

O DESAFIO DA VIGILÂNCIA EPIDEMIOLÓGICA FRENTE AO PROBLEMA DA RESISTÊNCIA ANTIMICROBIANA GLOBAL: EXPLORANDO O PAPEL DA BIOINFORMÁTICA ESTRUTURAL

Luís Henrique Féres Junqueira Filho¹.

¹Programa de Pós-Graduação em Genética e Bioquímica (PPGGB)

Universidade Federal de Uberlândia (UFU), Uberlândia, MG.

<http://lattes.cnpq.br/6839323444637486>

RESUMO: Existe uma preocupação crescente, em nível mundial, com os patógenos que apresentam resistência aos fármacos que são utilizados em seu combate, constituindo o que passou a ser conhecido como o problema da resistência antimicrobiana. Este problema tornou-se uma das maiores ameaças da atualidade, tanto à segurança sanitária quanto à saúde pública em escala global. Frente à crescente ineficácia da ação de fármacos contra patógenos resistentes, reportada em levantamentos realizados pela Organização Mundial da Saúde, as ferramentas computacionais de modelagem molecular e de visualização tridimensional, surgem como uma necessidade imediata para a pesquisa e desenvolvimento de novos medicamentos. A bioinformática estrutural e a inteligência artificial, utilizando-se de algoritmos especializados, se apresentam como aliadas indispensáveis no enfrentamento da resistência antimicrobiana. Essas tecnologias podem superar as atuais limitações do tempo necessário para a realização das triagens farmacológicas, e reduzir os custos envolvidos, ao produzirem modelos preditivos *in silico*. Conclui-se, neste estudo, que se torna crucial a integração definitiva entre as abordagens da bioinformática estrutural, a vigilância epidêmica e as políticas de saúde pública, no enfrentamento da atual crise global decorrente do problema da resistência antimicrobiana.

PALAVRAS-CHAVE: Bioinformática. Patógenos Resistentes. Saúde Pública.

THE CHALLENGE OF EPIDEMIOLOGICAL SURVEILLANCE IN RESPONSE TO GLOBAL AMR: EXPLORING THE ROLE OF STRUCTURAL BIOINFORMATICS

ABSTRACT: There is growing global concern regarding pathogens that exhibit resistance to the drugs used to combat them, a phenomenon known as the problem of antimicrobial resistance (AMR). This issue has become one of the greatest threats today to both health security and public health on a global scale. Given the increasing ineffectiveness of drugs against resistant pathogens, as reported in surveys conducted by the World

Health Organization, Computational tools for molecular modeling and three-dimensional visualization have become an immediate necessity for the research and development of new drugs. Structural bioinformatics and artificial intelligence, employing specialized algorithms, serve as indispensable allies in tackling antimicrobial resistance. These technologies can overcome current limitations regarding the time required for pharmacological screening and reduce associated costs by generating *in silico* predictive models. This study concludes that the definitive integration of structural bioinformatics approaches, epidemic surveillance, and public health policies is crucial to addressing the current global crisis stemming from antimicrobial resistance.

KEYWORDS: Bioinformatics. Resistant Pathogens. Public Health.

INTRODUÇÃO

Existe uma preocupação crescente, em nível mundial, com os patógenos que apresentam resistência aos fármacos que são utilizados em seu combate, constituindo o que passou a ser conhecido como o problema da resistência antimicrobiana. Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS) “A resistência antimicrobiana continua sendo um dos desafios mais significativos para a saúde e o desenvolvimento global, afetando humanos, animais, plantas, sistemas alimentares e o meio ambiente” (WHO, 2026a). Os principais fatos relacionados ao problema foram evidenciados em uma publicação recente:

- A resistência antimicrobiana (RAM) ocorre quando bactérias, vírus, fungos e parasitas não respondem aos medicamentos antimicrobianos. Como resultado, as infecções tornam-se difíceis ou impossíveis de tratar, aumentando o risco de propagação de doenças, quadros graves, incapacidade e morte;
- A RAM é uma grande ameaça à saúde global. Estima-se que a RAM bacteriana esteve associada a mais de 4,7 milhões de mortes globalmente em 2021;
- O uso indevido e excessivo de antimicrobianos está impulsionando o desenvolvimento e a disseminação de patógenos resistentes a medicamentos;
- A falta de acesso adequado a vacinas, diagnósticos e medicamentos apropriados, tanto novos quanto já existentes, também contribui para a crise;
- Aproximadamente 1 em cada 6 infecções bacterianas confirmadas em laboratório em todo o mundo foi resistente a antibióticos em 2023;
- O mundo enfrenta uma crise de pesquisa e desenvolvimento de antimicrobianos, com poucos medicamentos novos em fase de desenvolvimento (WHO, 2026a).

