



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

Christmas Maria Vidal de Barros
Center of Innovation Technology and
Education (CITE) at Anhembi Morumbi
University – Ânima Institute
São José dos Campos Technology Park
São José dos Campos, Brazil
chrisbarros1@gmail.com

Anna Paula Aguiar
Center of Innovation Technology and
Education (CITE) at Anhembi Morumbi
University – Ânima Institute
São José dos Campos Technology Park
São José dos Campos, Brazil
annaaguiar.galo@gmail.com

Sergio Senar
Dr Target, <https://doctortarget.com/>
28806 Madrid, Spain
senars00@gmail.com

Profa Dra Luciana Campos Baltatu
Center of Innovation Technology and
Education (CITE) at Anhembi Morumbi
University – Ânima Institute
São José dos Campos Technology Park
São José dos Campos, Brazil
camposbaltatu@gmail.com

Ovidiu Constantin Baltatu
Center of Innovation Technology and
Education (CITE) at Anhembi Morumbi
University – Ânima Institute
São José dos Campos Technology Park
São José dos Campos, Brazil and
College of Medicine
Alfaisal University
Riyadh, Saudi Arabia
obaltatu@alfaisal.edu

Resumo

A investigação de compostos bioativos naturais envolve a integração das áreas de química, ciência dos alimentos e farmacologia. O presente estudo propõe uma metodologia que utiliza de forma sinérgica banco de dados e ferramentas computacionais para análise das propriedades de absorção, biodisponibilidade e características farmacológicas desses compostos.

Para tanto, foram incorporados bancos de dados como PhytoHub, Phenol Explorer, ChEMBL e FoodDB, além de ferramentas como Rdkit em Python e sistema FAPS, cujo propósito é avaliar o potencial biológico dos compostos. A metodologia mostrou-se eficaz na análise sistemática de vastos conjuntos de dados, possibilitando a priorização dos compostos e a correlação entre suas propriedades químicas e a disponibilidade nutricional.

Este enfoque multidisciplinar fornece uma base consistente para o avanço da pesquisa e do desenvolvimento em fármacos e alimentos funcionais, promovendo a articulação entre os fundamentos teóricos e suas aplicações práticas.

Palavras-chave: Biodisponibilidade, Food Science e Big Data.

Introdução

A pesquisa de compostos bioativos naturais é inerentemente interdisciplinar, conectando química computacional, ciência dos alimentos e farmacologia. A crescente demanda por abordagens sistemáticas para avaliação de flavonoides e ácidos fenólicos impulsiona o desenvolvimento de metodologias integradas que combinem múltiplas bases de dados e ferramentas computacionais. Este trabalho propõe um framework inovador para avaliação sistemática de propriedades de absorção, biodisponibilidade e características farmacológicas de compostos bioativos, enfatizando a integração entre diferentes áreas do conhecimento.

Métodos

A abordagem metodológica baseou-se na integração de quatro bases de dados principais: **PhytoHub** (compostos fitoquímicos), **Phenol-Explorer** (polifenóis em alimentos), **ChEMBL** (propriedades bioativas) e **FoodDB** (composição alimentar). Utilizou-se a biblioteca **RDKit** em Python para cálculo de descritores moleculares e propriedades físico-químicas. O sistema **Flavonoid Absorption and Property Score (FAPS)** foi desenvolvido, integrando oito descritores moleculares ponderados para avaliação do potencial de absorção.



A avaliação de drug-likeness foi conduzida aplicando métricas como a Regra dos 5 de Lipinski, Regras de Veber, QED e pontuação de citotoxicidade.

O pipeline computacional automatizou a extração, harmonização e análise de dados, garantindo reprodutibilidade e escalabilidade. A interdisciplinaridade foi promovida pelo mapeamento de compostos para fontes alimentares, conectando dados químicos a informações nutricionais.

A validação metodológica incluiu análise de padrões de interação molecular, distribuição de propriedades físico-químicas e correlações entre diferentes métricas de avaliação, testando o framework em um dataset abrangente de compostos bioativos.

