

**TENDÊNCIAS DO USO DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA DESCOBERTA
DE FÁRMACOS A PARTIR DE PRODUTOS NATURAIS: UMA REVISÃO
BIBLIOMÉTRICA**

Ana Luisa Azevedo Araujo (analulu1605@gmail.com)

Beatriz Autullo Ramos (beatriz_autullo@ufrj.br)

Marisa Fernandes Mendes (marisamf@ufrj.br)

Produtos naturais obtidos de plantas, fungos e microrganismos têm sido amplamente empregados ao longo da história no tratamento de doenças infecciosas, inflamatórias, metabólicas, cardiovasculares, neoplásicas e transtornos psiquiátricos. Seus efeitos terapêuticos são oriundos dos metabólitos secundários, que apresentam elevado potencial farmacológico. Uma etapa essencial no processo de descoberta de fármacos baseados em produtos naturais é a seleção das fontes naturais para extração e isolamento de metabólitos bioativos com propriedades estruturais e biológicas de interesse. Apesar do uso crescente de técnicas modernas de extração, como micro-ondas assistida, ultrassom assistido, fluido supercrítico e líquido pressurizado, os resultados podem variar conforme o método e a matéria-prima. Nesse contexto, a integração de ferramentas de inteligência artificial, aprendizado de máquina e aprendizado profundo surge como alternativa promissora para otimizar essas etapas, reduzindo custos, tempo de desenvolvimento e variabilidade. Este estudo teve como objetivo realizar uma revisão bibliométrica para analisar a tendência do uso da inteligência artificial na produção e extração de moléculas bioativas destinadas ao desenvolvimento

de fitofármacos. A pesquisa foi conduzida na base Scopus, entre agosto e setembro de 2025, sem restrição temporal. Foram aplicadas combinações de palavras-chave, incluindo “artificial intelligence”, “machine learning”, “deep learning”, “phytopharmaceuticals”, “bioactive” e “drug discovery”. Os dados obtidos foram processados e analisados utilizando o software VOSviewer, que possibilitou a construção de mapas de redes bibliométricas e a visualização das relações entre autores, países e áreas de estudo. No total, foram identificadas 546 publicações, sendo a primeira datada de 1991. Observou-se um crescimento expressivo a partir de 2019, com o pico em 2025, totalizando 216 artigos. Os países líderes foram China, Índia e EUA, enquanto a principal área de pesquisa foi Bioquímica, Genética e Biologia Molecular, correspondendo a 16,7% das publicações. As principais aplicações identificadas incluem: mineração de dados e textos científicos, extração automática de informações químicas e farmacológicas de publicações e textos históricos, identificação e predição de produtos de biossintéticos microbianos, possibilitando a descoberta de novos metabólitos; predição de propriedades e atividades biológicas, identificação de proteínas-alvo e reposicionamento de fármacos, além do desenvolvimento de novos compostos, em que modelos generativos criam análogos sintéticos de produtos naturais com estruturas simplificadas, maior potência e melhor perfil farmacológico. Conclui-se que a inteligência artificial otimiza desde a identificação até o desenvolvimento de novos compostos inspirados em produtos naturais, representando uma tendência em expansão que pode redefinir o futuro da descoberta de medicamentos. Contudo, há desafios, como a limitação e o viés nos conjuntos de dados, a necessidade de representações moleculares específicas para produtos naturais e a integração entre modelos preditivos, síntese automatizada e validação experimental. Os resultados apresentados fornecem subsídios importantes para o embasamento científico e o direcionamento de futuras investigações sobre a aplicação da inteligência artificial no desenvolvimento de produtos naturais bioativos.

Palavras-chave: compostos bioativos; aprendizado de máquina; produtos naturais; design molecular; fitofármacos.