Intelligenza artificiale e ricerca scientifica: il caso delle scienze della vita, delle neuroscienze e della ricerca psicofarmacologia

di Raffaele Mauro

20-05-2025

In questo momento storico lo sviluppo di algoritmi e agenti intelligenti con capacità specializzate di grande rilievo, che in alcuni casi approssimano o superano quelle umane, ha raggiunto una fase decisiva. L'incremento simultaneo della disponibilità di dati, della potenza computazionale utilizzabile, della volontà di investire risorse e della presenza di innovazioni nell'architettura dei sistemi di intelligenza artificiale stanno ampliando enormemente le possibilità di applicazione. Una delle opportunità più importanti, viste le conseguenze positive che potrebbe comportare per il benessere umano, riguarda la ricerca scientifica.
Negli anni passati l'utilizzo della data science e dell'intelligenza artificiale in ambito scientifico è stato fortemente legato all'analisi di grandi quantità di dati sperimentali, in particolare per quanto riguarda l'estrapolazione di informazioni e schemi rilevanti. Si pensi, ad esempio, alla ricerca di esopianeti o al lavoro analitico svolto sui risultati degli esperimenti effettuati negli acceleratori di particelle. Oggi, sempre di più, sono rilevanti anche le componenti "generative" dell'intelligenza artificiale, finalizzate alla costruzione di nuovi contenuti originali o di prodotti informazionali rilevanti per un settore o per una disciplina. Ad esempio, imprese come DeepMind, con il suo modello AlphaFold, stanno contribuendo in modo significativo alle scienze della vita e alla proteomica (lo studio del proteoma, cioè dell'insieme delle proteine prodotte o modificate da un organismo). Questo sistema utilizza due tipi di approcci: le reti neurali convoluzionali, che sono particolarmente efficaci nell'analizzare immagini e strutture spaziali; e i transformer, un tipo di algoritmo in grado di comprendere relazioni complesse tra le informazioni. Il suo scopo, in particolare, è prevedere la struttura tridimensionale delle proteine a partire dalla sequenza di amminoacidi da cui sono composte, un aspetto fondamentale per comprendere il loro funzionamento nel corpo umano e negli altri organismi. Il cosiddetto protein folding, il problema dell'avvolgimento delle proteine, è infatti stato in passato un passaggio critico e particolarmente ostico nella biologia strutturale. AlphaFold, nelle sue varie versioni, ha superato test e competizioni importanti come il CASP (Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction), abbattendo radicalmente i tempi e i costi di un processo che con metodi tradizionali, come la cristallografia a raggi X e la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare, risultava eccessivamente lungo e costoso. Questa iniziativa ha inoltre portato alla creazione di un database open source con centinaia di milioni di strutture proteiche tridimensionali e nel 2024, con il modello AlphaFold 3, si è estesa la capacità predittiva computazionale non solo alle proteine ma anche a DNA, RNA e ligandi. Grazie a questi risultati, è possibile pensare a un impatto futuro tangibile per quanto riguarda la scoperta di nuovi farmaci e la comprensione della patogenesi di numerose malattie.
In questo senso, società come Insilico Medicine, Atomwise e Benevolent AI stanno utilizzando tecniche avanzate di intelligenza artificiale per scoprire e progettare nuovi composti farmacologici in modo più rapido ed efficiente rispetto ai metodi tradizionali. Per fare questo, nel caso di Insilico Medicine, uno degli strumenti chiave è l'utilizzo di generative adversarial networks (GANs), un tipo di rete neurale artificiale che genera nuove soluzioni sulla base di esempi preesistenti. Questo tipo di architettura funziona grazie a due reti neurali che competono tra loro: una crea delle nuove molecole, mentre l'altra verifica se queste molecole possano essere considerate realistiche e adatte

come potenziali farmaci. Questo processo permette di generare molecole promettenti per le applicazioni farmacologiche in modo molto più veloce rispetto ai metodi di laboratorio classici. Un'altra tecnica fondamentale è poi l'applicazione del deep reinforcement learning, un metodo con cui gli algoritmi imparano a migliorare continuamente i risultati che producono attraverso un sistema di premi e punizioni. Nel contesto della progettazione di farmaci, questo significa che l'intelligenza artificiale può esplorare milioni di possibili strutture chimiche e affinare progressivamente le migliori in base a criteri come l'efficacia della molecola, la sua stabilità e la sicurezza per gli esseri umani. Grazie all'uso dei metodi di intelligenza artificiale, il processo di sviluppo dei farmaci, che tipicamente richiede tra i dieci e i quindici anni, può essere potenzialmente ridotto quantomeno nella sua componente di scoperta e sviluppo pre-clinico, vale a dire i test iniziali necessari per valutare la sicurezza e l'efficacia del farmaco prima della sperimentazione sugli esseri umani. Un esempio concreto di questo progresso è il candidato farmaco INS018_055, un farmaco sperimentale sviluppato da Insilico Medicine per il trattamento della fibrosi polmonare idiopatica, una malattia grave che causa la progressiva cicatrizzazione dei polmoni e che rende difficile la respirazione. Grazie all'utilizzo dell'intelligenza artificiale, la fase preclinica relativa a questo farmaco è stata completata in meno di diciotto mesi, quando normalmente sarebbero stati necessari dai tre ai sei anni. Ancora una volta, un risultato particolarmente rapido rispetto ai metodi convenzionali.

