



## La théorie de l'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique comme un nouveau paradigme intégratif pour la traduction du savoir traditionnel en phytomédicaments standardisés

[The Pharmacological Intelligence Funnel Theory as a New Integrative Paradigm for Translating Traditional Knowledge into Standardized Phytomedicines]

Colette Ashande Masengo<sup>1,2,3</sup>, Pius Tshimankinda Mpiana<sup>4</sup>, Virima Mudogo<sup>2,4</sup> & Koto-Te-Nyiwa Ngbolua<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup>Département de Biologie, Faculté des Sciences et Technologies, Université de Kinshasa, Kinshasa, République Démocratique du Congo

<sup>2</sup>Centre de Recherche en Pharmacopée et Médecine Traditionnelle, Institut Supérieur de Kinshasa, Kinshasa, République Démocratique du Congo

<sup>3</sup>Section Biologie médicale, Institut Supérieur de Kinshasa, Kinshasa, République Démocratique du Congo

<sup>4</sup>Département de Chimie et Industries, Faculté des Sciences et Technologies, Université de Kinshasa, Kinshasa, République Démocratique du Congo

### Résumé

Le savoir médical traditionnel, en particulier dans les régions à forte biodiversité comme la République Démocratique du Congo, représente le résultat cumulatif de plusieurs siècles d'expérimentation empirique. Malgré sa forte valeur informationnelle, ce savoir demeure largement exclu des systèmes de santé modernes en raison du manque de rigueur scientifique, de validation mécanistique et de standardisation. Cet article propose un cadre conceptuel original, dénommé Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique (EIP), qui explique comment le savoir traditionnel peut être transformé de manière systématique en phytomédicaments standardisés. Ce cadre intègre, dans un processus séquentiel de filtration, la documentation ethnobotanique, la modélisation moléculaire in silico et la validation biologique expérimentale, réduisant progressivement l'incertitude tout en augmentant la robustesse scientifique. En positionnant le savoir traditionnel comme un point d'entrée intelligent plutôt que comme un obstacle, ce modèle offre une voie vers l'innovation pharmaceutique locale, la réponse aux besoins de santé publique et le renforcement de la souveraineté sanitaire dans les pays à revenu faible et intermédiaire.


**Mots-clés :** Médecine traditionnelle, Ethnobotanique, Pharmacologie inverse, Docking moléculaire, Phytomédicament, Souveraineté sanitaire.

### Abstract

Traditional medical knowledge, particularly in biodiversity-rich regions such as the Democratic Republic of the Congo, represents the cumulative outcome of several centuries of empirical experimentation. Despite its high informational value, this knowledge remains largely excluded from modern healthcare systems due to the lack of scientific rigor, mechanistic validation, and standardization. This article proposes an original conceptual framework, termed the Pharmacological Intelligence Funnel (PIF), which explains how traditional knowledge can be systematically transformed into standardized phytomedicines. This framework integrates, within a sequential filtration process, ethnobotanical documentation, in silico molecular modeling, and experimental biological validation, progressively reducing uncertainty while increasing scientific robustness. By positioning traditional knowledge as an intelligent entry point rather than an obstacle, this model offers a pathway toward local pharmaceutical innovation, addressing public health needs, and strengthening health sovereignty in low- and middle-income countries.

**Keywords:** Traditional medicine; Ethnobotany; Reverse pharmacology; Molecular docking; Phytomedicine; Health sovereignty.

\*Auteur correspondant: Koto-Te-Nyiwa Ngbolua, ([jpngbolua@unikin.ac.cd](mailto:jpngbolua@unikin.ac.cd)). Tél. : (+243) 81 68 79 527

 <https://orcid.org/0000-0002-0066-8153>; Reçu le 17/10/2025 ; Révisé le 11/11/2025 ; Accepté le 27/11/2025

DOI: <https://doi.org/10.59228/rcst.025.v4.i4.213>

Copyright: ©2025 Colette et al. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International License (CC-BY-NC-SA 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

## 1. Introduction

La médecine traditionnelle demeure une source majeure de soins de santé pour une large proportion de la population mondiale, en particulier en Afrique (OMS, 2013). Toutefois, malgré son utilisation répandue, le savoir thérapeutique traditionnel se caractérise souvent par une transmission empirique, une standardisation limitée et l'absence de validation mécanistique. Ces limitations entravent son intégration dans les systèmes de santé modernes et sa transformation en produits pharmaceutiques réglementés.

