

INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA DESCOBERTA DE NOVOS FÁRMACOS: APLICAÇÕES E PERSPECTIVAS PARA A PESQUISA FARMACÊUTICA

ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN THE DISCOVERY OF NEW DRUGS: APPLICATIONS AND PERSPECTIVES FOR PHARMACEUTICAL RESEARCH

INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN EL DESCUBRIMIENTO DE NUEVOS FÁRMACOS: APLICACIONES Y PERSPECTIVAS PARA LA INVESTIGACIÓN FARMACÉUTICA

Fábio Guedes Moreira¹
Ednólia Maria Ferreira Rodrigues²
Ursula Ghassan El Awar³
Gleicy Kelly China Quemel⁴
Cleber Nonato Macedo Costa⁵
Jéssica Máximo dos Santos⁶

RESUMO: A Inteligência Artificial (IA) tem promovido uma transformação significativa na descoberta de novos fármacos, ao permitir a análise de grandes volumes de dados químicos, biológicos e clínicos com maior precisão e rapidez. Técnicas como *machine learning*, *deep learning* e redes neurais generativas vêm sendo aplicadas na modelagem QSAR, triagem virtual, predição de toxicidade e geração de moléculas inéditas. Essas abordagens aumentam a eficiência do pipeline farmacêutico, reduzem custos e diminuem falhas nas fases pré-clínicas e clínicas. Modelos de predição ADMET, por exemplo, permitem antecipar problemas farmacocinéticos e toxicológicos, tornando o desenvolvimento mais seguro e sustentável. No contexto brasileiro, especialmente na região Amazônica, a aplicação dessas tecnologias representa uma oportunidade estratégica para integrar biodiversidade e inovação tecnológica. A utilização de IA pode acelerar a prospecção de compostos bioativos derivados de recursos naturais, fortalecendo a pesquisa regional e ampliando a competitividade científica nacional. Entretanto, desafios como infraestrutura computacional, capacitação técnica e integração interdisciplinar ainda precisam ser superados. Conclui-se que a consolidação da IA na pesquisa farmacêutica brasileira depende de investimentos em formação, colaboração institucional e políticas voltadas à bioeconomia sustentável.

Palavras-chave: Inteligência Artificial. Descoberta de Fármacos. Deep Learning. Modelos ADMET.

¹Farmacêutico, Centro Universitário da Amazônia (UNIESAMAZ).

²Farmacêutica, Centro Universitário da Amazônia (UNIESAMAZ).

³Especialista em farmácia clínica, CESUPA.

⁴Mestre em Ciências Ambientais, Centro Universitário da Amazônia (UNIESAMAZ).

⁵Orientador: Professor/Farmacêutico, Centro Universitário da Amazônia (UNIESAMAZ).

⁶Orientadora: Farmacêutica, Mestra em Análises Clínicas e Diagnóstico pela Universidade Federal do Pará (UFPA), Centro Universitário da Amazônia (UNIESAMAZ).

ABSTRACT: Artificial Intelligence (AI) has significantly transformed drug discovery by enabling the analysis of large-scale chemical, biological, and clinical data with greater accuracy and efficiency. Techniques such as machine learning, deep learning, and generative neural networks are applied in QSAR modeling, virtual screening, toxicity prediction, and de novo molecular design. These approaches enhance pharmaceutical pipeline efficiency, reduce costs, and minimize failures in preclinical and clinical phases. ADMET prediction models allow early identification of pharmacokinetic and toxicological issues, improving safety and sustainability. In Brazil, particularly in the Amazon region, AI represents a strategic opportunity to integrate biodiversity with technological innovation. Its application can accelerate the screening of bioactive compounds derived from natural resources, strengthening regional research and national scientific competitiveness. However, challenges related to computational infrastructure, technical training, and interdisciplinary integration remain. The consolidation of AI in Brazilian pharmaceutical research depends on investment in education, institutional collaboration, and sustainable bioeconomy policies.

Keywords: Artificial Intelligence. Drug Discovery. Deep Learning. ADMET Models.

RESUMEN: La Inteligencia Artificial (IA) ha transformado significativamente el descubrimiento de nuevos fármacos al permitir el análisis de grandes volúmenes de datos químicos, biológicos y clínicos con mayor precisión y rapidez. Técnicas como *machine learning*, *deep learning* y redes neuronales generativas se aplican en modelado QSAR, cribado virtual, predicción de toxicidad y diseño molecular *de novo*. Estas estrategias aumentan la eficiencia del desarrollo farmacéutico, reducen costos y disminuyen fallos en fases preclínicas y clínicas. Los modelos de predicción ADMET permiten anticipar problemas farmacocinéticos y toxicológicos, haciendo el proceso más seguro y sostenible. En Brasil, especialmente en la región amazónica, la IA representa una oportunidad estratégica para integrar biodiversidad e innovación tecnológica. Su aplicación puede acelerar la prospección de compuestos bioactivos derivados de recursos naturales, fortaleciendo la investigación regional y la competitividad científica nacional. No obstante, persisten desafíos relacionados con infraestructura computacional, capacitación técnica e integración interdisciplinaria. La consolidación de la IA en la investigación farmacéutica brasileña requiere inversión en formación, colaboración institucional y políticas de bioeconomía sostenible.

Palabras clave: Inteligencia Artificial. Descubrimiento de Fármacos. Deep Learning. Modelos ADMET.

