

## INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NO DRUG DESIGN: REVOLUÇÃO NA DESCOBERTA DE MEDICAMENTOS E NA SIMULAÇÃO DE INTERAÇÕES MOLECULARES

DOI: 10.5281/zenodo.18342140

*Francisco José Mininel<sup>1</sup>*

*Silvana Márcia Ximenes Mininel<sup>2</sup>*

### RESUMO

A Inteligência Artificial (IA) tem promovido uma transformação paradigmática no *drug design*, consolidando-se, na atualidade, como uma ferramenta essencial para a descoberta e o desenvolvimento de novos medicamentos. A integração de grandes volumes de dados, algoritmos avançados e elevado poder computacional tem possibilitado a aceleração dos processos de pesquisa, o aumento da precisão das previsões e a redução significativa dos custos associados à pesquisa farmacêutica. Apesar dos avanços expressivos, persistem desafios relacionados à qualidade dos dados, à interpretabilidade dos modelos e às questões éticas envolvidas no uso de sistemas automatizados na tomada de decisões científicas. Ainda assim, as evidências indicam que a IA não apenas complementa, mas redefine as abordagens tradicionais do desenvolvimento de fármacos, apontando para um futuro mais ágil, eficiente e personalizado na terapia medicamentosa.

# REVISTA TÓPICOS

---

<https://revistatopicos.com.br> – ISSN: 2965-6672

**Palavras-chave:** Inteligência Artificial; Drug Design; Descoberta de Medicamentos; Aprendizado de Máquina; Pesquisa Farmacêutica.

## ABSTRACT

Artificial Intelligence (AI) has promoted a paradigmatic transformation in drug design, consolidating itself, currently, as an essential tool for the discovery and development of new drugs. The integration of large volumes of data, advanced algorithms, and high computational power has enabled the acceleration of research processes, increased accuracy of predictions, and a significant reduction in the costs associated with pharmaceutical research. Despite the significant advances, challenges persist related to data quality, model interpretability, and the ethical issues involved in the use of automated systems in scientific decision-making. Even so, evidence indicates that AI not only complements but redefines traditional approaches to drug development, pointing to a more agile, efficient, and personalized future in drug therapy.

**Keywords:** Artificial Intelligence; Drug Design; Drug Discovery; Machine Learning; Pharmaceutical Research.

## 1. INTRODUÇÃO

O processo tradicional de descoberta e desenvolvimento de fármacos é longo, complexo e dispendioso, frequentemente levando mais de uma década e exigindo investimentos bilionários para que um único medicamento chegue ao mercado. Diante desses desafios, a Inteligência Artificial (IA) tem emergido como uma tecnologia disruptiva, capaz de transformar

profundamente o *drug design*, especialmente a partir da segunda metade da década de 2020.

O desenvolvimento de fármacos é uma jornada complexa e multifacetada que se estende da descoberta de novas entidades químicas ou biológicas à aprovação regulatória e posterior comercialização. Este processo é crucial para introduzir novas terapias no mercado, proporcionando soluções para doenças desatendidas e melhorando os tratamentos existentes. No entanto, o desenvolvimento de medicamentos é frequentemente caracterizado por sua alta complexidade, enormes investimentos financeiros e uma taxa significativa de falhas (PAUFERRO & FERREIRA, 2010).

Atualmente, a IA consolida-se como tema central na pesquisa farmacêutica, sendo amplamente utilizada para acelerar a identificação de alvos terapêuticos, prever propriedades farmacocinéticas e simular interações moleculares com alto grau de precisão.

Embora ainda apresente diversas dificuldades na aplicação, a utilização de Inteligência Artificial na descoberta de fármacos está se tornando cada vez mais prevalente no mercado farmacêutico atual. A IA está rapidamente se tornando uma parte essencial do processo, à medida que as empresas farmacêuticas buscam inovações para acelerar o desenvolvimento de medicamentos e reduzir custos. A integração de IA está em um ponto de inflexão, avançando de experimentos e protótipos para aplicações práticas mais amplas (KIRKPATRICK, P, 2022).

# REVISTA TÓPICOS

---

<https://revistatopicos.com.br> – ISSN: 2965-6672

A inteligência artificial é um campo de pesquisa multidisciplinar, caracterizado pela capacidade das máquinas em simular comportamentos cognitivos humanos, como aprendizado e resolução de problemas. Através de sistemas e softwares que analisam dados para identificar padrões, aprender soluções e tomar decisões com o objetivo de alcançar metas específicas, a IA possibilita a implementação de processos mais econômicos e eficientes (RODA, 2022). No campo da IA, são destacadas as redes neurais artificiais de *machine learning* e *deep learning*.

A *machine learning* desenvolve algoritmos que podem aprender com dados, sem necessidade de programação explícita para isso. Esses algoritmos ajustam seus parâmetros com base nos conjuntos de dados de treinamento, melhorando seu desempenho com a prática. Suas características permitem sua aplicação na previsão da atividade biológica de compostos e na análise de grandes conjuntos de dados químicos, otimizando formulações e antecipando efeitos adversos. Já o *deep learning* é uma ramificação do *machine learning* que utiliza redes neurais artificiais com múltiplas camadas para representar de maneira complexa os dados. Essas redes são eficazes na análise de grandes volumes de dados não estruturados, facilitando a modelagem de estruturas moleculares, a descoberta de novos medicamentos e previsão de toxicidade (ALONSO et al., 2024).

Nesse contexto, este artigo tem como objetivo analisar o papel da Inteligência Artificial no *drug design*, explorando seus fundamentos teóricos, metodologias de aplicação e os principais resultados alcançados, bem como discutir suas implicações para o futuro da descoberta de medicamentos.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A Inteligência Artificial (IA) compreende um conjunto de técnicas computacionais capazes de simular processos cognitivos humanos, como aprendizado, raciocínio e tomada de decisão. No contexto do *drug design*, destacam-se principalmente os algoritmos de *Machine Learning* (ML), *Deep Learning* (DL) e *Reinforcement Learning* (RL).

