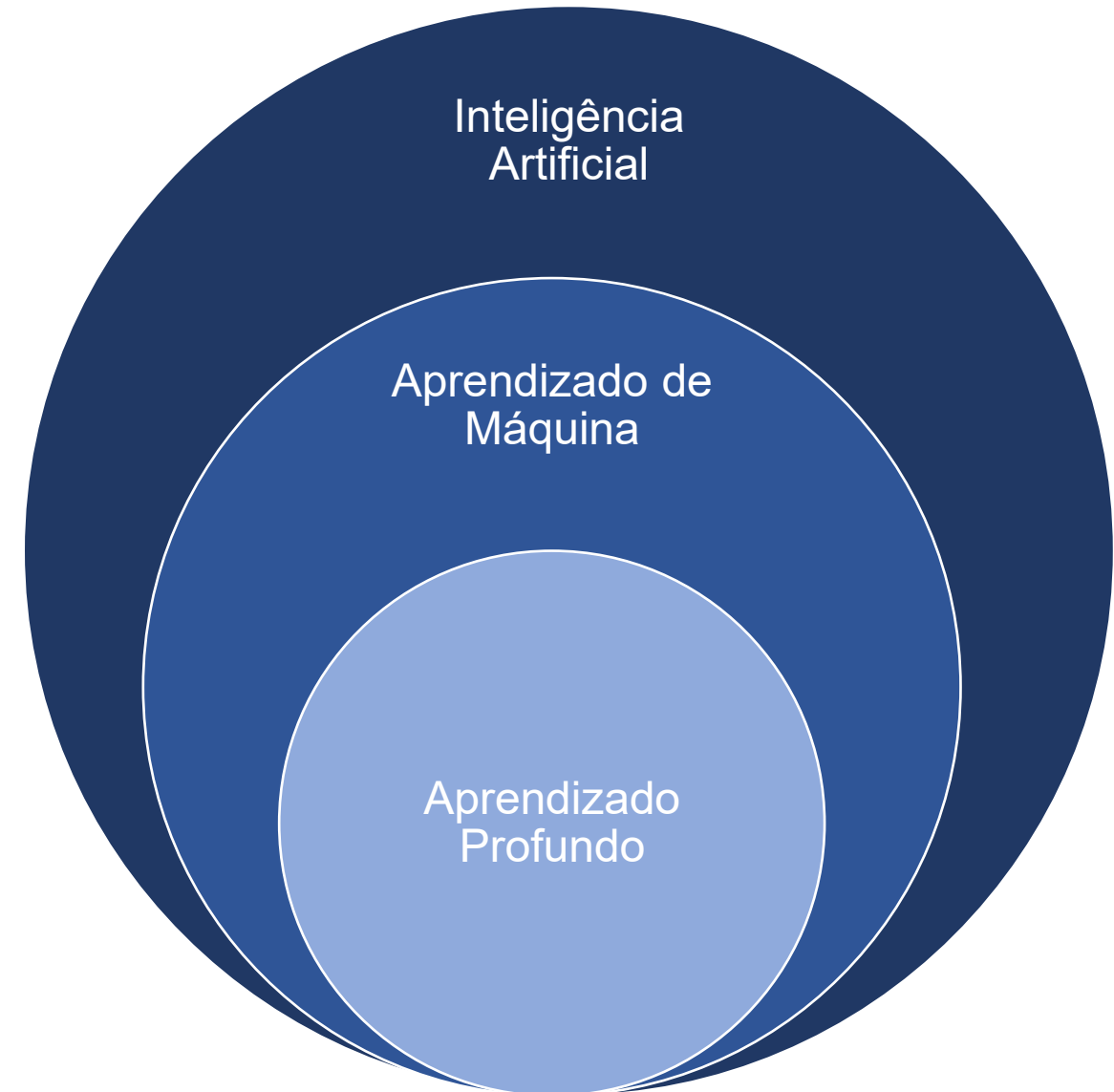


Chave de fenda Phillips.

Fonte: <https://pixabay.com/pt/vectors/chave-de-fenda-chave-phillips-33634/>

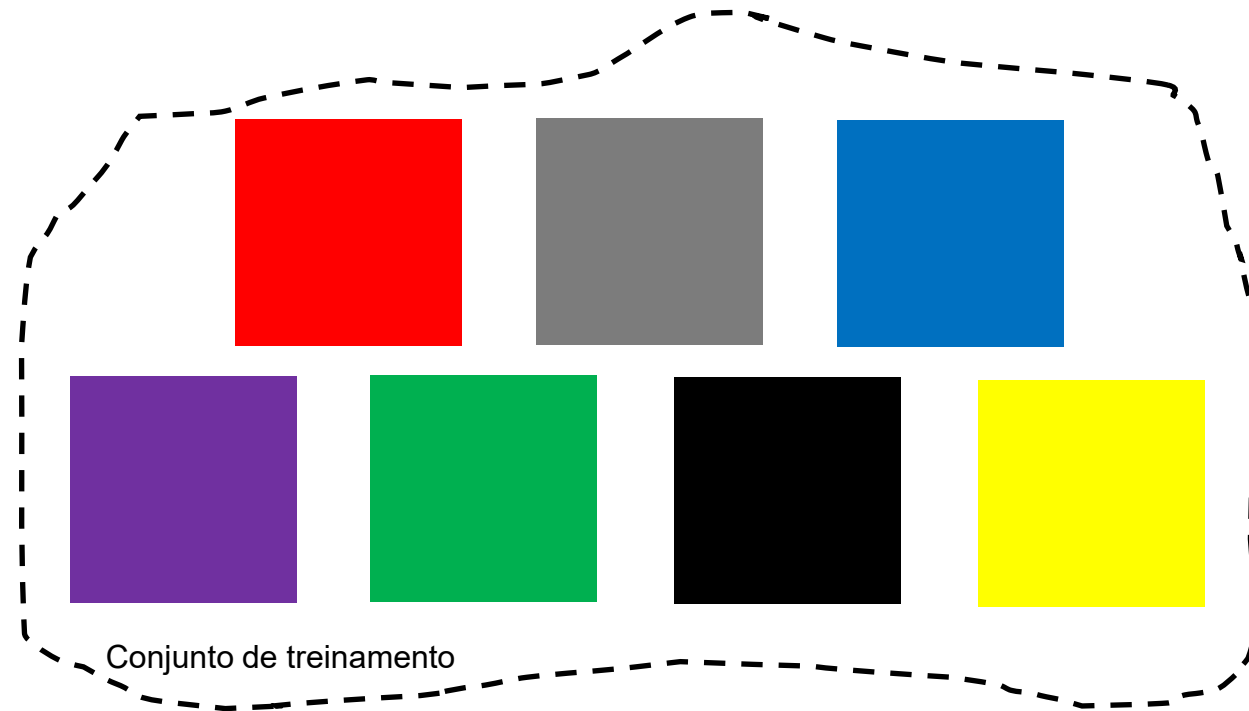
## Inteligência Artificial

A inteligência artificial tem como foco desenvolver sistemas que fazem as máquinas reagir e agir como humanos. Dentro do campo vasto de pesquisas sobre inteligência artificial, destacamos o aprendizado de máquina (*machine learning*) que é dedicado a permitir que computadores realizem tarefas sem serem explicitamente programados para elas. Dentro dos métodos de aprendizado de máquina, temos o aprendizado profundo (*deep learning*) que tem foco no uso de redes neurais. Métodos de aprendizado de máquina têm mostrado grande aplicação no estudo de fármacos ([de Azevedo, 2022](#)). Outra grande aplicação do aprendizado profundo é na previsão da estrutura tridimensional de proteínas ([Baek et al., 2021](#)). Estas emulam o funcionamento dos neurônios e podem apresentar diversas camadas.



## Aprendizado de Máquina Supervisionado

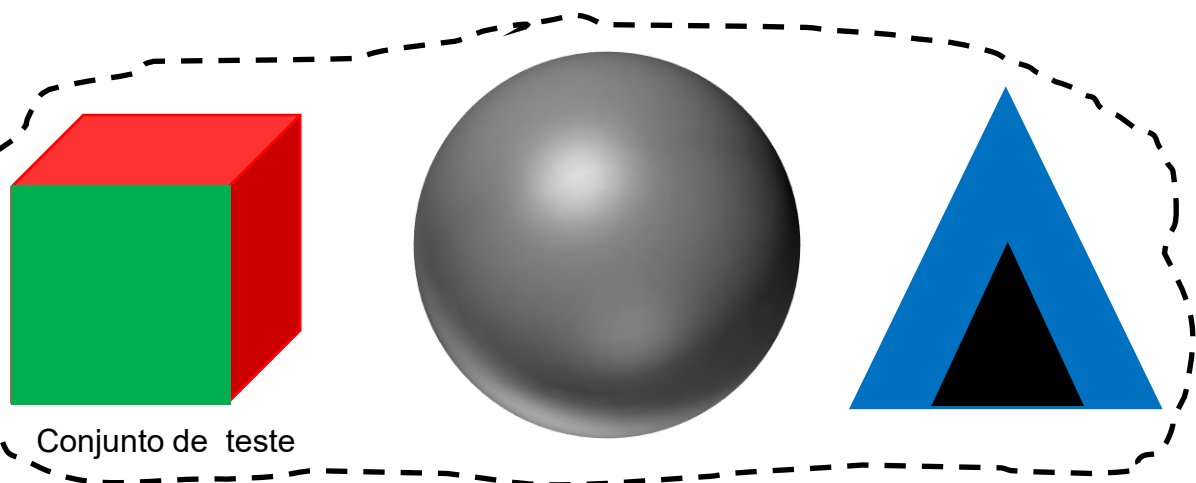
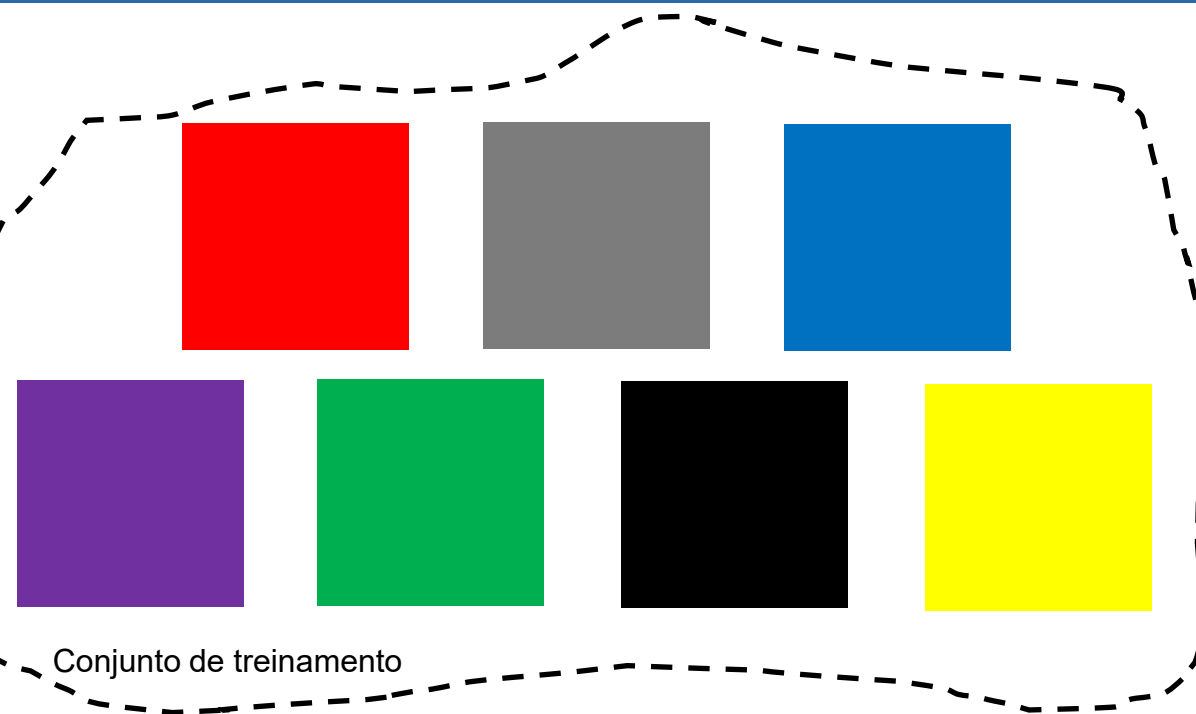
Para ilustrar alguns conceitos relevantes para o aprendizado de máquina supervisionado, vamos considerar um exemplo onde você enfrenta o desafio de ensinar uma criança as cores. No nosso exemplo, vamos ensinar ao infante sete cores usando quadrados de cartolina. Você mostra cada quadrado de cartolina para a criança e diz a cor desta. Chamamos esses sete quadrados de cartolina de **conjunto de treinamento**.



