

Bambu Enterprise: desenvolvimento de uma plataforma web para execução de modelos QSAR e descoberta de drogas anti-câncer

LUCAS MOCELLIN GOULART¹; EDUARDO GRUTZMANN FURTADO²;
DARLING DE ANDRADE LOURENÇO³; ISADORA LEITZKE GUIDOTTI⁴;
FREDERICO SCHMITT KREMER⁵

¹ Omixlab, Universidade Federal de Pelotas - lmocellingoulart@gmail.com

² Omixlab, Universidade Federal de Pelotas - grutzmann9@gmail.com

³ Omixlab, Universidade Federal de Pelotas - darlinglourengo@gmail.com

⁴ Omixlab, Universidade Federal de Pelotas - leitzke.gi@gmail.com

⁵ Omixlab, Universidade Federal de Pelotas - fred.s.kremer@gmail.com

1. DESCRIÇÃO DA INOVAÇÃO

O Bambu Enterprise é uma plataforma web de drug discovery que utiliza modelos de Machine Learning para prever a probabilidade de ação de uma ou mais moléculas no tratamento de uma doença-alvo. A plataforma é desenvolvida com tecnologias como ReactJS, Python, Flask e Bootstrap, e integra a ferramenta Bambu para disponibilização de modelos QSAR, tradicionalmente acessível apenas por meio de linha de comando (GUIDOTTI et al., 2023). Com uma interface gráfica simplificada, a plataforma permite que usuários sem conhecimentos avançados em ferramentas complexas possam utilizá-la de maneira eficiente. Além disso, oferece funcionalidades como a organização de projetos, gestão de resultados e compartilhamento entre usuários.

O grande diferencial do Bambu Enterprise está na integração de uma ferramenta recente e inovadora para o treinamento de modelos QSAR, aliada a uma interface gráfica intuitiva e acessível online. Esse conjunto de recursos torna a plataforma adequada para qualquer usuário com conhecimento na área, sem a necessidade de habilidades informáticas que antes eram essenciais para operar a versão de linha de comando. A adição de novas funcionalidades, como o compartilhamento de projetos e resultados entre usuários e a criação de links públicos, facilita a colaboração em tempo real, permitindo o desenvolvimento de projetos em equipe. Assim, o Bambu Enterprise atende tanto às necessidades de pesquisadores individuais quanto de grupos de trabalho em projetos colaborativos.

2. ANÁLISE DE MERCADO

A plataforma Bambu Enterprise é voltada para pesquisadores, empresas farmacêuticas, instituições acadêmicas e laboratórios de biotecnologia que atuam nas áreas de drug discovery e bioinformática. O público-alvo inclui profissionais com foco em pesquisa e desenvolvimento de novos fármacos, com ênfase em triagens iniciais de grandes quantidades de moléculas. Além de atender cientistas com conhecimento técnico, a plataforma é ideal para usuários que não possuem experiência com ferramentas de linha de comando, mas que buscam soluções avançadas e acessíveis para acelerar seus projetos de descoberta de medicamentos. Com uma interface gráfica simplificada e ferramentas colaborativas, Bambu Enterprise é ideal tanto para grandes empresas quanto para startups e universidades que buscam inovação com baixo custo e alta eficiência.

Os principais concorrentes do Bambu Enterprise incluem ferramentas como o MOE (Molecular Operating Environment) e o DeepAutoQSAR do pacote de ferramentas Schrödinger, que oferecem plataformas robustas de triagem de moléculas e descoberta de medicamentos. No entanto, essas soluções geralmente exigem licenças caras e conhecimentos técnicos avançados, limitando o acesso para pequenas empresas e pesquisadores sem amplo orçamento ou expertise. Diferentemente dessas plataformas, o Bambu Enterprise se destaca por oferecer uma solução mais acessível, com uma interface intuitiva e simplificada que dispensa a necessidade de conhecimento em programação, além de ser gratuita para pesquisadores universitários. Além disso, a plataforma oferece funcionalidades colaborativas, como o compartilhamento de projetos e resultados, o que a torna mais flexível para equipes que trabalham remotamente ou em conjunto.