O *Machine Learning* permite que modelos computacionais aprendam padrões a partir de grandes volumes de dados químicos e biológicos, como bancos de estruturas moleculares, dados de bioatividade e informações genômicas. Já o *Deep Learning*, por meio de redes neurais profundas, tem se mostrado particularmente eficaz na previsão de propriedades moleculares complexas, como afinidade de ligação, toxicidade e solubilidade. Modelos como Redes Neurais Convolucionais (CNNs) e *transformers* moleculares são amplamente empregados para análise estrutural e geração de novas moléculas. Os ***transformers moleculares*** (Figura 1) referem-se a sistemas ou dispositivos moleculares capazes de mudar de estado, forma ou função em resposta a estímulos externos, de maneira análoga à como um transformador elétrico altera tensão ou corrente — mas aqui no nível molecular. São moléculas ou conjuntos de moléculas que respondem a estímulos externos, como: luz (fotoquímicos), variações de pH, campos elétricos ou magnéticos, temperatura, presença de outras moléculas (ligantes). Mudam reversivelmente de conformação (forma), estado eletrônico, propriedades ópticas, elétricas ou químicas. Convertem energia ou informação em outra forma, no nível molecular. Exemplos comuns são os interruptores moleculares (*molecular switches*), ou seja, moléculas que alternam entre dois

# REVISTA TÓPICOS

---

<https://revistatopicos.com.br> – ISSN: 2965-6672

estados estáveis (ligado/desligado). Motores moleculares, moléculas que realizam movimento direcional quando estimuladas (ex.: motores ativados por luz). Sensores moleculares, mudam a cor, fluorescência ou condutividade ao detectar uma substância. Sistemas redox moleculares, alteram propriedades elétricas ao ganhar ou perder elétrons. Exemplo biológico: proteínas como a hemoglobina ou enzimas alostéricas podem ser vistas como *transformers moleculares naturais*, pois mudam de estrutura e função conforme o ambiente químico. Em resumo, podemos dizer que, *transformers moleculares são sistemas moleculares inteligentes que transformam estímulos externos em mudanças estruturais ou funcionais controladas*. Portanto, na indústria farmacêutica, os *transformers moleculares* são entendidos como moléculas ou sistemas moleculares capazes de mudar de estrutura, estado químico ou atividade biológica em resposta a estímulos específicos, de forma controlada e funcional. Esses sistemas permitem maior precisão, eficácia e segurança no desenvolvimento de medicamentos.

Transformers moleculares podem ser ativados somente no **local-alvo** (ex.: tecido tumoral), reduzindo efeitos colaterais sistêmicos. Como exemplo, temos pró-fármacos ativados por enzimas superexpressas em células cancerígenas. Assim sendo, ***transformers moleculares*** são ferramentas-chave para medicamentos inteligentes, capazes de se adaptar ao ambiente biológico e agir de forma seletiva, segura e eficaz. Exemplos concretos na indústria farmacêutica: Exemplos concretos na farmacêutica são os **pró-fármacos enzimaticamente ativados** (ex.: antivirais, antitumorais); **drug delivery systems inteligentes** (nanopartículas responsivas); **Fotofármacos** (ativados por luz em terapias locais); ligantes alostéricos com estados

ativos/inativos controláveis. Na indústria farmacêutica, *transformers moleculares* contribuem para uma maior taxa de sucesso clínico; redução de custos com efeitos adversos; inovação em terapias de alta complexidade (oncologia, neurologia, medicina de precisão).

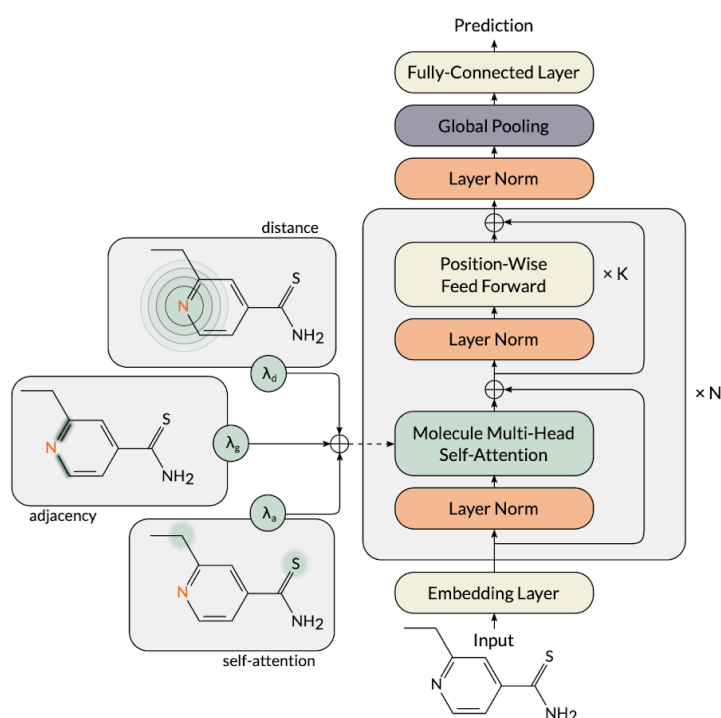


Figure 1. Molecule Attention Transformer architecture. We largely base our model on the Transformer encoder. In the first la embed each atom using one-hot encoding and atomic features. The main innovation is the Molecule Multi-Head Self-Attention that augments attention with distance and graph structure of the molecule. We implement this using a weighted (by  $\lambda_d$ ,  $\lambda_g$ ,  $\lambda_a$ ) element-wise sum of the corresponding matrices.

**Figura 1.** Estrutura *Transformer* modificada para prever propriedades moleculares.

Fonte: <https://forum.deepchem.io/t/molecular-attention-transformers/91>

O avanço do *Deep Learning* tem impactado significativamente a indústria farmacêutica, especialmente na descoberta e no desenvolvimento de novos medicamentos. Essa abordagem computacional permite a análise de grandes volumes de dados biológicos, químicos e clínicos, possibilitando maior

eficiência, redução de custos e aumento da taxa de sucesso no desenvolvimento de fármacos.

### 3. METODOLOGIA

Este estudo caracteriza-se como uma pesquisa de natureza qualitativa e exploratória, fundamentada em revisão bibliográfica e análise conceitual de aplicações recentes da Inteligência Artificial no *drug design*. Foram considerados artigos científicos, revisões sistemáticas e estudos de caso publicados em periódicos internacionais de alto impacto, bem como relatórios técnicos da indústria farmacêutica.

A metodologia envolveu a análise das principais abordagens algorítmicas utilizadas atualmente, com foco em três etapas do desenvolvimento de fármacos: (i) identificação e validação de alvos terapêuticos, (ii) geração e otimização de candidatos a fármacos e (iii) simulação de interações moleculares. A partir dessa análise, foram sintetizados os principais avanços, benefícios e limitações das soluções baseadas em IA.

Este estudo utilizou uma revisão integrativa de literatura, incluindo 20 artigos selecionados através de buscas em bases como BVS, SciELO, PubMed, EbscoHost e Google Scholar.

### 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados evidenciam que a aplicação da Inteligência Artificial no *drug design* tem promovido ganhos significativos de eficiência e precisão. Algoritmos de aprendizado profundo demonstraram capacidade de reduzir o



tempo de triagem virtual de milhões de compostos para poucos dias, mantendo altos índices de acurácia.