Assim, este problema tornou-se uma das maiores ameaças da atualidade, tanto à segurança sanitária quanto à saúde pública mundial. Dados do Sistema Global de Vigilância da Resistência Antimicrobiana (GLASS), divulgados pela OMS, dão conta que já nos encontramos em um cenário epidemiológico alarmante, no qual infecções comuns, anteriormente tratadas com sucesso, tornaram-se progressivamente refratárias, em função da crescente e generalizada ineficácia dos fármacos disponíveis para o combate dos patógenos bacterianos críticos (WHO, 2025).

A identificação desse estado de ineficácia terapêutica tem mobilizado ações por parte de países do mundo inteiro, com a coordenação geral e o estabelecimento de metas pela OMS, conforme o seu Plano de Ação Global contra a resistência antimicrobiana para o decênio 2026-2036, estabelecido em assembléia em maio deste ano, e estruturado em seu documento de divulgação. Deste relatório, destacam-se os trechos:

- A resistência aos antimicrobianos compromete a eficácia de tratamentos essenciais e representa uma ameaça crescente à saúde global, particularmente em contextos com capacidade limitada de diagnóstico e vigilância;
- O relatório analisa a resistência a 22 antibióticos em oito patógenos bacterianos prioritários e diversos tipos de infecção, destacando uma resistência generalizada e crescente - especialmente entre bactérias Gram-negativas - e variações regionais significativas;
- Os dados mostram que, em nível global, aproximadamente uma em cada seis infecções é resistente a antibióticos, com taxas mais elevadas em infecções do trato urinário e da corrente sanguínea, além de um impacto desproporcional em países de baixa e média renda (WHO, 2026b).

Um desafio de tal magnitude exige uma transição urgente da epidemiologia convencional, centrada principalmente em dados demográficos e estatísticos, para uma epidemiologia de precisão, aplicando abordagens genômica e molecular como recursos fundamentais da vigilância de saúde pública contemporânea.

Este estudo propõe-se a analisar como as ferramentas computacionais e de inteligência artificial, associadas ao desenvolvimento de fármacos, podem acelerar o cumprimento das diretrizes propostas pela OMS, contribuindo para a elucidação dos mecanismos atuantes da resistência antimicrobiana e o desenvolvimento racional de novas moléculas capazes de reverter o avanço dessa ameaça global.

OBJETIVO

Analisar criticamente a utilização da bioinformática estrutural e das ferramentas computacionais associadas à descoberta de novos fármacos, e o seu papel como recursos

estratégicos para a vigilância epidemiológica, no contexto do plano de ações da OMS para o enfrentamento do problema da resistência antimicrobiana.

METODOLOGIA

O estudo caracteriza-se como uma pesquisa teórica, de abordagem reflexiva, explorando-se os pontos de intersecção entre os desafios da vigilância epidemiológica, uso das ferramentas de Bioinformática Estrutural e políticas de saúde global relacionadas ao tema da resistência antimicrobiana, a partir do levantamento de literatura científica e documental disponível, aderentes ao tema do estudo.

Adotaram-se, individualmente ou em combinações pertinentes, os seguintes descritores: “antimicrobial resistance”, “bioinformatics”, “drug discovery”, “epidemiological surveillance” e “World Health Organization”, em buscas realizadas em bases de dados indexadas, portais de periódicos e sítios institucionais, priorizando-se a literatura mais recente, em particular aquela produzida nos últimos cinco anos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Procurou-se elaborar uma reflexão crítica acerca do problema da resistência antimicrobiana, destacando-se a importância da adoção de ferramentas computacionais, como o uso da inteligência artificial, bem como o uso da abordagem da bioinformática estrutural, que permitam mitigar as consequências da RAM, no cenário de saúde pública global, conforme as previsões da OMS (WHO, 2026b) e também considerando-se a disponibilidade e facilidade do uso da tecnologia por países de baixa e média renda, conforme destacadas em seu relatório sobre integração e igualdade nos planos nacionais de combate à RAM (WHO, 2026c).

