

O Método Científico



Prof. Dr. Walter F. de Azevedo, Jr.

walter@azevedolab.net

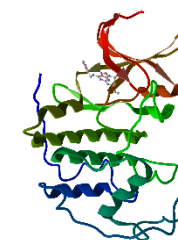
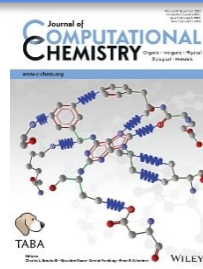
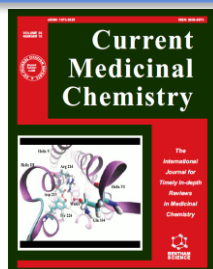
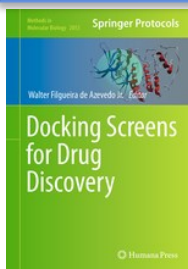
[Biography 01](#) ♥

[Biography 02](#) ♥

[Biography 03](#) ♥

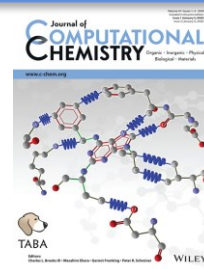
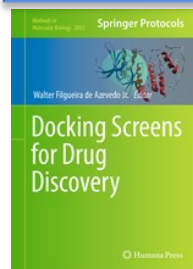
[Biography 04](#) ♥

Frontiers Section Editor (Bioinformatics and Biophysics) for the [Current Drug Targets](#) ISSN: 1873-5592
Section Editor (Bioinformatics in Drug Design and Discovery) for the [Current Medicinal Chemistry](#) ISSN: 1875-533X



Conteúdo

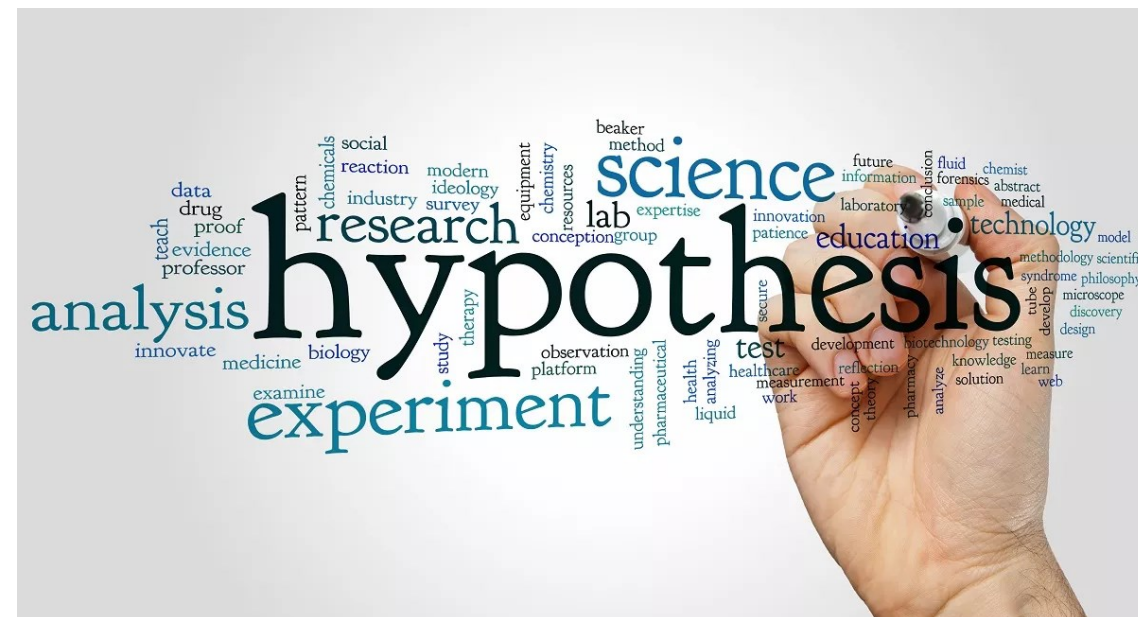
- [Resumo](#)
- [Navalha de Occam](#)
- [Desmascarando a Pseudociência](#)
- [Um Tour pelo Método Científico](#)
- [Experimento Mental](#)
- [Artigos Científicos](#)
- [Anatomia dos Artigos Científicos](#)
- [Scopus](#)
- [Índice h](#)
- [Quociente m](#)
- [Espaço Luz da Ciência](#)



Resumo

Nesta aula descreveremos o Método Científico e o que são os artigos científicos. O avanço do conhecimento científico deve-se à aplicação do método científico, que é a principal forma de investigar e estudar os fenômenos naturais. É uma sistematização das abordagens de estudo do Universo, desde partículas subatômicas até o próprio Universo como um todo. O método científico é o que temos de mais valioso do conhecimento humano. É a luz contra as trevas do negacionismo. Hoje veremos seus princípios com um exemplo contra a pseudociência.

Palavras-chave: Ciência, Navalha de Occam, força de atração gravitacional, força eletromagnética, força nuclear fraca, força nuclear forte, negacionismo, pseudociência, método científico, publons.com, scopus.com, métrica científica, índice h, índice h de 45, quociente m, influência científica, mediocridade científica.



Fonte: https://www.wondriumdaily.com/wp-content/uploads/2021/01/The-Scientific-Procedure-Method-Creativity-Blunders_QBS_Featured.jpg

Navalha de Occam

Tudo que existe na natureza é formado de informação, energia e massa, sendo a última uma forma de energia. As relações entre massa e energia são regidas por quatro forças básicas: força gravitacional, força eletromagnética, força nuclear fraca e força nuclear forte. Podemos dizer que todo fenômeno natural observado é resultado da interação de uma ou mais dessas forças. No estudo científico de qualquer fenômeno, nós usamos alguns princípios lógicos que nos guiam na interpretação da natureza. Discutiremos aqui o princípio lógico conhecido como Navalha de Occam.



Fonte: <https://www.britannica.com/topic/Occams-razor>


Navalha de Occam


O conceito da Navalha de Occam (*Lex parsimoniae*) foi estabelecido pelo frei franciscano William Occam (1285–1349) no século XIV. O conceito diz que a explicação para qualquer fenômeno deve fazer o menor número de suposições possíveis, com a eliminação daquelas que não fazem diferença nas previsões observáveis da hipótese ou teoria explanatória.

Quando múltiplas hipóteses são analisadas sob à luz da Navalha de Occam, o princípio recomenda selecionar a hipótese que introduz o menor número de suposições. Resumindo, a hipótese que tem mais chance de estar certa é a mais simples. Vejam que estamos tratando de um princípio lógico e há exceções. De forma geral, a Navalha de Occam nos guia para eliminar suposições absurdas.

A explicação
mais simples é
usualmente a
correta.

Desmascarando a Pseudociência

 Nada melhor que um exemplo para entendermos a Navalha de Occan. Vamos aplicá-la a uma abordagem pseudocientífica (pseudo=falso). Entre as manifestações pseudocientíficas, a astrologia é uma das bobagens mais divulgadas. Há centenas de livros sobre o assunto e muitos afirmam que há provas científicas sobre a influência dos astros nas nossas vidas.

 São raros os jornais que trazem divulgação científica séria, mas quase todos os jornais apresentam uma coluna de horóscopo. Tais colunas são lidas avidamente por milhões de fãs. Tirando o absurdo de considerar que mais de 650 milhões de pessoas teriam a mesma influência na sua vida, por terem o mesmo signo. Há diversas outros disparates em tal crença. Imaginem 650 milhões de pessoas no mundo todo com um dia idêntico!



 



Imagem da Terra vista do espaço.

