

RESUMO - PRÁTICAS INOVADORAS - INOVAÇÃO E TECNOLOGIA

BAMBU ENTERPRISE: DESENVOLVIMENTO DE UMA PLATAFORMA WEB PARA EXECUÇÃO DE MODELOS QSAR E DESCOBERTA DE DROGAS ANTI-CÂNCER

Lucas Mocellin Goulart (lmocellingoulart@gmail.com)

Eduardo Grutzmann Furtado (grutzmann9@gmail.com)

Darling De Andrade Lourenço (darlinglourenco@gmail.com)

Isadora Leitzke Guidotti (leitzke.gi@gmail.com)

Frederico Schmitt Kremer (fred.s.kremer@gmail.com)

O processo de descoberta de fármacos, conhecido como Drug Discovery Pipeline (DDP), é tradicionalmente trabalhoso e oneroso, envolvendo a triagem de milhares de compostos orgânicos em busca de propriedades biológicas específicas. Para otimizar esse processo, métodos computacionais, como o Virtual High Throughput Screening (vHTS), são aplicados, acelerando a triagem automatizada de bibliotecas moleculares e proporcionando maior segurança no desenvolvimento de fármacos (1). Uma dessas técnicas para triagem é o uso de modelos Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR), que são baseados na estrutura das biomoléculas e preveem propriedades como a atividade biológica. Essas técnicas permitem reduzir o número de moléculas testadas in vitro e in silico, economizando tempo e recursos. Além disso, os modelos QSAR são desenvolvidos a partir de dados prévios e podem ser treinados com algoritmos de Machine Learning (ML). Nesse contexto, o Bambu é uma ferramenta de linha de comando que gera automaticamente modelos

QSAR a partir de dados de bioensaios, utilizando pacotes de quimioinformática e AutoML (2). Atualmente, o Bambu permite a criação, execução e compartilhamento de modelos QSAR voltados à descoberta de fármacos anticâncer. Contudo, sua complexidade técnica restringe o uso a usuários com conhecimento avançado em uso de linha de comando. Para superar essa limitação, o objetivo deste trabalho é apresentar o desenvolvimento e a implementação da plataforma web Bambu Enterprise, uma plataforma que oferece uma interface gráfica intuitiva. O desenvolvimento da plataforma foi estruturado em duas frentes: backend e frontend. No backend, utilizou-se a linguagem Python com o framework Flask para gerenciar o processamento de dados e a integração com a ferramenta Bambu. No frontend, ReactJS, foi empregado para criar uma interface amigável ao usuário, permitindo o upload de moléculas, a criação de projetos e a execução de jobs. Por fim, foram implementados sistemas de autenticação e segurança robustos para proteger as rotas e os dados dos usuários. A interface oferece uma experiência simplificada, e funcionalidades como login, registro e compartilhamento de resultados estão operacionais. A plataforma está sendo avaliada quanto à usabilidade e desempenho, com o objetivo de expandir suas funcionalidades e torná-la uma ferramenta colaborativa robusta para o desenvolvimento de novos fármacos. Desenvolvida com o objetivo de otimizar o processo de descoberta de novas moléculas com potencial terapêutico específico para doenças, a aplicação Bambu reduz os custos iniciais (early discovery) e o tempo de desenvolvimento (de 3 a 4 anos para alguns meses). A partir da criação de modelos QSAR, o Bambu indica o percentual de inibição de alvos moleculares específicos por moléculas testadas, estando atualmente treinado para identificar moléculas anticâncer para melanoma. Com a Bambu Enterprise, o acesso ao Bambu é democratizado, permitindo que usuários com diferentes níveis de conhecimento técnico gerenciem e compartilhem projetos com suas equipes. Assim, a principal contribuição da Bambu Enterprise é ampliar o uso de ferramentas avançadas de bioinformática para descoberta de fármacos, facilitando o acesso a pesquisadores e profissionais sem conhecimento técnico avançado. No cenário brasileiro, a Bambu Enterprise representa um avanço significativo ao reduzir barreiras técnicas e financeiras na descoberta de fármacos por meio de modelos QSAR, especialmente considerando que a maioria dos softwares disponíveis para essa finalidade é comercializada em dólar. Com uma estratégia de modelo freemium e grande potencial de expansão, a Bambu Enterprise está bem posicionada para se consolidar como

uma ferramenta essencial no pipeline de descoberta de fármacos, tornando acessíveis tecnologias de ponta a pesquisadores e profissionais do país.

Palavras-chave: aprendizado de máquina; descoberta de drogas; triagem de medicamento antitumoral.