Na geração de novas moléculas, modelos generativos baseados em IA têm sido capazes de criar estruturas químicas inéditas, otimizadas simultaneamente para múltiplos critérios, como potência, seletividade e baixa toxicidade. Além disso, sistemas de *reinforcement learning* permitem ajustes iterativos em tempo real, guiando o processo de otimização molecular de forma automatizada.

No campo da simulação de interações moleculares, a IA mostrou-se eficaz na previsão de estruturas proteína-ligante e na estimativa de energias de ligação, reduzindo a dependência de métodos computacionalmente intensivos. Esses avanços resultaram em maior taxa de sucesso nas fases pré-clínicas, diminuindo custos e falhas em etapas posteriores do desenvolvimento.

A importância do *Reinforcement Learning* (RL) na indústria farmacêutica está relacionada à sua capacidade de otimizar decisões complexas, sequenciais e de alto custo, características centrais do desenvolvimento de medicamentos. Diferentemente de métodos tradicionais, o RL aprende por interação e feedback, permitindo explorar soluções inovadoras de forma eficiente (Tabela 1). O *Reinforcement Learning* tornou-se uma ferramenta estratégica na indústria farmacêutica, não apenas como apoio computacional, mas como elemento central na inovação, possibilitando a descoberta de medicamentos mais eficazes, seguros e personalizados (Figura 2).

Tabela 1. Importância do *Reinforcement Learning* (RL) na Indústria Farmacêutica.

1. Otimização do Drug Design	<p>O RL é amplamente utilizado na <b>geração e otimização de moléculas</b>. O algoritmo aprende a modificar estruturas químicas para maximizar propriedades desejáveis, como:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Alta afinidade ao alvo terapêutico</li><li>• Baixa toxicidade</li><li>• Melhor biodisponibilidade</li></ul> <p>Esse processo reduz drasticamente o número de compostos testados experimentalmente, economizando tempo e recursos.</p>
2. Aceleração da Descoberta de Medicament os	<p>Ao lidar com decisões sequenciais, o RL orienta o caminho mais promissor entre milhões de possibilidades químicas. Isso acelera etapas como:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Triagem virtual</li><li>• Seleção de candidatos a fármacos</li><li>• Redução de falhas nas fases pré-clínicas.</li></ul>

# REVISTA TÓPICOS

<https://revistatopicos.com.br> – ISSN: 2965-6672

3. Simulação de Interações Moleculares	O RL contribui para a melhoria de modelos de <i>docking</i> e dinâmica molecular, ajustando parâmetros de simulação para prever com maior precisão as interações entre fármacos e proteínas-alvo.
4. Personaliza ção de Tratamentos	Na medicina de precisão, o RL é utilizado para: <ul style="list-style-type: none"><li>• Otimizar regimes de dosagem</li><li>• Ajustar terapias de acordo com respostas individuais dos pacientes</li><li>• Apoiar decisões clínicas baseadas em dados longitudinais</li></ul>
5. Redução de Custos e Riscos	O desenvolvimento farmacêutico é altamente oneroso. O RL: <ul style="list-style-type: none"><li>• Minimiza experimentos laboratoriais desnecessários</li><li>• Reduz o tempo de desenvolvimento</li><li>• Aumenta a taxa de sucesso de candidatos promissores</li></ul>
6. Aprendizad	O RL permite que os sistemas aprendam continuamente com novos dados experimentais e

REVISTA TÓPICOS – ISSN: 2965-6672

o Contínuo  
e Adaptação

clínicos, tornando os modelos mais robustos e atualizados ao longo do ciclo de vida do medicamento.



**Figura 2.** Etapas de utilização do Reinforcement Learning.

Fonte: <https://techvidvan.com/tutorials/reinforcement-learning/>.

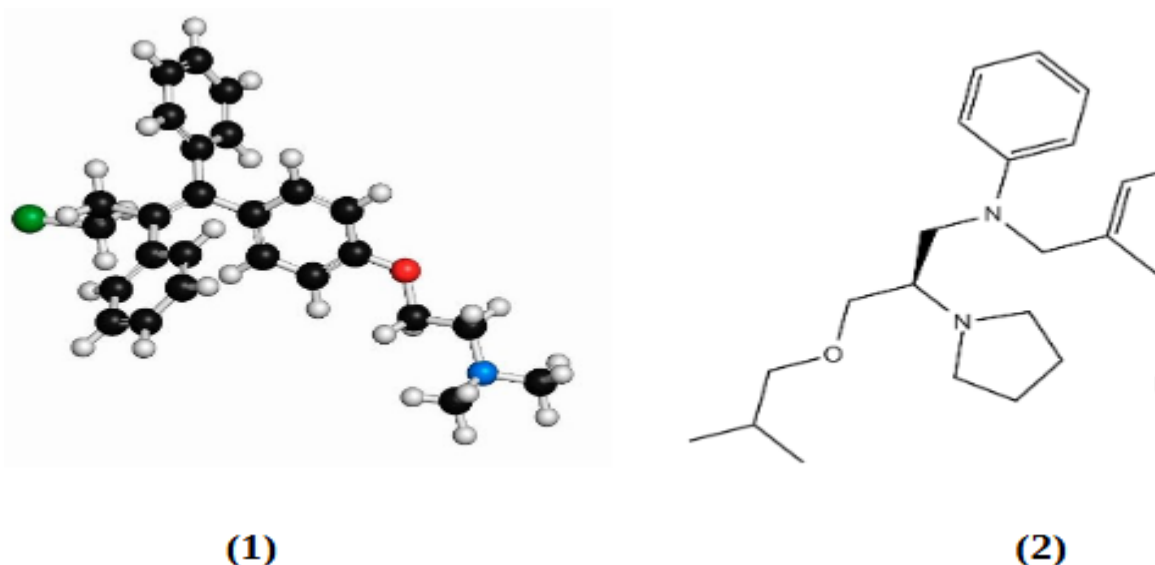
Outro pilar teórico relevante é a simulação de interações moleculares, tradicionalmente baseada em métodos de *docking* molecular e dinâmica molecular. A incorporação de IA nesses processos permite reduzir drasticamente o tempo computacional, além de aumentar a precisão na previsão de conformações e energias de ligação entre fármacos e alvos biológicos.