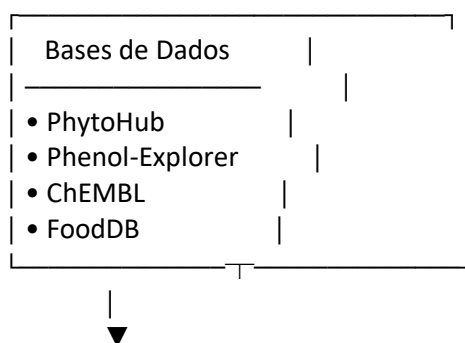
Resultados e Discussões

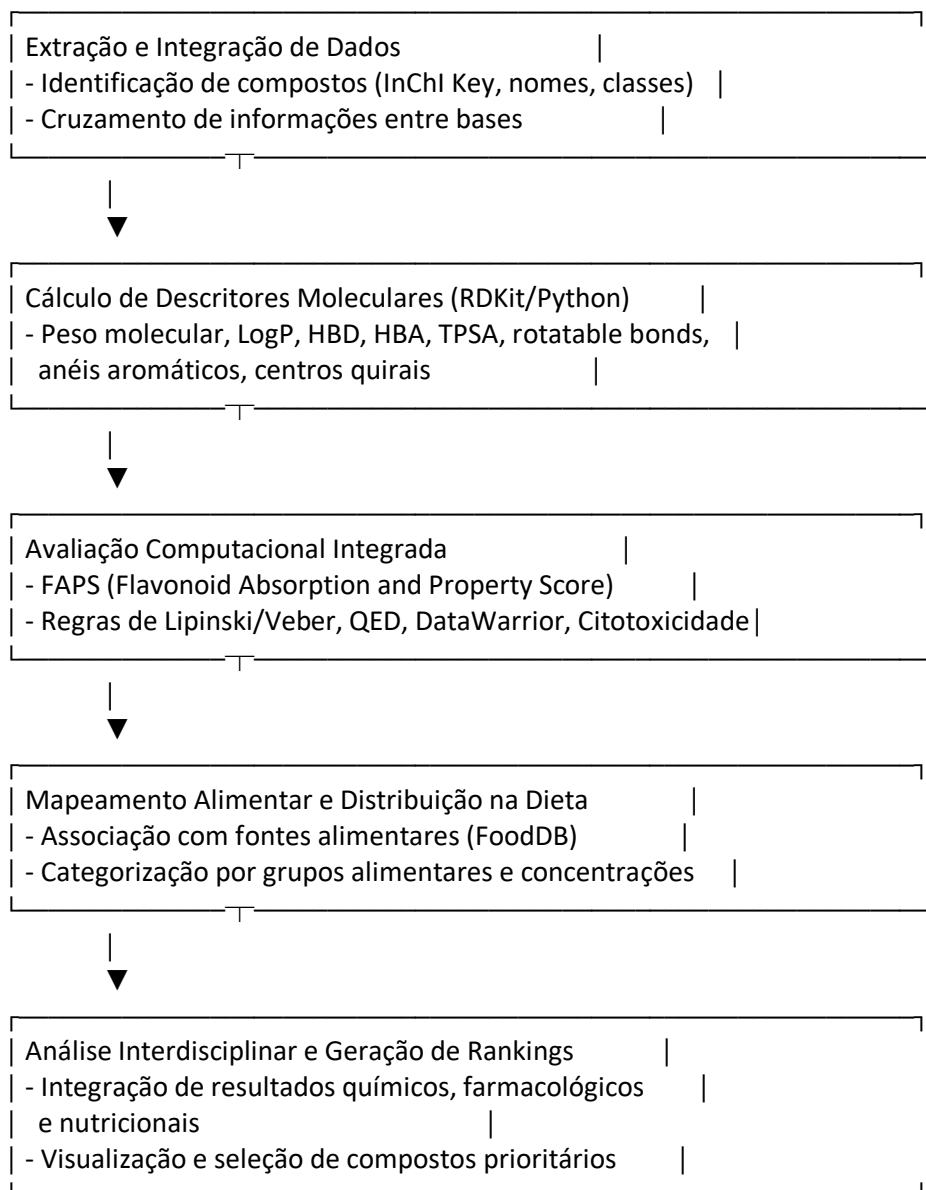
O framework metodológico demonstrou capacidade de processar e analisar grandes volumes de dados de compostos bioativos de forma sistemática e reprodutível. A integração multi-base permitiu análise abrangente considerando propriedades químicas, atividade biológica e contexto nutricional simultaneamente.

O sistema FAPS mostrou-se eficaz na diferenciação de compostos quanto ao potencial de absorção, fornecendo critério quantitativo para priorização. A aplicação de múltiplas métricas de drug-likeness revelou padrões específicos para compostos naturais, contribuindo para adaptação de critérios farmacológicos tradicionais.

O mapeamento de fontes alimentares estabeleceu conexões sistemáticas entre propriedades químicas e disponibilidade nutricional, facilitando a tradução de descobertas químicas para aplicações práticas em nutrição e desenvolvimento de alimentos funcionais.

FIGURA: Diagrama do pipeline metodológico integrando bases de dados, cálculo de descritores e avaliação interdisciplinar





Conclusões

Este trabalho estabelece uma metodologia computacional robusta para avaliação sistemática de compostos bioativos, demonstrando a viabilidade de abordagens interdisciplinares que integram cheminformática, ciência dos alimentos e farmacologia. O framework desenvolvido oferece protocolo reprodutível e escalável aplicável a diferentes classes de compostos naturais, contribuindo para a ponte entre conhecimento teórico e aplicação prática em desenvolvimento de fármacos e alimentos funcionais.

A metodologia proposta representa avanço significativo na sistematização da pesquisa de compostos bioativos,





oferecendo ferramenta valiosa para pesquisadores em áreas correlatas e estabelecendo base para futuras investigações interdisciplinares.

Referências

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/>

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.