Parallèlement, les pipelines conventionnels de découverte de médicaments, fondés sur le criblage aléatoire à haut débit, sont de plus en plus critiqués pour leurs coûts élevés, leurs délais prolongés et leurs faibles taux de succès (Paul et al., 2010). Ce contexte appelle à des modèles alternatifs d'innovation capables de réduire l'incertitude tout en maintenant la rigueur scientifique. Le savoir traditionnel comme base de données empirique peut jouer un rôle déterminant car en effet, le savoir ethnobotanique n'est pas, par nature, anecdotique. Il reflète un processus de sélection empirique à long terme, façonné par l'observation répétée, la transmission intergénérationnelle et la validation socioculturelle (Patwardhan, 2005). Toutefois, il y a lieu de noter que ce savoir demeure qualitatif plutôt que quantitatif, aveugle aux mécanismes moléculaires et faiblement reproductible selon les contextes.

En conséquence, les remèdes traditionnels ne peuvent être intégrés directement dans les systèmes de soins fondés sur les preuves sans un processus structuré de validation scientifique (OMS, 2013). D'où, la nécessité de recourir à un nouveau paradigme basé sur la théorie de l'entonnoir d'intelligence pharmacologique.

## 2. Littérature

### 2.1. Fondements conceptuels de l'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique

L'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique (EIP) est proposé ici comme un cadre conceptuel original. Il s'appuie sur des approches existantes — telles que l'ethnopharmacologie et la pharmacologie inverse — tout en s'en distinguant clairement (Vaidya, 2014).

#### 2.1.1. Hypothèse centrale

Le savoir traditionnel constitue une base de données empirique à haute valeur informationnelle mais à faible structuration scientifique, qui peut être

transformée en innovation pharmacologique par un processus progressif de filtration et de validation.

#### 2.1.2. Structure de l'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique

La théorie de l'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique (EIP) est globalement structurée en trois phases comprenant six étapes clés (enquêtes ethnobotaniques, criblage phytochimique, tests biologiques ciblés, identification de composés actifs, modélisation *in silico* et intégration et classement des candidats).

##### Phase 1. Entrée large de l'entonnoir ou Intelligence ethnobotanique

Elle consiste en la collecte systématique et l'analyse critique des pratiques médicinales traditionnelles en se basant sur le facteur de consensus informateur, l'indice de valeur d'usage, la priorisation selon les pathologies d'intérêt en santé publique du pays. Il s'agit d'un premier filtre intelligent basé essentiellement les données empiriques validées culturellement (Patwardhan, 2005).

##### Phase 2. Cœur de l'entonnoir ou Intelligence computationnelle

Les méthodes *in silico* notamment le docking moléculaire, la dynamique moléculaire, la pharmacologie des réseaux, la DFT et la prédiction ADMET vont aider le chercheur à traduire les hypothèses ethnobotaniques qualitatives en prédictions moléculaires vérifiables au moyen des algorithmes (Lionta et al., 2014).

Cette approche permet de réduire drastiquement coûts liés aux essais expérimentaux, à prioriser les candidats prometteurs ayant une probabilité plus élevée d'activité biologique et à proposer les mécanismes d'action des composés bioactifs.

##### Phase 3 : Sortie étroite de l'entonnoir ou Intelligence biologique

La validation expérimentale par des essais *in vitro* et *in vivo* demeure l'étape décisive. En effet les prédictions computationnelles au moyen des algorithmes doivent être confirmées par la réalité du vivant afin de confirmer, rejeter ou optimiser les candidats.

C'est dans ce cadre que les paramètres pharmacologiques notamment l'efficacité, la toxicité et la reproductibilité deviennent mesurables et pertinents sur le plan réglementaire (Atanasov et al., 2015).

#### 2.1.3. Résultat attendu : phytomédicaments standardisés

Le produit final de l'EIP n'est pas la plante brute, mais des phytomédicaments standardisés caractérisés

par une composition chimique contrôlée, une activité pharmacologique démontrée, une évaluation de la sécurité et une reproductibilité garantie. Ces produits sont compatibles avec les cadres réglementaires nationaux et internationaux.