## 4.1. Aplicações Práticas do Deep Learning na Indústria Farmacêutica

### 4.1.1. Descoberta de Novos Medicamentos (drug Discovery)

Tradicionalmente, a descoberta de fármacos é um processo longo e dispendioso, podendo levar mais de 10 anos. Modelos de *Deep Learning* passaram a ser utilizados para **identificar moléculas promissoras** de forma mais rápida. A empresa Atomwise utiliza redes neurais profundas para prever a interação entre moléculas e proteínas-alvo. Em 2020, seus modelos identificaram compostos com potencial terapêutico contra o vírus Ebola e o SARS-CoV-2, reduzindo drasticamente o tempo necessário para triagem de moléculas em comparação aos métodos tradicionais. Os dois medicamentos identificados pela **Atomwise** em 2015 (Figura 3) como potenciais tratamentos para o vírus Ebola por meio de reposicionamento de fármacos via inteligência artificial são:

1. **Toremifene:** Um modulador seletivo do receptor de estrogênio, originalmente aprovado para o tratamento do câncer de mama avançado.
2. **Bepiridil:** Um bloqueador dos canais de cálcio, tradicionalmente utilizado para tratar a angina de peito.



**Figura 3.** Estruturas dos medicamentos Toremifene (1) e Bepridil (2).

Fonte: <https://www.glpbio.com/bepridil-hydrochloride.html>

A plataforma de IA da empresa, o **AtomNet**, analisou milhares de compostos existentes e previu que esses dois medicamentos poderiam impedir a entrada do vírus nas células humanas. Essa descoberta foi notável por ter sido realizada em poucos dias, um processo que normalmente levaria anos em laboratório.

#### 4.1.2. Design e Otimização de Moléculas (de Novo Drug Design)

O *Deep Learning* permite gerar novas moléculas com propriedades desejadas, como baixa toxicidade e alta eficácia terapêutica. A empresa Insilico Medicine emprega redes neurais generativas para criar moléculas inéditas. Em 2019, a empresa conseguiu identificar um novo candidato a fármaco para fibrose pulmonar em apenas 46 dias, desde a identificação do alvo biológico até a geração da molécula, um marco significativo na área.

## 4.1.3. Predição de Toxicidade e Segurança

A falha por toxicidade é uma das principais causas de insucesso no desenvolvimento de medicamentos. Modelos de *Deep Learning* ajudam a prever efeitos adversos ainda na fase pré-clínica. No desafio Tox21, organizado por instituições como o NIH e a FDA, modelos baseados em *Deep Learning* superaram métodos tradicionais na predição de toxicidade química, demonstrando maior precisão na identificação de compostos potencialmente perigosos.

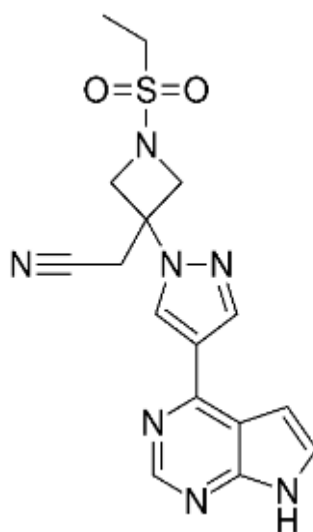
## 4.1.4. Ensaios Clínicos e Medicina Personalizada

O *Deep Learning* também é aplicado na análise de dados clínicos e genômicos para melhorar o desenho de ensaios clínicos e promover a medicina personalizada. O Watson Health foi utilizado para analisar dados genéticos e clínicos de pacientes oncológicos, auxiliando na escolha de terapias mais adequadas. Embora enfrente desafios práticos, o projeto demonstrou o potencial do *Deep Learning* para personalizar tratamentos e otimizar decisões clínicas.

## 4.1.5. Reposicionamento de Medicamentos (drug Repurposing)

O reposicionamento de fármacos consiste em encontrar novas indicações terapêuticas para medicamentos já aprovados. Durante a pandemia de COVID-19, a empresa Benevolent AI utilizou modelos de *Deep Learning* para analisar bases de dados biomédicos e identificou o baricitinibe como um possível tratamento para a doença, que posteriormente teve sua eficácia confirmada em estudos clínicos. A COVID-19 grave caracteriza-se por danos

pulmonares, que podem estar associados a concentrações muito elevadas de citocinas circulantes (tempestade de citocinas), incluindo a interleucina-6 (IL-6). O baricitinibe modula a produção de citocinas e, portanto, tem sido sugerido como um possível tratamento para a COVID-19 grave (Figura 4).



**Figura 4.** Estrutura química do baricitinibe.

Fonte: <https://www.cebm.net/covid-19/baricitinib/>

O baricitinibe é um medicamento de base sintética, alvo específico, inibidor da tirosina quinase e inibidor seletivo de Janus quinases - JAK1 e JAK2 (Figura 5). As enzimas Janus quinases (JAK) são responsáveis pela transdução dos sinais intracelulares, entre os receptores presentes na superfície celular, de diversas citocinas e fatores de crescimento envolvidos na hematopoiese, inflamação e função imune. As JAKs fosforilam e ativam transdutores de sinal e ativadores de transcrição (STAT) na via de sinalização intracelular, o que leva a uma ativação na expressão de genes no interior da célula. Por inibir parcialmente a atividade enzimática da JAK1 e JAK2, o



baricitinibe modula essas vias de sinalização, reduzindo a fosforilação e ativação dos STAT. Essas duas vias estão ligadas à hiper inflamação gerada pelo sistema imune como forma de defesa. Além disso, também reduzem a endocitose do SARS-CoV-2 e a liberação de novos mediadores pró-inflamatórios (TERRA et. al, 2012). Por apresentar ação inibitória menos potente sobre a JAK3, acredita-se que isso pode reduzir a imunossupressão ligada à inibição da pan-JAK, porém essa seletividade só é observada em ensaios enzimáticos (AEM, 2017).

