

Artigos Científicos. Fatos e Fatores de Impacto

Dr. Walter F. de Azevedo Jr.
<https://azevedolab.net>

Introdução

Uma descoberta científica necessita ser comunicada para que ocorra a difusão dos novos conhecimentos. Até o século XIX, a grande maioria das novas descobertas era comunicada por meio de livros. A publicação da teoria da evolução se deu por meio da publicação do livro “A Origem das Espécies” de Charles Darwin [1]. Com o aumento da taxa de crescimento de novas descobertas, novos canais mais dinâmicos foram necessários. Os principais meios de divulgação da informação científica atualmente são os periódicos científicos (ou revistas científicas) (“journals”). De uma forma geral, podemos dizer que hoje temos milhares de periódicos científicos nas mais diversas áreas do conhecimento humano.

Apesar da grande abrangência dos assuntos abordados, todos os periódicos científicos guardam uma característica comum: a revisão por pares. Para ilustrar com um exemplo, vamos supor que você em seu laboratório fez uma nova descoberta. Não importa em qual área do conhecimento. Para facilitar, vamos considerar descobertas nas áreas de ciências naturais, saúde, matemática e tecnologia. A descoberta tem que ser comunicada, para que a humanidade como um todo se beneficie do novo conhecimento.

Tradicionalmente os resultados da nova descoberta são convertidos em um artigo em inglês, o “paper”. Há variações na apresentação dos resultados em um artigo científico, normalmente temos título do artigo, seguido pela lista de autores, as afiliações dos autores, o resumo do artigo (*abstract*), a introdução do artigo, uma seção de materiais e métodos, uma seção de resultados, outra de discussão e a conclusão. Segue-se a conclusão, os agradecimentos, lista de abreviaturas (se necessário) e lista de referências. A figura abaixo tem a primeira página de um artigo científico. Podemos ter também um material suplementar relacionado ao artigo. O material suplementar pode ser composto por tabelas adicionais, figuras, vídeos, códigos fonte de programas entre outros. O material suplementar é colocado à parte para não aumentar o tamanho do artigo, e ficará disponível on-line junto com o artigo.

Uma vez que o artigo esteja pronto, ele é submetido ao periódico científico escolhido. Como há milhares de periódicos, normalmente se escolhe um relacionado com a área de estudo do artigo. Há periódicos científicos que não se restringem a uma área do conhecimento, publicando artigos de todas as áreas das ciências e tecnologia, os mais conhecidos são *Nature*, *Science* e *PNAS*. Muito bem, uma vez submetido o artigo, este chega às mãos do editor chefe do periódico científico. O editor chefe poderá fazer uma triagem preliminar do artigo, mas não é sempre que esta triagem ocorre. O que o editor chefe faz é escolher os possíveis avaliadores do artigo submetido. Os avaliadores (árbitros ou revisores) são chamados em inglês de *referees* ou *reviewers*. Os revisores são especialistas no assunto que trata o artigo. Normalmente são escolhidos três avaliadores, este número pode variar conforme o periódico. O editor convida os possíveis avaliadores, que podem ou não aceitar o convite. Se o número de revisores do periódico é três, o editor convida potenciais revisores até que este número seja atingido. Normalmente os revisores têm de duas semanas a um mês para emitir o parecer do artigo. No ambiente científico é considerado prestígio ser *referee* de um periódico científico, mas os revisores normalmente não são pagos por este serviço. Outro aspecto a se destacar, é que uma vez escolhidos os revisores, normalmente os autores não sabem quem são os avaliadores do artigo. Há revistas científicas que revelam a identidade dos revisores, mas o mais comum é que não sejam revelados os nomes dos avaliadores, para que estes se sintam à vontade para avaliar o artigo.