## Aprendizado de Máquina Supervisionado

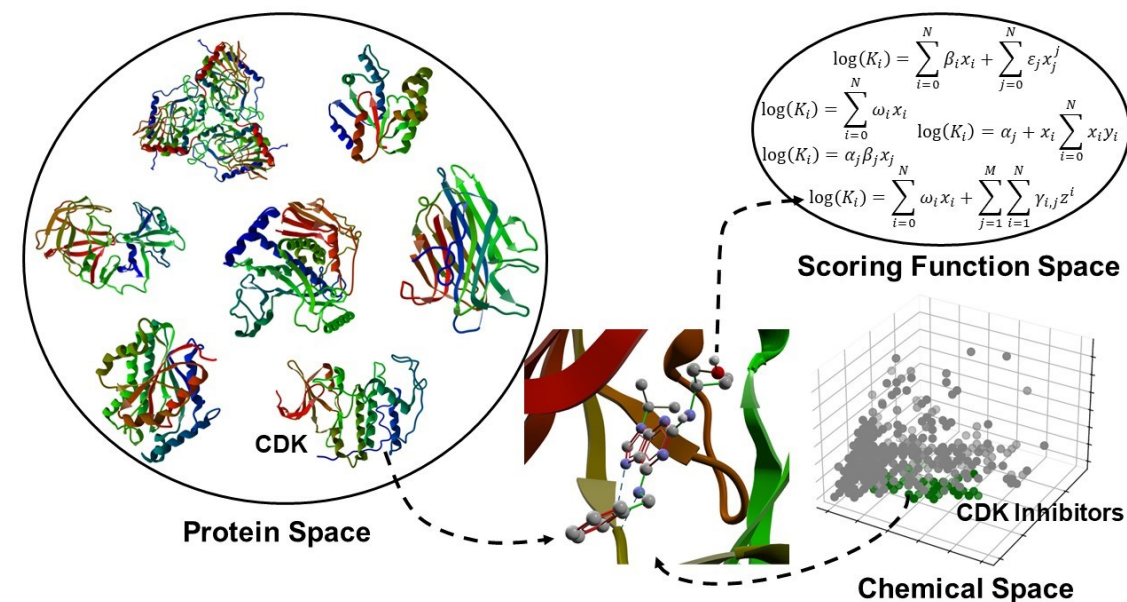
Agora temos três objetos com cores distintas, mas com as sete ensinadas. Esses objetos não foram usados para ensinar cores à criança. Chamamos esses três objetos de **conjunto de teste**. Depois de treinada a criança com o conjunto de treinamento, você pega os objetos do conjunto de teste e verifica o aprendizado. Esses objetos são um cubo de plástico vermelho e verde, uma bola cinza e um triângulo de cartolina azul e preto. Cada objeto do conjunto de teste é mostrado à criança e perguntada a cor. Caso a criança acerte as cores, consideramos que o processo de aprendizado foi eficiente. Os métodos de aprendizado de máquina supervisionado apresentam essa abordagem, dividem os dados em conjuntos de treinamento e de teste.

O conjunto de teste é usado para avaliar o **poder de previsão** do **modelo de aprendizado máquina**. O modelo de aprendizado de máquina é uma abstração matemática (por exemplo uma equação) capaz de ler as características (*features*) e prever a variável alvo (rótulo).



## Aprendizado de Máquina Supervisionado

Métodos de aprendizado de máquina supervisionado podem ser usados para desenvolvermos modelos computacionais para previsão da afinidade de ligantes por proteínas específicas. Os programas de docagem molecular normalmente usam funções escores treinadas com conjuntos que envolvem dezenas e às vezes centenas de proteínas, como no caso do programa AutoDock Vina ([Trott & Olson, 2010](#); [Eberhardt et al., 2021](#)). Essas funções são chamadas funções escores clássicas ([Wójcikowski et al., 2019](#)). O desenvolvimento de funções escores específicas para uma proteína mostrou-se capaz de criar modelos com poder de previsão superior, comparadas com as funções clássicas ([Li et al., 2019](#)). As milhares de estruturas cristalográficas para as quais temos dados de afinidade de ligação fornecem os dados brutos para a criação de modelos de aprendizado de máquina para previsão de afinidade ([Veit-Acosta & de Azevedo, 2021](#)), explorando-se o conceito de espaço de funções escores (figura ao lado) ([Heck et al., 2017](#)).





## Modelos de Regressão

Modelos de regressão tentam captar o comportamento de dados por meio de uma equação calibrada para os dados experimentais. Por exemplo, você pode pegar um conjunto de 100 casais que têm filhos adultos e tentar gerar um modelo de regressão que prever a altura dos filhos, a partir da altura média dos pais. Esse modelo criará uma equação que tem a seguinte forma:

$$p = \theta_0 + \theta_1 x$$

Onde:

$p$  é o valor previsto para a altura média dos filhos adultos;

$\theta_j$  é o  $j^{\text{th}}$  parâmetro do modelo (peso) que será calibrado para concordar com os dados;

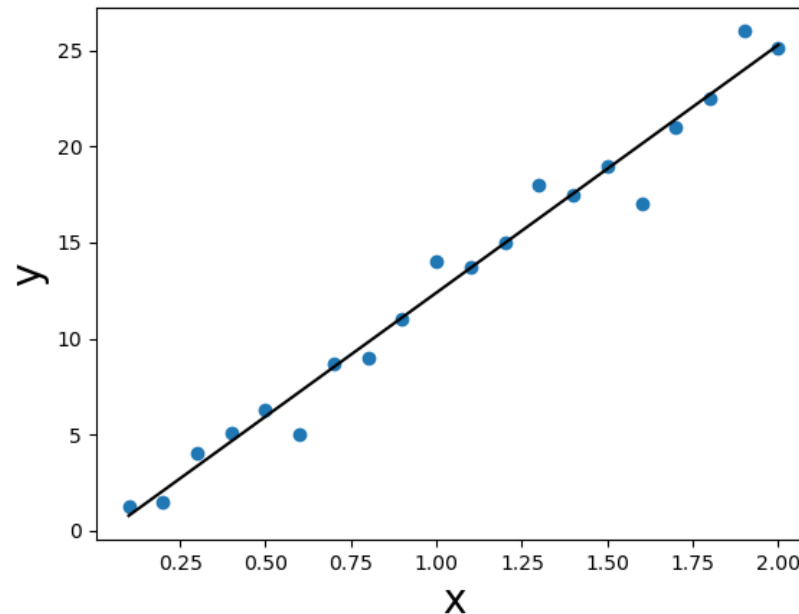
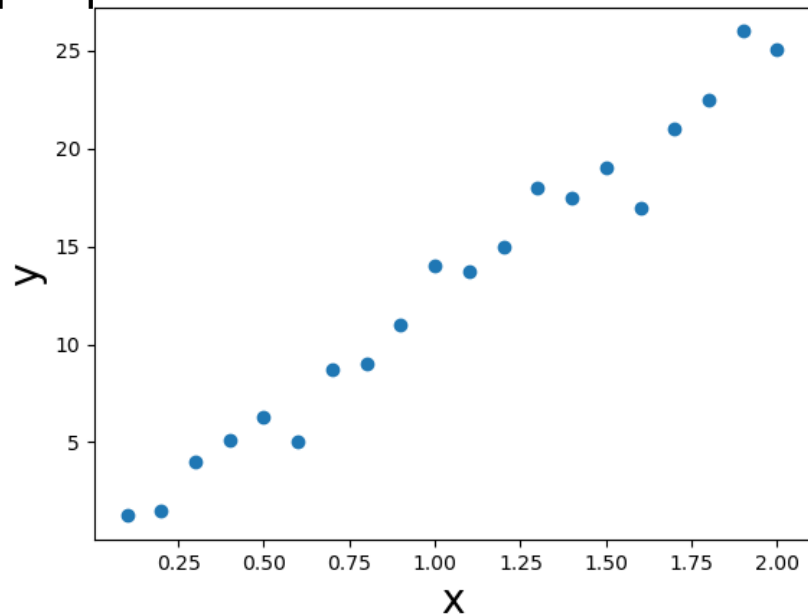
$x$  é média da altura dos pais (*feature*).