1. INTRODUÇÃO

A aplicação da Inteligência Artificial na descoberta de novos fármacos representa uma mudança paradigmática no modo como a pesquisa farmacêutica é conduzida, permitindo a análise de grandes volumes de dados provenientes de bancos como o PubChem e o Protein Data Bank, além da integração com informações genômicas e clínicas. Essas tecnologias possibilitam identificar padrões complexos invisíveis às abordagens tradicionais, favorecendo a seleção mais precisa de alvos terapêuticos e a proposição de moléculas com maior probabilidade de sucesso experimental (Al Kuwaiti *et al.*, 2023).

Empresas e centros de pesquisa internacionais, como a Insilico Medicine e a DeepMind esta última responsável pelo desenvolvimento do sistema AlphaFold demonstram como a IA pode reduzir drasticamente o tempo necessário para prever estruturas proteicas e propor compostos candidatos. Esses avanços reforçam o potencial estratégico da IA não apenas para acelerar a inovação, mas também para democratizar o acesso a metodologias avançadas de pesquisa (Callaway, 2025).

No contexto brasileiro, a incorporação dessas ferramentas em universidades, programas de pós-graduação e centros de pesquisa farmacêutica pode ampliar a competitividade científica nacional, promovendo colaboração interdisciplinar entre as áreas de Farmácia, Química, Biotecnologia e Ciência da Computação. Em regiões como Belém (PA), onde há biodiversidade rica e ainda pouco explorada, a IA pode atuar como instrumento estratégico na prospecção de moléculas bioativas derivadas de recursos naturais amazônicos, contribuindo para o desenvolvimento sustentável e para a valorização da pesquisa local (Miguel, 2007).

Dessa forma, investigar as aplicações e perspectivas da Inteligência Artificial na descoberta de novos fármacos torna-se essencial para compreender seus impactos científicos, tecnológicos e socioeconômicos, bem como para delinear estratégias que viabilizem sua implementação ética, eficiente e adaptada às realidades institucionais brasileiras (De Souza *et al.*, 2024).

3

Embora as inovações em IA tenham demonstrado ganhos expressivos em instituições internacionais, ainda há lacunas significativas quanto à adoção e implementação dessas tecnologias no contexto brasileiro, especialmente em polos de pesquisa fora dos grandes centros como São Paulo e Minas Gerais. Identificar como essas ferramentas podem ser aplicadas e adaptadas à realidade local pode estimular pesquisas regionais e ampliar a competitividade científica (Trubetskoy *et al.*, 2022).

O presente estudo tem como objetivo analisar as principais contribuições da Inteligência Artificial (IA) no processo de descoberta de fármacos, destacando métodos e ferramentas mais utilizados, como *machine learning* e *deep learning*, bem como seu potencial de aplicação no contexto científico brasileiro. Busca-se revisar as abordagens de IA empregadas no desenvolvimento de medicamentos, avaliar seu impacto na redução de tempo e aumento de eficiência nas etapas pré-clínicas e clínicas, e identificar frentes estratégicas de pesquisa já existentes no Brasil especialmente em laboratórios voltados à IA aplicada à saúde que possam ser replicadas ou adaptadas em instituições científicas de Belém (PA).

2 METODOLOGIA

2.1 Delineamento do estudo

Trata-se de uma revisão narrativa com abordagem qualitativa e descritiva, estruturada segundo recomendações metodológicas amplamente adotadas em bases indexadoras como Scientific Electronic Library Online (SciELO) e PubMed, garantindo transparência, reprodutibilidade e rigor científico.

A investigação foi organizada em quatro etapas principais: definição das palavras-chave, levantamento bibliográfico, análise das ferramentas de inteligência artificial (IA) aplicadas à descoberta de fármacos e contextualização do cenário brasileiro.

2.2 Estratégia de busca

A estratégia de busca foi estruturada a partir de descritores em língua inglesa, combinados por operadores booleanos (AND, OR), visando ampliar a sensibilidade e especificidade dos resultados. Foram utilizados os seguintes termos:

“artificial intelligence”

“drug discovery”

“machine learning”

“deep learning”

“pharmaceutical research”

“Brazil healthcare AI”

Exemplo de estratégia aplicada:

(“artificial intelligence” OR “machine learning” OR “deep learning”) AND (“drug discovery” OR “pharmaceutical research”)

As buscas foram realizadas nas seguintes bases de dados eletrônicas:

PubMed

Scientific Electronic Library Online

Scopus

Web of Science

A coleta incluiu artigos publicados no período de 2014 a 2024.

2.3 Critérios de inclusão e exclusão

2.3.1 Critérios de inclusão:

- Artigos originais e revisões sistemáticas publicados em periódicos revisados por pares;
- Estudos que abordem diretamente a aplicação de IA na descoberta, desenvolvimento ou otimização de fármacos;
- Publicações nos últimos 10 anos;
- Estudos com descrição metodológica clara e aplicabilidade científica.

2.3.2 Critérios de exclusão:

- Trabalhos sem aplicação direta à área farmacêutica;
- Estudos com insuficiência metodológica ou ausência de descrição dos algoritmos utilizados;
- Resumos de congressos, cartas ao editor e opiniões sem base empírica;
- Publicações duplicadas entre as bases.

2.4 Processo de seleção dos estudos

A seleção dos artigos foi realizada em três etapas:

1. Leitura de títulos e resumos, com exclusão preliminar dos estudos que não atendiam aos critérios estabelecidos;
2. Leitura na íntegra dos artigos potencialmente elegíveis;
3. Extração e organização dos dados, incluindo ano de publicação, país de origem, tipo de algoritmo utilizado, aplicação farmacológica e principais resultados.