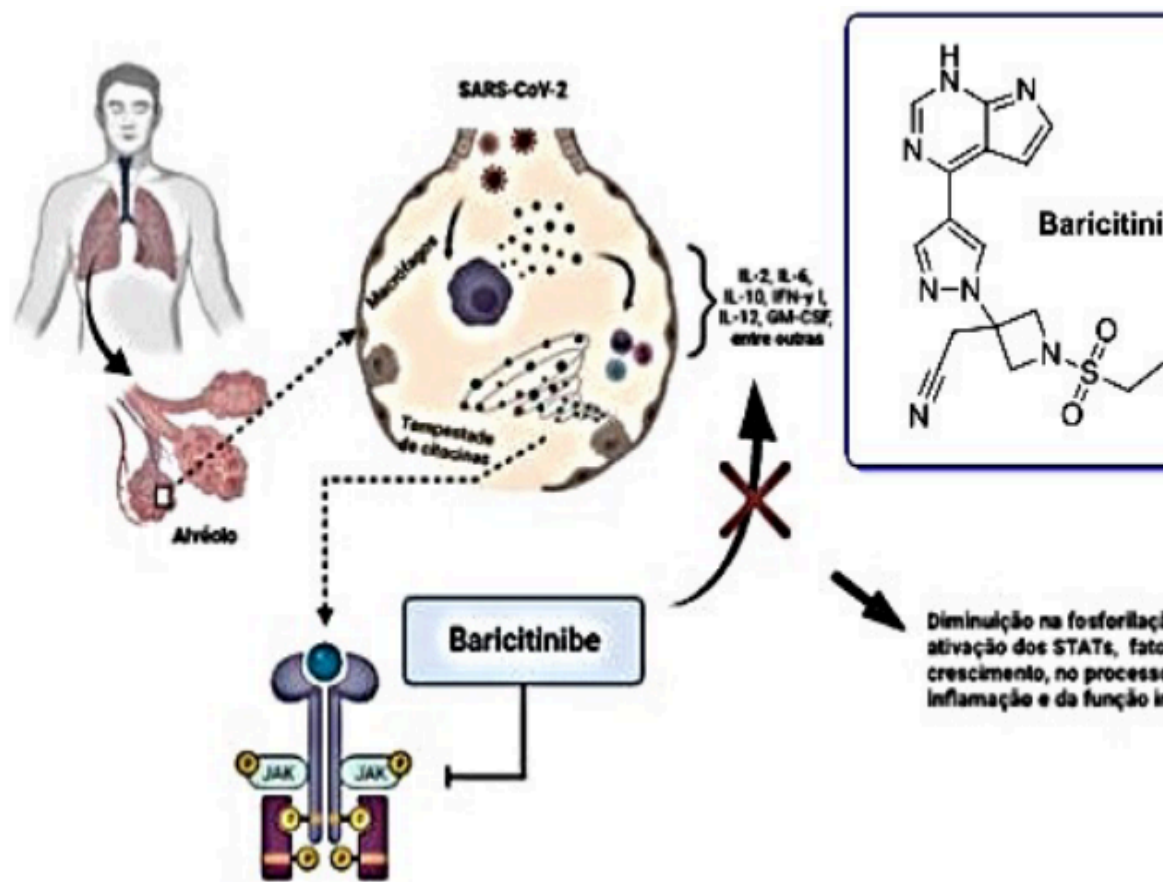


Figura 5. Mecanismo de ação do baricitinibe.

Fonte: Criado por biorender.com

## 4.1.6. Impactos e Benefícios para a Indústria Farmacêutica

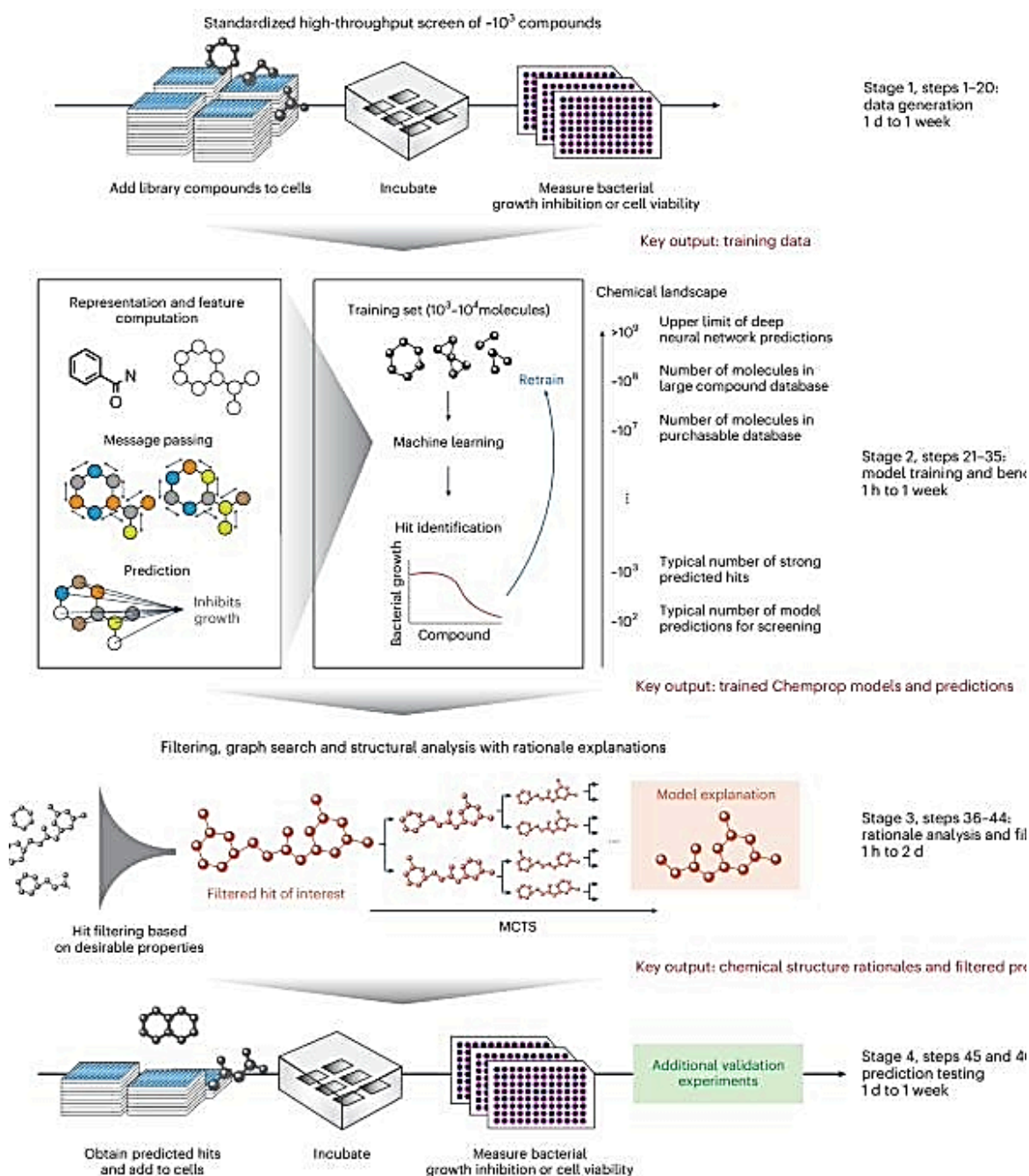
A aplicação do *Deep Learning* tem proporcionado:

- Redução do tempo de desenvolvimento de fármacos
- Diminuição de custos associados a testes experimentais
- Maior taxa de sucesso em fases clínicas
- Melhoria na segurança e eficácia dos medicamentos.