#### 2.1.4. Implications pour la santé publique et la souveraineté sanitaire

Pour les pays à forte biodiversité comme la République Démocratique du Congo, le cadre EIP favorise des solutions thérapeutiques adaptées au contexte local, la valorisation scientifique des ressources biologiques et la réduction de la dépendance aux médicaments importés.

#### 2.1.5. Implications globales pour l'innovation pharmaceutique

L'EIP (figure 1) permet en question le paradigme dominant de l'innovation pharmaceutique en réintroduisant le savoir traditionnel validé scientifiquement comme point d'entrée rationnel dans la découverte de médicaments. Plutôt que d'opposer tradition et modernité, ce modèle montre que leur intégration peut devenir une source d'efficacité et de diversité épistémologique. Il contribue ainsi au concept de souveraineté sanitaire, entendu comme la capacité à produire localement des solutions de santé pertinentes répondant aux standards internationaux.



Figure 1. Théorie de l'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique et ses auteurs

Selon ces Chercheurs Congolais (RDC), la théorie de l'EIP est structurée en 06 étapes chronologiques (enquêtes ethnobotaniques, criblage phytochimique, tests biologiques ciblés, identification de composés actifs, modélisation *in silico* et intégration et classement des candidats) comme suit :

*Étape 1. Production extensive d'hypothèses : enquêtes ethnobotaniques*

Les recherches de ces chercheurs commencent par des études ethnobotaniques systématiques pour recenser les plantes médicinales utilisées traditionnellement pour la gestion de différentes maladies, y compris les infections virales et la drépanocytose. Cette étape représente la base de l'entonnoir, où les connaissances traditionnelles fournissent le point de départ des hypothèses pharmacologiques. A ce jour, plus de 200 espèces des plantes médicinales ont été répertoriées (Mpiana et al., 2007 ; Mpiana et al., 2008 ; Katemo et al., 2012 ; Mawunu et al., 2023 ; Masengo et al., 2024 ; Menga et al., 2024 ; Mawunu et al., 2025 )

*Étape 2. Premier filtrage : criblage phytochimique*

Les plantes identifiées sont soumises à un criblage phytochimique pour la recherche des grandes classes de métabolites secondaires (alcaloïdes, flavonoïdes, polyphénols, terpènes, etc.). Cette étape permet d'écarter les espèces dont le profil chimique est peu compatible avec une activité pharmacologique plausible, rétrécissant ainsi l'espace de recherche (Masengo et al., 2024).

*Étape 3. Validation fonctionnelle : tests biologiques ciblés*

Les extraits ayant un profil phytochimique intéressant sont testés par des tests biologiques *in vitro* ou *ex vivo* (activité anti-drépanocytaire, antibactérienne, antiinflammatoire ou antioxydante). Ces tests représentent une deuxième étape de sélection, ne conservant que les extraits avec une activité mesurable et reproductible (Masengo et al., 2024).

*Étape 4. Ciblage moléculaire : identification de composés actifs*

Les extraits actifs sont fractionnés pour isoler les molécules actives. Ce passage du niveau « extrait » au niveau « molécule » diminue considérablement la complexité du système et permet de concentrer l'attention sur un nombre limité de composés bioactifs (Masengo et al., 2023). Il faut noter qu'au niveau de l'étape de l'élucidation des structures moléculaires, deux approches méthodologiques sont possibles pour le chercheur. La première est la détermination structurale expérimentale, qui repose sur l'isolement

des composés actifs et l'utilisation des techniques chromatographiques et spectroscopiques appropriées (HPLC, GC, LC-MS, GC-MS, RMN 1D/2D, IR, UV). Cette méthode est la méthode de référence pour l'identification formelle des métabolites secondaires (Dewick, 2009; Silverstein et al., 2014).

La deuxième option est d'utiliser les bases de données spécialisées pour rechercher les composés chimiques déjà identifiés dans les plantes médicinales choisies. On peut ainsi recourir aux bases de données comme PubChem, ChemSpider, ChEMBL, Dictionary of Natural Products (DNP), NAPRALERT ou KNApSACk (Afendi et al., 2012 ; Wishart et al., 2018).

Cette deuxième possibilité représente une alternative raisonnable lorsque l'on ne possède pas un laboratoire suffisamment équipé pour une élucidation structurale complète.