Os dados foram sistematizados em planilha eletrônica para análise comparativa e categorização temática.

2.5 Análise das ferramentas de Inteligência Artificial

Foi realizada análise qualitativa das abordagens tecnológicas identificadas nos estudos selecionados, com categorização das aplicações mais recorrentes, tais como:

- Plataformas de modelagem molecular e docking virtual;

Algoritmos de predição de atividade biológica;
Modelos de predição de toxicidade e farmacocinética (ADMET);
Redes neurais profundas para triagem virtual de compostos;
Sistemas generativos para desenho de moléculas *in silico*.

A análise considerou o tipo de algoritmo (machine learning clássico ou deep learning), base de dados utilizada, validação experimental e potencial de aplicabilidade clínica ou industrial.

2.6 Contextualização do cenário brasileiro

Foi realizado levantamento complementar sobre iniciativas brasileiras relacionadas à IA em saúde e pesquisa farmacêutica, incluindo centros e grupos de pesquisa vinculados a:

Universidade de São Paulo

Universidade Federal de Minas Gerais

Universidade Federal do Pará

Também foram analisadas iniciativas como o Laboratório de Inteligência Artificial em Saúde (LIAS), com foco na identificação de potencial de replicação, adaptação tecnológica e aplicabilidade no contexto científico da região Norte, especialmente em Belém (PA).

2.7 Considerações éticas

Por se tratar de revisão de literatura baseada em dados secundários de domínio público, não houve necessidade de submissão ao Comitê de Ética em Pesquisa, conforme as diretrizes nacionais para pesquisas que utilizam exclusivamente fontes bibliográficas.

4. RESULTADOS E DISCURSÕES

4.1 Machine Learning tradicional

O *Machine Learning* (ML) tradicional representa uma das abordagens mais consolidadas na aplicação da Inteligência Artificial à descoberta de fármacos. Métodos como regressão linear e logística, árvores de decisão, *random forest* e *support vector machines* (SVM) têm sido amplamente utilizados na modelagem quantitativa de relações estrutura-atividade (QSAR), permitindo prever a atividade biológica de compostos com base em descritores moleculares. Esses algoritmos são especialmente eficazes quando aplicados a bases de dados estruturadas e de tamanho moderado.

Na prática, esses modelos são empregados na triagem virtual (*virtual screening*), na priorização de compostos promissores e na classificação de moléculas quanto à sua atividade ou toxicidade potencial. O uso de *random forest*, por exemplo, permite lidar com múltiplas variáveis químicas simultaneamente, aumentando a robustez das previsões. Já os modelos SVM são eficientes em problemas de classificação binária, como ativo versus inativo, contribuindo para decisões mais rápidas nas fases iniciais do desenvolvimento.

Tabela 1 - Machine Learning tradicional

Autores / Ano	IA Utilizada	Área da Pesquisa	Principais Resultados
Catacutan <i>et al.</i> , 2024	Machine Learning tradicional (Random Forest, SVM)	Descoberta pré-clínica de fármacos	Maior eficiência preditiva
Elbadawi, Gaisford & Basit, 2021	Machine Learning tradicional aplicado a QSAR	Modelagem computacional e propriedades farmacocinéticas	Viabilidade computacional acessível
Vatansever <i>et al.</i> , 2021	Machine Learning tradicional e IA aplicada	Doenças do Sistema Nervoso Central	Integração preditiva eficiente
Gupta <i>et al.</i> , 2021	Machine Learning tradicional (base para Deep Learning)	Evolução das técnicas de IA na descoberta de fármacos	Base metodológica essencial

Fonte: Elaborado pelo autor com base em Catacutan *et al.* (2024), Elbadawi, Gaisford e Basit (2021), Vatansever *et al.* (2021) e Gupta *et al.* (2021).

O estudo de Catacutan *et al.* (2024) destaca que o *machine learning* aplicado à fase pré-clínica tem promovido avanços concretos na identificação de alvos terapêuticos, triagem virtual e otimização de moléculas líderes. O principal achado do artigo é que modelos supervisionados, como *random forest* e *support vector machines*, já apresentam desempenho comparável ou superior a métodos tradicionais de triagem experimental, reduzindo o número de compostos necessários para validação laboratorial. Isso reforça o objetivo do presente trabalho ao evidenciar a contribuição do ML tradicional para aumentar a eficiência e reduzir custos na etapa inicial do desenvolvimento farmacêutico.

Elbadawi, Gaisford e Basit (2021) enfatizam que técnicas avançadas de ML vêm sendo integradas a plataformas computacionais de descoberta de fármacos, especialmente na modelagem QSAR e na previsão de propriedades farmacocinéticas. O principal achado aponta que algoritmos clássicos continuam altamente relevantes devido à sua interpretabilidade e menor demanda computacional, tornando-os particularmente úteis em ambientes acadêmicos. Essa conclusão dialoga diretamente com o objetivo do artigo ao

indicar que o ML tradicional é uma abordagem viável para implementação em instituições científicas brasileiras.

