

sujeitos portadores de aparelho ortodôntico que foram convidados a efetuar dois desenhos do seu sorriso em dois momentos distintos: O primeiro desenho remete para o Momento antes do uso do aparelho ortodôntico (M1) e, no segundo desenho, o paciente é convidado a desenhar o seu sorriso após o uso do aparelho ortodôntico (M2). **Resultados e Conclusões:** Os resultados obtidos sugerem que, os principais motivos que levaram os pacientes a procurar cuidados dentários parecem estar mais conotados com problemas estéticos, nomeadamente, a busca por um sorriso alinhado e esteticamente harmonioso.

Palavras-chave: Representação mental, sorriso ortodôntico, sorriso harmonioso e estético, autopercepção do sorriso.

Referências bibliográficas:

- [1] do Rosário Dias, M., Naben, L.G., Monteiro, A.L., Ferreira, A., Alves, V.P. and Delgado, A. When the Silence Speaks: The Smile. *Journal of Biosciences and Medicines*, 6, 13-20, 2018. <https://doi.org/10.4236/jbm.2018.611002>.
- [2] Rosário Dias, M., Ferreira, A., Pires, M.P., Alves, V. and Delgado, A. Orthodontic Smile: A New Categorization of the Perfect Smile. *European Journal of General Dentistry* 9(3):130-133, 2020.
- [3] do Rosário Dias, M., Ferreira, A., Alves, V.P. and Delgado, A., The Mental Representation of the Smile Before and After Orthodontic Treatment. In: *Highlights on Medicine and Medical Reserach*, 5, Dr. Ashish Anand, 2023.

Resumos de Ciências Farmacêuticas/Farmácia

PO29

Previsão de reações adversas dos anti-inflamatórios não esteroides por meio de modelação molecular

Fernando Banze C. Fernando¹, Ivon Gonzalez Blanco², Luis A Torres Gomez^{2*}

¹Instituto Superior Politécnico de Benguela, Angola.

²Instituto Superior de Farmácia y Alimento - Universidad de Havana, Cuba.

*Autor correspondente: ✉ fernando.fernando@ispbenguela.com

Resumo

Introdução: Os anti-inflamatórios não esteróides (AINEs) são amplamente utilizados pelos seus efeitos anti-inflamatórios, analgésicos e antipiréticos no tratamento de diversas patologias, muitas vezes sem receita médica (Aleksic et al., 2022). AINEs é muito comum na população. Por esta razão, os métodos de previsão utilizando técnicas de inteligência artificial impõem-se como uma nova alternativa (Cox et al., 2013). **Objetivos:** Modelar as reações adversas mais prováveis de anti-inflamatórios não esteroidais usando a abordagem MODESLAB. **Material e Métodos:** Para isso, os momentos espectrais da matriz de adjacência entre arestas do gráfico molecular foram calculados com diferentes parâmetros que caracterizam tanto as ligações quanto os átomos nas moléculas de 62 compostos com ação anti-inflamatória. Sobre técnicas estatísticas é usada uma técnica de análise discriminante linear, que está incluída na análise multivariada. **Resultados:** Um total de 91 descritores foram calculados e utilizados em uma série de treinamento dividida em quatro grupos, de acordo com o tipo de reação adversa mais frequente. Para identificar os descritores que melhor discriminam e definem o conjunto de funções, foi desenvolvida uma análise discriminante linear utilizando o método de inclusão stepwise assim como o software estatístico IBM SPSS versão 22. Foram geradas três funções que constituem combinações lineares de seis descritores moleculares que codificam informações estéricas e eletrônicas das moléculas de cada grupo. **Conclusões:** As funções obtidas apresentam um Wilks Lambda muito baixo (0,0146) e uma correlação canônica alta (0,9784), o que demonstra seu poder discriminante, e permite que os descritores nelas incluídas sejam utilizados em futuros estudos.

Palavras-chave: Anti-inflamatorio, QSAR, reações adversas.

Referências bibliográficas:

- [1] Aleksic, S., Seeliger, D., & Brown, J. B. ADMET Predictability at Boehringer Ingelheim: State-of-the-Art, and Do Bigger Datasets or Algorithms Make a Difference? *Mol. Inf.*, 41, 2100113, 2022.
- [2] Cox, R., Green, D. V. S., Luscombe, N., Malcolm, N., & Pickett, S. D. QSAR Workbench: Automating QSAR Modeling to Drive Compound Design. *J. Comp.- Aided. Mol. Des.*, 27, 321, 2013.