Foi descoberta uma nova classe de antibióticos para bactérias Staphylococcus aureus resistentes a medicamentos

A utilização da inteligência artificial (IA) está se revelando como um fator de mudança no que diz respeito à Medicina, com a tecnologia ajudando os cientistas a descobrir os primeiros novos antibióticos após 60 anos.

A descoberta de um novo composto capaz de matar uma bactéria resistente aos medicamentos que mata milhares de pessoas em todo o mundo pode vir a ser um *turning point* na luta contra a resistência aos antibióticos.

"A ideia aqui é que podemos ver o que está a ser captado pelos modelos para fazer as suas previsões de que certas moléculas seriam bons antibióticos", disse James Collins, professor de Engenharia Médica e Ciência no Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT) e um dos autores do estudo, em **comunicado.**

"O nosso trabalho fornece uma estrutura que é eficiente em termos de tempo, de recursos e mecanicamente perspicaz, do ponto de vista da estrutura química, de uma forma que não tínhamos até à data".

Os resultados foram publicados na revista **Nature** e contaram com a coautoria de uma equipe de 21 pesquisadores.

Estudo com o objetivo de "abrir a caixa preta"

A equipe responsável pelo projeto utilizou um modelo de aprendizagem profunda para prever a atividade e a toxicidade do novo composto.

A aprendizagem profunda envolve a utilização de redes neuronais artificiais para aprender e representar automaticamente características de dados sem programação explícita.

Está a ser cada vez mais aplicada na descoberta de medicamentos para acelerar a identificação de potenciais candidatos, prever as suas propriedades e otimizar o processo de

desenvolvimento de medicamentos.

Neste caso, os pesquisadores centraram-se no *Staphylococcus aureus* resistente à meticilina (MRSA).

As infeções por MRSA podem variar desde infeções cutâneas leves a doenças mais graves e potencialmente fatais, como pneumonia e infeções da corrente sanguínea.

Quase 150.000 infeções por MRSA ocorrem todos os anos na União Europeia e quase 35.000 pessoas morrem anualmente no bloco devido a infeções resistentes aos antimicrobianos, de acordo com o Centro Europeu de Prevenção e Controlo das Doenças (ECDC).

"O que nos propusemos fazer neste estudo foi abrir a caixa negra. Estes modelos são constituídos por um grande número de cálculos que imitam as ligações neuronais e ninguém sabe realmente o que se passa por detrás da caixa", afirmou Felix Wong, pós-doutorado no MIT e em Harvard e um dos principais autores do estudo.

Descobrir um novo composto

Para aperfeiçoar a seleção de potenciais medicamentos, os investigadores utilizaram três modelos adicionais de aprendizagem profunda. Estes modelos foram treinados para avaliar a toxicidade dos compostos em três tipos distintos de células humanas.

Ao integrar estas previsões de toxicidade com a atividade antimicrobiana previamente determinada, os investigadores identificaram compostos capazes de combater eficazmente os micróbios com o mínimo de danos para o corpo humano.

Utilizando este conjunto de modelos, foram analisados cerca de 12 milhões de compostos disponíveis no mercado.

Os modelos identificaram compostos de cinco classes diferentes, categorizados com base em subestruturas químicas específicas dentro das moléculas, que exibiram atividade prevista contra o MRSA.

Posteriormente, os investigadores adquiriram cerca de 280 destes compostos e efectuaram testes contra o MRSA em laboratório. Esta abordagem levou-os a identificar dois candidatos a antibióticos promissores da mesma classe.