## Modelos de Regressão

- Para ilustrar, vamos considerar os pontos do gráfico de dispersão abaixo à esquerda. Uma inspeção rápida sugere uma reta relacionada aos pontos. Aplicando-se o método de regressão, geramos o seguinte modelo:

$$p = -0,5116 + 12,9 x$$

À direita abaixo temos o gráfico de dispersão com a reta prevista. A equação da reta é o modelo de aprendizado de máquina gerado para prever o comportamento dos dados. Com o modelo, podemos prever o valor de  $p$  para qualquer  $x$ .



Gráficos de dispersão. A) Pontos experimentais (azul). B) Pontos experimentais (azul) com reta do modelo de regressão (preta).

## Modelos de Regressão

Os modelos de regressão não se limitam a uma variável nem ao grau um. Podemos ter diversas variáveis independentes (*features*) e cada variável pode ter graus ( $g$ ) diferentes de um e nem precisam ser funções polinomiais, podem ter funções trigonométricas, exponenciais entre outras. Considere o gráfico de dispersão abaixo. O gráfico ilustra a porcentagem dos produtos derivados de petróleo importados pelos Estados Unidos com relação ao total consumido no período de 1973 a 1992 ([Abell & Braselton, 2004, página 290](#)). No gráfico colocamos os anos na faixa de 73 a 92 (eixo  $x$ ). Vemos claramente que uma reta não seria o melhor modelo para explicar os dados. No próximo slide temos vários modelos de regressão gerados para diferentes graus. Os modelos de regressão têm a seguinte expressão geral:

$$p = \theta_0 + \theta_1 x^g$$

Onde:

$p$  é o valor previsto;

$\theta_j$  é o  $j^{\text{th}}$  parâmetro do modelo;

$x$  é a variável independente (*feature*);

$g$  é o grau do polinômio.

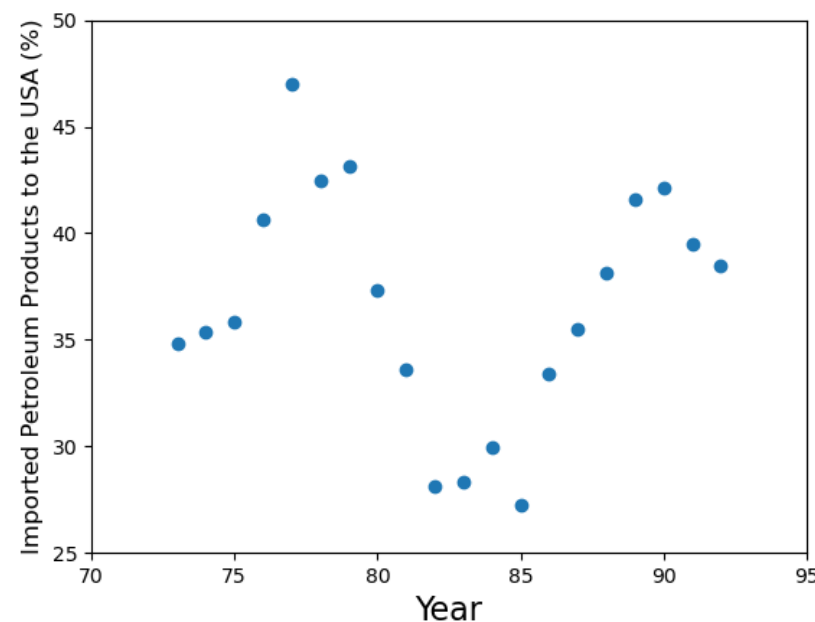
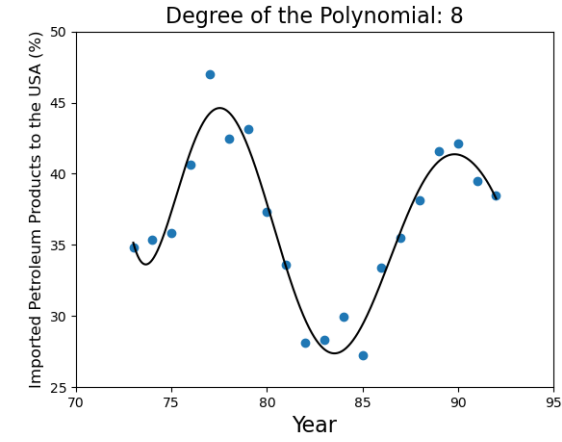
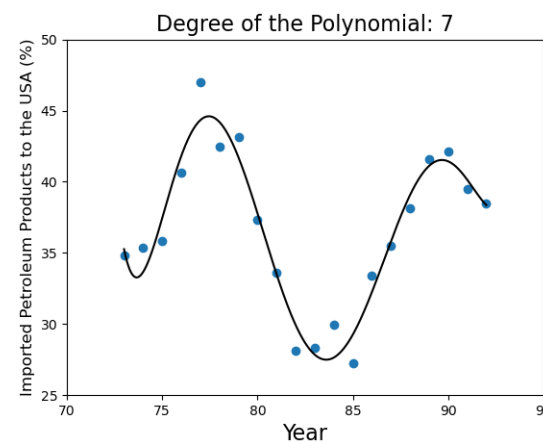
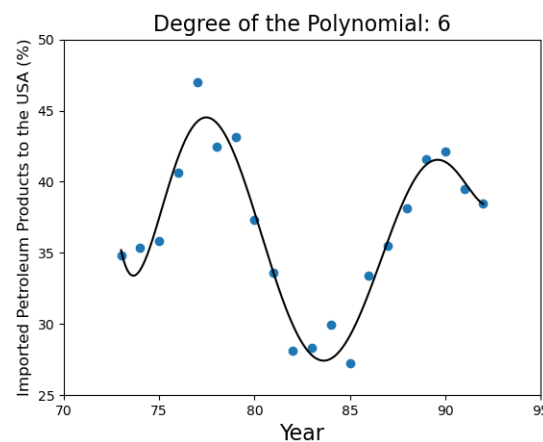
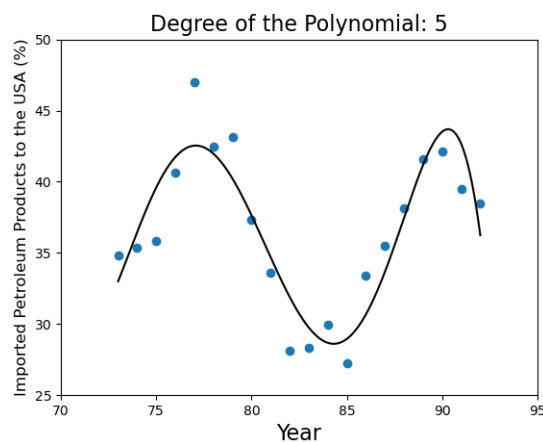
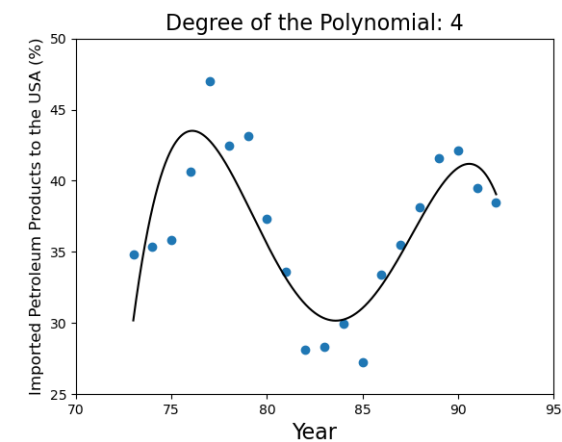
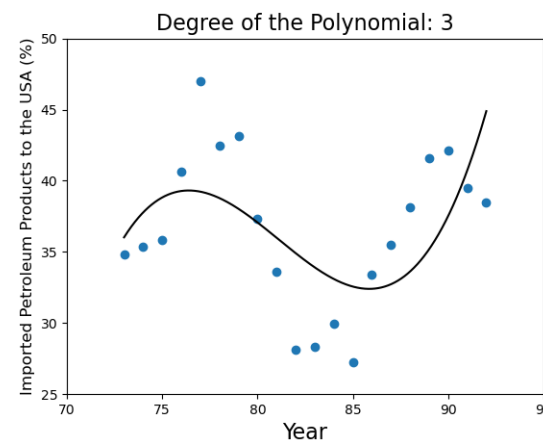
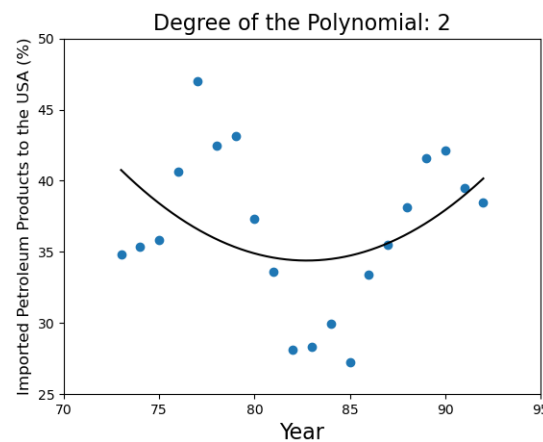
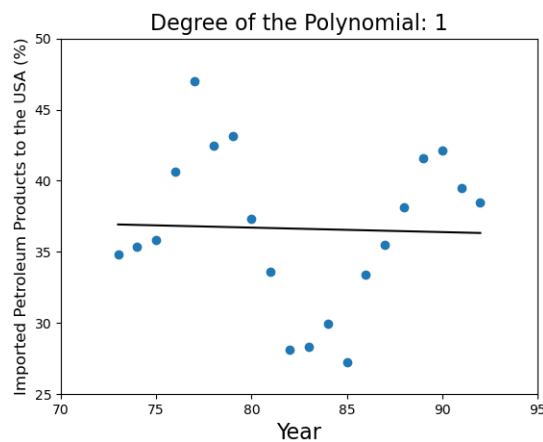


Gráfico de dispersão.

