

2022

XXX Encontro de Jovens Pesquisadores

e XII Mostra Acadêmica de Inovação e Tecnologia



UCS A UCS É PRA QUEM BUSCA INOVAR O FUTURO!



BIOTECNOLOGIA APLICADA À CONSTRUÇÃO DE NOVAS REDES DE PROTEÍNA NECESSÁRIAS PARA A CONTENÇÃO DE AGENTES ANTI-INFLAMATÓRIOS

BIO-IA

Wanessa Karine Bernardi, Scheila de Ávila e Silva, Eduardo Echer dos Reis



CONTEXTUALIZAÇÃO GERAL

A liberação de mediadores químicos originados em células migratórias e possíveis tecidos lesados, em organismo humano, ocasiona um ciclo inflamatório resistente à utilização usual de anti-inflamatórios não esteroides (AINE's). Através dessa revisão bibliográfica, são viabilizadas estratégias de procedência terapêutica que não utilizem nenhuma abordagem toxicológica durante as fases de testagem, aumentando a precisão e diminuindo potenciais riscos em biotérios e, conseqüentemente, estabelecimentos de saúde.



RESULTADOS DE VALIDAÇÃO

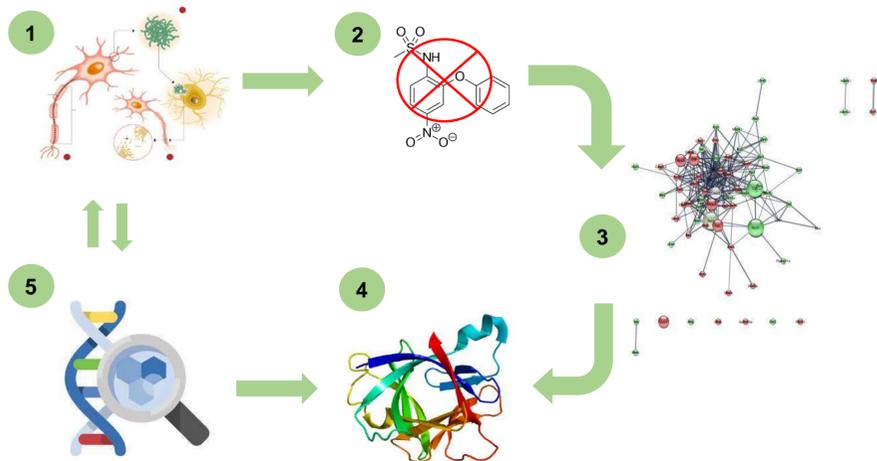
O modelo Random Forest Regression and Classification apresentou um escore de confiança (R^2) igual a 0,69, segundo uma modelagem 3D, tornando válido o modelo preditivo da IL-1 β e apresentando potenciais para uma avaliação de inibidores sob um ponto de vista *in silico*.

Data Set	#	R^2	q^2	RMSE	MAE
Training set: il1betaTREINO_xls	188 records	0.31 ± 0.07	0.29 ± 0.06	0.42 ± 0.04	0.33 ± 0.02
Test set: il1betaTESTE_xls [x]	95 records	0.69 ± 0.09	0.51 ± 0.06	0.4 ± 0.04	0.3 ± 0.03



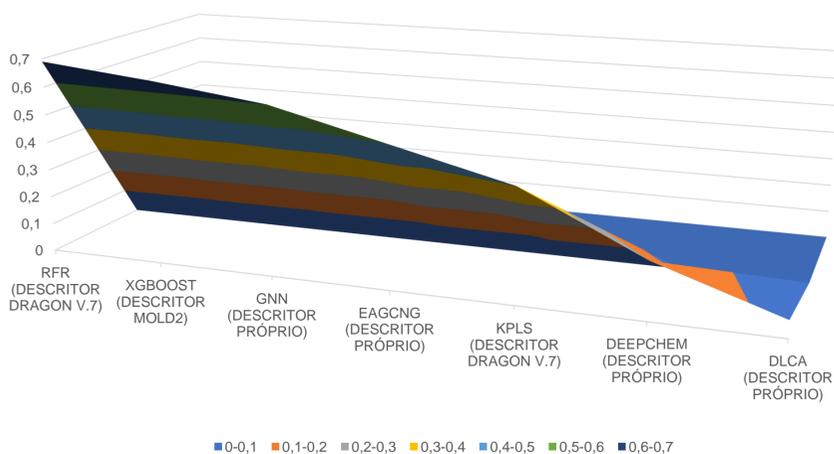
MATERIAIS E MÉTODOS

A partir da extração dessas informações, foram evidenciadas uma série de genes envolvidos em processos neuroinflamatórios, gerando uma rede de proteínas qualificativa para a interleucina 1 beta (IL-1 β), de maneira a possibilitar a elaboração de um banco de dados para seus principais inibidores e seus descritores químicos.



RESULTADOS INICIAIS

A obtenção prévia de resultados partiu de uma aplicação do Modelo de Relação Quantitativa Estrutura-Atividade (QSAR), empregado sob sets de treino e teste, respectivamente, a diversos descritores químicos em dimensões 2D e 3D.



CONSIDERAÇÕES FINAIS

A centralização gradativa do projeto em proteínas envolvidas no processo inflamatório do sistema nervoso, com o decorrer dos meses, possibilitou a elaboração de um modelo preditivo para a inibição da IL-1 β e projetou perspectivas alcançáveis mediante a continuidade de uma revisão sistemática aprofundada e a testagem de outras proteínas sob a metodologia QSAR. Os objetivos futuros consistem em utilizar dos melhores resultados obtidos para prever o potencial inibitório de diferentes mediadores endógenos leucocíticos, assim quantificando e qualificando alternativas terapêuticas que atinjam diretamente o sistema afetado. Futuramente, é almejada uma produção científica completa que viabilize a modelagem *in silico* no desenvolvimento de novos medicamentos, diminuindo a testagem toxicológica em animais e elucidando cada vez mais o potencial assertivo, rápido e de baixo custo apresentado pela biotecnologia



REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] PAPPALARDO, Francesco et al. *In silico clinical trials: concepts and early adoptions*. Briefings in Bioinformatics, v. 20, p. 1699-1708, 2018.
- [2] MOTA-ROJAS, Daniel et al. *The Utility of Grimacy Scales for Practical Pain Assessment in Laboratory Animals*. National Library of Medicine, v. 10, p. 1838-1845, 2020.
- [3] VERMA, Jitender et al. *3D QSAR in drug design: a review*. Bentham Science, v. 10, p. 95-115, 2010.

APOIO