Fonte: <https://pixabay.com/illustrations/earth-space-sunlight-sun-rays-1756274/>

Desmascarando a Pseudociência

Consideremos um nativo do signo de capricórnio. Segundo a astrologia, o planeta regente de capricórnio é Saturno. Vamos calcular a força de atração gravitacional que Saturno exerce sobre os capricornianos nascidos no planeta Terra. Como a distância entre os planetas Terra e Saturno varia durante o ano, vamos tentar ajudar os que acreditam em horóscopo e calcular a força de atração gravitacional quando os dois planetas estão mais próximos. Nessa situação a força de atração é máxima. A força de atração gravitacional entre dois corpos de massas M e m é dada pela equação abaixo.

$$F_g = G \frac{Mm}{r^2}$$

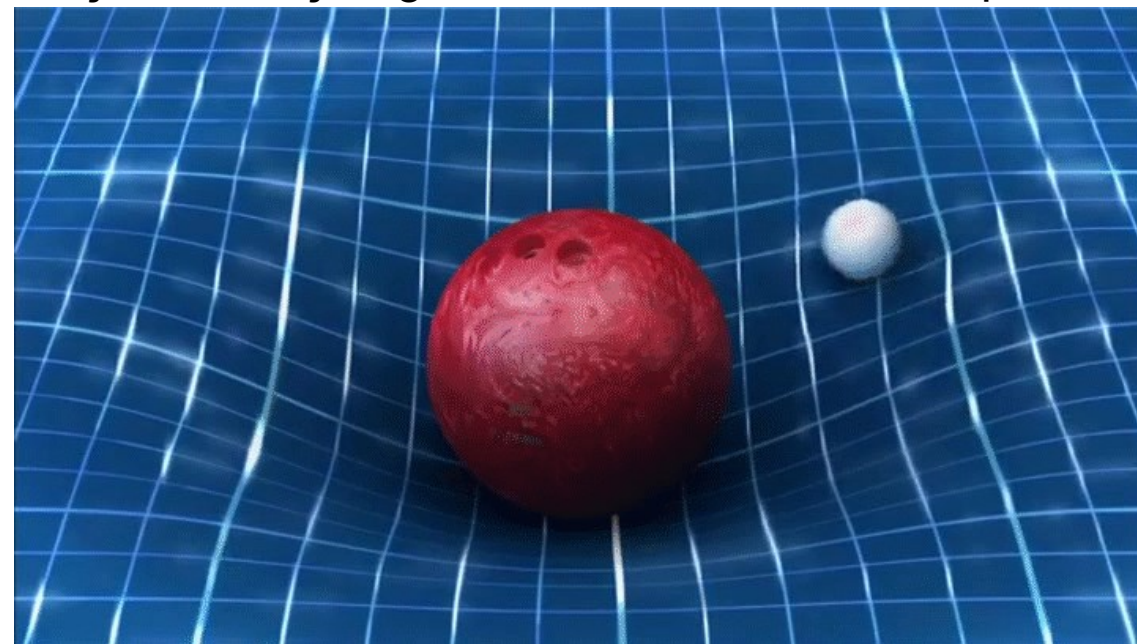
Força de atração gravitacional em N

Massa em Kg

Massa em Kg

Distância entre as massas (M e m) em metros

Constante da gravitação universal ($G = 6,67 \cdot 10^{-11} \text{ N.m}^2/\text{kg}^2$)



Desmascarando a Pseudociência

A menor distância entre os planetas Terra e Saturno é de aproximadamente 1,35 bilhões de km, passando para metros temos $1,35 \cdot 10^{12}$ m.

A massa de Saturno é de $5,69 \cdot 10^{26}$ kg, (fonte: <http://www.solarviews.com/cap/sat/PIA03156.htm>). A força de atração gravitacional de Saturno sobre uma pessoa de 70 kg no planeta Terra é calculada como indicado abaixo.

$$F_{g,S} = G \frac{Mm}{r^2} = 6,67 \cdot 10^{-11} \frac{5,69 \cdot 10^{26} \cdot 70}{(1,35 \cdot 10^{12})^2} = 1,46 \cdot 10^{-6} N$$

$$F_{g,S} = 1,46 \cdot 10^{-6} N$$



Desmascarando a Pseudociência

Vamos considerar a influência que uma xícara de café faz sobre você. Usaremos a lei da gravitação de Newton para determinarmos a atração gravitacional de uma xícara de café. Considere uma xícara de café a 1 cm (0,01 m) de distância (r) de você. A massa da xícara (m) com café é 312 g (0,312 kg). Sua massa (M) é de 70 kg. Determine a força de atração que a xícara exerce sobre você.

Se colocarmos todas unidades do sistema internacional (SI), teremos como resultado uma força em unidades do SI, ou seja, Newton (N), como segue.

$$F_{g,c} = G \frac{Mm}{r^2} = 6,67 \cdot 10^{-11} \frac{0,312 \cdot 70}{(0,01)^2} = 1,46 \cdot 10^{-5} N$$

$$F_{g,c} = 1,46 \cdot 10^{-5} N$$



Desmascarando a Pseudociência

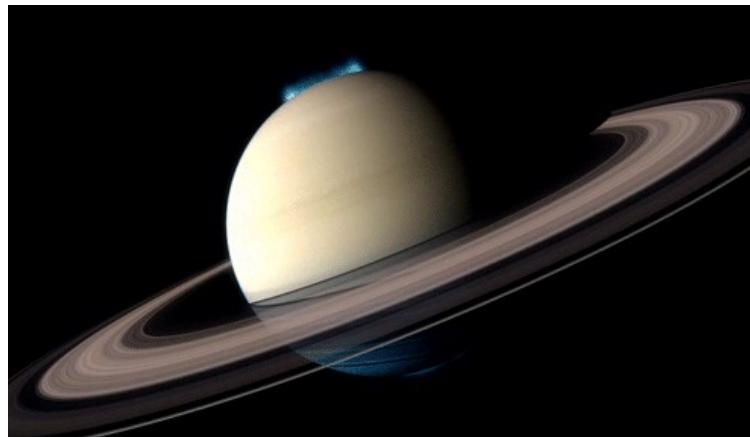
Ou seja, Saturno exerce uma influência sobre você 10 vezes menor que a xícara de café. Há pessoas, infelizmente muitas, que não saem de casa sem antes lerem o horóscopo. A próxima vez que perguntarem seu signo, diga: “Sou do signo da xícara de café”.

$$F_{g,c} = 1,46 \cdot 10^{-5} N$$




$$F_{g,c} > F_{g,s}$$

$$F_{g,s} = 1,46 \cdot 10^{-6} N$$



Desmascarando a Pseudociência


 Convencido que seu signo é a xícara de café? Ou do chimarrão? Bem, nem todos estão com certeza. Alguns podem argumentar: “Bem Walter, na natureza não há somente a força gravitacional. Há outras forças”. Certo! Há mais três forças na natureza. Toda a matéria e energia que conhecemos estão sujeitas a essas quatro forças:

 Força gravitacional

 Força eletromagnética

Força nuclear fraca

 Força nuclear forte

 Então ainda há esperanças que o planeta que rege seu signo exerça alguma dessas forças sobre você? Lamento informá-los que não.

Desmascarando a Pseudociência

Vamos aprender um pouco mais sobre essas quatro forças.

Força gravitacional

Está relacionada às massas dos corpos e é inversamente proporcional à distância entre os corpos. Quanto maior a distância entre os corpos, menor a atração gravitacional.

Força eletromagnética

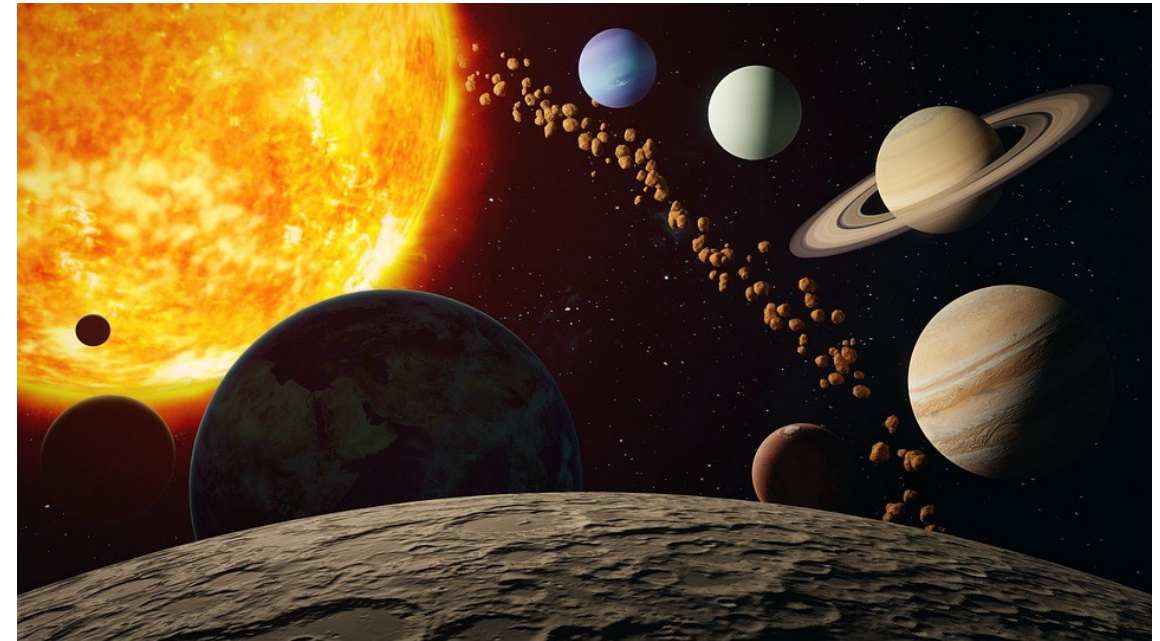
Depende da carga elétrica e da distância. Considerando-se as cargas elétricas envolvidas e a distância entre a Terra e Saturno, a atração devido à cargas é ainda menor que a atração gravitacional.