## Modelos de Regressão

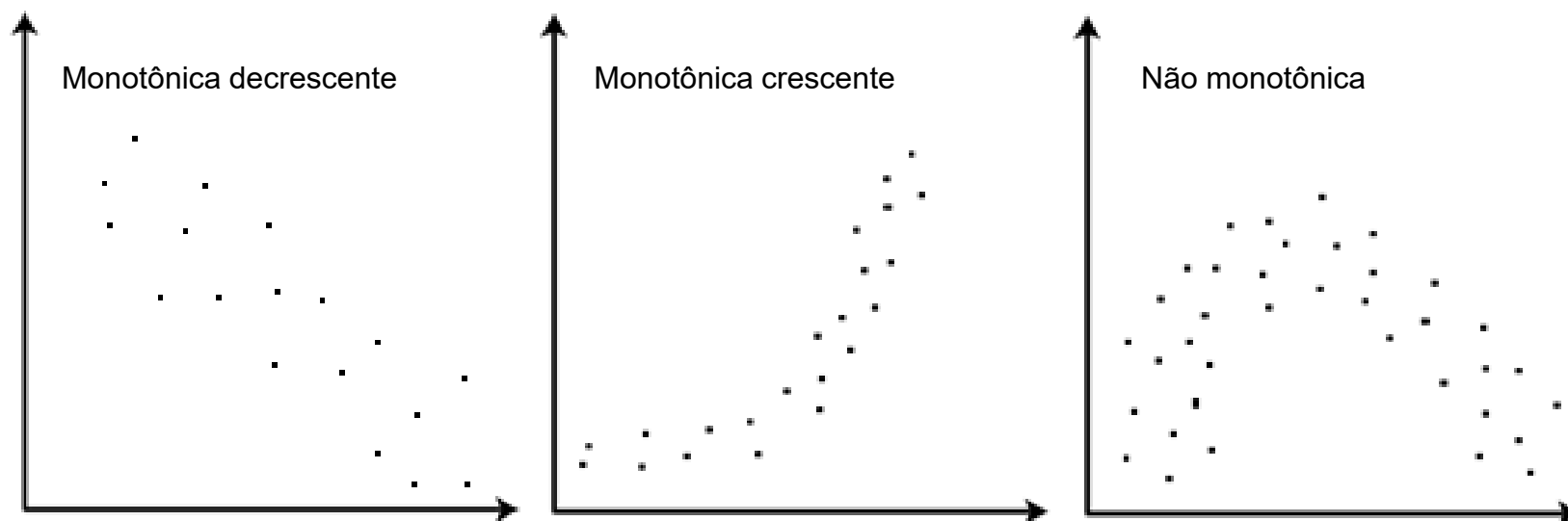
Abaixo temos oito modelos de regressão para os dados vistos. Só pela análise visual, não é possível identificar o melhor. A seguir indicaremos diversas **métricas** usadas para a avaliação da qualidade de modelos de regressão.



Gráficos de dispersão. Pontos experimentais (azul) com curva do modelo de regressão (preta).

## Métricas

O **coeficiente de correlação de Spearman** ( $\rho$ ) é uma medida da força e direção da associação que existe entre duas variáveis em função da ordem dos valores das variáveis ([Zar, 1972](#)). As variáveis podem ser os valores previstos ( $p$ ) e a outra com os valores experimentais ( $y$ ). Para o uso do coeficiente de correlação de Spearman, é necessário que as duas variáveis possam ser expressas de forma ordinal e que tenham uma relação monotônica, como indicadas nos dois primeiros gráficos abaixo.



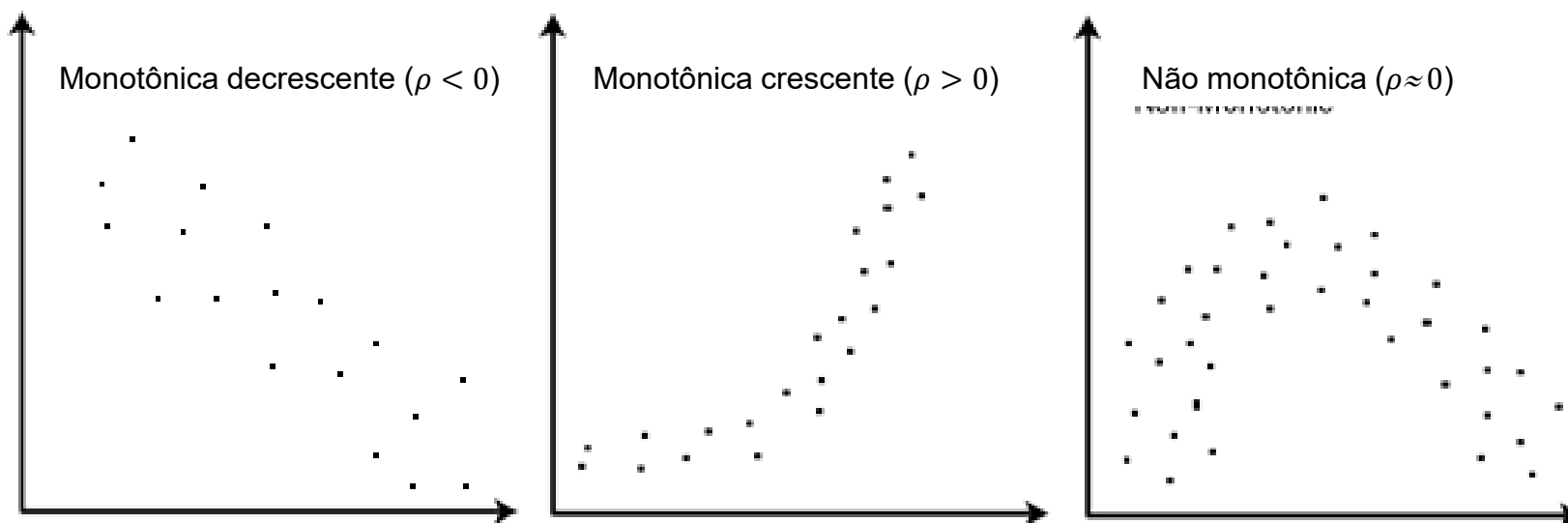
Gráficos de dispersão.

## Métricas

O coeficiente de correlação de Spearman ( $\rho$ ) é dado pela seguinte equação,

$$\rho = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n(n-1)}$$

onde  $d_i$  é a diferença de posto de cada observação e  $n$  é o número de observações ([Zar, 1972](#)). Os valores do coeficiente de correlação de Spearman variam entre -1 e 1. Valores próximos de 1 indicam uma correlação positiva, como no gráfico da relação monotônica crescente ( $\rho > 0$ ). Valores negativos para  $\rho$  indicam um gráfico de dispersão com uma relação monotônica decrescente. Um  $\rho \approx 0$  indica falta de correlação.



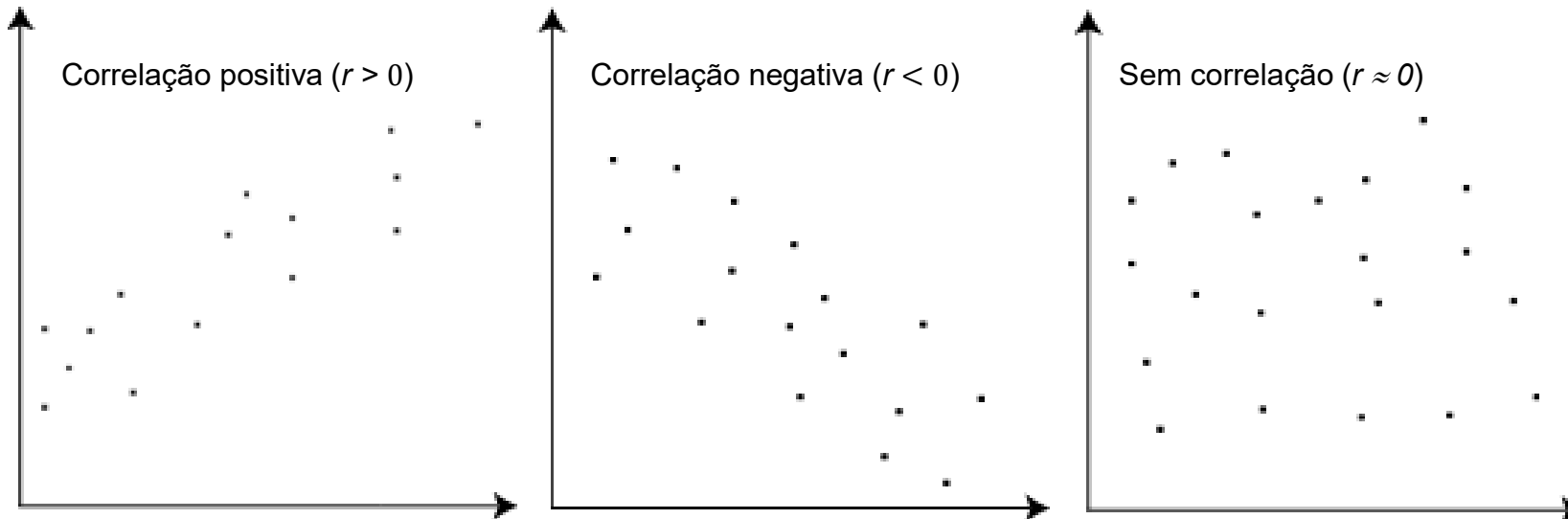
Gráficos de dispersão.

## Métricas

O **coeficiente de correlação de Pearson** ( $r$ ) é uma medida da força da associação linear que existe entre duas variáveis. Nos gráficos abaixo, temos situações com correlação positiva, negativa e sem correlação. O coeficiente de correlação de Pearson ( $r$ ) é dado pela expressão abaixo,

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(p_i - \bar{p})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n (p_i - \bar{p})^2}} \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad \bar{p} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i$$

onde  $y_1, \dots, y_n$  indicam os valores experimentais e  $p_1, \dots, p_n$  são os valores previstos pelo modelo de regressão. Os termos  $\bar{y}$  e  $\bar{p}$  são as médias aritméticas indicadas acima.



Gráficos de dispersão.

## Métricas

O **coeficiente de determinação** ( $R^2$ ) mede o quão bem os valores previstos ( $p_i$ ) se aproximam dos valores experimentais ( $y_i$ ). Ele depende da distância dos pontos de uma linha  $y = x$  (diagonal aos quadrantes 1 e 3 do gráfico cartesiano bidimensional). Quanto mais próximos os valores previstos ( $p_i$ ) estão de uma linha  $y = x$ , melhor é o coeficiente de determinação.

O coeficiente de determinação ( $R^2$ ) é dado pela seguinte equação,

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2}{\sum_{i=1}^n \left( y_i - \frac{\sum_{j=1}^n y_j}{n} \right)^2}$$

onde  $p_i$  indica os valores previstos por um modelo e  $y_i$  e  $y_j$  são os valores experimentais para  $n$  observações. Apesar do coeficiente de determinação se indicado por  $R^2$ , podemos ter valores negativos para esta correlação. Para  $R^2 = 1$ , temos uma correlação perfeita. Quando  $R^2 = 0$  a correção é tão boa quanto tentativas aleatórias. Para  $R^2 < 0$  indica previsões pior que uma tentativa aleatória.



## Métricas

- Além dos coeficientes de correlação, podemos avaliar o erro associado ao modelo de regressão. Uma das métricas que usam o erro é o **RMSE (root mean squared error) (raiz quadrada do erro médio)**.

