



FRAMEWORK INTEGRADO PARA AVALIAÇÃO DE COMPOSTOS BIOATIVOS: METODOLOGIA COMPUTACIONAL E ABORDAGEM INTERDISCIPLINAR

Christmas Maria Vidal de Barros Rêgo¹, Anna Paula Aguiar¹, Sergio Senar², Luciana Aparecida Campos¹, Ovidiu Constantin Baltatu¹

¹ Center of Innovation, Technology, and Education (CITE) at Anhembi Morumbi University – Anima Institute, São José dos Campos Technology Park, São José dos Campos, Brazil

² DrTarget, <https://doctortarget.com/>, 28806 Madrid, Spain

Universidade Anhembi Morumbi

PPG em Engenharia Biomédica, Campus São José dos Campos/PIT

Introdução

- Pesquisa interdisciplinar: química computacional + ciência dos alimentos + farmacologia
- Necessidade de metodologias sistemáticas para compostos bioativos
- Framework inovador para avaliação integrada

Objetivos

- Desenvolver metodologia computacional integrada
- Criar sistema de pontuação preditivo (FAPS)
- Estabelecer critérios de drug-likeness para compostos naturais
- Mapear fontes alimentares e concentrações

Metodologia

O estudo integrou quatro bases de dados (PhytoHub, Phenol-Explorer, ChEMBL e FoodDB) para reunir informações sobre compostos bioativos e alimentos. Por meio da aplicação RDKit em Python, foram calculadas propriedades moleculares e físico-químicas. E com base nesses dados, foi criado o sistema FAPS para estimar o potencial de absorção de flavonoides. A avaliação de similaridade com fármacos considerou métricas como Lipinski, Veber, QED e citotoxicidade. O processo automatizado garantiu reproduzibilidade e permitiu explorar padrões e correlações em um conjunto amplo de compostos.

Resultados

- Distribuição de propriedades moleculares. Pipeline automatizado e reproduzível
- Sistema FAPS eficaz para diferenciação
- Mapeamento sistemático fonte-atividade
- Critérios adaptados para compostos naturais

Conclusões

- ✓ Metodologia robusta e interdisciplinar estabelecida
- ✓ Framework escalável e reproduzível
- ✓ Ponte entre conhecimento teórico e aplicação prática
- ✓ Base para futuras investigações interdisciplinares

Bibliografia

Lipinski, C. A. et al. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery. Advanced Drug Delivery Reviews, 2001.

Veber, D. F. et al. Molecular properties that influence the oral bioavailability of drug candidates. Journal of Medicinal Chemistry, 2002.

RDKit Documentation. Open-source cheminformatics software. <https://www.rdkit.org/>

ChEMBL Database. European Bioinformatics Institute. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>

Phenol-Explorer Database. <http://phenol-explorer.eu/>

Agradecimentos

Fomento: O presente trabalho contou com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES), por meio do Código de Financiamento 001. O suporte concedido foi essencial para o desenvolvimento da pesquisa, possibilitando a obtenção de recursos, materiais e infraestrutura necessários para a execução do estudo.