Força nuclear fraca

Atua no núcleo e é de curto alcance. Não atua em distâncias interplanetárias.

Força nuclear forte

Atua em partículas elementares e também tem curtíssimo alcance. Resumindo, se não é a força gravitacional que está atuando a longa distância, definitivamente não serão as outras.



Nosso sistema solar.

Fonte: <https://pixabay.com/pt/illustrations/espa%C3%A7o-solar-sistema-universo-5975455/>

Um Tour pelo Método Científico

O método científico é um conjunto de procedimentos que possibilita a análise de fenômenos naturais com um olhar crítico e sistemático. O método científico visa extrair modelos de observações experimentais que permitam o entendimento dos fenômenos da natureza. Podemos estabelecer que o método científico envolve a observação de fenômenos, levantamento de hipóteses sobre o fenômeno, experimentação para verificar a validade ou não das hipóteses levantadas e uma conclusão que valida ou não as hipóteses. Resumindo, o método científico é um guia para descobertas científicas. O método científico é a luz que nos separa da superstição e das trevas do negacionismo.



Rocha lunar coletada durante a missão da Apollo 15 em exposição no Science Museum London UK. A peça mostrada na foto foi cortada da rocha "Great Scott" coletada pelo astronauta David Scott em Agosto de 1971, após a alunissagem da nave Apollo 15. A rocha lunar tem massa de 83 g e é mantida numa câmara de nitrogênio para não entrar em contato com a atmosfera terrestre. Um total de 400 kg de rochas foram trazidas da Lua. Uma análise comparativa das rochas lunares indicou semelhanças com as rochas terrestres, o que levou à hipótese da Lua ter se formado a partir de pedaços da Terra, que foram levados ao espaço após a colisão com um planetóide. Tal análise é um exemplo da aplicação do método científico. Foto de Linus Santana Azevedo, 3 de fevereiro de 2013.

Informações adicionais em:

<http://www.sciencemuseum.org.uk/objects/loans/moonrock.asp>

Um Tour pelo Método Científico

O método científico trata de observar algum fenômeno (1) e levantar uma pergunta (2), como por exemplo: como posso explicar o que estou observando? A explicação é uma hipótese que tem que ser testada (3). De posse dos resultados do teste, examinamos estes e chegamos a uma conclusão (4). Por último, reportamos os resultados, hipótese e conclusão na forma de um artigo científico.



Fonte: [https://www.verywellmind.com/thmb/7_eq4ToJ6-3WRPiz_m1d9EKMbY=/800x0/filters:no_upscale\(\):max_bytes\(150000\):strip_icc\(\):format\(webp\)/steps-of-the-scientific-method-2795782-Final-1c4d659549df442f8f68596ec6e14345.png](https://www.verywellmind.com/thmb/7_eq4ToJ6-3WRPiz_m1d9EKMbY=/800x0/filters:no_upscale():max_bytes(150000):strip_icc():format(webp)/steps-of-the-scientific-method-2795782-Final-1c4d659549df442f8f68596ec6e14345.png)

Um Tour pelo Método Científico

Consideremos que uma pessoa tem três fertilizantes para uma dada planta. Sua hipótese é que o fertilizante A funciona melhor que os outros dois (B e C). Usando o método científico, é necessário testar os fertilizantes A, B e C. Depois de observar os resultados, a conclusão é que a hipótese estava correta.