O *RMSE* tem a seguinte expressão,

$$RMSE = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2}$$

- onde  $p_i$  indica os valores previstos por um modelo e  $y_i$  são os valores experimentais para  $n$  observações. O *RMSE* seria zero se o modelo previste exatamente os pontos experimentais.

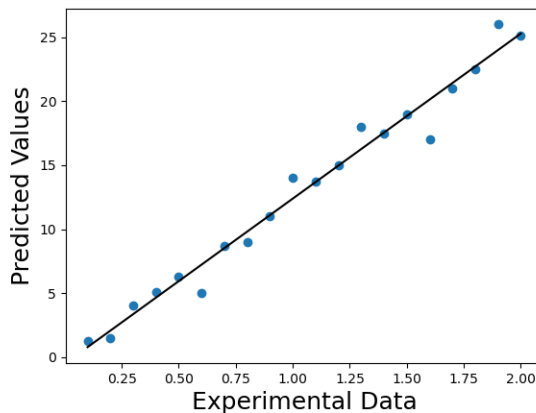
Outra métrica é a *MAE (mean absolute error)* (erro médio absoluto),

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - p_i|$$

- onde  $p_i$  indica os valores previstos por um modelo e  $y_i$  são os valores experimentais para  $n$  observações.

## Métricas

Uma grande contribuição dos modelos de regressão é a previsão do comportamento de sistemas biológicos. Hoje com a explosão de dados biológicos, temos material para alimentar a modelagem. Ao gerarmos os modelos de regressão, normalmente dividimos os dados em dois conjuntos, um chamado de conjunto de treinamento (*training set*) e outro de teste (*test set*). O conjunto de treinamento é usado para obter o modelo de regressão e o de teste para verificar o poder de previsão, visto que os dados deste último não foram usados para a modelagem. Os pontos de cada conjunto são selecionados aleatoriamente, onde pegamos usualmente 70 % dos dados para o treinamento e o restante para o teste ([Bitencourt-Ferreira & de Azevedo, 2019](#)). Em 2021, um grupo de pesquisadores em aprendizado de máquina publicou um estudo que estabeleceu quais são as métricas mais relevantes para a modelagem em biologia ([Walsh et al., 2021](#)). Para a análise do poder de previsão de modelos de regressão, recomenda-se o uso do coeficiente de determinação ( $R^2$ ), raiz quadrada do erro médio ( $RMSE$ ) e erro médio absoluto ( $MAE$ ). A seleção é feita pela aplicação das métricas ao conjunto de teste.



$$RMSE = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2}$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - p_i|$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2}{\sum_{i=1}^n \left( y_i - \frac{\sum_{j=1}^n y_j}{n} \right)^2}$$

Nas equações acima,  $p_i$  indica os valores previstos por um modelo e  $y_i$  são os valores experimentais para  $n$  observações.

Gráfico de dispersão entre os dados experimentais e os valores previstos. Equações para previsão do poder de previsão dos modelos de regressão ([Walsh et al., 2021](#)).

## Métricas

Aplicando-se a análise estatística do poder de previsão dos modelos de regressão para oito equações polinomiais, temos os resultados da tabela abaixo.

Grau	RMSE	MAE	$R^2$	$\rho$	$p$ -value	$r$	$p$ -value
1	5.333	4.457	0.001	-0.009	9.699e-01	0.034	0.8868
2	4.948	4.152	0.140	0.498	2.553e-02	0.375	0.1038
3	4.317	3.741	0.346	0.677	1.051e-03	0.588	0.006408
4	2.872	2.336	0.710	0.820	9.807e-06	0.843	3.1e-06
5	2.228	1.882	0.826	0.905	4.122e-08	0.909	3.002e-08
<b>6</b>	<b>1.350</b>	<b>1.112</b>	<b>0.936</b>	<b>0.977</b>	<b>1.323e-13</b>	<b>0.967</b>	<b>3.424e-12</b>
7	1.347	1.124	0.936	0.971	1.086e-12	0.968	3.327e-12
8	1.337	1.132	0.937	0.974	4.037e-13	0.968	2.887e-12

O  $p$ -value indica a relevância da correlação, quanto menor mais confiável é a correlação. Para sistemas biológicos, considera-se que valores  $p < 0,05$  são desejáveis. Usando-se o  $MAE$  como critério de seleção, o melhor modelo é o polinômio de grau 6.

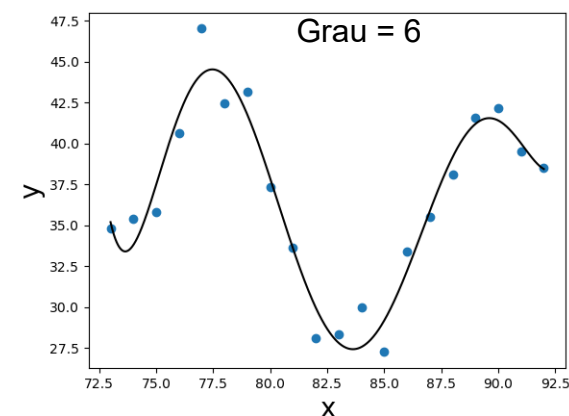
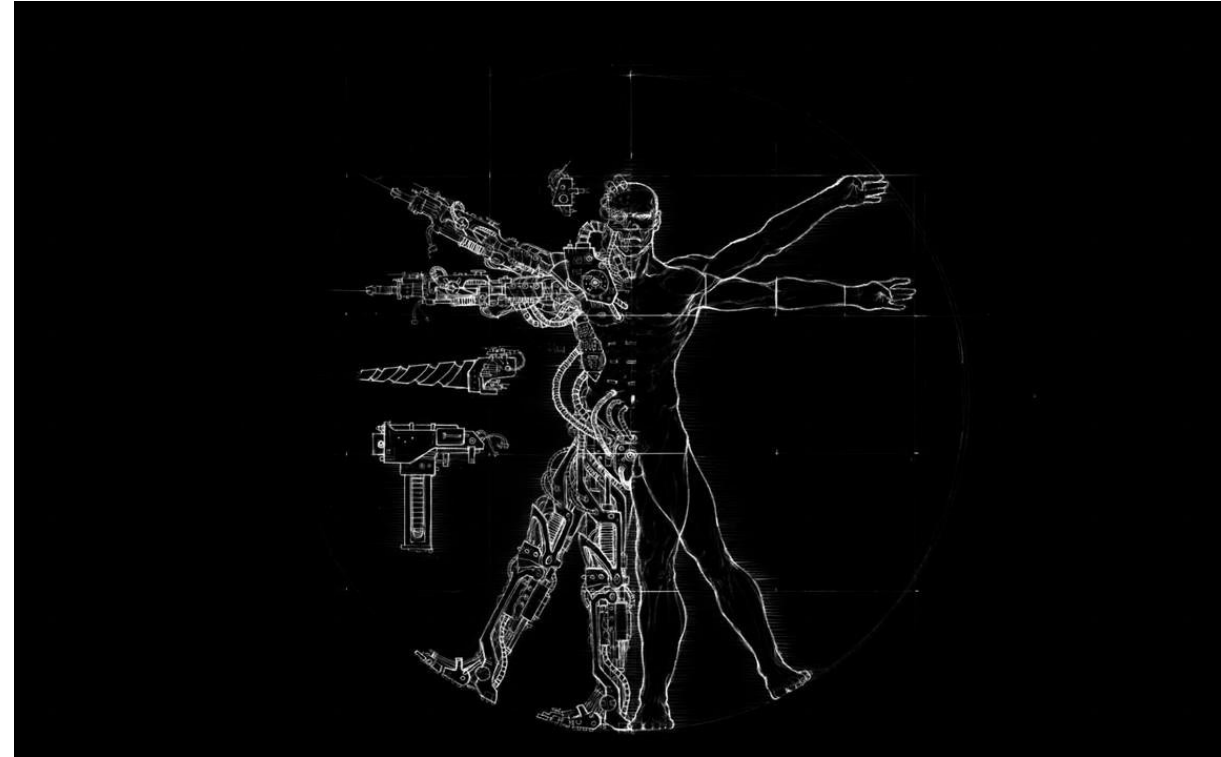


Gráfico de dispersão. Pontos experimentais (azul) com curva do modelo de regressão (preta).

## Apresentação da Singularidade Tecnológica

Uma grande parte dos cientistas influentes mundialmente acredita que vivemos um momento especial da história do desenvolvimento científico e tecnológico. Devido à importância deste momento, destaco nos meus cursos e palestras alguns aspectos relevantes da singularidade tecnológica. Hoje, discutiremos o aumento da expectativa de vida e a possibilidade de atingirmos a singularidade tecnológica. Considerando-se o crescimento constante do poder de processamento dos computadores, espera-se que num futuro próximo sejamos capazes de transferir nossa consciência para computadores com complexidade do cérebro humano. Ficção científica ou realidade?



## Aumento da Expectativa de Vida

Um aspecto interessante da saúde humana é o aumento expressivo da expectativa de vida observado no último século. Se compararmos a expectativa de vida hoje, com a de um brasileiro da década de 1940, vemos um aumento significativo desta. No gráfico ao lado, vemos que a expectativa de vida do brasileiro em 1940 era menor que 50 anos, e hoje está acima de 70 anos. O aumento deve-se a diversos fatores, como o ampliação do saneamento básico e as conquistas científicas da medicina moderna.