A ineficácia crescente dos antibióticos tradicionais impõe um desafio epidemiológico crítico: a taxa de evolução dos determinantes de resistência bacteriana supera historicamente o tempo e o custo do desenvolvimento de novos fármacos pela indústria convencional (SALAM *et al.*, 2023).

A aplicação e o potencial de uso da inteligência artificial no enfrentamento da RAM tem sido destaque em diversos estudos, como em Bhattacharya *et al.* (2026) e Ibrahim *et al.* (2025). Já o uso da genômica (BAKER *et al.*, 2023) e a descoberta de novos fármacos (PIPADA *et al.*, 2026; OCANA *et al.*, 2025), ressaltam a importância da bioinformática estrutural para a vigilância epidemiológica, diante da ameaça global representada pela RAM (SALAM *et al.*, 2023).

Diferente da bioinformática convencional, cujos trabalhos iniciais estavam voltados ao sequenciamento linear de nucleotídeos e aminoácidos, a bioinformática estrutural tem seu foco voltado para o estudo, predição e visualização de estruturas tridimensionais (3D)

de moléculas biológicas de interesse, como as proteínas, que desempenham papel chave no funcionamento dos organismos. De forma resumida “A bioinformática estrutural pode ser descrita como uma abordagem que auxilia a obter informações biológicas a partir de estruturas de proteínas” (CHANDRA *et al.*, 2010). Dentre suas aplicações, destacam-se:

- (1) Predição de estruturas 3D: o uso de algoritmos computacionais e modelagem para antecipar o formato tridimensional de uma proteína a partir de sua sequência primária;
- (2) Estudo de interações moleculares: a análise sobre como as macromoléculas se ligam a outras moléculas, íons, ácidos nucleicos ou fármacos; e
- (3) Desenvolvimento de novos fármacos: o emprego de técnicas de *docking* e triagem virtual para projetar medicamentos de forma racional (CHANDRA *et al.*, 2010).

O uso da bioinformática, de modo geral, representa forte apelo no âmbito da RAM (SEOANE; BOU, 2021), e pode ser priorizada a partir do uso de ferramentas como o PyMOL e o *docking* molecular, por exemplo. O PyMOL é um software para visualização gráfica. Ele traduz arquivos contendo dados em modelos 3D interativos e bastante detalhados. O *docking* molecular é uma técnica de simulação computacional utilizada para prever como duas moléculas se encaixam e se ligam. Costuma envolver uma proteína ou enzima ligada a determinada doença (receptor) e uma molécula-alvo, candidata ao novo fármaco (ligante). Um pesquisador pode utilizar o software de *docking* para testar milhares de moléculas e procurar um alvo viável para um medicamento específico (NIVATYA *et al.*, 2025).

No nível molecular, a literatura consagrou a inteligência artificial como o propulsor da biologia estrutural. O advento da ferramenta conhecida como AlphaFold permitiu decodificar a estrutura tridimensional de proteínas bacterianas mutantes complexas em minutos, eliminando a lentidão das técnicas convencionais de laboratório, como o uso da cristalografia de raios-X (ABRAMSON *et al.*, 2024). A capacidade de antecipar a estrutura tridimensional dessas moléculas tem o potencial de redefinir a vigilância epidemiológica, por meio da transformação dos dados obtidos pelo sequenciamento genômico em alvos terapêuticos passíveis de validação.

A análise da literatura aqui revisada indica que a disponibilidade tecnológica das ferramentas de bioinformática estrutural, com sua velocidade e precisão computacional, modificou profundamente os métodos utilizados para interpretar a resistência antimicrobiana.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Analisou-se criticamente a literatura levantada, com a coleta de evidências que enfatizam o papel da bioinformática estrutural e da inteligência artificial como ferramentas potenciais no auxílio do cumprimento das metas da OMS, em relação ao problema da resistência antimicrobiana. Elaborou-se reflexão, correlacionando a ineficácia dos

fármacos atuais com as vantagens proporcionadas pela modelagem molecular e análises computacionais. Verificou-se o papel preditivo de ferramentas baseadas em biologia estrutural na compreensão das estruturas de proteínas presentes em patógenos, bem como dos novos determinantes de resistência antimicrobiana.

Verificou-se ainda a aplicação do *docking* molecular como sendo uma estratégia fundamental para a testagem computacional de novos compostos com fins medicinais e também para a compreensão dos mecanismos moleculares de patógenos resistentes aos antibióticos atuais. Ferramentas como o *docking* molecular e o AlphaFold demonstram que os algoritmos computacionais especializados conseguem prever o comportamento de resistência antimicrobiana, analisando os dados obtidos por sequenciamento genômico.

