

LIVRO DE RESUMOS



DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS – USP

2021



**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2021**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandionio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

PG15

Construção de base de dados de compostos químicos para o desenvolvimento de modelos baseados em aprendizado de máquina aplicados à descoberta de candidatos a fármacos para a malária

NOGUEIRA, V. H. R.¹; GUIDO, R. V. C.¹; FASSIO, A.¹

victor.nogueira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A malária é uma doença tropical infecciosa que possui a maior taxa de mortalidade ao redor do mundo. De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS), estima-se que, no ano de 2019, cerca de 229 milhões de casos da doença tenham ocorrido em todo o planeta, com cerca de 409 mil mortes em decorrência da infecção, das quais 67% representam mortes de crianças com menos de cinco anos de idade.(1) Atualmente, a África subsaariana é a região mais afetada pela doença, representando 94% de todos os casos estimados para o ano de 2019.(1). No Brasil, a área endêmica compreende a região Amazônica, principalmente devido às condições sociais, demográficas e ambientais. A malária é causada vários protozoários do gênero *Plasmodium*, sendo o *Plasmodium falciparum* o principal causador das mortes por essa doença. Esse parasito possui um ciclo de vida complexo, sendo transmitido para hospedeiros humanos por meio de mosquitos fêmeas do gênero *Anopheles* infectados. O tratamento para formas mais severas da doença é realizado com a terapia combinada de derivados da artemisinina (ACT).(2) Entretanto, há um aumento da resistência do parasito aos múltiplos medicamentos disponíveis para o tratamento, de modo que fica evidente uma grande necessidade de se desenvolver novos fármacos antimaláricos. Assim, investigar novos compostos como uma alternativa é uma estratégia bastante atrativa para a descoberta de novos agentes terapêuticos para o tratamento da malária.(2) Neste trabalho, descrevemos a construção de um banco de dados de estruturas químicas e atividade inibitória do *P. falciparum*. A base de dados contém moléculas testadas contra diferentes cepas do parasito causador da malária, extraídas do mais renomado periódico em química medicinal, o *Journal of Medicinal Chemistry*, publicados desde a década de 1970 até 2021. Para cada molécula, o banco possui informações como propriedades físico-químicas, potência antiplasmoidal, cepa na qual foi testada e, quando disponível, o alvo molecular no qual a molécula foi testada. Atualmente, o banco possui mais de 2.000 moléculas que foram manualmente curadas. Essa base de dados será útil para a construção e treinamento de modelos gerativos através de métodos de aprendizado de máquina, os quais têm sido cada vez mais utilizados para a descoberta de novos fármacos.(3) Esses modelos serão utilizados para a descoberta e planejamento de novas moléculas como candidatas a compostos líderes para a malária.

Palavras-chave: Malária. Banco de dados. Aprendizado de máquina.

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. *World malaria report 2020: 20 years of global progress and challenges*. Geneva: 2020. 247 p.
- 2 AGUIAR, A. C. C. et al. New molecular targets and strategies for antimalarial discovery. *Current Medicinal Chemistry*. v. 26, n. 23, p. 4380-4402, 2019.
- 3 IMRIE, F. et al. Deep generative models for 3D linker design. *Journal of Chemical Information and Modeling*. v. 60, n. 4, p. 1983-1995, 2020.