Uso de inteligência artificial na triagem de compostos bioativos em pesquisas farmacêuticas

Autor(res)

Yslla Milla De Souza Alencar
Yasmin Jacinto De Amorim
Guilherme Sampaio Arruda

Categoria do Trabalho

Trabalho Acadêmico

Instituição

FACULDADE ANHANGUERA DE IMPERATRIZ

Introdução

O desenvolvimento de novos fármacos é um processo longo e custoso, comumente chegando aos 15 anos de pesquisas. Para maior eficiência, a Inteligência Artificial (IA) tem sido adotada. Técnicas de machine learning e deep learning otimizam a identificação de padrões em grandes volumes de dados, preveem ações biológicas, modelam proteínas e geram novos compostos. O docking molecular, que mede a ligação entre moléculas e alvos, é essencial na triagem virtual. A união de IA e docking melhora a seleção de moléculas e acelera a criação de novos fármacos (SANTOS et al., 2025).
Métodos como HTS e VS são cruciais na escolha de moléculas promissoras. Usados paralelamente ou em sequência, garantem maior precisão e reduzem falhas na pesquisa (DIMASI et al., 2016; GUPTA et al., 2021; GENTILE et al., 2022; NETO et al., 2024). Esta pesquisa analisa o uso da IA aliada à bioinformática na medicina moderna, com foco na triagem de moléculas para fármacos, diagnósticos e medicina de precisão.

Objetivo

Esta pesquisa analisa o uso de inteligência artificial e bioinformática na medicina atual, com foco na triagem de moléculas promissoras para acelerar o desenvolvimento de fármacos. A aplicação de algoritmos permite prever padrões biológicos, contribuindo para diagnósticos mais precisos e tratamentos personalizados, seguros e eficazes.

Material e Métodos

Para realizar a revisão bibliográfica, foram utilizadas as ferramentas de busca “Google Acadêmico”. A pesquisa foi focada em resultados atuais, de modo que foi aplicado um filtro temporal para o período de 2020 até 2025 (os últimos 5 anos). Utilizou-se a combinação dos seguintes termos-chave: "Triagem de bioativos", “Pesquisa de bioativos”, a sigla "IA" (Inteligência Artificial) e a palavra "Medicamentos". Após a obtenção dos resultados, foi realizada uma triagem rápida para selecionar apenas os artigos mais relevantes para a discussão.

Resultados e Discussão

Como resultado, investigações recentes revelam o uso de aprendizado de máquina e redes neurais aliados ao

acoplamento molecular (docking), métodos cruciais na descoberta de fármacos. O AtomNet, uma CNN, por exemplo, alcançou 57,8% na estimativa de ação. O RF-Score-Vs, um novo mecanismo de score, atingiu 55,6% de êxito na identificação de moléculas com alto potencial farmacológico. (Santos et al, 2025).

Bicaletto aponta que a IA antecipa o efeito sinérgico ou antagônico entre moléculas. Na bioinformática, a união entre polimorfismo de nucleotídeo único (SNP) e machine learning é vital para decifrar a base genética de doenças, prever a resposta a medicamentos e acelerar o desenvolvimento de tratamentos inovadores.

As técnicas de ML e DL possibilitaram a conversão digital, a análise e o reconhecimento de padrões em grandes volumes de dados. Isso impulsionou biossensores e consolidou o tratamento individualizado na medicina de precisão. Tais avanços mitigam tarefas repetitivas e otimizam o trabalho dos profissionais, permitindo-lhes dedicar maior tempo e atenção aos pacientes. (Bicalletto, 2023).

Conclusão

A inteligência artificial aliada à bioinformática impulsiona o desenvolvimento de fármacos e a medicina diagnóstica e personalizada, com uso de CNN, GNN, docagem molecular e biossensores. Apesar dos avanços, persistem resultados falsos, revelando limitações. Assim, é necessária regulamentação e validação dos achados, seja na triagem de moléculas, na medicina diagnóstica ou na análise da eficácia de medicamentos.

Referências

BICALETTO, Gabriel Luchini. Desafios e Perspectivas do uso da Bioinformática e Inteligência Artificial na descoberta de novos fármacos. 2023. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

FERREIRA, R. S.; OLIVA, G.; ANDRICOPULO, A. D. Integração das técnicas de triagem virtual e triagem biológica automatizada em alta escala: oportunidades e desafios em P&D de fármacos. Química Nova, São Paulo, v. 34, n. 10, p. 1770-1778, 2011. Disponível em: https://www.scielo.br/j/qn/a/wCtk9GFDMsrNCpScP8kn8Jr/?format=html&lang=pt. Acesso em: 29 set. 2025.

SANTOS, P. G. et al. INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL E BIOINFORMÁTICA APLICADA À PESQUISA CIENTÍFICA: UMA REVISÃO SOBRE A DESCOBERTA DE NOVOS FÁRMACOS. In: ALMEIDA, F. M. de (org.). Fronteiras da tecnologia: Explorando o futuro da Ciência e da Inovação. Ponta Grossa: Atena Editora, 2025, p. 187-194. Disponível em: https://educapes.capes.gov.br/bitstream/capes/1081099/1/inteligencia-artificial-e-.pdf. Acesso em: 29 set. 2025.