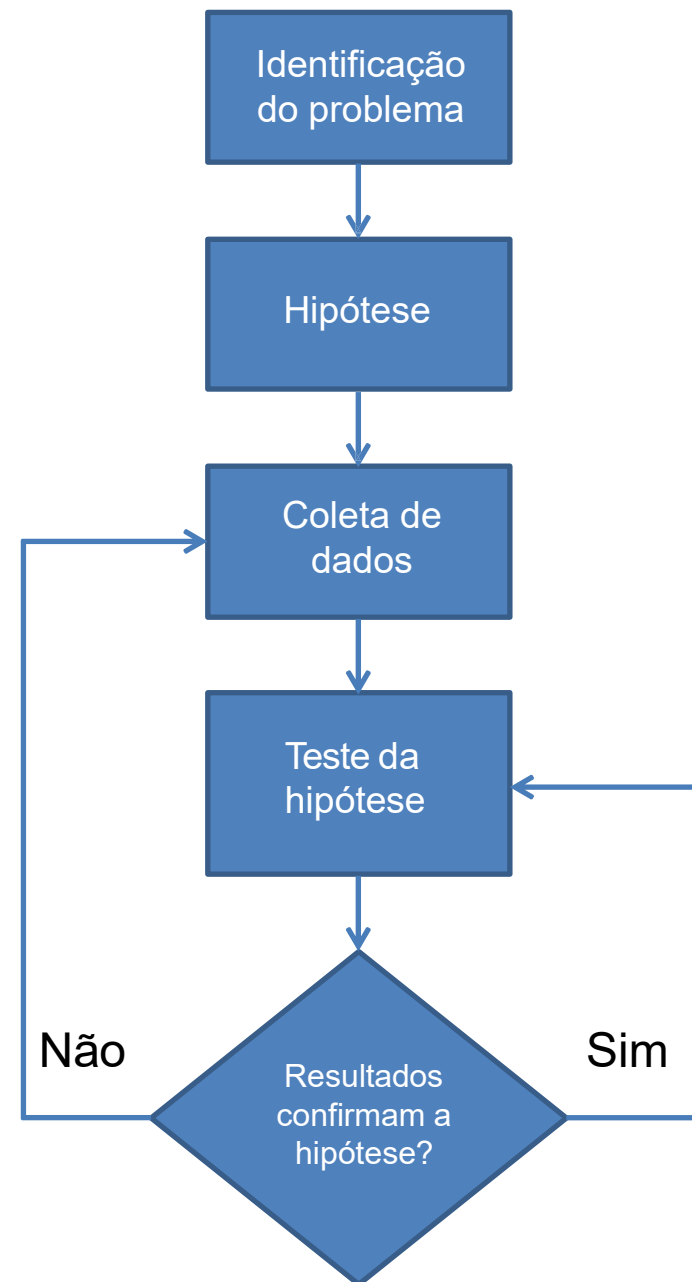


Fonte: <https://www.thoughtco.com/scientific-method-p2-373335>

Um Tour pelo Método Científico

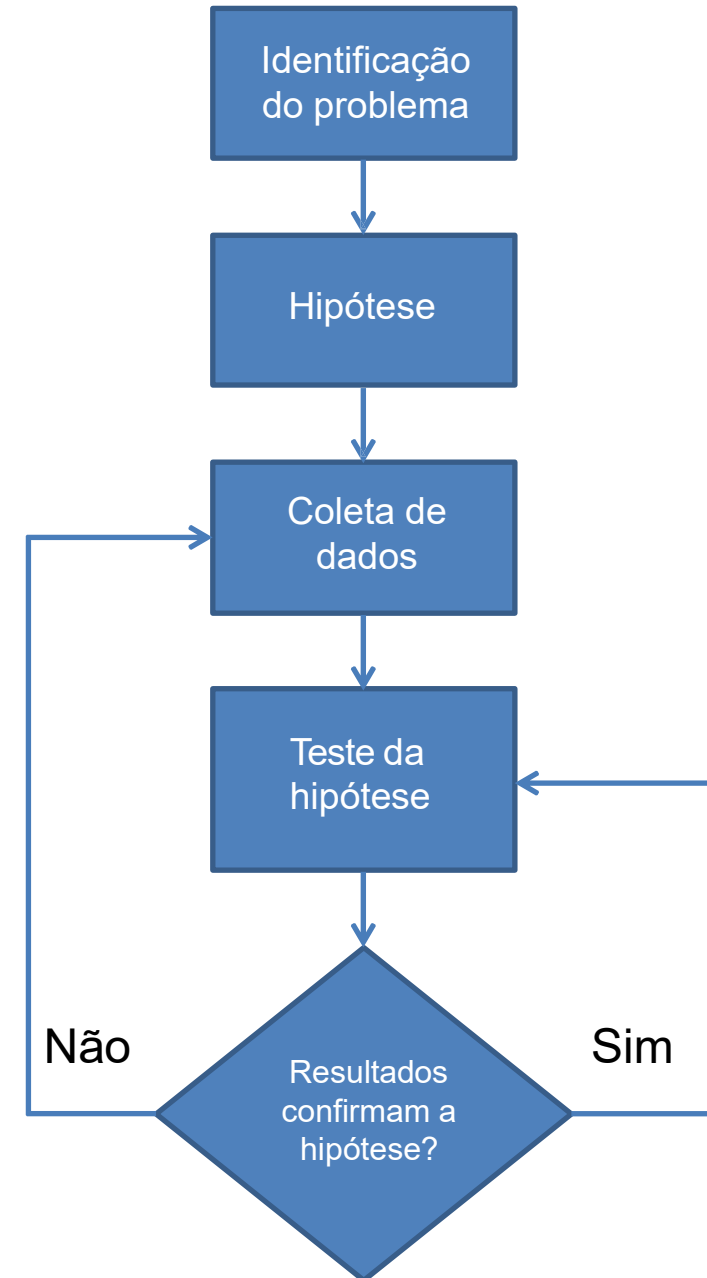
O fluxograma ao lado ilustra os principais passos para a aplicação do método científico. Para a **identificação do problema**, escolhemos o que estamos interessados em estudar. Uma vez definido problema, podemos elaborar uma **hipótese** para explicá-lo. A elaboração da hipótese é uma tentativa de explicar de forma racional o problema que estamos estudando.

Em seguida realizamos a **coleta de dados**. Esta coleta trata de observar e realizar medições focadas no problema em estudo, ou usar dados previamente coletados disponíveis na literatura científica. A natureza das medidas depende do sistema sendo estudado. Tais medidas formam os dados, que serão submetidos à análise estatística que auxiliará no **teste da hipótese**.



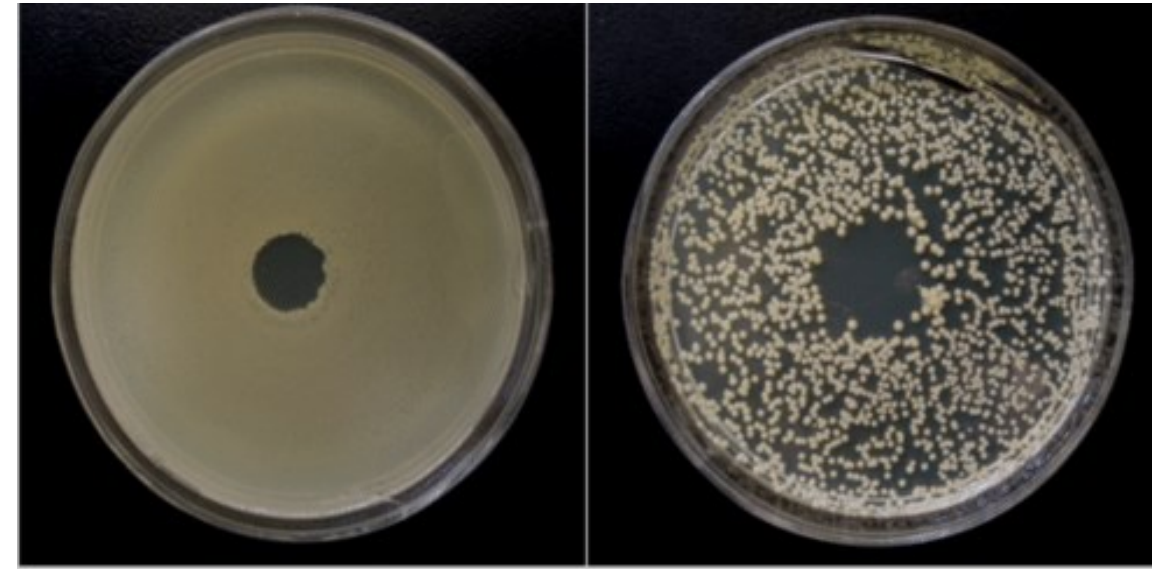
Um Tour pelo Método Científico

A caixa de decisão (representada pelo losango ao lado) indica que testamos se os resultados estão em concordância com a hipótese. Caso estejam, temos um experimento em concordância com a hipótese e podemos elaborar um novo experimento para testá-la ainda mais. Depois que um número estatisticamente relevante de experimentos for realizado, confirmando a hipótese, esta passa a ser aceita pela comunidade científica. Casos os novos experimentos refutem a hipótese levantada, temos a necessidade de elaborar uma nova hipótese, que será testada em novos experimentos. O ciclo se repete.



Experimento Mental

Para ilustrar, consideremos um experimento mental. Este é um recurso usado para testarmos hipóteses e didaticamente apresentarmos conceitos científicos. Experimento mental é um experimento hipotético, mas que pode ser executado, se a tecnologia permitir. Bem, nosso experimento mental considera a influência da temperatura na taxa de crescimento de bactérias. Nossa hipótese é que a temperatura influencia o crescimento das bactérias. Então iremos fazer vários testes para verificar a influência da temperatura na taxa de crescimento das bactérias. Pegamos uma cultura de bactérias e crescemos em um *petri dish* (um tipo de tubo de ensaio) (imagem ao lado). Medimos a taxa de crescimento do número de bactérias em função do tempo. Pegamos uma bactéria específica, como *E. coli*. No nosso experimento mental, medimos a taxa de crescimento das bactérias para as temperaturas de 20° C, 30° C, 40° C, 50° C e 60° C. Os resultados indicam que na faixa de temperaturas testadas, o aumento da temperatura eleva a taxa de crescimento das bactérias.