*Étape 5. Compréhension mécanistique : modélisation in silico*

Dans les études récentes, les auteurs combinent des méthodes de docking moléculaire et de dynamique moléculaire pour étudier les interactions des composés isolés avec des cibles biologiques d'intérêt. Cette étape apporte une dimension mécanistique, reliant l'activité biologique observée à des interactions moléculaires (Masengo et al., 2023; Menga et al., 2024).

*Étape 6. Intégration et classement des candidats*

Toutes les informations ethnobotaniques, phytochimiques, biologiques et *in silico* sont ensuite combinées pour classer les plantes et les molécules les plus prometteuses. Cette étape représente le bout de l'entonnoir, où seuls les candidats les plus scientifiquement justifiés sont proposés pour des développements pharmacologiques ultérieurs (Menga et al., 2024).

Pris ensemble, ces travaux montrent un processus de réduction de l'incertitude pharmacologique, de connaissances empiriques larges à des hypothèses mécanistiques spécifiques. Cette logique équivaut fonctionnellement à un entonnoir d'intelligence pharmacologique, bien que ce terme ne soit pas théorisé en tant que tel dans la littérature (Menga et al., 2024 ; Masengo et al., 2024).



Tableau I. Synthèse des travaux antérieurs selon la théorie de l'entonnoir d'intelligence pharmacologique

Étape de l'entonnoir	Objectif scientifique	Méthodes mobilisées	Type de données produites	Résultat clé	Références
1. Formulation d'hypothèses	Identifier des plantes d'intérêt pharmacothérapeutique	Enquêtes ethnobotaniques, entretiens avec tradiprathérapeutes	Usages traditionnels, fréquences de citation, indications thérapeutiques	Liste de plantes candidates	Mpiana et al. (2007) ; Mpiana et al. (2008) ; Katemo et al. (2012) ; Mawunu et al. (2023) ; Masengo et al. (2024) ; Menga et al. (2024) ; Mawunu et al. (2025)
2. Filtration chimique préliminaire	Vérifier la cohérence pharmacologique	Screening phytochimique qualitatif	Classes de métabolites secondaires (flavonoïdes, alcaloïdes, polyphénols, terpènes)	Réduction des plantes non pertinentes	
3. Validation biologique	Confirmer une activité mesurable	Tests biologiques <i>in vitro/ex vivo</i> (anti-drépanocytaire, antibactérien, anti-inflammatoire, antioxydant)	Activité biologique (taux d'inhibition, inhibition de la falciformation, etc.), indices fonctionnels	Sélection d'extraits bioactifs	Mpiana et al. (2007) ; Mpiana et al. (2008) ; Kasali et al. (2013) ; Tshilanda et al. (2014) ; Masengo et al. (2024) ; Tshibangu et al. (2025)
4. Focalisation moléculaire	Identifier les phyto-composés responsables	Fractionnement, identification de molécules bioactives	Molécules candidates spécifiques (hits)	Passage extrait → molécule	Fatiany et al. (2013) ; Ruphin et al. (2014) ; Tshilanda et al. (2016) ; Masengo et al., 2023 ; Lengbiye et al. (2025a) ; Lengbiye et al. (2025b)
5. Validation mécanistique	Comprendre le mode d'action	Docking moléculaire, dynamique moléculaire, DFT, profil ADMET	Affinité ligand-cible protéique, stabilité des complexes	Preuve mécanistique <i>in silico</i>	Mpiana et al. (2020) ; Masengo et al. (2022) ; Ngbolua et al. (2022) ; Masengo et al. (2023) ; Menga et al. (2024) ; Mfutu et al. (2024) ; Kitete et al. (2025a) ; Kitete et al. (2025b)
6. Hiérarchisation finale	Prioriser les candidats pharmacothérapeutiques	Intégration ethnobotanique, chimique, biologique et <i>in silico</i>	Classement final des plantes/molécules d'intérêt	Candidats thérapeutiques prioritaires	Menga et al. (2024)

D'après la théorie de l'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique (tableau I) appliquée aux résultats de nos recherches, la démarche conduisant à la validation thérapeutique commence par le savoir traditionnel (endogène ou empirique) à travers des enquêtes ethnobotaniques (pharmacologie inverse). Celles-ci permettent une première sélection rationnelle des plantes médicinales à fort potentiel pharmacobiologique (Katemo et al., 2012; Mawunu et al., 2025).