O mercado de serviços de descoberta de medicamentos (Drug Discovery Services Market) está em rápido crescimento, com uma taxa de crescimento anual composta (CAGR) estimada de 14,9% entre 2023 e 2028. Esse aumento é impulsionado por fatores como o crescimento dos investimentos em P&D farmacêutica e a dependência cada vez maior da terceirização desses serviços. Em termos de tamanho de mercado, a expectativa é que a indústria passe de 20,6 bilhões de dólares em 2023 para 41,3 bilhões de dólares em 2028, dobrando em valor ao longo de seis anos. O mercado está dividido principalmente em dois tipos de medicamentos: pequenas moléculas (Small Molecule Drugs) e biológicos (Biologics) (www.marketsandmarkets.com). A crescente demanda por pipelines de P&D e a externalização dos processos de descoberta estão entre os principais fatores que impulsionam esse crescimento. Com estas perspectivas em vista, nossa plataforma se apresenta com grande potencial para preencher lacunas de mercado como as necessidades de pesquisadores e acadêmicos, além de pequenas empresas e startups.

3. ESTRATÉGIA DE DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO

O Bambu Enterprise adota um modelo de negócios freemium, oferecendo acesso gratuito para pesquisadores e startups, enquanto grandes empresas farmacêuticas terão planos pagos com funcionalidades avançadas, como maior capacidade de processamento e suporte técnico. A distribuição da plataforma é online, sem necessidade de instalação, e parcerias com universidades e centros de pesquisa são estratégicas para ampliar sua adoção.

A plataforma já tem registro de software depositado, com concessão prevista para futuro próximo, garantindo proteção intelectual. Atualmente, a tecnologia está no TRL 5, com um protótipo funcional em teste em ambiente relevante. As próximas etapas incluem ajustes baseados no feedback de usuários e a expansão das funcionalidades, visando atingir o TRL 8. Desafios incluem a aceitação por grandes empresas e a escalabilidade da plataforma, que serão mitigados por parcerias estratégicas e infraestrutura em nuvem robusta.

4. RESULTADOS ESPERADOS E IMPACTO

O Bambu Enterprise tem o potencial de gerar um impacto social significativo ao democratizar o acesso a ferramentas avançadas de drug discovery, especialmente para pequenas empresas, startups e instituições acadêmicas que não possuem recursos para adquirir plataformas caras. Ao facilitar o

desenvolvimento de novos fármacos, a plataforma pode acelerar a descoberta de medicamentos para doenças negligenciadas, contribuindo para o bem-estar social e econômico global. Financeiramente, o Bambu Enterprise se apresenta como um projeto desenvolvido dentro da Universidade e que será distribuído pela empresa parceira BioScient. A visão de futuro inclui a expansão para mercados internacionais, integração de novos modelos voltados às outras doenças e a ampliação de sua base de usuários por meio de colaborações com grandes empresas farmacêuticas e laboratórios de biotecnologia. Com a escalabilidade da plataforma, espera-se que ela se torne uma ferramenta relevante no cenário de drug discovery, contribuindo para inovações no setor de saúde.

5. CONCLUSÕES

O Bambu Enterprise é uma plataforma inovadora que facilita o processo de drug discovery ao tornar acessíveis modelos QSAR por meio de uma interface simples e colaborativa, eliminando barreiras técnicas e financeiras para pesquisadores e pequenas empresas. Seu impacto social reside na democratização do acesso a ferramentas avançadas, acelerando a descoberta de novos medicamentos e potencialmente beneficiando populações que sofrem com doenças negligenciadas. Com uma estratégia de modelo freemium e projeções financeiras promissoras, a plataforma está bem posicionada para crescer e evoluir com novas funcionalidades e parcerias estratégicas.

Convidamos stakeholders, investidores e novos parceiros a se unirem a este projeto promissor, que já possui a propriedade intelectual em fase final de registro. Em colaboração com nossa parceira BioScient, estamos abertos a propostas de parcerias financeiras e acadêmicas para expandir as oportunidades de cooperação, com o objetivo de avançar para a próxima etapa de desenvolvimento. Nossa intenção é validar o Bambu Enterprise em um ambiente empresarial real, garantindo que a plataforma atenda às demandas do mercado e acelere o processo de descoberta de medicamentos de forma eficiente e acessível.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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.

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

SATTENE-RAMOS, M. S.; AUSTIN, C. P.; XIA, M. High Throughput Screening. Em: WEXLER, P. (Ed.). *Encyclopedia of Toxicology (Third Edition)*. Oxford: Academic Press, 2014. p. 916–917.

GAD, S. C. QSAR. Em: WEXLER, P. (Ed.). *Encyclopedia of Toxicology (Third Edition)*. Oxford: Academic Press, 2014. p. 1–9.

GUIDOTTI, I. L. et al. Bambu and its applications in the discovery of active molecules against melanoma. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, v. 124, p. 108564, nov. 2023. -

MARKETSANDMARKETS. Drug Discovery Services Market. 2023. Disponível em: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/drug-discovery-services-market-138732129.html>.