



Simpósio Integrado das Ciências Farmacêuticas

AVANÇOS QUE CONECTAM CIÊNCIA, CUIDADO E TECNOLOGIA

USO DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA DESCOBERTA E DESENVOLVIMENTO DE FÁRMACOS

Sofia Chagas da Costa¹; Aryadne Gabriela de Moraes Jordão¹; Vânia Chagas da Costa²

¹Universidade Federal de Pernambuco, UFPE; Recife/PE

²Universidade de Pernambuco, UPE; Recife/PE

Email do autor principal: sofia.chagas@ufpe.br

INTRODUÇÃO: Descoberta e desenvolvimento de fármacos são processos longos, caros e complexos. Para otimizá-los, a Inteligência Artificial (IA) surge como ferramenta promissora, utilizando aprendizado de máquina e modelos generativos para analisar grandes volumes de dados, acelerar decisões e identificar moléculas com potencial terapêutico. Embora reduza custos e tempo, a IA ainda enfrenta desafios como a qualidade dos dados e a validação experimental, nesse contexto compreender as evidências científicas sobre o uso da IA na descoberta e no desenvolvimento de fármacos é essencial para avaliar seu impacto e suas perspectivas na inovação farmacêutica. **OBJETIVOS:** Analisar e sintetizar as evidências científicas sobre o uso da inteligência artificial na descoberta e desenvolvimento de fármacos. **MATERIAL E MÉTODOS:** Trata-se de uma revisão integrativa da literatura estruturada em seis etapas, norteada pela questão: "Como a inteligência artificial tem contribuído para otimizar o desenvolvimento de fármacos?". Os critérios de inclusão adotados foram: artigos completos, de acesso gratuito, nos idiomas português e inglês, publicados nos últimos 5 anos. Os critérios de exclusão compreenderam artigos duplicados ou que não abordavam diretamente o tema proposto. A busca foi realizada em julho de 2026 nas bases de dados LILACS, SciELO e PubMed, utilizando o operador booleano AND para combinar os descritores em português e inglês: Inteligência artificial/ Artificial Intelligence; Indústria Farmacêutica/ Pharmaceutical Industry e Desenvolvimento de medicamentos/ Drug development. Foram identificados 20 artigos no total, todos na PubMed. Após a triagem por títulos e resumos, 15 estudos foram excluídos por não abordar o tema do estudo, restando cinco para leitura na íntegra. Destes, três foram incluídos na amostra final desta revisão. Todo o processo de seleção foi mapeado por meio do fluxograma PRISMA. **RESULTADOS E DISCUSSÕES:** Os resultados evidenciam que a IA otimiza o pipeline farmacêutico. Plataformas como PandaOmics e Chemistry42, que aceleram a identificação de alvos e o desenho preditivo de formulações, apontam para a sinergia entre o desenvolvimento de medicamentos informado por modelos (MIDD) e o aprendizado de máquina refina a modelagem farmacocinética. No mapeamento pré-clínico, destacam-se que algoritmos de aprendizado profundo reduzem custos e tempo ao preverem com alta precisão o perfil de absorção, distribuição, metabolismo, excreção e toxicidade (ADMET) de compostos. A translação clínica enfrenta elevado





atrito em ensaios biológicos. E a acurácia de modelos ADMET depende da qualidade de dados primários, sob risco de vieses algorítmicos. Mitigar esses gargalos exige um fluxo híbrido, onde a modelagem *in silico* convirja com a validação experimental, garantindo maior segurança antes das fases clínicas. **CONCLUSÃO:** O uso da IA transforma o desenvolvimento farmacêutico em um sistema unificado e orientado por dados. Contudo, surge um descompasso: enquanto a capacidade preditiva dos modelos avança rapidamente, a regulação e a interpretabilidade caminham em ritmo lento, o que limita a adoção clínica. Reduzir essa assimetria é o principal desafio atual para consolidar a inteligência artificial como uma ferramenta segura e confiável na inovação farmacêutica.

PALAVRAS-CHAVE: Inteligência Artificial. Indústria Farmacêutica. Desenvolvimento de medicamentos.

ÁREA TEMÁTICA: Tecnologia Farmacêutica e Desenvolvimento Industrial

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

HUANBUTTA, K. *et al.* Artificial intelligence-driven pharmaceutical industry: A paradigm shift in drug discovery, formulation development, manufacturing, quality control, and post-market surveillance. **European Journal of Pharmaceutical Sciences, Amsterdam**. v. 203, 106938, 1 dez. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ejps.2024.106938>. Acesso em: 12 jul. 2026.

RAMAN, K. *et al.* Integrating Model-Informed Drug Development With AI: A Synergistic Approach to Accelerating Pharmaceutical Innovation. **Clinical and Translational Science**, [S. l.], v. 18, n. 1, e70124, Jan. 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1111/cts.70124>. Acesso em: 12 jul. 2026.

SELVARAJ, C.; CHANDRA, I.; SINGH, S. K. Artificial intelligence and machine learning approaches for drug design: challenges and opportunities for the pharmaceutical industries. **Molecular Diversity**, [S. l.], v. 26, n. 3, p. 1893-1913, jun. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11030-021-10326-z>. Acesso em: 12 jul. 2026.