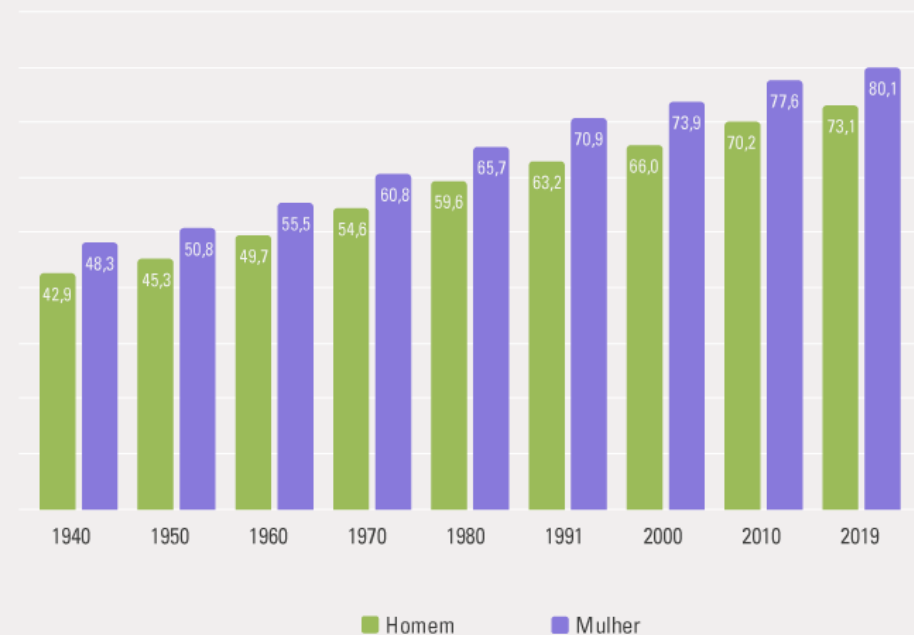
Dados sobre a expectativa de vida em diferentes países podem ser encontrados no site:

<https://www.indexmundi.com/g/g.aspx?v=30&c=br&l=p>

t

### Expectativa de vida ao nascer (em anos)

Por sexo



Fonte: Tábuas Abreviadas e Tábuas Completas de Mortalidade

AGÊNCIA IBGE  
NOTÍCIAS  
IBGE

Expectativa de vida do Brasileiro entre 1940 e 2019.

Fonte: <https://www.ufjf.br/ladem/2020/12/10/expectativa-de-vida-dos-brasileiros-aumenta-3-meses-e-chega-a-766-anos-em-2019/>

## Aumento da Expectativa de Vida

Olhando para o futuro, podemos esperar um aumento da expectativa de vida. Um geneticista da Cambridge University-Reino Unido prevê que a primeira pessoa a viver mais de 1000 anos já está entre nós. **Isto mesmo, mil anos!** Fonte: [http://news.bbc.co.uk/2/hi/uk\\_news/4003063.stm](http://news.bbc.co.uk/2/hi/uk_news/4003063.stm)

The screenshot shows a web browser window with the URL <https://www.sens.org/about-us/>. The browser's address bar and tabs are visible. The website header includes the Sens Research Foundation logo with the tagline "reimagine aging" and a navigation menu with "ABOUT US", "RESEARCH", "EDUCATION", and "GET INVOLVED". There are also buttons for "Donate", "Subscribe", and "SENSible Blog". The main content area features a large banner for the "2023 | ANNUAL REPORT" with the text "Read our 2023 Annual Report" and "The latest in SRFs progress, research, & growth." Below this is an orange button that says "Read our new Annual Report". The banner image depicts a road leading from a desolate, dry landscape with a dead tree to a lush, green landscape with a healthy tree under a bright sun.

We fund innovative research at universities across the world, at our own Research Center in Mountain View, CA, and through investments in early stage companies.

## Aumento da Expectativa de Vida

A evolução da ciência médica nos deu nas últimas décadas desenvolvimentos como transplantes, vacinas, novos fármacos etc. Além disso, temos a expectativa da substituição de órgãos, como o rim portátil que pode ser usado numa mochila e no futuro poderá ser implantado. Veja o site abaixo.

Artificial kidney could supplant dialysis, the decades-old standard treatment for kidney failure

By uclahealth • January 29, 2021

Share this:

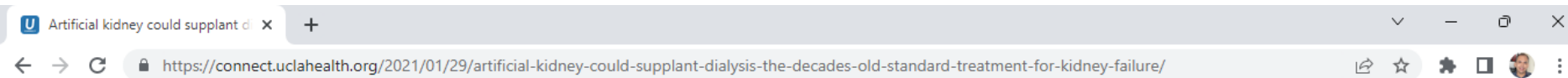
English Español 中文 العربية 한국어 日本語

*UCLA Health's Dr. Ira Kurtz and collaborators are nearing the finish line in development of the groundbreaking device.*

Ira Kurtz, MD, chief of Nephrology at UCLA Health, believes the kidney is the human body's most fascinating organ — even smarter, he says, than

## Aumento da Expectativa de Vida

Baseado neste cenário, podemos ser otimistas quanto à expectativa de vida. Esperamos que nas próximas décadas teremos a possibilidade de substituição de nossos órgãos. A substituição do rim tem uma perspectiva de ser possível nos próximos anos. Outros órgãos apresentam **equivalente biomecânico** como o coração.



Connect ▾ Share ▾ Wellness ▾ Coronavirus Science Ask the Doctors Resources ▾

Site search



*UCLA Health's Dr. Ira Kurtz and collaborators are nearing the finish line in development of the groundbreaking device.*

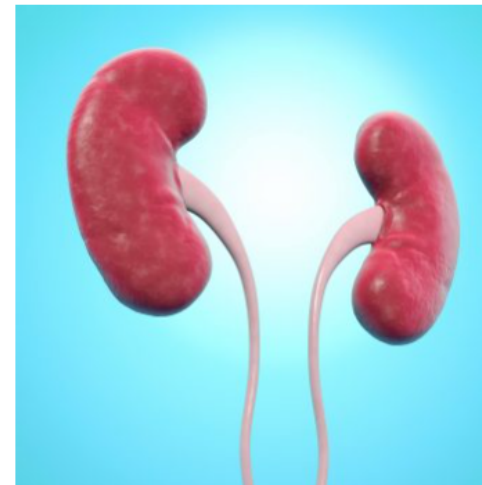
Ira Kurtz, MD, chief of Nephrology at UCLA Health, believes the kidney is the human body's most fascinating organ — even smarter, he says, than the brain.

For Dr. Kurtz and his colleagues, the holy grail long has been the development of a wearable and an implantable artificial kidney to replace the cumbersome dialysis process that has been the standard treatment for renal failure since the 1950s.

Now, after a five-year collaboration between the US Kidney Research Corporation, the University of Arkansas and UCLA Health, Dr. Kurtz and a team of researchers are on the verge of achieving that goal with the introduction of an artificial kidney that can be worn inside a backpack. If things proceed as hoped, within a few years a similar device could be implanted in the body as an artificial organ.

In July 2019, U.S. nephrologists celebrated when then-President Donald Trump announced in an executive order that his administration wanted to transform the care for 37 million Americans suffering from kidney disease, which kills more people annually than most cancers.

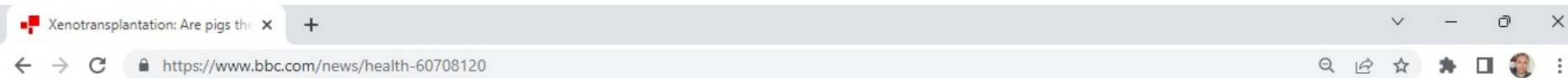
“It made a major splash in the renal community because it was the first time kidney care had really





## Aumento da Expectativa de Vida

Além da substituição de órgão por equivalentes biomecânicos, há a tecnologia dos xenotransplantes. Desenvolvimentos recentes com porcos geneticamente modificados geraram órgãos para transplantes em humanos.



## Xenotransplantation: Are pigs the future of organ transplants?

By James Gallagher  
Inside Health presenter, BBC Radio 4

13 March



## Aumento da Expectativa de Vida

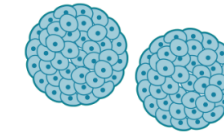
Ao lado temos a sequência de etapas para a produção de órgãos para xenotransplantes. Para a criação dos órgãos, começamos com a edição genética das células do porco para torná-los mais próximos aos humanos (1). Uma vez editadas as células, estas são usadas para fazer embriões de porcos (2). Os porcos geneticamente modificados são criados em um ambiente controlado até a idade adulta (3). Depois o porco doador adulto é sacrificado e o órgão transplantado para o paciente (4). A última etapa é o uso de fármacos imunossupressores para prevenir a rejeição do órgão transplantado (5). Entre os fármacos usados como imunossupressores destacam-se os inibidores de enzima purina nucleosídeo fosforilase ([Canduri et al., 2005](#)).

## Genetically engineering pigs as organ donors

① Adding and removing genes with gene-editing technology creates genetically-altered pig cells



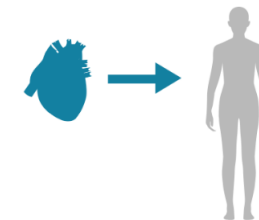
② These are used to make pig embryos



③ The genetically-engineered pigs are raised in a controlled, bio-sealed environment



④ The organ is removed from adult pig and transplanted into patient



⑤ Patient must still take immunosuppressant drugs, to prevent their body rejecting the new organ



## Singularidade Tecnológica

Além do aumento expressivo do número de anos vividos, a humanidade usufruirá de facilidades tecnológicas cada vez mais baratas. A evolução da medicina e da cibernética permitirá o desenvolvimento de um equivalente computacional ao cérebro humano. Com o progresso concomitante da neurociência, espera-se que tenhamos a capacidade tecnológica de transferirmos o conjunto de nossas sinapses para um cérebro artificial, ou seja, a substituição do cérebro humano por um equivalente computacional. Nessa fase a humanidade atingirá virtualmente a imortalidade. A situação onde essa transição ocorrerá, é chamada de **singularidade tecnológica**.



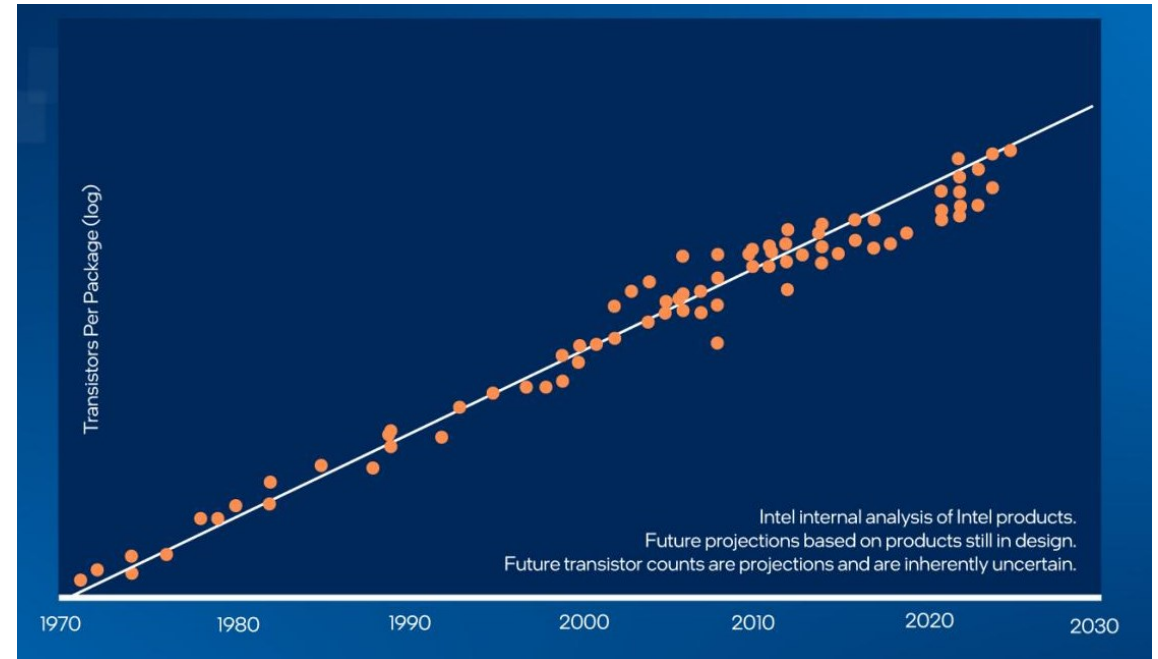
Visão artística da modelagem matemática do cérebro.

