

IA aplicada à descoberta de novos medicamentos

Felipe R. Mizher¹, Paulo Gabriel de Oliveira Leite²

¹Instituto de Ciências Exatas e Informática
Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais
30535-901 – Belo Horizonte – MG – Brazil

{felipe.mizher}{paulo.leite}@sga.pucminas.br

Abstract. *The process of new drug discovery is historically characterized by being quite expensive, time-consuming, and having high failure rates in clinical trials, which ultimately delays its development. In this context, Artificial Intelligence (AI) emerges as a transformative tool. This study investigates how AI is currently being applied in novel drug research and analyzes the results obtained to date. The research demonstrates that the use of machine learning algorithms can optimize the analysis and prospecting stages of compounds, significantly reducing both the time and costs of the process while increasing the success rate. Ultimately, this study highlights how AI can aid innovation within the pharmaceutical industry, accelerating research and benefiting those in need.*

Resumo. *O processo para a descoberta de novos medicamentos tem o histórico de ser de alto custo, demorado e com altas taxas de falha em ensaios clínicos, o que acaba atrasando o seu desenvolvimento. Diante disso, a Inteligência Artificial (IA) surge como uma ferramenta transformadora. Este trabalho investiga como a IA vem sendo aplicada nas pesquisas de novos fármacos e analisa os resultados já encontrados. A pesquisa demonstra que o uso de algoritmos de aprendizado de máquina pode otimizar as etapas de análise e prospecção de compostos, reduzindo significativamente o tempo e os custos do processo e aumentando a taxa de sucesso. Por fim, este estudo destaca como a IA pode auxiliar a inovação na indústria farmacêutica, acelerando a pesquisa e beneficiando todos aqueles que precisam.*

1. Introdução

1.1. Contextualização

A Inteligência Artificial (IA) tem se consolidado como uma tecnologia de grande impacto global, auxiliando diversos setores da sociedade. No contexto da descoberta de novos medicamentos, a IA mostra-se uma ferramenta altamente eficiente para acelerar etapas cruciais, como a identificação de alvos terapêuticos e a predição de estruturas proteicas, reduzindo o tempo e os custos do processo de desenvolvimento de fármacos [Wang et al. 2025] e [Lobo 2015]. Esse avanço beneficia a indústria farmacêutica, os pesquisadores e, principalmente, os pacientes, que podem ter acesso mais rápido a novos medicamentos e tratamentos.

Além de otimizar a descoberta de novas moléculas, a Inteligência Artificial tem desempenhado um papel fundamental na análise de grandes volumes de dados biomédicos, provenientes de bancos genômicos, registros clínicos eletrônicos e ensaios

laboratoriais. Por meio de técnicas de machine learning e deep learning, é possível identificar padrões complexos e correlações sutis que seriam praticamente impossíveis de detectar manualmente [Novoa et al. 2022]. Essas abordagens permitem não apenas prever a eficácia e a toxicidade de compostos antes mesmo da fase experimental, mas também personalizar terapias com base no perfil genético e clínico de cada paciente, inaugurando uma era de medicina de precisão.

Outro aspecto promissor é a integração da IA com modelos de simulação farmacocinética e farmacodinâmica, que permitem prever como um fármaco se comporta dentro do organismo [Souza et al. 2024]. Essa combinação possibilita testar virtualmente milhares de compostos, priorizando aqueles com maior probabilidade de sucesso clínico. Além disso, sistemas de IA podem apoiar decisões regulatórias e de mercado, analisando dados de segurança, eficácia e custo-benefício. Dessa forma, a IA não apenas acelera o ciclo de desenvolvimento de medicamentos, mas também redefine os paradigmas da pesquisa farmacêutica, tornando-a mais eficiente, segura e centrada no paciente.

