

DESENVOLVIMENTO DE UMA PLATAFORMA DE DOCKING MOLECULAR COM UMA INTERFACE SIMPLES E INTUITIVA

EDUARDO GRUTZMANN FURTADO¹; FREDERICO SCHMITT KREMER²

¹Universidade Federal de Pelotas– grutzmann9@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas– fred.s.kremer@gmail.com

[OBJ]

1. DESCRIÇÃO DA INOVAÇÃO

O projeto trata-se do desenvolvimento de um aplicativo de docking molecular que busca simplificar o uso dessa técnica por meio de uma interface gráfica amigável, simples e intuitiva. Utilizando tecnologias como JavaScript, Python, Electron, React, 3Dmol, RDKit e Bootstrap, o aplicativo integra ferramentas renomadas de docking, como AutoDock Vina, para oferecer uma solução acessível a um público mais amplo. A interface simples guia o usuário através de cada etapa do processo de docking, desde a preparação das moléculas até a análise dos resultados, permitindo a importação de diferentes formatos de arquivos moleculares.

O principal diferencial desta inovação é a interface simplificada que democratiza o uso do docking molecular, tradicionalmente restrito a usuários com conhecimentos avançados em bioinformática e química computacional. A combinação da interface simples, visualização interativa de estruturas moleculares e compatibilidade com múltiplos formatos de arquivos torna o aplicativo único, em comparação com outras soluções que exigem um maior conhecimento prévio, como as que usam linhas de comando ou possuem interfaces complexas (MORRIS; LIM-WILBY, 2008; KROEMER, 2007).

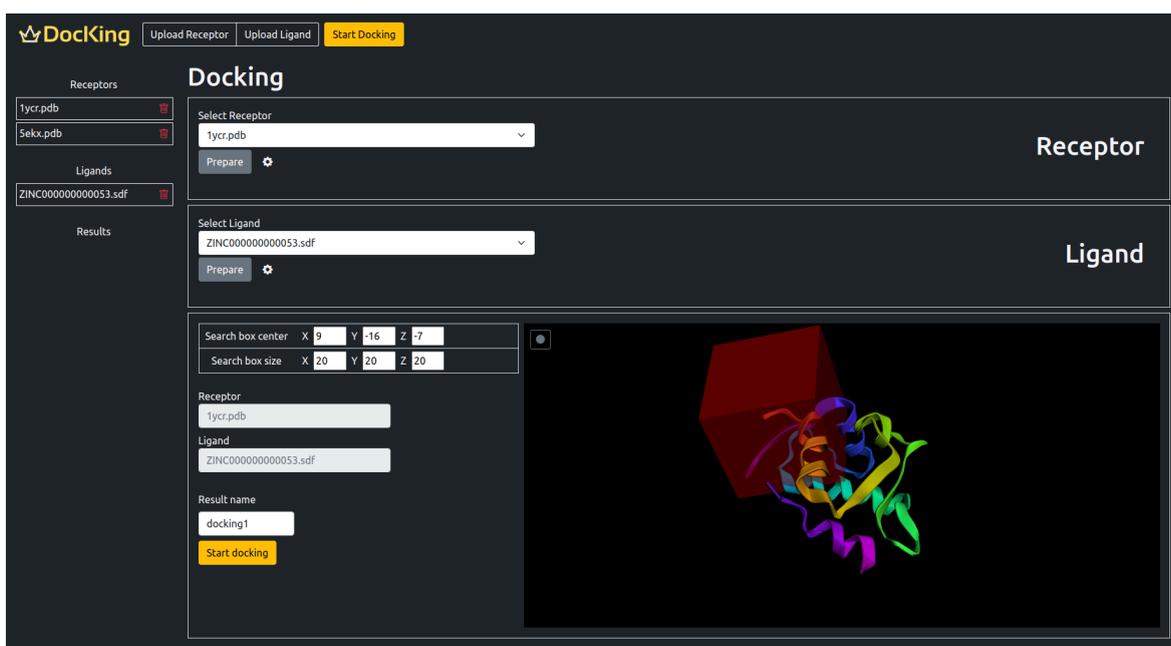


Figura 1. Tela de docking com uma molécula selecionada e com box ajustada

2. ANÁLISE DE MERCADO

O público-alvo baseia-se em estudantes de graduação e pós-graduação em biotecnologia e áreas afins, bem como pesquisadores na área, em diferentes níveis de experiência. A ferramenta foi pensada em usuários com pouca ou nenhuma experiência prévia com docking molecular e que necessitam de uma ferramenta que facilite a compreensão e execução do processo.

Atualmente, os principais concorrentes no mercado de softwares são o AutoDock, DOCK, SwissDock e Glide. Contudo, esses programas frequentemente possuem interfaces complexas ou que dependem de linhas de comando, o que limita sua acessibilidade para usuários inexperientes. O nosso aplicativo se diferencia por sua interface intuitiva e facilidade de uso.