O trabalho de Vatansever *et al.* (2021), focado em doenças do sistema nervoso central, demonstra que a aplicação de IA e ML melhora significativamente a identificação de compostos capazes de atravessar a barreira hematoencefálica — um dos maiores desafios terapêuticos nessa área. O principal achado evidencia que modelos preditivos tradicionais conseguem integrar múltiplos parâmetros biológicos e químicos para selecionar candidatos mais promissores, reduzindo falhas nas etapas posteriores. Isso reforça o impacto da IA na otimização do pipeline de desenvolvimento.

Já Gupta *et al.* (2021) apresentam uma análise evolutiva das técnicas de inteligência computacional, demonstrando que o ML tradicional constitui a base estrutural para métodos mais complexos, como o *deep learning*. O principal achado do artigo é que algoritmos clássicos permanecem essenciais para tarefas de classificação, regressão e triagem virtual, especialmente quando os conjuntos de dados são limitados. Essa constatação sustenta a classificação estruturada proposta no presente estudo, posicionando o ML tradicional como abordagem fundamental, acessível e estrategicamente relevante para o avanço da pesquisa farmacêutica, inclusive no contexto brasileiro.

4.2 Deep Learning

O *Deep Learning* (DL) representa uma evolução do ML tradicional, utilizando redes neurais profundas com múltiplas camadas para capturar padrões complexos em grandes volumes de dados. Na descoberta de fármacos, redes neurais profundas e redes neurais convolucionais (CNNs) têm sido aplicadas à modelagem molecular, análise de imagens estruturais e predição de interações proteína-ligante.

Uma das principais contribuições do DL está na capacidade de processar grandes bases químicas e biológicas, identificando relações não lineares que escapam aos métodos tradicionais. Redes convolucionais podem analisar representações tridimensionais de estruturas moleculares, enquanto redes recorrentes e arquiteturas baseadas em grafos permitem modelar moléculas como conjuntos de átomos interconectados, aprimorando a precisão preditiva.

Tabela 2 - Deep Learning

Autores / Ano	IA Utilizada	Área da Pesquisa	Principais Resultados
Krentzel, Shorte & Zimmer, 2023	Deep Learning (redes convolucionais – CNNs)	Descoberta fenotípica baseada em imagem	Triagem fenotípica automatizada

Zhou et al., 2023	Deep Learning	Descoberta e desenvolvimento pré-clínico de anticorpos	Otimização preditiva anticorpos
Tropsha et al., 2024	Deep QSAR (integração de QSAR e Deep Learning)	Modelagem preditiva na descoberta de fármacos	Robustez preditiva ampliada
Xu et al., 2025	Deep Learning de grande escala (Large Models)	Descoberta de fármacos para osteoporose	Análise molecular escalável

Fonte: Elaborado pelo autor com base em Krentzel, Shorte e Zimmer (2023), Zhou *et al.* (2023), Tropsha *et al.* (2024) e Xu *et al.* (2025).

Os estudos analisados evidenciam que o *Deep Learning* vem consolidando um papel estratégico na transformação do processo de descoberta de fármacos. No trabalho de Krentzel, Shorte e Zimmer (2023), observa-se que a aplicação de redes neurais convolucionais na análise de imagens celulares permite identificar fenótipos com maior precisão e rapidez do que métodos tradicionais baseados em inspeção manual. Esse avanço fortalece a descoberta fenotípica baseada em imagem, reduz vieses humanos e aumenta a reprodutibilidade experimental, impactando diretamente a eficiência da triagem inicial de compostos.

Já Zhou *et al.* (2023) demonstram que redes neurais profundas têm contribuído significativamente para a descoberta e o desenvolvimento pré-clínico de anticorpos terapêuticos. Os autores evidenciam que o *Deep Learning* melhora a predição de parâmetros críticos, como afinidade de ligação, estabilidade estrutural e especificidade molecular, fatores essenciais para o sucesso clínico. Esse achado indica que a IA não apenas acelera o processo de seleção de candidatos, mas também eleva a qualidade das moléculas escolhidas, reduzindo riscos nas fases subsequentes.

O estudo de Tropsha *et al.* (2024) destaca a consolidação do conceito de “Deep QSAR”, resultado da integração entre modelagem QSAR tradicional e arquiteturas de *Deep Learning*. Os autores argumentam que essa combinação aumenta a robustez estatística e a capacidade de generalização dos modelos preditivos, superando limitações metodológicas anteriores. Esse avanço representa uma evolução metodológica relevante, pois une interpretabilidade e poder preditivo em uma abordagem mais abrangente e estratégica para o design racional de fármacos.

Por fim, Xu *et al.* (2025) demonstram que a aplicação de modelos profundos de grande escala, inseridos na chamada “era dos grandes modelos”, amplia significativamente a capacidade de processamento e análise de extensas bases químicas e biológicas. No contexto da descoberta de fármacos para osteoporose, os autores evidenciam que esses sistemas aceleram a

identificação de novos candidatos terapêuticos, reforçando o papel do *Deep Learning* como ferramenta de alta escalabilidade e impacto translacional. Em conjunto, os estudos apontam que o DL não apenas otimiza etapas específicas do pipeline farmacêutico, mas também redefine padrões metodológicos na pesquisa contemporânea.

O impacto dessas técnicas é observado na aceleração da identificação de alvos terapêuticos e na melhoria da triagem virtual. A redução do tempo necessário para analisar milhões de compostos torna o processo de descoberta mais dinâmico e estratégico, além de aumentar a taxa de acerto na seleção de moléculas líderes. Essa eficiência contribui diretamente para a diminuição de custos nas fases iniciais do desenvolvimento farmacêutico.