O *Deep Learning* representa uma ferramenta estratégica para a indústria farmacêutica moderna. Seus modelos avançados possibilitam a análise integrada de dados complexos, acelerando a descoberta de medicamentos e contribuindo para terapias mais seguras e personalizadas. Apesar dos desafios relacionados à interpretabilidade dos modelos e à qualidade dos dados, seu impacto positivo no setor é crescente e promissor.

Abordagens de aprendizado profundo (*Deep Learning*) têm sido cada vez mais aplicadas à descoberta de novos compostos químicos. Essas abordagens preditivas podem modelar compostos com precisão e aumentar as taxas de descoberta reais, mas geralmente são de natureza de caixa preta e não geram insights químicos específicos. O aprendizado profundo explicável visa "abrir" a caixa preta, fornecendo um raciocínio generalizável e compreensível para humanos para as previsões do modelo. Essas explicações podem aumentar a descoberta molecular, identificando classes estruturais de compostos com a atividade desejada em vez de compostos isolados. Além

disso, essas explicações podem orientar a geração de hipóteses e tornar a busca em grandes espaços químicos mais eficiente. A literatura indica uma plataforma de aprendizado profundo explicável que permite a exploração de vastos espaços químicos e a identificação das subestruturas químicas subjacentes à atividade prevista (WONG, et al., 2025). A plataforma se baseia no Chemprop, um pacote de software que implementa redes neurais gráficas como uma arquitetura de modelo de aprendizado profundo. Em contraste com abordagens semelhantes, as redes neurais gráficas têm se mostrado o estado da arte para a previsão de propriedades moleculares (Figura 6). Com foco na descoberta de classes estruturais de antibióticos, este protocolo fornece diretrizes para geração de dados experimentais, implementação de modelos e explicabilidade e avaliação de modelos. Este protocolo não exige conhecimento de programação nem hardware especializado e pode ser executado em apenas 1 a 2 semanas, desde a geração de dados até o teste das previsões do modelo. A plataforma pode ser amplamente aplicada para descobrir classes estruturais de outras pequenas moléculas, incluindo fármacos anticancerígenos, antivirais e senolíticos, bem como para descobrir classes estruturais de moléculas inorgânicas com propriedades físico-químicas desejadas (WONG, et al., 2025).



**Figura 6.** Plataforma utilizada nas abordagens de aprendizagem profunda (*Deep learning*) aplicadas na descoberta de novos compostos químicos.

Fonte: (WONG, et al., 2025)

- Este protocolo permite a descoberta computacional de compostos químicos usando uma arquitetura de aprendizado profundo chamada redes neurais gráficas, que, dada a estrutura química de qualquer composto, pode prever se o composto possui uma propriedade de interesse (WONG, et al., 2025).
- A plataforma aproveita o aprendizado profundo explicável para facilitar a identificação de classes estruturais de novos compostos. Essa abordagem orienta a geração de hipóteses e torna a busca em grandes espaços químicos mais eficiente em comparação com abordagens anteriores, que geralmente são de natureza opaca e não geram insights químicos específicos (WONG, et al., 2025).

Em relação ainda ao ***design de moléculas***, um estudo importante no campo é "Molecular de-novo design through deep reinforcement learning" por Olivecrona et al. (2017). O estudo foca no desenvolvimento do REINVENT, um sistema que combina aprendizado profundo com aprendizado por reforço para gerar moléculas quimicamente viáveis com propriedades desejadas.

O REINVENT demonstrou ser capaz de gerar moléculas não apenas novas, mas também com propriedades específicas desejadas. Este trabalho representou um avanço significativo na descoberta de fármacos, pois oferece uma ferramenta poderosa para acelerar o processo de design de moléculas, permitindo que pesquisadores explorem espaços químicos com maior eficiência e criatividade. Dessa forma, a inovação central está na maneira como o modelo é treinado. Em vez de apenas aprender com um conjunto de dados pré-existente, o REINVENT (Figura 7) é continuamente treinado e

ajustado através de um ciclo de feedback, onde as moléculas geradas são avaliadas por sua adequação às propriedades desejadas e o modelo é ajustado para melhorar sua capacidade de gerar moléculas que atendam a esses critérios.

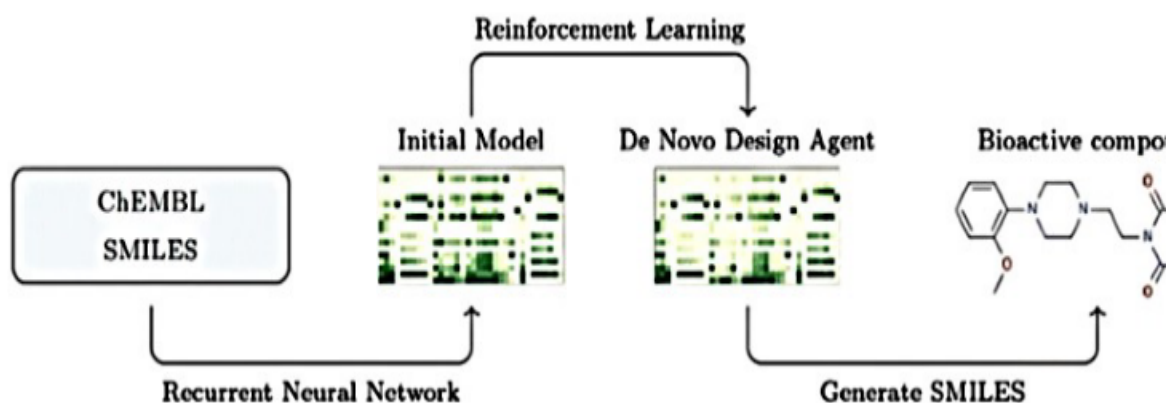


Figura 7. Descrição da atuação do modelo REINVENT.

Fonte: OLIVECRONA, M. et al., 2017.

A predição da afinidade de ligação entre drogas e alvos é complexa devido à natureza variável dos alvos biológicos e à diversidade estrutural dos compostos. Nesse contexto, um estudo notável nessa aplicação é o estudo "DeepDTA: deep drug–target binding affinity prediction" de Öztürk, Özgür e Ozkirimli (2018), publicado na revista "Bioinformatics". O estudo introduziu o DeepDTA, um modelo baseado em redes neurais profundas para prever a afinidade de ligação droga-alvo. O DeepDTA foi projetado para processar sequências de aminoácidos de proteínas-alvo e estruturas químicas de compostos, superando desafios com dados não estruturados e heterogêneos.