Cette première phase de première sélection est ensuite affinée par des études phytochimiques en vue d'identifier les composés chimiques potentiellement responsables de l'activité observée, c'est ce qui permet ainsi de diminuer l'incertitude scientifique liée à

l'utilisation traditionnelle (Lengbiye et al., 2025a; Fatiany et al., 2013). La deuxième phase de l'entonnoir est l'évaluation pharmacologique expérimentale où des tests biologiques *in vitro* et *in vivo* permettent de confirmer, de quantifier et de hiérarchiser les activités pharmacobiologiques (Mushagalusa Kasali et al., 2013; Tshilanda et al., 2014). Enfin, la modélisation moléculaire basée sur les approches computationnelles (pharmacologie des réseaux, docking moléculaire, dynamique moléculaire, DFT, profil ADMET, etc.) constituent l'étape la plus étroite et la plus prédictive de l'EIP qui offre une compréhension du mécanisme des interactions moléculaires (modes d'action) et qui prédit les profils pharmacocinétiques et toxicologiques des composés bioactifs (Mpiana et al., 2020; Ngbolua et al., 2022).

### 3. Conclusion

L'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique constitue un cadre intégratif et transférable permettant de traduire le savoir médicinal traditionnel en phytomédicaments scientifiquement validés. En articulant intelligences ethnobotanique, computationnelle et biologique, il offre une voie crédible d'innovation pharmaceutique fondée sur la biodiversité, l'héritage culturel et la rigueur scientifique.

### Remerciements

La Cheffe de Travaux, Colette Ashande Masengo, tient à remercier son équipe d'encadrement pour sa contribution majeure au développement de la théorie sur l'Entonnoir d'Intelligence pharmacologique (EIP).

### Financement

Cette recherche n'a reçu aucun financement extérieur.

### Conflit d'intérêts

Les auteurs déclarent n'avoir aucun conflit d'intérêts.

### Considérations éthiques

Cette étude est strictement théorique et n'implique ni participants humains, ni animaux, ni données personnelles identifiables.

Par conséquent, aucune approbation d'un comité d'éthique n'était nécessaire, conformément aux normes internationales de publication scientifique.

### ORCID des Auteurs

Ashande M.C.: <https://orcid.org/0000-0002-9086-5731>

Mpiana T.P.: <https://orcid.org/0000-0002-8590-6017>

Virima M.: <https://orcid.org/0000-0002-4603-3620>

Ngbolua K.N.: <https://orcid.org/0000-0002-0066-8153>

### Contribution des Auteurs

C.A.M.

- Conception initiale de la théorie de l'Entonnoir d'Intelligence Pharmacologique.
- Analyse conceptuelle du savoir médical traditionnel et de sa traduction en phytomédicaments.
- Rédaction du manuscrit original (première version).
- Collecte, synthèse et interprétation de la littérature scientifique et ethnopharmacologique.

P.T.M.

- Contribution à la structuration théorique et à la formalisation scientifique du paradigme proposé.
- Analyse critique de la cohérence épistémologique et méthodologique du modèle.
- Révision substantielle du manuscrit pour le contenu intellectuel majeur.

V.M.

- Apport méthodologique sur les aspects pharmacologiques, toxicologiques et de validation préclinique.
- Contribution à l'intégration des étapes de standardisation et d'évaluation biologique des phytomédicaments.
- Relecture critique et amélioration de la rigueur scientifique du manuscrit.

K.N.N.

- Supervision scientifique globale du travail.
- Contribution majeure à l'intégration interdisciplinaire (ethnobotanique, chimie, pharmacologie, biologie).
- Validation finale du modèle conceptuel proposé.
- Coordination de l'équipe, révision finale et approbation de la version soumise.

Tous les auteurs ont lu et approuvé la version finale du manuscrit et acceptent d'en assumer la responsabilité scientifique.