Nell'ambito delle neuroscienze e della neurotecnologia l'intelligenza artificiale sta trasformando il modo in cui comprendiamo il connettoma cerebrale e gli schemi funzionali nei circuiti cerebrali, consentendo di comprendere meglio e potenzialmente prevenire o trattare disturbi neurologici e psichiatrici. Un esempio rilevante è l'analisi delle neuroimmagini per identificare pattern di attività cerebrale associati a disturbi neurologici come l'Alzheimer e il Parkinson. Attraverso l'analisi di grandi dataset e di modelli predittivi, potrebbe essere possibile in futuro ottenere la diagnosi precoce e la personalizzazione delle terapie. Altri ambiti di applicazione riguardano le interfacce neurali, utilizzate per far comunicare il cervello umano con computer o dispositivi elettronici, e le tecniche di neuromodulazione e stimolazione cerebrale non invasiva. I sistemi di deep learning consentono, ad esempio, di migliorare la qualità della decodifica dei segnali cerebrali, accrescendo la comprensione dei dati e consentendo di sviluppare protocolli di intervento più efficaci. In questo frangente, startup come Kernel e Neurable stanno sviluppando interfacce neurali per il ripristino delle funzioni motorie in pazienti con lesioni spinali o per il supporto alle capacità cognitive.

Il settore della psicofarmacologia è un altro campo molto fertile per l'applicazione di queste tecnologie. A livello globale, il mercato della ricerca applicata alla psicofarmacologia ha visto un aumento degli investimenti e un crescente interesse per le nuove metodologie computazionali. Inoltre, i modelli predittivi sviluppati stanno consentendo di identificare biomarcatori di risposta ai farmaci, migliorando la personalizzazione delle terapie psichiatriche. L'evoluzione della ricerca in questo ambito, grazie all'intelligenza artificiale, lascia intravedere scenari in cui diagnosi, terapie personalizzate e sviluppo di farmaci saranno sempre più rapidi ed efficienti, potenzialmente migliorativi della qualità della vita di milioni di persone. Un esempio che va in questa direzione è Mindstate Design Labs, una società americana fondata nel 2021, che è passata attraverso il celebre acceleratore Y Combinator prima di raccogliere cicli rilevanti di investimento da parte di fondi di venture capital, e che ha introdotto un approccio computazionale alla progettazione di nuovi composti psicoattivi. Questa startup ha utilizzato sofisticate tecniche di simulazione per identificare nuove molecole con il potenziale di trattare la depressione resistente ai farmaci tradizionali. Per farlo, ha impiegato il cosiddetto "docking molecolare", una metodologia che permette di simulare l'interazione tra una molecola candidata e una proteina bersaglio, in questo caso il recettore serotoninergico 5-HT2A, coinvolto nella regolazione dell'umore. Questa tecnica funziona come una serratura o un puzzle: il sistema prova a incastrare la molecola nel recettore e valuta quanto bene si possa adattare, determinando così il suo potenziale effetto terapeutico. Per migliorare la ricerca

sono state utilizzate anche tecniche di simulazione Monte Carlo, un metodo statistico che esplora numerose configurazioni possibili, combinate al deep reinforcement learning, in questo caso specifico per capire quale orientamento della molecola garantisca il legame di maggiore affinità con il recettore. Questo approccio consente di testare rapidamente migliaia di possibilità, individuando quelle con la maggiore probabilità di successo.
L'obiettivo di questa linea di ricerca è stato individuare strutture chimiche capaci di modulare selettivamente il recettore serotoninergico 5-HT2A, ovvero influenzarne l'attività senza interferire con altri recettori. Questo aspetto è cruciale per gli interventi di precisione, per evitare effetti collaterali indesiderati e sviluppare farmaci più sicuri ed efficaci. Dato che il recettore 5-HT2A è fortemente implicato nei meccanismi neurochimici della depressione, come accennato queste nuove molecole potrebbero rappresentare un'alternativa terapeutica per i pazienti che non traggono beneficio dai trattamenti attualmente disponibili. Con numerosi composti studiati attraverso test computazionali, Mindstate Design Labs ha ridotto significativamente i costi di sviluppo rispetto ai metodi tradizionali, analogamente a quanto accaduto negli altri esempi fin qui presentati. Questa società statunitense sta inoltre lavorando a varianti molecolari di psichedelici classici, un tema di grande interesse oggi alla base di una nuova ondata di ricerche, che talvolta si basano su modelli generativi per prevedere gli effetti cognitivi e psicotropi delle nuove strutture chimiche. In questo caso, la startup ha utilizzato anche metodologie particolarmente originali di analisi della "storia naturale" delle esperienze soggettive, in particolare con sistemi di analisi testuale applicati a 70.000 "trip report", ovvero le narrazioni delle esperienze degli utilizzatori di queste sostanze presenti su database come Erowid e Reddit, con l'obiettivo di correlare queste descrizioni con le strutture molecolari conosciute. In senso generale, società come Compass Pathways, MindMed, Terapsil, Atai Life Sciences, Beckley Psytech e Cybin Corp stanno portando diversi composti sia noti sia di nuova sintesi verso i trial clinici per il trattamento di patologie come il disturbo da stress post traumatico e la depressione resistente ai trattamenti. Alcune di queste, come la già citata Mindstate Design Labs e altre startup come Psilera, April19 Discovery ed Enveric Biosciences, stanno utilizzando efficacemente la leva dell'intelligenza artificiale.
In conclusione, il futuro della ricerca scientifica, sia in senso generale sia nell'ambito neuropsicofarmacologico, appare sempre più arricchito dall'utilizzo dei sistemi cognitivi automatizzati, che, oltre ad essere più rapidi, stanno aprendo delle modalità originali per connettere diverse metodologie di ricerca e ambiti disciplinari. Questi progressi non solo aumentano la nostra comprensione del mondo, ma offrono anche nuove opportunità per migliorare la salute e il benessere umano con trattamenti più efficaci e personalizzati.