

# ESTUDO DA APLICAÇÃO DE APRENDIZADO DE MÁQUINA NA DESCOBERTA DE NOVOS COMPOSTOS TERAPÊUTICOS

Ezequias de Oliveira Cardoso<sup>1</sup>, Adeilson Marques da Silva Cardoso<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Estudante do Curso Técnico em Redes de Computadores Integrado ao Ensino Médio – IFTO. Bolsista do Programa de Iniciação Científica IFTO. e-mail: ezequias.cardoso@estudante.ifto.edu.br

<sup>2</sup>Docente do Curso Superior de Licenciatura em Computação – IFTO. Orientador(a). e-mail: adeilson@ifto.edu.br

## 1 INTRODUÇÃO

O processo de descoberta e desenvolvimento de novos fármacos é um dos maiores desafios da biomedicina moderna. Estima-se que a criação de um medicamento inovador possa levar de 12 a 15 anos, exigindo investimentos superiores a bilhões de dólares, desde a identificação do alvo biológico até a aprovação clínica (NOGUEIRA, 2024). Além disso, grande parte dos candidatos a fármacos fracassa em fases intermediárias, o que aumenta ainda mais os custos e o tempo do processo.

Nos últimos anos, a inteligência artificial (IA), em especial o aprendizado de máquina (AM), tem se destacado como ferramenta promissora para enfrentar esses desafios. Diferente das abordagens tradicionais, os algoritmos de AM são capazes de analisar grandes volumes de dados, identificar padrões complexos e gerar previsões mais rápidas e precisas. Essa capacidade vem sendo aplicada não apenas na área de diagnóstico médico, mas também em prognóstico clínico e na descoberta de novos compostos terapêuticos (GARZON; BARBOSA, 2023). Estudos recentes indicam que modelos de aprendizado profundo, como redes neurais convolucionais (CNNs) e autocodificadores variacionais (VAE), já são empregados para interpretar imagens médicas, prever evolução de doenças e propor moléculas bioativas inéditas. Essas aplicações reduzem etapas laboratoriais, aceleram a pesquisa e ampliam a chance de sucesso clínico (BARBOSA et al., 2023; NOGUEIRA, 2024).

Outro campo de impacto é a farmacogenômica, que estuda como variações genéticas influenciam a resposta a medicamentos. O uso de AM nessa área permite prever como diferentes perfis genômicos responderão a determinados fármacos, abrindo caminho para terapias individualizadas. Leal (2022) demonstrou essa aplicabilidade em estudos envolvendo o câncer de esôfago, destacando o potencial de personalização da oncologia de precisão. Por fim, a integração entre modelagem molecular e aprendizado de máquina já gerou resultados promissores em doenças infecciosas como malária e COVID-19, com novos compostos *in silico* sendo posteriormente validados em laboratório (NOGUEIRA, 2024).

Diante desse panorama, este estudo buscou revisar e analisar sistematicamente as aplicações do aprendizado de máquina na descoberta de novos compostos terapêuticos, destacando benefícios, limitações e perspectivas para a medicina de precisão.

## 2 OBJETIVO

Investigar e sistematizar as aplicações do aprendizado de máquina no processo de descoberta de novos compostos terapêuticos, identificando metodologias, resultados e tendências que possam contribuir para a pesquisa biomédica e para o desenvolvimento de fármacos mais eficazes e acessíveis.

## 3 MATERIAL E MÉTODOS

Este trabalho foi desenvolvido como uma revisão sistemática da literatura. Foram consultadas as bases de dados PubMed, Scopus, Google Scholar e Biblioteca Virtual em Saúde (BVS), utilizando descritores como *machine learning*, *drug discovery*, *artificial intelligence in medicine* e *pharmacogenomics*.

Os critérios de inclusão consideraram estudos:

- publicados nos últimos cinco anos (2019–2024);
- artigos revisados por pares ou trabalhos acadêmicos originais (teses/dissertações);
- disponíveis em texto completo;
- que aplicassem aprendizado de máquina diretamente em diagnóstico médico, prognóstico ou descoberta de novos medicamentos.