DeepDTA é uma estrutura baseada em aprendizado profundo projetada para prever a afinidade de ligação fármaco-alvo (DTA), que quantifica a força da

interação entre um fármaco e sua proteína-alvo. Ao contrário de modelos anteriores que tratavam a interação fármaco-alvo (DTI) como um problema de classificação binária (ligação ou não ligação), o DeepDTA a aborda como uma tarefa de regressão para fornecer um valor contínuo de afinidade de ligação. Arquitetura Central: O modelo utiliza Redes Neurais Convolucionais (CNNs) para aprender automaticamente representações a partir de dados brutos, sem engenharia manual de recursos. Representação de Entrada: utiliza apenas informações de sequência unidimensional; Fármacos: Representados por meio de strings SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System). Proteínas: representadas por meio de suas sequências de aminoácidos. Camadas de Processamento: o modelo consiste em dois blocos de CNN separados para proteínas e fármacos. Cada bloco normalmente usa três camadas convolucionais 1D para extrair características de alto nível. Cabeçalho de Predição: as características extraídas de ambos os blocos são concatenadas e alimentadas em três camadas totalmente conectadas para prever a pontuação de afinidade final, ou pontuações KIBA. Desempenho e Benchmarks Principais: o DeepDTA foi avaliado em dois importantes conjuntos de dados de benchmark: Davis e KIBA (ZAO et al., 2019). Métricas de Avaliação: ele usa principalmente o Índice de Concordância (CI) e o Erro Quadrático Médio (MSE) para medir a precisão da previsão. Comparação: Após seu lançamento em 2018, superou métodos tradicionais de aprendizado de máquina como KronRLS e SimBoost.

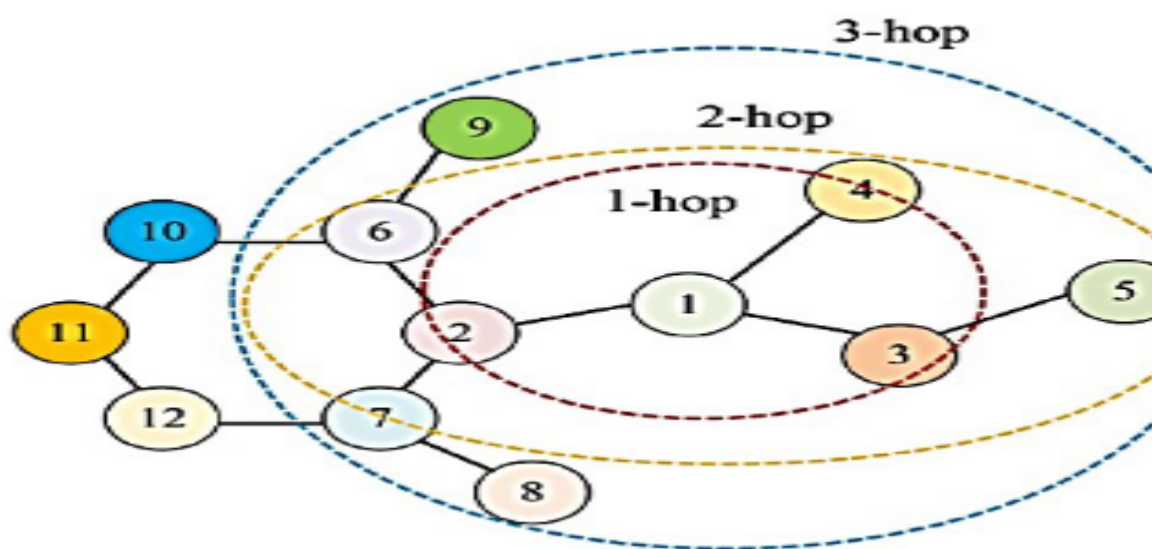
Os alvos de fármacos e proteínas afetam as funções fisiológicas e os efeitos metabólicos do organismo por meio de reações de ligação, e a previsão precisa das interações fármaco-alvo proteico é crucial para o

desenvolvimento de medicamentos. Para encurtar o ciclo de desenvolvimento de fármacos e reduzir custos, os métodos de aprendizado de máquina estão desempenhando um papel cada vez mais importante no campo das interações fármaco-alvo (HU et al. 2025). Em comparação com outros métodos, a afinidade do fármaco ao alvo baseada em regressão é mais representativa da capacidade de ligação. A previsão precisa da afinidade do fármaco ao alvo pode reduzir efetivamente o tempo e o custo do redirecionamento de fármacos e do desenvolvimento de novos medicamentos. HU et al. (2025), propõe-se um modelo de previsão de afinidade do fármaco ao alvo (WPGraphDTA) baseado em grafos de potência e word2vec. Neste modelo, as características moleculares do fármaco no módulo de grafo de potência são extraídas por uma rede neural gráfica, e então as características da proteína são obtidas pelo método Word2vec. O método Word2Vec é uma técnica de Inteligência Artificial que transforma palavras ou sequências químicas em vetores numéricos, permitindo que computadores entendam relações semânticas e estruturais complexas. O Word2Vec é adaptado para "ler" estruturas químicas como se fossem frases.

- Representação **SMILES (SPVec)**: Cadeias de caracteres SMILES (que descrevem estruturas moleculares) são convertidas em vetores (embeddings). Isso ajuda a identificar compostos similares que podem ter propriedades terapêuticas parecidas.
- Identificação **de Alvos**: O método auxilia na predição de interações entre drogas e proteínas (DTIs), acelerando a validação de novos alvos terapêuticos e reduzindo custos de laboratório. Atualmente, sua



aplicação na farmácia consolidou-se como um pilar para a medicina de precisão e a eficiência na pesquisa farmacêutica. Após a fusão das características, elas são inseridas nas três camadas totalmente conectadas para obter o valor de predição da afinidade do fármaco ao alvo. Foram realizados experimentos nos conjuntos de dados Davis e Kiba, e os resultados experimentais mostraram que o WPGraphDTA apresentou um bom desempenho de predição (HU et al. 2025). A representação gráfica molecular dos grafos de potência de 1 salto (1-hop), 2 saltos (2-hop) e 3 saltos (3-hop) com o nó 1 como o nó central é mostrada na Figura 8.

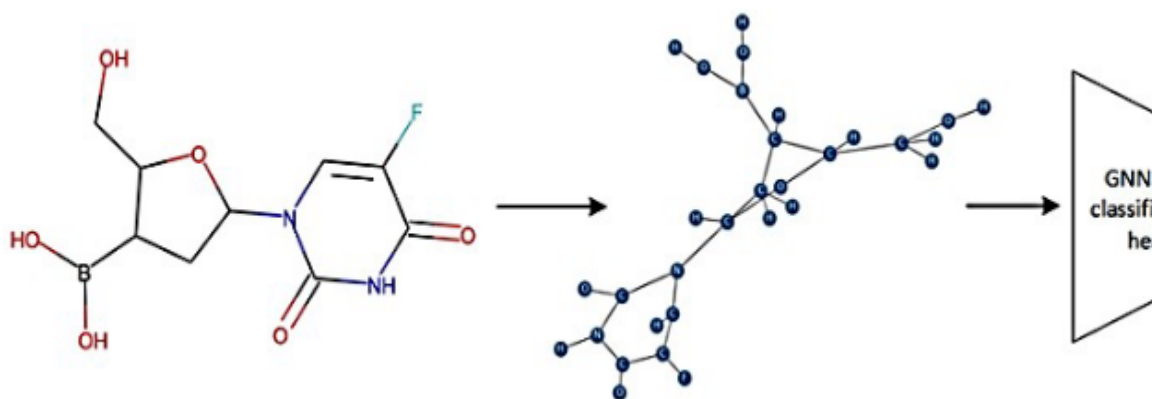


**Figura 8.** Representação gráfica molecular dos grafos de potência e nós.

Fonte: (HU et al. 2025).