## Références bibliographiques

- Afendi, F. M., Okada, T., & Yamazaki, M. (2012). KNApSACk family databases: integrated metabolite–plant species databases for multifaceted plant research. *Plant and Cell Physiology*, 53(2), e1. <https://doi.org/10.1093/pcp/pcr165>
- Atanasov, A. G., Waltenberger, B., Pferschy-Wenzig, E. M., Linder, T., Wawrosch, C., Uhrin, P., Temml, V., Wang, L., Schwaiger, S., Heiss, E. H., Rollinger, J. M., Schuster, D., Breuss, J. M., Bochkov, V., Mihovilovic, M. D., Kopp, B., Bauer, R., Dirsch, V. M., & Stuppner, H. (2015). Discovery and resupply of pharmacologically active plant-derived natural products: A review. *Biotechnology Advances*, 33(8), 1582–1614. <https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2015.08.001>
- Dewick, P. M. (2009). *Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach* (3rd ed.). Wiley.
- Fatiany, P. R., Baholy, R., Andrianarivo, E., Raharisololalao, A., Martin, M.-T., & Ngbolua, K.N. (2013). Antiplasmodial, cytotoxic activities and characterization of a new naturally occurring quinone methide pentacyclic triterpenoid derivative isolated from *Salacia leptoclada* Tul. (Celastraceae) originated from Madagascar. *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, 3(10), 780–784. [https://doi.org/10.1016/S2221-1691\(13\)60155-0](https://doi.org/10.1016/S2221-1691(13)60155-0)
- Fatiany, P. R., Baholy, R., Randrianarivo, E., Raharisololalao, A., Martin, M.-T., & Ngbolua, K.N. (2014). Isolation and structural elucidation of cytotoxic compounds from the root bark of *Diospyros quercina* (Baill.) endemic to Madagascar. *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, 4(3), 169–175. [https://doi.org/10.1016/S2221-1691\(14\)60227-6](https://doi.org/10.1016/S2221-1691(14)60227-6)
- <https://doi.org/10.1093/nar/gkx1037>
- Kasali, M. F., Ntokamunda Kadima, J., Mpiana, P. T., Ngbolua, K.N., & Sha-Tshibey Tshibangu, D. (2013). Assessment of antidiabetic activity and acute toxicity of leaf extracts from *Physalis peruviana* L. in guinea-pig. *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, 3(11), 841–846. [https://doi.org/10.1016/S2221-1691\(13\)60166-5](https://doi.org/10.1016/S2221-1691(13)60166-5)
- Katemo, M., Mpiana, P. T., Mbala, B. M., Mihigo, S. O., Ngbolua, K. N., Tshibangu, D. S. T., & Koyange, P. R. (2012). Ethnopharmacological survey of plants used against diabetes in Kisangani city (DR Congo). *Journal of Ethnopharmacology*, 144(1), 39–43. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2012.08.022>
- Kitete, M.E., Kilembe Thambwe, J., Neema-Ufoy Mungu Y., Matondo, A., Ngbolua, K.N., Tshilanda, D. D., Tshibangu, D. S. T., & Mpiana, P. T. (2025). Molecular docking, DFT and dynamics simulations of *Jatropha curcas* -derived compounds targeting PR and hER $\alpha$  for breast cancer treatment. *Next Research*, 2(2), Article 100249. <https://doi.org/10.1016/j.nexres.2025.100249>
- Kitete, M.E., Matondo, A., Ngbolua, K.N., & Mpiana, P. T. (2025). Evaluation of antiviral potential of *Cinchona officinalis* derived compounds against COVID-19 and human hepatitis B: An in silico molecular docking and molecular dynamics simulation study. *Pharmacological Research – Natural Products*, 7, Article 100229. <https://doi.org/10.1016/j.prenap.2025.100229>
- Lengbiye, M. E., Ngbolua, K.N., Loketo, A. T., Ngo Mbing, J., Kemzeu, R., Tchouhoua Yamthe, L. R., Fotsing, S. K., Sha-Tshibey Tshibangu, D., Pegnyemb, D. E., & Mpiana, P. T. (2025). Antimicrobial activity and structural elucidation of isoorientin, a naturally occurring flavonoid from the stem bark of *Ganophyllum giganteum* (A. Chev.) Hauman (Sapindaceae). *Pharmacological Research – Natural Products*, 9, Article 100408. <https://doi.org/10.1016/j.prenap.2025.100408>
- Lengbiye, M. E., Ngbolua, K.N., Messi, A. N., Messi, L. M., Fofack, B., Abouem A. Zintchem, A., Djikam, G. S., Atangana, J. F., Sha-Tshibey Tshibangu, D., Mbundu Lukukula, C., Ngo Mbing, J., Pegnyemb, D. E., & Mpiana, P. T. (2025). Antimicrobial activity and structure elucidation of pterosterone, a naturally occurring phytoecdysteroid isolated from the leaves of *Vitex madiensis* Oliv. (Lamiaceae). *Pharmacological Research – Natural Products*, 7, Article 100264. <https://doi.org/10.1016/j.prenap.2025.100264>
- Lionta, E., Spyrou, G., Vassilatis, D. K., & Cournia, Z. (2014). Structure-based virtual screening for drug discovery: Principles, applications and recent advances. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 14(16), 1923–1938. <https://doi.org/10.2174/1568026614666140929124445>
- Masengo Ashande, C., Tuwisana Masunda, A., Ngbolua, K.N., Thambwe Kilembe, J., Matondo, A., Liyongo Clément, I., Gbolo, B. Z., Moke