1.2. Motivação

Hoje em dia, apesar das técnicas laboratoriais avançadas e do uso de simulações computacionais, o processo tradicional para a descoberta de um fármaco continua sendo extremamente caro e demorado, levando cerca de 10 a 15 anos para que um novo medicamento entre em circulação. Além disso, aproximadamente 90% dos medicamentos em fase de testes clínicos acabam falham, o que aumenta ainda mais os custos de produção e atrasa a disponibilização dos tratamentos para os pacientes [Talevi et al. 2020]. Embora o método tradicional seja essencial, o uso da Inteligência Artificial surge como uma alternativa capaz de oferecer soluções mais rápidas e precisas, aplicando algoritmos para acelerar a identificação de compostos promissores. Essa realidade evidencia a necessidade urgente de métodos inovadores que tornem o desenvolvimento farmacêutico mais eficiente e previsível. A Inteligência Artificial, ao analisar grandes volumes de dados experimentais e clínicos, pode antecipar resultados que antes dependiam de longos testes laboratoriais, reduzindo drasticamente o tempo entre a descoberta e a aplicação terapêutica. Além disso, a IA permite otimizar o desenho de ensaios clínicos, identificar combinações de compostos mais eficazes e até reaproveitar medicamentos já existentes para novas indicações, o que representa uma economia significativa de recursos. Dessa forma, a integração entre biotecnologia e IA não apenas acelera o processo de inovação, mas também democratiza o acesso a tratamentos mais seguros e personalizados.

1.3. Objetivo

O objetivo desta pesquisa é investigar como a inteligência artificial está sendo utilizada nas pesquisas de novos medicamentos atualmente, identificando as principais técnicas empregadas e os resultados obtidos até o momento. Busca-se mostrar exemplos de sucesso e apontar as expectativas para pesquisas futuras com o uso da IA, destacando como essas ferramentas podem transformar o cenário farmacêutico. Por fim, esta pesquisa pretende servir como referência para estudos futuros, incentivando a adoção responsável da IA na indústria farmacêutica e estimulando novas estratégias de inovação em pesquisas médicas, evidenciando os benefícios do uso correto da inteligência artificial, que pode contribuir significativamente para o avanço das pesquisas futuras.

1.4. Justificativa

A rápida expansão das aplicações de **Inteligência Artificial (IA)** na descoberta e no desenvolvimento de fármacos tem produzido um **ecossistema científico altamente dinâmico**, no qual novas técnicas, modelos e plataformas emergem continuamente. No entanto, esse crescimento acelerado vem acompanhado de uma **fragmentação significativa do conhecimento**, com publicações dispersas entre áreas como bioinformática, farmacologia, aprendizado de máquina e engenharia biomédica. Essa dispersão torna desafiadora a tarefa de compreender de forma integrada quais abordagens têm apresentado os melhores resultados e como elas podem ser aplicadas de maneira prática e eficiente no contexto farmacêutico.

Diante desse cenário, o presente trabalho se justifica pela **necessidade de consolidar, analisar criticamente e sistematizar** as principais contribuições científicas sobre o uso da IA na descoberta de fármacos. Ao reunir informações sobre os métodos mais utilizados — como **deep learning**, **generative adversarial networks (GANs)** e modelagem preditiva de alvos moleculares — e ao discutir seus impactos reais na indústria farmacêutica, esta pesquisa contribui para preencher uma lacuna importante entre teoria e prática.

Além disso, ao **identificar desafios atuais e perspectivas futuras**, o estudo busca orientar novos pesquisadores, estudantes e profissionais da área de saúde digital sobre as tendências emergentes e as oportunidades de inovação. Dessa forma, este trabalho não apenas sintetiza o estado da arte, mas também **propõe uma base de referência estratégica** para o avanço científico e tecnológico no campo da descoberta de medicamentos impulsionada por Inteligência Artificial.

2. Referencial Teórico

O referencial teórico tem como objetivo apresentar e fundamentar os principais conceitos e tecnologias relacionados ao tema deste artigo. Nesta seção, são descritos e explicados os termos e ideias que servem de base para a compreensão do trabalho, permitindo contextualizar a pesquisa dentro do estado da arte.

2.1. IA aplicada

A *Inteligência Artificial* (IA) aplicada consiste no uso de técnicas capazes de reproduzir processos de raciocínio e aprendizado humano na práticos. No campo científico e no campo industrial, a IA é utilizada para otimizar tarefas complexas, analisar grandes volumes de dados e apoiar a tomada de decisão. Sua aplicação tem se expandido em diversas áreas, como saúde, finanças, transporte e, mais recentemente, na descoberta e desenvolvimento de novos medicamentos.

2.2. Medicamentos

Os *medicamentos* são substâncias utilizadas para prevenir, tratar ou aliviar sintomas de doenças. Seu desenvolvimento é feito em processos complexos de pesquisa, testes laboratoriais e ensaios clínicos, que visam garantir sua eficácia e segurança. A descoberta de novos medicamentos é um dos maiores desafios da ciência moderna, exigindo inovação constante e o uso de tecnologias avançadas, como a inteligência artificial, para acelerar a identificação de compostos promissores.