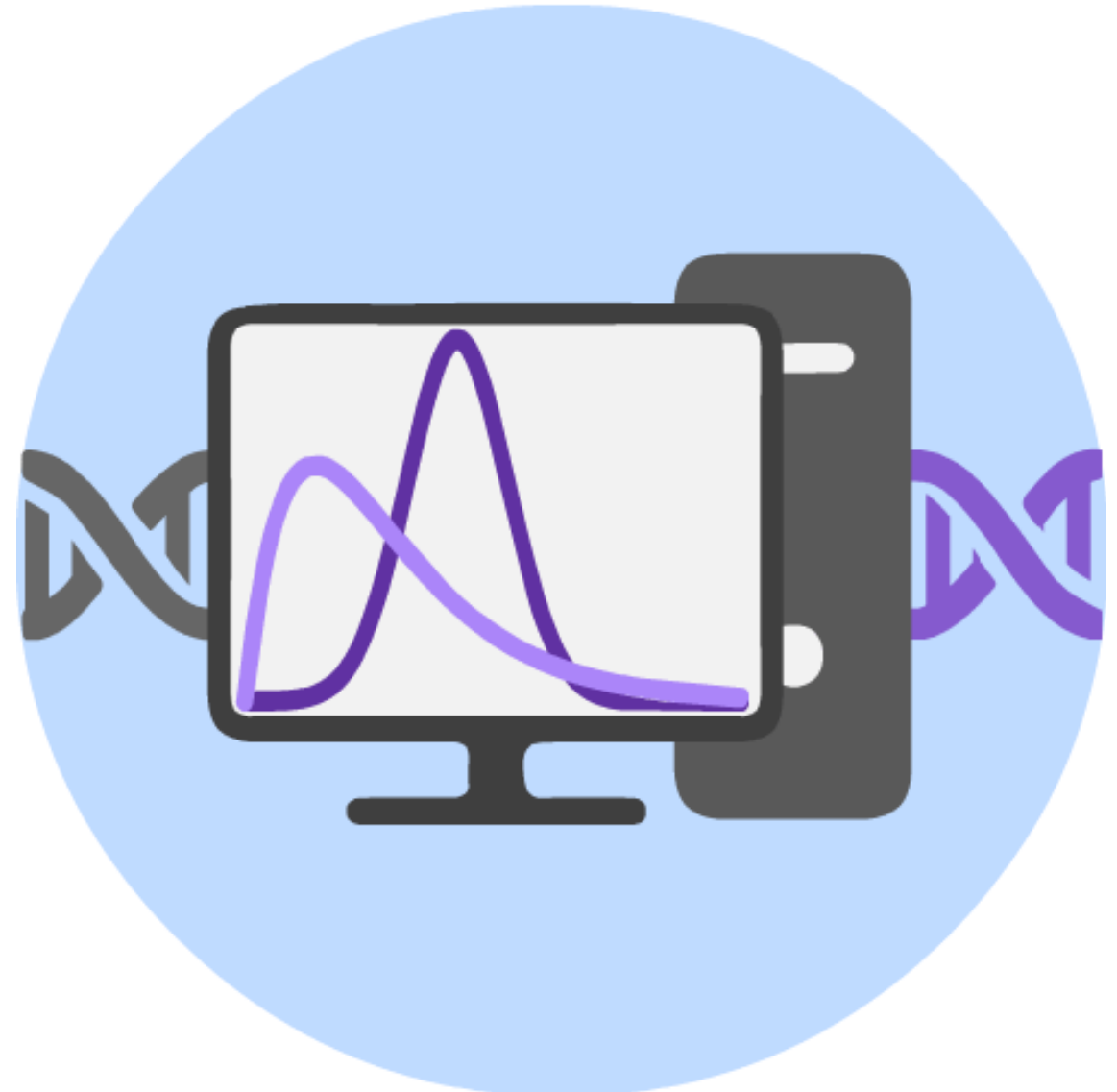


Fonte: https://www.researchgate.net/figure/A-Petri-dish-with-Caso-agar-after-48-hours-seeded-by-10-2-cfu-ml-of-Ecoli-bacteria_fig3_267706870

Experimento Mental

A partir desses resultados, confirmamos a hipótese para a bactéria *E. coli*, podemos testar para outra espécie. Se observarmos o mesmo comportamento, temos mais uma confirmação da hipótese. Assim, teríamos que testar para diferentes espécies de bactérias para vermos abrangência da hipótese.

Se conseguirmos confirmar para um número estatisticamente relevante de espécies de bactérias, podemos afirmar que a temperatura influencia a taxa de crescimento de bactérias. Depois de vários anos de publicados esses resultados, pode ser que para uma bactéria específica a influência da temperatura não seja verificada. Um resultado desses, não significa que tudo o que foi descoberto vai ser jogado fora. Podemos dizer que para certas famílias de bactérias, a temperatura influencia e para outras não. Assim, funciona o método científico, muitas vezes temos que estabelecer a abrangência da nossa hipótese.



Artigos Científicos

Pesquisadores reportam os resultados científicos normalmente na forma de artigos científicos. De uma forma geral, após uma descoberta científica, os cientistas a transformam em um texto em inglês descrevendo os resultados e conclusões. A formatação varia conforme a revista científica, mas normalmente apresenta os seguintes itens: Título, lista de autores, resumo, introdução, metodologia (materiais e métodos), resultados, discussão, conclusão, referências e material suplementar. O título descreve de forma concisa o que os autores querem descrever no artigo. O título tem poucas palavras, raramente excede duas linhas. A lista de autores traz todos que contribuíram para pesquisa reportada no artigo. O primeiro autor é usualmente aquele que mais contribuiu para o artigo. Há também o autor de correspondência, que normalmente é o investigador principal, responsável pelo estudo. O resumo do artigo faz uma breve apresentação dos resultados reportados no artigo, normalmente tem por volta de 250 palavras, mas há variações conforme a revista.



Fonte: <https://pixabay.com/photos/microscope-slide-research-close-up-275984/>

Artigos Científicos

A introdução do artigo traz uma descrição do assunto tratado pelos cientistas. Normalmente faz um relato do conhecimento científico relacionado ao problema estudado, sem incluir os novos resultados. No caso do exemplo da influência da temperatura sobre a taxa de crescimento de bactérias, poderia ser um texto de poucas páginas reportando artigos anteriores que trataram do assunto. Não há uma regra rígida, mas a introdução costuma não exceder um terço do tamanho final do artigo.

A metodologia, também chamada de materiais e métodos, visa descrever os procedimentos usados para se chegar aos resultados descritos no artigo. Nessa parte espera-se que os autores detalhem as metodologias usadas, de forma que qualquer cientista da área sobre o qual o artigo trata seja capaz de reproduzir os resultados.



Fonte: <https://pixabay.com/photos/glasses-book-education-eyeglasses-1052010/>

Artigos Científicos

Os resultados trazem a novidade do artigo. Descreve na forma de texto, tabelas, figuras e esquemas os resultados dos cientistas. Muitos artigos fundem resultados e discussão, onde para cada resultado apresentado segue uma discussão. A discussão pode ser um item separado. Depois temos a conclusão, que pode ser um parágrafo que sintetiza os principais resultados do artigo e destaca uma ou mais conclusões tiradas destes. Todo artigo científico tem uma lista de referências que trazem citações de artigos científicos incluídos pelos autores no texto.



Fonte: <https://pixabay.com/pt/photos/laboratory-medical-medicine-m%c3%a3o-3827745/>

Artigos Científicos

O artigo pode ter uma lista de material suplementar, formado por figuras, tabelas, códigos de programas de computador, imagens, áudios entre outras mídias que não ficaram nos resultados mas completam o artigo. O material suplementar não aparece em todos artigos, mas é comum.

Após a finalização do artigo, os autores o submetem a uma revista científica. O fato de submeterem o artigo científico não significa que este será publicado. O artigo ao ser submetido é enviado ao editor chefe da revista científica. Este funciona como o chefe da revista, que toma as decisões finais sobre o que será ou não publicado naquela revista. O editor chefe lê o artigo submetido e envia para três revisores (em média), caso este ache que o artigo tem mérito para ser avaliado. Se a decisão foi que o artigo não tem mérito, este é rejeitado.



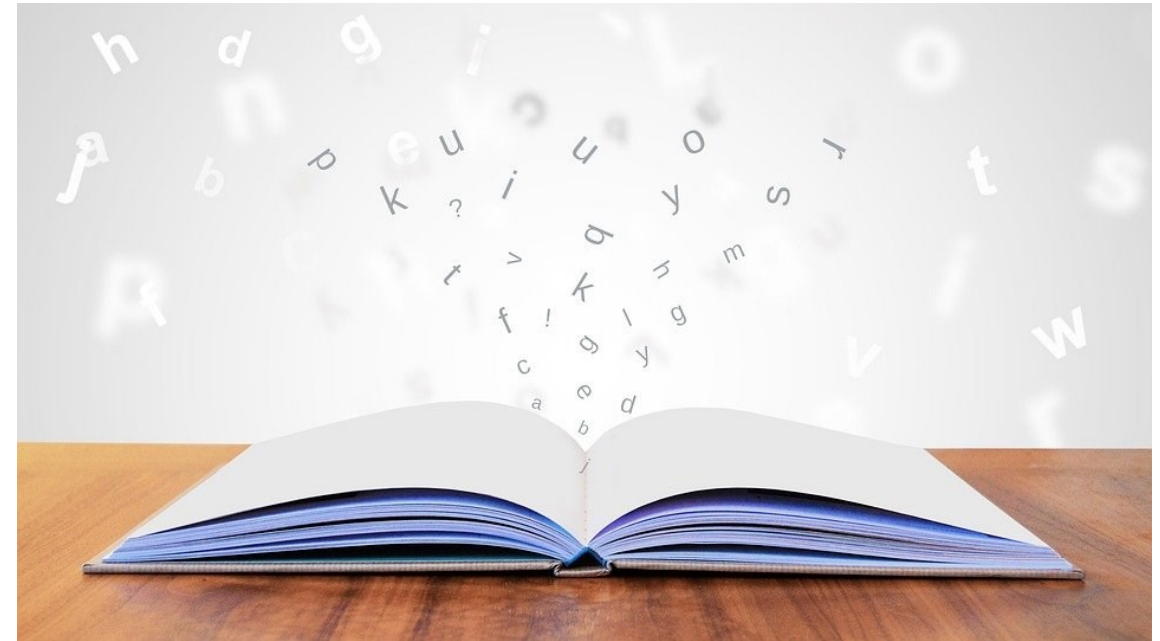
Fonte: <https://pixabay.com/illustrations/science-technology-education-1182713/>

Artigos Científicos

Considerando-se que o artigo foi enviado para os revisores. Estes em média têm duas semanas para fazer a avaliação. A maioria das revistas científicas dá quatro opções de resposta para os revisores.