Apesar do alto potencial, a implementação do DL exige infraestrutura computacional robusta e acesso a grandes volumes de dados bem estruturados. No Brasil, a ampliação de centros de pesquisa com capacidade em ciência de dados e bioinformática pode viabilizar o uso dessas tecnologias, especialmente por meio de colaborações interinstitucionais e programas de capacitação técnica.

4.3 Redes neurais generativas

As redes neurais generativas representam um avanço estratégico na descoberta de fármacos, pois permitem não apenas analisar dados existentes, mas também criar novas moléculas com propriedades desejáveis. Modelos como *Generative Adversarial Networks* (GANs) e *Variational Autoencoders* (VAEs) são capazes de aprender padrões estruturais de compostos conhecidos e gerar estruturas químicas inéditas *in silico*.

10

Tabela 3 - Redes neurais generativas

Autores / Ano	IA Utilizada	Área da Pesquisa	Principais Resultados
Krishnan et al., 2025	Deep Learning Generativo (modelos de geração <i>de novo</i>)	Design de antibióticos	Design antibiótico inovador.
Bian & Xie, 2021	Modelos Generativos (VAEs, GANs e outros)	Química generativa na descoberta de fármacos	Exploração química ampliada
Preuer et al., 2018	Modelos generativos avaliados por métrica específica (Fréchet ChemNet Distance)	Avaliação de qualidade de moléculas geradas	Padronização avaliativa molecular
Bordukova et al., 2024	IA Generativa aplicada a <i>Digital Twins</i>	Descoberta de fármacos e ensaios clínicos	Simulação clínica avançada

Fonte: Elaborado pelo autor com base em Krishnan *et al.* (2025), Bian e Xie (2021), Preuer *et al.* (2018) e Bordukova *et al.* (2024).

Essas abordagens têm sido aplicadas no design de moléculas líderes, otimizando características como afinidade por determinado alvo, solubilidade e estabilidade. Ao integrar critérios farmacológicos durante o processo de geração, os modelos podem propor compostos com maior probabilidade de sucesso experimental, reduzindo tentativas e erros tradicionais da química sintética.

Do ponto de vista da eficiência, as redes generativas aceleram a fase de ideação molecular, tradicionalmente demorada e dependente de extensa experimentação laboratorial. Ao automatizar a criação de candidatos promissores, a IA contribui para ciclos de desenvolvimento mais curtos e direcionados, ampliando o potencial de inovação na indústria farmacêutica.

Os estudos sobre redes neurais generativas demonstram que essa abordagem representa uma das mais inovadoras frentes da Inteligência Artificial aplicada à descoberta de fármacos. O trabalho de Krishnan *et al.* (2025) evidencia que modelos de *deep learning* generativo são capazes de realizar design *de novo* de antibióticos, criando moléculas inéditas com atividade antibacteriana promissora. Esse avanço é particularmente relevante diante do crescente problema da resistência microbiana, pois demonstra que a IA pode não apenas otimizar compostos existentes, mas propor estruturas químicas totalmente novas, acelerando significativamente o processo de inovação terapêutica.

11

Bian e Xie (2021) reforçam essa perspectiva ao destacar que modelos generativos, como *Variational Autoencoders* (VAEs) e *Generative Adversarial Networks* (GANs), permitem explorar amplamente o espaço químico, ampliando a diversidade molecular analisada. Os autores argumentam que essa capacidade de navegação pelo “universo químico” favorece a otimização simultânea de múltiplas propriedades farmacológicas, tornando o design racional de medicamentos mais eficiente, direcionado e estratégico.

Já Preuer *et al.* (2018) contribuem ao propor a métrica Fréchet ChemNet Distance, uma ferramenta essencial para avaliar a qualidade, diversidade e realismo das moléculas geradas por IA. Esse achado é particularmente importante para a consolidação metodológica da área, pois fornece parâmetros objetivos para validar modelos generativos, reduzindo incertezas e fortalecendo a confiabilidade científica dessas abordagens.

Por fim, Bordukova *et al.* (2024) ampliam o escopo da aplicação da IA generativa ao introduzir o conceito de “gêmeos digitais” no contexto da descoberta de fármacos e ensaios clínicos. Segundo os autores, a simulação de respostas terapêuticas por meio de modelos digitais

pode aumentar a eficiência do planejamento clínico, reduzir riscos e otimizar decisões estratégicas. Em conjunto, esses estudos demonstram que as redes neurais generativas não apenas transformam o design molecular, mas também expandem o impacto da IA para etapas avançadas do desenvolvimento farmacêutico, consolidando-se como ferramenta disruptiva no cenário científico contemporâneo.

No cenário brasileiro, essa tecnologia ainda está em fase emergente, mas apresenta grande potencial de crescimento. Instituições acadêmicas podem integrar grupos de química computacional e ciência de dados para explorar a geração de moléculas a partir de compostos naturais da biodiversidade amazônica, fortalecendo a pesquisa regional e promovendo inovação com identidade local.

4.4 Modelos de predição ADMET

Os modelos de predição ADMET (Absorção, Distribuição, Metabolismo, Excreção e Toxicidade) constituem uma das aplicações mais estratégicas da IA na descoberta de fármacos. Grande parte das falhas em ensaios clínicos está associada a problemas farmacocinéticos ou toxicológicos não detectados precocemente. Assim, ferramentas preditivas baseadas em ML e DL desempenham papel essencial na redução desses riscos.