O mercado de software para biotecnologia e principalmente para drug discovery está em crescimento, impulsionado pela necessidade constante de novas ferramentas que acelerem o processo de descoberta de medicamentos. Com uma abordagem centrada no usuário, nosso aplicativo tem um grande potencial para capturar uma parcela significativa deste mercado, especialmente entre instituições educacionais, laboratórios de pesquisa e até empresas do ramo.

3. ESTRATÉGIA DE DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO

O aplicativo será oferecido em um modelo freemium, onde as funcionalidades básicas estarão disponíveis gratuitamente para estudantes, enquanto recursos avançados, suporte premium e acesso a empresas e laboratórios serão oferecidos por meio de assinaturas. A distribuição será feita via download online, e parcerias com universidades e centros de pesquisa serão exploradas para maior disseminação.

Estamos em processo de registro da propriedade intelectual do software, incluindo o código-fonte e o design da interface.

Etapas de Desenvolvimento:

1. **Protótipo Inicial:** Desenvolvimento e testes internos.
2. **Teste de Usuário:** Realização de estudos de usabilidade com o público-alvo.
3. **Ajustes e Refinamentos:** Implementação de melhorias baseadas no feedback.
4. **Lançamento Beta:** Distribuição para um grupo restrito de usuários para testes finais.
5. **Lançamento Oficial:** Disponibilização pública do aplicativo.

Atualmente, o projeto está no nível de maturidade tecnológica 5 (demonstração de um protótipo em ambiente relevante).

Os principais desafios incluem garantir a precisão dos resultados de docking e a adaptação contínua do software às necessidades dos usuários. Planejamos mitigar esses riscos com testes rigorosos e um ciclo de desenvolvimento ágil, que permita rápidas atualizações e melhorias.

4. RESULTADOS ESPERADOS E IMPACTO

O aplicativo democratiza o acesso à técnica de docking molecular, promovendo a inclusão educacional e potencialmente acelerando a descoberta de novos medicamentos. Isso pode ter um impacto significativo na saúde pública e no avanço científico.

Esperamos alcançar um crescimento gradual na base de usuários, com receitas provenientes de assinaturas premium e parcerias. Projeções iniciais indicam um retorno positivo dentro dos primeiros dois anos de operação.

A inovação tem potencial para evoluir incorporando novas funcionalidades, como integração com inteligência artificial para previsões mais precisas e suporte para um maior número de algoritmos de docking. Planejamos expandir para mercados internacionais e explorar colaborações com indústrias farmacêuticas.

5. CONCLUSÕES

O desenvolvimento deste aplicativo de docking molecular com uma interface simples e intuitiva representa um avanço significativo na acessibilidade e eficiência do processo de descoberta de medicamentos. Com um forte potencial de mercado e impacto positivo na pesquisa científica, o projeto está bem posicionado para se tornar uma ferramenta essencial na biotecnologia.

Convidamos investidores, instituições educacionais e laboratórios de pesquisa a se envolverem com nosso projeto. Juntos, podemos democratizar a biotecnologia e acelerar a descoberta de novos tratamentos eficazes.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGARWAL, S.; MEHROTRA, R. **An overview of Molecular Docking**. 2016.

FAN, J.; FU, A.; ZHANG, L. **Progress in molecular docking**. *Quantitative Biology*, v. 7, n. 2, p. 83–89, 1 jun. 2019.

JIMÉNEZ-LUNA, J.; GRISONI, F.; SCHNEIDER, G. **Drug discovery with explainable artificial intelligence**. *Nature Machine Intelligence*, v. 2, n. 10, p. 573–584, out. 2020.

KROEMER, R. T. **Structure-based drug design: docking and scoring**. *Current Protein & Peptide Science*, v. 8, n. 4, p. 312–328, ago. 2007.

MORRIS, G. M.; LIM-WILBY, M. **Molecular docking**. *Methods in Molecular Biology* (Clifton, N.J.), v. 443, p. 365–382, 2008.

PAGADALA, N. S.; SYED, K.; TUSZYNSKI, J. **Software for molecular docking: a review**. Biophysical Reviews, v. 9, n. 2, p. 91–102, abr. 2017.

PICCIRILLO, E.; AMARAL, A. T. DO. **Busca virtual de compostos bioativos: conceitos e aplicações**. Química Nova, v. 41, p. 662–677, jun. 2018.

SOUSA, S. F.; FERNANDES, P. A.; RAMOS, M. J. **Protein-ligand docking: current status and future challenges**. Proteins, v. 65, n. 1, p. 15–26, 1 out. 2006.

WARREN, G. L. et al. **A Critical Assessment of Docking Programs and Scoring Functions**. Journal of Medicinal Chemistry, v. 49, n. 20, p. 5912–5931, 1 out. 2006.