- 1) Artigo aceito para publicação como está.
- 2) Artigo aceito com correções mínimas.
- 3) Artigo pode ser aceito com correções substanciais.
- 4) Artigo rejeitado, sem ressubmissão.

No caso 4, não há o que fazer com relação à submissão para revista escolhida, mas os autores podem reformatar o artigo e submeter para outra revista. No caso 1, o artigo está aceito. Normalmente em poucos dias o artigo já estará disponível online no site da revista. Nos casos 2 e 3 os autores têm que fazer as correções e ressubmeter o artigo, que será avaliado novamente e as respostas dos revisores seguem o padrão já destacado.



Fonte: <https://pixabay.com/photos/book-literature-page-book-bindings-3033196/>

Artigos Científicos

Resumindo, os artigos científicos só serão publicados se tiverem méritos para sua publicação. São considerados vários aspectos do artigo, mas o principal é a adequação da metodologia usada pelos cientistas e se os resultados têm novidade suficiente para justificar uma nova publicação.

Artigos científicos são extremamente importantes, eles são resultados diretos da aplicação do método científico. Às vezes há centenas de autores envolvidos em um artigo científico e milhões de dólares investidos para compra de equipamentos e reagentes para gerar os resultados reportados no artigo. A grande maioria das vezes, os recursos usados pelos cientistas são públicos, por isso, destacamos ainda mais a importância do artigo. Os artigos que usam recursos públicos devem ter a preocupação de reportar resultados que sejam de interesse do público, que pagou com impostos por essa pesquisa.



Fonte: <https://pixabay.com/vectors/papers-stack-heap-documents-576385/>

Anatomia dos Artigos Científicos

Veremos um artigo científico publicado para destacar o seus principais itens. Abaixo temos a primeira página de um artigo científico, com destaque para alguns itens já discutidos (título, autores, resumo e introdução). Também destacamos o nome da revista e o identificador digital do artigo (DOI) (*Digital Object Identifier*).


Nome da revista

Journal of
**COMPUTATIONAL
CHEMISTRY**

WWW.C-CHEM.ORG

SOFTWARE NEWS AND UPDATES

Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity

Amauri Duarte da Silva^[a,b] Gabriela Bitencourt-Ferreira,^[a] and
Walter Filgueira de Azevedo Jr. ^{*,[a,b]}

Resumo

Evaluation of ligand-binding affinity using the atomic coordinates of a protein-ligand complex is a challenge from the computational point of view. The availability of crystallographic structures of complexes with binding affinity data opens the possibility to create machine-learning models targeted to a specific protein system. Here, we describe a new methodology that combines a mass-spring system approach with supervised machine-learning techniques to predict the binding affinity of protein-ligand complexes. The combination of these techniques allows exploring the scoring function space, generating a model

targeted to a protein system of interest. The new model shows superior predictive performance when compared with classical scoring functions implemented in the programs Molegro Virtual Docker, AutoDock4, and AutoDock Vina. We implemented this methodology in a new program named Taba. Taba is implemented in Python and available to download under the GNU license at <https://github.com/azevedolab/taab>. © 2019 Wiley Periodicals, Inc.

DOI: 10.1002/jcc.26048

Introdução

Introduction

The computational evaluation of the ligand-binding affinity is an open problem in the field of computational chemistry. The possibility of using the atomic coordinates available for protein-ligand complexes to predict binding affinity has a tremendously beneficial impact on drug design.^[1,2] Here, we describe the

We have the principles we described above implemented in the program Taba, which is an acronym for Tool to Analyze the Binding Affinity. Taba focuses on the generation of machine-learning models to predict ligand-binding affinity for protein-ligand structures. To do so, Taba makes use of an algorithm that sees protein-ligand interactions as a mass-spring system. For the mass-spring approach Taba considers the average

Título

Autores

DOI

Anatomia dos Artigos Científicos

O DOI de um artigo científico funciona como o CPF deste. O DOI identifica de forma única um artigo científico. A adoção desse sistema facilita a localização dos artigos científicos. Lembrem-se, todo dia milhares de artigos científicos são publicados, o DOI facilita a identificação a recuperação das informações do artigo.


Nome da revista

Journal of
**COMPUTATIONAL
CHEMISTRY**

WWW.C-CHEM.ORG

SOFTWARE NEWS AND UPDATES

Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity

Amauri Duarte da Silva^[a,b] Gabriela Bitencourt-Ferreira,^[a] and
Walter Filgueira de Azevedo Jr. ^{*,[a,b]}

Título

Autores

Resumo

Evaluation of ligand-binding affinity using the atomic coordinates of a protein-ligand complex is a challenge from the computational point of view. The availability of crystallographic structures of complexes with binding affinity data opens the possibility to create machine-learning models targeted to a specific protein system. Here, we describe a new methodology that combines a mass-spring system approach with supervised machine-learning techniques to predict the binding affinity of protein-ligand complexes. The combination of these techniques allows exploring the scoring function space, generating a model

targeted to a protein system of interest. The new model shows superior predictive performance when compared with classical scoring functions implemented in the programs Molegro Virtual Docker, AutoDock4, and AutoDock Vina. We implemented this methodology in a new program named Taba. Taba is implemented in Python and available to download under the GNU license at <https://github.com/azevedolab/taeba>. © 2019 Wiley Periodicals, Inc.

DOI: 10.1002/jcc.26048

DOI

Introdução

Introduction

The computational evaluation of the ligand-binding affinity is an open problem in the field of computational chemistry. The possibility of using the atomic coordinates available for protein-ligand complexes to predict binding affinity has a tremendously beneficial impact on drug design.^[1,2] Here, we describe the

We have the principles we described above implemented in the program Taba, which is an acronym for Tool to Analyze the Binding Affinity. Taba focuses on the generation of machine-learning models to predict ligand-binding affinity for protein-ligand structures. To do so, Taba makes use of an algorithm that sees protein-ligand interactions as a mass-spring system. For the mass-spring approach Taba considers the average

Anatomia dos Artigos Científicos

Na página seguinte temos a parte de métodos. O artigo em destaque não tem a parte de materiais, pois é um artigo computacional. A hipótese do artigo é que podemos olhar a interação de um fármaco com uma proteína como se fosse um sistema massa-mola.

pairs of atoms inside of a protein region with a defined cutoff distance. We consider these average distances as equilibrium distances, in the mass-spring approach. For a given structure, any displacement from this equilibrium distance generates an increase in the potential energy of the protein-ligand system.