Fonte: <http://www.kurzweilai.net/mind-uploading-featured-in-academic-journal-for-first-time>

## Singularidade Tecnológica

O gráfico ao lado ilustra a lei de Moore, que estabelece que aproximadamente entre 18 e 24 meses o número de transistores por chip dobra. Esta lei foi proposta por Gordon Moore cofundador da Intel. Ou seja, considerando-se os processadores hoje, esperamos que em aproximadamente entre 18 e 24 meses teremos disponíveis, pelo mesmo preço, computadores com o dobro da capacidade de processamento. Uma extrapolação da lei de Moore para 2050, ou um pouco depois, indica que teremos computadores com a complexidade do cérebro humano. Contudo, nos últimos anos temos observado uma queda na taxa de crescimento do poder de processamento, ou seja, um desvio da lei Moore, mesmo assim ainda temos um crescimento do poder de processamento.

Fonte: <https://youtu.be/bm6ScvNygUU>



Evolução do número de transistores por chip em função do ano.

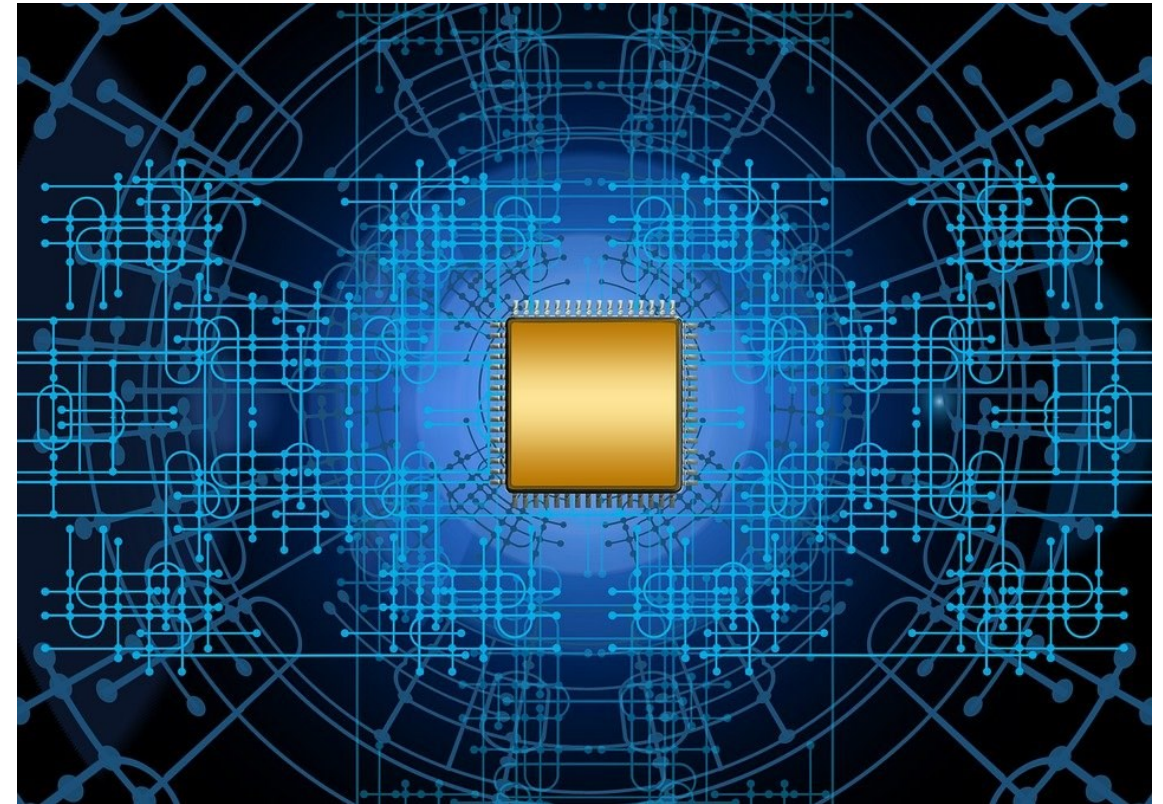
Fonte: <https://www.intel.com/content/www/us/en/newsroom/opinion/moore-law-now-and-in-the-future.html>

## Singularidade Tecnológica

A lei de Moore tem mostrado uma tendência de diminuição da taxa de crescimento. Há duas razões principais para essa queda.

1) Os chips de computadores quando atingirem um nível de integração onde os elementos do circuito estiverem com uma distância de cinco átomos teremos a indeterminação da corrente elétrica. Assim, as correntes elétricas do circuito ficam indeterminadas e o chip não funcionará. Estamos próximos a atingir esse limite de cinco átomos de distância entre os elementos do circuito dentro de um chip.

2) Uma integração elevada de componentes no chip leva a uma grande geração de calor, o que torna inviável o funcionamento deste. O chip literalmente derreterá devido à grande quantidade de calor gerado por seu funcionamento.



Chip de computador.

Fonte: <https://pixabay.com/pt/illustrations/chip-de-computador-placa-de-circuito-5936602/>

## Singularidade Tecnológica

Para superar a limitação atual da construção dos chips, há várias tecnologias emergentes. Destacaremos duas delas: **computação quântica** e **computador molecular**.

O computador quântico usa princípios da mecânica quântica para realizar cálculos. Essa abordagem aumenta em muito o poder computacional, mas ainda temos limites tecnológicos para sua implementação.

Fontes:

<https://physicstoday.scitation.org/doi/10.1063/pt.6.1.20210305a/full/>

<https://www.cbinsights.com/research-quantum-computing-explainer>



Computador quântico.

Fonte: <https://physicstoday.scitation.org/doi/10.1063/pt.6.1.20210305a/full/>

## Singularidade Tecnológica

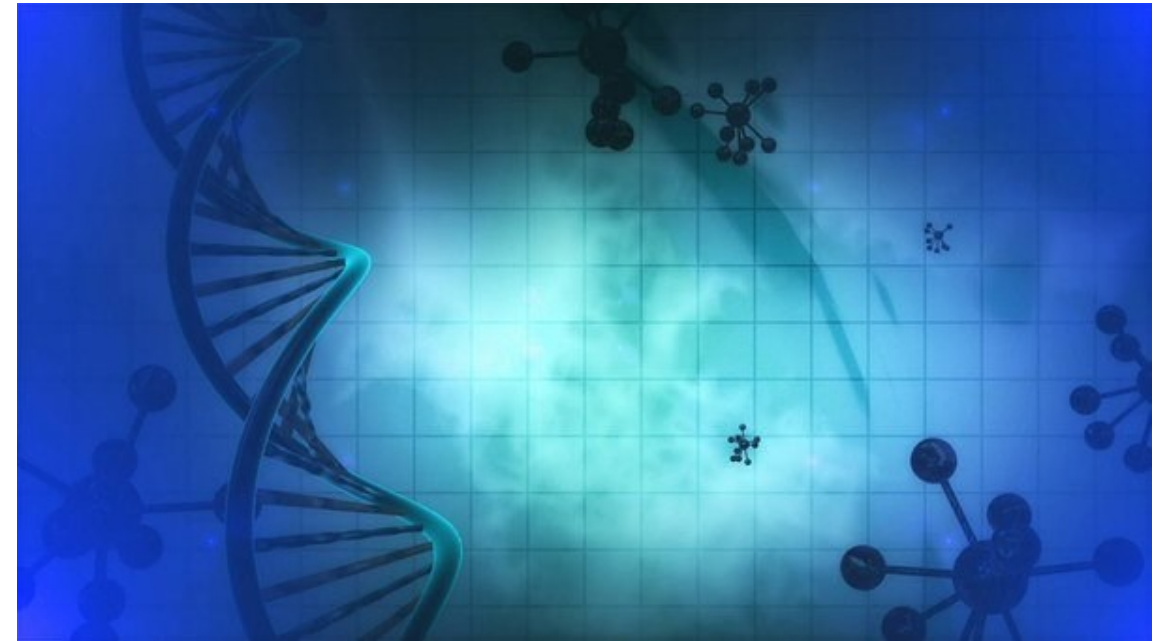
O computador molecular usa moléculas para calcular. Há estudos usando o DNA para o desenvolvimento de computadores moleculares ([Zhang et al., 2021](#)), além de outras moléculas orgânicas ([Minina & Shklovskiy-Kordi, 2022](#)).

Resumindo, mesmo com a diminuição da taxa de crescimento do poder computacional usando-se a tecnologia atual de construção de chips, esperamos nas próximas décadas termos uma nova tecnologia para desenvolvimento de computadores mais poderosos que nos levarão a ter computadores com a capacidade do cérebro humano.

### Referências:

Zhang Y, Feng Y, Liang Y, Yang J, Zhang C. Development of Synthetic DNA Circuit and Networks for Molecular Information Processing. *Nanomaterials* (Basel). 2021; 11(11): 2955. [PubMed](#)

Minina SV, Shklovskiy-Kordi NE. Neuron quantum computers and a way to unification of science: A compendium of Efim Liberman's scientific work. *Biosystems*. 2022; 217: 104684. [PubMed](#)



Computadores moleculares exploram interações intermoleculares para realização de cálculos.

Fonte: [https://cdn.pixabay.com/photo/2013/07/18/10/55/microbiology-163470\\_960\\_720.jpg](https://cdn.pixabay.com/photo/2013/07/18/10/55/microbiology-163470_960_720.jpg)

## Singularidade Tecnológica

A pesquisa em singularidade tecnológica é uma atividade multidisciplinar, cujo o foco é o entendimento dos sistemas biológicos e computacionais, especificamente a interface do ser humano com máquinas. A partir deste conhecimento, teremos condições de prolongar nossa expectativa de vida, até termos condições tecnológicas de transferirmos nossa consciência para um sistema computacional, o que abre a possibilidade da imortalidade, bem como uma nova fase da evolução humana. Tal fase da evolução permitirá a integração das consciências computacionais, o que abre um amplo espectro de possibilidades. Tais tecnologias ainda não existem, mas se consideramos a lei de Moore, vemos que o rápido desenvolvimento tecnológico nos levará até esse estágio.