Research Article

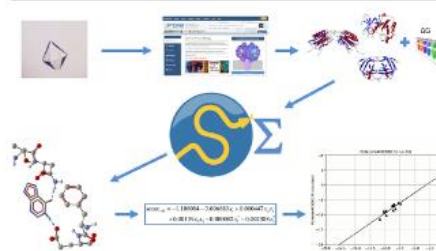
Development of a machine-learning model to predict Gibbs free energy of binding for protein-ligand complexes

Gabriela Bitencourt-Ferreira^a, Walter Filgueira de Azevedo^{a,b,*}^a Laboratory of Computational Systems Biology, School of Sciences, Pontifical Catholic University of Rio Grande do Sul (PUCRS), Av. Ipiranga, 6681, Porto Alegre, RS 90619-900, Brazil^b Graduate Program in Cellular and Molecular Biology, The Pontifical Catholic University of Rio Grande do Sul (PUCRS), Av. Ipiranga, 6681, Porto Alegre, RS 90619-900, Brazil

HIGHLIGHTS

- Development of a machine-learning model to predict free energy of binding for protein-ligand complexes;
- The use of a dataset composed of 48 high-resolution crystallographic structures to be used to build a new scoring function;
- Improved predictive power of the machine learning model to predict ΔG , when compared with classical scoring functions.

GRAPHICAL ABSTRACT



ABSTRACT

The possibility of using the atomic coordinates of protein-ligand complexes to assess binding affinity has a beneficial impact in the early stages of drug development and design. From the computational view, the creation of reliable scoring functions is still an open problem in the simulation of biological systems, and the development of a new generation machine-learning model is an active research field. In this work, we propose a novel scoring function to predict Gibbs free energy of binding (ΔG) based on the crystallographic structure of complexes involving a protein and an active ligand. We made use of the energy terms available in the AutoDock Vina scoring function and trained a novel function using the machine learning methods available in the program SAnDReS. We used a training set composed exclusively of high-resolution crystallographic structures for which the ΔG data was available. We describe here the methodology to develop a machine-learning model to predict binding affinity using the program SAnDReS. Statistical analysis of our machine-learning model indicated a superior performance when compared to the MolDock, Plants, AutoDock 4, and AutoDock Vina scoring functions. We expect that this new machine-learning model could improve drug design and development through the application of a reliable scoring function in the analysis of virtual screening simulations.

Primeira página do artigo: Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo Jr. WF. Development of a machine-learning model to predict Gibbs free energy of binding for protein-ligand complexes. *Biophys Chem.* 2018; 240: 63–69 [2].

Muito bem, uma vez que o artigo foi avaliado pelos revisores este retorna para o editor chefe. Cada revisor emite um parecer sobre o artigo. De uma forma geral, há quatro situações. 1) artigo recusado, 2) artigo aceito com correções substanciais, 3) artigo aceito com correções mínimas, 4) artigo aceito. Nas situações 1 e 4, não há o que fazer, na 4 o artigo vai para publicação, dependendo do periódico em horas após o aceite já pode estar disponível on-line. Em outros casos demoram-se meses até a publicação. Nas situações 2 e 3 os autores podem escolher fazer as correções e submeter o artigo revisado, que será reavaliado e pode finalmente ser aceito. Na situação de recusa, os autores podem submeter para outro periódico científico, considerando eventuais sugestões que os revisores indicarem. É muito comum que um artigo recusado em um periódico tenha indicação dos pontos fracos do artigo, que podem ser superados e submetidos a uma nova revista científica, o que maximiza as chances de sucesso da nova submissão.

Fator de Impacto

Uma das formas de avaliar a repercussão de um periódico científico é por meio do cálculo do fator de impacto (*impact factor*). O fator de impacto (*IF*) é calculado considerando-se todos os artigos científicos

de um dado periódico num dado biênio (P) e o número total de citações que estes artigos receberam neste biênio (N) [3].

$$IF = N/P$$

O *Web of Science* (<https://clarivate.com/essays/impact-factor/>) todo ano publica os fatores de impacto de todos os periódicos indexados. Nem todos os periódicos são indexados. Periódicos novos, precisam de um período mínimo de três anos para serem indexados. Além disso, muitos periódicos não atingem os requisitos estabelecidos para serem indexados, apesarem de terem processo editorial de avaliação de submissão, não foram considerados indexados.

