

MÉTODO DE TRIAGEM DE COMPOSTOS BASEADO EM REGRESSÃO LOGÍSTICA MODIFICADA

Estágio de desenvolvimento: Avançado

Descrição

Método de triagem de compostos que utiliza um modelo de regressão logística modificada e que permite a utilização de um número superior de atributos (descritores moleculares e/ou físico-químicos e/ou topológicos e/ou estruturais e/ou farmacológicos) em relação ao número de entidades (fármacos ou ligantes), podendo ser utilizado, por exemplo, no processo de reposicionamento de fármacos e no descobrimento de novos compostos.

Vantagens

- Torna mais ágil o processo de desenvolvimento de medicamentos e de reposicionamento de fármacos e, por consequência, reduz os custos relacionados ao processo.
- Não requerem uma infraestrutura computacional complexa e robusta.
- Permite a utilização de um número superior de atributos (descritores moleculares e/ou físico-químicos e/ou topológicos e/ou estruturais e/ou farmacológicos) em relação ao número de entidades (fármacos ou ligantes)

Inventores

Marcos Augusto dos Santos / Carmelina Figueiredo Vieira Leite

Titulares:

UFMG

Nº da PI : BR1020190277033