- Lengbiye, E., Tshibangu, D. S. T., Tshilanda, D. D., Mpiana, P. T., & Mudogo, V. (2022). *Glucose oxidase as a model enzyme for antidiabetic activity evaluation of medicinal plants: In vitro and in silico evidence*. *NRFHH*, 2(2), 265–273. <https://doi.org/10.53365/nrfhh/144779>
- Masengo, C. A., Ngbolua, K. N., Mudogo, V., & Mpiana, P. T. (2023). Evaluation in silico de l'activité anti-drépanocytaire de quelques composés de l'huile essentielle de *Lippia multiflora* Moldenke (Verbenaceae). *Revue Congolaise des Sciences et Technologies*, 2(3), 424–429. <https://doi.org/10.59228/rcst.023.v2.i3.47>
- Masengo, C. A., Ngbolua, K.N., Mudogo, V., & Mpiana, P. T. (2024). Étude ethnobotanique, phytochimique et pharmaco-biologique des plantes utilisées en médecine traditionnelle pour la prise en charge de la drépanocytose à Kinshasa, RD Congo. *Revue Marocaine des Sciences Agronomiques et Vétérinaires*, 12(2), 103–111. <https://doi.org/10.5281/zenodo.11526591>
- Mawunu, M., António, D. ., Vita, P., Ngbolua, K.N., Lukoki Luyeye, F., Ndiku, L., Mbandu Luzolawo, P., & M. Francisco, N. . (2023). Ethnobotanical Survey of the Chinese Tea Substitutes Consumed in Uíge Province, Angola: Part 1. *Ethnobotany Research and Applications*, 26, 1–27. <https://ethnobotanyjournal.org/index.php/era/article/view/4645>
- Mawunu, M., Malungo, A. D., Cuca Afonso, L., Luyeye, L., Ndiku, L., & Ngbolua, K.N. (2025). Medicinal plants traditionally used by the rural Kimalalu people in the municipality of Songo (Uíge province), Northern Angola. *NRFHH*, 5(1), 40–69. <https://doi.org/10.53365/nrfhh/192950>
- Menga, M.P., M., Koto Georges, G., Monizi, M., Ashande Colette, M., Tshimankinda Mpiana, P., Mudogo, V., & Ngbolua, K.N. (2024). Integrating ethnobotany and artificial intelligence to validate the potential bioactivity of two medicinal plants traditionally used in the treatment of influenza in IBI-Village and surrounding areas, Democratic Republic of the Congo. *NRFHH*, 4(3), 230–246. <https://doi.org/10.53365/nrfhh/187385>
- Mfutu, M.C., Ngbolua, K.N., & Issouradi, J.P.S. (2024). Molecular docking and molecular dynamics simulation studies of the interaction of anti-oral cancer plant *Curcuma longa* derived-compounds with human epidermal growth factor receptor 2. *J Proteins Proteom* 15, 491–507 <https://doi.org/10.1007/s42485-024-00158-4>
- Mpiana, P. T., Mudogo, V., Tshibangu, D. S. T., Kitwa, E. K., Kanangila, A. B., Lumbu, J. B. S., Ngbolua, K. N., Atibu, E. K., & Kakule, M. K. (2008). Antisickling activity of anthocyanins from *Bombax pentadrum*, *Ficus capensis* and *Ziziphus mucronata*: Photodegradation effect. *Journal of Ethnopharmacology*, 120(3), 413–418. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2008.09.012>
- Mpiana, P. T., Ngbolua, K.N., Tshibangu, D. S. T., Kilembe, J. T., Gbolo, B. Z., Mwanangombo, D. T., Inkoto, C. L., Lengbiye, E. M., Mbadiko, C. M., Matondo, A., Bongo, G. N., & Tshilanda, D. D. (2020). Identification of potential inhibitors of SARS-CoV-2 main protease from *Aloe vera* compounds: A molecular docking study. *Chemical Physics Letters*, 754, Article 137751. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2020.137751>
- Mpiana, P. T., Tshibangu, D. S. T., Shetonde, O. M., & Ngbolua, K. N. (2007). In vitro antidrepanocytary activity (anti-sickle cell anemia) of some Congolese plants. *Phytomedicine*, 14(2–3), 192–195. <https://doi.org/10.1016/j.phymed.2006.05.008>
- Ngbolua, K.N., Kilembe, J. T., Matondo, A., Masengo Ashande, C., Mukiza, J., Mudogo Nzanu, C., Ruphin, F. P., Baholy, R., Mpiana, P. T., & Mudogo, V. (2022). In silico studies on the interaction of four cytotoxic compounds with angiogenesis target protein HIF-1 $\alpha$  and human androgen receptor and their ADMET properties. *Bulletin of the National Research Centre*, 46, 101. <https://doi.org/10.1186/s42269-022-00793-1>
- Organisation Mondiale de la Santé (2013). *Stratégie de l'OMS pour la médecine traditionnelle 2014–2023*. OMS.
- Patwardhan, B. (2005). Ethnopharmacology and drug discovery. *Journal of Ethnopharmacology*, 100(1–2), 50–52. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2005.06.006>
- Paul, S. M., Mytelka, D. S., Dunwiddie, C. T., Persinger, C. C., Munos, B. H., Lindborg, S. R., & Schacht, A. L. (2010). How to improve R&D productivity: The pharmaceutical industry's grand challenge. *Nature Reviews Drug Discovery*, 9(3), 203–214. <https://doi.org/10.1038/nrd3078>
- Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J., & Bryce, D. L. (2014). *Spectrometric Identification of Organic Compounds* (8th ed.). Wiley.
- Tshibangu, D. S. T., Kavugho, F. S., Kabengele, C. N., Masunda, A. T., Bongo, G. N., Kasiana, G. N., Mwanangombo, D. T., Inkoto, C. L., Mbadiko, C. M., Gbolo, B. Z., Musuyu, D. M., Tshilanda, D. D.,