A análise conduzida neste estudo evidencia que o enfrentamento do problema da resistência antimicrobiana requer uma mudança de abordagem, em relação ao modelo tradicional de descoberta de fármacos, lento e custoso, e cuja eficácia já não é capaz de acompanhar a rápida e imprevisível evolução dos patógenos resistentes aos medicamentos antimicrobianos.

A bioinformática estrutural e a inteligência artificial se apresentam como aliadas indispensáveis no enfrentamento da RAM. Essas tecnologias podem superar as atuais limitações do tempo necessário para a realização das triagens farmacológicas, e reduzir os custos envolvidos, ao produzirem modelos preditivos *in silico*. Conclui-se, dessa forma, que se torna crucial a integração definitiva entre as abordagens da bioinformática estrutural, a vigilância epidêmica e as políticas de saúde pública, no enfrentamento da atual crise global decorrente do problema da resistência antimicrobiana.

REFERÊNCIAS

ABRAMSON, Josh *et al.* Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. **Nature**, v. 630, p. 493–500, jun. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-024-07487-w>

BAKER, Kate *et al.* Genomics for public health and international surveillance of antimicrobial resistance. **The Lancet Microbe**, 14 nov. 2023.

DOI: [https://doi.org/10.1016/S2666-5247\(23\)00283-5](https://doi.org/10.1016/S2666-5247(23)00283-5)

BHATTACHARYA, Riya *et al.* Artificial Intelligence for sustainable solutions in combating antimicrobial resistance through data driven health innovations. **Discover Public Health**, v. 23, n. 10, 2026. DOI: <https://doi.org/10.1186/s12982-025-01302-1>

CHANDRA, Nagasuma; ANAND, Praveen; YETURU, Kalidas. Structural Bioinformatics: deriving biological insights from protein structures. **Interdisciplinary Sciences: Computational Life Sciences**, v. 2, n. 4, p. 347-366, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12539-010-0045-6>

IBRAHIM, Adamu M. *et al.* Harnessing Artificial Intelligence for predictive modeling in combating antimicrobial resistance: a call for integration and innovation. **BMC Artificial Intelligence**, v. 1, n.1, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1186/s44398-025-00001-w>

NIVATYA, Harendar *et al.* Assessing molecular docking tools: understanding drug discovery and design. **Future Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 11, n. 111, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1186/s43094-025-00862-y>

OCANA, Alberto *et al.* Integrating Artificial Intelligence in drug discovery and early drug development: a transformative approach. **Biomarker Research**, v. 13, 45, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1186/s40364-025-00758-2>

PIPADA, Vrushab S. *et al.* Artificial Intelligence accelerates drug discovery and enhances commercialization efficiency. **Discover Artificial Intelligence**, v. 6, 173, 2026. DOI: <https://doi.org/10.1007/s44163-026-00859-3>

SALAM, Abdus *et al.* Antimicrobial Resistance: a growing serious threat for global public health. **Healthcare**, v. 11, 1946, 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/healthcare11131946>

SEOANE, Alejandro; BOU, Germán. Bioinformatics approaches to the study of antimicrobial resistance. **Rev Esp Quimioter**, n. 34 (Supl. 1), p. 15-17, 2021.

DOI: <https://doi.org/10.37201/req/s01.04.2021>

World Health Organization (WHO). **Antimicrobial Resistance: Global Antibiotic Resistance Surveillance Report 2025 - WHO Global Antimicrobial Resistance and Use Surveillance System (GLASS) - Summary**. Geneva: WHO, 2025. DOI: <https://doi.org/10.2471/B09585>

World Health Organization (WHO). **Antimicrobial Resistance**. Geneva: WHO, 2026a. Disponível em: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/antimicrobial-resistance>. Acesso em: 29 ago. 2026.

World Health Organization (WHO). **Global Action Plan on Antimicrobial Resistance 2026-2036**. Draft updated. Document A79/5 Add.2. Geneva: WHO, 2026b. Disponível em: https://apps.who.int/gb/ebwha/pdf_files/WHA79/A79_5Add2-en.pdf. Acesso em: 29 ago. 2026.

World Health Organization (WHO). **Integration of Equity into National Action Plans on Antimicrobial Resistance: Guidance to Complement the People-Centred Approach**. Geneva: WHO, 2026c. ISBN 978-92-4-012389-2.