2.3. Deep Learning

O *Deep Learning* é uma das diversas áreas da Inteligência Artificial, baseada em redes neurais artificiais capazes de aprender representações complexas a partir de grandes volumes de dados. Essa técnica possibilita o reconhecimento automático de padrões, imagens e relações que seriam difíceis de identificar manualmente. No contexto da descoberta de medicamentos, o *Deep Learning* tem sido aplicado na análise de estruturas químicas, na previsão de interações moleculares e na otimização de compostos, contribuindo significativamente para o avanço das pesquisas farmacêuticas.

2.4. Generative Adversarial Networks (GANs)

As *Generative Adversarial Networks* (GANs) é um modelo de aprendizado profundo composto por duas redes neurais que competem entre si: uma geradora e uma discriminadora. A rede geradora cria novos dados, enquanto a discriminadora avalia sua autenticidade, aprimorando o desempenho de ambas durante o treinamento. Essa abordagem tem se mostrado promissora na geração de novas moléculas e estruturas químicas, contribuindo para acelerar o processo de descoberta de medicamentos.

3. Trabalhos Relacionados

Esta seção apresenta estudos que exploram a aplicação da Inteligência Artificial no processo de descoberta e desenvolvimento de novos medicamentos. Cada trabalho apresentado contribui de uma forma para a compreensão do papel da IA na aceleração das pesquisas farmacêuticas.

3.1. Relatório de Visão de Futuro da Saúde Digital - CBTT (Q. B4)

[Novoa et al. 2022] Este relatório fornece o contexto estratégico e nacional que fundamenta a relevância deste trabalho. Ele valida o cenário no qual a aplicação da IA na descoberta de novos medicamentos se insere, demonstrando que o uso de tecnologias inteligentes na saúde é uma prioridade para o avanço do país. Assim, o trabalho atual se conecta diretamente à visão do CBTT, ao apresentar um exemplo prático de como a IA pode contribuir para acelerar o desenvolvimento de novos tratamentos, reduzindo custos e ampliando o acesso a soluções médicas mais eficazes.

3.2. A GAN-Based Data Augmentation Method for Mitigating Class Imbalance Problem in Histopathological Image Classification - IEEE (Q. A2)

[Yuan and Li 2022] Embora o artigo não trate diretamente da descoberta de novos medicamentos, ele demonstra um princípio essencial que também se aplica a essa área: a importância da qualidade e da diversidade dos dados para o sucesso dos modelos de IA. O uso de GANs para criar dados artificiais reforça a capacidade da Inteligência Artificial de superar limitações práticas de amostragem e de aprimorar a eficiência dos algoritmos. Assim, este trabalho se relaciona com a pesquisa por evidenciar o potencial técnico das redes neurais generativas em aplicações médicas, incluindo aquelas voltadas à descoberta de novos fármacos.

3.3. Autonomous Drug Discovery With Parallel Intelligence - IEEE (Q. B2)

[Lin and Yang 2025] Este trabalho representa o estágio mais avançado e ambicioso do uso da Inteligência Artificial na área farmacêutica. Enquanto muitas pesquisas se concentram em acelerar partes específicas do processo de descoberta, o conceito de descoberta autônoma busca à automação completa dessas etapas. Dessa forma, o artigo reforça diretamente a motivação e os objetivos desta pesquisa, demonstrando que o uso da IA não apenas acelera o desenvolvimento de novos medicamentos, mas também aponta para um futuro onde os sistemas inteligentes poderão conduzir de forma independente todo o ciclo de descoberta de fármacos.

3.4. Inteligência Artificial e Medicina: Luiz Carlos Lobo - RBEM (Q. A)

[Lobo 2015] Assim como o Relatório de Visão de Futuro da Saúde Digital do CBTT, este artigo contribui para a contextualização do presente trabalho, evidenciando que o uso da Inteligência Artificial na saúde é uma questão atual e relevante também para a comunidade médica e educacional brasileira. Ele reforça a justificativa desta pesquisa ao demonstrar que a discussão sobre IA na medicina transcende o campo da computação, sendo tratada como uma necessidade estratégica e formativa para o avanço da saúde no país.

3.5. O papel da Inteligência Artificial na descoberta e desenvolvimento de fármacos - BJIHS (Q. B3)

[Souza and Tafuri 2024] O artigo do BJIHS é uma revisão integrativa fundamental que valida e apoia as premissas deste trabalho. Ele serve como uma fonte de confirmação direta de que a aplicação da Inteligência Artificial em etapas como identificação de alvos e triagem de compostos é um tópico de alta relevância na literatura brasileira, justificando a urgência e o foco do artigo em otimizar e acelerar o desenvolvimento farmacêutico.