O fator de impacto é um dos parâmetros usados para avaliação de desempenho dos pesquisadores. Outro aspecto é número de citações que cada artigo recebe e mais importante o índice h de cada pesquisador. O índice h é o número de artigos que o pesquisador tem com pelo menos aquele número de citações. Vamos a um exemplo. Um pesquisador com índice h de 30 significa que ele tem pelo menos 30 artigos com pelo menos 30 citações. O número total de citações é facilmente inflado, agora o índice h é difícil de ser artificialmente inflado, sendo o parâmetro mais importante na avaliação do desempenho de um pesquisador.

Há diversas bases de dados que apresentam informações de indexação da produção científica dos pesquisadores. As mais importantes estão listadas a seguir:

ResearchID: <http://www.researcherid.com>

GoogleScholar: <https://scholar.google.com.br/>

ResearchGate: <https://www.researchgate.net/>

Orcid: <https://orcid.org/>

Mendeley: <https://www.mendeley.com/>

Scopus: <https://www.scopus.com>

Se você ainda não se registrou nos sites acima, faça seu registro. É importante para acompanhar as publicações dos assuntos de seu interesse.

Fatos e Mentiras sobre Artigos Científicos

A seguir temos uma lista de observações que vi muitos estudantes de graduação, mestrado e doutorado fazendo nos últimos 30 anos sobre publicações científicas. Algumas fazem sentido outras são absurdas e merecem esclarecimento.

- 1) “Minha área é difícil de publicar, por isso não publico nenhum artigo”. Mentira! Não existe área “difícil” de publicar. Todas áreas do conhecimento científico têm periódicos científicos. Basta procurar. Agora é muito confortável a afirmação acima.
- 2) “Eu não publiquei pois estou aguardando a patente”. Pode acontecer, processos e produtos patenteáveis devem aguardar o processo de registro da patente para posterior publicação. Sempre é importante avaliar se a pesquisa gerou um resultado patenteável. As universidades têm grupos especializados em patente para assessorar os pesquisadores.
- 3) “Meu artigo foi recusado e terei que fazer novos experimentos para submeter novamente”. Não necessariamente, um artigo recusado que vem com parecer pode ajudar a modificar o texto original, sem necessidade de novos experimentos. O novo artigo pode ser submetido a outra revista científica.
- 4) “Não publiquei meu mestrado pois irei continuar o mesmo trabalho no doutorado”. Perigoso, tente sempre publicar seus resultados. Aproveite para publicar um artigo e depois avançar e publicar um segundo artigo com as novidades.