- Ngbolua, K.-N., & Mpiana, P. T. (2025). Phytochemical study and evaluation of the antidiabetic and antihyperglycemic activities of the fruit extracts of *Physalis peruviana* L. (Solanaceae). *Phytomedicine Plus*, 5(1), Article 100675.  
<https://doi.org/10.1016/j.phyplu.2024.100675>
- Tshilanda, D. D., Bila Babady, P., Onyamboko, D. N. V., Tshilolo Tshiongo, C. M., Tshibangu, D. S.-T., Ngbolua, K.N., Vuka Tsalu, P., & Mpiana, P. T. (2016). Chemo-type of essential oil of *Ocimum basilicum* L. from DR Congo and relative in vitro antioxidant potential to the polarity of crude extracts. *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, 6(12), 1022–1028.  
<https://doi.org/10.1016/j.apjtb.2016.08.013>
- Tshilanda, D. D., Mpiana, P. T., Onyamboko, D. N. V., Mbala, B. M., Ngbolua, K.N., Tshibangu, D. S., Bokolo, M. K., Taba, K. M., & Kasonga, T. K. (2014). Antisickling activity of butyl stearate isolated from *Ocimum basilicum* (Lamiaceae). *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, 4(5), 393–398.  
<https://doi.org/10.12980/APJTB.4.2014C1329>
- Vaidya, D. B. (2014). Reverse pharmacology—A paradigm shift for drug discovery and development. *Current Research in Drug Discovery*, 1(2), 39–44.  
<https://doi.org/10.3844/crddsp.2014.39.44>
- Wishart, D. S., Feunang, Y. D., Guo, A. C., et al. (2018). DrugBank 5.0: a major update to the DrugBank database for 2018. *Nucleic Acids Research*, 46(D1), D1074–D1082.