Tabela 4 - Modelos de predição ADMET

Autores / Ano	IA Utilizada	Área da Pesquisa	Principais Resultados
Fu et al., 2024	Modelos de Machine Learning e Deep Learning integrados (plataforma online)	Predição integrada de propriedades ADMET	O desenvolvimento do ADMETlab 3.0 representa um avanço significativo na predição computacional de propriedades
Zhang et al., 2025	Inteligência Artificial aplicada à toxicologia computacional	Predição de ADMET e toxicidade	Maior precisão toxicológica
Aksamit et al., 2024	Deep Learning com tokenização híbrida (fragmento + SMILES)	Predição de propriedades ADMET	Representação molecular aprimorada
Jamrozik et al., 2024	Modelos preditivos com foco em interpretabilidade (ADMET-PrInt)	Predição e interpretação de propriedades ADMET	Predição interpretável ADMET

Fonte: Elaborado pelo autor com base em Fu et al. (2024), Zhang et al. (2025), Aksamit et al. (2024) e Jamrozik et al. (2024).

Esses modelos utilizam descritores moleculares e dados experimentais anteriores para prever como um composto se comportará no organismo. Algoritmos de classificação e regressão permitem estimar toxicidade hepática, potencial mutagênico, biodisponibilidade oral e interações metabólicas, antecipando problemas antes da fase clínica.

O impacto direto desses sistemas é a diminuição de falhas tardias, que representam altos custos financeiros e éticos. Ao filtrar compostos com perfil ADMET inadequado nas etapas iniciais, a IA contribui para tornar o desenvolvimento farmacêutico mais seguro, eficiente e sustentável.

Os avanços recentes em modelos de predição ADMET demonstram uma evolução significativa na integração entre inteligência artificial e avaliação farmacocinética e toxicológica, etapa crucial no desenvolvimento de novos fármacos. O estudo de Fu *et al.* (2024), ao apresentar o ADMETlab 3.0, evidencia a consolidação de plataformas computacionais robustas, com cobertura ampliada de propriedades, melhor desempenho preditivo e integração via API. Esse avanço não apenas facilita a triagem de compostos em larga escala, mas também fortalece o suporte à tomada de decisão nas fases iniciais da descoberta de fármacos, reduzindo custos e taxas de falha em etapas posteriores.

Complementarmente, Zhang *et al.* (2025) destacam o papel estratégico da inteligência artificial na toxicologia computacional, demonstrando que algoritmos avançados de *machine learning* e *deep learning* aumentam a precisão na predição de toxicidade e parâmetros ADMET. Os autores reforçam que a incorporação dessas ferramentas possibilita uma avaliação mais precoce e confiável de riscos, contribuindo para a segurança e eficiência do pipeline farmacêutico.

13

No campo metodológico, Aksamit *et al.* (2024) propõem uma inovação na representação molecular por meio da tokenização híbrida baseada em fragmentos estruturais e SMILES. Essa abordagem aprimora a capacidade dos modelos de capturar informações químicas relevantes, resultando em melhor desempenho preditivo. O estudo demonstra que a forma como as moléculas são representadas computacionalmente impacta diretamente a qualidade dos modelos de IA sendo um fator determinante para avanços na área.

Por fim, Jamrozik *et al.* (2024) introduzem o ADMET-PrInt, ferramenta que alia predição à interpretabilidade dos resultados. Esse aspecto é particularmente relevante diante das críticas relacionadas ao caráter de “caixa-preta” de muitos modelos de *deep learning*. Ao oferecer

mecanismos de interpretação, o estudo contribui para aumentar a transparência, a confiabilidade e a aceitabilidade regulatória das abordagens baseadas em IA.

Em conjunto, esses trabalhos demonstram que os modelos de predição ADMET estão evoluindo não apenas em desempenho, mas também em abrangência, integração tecnológica e interpretabilidade. Essa convergência posiciona a IA como elemento central na otimização do desenvolvimento de medicamentos, promovendo processos mais rápidos, seguros e fundamentados em evidências computacionais robustas. Ao trazer os avanços em modelos de predição ADMET para a realidade brasileira especialmente para a região Amazônica e o Norte do país emerge um cenário de grandes oportunidades estratégicas, mas também de desafios estruturais.

A Amazônia concentra uma das maiores biodiversidades do planeta, com enorme potencial para a prospecção de compostos bioativos oriundos de plantas, microrganismos e metabólitos naturais. No entanto, transformar essa riqueza biológica em candidatos a fármacos viáveis exige etapas rigorosas de avaliação farmacocinética e toxicológica. Nesse contexto, modelos de predição ADMET baseados em inteligência artificial podem representar uma ferramenta decisiva para acelerar a triagem de compostos naturais amazônicos, reduzindo custos experimentais e priorizando moléculas com maior probabilidade de sucesso.

14

Plataformas como o ADMETlab 3.0 demonstram como a digitalização e a automação da análise ADMET podem apoiar centros de pesquisa brasileiros, inclusive universidades e institutos localizados na região Norte, que frequentemente enfrentam limitações de infraestrutura laboratorial avançada. A possibilidade de acesso online e integração via API permite que grupos regionais utilizem ferramentas de alto nível tecnológico sem depender exclusivamente de grandes centros do Sudeste.