- 5) “Ah você publica bastante porque sua área é fácil de publicar”. Da mesma forma que não existe área “difícil” de publicar não existe área “fácil”. Todos os periódicos têm avaliadores que só deixarão o artigo ser publicado se tiver mérito. O que há são pessoas produtivas e improdutivas. Para os improdutivos tudo é difícil.
- 6) “Publicar não é importante”. Esta é a maior mentira que alguém pode contar sobre ciência e tecnologia. A publicação é uma vitória do cientista, uma realização científica, tecnológica e até cultural. Uma publicação científica abre portas, alavanca a carreira do cientista. Principalmente no início da carreira, serve de base para concessão de bolsa e para estudar no exterior. Para aqueles que realmente amam a ciência é uma das grandes alegrias da carreira científica. Ver seu nome numa publicação científica, o resultado do seu trabalho publicado para comunidade científica internacional é motivo de satisfação e um selo de qualidade do trabalho realizado. Só aqueles que passaram por essa alegria conseguem entender o sentimento a que me refiro. Já tive a alegria de publicar mais de 150 artigos científicos, mas minha maior alegria é ver o sentimento de realização com a publicação dos artigos dos meus orientados. Principalmente os orientados de iniciação científica.
- 7) “Esse negócio de publicar é só para laboratórios ricos”. Outra mentira, há diversos laboratórios que não precisam de grandes quantidades de recursos para publicar. Às vezes uma boa ideia e muito trabalho valem mais de milhões de dólares em equipamentos bonitos que poucos sabem usar e muito menos analisar os resultados.
- 8) “Meu orientador(a) não quer publicar meus resultados”. Converse com seu orientador. Analise as publicações recentes da área da sua pesquisa e veja onde seus resultados podem contribuir. Nunca desista. Pense, analise os dados, reflita sobre os resultados. A discussão científica é salutar e extremamente gratificante. Quando transformamos nossos resultados em artigo científico amaduremos como cientistas e aprendemos de fato.
- 9) “Não irei publicar meus resultados pois um projeto de iniciação científica não gera publicações”. Longe de mim querer dizer o que os outros pesquisadores devem ou não devem fazer. Mas se eu fosse orientado de iniciação científica ficaria muito triste com uma situação assim. Todos, sem exceção, devem ter um projeto de pesquisa quando estão sendo orientados. E o principal objetivo de qualquer projeto de pesquisa é gerar resultados novos, ou seja, no final teremos uma publicação. Assim, se você estiver numa situação como a destacada, converse com seu orientador(a). Publicar é muito importante para um estudante de iniciação científica. Principalmente se o estudante consta como primeiro autor da publicação. Na minha modesta opinião, para as áreas de ciências naturais, saúde, tecnologia e matemática todos os orientados de iniciação científica deveriam ter pelo menos um artigo submetido ao final de um ano de bolsa de iniciação científica.

Conclusão

Meu principal objetivo aqui foi disponibilizar de forma descontraída reflexões sobre um assunto polêmico e que é a principal base para avaliação de desempenho na área acadêmica. Podemos dizer que não há uma receita mágica para se conseguir publicar um artigo científico, mas as dicas gerais apresentadas neste pequeno ensaio ilustram minha modesta visão sobre o assunto. Destaco que os pontos discutidos aqui são resultados de muita reflexão e uma experiência como editor de diversas revistas científicas indexadas por mais de 15 anos. Sempre tenha em mente que uma publicação tem que relatar algo novo, e a novidade que o artigo traz tem que estar bem clara no texto do artigo. Outro hábito importante para maximizar o sucesso na publicação de um artigo científico, é manter-se atualizado sobre o assunto. Leia sempre sua área de pesquisa e sobre ciência em geral. Às vezes a melhor ideia para seu próximo artigo não virá de publicações da sua área específica, mas de um artigo de outra área que gerou uma curiosidade de testar a abordagem relatada para o seu objeto de pesquisa. Pense constantemente sobre sua pesquisa. Fico grato por sugestões e críticas.

Dr. Walter F. de Azevedo Jr.

Frontiers Section Editor (Bioinformatics and Biophysics) for the Current Drug Targets ISSN: 1873-5592

<https://benthamscience.com/journals/current-drug-targets/editorial-board/#top>

Section Editor (Bioinformatics in Drug Design and Discovery) for the Current Medicinal Chemistry ISSN:1875-533X

<https://benthamscience.com/journals/current-medicinal-chemistry/editorial-board/#top>

Referências

[1] Darwin, Charles, 1809-1882. (1859). *On the origin of species by means of natural selection, or preservation of favoured races in the struggle for life*. London :John Murray.

[2] Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo Jr. WF. Development of a machine-learning model to predict Gibbs free energy of binding for protein-ligand complexes. *Biophys Chem*. 2018; 240: 63–69.

[3] SCI® Journal Citation Reports®: a bibliometric analysis of science journals in the ISI® database. Philadelphia: Institute for Scientific Information, Inc.®, 1993.