

WORKSHOP

1 0 1

Nutrição, microbioma e saúde
últimos achados e futuras pesquisas

Inteligência Artificial e Pesquisa do Microbioma



Georg Gerber

Brigham and Women's Hospital, Massachusetts, EUA

Inteligência artificial (IA) é uma subdisciplina da ciência da computação que desenvolve máquinas que imitam funções cognitivas caracteristicamente humanas, como aprendizado ou resolução de problemas. As raízes da IA podem ser rastreadas até o trabalho seminal de mais de oitenta anos atrás descrevendo modelos matemáticos de redes de neurônios. Nas décadas subsequentes, o trabalho avançou em várias direções, incluindo o desenvolvimento de um ramo da IA denominado aprendizado de máquina (*machine learning*, ML), que cria algoritmos capazes de melhorar seu desempenho em medidas objetivas, como vencer em um jogo, por meio de treinamento em dados de entrada.

Uma grande revolução na IA começou por volta de 2010, catalisada por uma confluência de vários fatores, incluindo algoritmos aprimorados, pacotes de software, hardware de computador e disponibilidade de conjuntos de dados cada vez maiores. Os sistemas de IA de última geração hoje são baseados em aprendizado profundo (deep learning, DL), que empilha camadas de funções matemáticas capazes de capturar padrões extremamente complexos em dados. Um avanço importante a esse respeito são os *modelos de fundação*, que são modelos DL flexíveis treinados em grandes e amplos conjuntos de dados que podem então ser aplicados a uma variedade de tarefas posteriores^{1,2}. Esses sistemas exibem comportamento sofisticado que pode parecer surpreendentemente humano, particularmente nos reinos de reconhecimento de imagem e compreensão de linguagem natural. Tais modelos também estão sendo cada vez mais aplicados nas ciências da vida e estão alcançando resultados igualmente impressionantes em problemas como dobramento de proteínas³.

A IA pode ser usada para avançar na pesquisa do microbioma? De fato, os métodos DL já foram usados no campo, com aplicações iniciais empregando ferramentas prontas para uso para abordar tarefas como melhorar a atribuição taxonômica de leituras de sequenciamento e previsão de doenças do hospedeiro com base na composição do microbioma. Os conjuntos de dados do microbioma, no entanto, apresentam vários desafios para DL. Muitos métodos DL exigem conjuntos de dados extremamente grandes para treinamento. Embora experimentos de microbioma gerem conjuntos de dados de alta dimensão, eles medem relativamente poucos microbiomas. Além disso, os dados do microbioma são ruidosos e os táxons microbianos presentes geralmente variam tremendamente entre hospedeiros humanos. Outra questão para análises de microbioma é a necessidade de interpretabilidade, ou a capacidade de entender o raciocínio por trás de previsões e decisões tomadas por modelos. A interpretabilidade não é tão importante em aplicações de IA para o consumidor, como chatbots ou programas de geração de imagens, que geralmente usam modelos de "caixa preta". No entanto, para pesquisadores de microbioma, que analisam conjuntos de dados com os objetivos de obter entendimento científico ou desenvolver diagnósticos ou tratamentos clinicamente úteis, a interpretabilidade é essencial.

O caminho a seguir para superar os desafios acima mencionados e desbloquear o potencial para aplicações de IA em microbioma envolverá o desenvolvimento criativo e a aplicação de tecnologias experimentais juntamente com modelos DL construídos para esse propósito. Um exemplo de um modelo promissor desse tipo é o MDITRE⁴, um método que aprende eficientemente regras interpretáveis por humanos prevendo o estado de saúde do hospedeiro a partir de dados de séries temporais de microbiota. Este método tem desempenho igual ou superior aos métodos de ML de "caixa preta". Ademais, ele deriva automaticamente interpretações biologicamente significativas que vinculam padrões de mudanças do microbioma ao longo do tempo com fenótipos do hospedeiro, sugerindo seu potencial como uma ferramenta para definir biomarcadores para novos diagnósticos baseados em microbioma.

O futuro da IA na pesquisa de microbioma é brilhante. Ideias de aplicação empolgantes incluem prever os efeitos de antibióticos, mudanças na dieta ou intervenções terapêuticas no microbioma; elucidar os mecanismos moleculares de interações entre células humanas e o microbioma; descobrir as funções da vasta gama de genes de microbioma não anotados; mapear a estrutura espacial de microbiomas; e usar IA para orientar o design e a interpretação de estudos de microbioma. Apesar desse potencial extremamente empolgante, a IA tem perigos, incluindo riscos de preconceito e discriminação; remoção do julgamento e criatividade humanos das tarefas; acumulação de ferramentas por empresas e países ricos; e impacto negativo no meio ambiente. Assim, esforços internacionais são essenciais para traçar um curso para o uso responsável dessa tecnologia incrivelmente poderosa.

Referências

- 1) Chen, R. J. et al. *Towards a general-purpose foundation model for computational pathology. Nat Med* 30, 850-862 (2024).
<https://doi.org/10.1038/s41591-024-02857-3>
- 2) Lu, M. Y. et al. *A visual-language foundation model for computational pathology. Nat Med* 30, 863-874 (2024).
<https://doi.org/10.1038/s41591-024-02856-4>
- 3) Abramson, J. et al. *Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. Nature* (2024).
<https://doi.org/10.1038/s41586-024-07487-w>
- 4) Maringanti, V. S., Bucci, V. & Gerber, G. K. *MDITRE: Scalable and Interpretable Machine Learning for Predicting Host Status from Temporal Microbiome Dynamics. mSystems* 7, e0013222 (2022).
<https://doi.org/10.1128/msystems.00132-22>



WORKSHOP

1 0 1

Nutrição, microbioma e saúde
últimos achados e futuras pesquisas

Siga-nos em nossas páginas de mídia social



Website
nnibrasil.com.br



LinkedIn
[@NNI Brasil](https://www.linkedin.com/company/nni-brasil)