Foram excluídos artigos duplicados, textos sem revisão científica e estudos que não relacionassem IA e biomedicina. Após a triagem de 18 trabalhos, foram selecionados 6 estudos originais, priorizando os que apresentaram maior relevância metodológica e robustez de resultados. Os trabalhos selecionados foram categorizados em três eixos:

1. Aplicações em diagnóstico e prognóstico clínico;
2. Descoberta de medicamentos em big data (QSAR, triagem virtual e otimização ADMET);
3. Modelagem molecular, farmacogenômica e terapias personalizadas.

Os dados foram organizados em quadros comparativos, destacando algoritmos empregados, metodologias, vantagens, limitações e resultados. Também foram analisadas as tendências de publicações para verificar o crescimento do campo.

#### 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise mostrou que o aprendizado de máquina promoveu avanços em diferentes áreas:

a) **Diagnóstico e prognóstico médico** - Os algoritmos de aprendizado vêm sendo aplicados com destaque na radiologia e na oncologia. Redes neurais convolucionais (CNNs) alcançam alta precisão na detecção de tumores em exames de imagem. Além disso, modelos de prognóstico auxiliam médicos a estimar a progressão de doenças crônicas, personalizando o tratamento (GARZON; BARBOSA, 2023). Nessa mesma linha, Lima (2024) aplicou modelos de aprendizado profundo para diferenciar tumores pulmonares primários de metástases em exames de tomografia computadorizada, alcançando resultados consistentes e reforçando a utilidade do aprendizado de máquina em cenários clínicos complexos.

b) **Descoberta de fármacos e big data** - O crescimento das bases químicas e genômicas favoreceu o uso do AM em estratégias como QSAR, que correlaciona estruturas químicas com atividade biológica, e triagem virtual, que simula a interação de milhares de moléculas com alvos proteicos. Barbosa et al. (2023) identificaram que algoritmos de aprendizado são os mais eficazes nesse contexto, reduzindo tempo e custo das pesquisas.

c) **Farmacogenômica e medicina personalizada** - A dissertação de Leal (2022) mostrou a capacidade de redes neurais em prever respostas genéticas a 174 fármacos para câncer de esôfago. Essa abordagem aponta para uma era de tratamentos sob medida, nos quais o

perfil genético do paciente determina o medicamento mais eficaz e com menos efeitos colaterais.

d) **Modelagem molecular aplicada a doenças infecciosas** - Nogueira (2024) aplicou autocodificadores variacionais (VAE) para gerar milhares de moléculas inéditas contra malária e COVID-19. Entre os compostos propostos, alguns passaram por testes experimentais e mostraram atividade inibitória relevante. De forma complementar, Mioto (2023) aplicou algoritmos de aprendizado em dados clínicos de tuberculose, prevendo desfechos como abandono de tratamento e óbito. Esses exemplos evidenciam que o uso combinado de modelagem molecular, análise preditiva e aprendizado de máquina pode acelerar tanto a descoberta de moléculas bioativas quanto a gestão de doenças infecciosas em larga escala.

#### 4.1 Desafios identificados

Apesar dos resultados positivos, persistem limitações significativas:

- **qualidade dos dados:** inconsistências e falta de padronização comprometem a robustez dos modelos;
- **interpretação dos algoritmos:** muitos modelos de AM funcionam como “caixas-pretas”, dificultando a explicação clínica;
- **dependência de infraestrutura computacional avançada:** estudos como o de Lima (2024) mostram que o treinamento de redes profundas em imagens médicas exige hardware especializado, como GPUs de alto desempenho, o que limita a aplicação prática em instituições de saúde com recursos restritos.

Esses desafios apontam para a necessidade de políticas de governança de dados e desenvolvimento de modelos mais interpretáveis.