The use of a mass-spring approach is ubiquitous in modeling oscillating systems in nature (at least approximately). A mass-spring approach applies for an idealized spring, and it is a reasonable approximation for a real-live spring, homogeneous isotropic elastic materials,^[7,8] graphene sheets,^[9] the phenomenon of electron tunneling in transistors made from C140,^[10] and others complex networks.^[11]

Let us consider arbitrary potential energy $V(x)$, and we can expand this potential in a Taylor series around d_0 (the location of the minimum of potential energy). We have the following expression,

$$V(x) = V(d_0) + V(d_0)'(x-d_0) + (1/2!)V(d_0)''(x-d_0)^2 + (1/3!)V(d_0)'''(x-d_0)^3 + \dots \quad (1)$$

In the above equation, the second term on the right-hand side is zero, because we have the minimum and the first derivative of the potential energy (V') is zero. The terms with order higher or equal to 3 are negligible compared with the $(x-d_0)^2$. Then, we have the following equation,

$$V(x) \approx V(d_0) + (1/2!)V(d_0)''(x-d_0)^2 \quad (2)$$

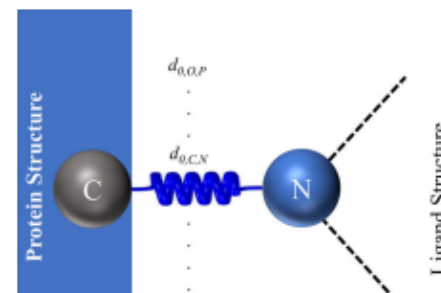
In summary, we could consider our protein-ligand system as composed of an atom-spring-atom system, where we take the first atom from the protein structure and the second one from

As proof of concept, we applied the present methodology to generate a targeted-scoring function for cyclin-dependent kinases (CDK). These enzymes comprise an attractive protein system due to the richness of structural and binding affinity data. Also, CDK is a protein target for drug development,^[12] which highlights the potential use of new computational methodologies in drug discovery. The hybrid methodology involving the mass-spring model and machine-learning approach shows superior predictive performance when compared with classical scoring functions available in the AutoDock4 (AD4), AutoDock Vina, and Molegro Virtual Docker (MVD).^[13-15]

Methods

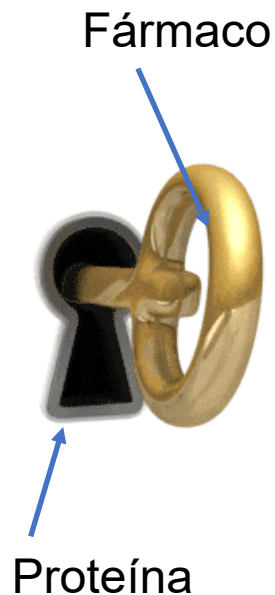
We implemented the combined mass-spring model and machine-learning technique in the program Taba. We show the Taba flowchart in Figure 3. In the first step, the user defines the type of binding affinity and the PDB access codes. Taba will download PDB files (protein-ligand complexes) and CSV files with experimental binding affinity data. Taba can handle the following types of binding affinity: inhibition constant (K_i),

Métodos



Anatomia dos Artigos Científicos

Muitas das doenças têm proteínas relacionadas e os remédios (fármacos) encaixam nestas proteínas para gerarem uma resposta farmacológica. Normalmente usamos a analogia chave-fechadura. Onde a chave é o fármaco e a fechadura é a parte da proteína onde encaixa o fármaco.



pairs of atoms inside of a protein region with a defined cutoff distance. We consider these average distances as equilibrium distances, in the mass-spring approach. For a given structure, any displacement from this equilibrium distance generates an increase in the potential energy of the protein-ligand system.

The use of a mass-spring approach is ubiquitous in modeling oscillating systems in nature (at least approximately). A mass-spring approach applies for an idealized spring, and it is a reasonable approximation for a real-live spring, homogeneous isotropic elastic materials,^[7,8] graphene sheets,^[9] the phenomenon of electron tunneling in transistors made from C140,^[10] and others complex networks.^[11]

Let us consider arbitrary potential energy $V(x)$, and we can expand this potential in a Taylor series around d_0 (the location of the minimum of potential energy). We have the following expression,

$$V(x) = V(d_0) + V(d_0)'(x-d_0) + (1/2!)V(d_0)''(x-d_0)^2 + (1/3!)V(d_0)'''(x-d_0)^3 + \dots \quad (1)$$

In the above equation, the second term on the right-hand side is zero, because we have the minimum and the first derivative of the potential energy (V') is zero. The terms with order higher or equal to 3 are negligible compared with the $(x-d_0)^2$. Then, we have the following equation,

$$V(x) \approx V(d_0) + (1/2!)V(d_0)''(x-d_0)^2 \quad (2)$$

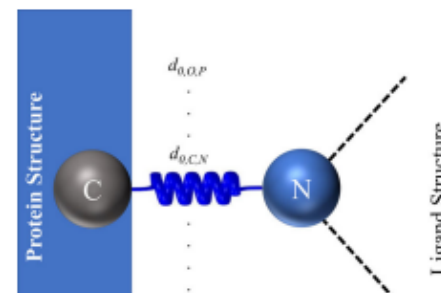
In summary, we could consider our protein-ligand system as composed of an atom-spring-atom system, where we take the first atom from the protein structure and the second one from

As proof of concept, we applied the present methodology to generate a targeted-scoring function for cyclin-dependent kinases (CDK). These enzymes comprise an attractive protein system due to the richness of structural and binding affinity data. Also, CDK is a protein target for drug development,^[12] which highlights the potential use of new computational methodologies in drug discovery. The hybrid methodology involving the mass-spring model and machine-learning approach shows superior predictive performance when compared with classical scoring functions available in the AutoDock4 (AD4), AutoDock Vina, and Molegro Virtual Docker (MVD).^[13-15]

Methods

We implemented the combined mass-spring model and machine-learning technique in the program Taba. We show the Taba flowchart in Figure 3. In the first step, the user defines the type of binding affinity and the PDB access codes. Taba will download PDB files (protein-ligand complexes) and CSV files with experimental binding affinity data. Taba can handle the following types of binding affinity: inhibition constant (K_i),

Métodos



Anatomia dos Artigos Científicos

Mais adiante no artigo, temos a parte de resultados e discussão.

a dataset of crystallographic structures of human CDKs (EC 2.7.11.22) for which K_i data were available. We deleted repeated ligands from the dataset, keeping the one with the highest resolution. In doing so, we try to maintain chemical diversity by eliminating repeated ligands that may overpopulate the training and test sets. We have 31 structures satisfying these criteria in the PDB (a search carried out on May 29, 2019). This dataset will be referred to as CDKki dataset (Supporting Information S1).

We used the structures in the CDKki dataset to evaluate the binding affinity using the scoring functions available in the following docking programs: MVD, AD4, and AutoDock Vina.^[13–15] We calculated the binding affinities for the crystallographic positions of the ligands and proteins. We did not employ docked poses in this analysis. We applied the program SAnDReS^[21] to carry out the statistical analysis of the predictive performance of the scoring functions available in the docking programs mentioned above.

Results and Discussion

Statistical analysis of the predictive performance of classical scoring functions indicates that ρ ranges from -0.569 to 0.650 for the test set structures (Table 1). For the training set, the ρ ranges from -0.257 to 0.407 (Supporting Information S2).

To generate models using Taba, we considered different cutoff distances (3.5, 4.5, 6.0, 7.5, and 9.0 Å). Models with cutoff distances higher than 9.0 Å showed poor predictive performance for the CDKki dataset, and we did not discuss them here. We also varied the number of explanatory variables in the models (from 2 to 4 variables). We took $\log(K_i)$ as the response variable. In the Supporting Information S3A and S3B, we have a statistical analysis of the best model for each cutoff. Taking the

3 score ^b				
Affinity score ^c	-0.067	0.8647	0.117	0.3669
Gauss 1 score ^c	-0.367	0.3317	0.120	0.3603
Gauss 2 score ^c	-0.283	0.4600	0.018	0.7297
Repulsion score ^c	-0.700	0.0358	0.240	0.1804
Hydrophobic score ^c	0.100	0.7980	0.002	0.9157
Hydrogen score ^c	-0.583	0.0992	0.340	0.0993
Taba (3 variables, $d \leq 4.5$ Å)	0.783	0.01252	0.794	0.0107

Calculated using [a] AD4; [b] MVD; [c] Vina.

training set results, we considered the best overall model, the one with the lowest standard deviation, which shows a scoring function with three explanatory variables and a cutoff distance of 4.5 Å. For this model, the regression constants are the following: $\alpha_0 = -6.581356$; $\alpha_{C,N} = -0.111232$; $\alpha_{C,O} = -0.406456$; $\alpha_{N,F} = -0.353717$. The equilibrium distances are the following: $d_{0,C,N} = 3.99463$; $d_{0,C,O} = 3.88190$; $d_{0,N,G} = 4.21672$ Å. Taba obtained these results using the elastic net with CV as a regression method.

Statistical analysis of the predictive performance indicates that Taba model has the highest correlation coefficients for training and test sets when compared with 24 scoring functions (Table 1 and Supporting Information S2–S7). For the test set, we have $\rho = 0.78$ (p value = 0.01252).