Dessa forma, a modelagem direta da estrutura de moléculas como grafos, onde átomos e ligações são tratados como nós e arestas (Figura 9), respectivamente, pode ser utilizada para formar a rede. Esta representação

naturalmente incorpora a topologia da molécula e permite que o modelo aprenda representações de características de forma end-to-end, potencialmente capturando interações complexas sem a necessidade de engenharia de atributos pré-definida, mas também possibilitando a integração de atributos em níveis de nó e globais para aumento de sua robustez (SANCHEZ-LENGELING, B; 2021). Assim sendo, as Redes Neurais Gráficas (Graph Neural Networks - GNNs) apresentam uma abordagem promissora (Figura 8). Este tipo de modelagem, que tem ganhado relevância consistentemente nos últimos anos, não apenas em química computacional, mas como em outras aplicações (como processamento de imagens ou análises de redes sociais), possibilita a definição de suas camadas a partir de grafos (estruturas de dados que consistem em um conjunto de nós (ou vértices) e arestas que conectam pares desses nós) (SANCHEZ-LENGELING, B; 2021).



**Figura 9.** Representação de molécula na forma de grafo.

Fonte: LENG, DAWEI & GUO, JINJIANG & PAN, LURONG & LI, JIE & WANG, XINY (2021).

## 5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

# REVISTA TÓPICOS

---

<https://revistatopicos.com.br> – ISSN: 2965-6672

A Inteligência Artificial representa uma transformação paradigmática no *drug design*, consolidando-se na atualidade como uma ferramenta indispensável para a descoberta e desenvolvimento de novos medicamentos. Ao integrar grandes volumes de dados, algoritmos avançados e poder computacional, a IA permite acelerar processos, aumentar a precisão das previsões e reduzir significativamente os custos associados à pesquisa farmacêutica.

Apesar dos avanços, desafios permanecem, como a necessidade de dados de alta qualidade, a interpretabilidade dos modelos e questões éticas relacionadas ao uso de algoritmos automatizados na tomada de decisões científicas. Ainda assim, os resultados analisados indicam que a IA não apenas complementa, mas redefine as estratégias tradicionais de desenvolvimento de fármacos, apontando para um futuro mais rápido, eficiente e personalizado na terapia medicamentosa. Por fim, pode-se concluir que o uso de inteligência artificial no desenvolvimento de fármacos é um campo extremamente promissor e com um potencial de revolução na farmacologia imensurável. Pode-se observar que o conceito já é usado em diversas aplicações práticas, mas ainda apresenta desafios notáveis e potenciais de otimização.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AEM. **Agência Europeia de Medicamentos**. Olumiant, INN-baricitinib. Resumo das características do medicamento, 2017.

# REVISTA TÓPICOS

---

<https://revistatopicos.com.br> – ISSN: 2965-6672

ALONSO, T. R. et al. Uso Da Inteligência Artificial na medicina contemporânea - Uma revisão integrativa. **Revista de Epidemiologia e Saúde Pública**, [S. l.], v. 2, n. 1, 2024.

HU, Jing et al. Drug-target binding affinity prediction based on power graph and word2vec. **BMC Medical Genomics**, v. 18, n. Suppl 1, p. 9, 2025.

KIRKPATRICK, P. Artificial intelligence makes a splash in small-molecule drug discovery. **Biopharma Dealmakers**, 17 maio 2022.

LENG, DAWEI & GUO, JINJIANG & PAN, LURONG & LI, JIE & WANG, XINYU. **Enhance Information Propagation for Graph Neural Network by Heterogeneous Aggregations**, 2021.

OLIVECRONA, M. et al. Molecular de-novo design through deep reinforcement learning. **Journal of Cheminformatics**, v. 9, n. 1, 4 set. 2017.

ÖZTÜRK, H., ÖZGÜR, A., & OZKIRIMLI, E. DeepDTA: deep drug–target binding affinity prediction. **Bioinformatics**, 34(17), i821-i829, 2018.

PAUFERRO, Márcia Rodriguez Vázquez; PEREIRA, Luciane Lúcio. a Farmácia Hospitalar Sob Um Olhar Histórico. **Infarma-Ciências Farmacêuticas**, v. 22, n. 5/6, p. 24-31, 2010.

RODA, C. I. A inteligência artificial na descoberta de novos medicamentos. **Repositório da Universidade de Lisboa** [s.l: s.n.], 2022.

SANCHEZ-LENGELING, B. et al. A Gentle Introduction to Graph Neural Networks. **Distill**, v. 6, n. 8, 17 ago. 2021.

# REVISTA TÓPICOS

---

<https://revistatopicos.com.br> – ISSN: 2965-6672

TERRA, R. *et. al.* Efeito do exercício no sistema imune: resposta, adaptação e sinalização celular. **Revista Brasileira de Medicina Do Esporte**, v. 18, n. 3, p. 208–214, 2012.

WONG, Felix et al. An explainable deep learning platform for molecular discovery. **Nature Protocols**, v. 20, n. 4, p. 1020-1056, 2025.

ZHAO, Qichang et al. AttentionDTA: prediction of drug–target binding affinity using attention model. In: **2019 IEEE international conference on bioinformatics and biomedicine (BIBM)**. IEEE, 2019.

<sup>1</sup> Docente do Curso Superior de Farmácia da Universidade Brasil, *Campus* de Fernandópolis-SP. Doutor em Química pelo Instituto de Química UNESP, *Campus* de Araraquara-SP. E-mail: [kmininel17@gmail.com](mailto:kmininel17@gmail.com)

<sup>2</sup> Docente do Curso Superior de Farmácia da Universidade Brasil, *Campus* de Fernandópolis-SP. Mestre em Química pelo Instituto de Química UNESP, *Campus* de Araraquara-SP. E-mail: [silvana.mininel@ub.edu.br](mailto:silvana.mininel@ub.edu.br)