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A análise bibliográfica realizada demonstrou que essa abordagem vem se consolidando como eixo central no avanço da medicina computacional, confirmando que o objetivo proposto foi alcançado. Constatou-se que o aprendizado de máquina já não se restringe ao apoio em tarefas auxiliares, mas atua como ferramenta estratégica capaz de acelerar o desenvolvimento de medicamentos, reduzir custos e ampliar a eficácia de terapias. Nesse sentido, o campo da farmacogenômica se destaca, pois permite a personalização de tratamentos a partir de dados genômicos, contribuindo diretamente para a medicina de precisão.

Ao mesmo tempo, os estudos analisados reforçam que a integração entre modelagem molecular e técnicas de aprendizado pode gerar soluções inovadoras para doenças infecciosas e crônicas, indicando que o impacto do AM vai além do âmbito acadêmico, mas sim podendo alcançar a área social e econômica ao possibilitar terapias mais acessíveis e eficazes. No campo da farmacogenômica, os resultados revelam a importância de personalizar tratamentos com base em perfis genômicos, contribuindo para a consolidação da medicina de precisão. Ao mesmo tempo, aplicações em diagnóstico por imagem e prognóstico clínico reforçam que a IA já desempenha papel decisivo na prática médica.

Entretanto, algumas limitações continuam. A qualidade dos dados biomédicos permanece um desafio, visto que a falta de padronização compromete a reprodutibilidade dos modelos. Além disso, a interpretabilidade dos algoritmos, muitas vezes vistos como “caixas-pretas”, dificulta a aceitação clínica e a confiança de profissionais de saúde. Ainda assim, conclui-se que o aprendizado de máquina já se configura como um dos principais vetores de inovação na farmacologia contemporânea. Seu impacto vai além da descoberta de medicamentos, abrindo caminho para uma transformação estrutural na forma como a medicina compreende, diagnostica e trata doenças. A consolidação desse potencial dependerá da articulação entre ciência de dados, pesquisa experimental e políticas de regulamentação adequadas, garantindo que os benefícios alcancem de forma equitativa a sociedade.

## 6 AGRADECIMENTOS

Expresso minha gratidão ao meu orientador pelas contribuições e pelo incentivo constante em todas as etapas da pesquisa. Sua paciência e compromisso foram essenciais para o desenvolvimento deste trabalho.

## REFERÊNCIAS

BARBOSA, Luiz Carlos Bertucci; SILVA, Gustavo Moreira; FORTINI, Rosimere Miranda. Aprendizado de máquina e big data na descoberta de novos medicamentos: um mapeamento sistemático. **Brazilian Journal of Development**, v. 9, n. 8, p. 24562-24581, 2023.

GARZON, Newdon Ataíde; DE OLIVEIRA BARBOSA, Luiz Sergio. APRENDIZADO DE MÁQUINA NA MEDICINA: COMO ALGORITMOS DE APRENDIZADO DE MÁQUINA PODEM SER APLICADOS EM DIAGNÓSTICOS MÉDICOS, PROGNÓSTICOS E DESCOBERTA DE NOVOS TRATAMENTOS. **RECIMA21-Revista Científica Multidisciplinar-ISSN 2675-6218**, v. 4, n. 12, p. e4124708-e4124708, 2023.

LEAL, Gabriel Fernandes. **Aplicação de aprendizado de máquina para descobertas de farmacogenômica no tratamento do câncer de esôfago**. 2022. Dissertação de Mestrado. Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul.

LIMA, Lucas Lins de. **Redes neurais profundas e aprendizagem de máquina aplicados na diferenciação de tumores pulmonares primários de metástases em exames de tomografia computadorizada**. 2024. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

MIOTO, Ana Clara de Andrade. **Estudo e aplicações de técnicas de aprendizado de máquina na análise de desfechos inesperados de tuberculose**. 2023. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

NOGUEIRA, Victor Henrique Rabesquine. **Descoberta de novos inibidores para doenças infecciosas: estudos integrados de modelagem molecular e aprendizado de máquina para a malária e o COVID-19**. 2024. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.