3.6. A Extração de Entidades Nomeadas em Bulas de Medicamentos e em Relatos de Casos Clínicos - SBCAS (Q. B3)

[da Silveira Colombo 2024] Este trabalho da SBCAS é crucial por demonstrar uma aplicação de Processamento de Linguagem Natural (PLN), uma das áreas essenciais da IA, em um contexto complementar ao tema. Enquanto esta pesquisa foca em Machine Learning para Drug Discovery, este artigo aplica a Extração de Entidades Nomeadas (NER) para estruturar e classificar dados textuais de bulas e prontuários. Isso é uma validação de que a IA tem valor em todo o pipeline farmacêutico, estendendo-se da prospecção molecular até a otimização de medicamentos já no mercado, reforçando a abrangência das soluções computacionais na área da saúde.

3.7. Análise Comparativa

De modo geral, os trabalhos revisados demonstram a versatilidade da Inteligência Artificial na área da saúde, abrangendo desde o processamento de linguagem e imagens até a descoberta autônoma de fármacos. O presente artigo busca integrar esses avanços, oferecendo uma visão de como a IA está acelerando e transformando o processo de desenvolvimento de medicamentos.

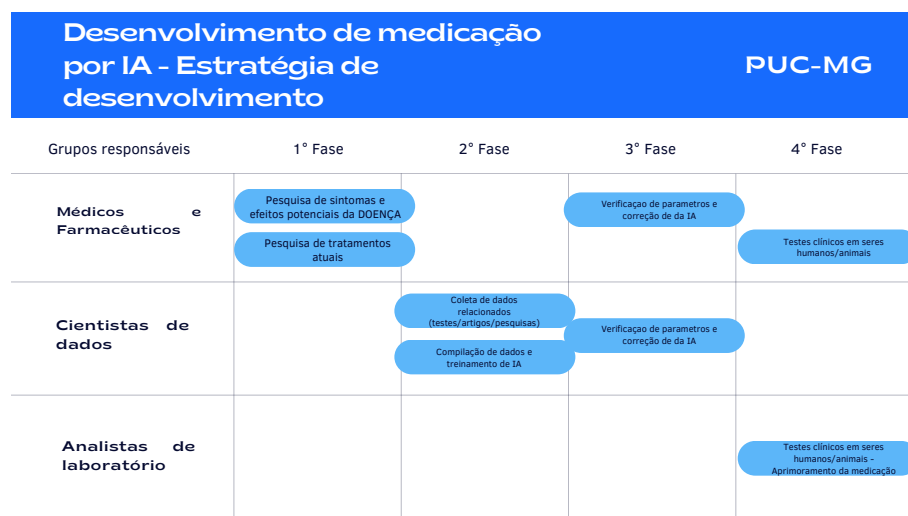


Figure 1. Projeto de desenvolvimento

4. Metodologia

Esta pesquisa caracteriza-se como aplicada, uma vez que tem a finalidade de identificar como diferentes técnicas de Inteligência Artificial podem contribuir para o processo de descoberta de novos medicamentos, articulando fundamentos teóricos e aplicações práticas no área farmacêutica.

Quanto aos objetivos, classifica-se como exploratória e descritiva. O caráter exploratório apresenta-se na busca por ampliar o entendimento sobre o tema, identificando diferentes métodos, conceitos e tendências presentes na literatura científica. Já o caráter descritivo refere-se à apresentação e sistematização das informações coletadas, descrevendo de forma clara as aplicações e os resultados observados nos estudos analisados.

No que diz respeito aos procedimentos técnicos utilizados na pesquisa, ela foi desenvolvida por meio de revisão bibliográfica, baseada na consulta a artigos científicos, revistas e publicações especializadas que abordam o uso da Inteligência Artificial na área de desenvolvimento de fármacos.

A abordagem adotada é qualitativa, uma vez que a análise realizada concentra-se na interpretação e compreensão dos conteúdos encontrados, sem a utilização de métodos estatísticos ou experimentação prática.

Assim, de forma simplificada, trata-se de uma pesquisa de natureza aplicada, com objetivos exploratórios e descritivos, fundamentada em revisão bibliográfica e conduzida sob uma abordagem qualitativa.