Visão artística do cérebro digital.

Fonte: <https://www.kurzweilai.net/critique-of-against-naive-uploadism>



## Singularidade Tecnológica

Muitos autores destacam que, as pesquisas mais importantes e desafiadoras nos dias de hoje estão relacionadas com a singularidade tecnológica. A biofísica, a bioinformática e a inteligência artificial podem contribuir nesta área em duas frentes de atuação. Uma frente para entendermos as bases moleculares do funcionamento do cérebro, que permitirá seu entendimento e então sua modelagem computacional. Noutra frente, ao vivermos mais (aumento da expectativa de vida), nos tornamos sujeitos a novas enfermidades, que podem ser combatidas com abordagens do desenho de fármacos baseado em computadores.

*Ao atingirmos a singularidade tecnológica, abandonaremos as limitações biológicas do nosso ser e atingiremos um universo de novas possibilidades que tal fase nos trará.*

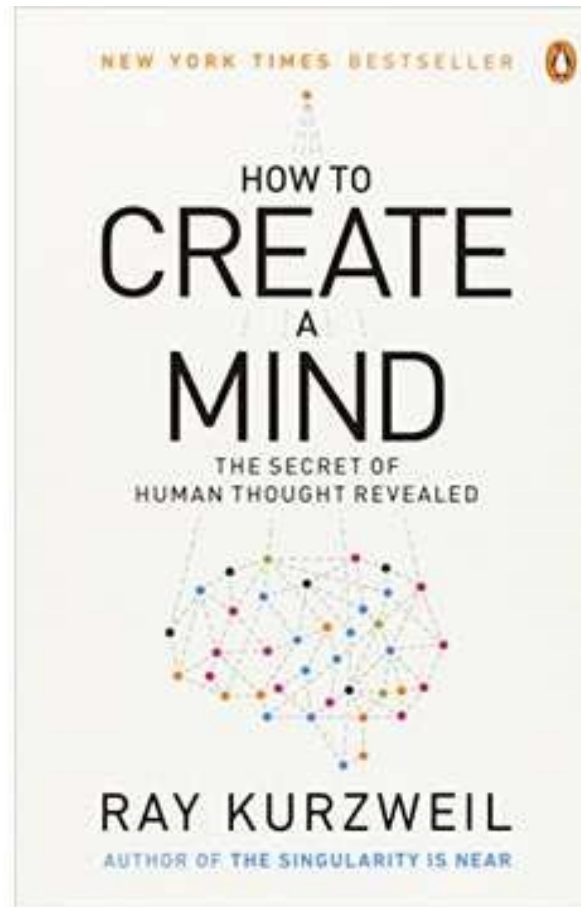
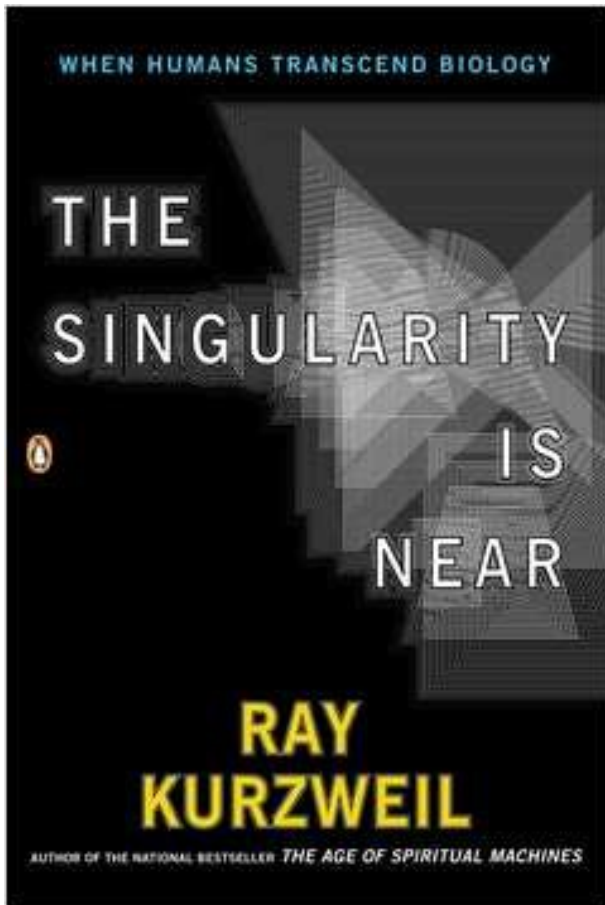


Visão artística da singularidade tecnológica.

Fonte: [https://cdn.pixabay.com/photo/2020/11/14/12/30/robot-5741488\\_960\\_720.jpg](https://cdn.pixabay.com/photo/2020/11/14/12/30/robot-5741488_960_720.jpg)

## Singularidade Tecnológica

Um dos maiores pensadores sobre a singularidade tecnológica é o inventor, empresário e escritor Ray Kurzweil. Entre os seus livros destacamos os dois mostrados abaixo que tratam da singularidade tecnológica.








## Singularidade Tecnológica




Você pode ter informações adicionais sobre estudos relacionados à singularidade tecnológica visitando o site do Ray Kurzweil: <https://www.kurzweilai.net/>

The screenshot shows a web browser window with the URL <https://www.kurzweilai.net>. The page header features the Kurzweil logo and the tagline "Tracking the acceleration of intelligence." Below the header is a navigation menu with links for "home", "stories on progress", "essays", "a + e", "mailbox", "look + listen + learn", "design", "staff log-in", and "search". A secondary navigation bar includes "about", "spotlight", "good books", "events guide", "bulletin board", and "newsletter". The main content area is divided into several sections: "the Kurzweil Library", "books by Ray Kurzweil", "writings by Ray Kurzweil", "Ray Kurzweil lifetime of innovation", and "Ray Kurzweil press + appearances". A featured article titled "Breakthrough research links deformed proteins with schizophrenia" is visible, along with a "the Kurzweil Library" section featuring a portrait of Ray Kurzweil and a list of links: "about Ray Kurzweil", "books", "writings", "projects", "press + appearances", and "awards + celebrations". A quote at the bottom reads: "Ray Kurzweil is a best-selling author, pioneering inventor, and futurist."

## Referências

-  Abell, M. L. and J. P. Braselton. *Mathematica by Example*. (3rd ed.) Elsevier Academic Press, 2004. [Link](#)
- Baek M, DiMaio F, Anishchenko I, Dauparas J, Ovchinnikov S, Lee GR, Wang J, Cong Q, Kinch LN, Schaeffer RD, Millán C, Park H, Adams C, Glassman CR, DeGiovanni A, Pereira JH, Rodrigues AV, van Dijk AA, Ebrecht AC, Opperman DJ, Sagmeister T, Buhlheller C, Pavkov-Keller T, Rathinaswamy MK, Dalwadi U, Yip CK, Burke JE, Garcia KC, Grishin NV, Adams PD, Read RJ, Baker D. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science*. 2021 Aug 20;373(6557):871-876. [PubMed](#)
-  Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo WF Jr. Machine Learning to Predict Binding Affinity. *Methods Mol Biol*. 2019;2053:251-273. [PubMed](#)
- Canduri F, Fadel V, Basso LA, Palma MS, Santos DS, de Azevedo WF Jr. New catalytic mechanism for human purine nucleoside phosphorylase. *Biochem Biophys Res Commun*. 2005; 327(3): 646–649. [PubMed](#)
-  De Azevedo WF. Protein-Ligand Interactions: High-Resolution Structures of CDK2. *Curr Drug Targets*. 2022;23(5):438-440. [PubMed](#)
- Heck GS, Pintro VO, Pereira RR, de Ávila MB, Levin NMB, de Azevedo WF. Supervised Machine Learning Methods Applied to Predict Ligand- Binding Affinity. *Curr Med Chem*. 2017;24(23):2459-2470. [PubMed](#)
-  Eberhardt J, Santos-Martins D, Tillack AF, Forli S. AutoDock Vina 1.2.0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings. *J Chem Inf Model*. 2021; 61(8):3891-3898. [PubMed](#)
- Li H, Peng J, Sidorov P, Leung Y, Leung KS, Wong MH, Lu G, Ballester PJ. Classical scoring functions for docking are unable to exploit large volumes of structural and interaction data. *Bioinformatics*. 2019; 35(20):3989-3995. [PubMed](#)
-  Minina SV, Shklovskiy-Kordi NE. Neuron quantum computers and a way to unification of science: A compendium of Efim Liberman's scientific work. *Biosystems*. 2022; 217: 104684. [PubMed](#)
- Wójcikowski M, Siedlecki P, Ballester PJ. Building Machine-Learning Scoring Functions for Structure-Based Prediction of Intermolecular Binding Affinity. *Methods Mol Biol*. 2019;2053:1-12. [PubMed](#)

## Referências

-  Trott O, Olson AJ. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. J Comput Chem. 2010; 31(2):455-461. [PubMed](#)
- Veit-Acosta M, de Azevedo Junior WF. The Impact of Crystallographic Data for the Development of Machine Learning Models to Predict Protein-Ligand Binding Affinity. Curr Med Chem. 2021; 28(34):7006-7022. [PubMed](#)
-  Walsh I, Fishman D, Garcia-Gasulla D, Titma T, Pollastri G; ELIXIR Machine Learning Focus Group, Harrow J, Psomopoulos FE, Tosatto SCE. DOME: recommendations for supervised machine learning validation in biology. Nat Methods. 2021;18(10):1122-1127. [PubMed](#)
- Zhang Y, Feng Y, Liang Y, Yang J, Zhang C. Development of Synthetic DNA Circuit and Networks for Molecular Information Processing. Nanomaterials (Basel). 2021; 11(11): 2955. [PubMed](#)
-  Zar, J.H. Significance Testing of the Spearman Rank Correlation Coefficient. J. Am. Stat. Assoc., 1972, 67(339), 578-580. [DOI](#)

[http://atlasgeneticsoncology.org/Genes/GC\\_PNP.html](http://atlasgeneticsoncology.org/Genes/GC_PNP.html)

 <https://medlineplus.gov/genetics/condition/purine-nucleoside-phosphorylase-deficiency/#frequency>





Que a luz da ciência acabe com  
as trevas do negacionismo.