



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

Christmas Maria Vidal de Barros Rêgo ¹, Anna Paula Aguiar ¹, Sergio Senar ², Luciana Aparecida Campos ¹, Ovidiu Constantin Baltatu ¹

¹ Center of Innovation, Technology, and Education (CITE) at Anhembi Morumbi University – Anima Institute, Sao Jose dos Campos Technology Park, Sao Jose 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 reprodutibilidade e permitiu explorar padrões e correlações em um conjunto amplo de compostos.

Resultados

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

Conclusões

- ✓ Metodologia robusta e interdisciplinar estabelecida
- ✓ Framework escalável e reprodutível
- ✓ 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.