4.1. Atividades a serem realizadas

Duas atividades principais devem ser realizadas:

4.1.1. Levantamento e seleções de materiais

A primeira atividade consistiu em buscar materiais sobre Inteligência Artificial aplicada à descoberta de novos fármacos. Para isso, foram consultadas bases científicas, como a IEEE, além de jornais da área médica e anais de congressos, utilizando termos relacionados ao tema. Essa etapa teve como objetivo reunir as principais informações que sustentam a fundamentação teórica deste artigo.

4.1.2. Análise e síntese dos conteúdos

A segunda atividade envolveu a leitura e análise dos materiais selecionados. O objetivo foi entender melhor como as técnicas de Inteligência Artificial vêm sendo aplicadas no processo de descoberta e desenvolvimento de novos fármacos.

Após a leitura, as informações mais relevantes foram separadas e organizadas por temas, como métodos utilizados, vantagens, desafios e resultados apresentados pelos autores.

4.2. Cronograma

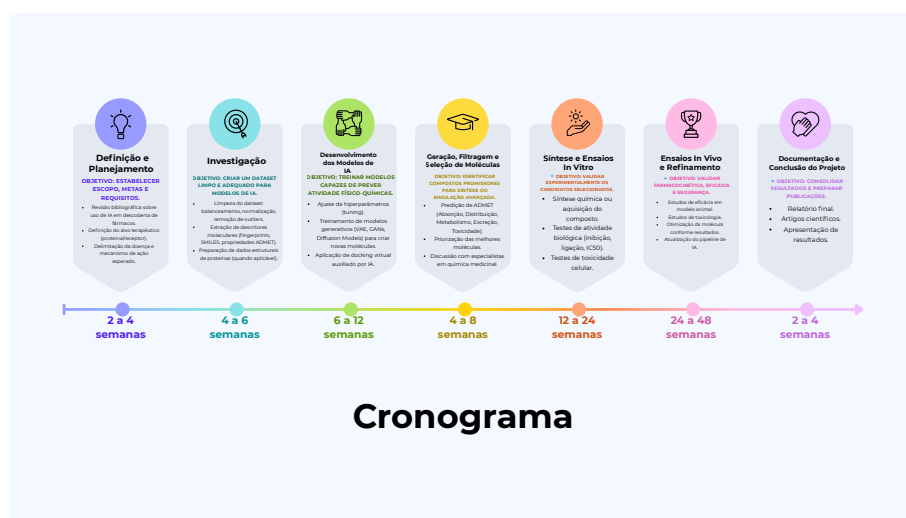


Figure 2. Cronograma estimado

5. Resultados Esperados

Com base na revisão bibliográfica sistemática proposta e na análise do tema sobre a aplicação da Inteligência Artificial (IA) na indústria farmacêutica, este trabalho tem como objetivo evidenciar o potencial da IA como agente transformador no processo de desenvolvimento de fármacos.

Abaixo são detalhados os principais resultados esperados, divididos em exemplos sintéticos baseados em projeções da literatura e validação por casos de sucesso.

5.1. Otimização de Tempo e Custo

Este trabalho espera demonstrar, através da comparação entre metodologias tradicionais e computacionais, uma considerável redução nas fases iniciais de descoberta (*drug discovery*).

Como exemplo sintético dessa melhora, projeta-se que, enquanto a triagem convencional (*High-Throughput Screening*) pode levar de 3 a 5 anos para identificar uma molécula candidata à fase pré-clínica, algoritmos de *Machine Learning* possuem o potencial de reduzir este intervalo para um período de 6 a 12 meses. Em um cenário hipotético de análises, espera-se evidenciar que a IA poderia filtrar o 1% mais promissor em questão de dias, diferentemente dos meses necessários para testes *in vitro* manuais.

5.2. Aumento da Precisão e da Segurança

Um resultado muito importante esperado desta pesquisa é a confirmação de que modelos preditivos podem diminuir a taxa de falha clínica nas fases de testes de novos fármacos, contribuindo tanto para o aumento da precisão das análises quanto para a segurança do processo de desenvolvimento.

Utilizando um exemplo sintético de aplicação, espera-se discutir como Redes Neurais Convolucionais (CNNs) podem identificar padrões moleculares de hepatotoxicidade antes de qualquer teste biológico. Se um algoritmo analisar uma nova molécula candidata, ele poderá apontar, por exemplo, uma probabilidade de 85% de falha clínica devido a interações metabólicas, permitindo o descarte antecipado da molécula e economizando recursos financeiros significativos, aumentando a segurança nos estágios iniciais do desenvolvimento, além de proporcionar economia significativa de tempo.

