



**CAFA-S**

**CONFERÊNCIA ACADÊMICA E  
FARMACÊUTICA ANHANGUERA E SAÚDE.**

Health Innovation: Transformando  
Vidas, Conectando Futuros

**20 a 24 de OUTUBRO**  
Na Faculdade Anhanguera

# 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



CAFA-S

CONFERÊNCIA ACADÊMICA E  
FARMACÊUTICA ANHANGUERA EM SAÚDE

Health Innovation: Transformando  
Vidas, Conectando Futuros

20 a 24 de Outubro  
Na Faculdade Anhanguera

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. (Bicaletto, 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/jqn/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.