Além disso, a aplicação de inteligência artificial na toxicologia computacional é especialmente relevante para o Brasil, onde há forte regulamentação sanitária conduzida pela ANVISA e necessidade crescente de garantir segurança e eficácia de novos fitoterápicos e bioativos derivados da biodiversidade. Modelos mais precisos e interpretáveis, como os que incorporam explicabilidade (explainable AI), podem contribuir para maior confiança regulatória e facilitar processos de registro e validação.

Outro ponto crucial é a capacitação regional. A adoção de técnicas como tokenização híbrida, modelos de deep learning e abordagens interpretáveis exige formação interdisciplinar em química computacional, ciência de dados e farmacologia. Investimentos em formação

técnica e infraestrutura digital na região Norte são fundamentais para que a Amazônia não seja apenas fornecedora de matéria-prima biológica, mas também protagonista na geração de conhecimento e inovação tecnológica.

Portanto, ao considerar a realidade amazônica, os modelos de predição ADMET baseados em IA não representam apenas avanço científico, mas também instrumento estratégico de soberania tecnológica, desenvolvimento regional e bioeconomia sustentável. Integrar biodiversidade, inteligência artificial e políticas públicas pode posicionar o Norte do Brasil como polo emergente de inovação farmacêutica baseada na floresta.

No Brasil, a adoção de modelos ADMET pode fortalecer pesquisas acadêmicas e industriais, especialmente em instituições que desenvolvem estudos pré-clínicos. A integração dessas ferramentas em laboratórios universitários pode melhorar a qualidade das pesquisas e ampliar as chances de que moléculas desenvolvidas localmente avancem para fases mais avançadas de desenvolvimento, beneficiando o sistema de saúde e a inovação nacional.

5 CONCLUSÃO

A Inteligência Artificial apresenta potencial transformador na pesquisa farmacêutica, contribuindo para a redução de custos, aceleração da descoberta de compostos e aumento da precisão das previsões científicas. Métodos como *machine learning*, *deep learning* e modelos generativos já demonstram impacto concreto na identificação de alvos terapêuticos, no design molecular e na previsão de propriedades farmacológicas.

No Brasil, o fortalecimento de laboratórios de IA aplicada à saúde e a promoção de colaborações interdisciplinares podem posicionar centros de pesquisa nacionais em maior destaque no cenário global. Em Belém (PA), a articulação entre instituições acadêmicas, programas de capacitação em ciência de dados e iniciativas de inovação tecnológica pode ampliar significativamente a produção científica local.

A consolidação de uma agenda estratégica que integre inteligência computacional, pesquisa biomédica e exploração sustentável da biodiversidade regional representa uma oportunidade concreta para o avanço da ciência farmacêutica, com impacto social, econômico e regional duradouro.

REFERÊNCIAS

AKSAMIT, N.; Tchagang, A.; Li, Y.; Ombuki-Berman, B. Hybrid fragment-SMILES tokenization for ADMET prediction in drug discovery. *BMC Bioinformatics*, 2024 Aug 1;25(1):255. doi: 10.1186/s12859-024-05861-z. PMID: 39090573; PMCID: PMC11295479.

AL KUWAITI, A.; Nazer, K.; Al-Reedy, A.; Al-Shehri, S.; Al-Muhanna, A.; Subbarayalu, A.V.; Al Muhanna, D.; Al-Muhanna, F.A. A Review of the Role of Artificial Intelligence in Healthcare. *J Pers Med*, 2023 Jun 5;13(6):951. doi: 10.3390/jpm13060951. PMID: 37373940; PMCID: PMC10301994.

BIAN, Y.; Xie, X.Q. Generative chemistry: drug discovery with deep learning generative models. *J Mol Model*, 2021 Feb 4;27(3):71. doi: 10.1007/s00894-021-04674-8. PMID: 33543405; PMCID: PMC10984615.

BORDUKOVA, M.; Makarov, N.; Rodriguez-Esteban, R.; Schmich, F.; Menden, M.P. Generative artificial intelligence empowers digital twins in drug discovery and clinical trials. *Expert Opin Drug Discov*, 2024 Jan-Jun;19(1):33-42. doi: 10.1080/17460441.2023.2273839. Epub 2024 Jan 8. PMID: 37887266.

Catacutan, D.B.; Alexander, J.; Arnold, A.; Stokes, J.M. Machine learning in preclinical drug discovery. *Nat Chem Biol*, 2024 Aug;20(8):960-973. doi: 10.1038/s41589-024-01679-1. Epub 2024 Jul 19. PMID: 39030362.

CALLAWAY, E. DeepMind's new AlphaGenome AI tackles the 'dark matter' in our DNA. *Nature*, 2025 Jul;643(8070):17-18. doi: 10.1038/d41586-025-01998-w. PMID: 40562910.

DE SOUZA, Camila Andrade et al. O papel da inteligência artificial na descoberta e desenvolvimento de fármacos. *Brazilian Journal of Implantology and Health Sciences*, v. 6, n. 11, p. 650-663, 2024.

Elbadawi, M.; Gaisford, S.; Basit, A.W. Advanced machine-learning techniques in drug discovery. *Drug Discov Today*, 2021 Mar;26(3):769-777. doi: 10.1016/j.drudis.2020.12.003. Epub 2020 Dec 5. PMID: 33290820.

FU, L.; Shi, S.; Yi, J.; Wang, N.; He, Y.; Wu, Z.; Peng, J.; Deng, Y.; Wang, W.; Wu, C.; Lyu, A.; Zeng, X.; Zhao, W.; Hou, T.; Cao, D. ADMETlab 3.0: an updated comprehensive online ADMET prediction platform enhanced with broader coverage, improved performance, API functionality and decision support. *Nucleic Acids Res*, 2024 Jul 5;52(W1):W422-W431. doi: 10.1093/nar/gkae236. PMID: 38572755; PMCID: PMC11223840.