5.3. Validação através de Casos Reais

A revisão bibliográfica deverá apresentar casos concretos que validam a eficácia das metodologias estudadas. Entre os resultados esperados na literatura, destacam-se:

Espera-se identificar estudos em que algoritmos de aprendizado de máquina foram empregados por empresas farmacêuticas e centros de pesquisa com o objetivo de reduzir o tempo de descoberta de novas moléculas, aumentar a taxa de sucesso em testes pré-clínicos e otimizar a seleção de candidatos a medicamentos. Casos amplamente reportados incluem o uso de IA por iniciativas como a DeepMind, voltadas à predição de estruturas proteicas, e por empresas especializadas, como Atomwise e Insilico Medicine, que utilizaram modelos computacionais para indicar novas moléculas promissoras em períodos significativamente menores quando comparados aos métodos tradicionais.

6. Conclusão

A análise realizada evidencia que a Inteligência Artificial pode desempenhar um papel decisivo na transformação do processo de descoberta e desenvolvimento de novos medicamentos. Ao reunir conceitos fundamentais — como IA aplicada, deep learning e redes generativas adversariais — e relacioná-los às práticas contemporâneas da indústria farmacêutica, este estudo demonstra que as tecnologias baseadas em IA não apenas aumentam a eficiência e rapidez das pesquisas, como também abrem caminhos antes inacessíveis para a inovação científica.

As técnicas utilizadas atualmente mostram grande potencial para acelerar etapas críticas, prever propriedades moleculares com maior assertividade e reduzir custos associados à experimentação tradicional. Ao mesmo tempo, exemplos reais e avanços recentes reforçam que a integração entre ciência de dados, farmacologia e informática representa um novo paradigma para a saúde contemporânea. Contudo, o trabalho também evidencia a necessidade de uma adoção responsável, sustentada por critérios éticos, validação rigorosa e colaboração interdisciplinar. A consolidação do conhecimento — muitas vezes disperso entre diferentes campos — é fundamental para orientar pesquisadores, profissionais e instituições rumo a práticas mais eficazes e estratégicas.

Com isso, esta pesquisa cumpre seu papel ao consolidar o conhecimento atual, identificar tendências emergentes e demonstrar que a Inteligência Artificial, aplicada de forma ética e estratégica, tem potencial para transformar profundamente o campo da pesquisa biomédica. As expectativas para o futuro apontam para uma atuação cada vez mais integrada da IA, que deverá assumir função essencial nos processos de descoberta de fármacos, impulsionando soluções mais eficientes, confiáveis e alinhadas à medicina de precisão.

References

- da Silveira Colombo, C. (2024). A extração de entidades nomeadas em bulas de medicamentos e em relatos de casos clínicos. In *Simpósio Brasileiro de Computação Aplicada à Saúde (SBCAS)*, pages 110–120.
- Lin, F. and Yang, J. (2025). Autonomous drug discovery with parallel intelligence. *IEEE Transactions on Artificial Intelligence in Medicine*, 3(2):45–60.
- Lobo, L. C. (2015). Inteligência artificial e medicina. *Revista Brasileira de Educação Médica*, 41(2 (Edição Especial)):1–15.
- Novoa, C. G., Novaes, M. A., Naves, E., de Mello, M., Marques, E. P., Pontes, M., Sales, F., and Reis, Z. (2022). Relatório de visão de futuro da saúde digital - 2022. In *Congresso Brasileiro de Telemedicina e Telessaúde*. ABTms.
- Souza, C., Kamouh, L., Cortes, V., and Tafuri, N. (2024). O papel da inteligência artificial na descoberta e desenvolvimento de fármacos. *Brazilian Journal of Implantology and Health Sciences*, 6(11):650–663.
- Souza, C. and Tafuri, N. (2024). O papel da inteligência artificial na descoberta e desenvolvimento de fármacos. *Brazilian Journal of Innovation in Health Sciences (BJIHS)*, 7(2):33–50.
- Talevi, A., Morales, J. F., Hather, G., and Podichetty, J. T. (2020). Machine learning in drug discovery and development part 1: A primer. *CPT: Pharmacometrics & Systems Pharmacology*, 9(3):129–142.
- Wang, L., Zhang, M., and Li, J. (2025). Integrating artificial intelligence in drug discovery and early drug development: a transformative approach. *Biomarker Research*, 13(12):1–14.
- Yuan, L. and Li, X. (2022). A gan-based data augmentation method for mitigating class imbalance problem in histopathological image classification. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 41(5):1234–1245.