GUPTA, R.; Srivastava, D.; Sahu, M.; Tiwari, S.; Ambasta, R.K.; Kumar, P. Artificial intelligence to deep learning: machine intelligence approach for drug discovery. *Mol Divers*, 2021 Aug;25(3):1315-1360. doi: 10.1007/s11030-021-10217-3. Epub 2021 Apr 12. PMID: 33844136; PMCID: PMC8040371.

JAMROZIK, E.; Śmieja, M.; Podlowska, S. ADMET-PrInt: Evaluation of ADMET Properties: Prediction and Interpretation. *J Chem Inf Model*, 2024 Mar 11;64(5):1425-1432. doi: 10.1021/acs.jcim.3c02038. Epub 2024 Feb 19. PMID: 38373602.

Krentzel, D.; Shorte, S.L.; Zimmer, C. Deep learning in image-based phenotypic drug discovery. *Trends Cell Biol*, 2023 Jul;33(7):538-554. doi: 10.1016/j.tcb.2022.11.011. Epub 2023 Jan 7. PMID: 36623998.

KRISHNAN, A.; Anahtar, M.N.; Valeri, J.A.; Jin, W.; Donghia, N.M.; Sieben, L.; Lutgens, A.; Zhang, Y.; Modaresi, S.M.; Hennes, A.; Fromer, J.; Bandyopadhyay, P.; Chen, J.C.; Rehman, D.; Desai, R.; Edwards, P.; Lach, R.S.; Aschtgen, M.S.; Gaborieau, M.; Gaetani, M.; Palace, S.G.; Omori, S.; Khonde, L.; Moroz, Y.S.; Blough, B.; Jin, C.; Loh, E.; Grad, Y.H.; Saei, A.A.; Coley, C.W.; Wong, F.; Collins, J.J. A generative deep learning approach to de novo antibiotic design. *Cell*, 2025 Oct 16;188(21):5962-5979.e22. doi: 10.1016/j.cell.2025.07.033. Epub 2025 Aug 14. PMID: 40816267; PMCID: PMC12790861.

MIGUEL, L.M. Uso sustentável da biodiversidade na Amazônia brasileira: experiências atuais e perspectivas. 2007. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

PREUER, K.; Renz, P.; Unterthiner, T.; Hochreiter, S.; Klambauer, G. Fréchet ChemNet Distance: A Metric for Generative Models for Molecules in Drug Discovery. *J Chem Inf Model*, 2018 Sep 24;58(9):1736-1741. doi: 10.1021/acs.jcim.8b00234. Epub 2018 Aug 28. PMID: 30118593.

TROPSHA, A.; Isayev, O.; Varnek, A.; Schneider, G.; Cherkasov, A. Integrating QSAR modelling and deep learning in drug discovery: the emergence of deep QSAR. *Nat Rev Drug Discov*, 2024 Feb;23(2):141-155. doi: 10.1038/s41573-023-00832-0. Epub 2023 Dec 8. PMID: 38066301.

TRUBETSKOY, V. et al. Mapping genomic loci implicates genes and synaptic biology in schizophrenia. *Nature*, 2022 Apr;604(7906):502-508. doi: 10.1038/s41586-022-04434-5. Epub 2022 Apr 8. PMID: 35396580; PMCID: PMC9392466.

VATANSEVER, S.; Schlessinger, A.; Wacker, D.; Kaniskan, H.Ü.; Jin, J.; Zhou, M.M.; Zhang, B. Artificial intelligence and machine learning-aided drug discovery in central nervous system diseases: State-of-the-arts and future directions. *Med Res Rev*, 2021 May;41(3):1427-1473. doi: 10.1002/med.21764. Epub 2020 Dec 9. PMID: 33295676; PMCID: PMC8043990.

XU, J.; Wen, X.; Sun, L.; Xing, K.; Xue, L.; Zhou, S.; Hu, J.; Ai, Z.; Kong, Q.; Wen, Z.; Guo, L.; Hao, M.; Xing, D. Large Model Era: Deep Learning in Osteoporosis Drug Discovery. *J Chem Inf Model*, 2025 Mar 10;65(5):2232-2244. doi: 10.1021/acs.jcim.4c02264. Epub 2025 Feb 26. PMID: 40008920.

ZHANG, J.; Li, H.; Zhang, Y.; Huang, J.; Ren, L.; Zhang, C.; Zou, Q.; Zhang, Y. Computational toxicology in drug discovery: applications of artificial intelligence in ADMET and toxicity prediction. *Brief Bioinform*, 2025 Aug 31;26(5):bbaf533. doi: 10.1093/bib/bbaf533. Erratum in: *Brief Bioinform*, 2025 Nov 1;26(6):bbaf708. doi: 10.1093/bib/bbaf708. PMID: 41052279; PMCID: PMC12499773.

ZHOU, Y.; Huang, Z.; Li, W.; Wei, J.; Jiang, Q.; Yang, W.; Huang, J. Deep learning in preclinical antibody drug discovery and development. *Methods*, 2023 Oct;218:57-71. doi: 10.1016/j.ymeth.2023.07.003. Epub 2023 Jul 15. PMID: 37454742.