The model obtained using Taba highlights the importance of intermolecular interactions involving the following pair of atoms CN, CO, and NF for binding affinity. Especially interesting is the participation of N and F in the intermolecular potential. Previous analysis of hundreds of crystallographic structures of CDK in complex with inhibitors indicated the importance of the halogen atoms for binding affinity.^[22] The Taba machine-learning model captured this critical structural feature for the binding affinity of CDKs.

Resultados e Discussão



Anatomia dos Artigos Científicos

Por último temos as conclusões, a lista de referências e o link para o material adicional.

Conclusões → Conclusions


Here, we reported the development of a new computational method to predict ligand-binding affinity based on an ensemble of crystallographic structures for which binding affinity is available. This methodology is implemented in the program Taba. The new approach considers that we may model the protein-ligand interaction as a mass-spring system. The present method strongly relies on experimental data for protein structures, and ligand-binding affinity. As proof of concept, we generated a model using Taba for CDK crystallographic structures with K_i data. Our machine-learning model showed superior performance when compared with AD4, MVD, and Vina scoring functions. The combined mass-spring system and machine-learning approaches have the flexibility to generate a scoring function targeted to a protein system of interest, which allows us exploring the scoring function space, producing a model adequate to the protein system of interest.

Acknowledgment

GBF acknowledges the receipt of a fellowship from the Pontifical Catholic University of Rio Grande do Sul (PUCRS) (Programa de Bolsa/Pesquisa para Alunos da Graduação, BPA program).

Keywords: binding affinity · scoring function · machine learning · protein–ligand interactions · drug design

How to cite this article: A. D. da Silva, G. Bitencourt-Ferreira, W. F. de Azevedo Jr. *J. Comput. Chem* **2020**, *41*, 69–73. DOI: 10.1002/jcc.26048

 Additional Supporting Information may be found in the online version of this article.

← Referências

- [1] Y. Cao, W. Dai, Z. Miao, *Methods Mol. Biol.* **2018**, *1762*, 233.
- [2] Y. Li, M. Su, Z. Liu, J. Li, J. Liu, L. Han, R. Wang, *Nat. Protoc.* **2018**, *13*, 666.
- [3] T. I. Oprea, J. Gottfries, *J. Comb. Chem.* **2001**, *3*, 157.
- [4] J. M. Smith, *Nature* **1970**, *225*, 563.
- [5] G. S. Heck, V. O. Pintro, R. R. Pereira, M. B. de Ávila, N. M. B. Levin, W. F. de Azevedo, *Curr. Med. Chem.* **2017**, *24*, 2459.
- [6] J. Westbrook, Z. Feng, L. Chen, H. Yang, H. M. Berman, *Nucleic Acids Res.* **2003**, *31*, 489.
- [7] M. Kot, H. Nagahashi, P. Szymczak, *Vis. Comput.* **2015**, *31*, 1339.
- [8] M. Kot, H. Nagahashi, *Vis. Comput.* **2017**, *33*, 283.
- [9] M. H. Kim, D. Kim, J. B. Choi, M. K. Kim, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 15263.
- [10] A. N. Pasupathy, J. Park, C. Chang, A. V. Soldatov, S. Lebedkin, R. C. Bialczak, J. E. Grose, L. A. K. Donev, J. P. Sethna, D. C. Ralph, P. L. McEuen, *Nano Lett.* **2005**, *5*, 203.
- [11] M. Zhan, S. Liu, Z. He, *PLoS One* **2013**, *8*, e82161.
- [12] W. F. De Azevedo, S. Leclerc, L. Meijer, L. Havlicek, M. Strnad, S. H. Kim, *Eur. J. Biochem.* **1997**, *243*, 518.
- [13] G. M. Morris, D. S. Goodsell, R. S. Halliday, R. Huey, W. E. Hart, R. K. Belew, A. J. Olson, *J. Comput. Chem.* **1998**, *19*, 1639.
- [14] O. Trott, A. J. Olson, *J. Comput. Chem.* **2010**, *31*, 455.
- [15] R. Thomsen, M. H. Christensen, *J. Med. Chem.* **2006**, *49*, 3315.
- [16] T. Liu, Y. Lin, X. Wen, R. N. Jorissen, M. K. Gilson, *Nucleic Acids Res.* **2007**, *35*, 198.
- [17] L. Hu, M. L. Benson, R. D. Smith, M. G. Lerner, H. A. Carlson, *Proteins* **2005**, *60*, 333.
- [18] R. Wang, X. Fang, Y. Lu, S. Wang, *J. Med. Chem.* **2004**, *47*, 2977.
- [19] E. Cichero, S. Cesarini, L. Mosti, P. Fossa, *J. Mol. Model.* **2010**, *16*, 1481.
- [20] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg, J. Vanderplas, A. Passos, D. Cournapeau, M. Brucher, M. Perrot, E. Duchesnay, *J. Mach. Learn. Res.* **2011**, *12*, 2825.
- [21] M. M. Xavier, G. S. Heck, M. B. Avila, N. M. B. Levin, V. O. Pintro, N. L. Carvalho, W. F. Azevedo, *Comb. Chem. High Throughput Screen.* **2016**, *19*, 801.
- [22] M. Z. Hernandez, S. M. Cavalcanti, D. R. Moreira, W. F. de Azevedo, A. C. Leite, *Curr. Drug Targets* **2010**, *11*, 303.

Received: 3 June 2019
Accepted: 28 July 2019
Published online on 13 August 2019

Material Adicional →

Scopus

Hoje iremos explorar outra base de dados de artigos científicos e currículos de pesquisadores, a base de dados scopus.com. Como na base de dados publons.com, a Scopus permite a busca de pesquisadores pelo nome. No seu navegador acesse scopus.com. Você terá a página abaixo. Clique em *Author Search*.

Scopus Preview

Author Search Sources ? Create account Sign in

Welcome to Scopus Preview

What is Scopus [↗](#) Blog [↗](#)

in

Check access

Check if you have access through your sign in credentials or via your institution.

[Check Scopus access](#)

Check out your free author profile!

Did you know Scopus offers free profiles to all indexed authors? Review yours, claim it, and update it — all for free!

[View your author profile >](#)

Scopus content

Content coverage guide

Looking for free journal rankings and metrics?

Search for an author profile

Author last name: Author first name:

Affiliation: [Show more options](#) [Search](#)

[Search](#)

About Scopus Language Customer Service

What is Scopus	CONTACT US	Help
Customer support	CONTACT US	
Feedback	CONTACT US	

Sources

Introducing Clarivate metrics for serials

We are pleased to introduce Clarivate metrics for serials — comprehensive content and the leading for serials in Scopus. Search in Scopus to find serials and see the new metrics. Use the annual metrics for ranking, and the 5-year metrics for publication trends. The new metrics are available in Scopus and the Scopus database. When planning your research, and always use them in conjunction with the qualitative part.

Search for a source: Browse sources:

[Download Scopus Research](#)

Scopus

Agora temos a página para busca de autores. Como exemplo, buscaremos o currículo do Prof. Philip Charles Biggin da Oxford University, umas das universidades mais influentes do mundo. O Prof. Biggin pesquisa a descoberta de fármacos a partir de métodos computacionais.

The screenshot shows the Scopus website's search interface. At the top, there are navigation links for 'Author Search', 'Sources', and 'Create account'/'Sign in'. The main heading is 'Search for an author profile'. Below this is an information box stating that Scopus is the world's largest abstract and citation database of peer-reviewed research literature, with over 22,000 titles from more than 5,000 international publishers. It also mentions the 'Author Feedback Wizard' and the option to register for a unique ORCID and import records. The search form includes fields for 'Author last name' (with the example 'e.g. Smith'), 'Author first name' (with the example 'e.g. J.L.'), and 'Affiliation' (with the example 'e.g. University of Toronto'). There is also a checkbox for 'Show exact matches only' and a 'Search' button.

Scopus Preview

Author Search Sources ? ? Create account Sign in

Search for an author profile

i Scopus is the world's largest abstract and citation database of peer-reviewed research literature. With over 22,000 titles from more than 5,000 international publishers. You can use this free author lookup to search for any author; or, use the [Author Feedback Wizard](#) to verify your Scopus Author Profile. Register for your unique ORCID and use Scopus to import your records.

Author last name
e.g. Smith

Author first name
e.g. J.L.

Affiliation
e.g. University of Toronto

Show exact matches only

Search

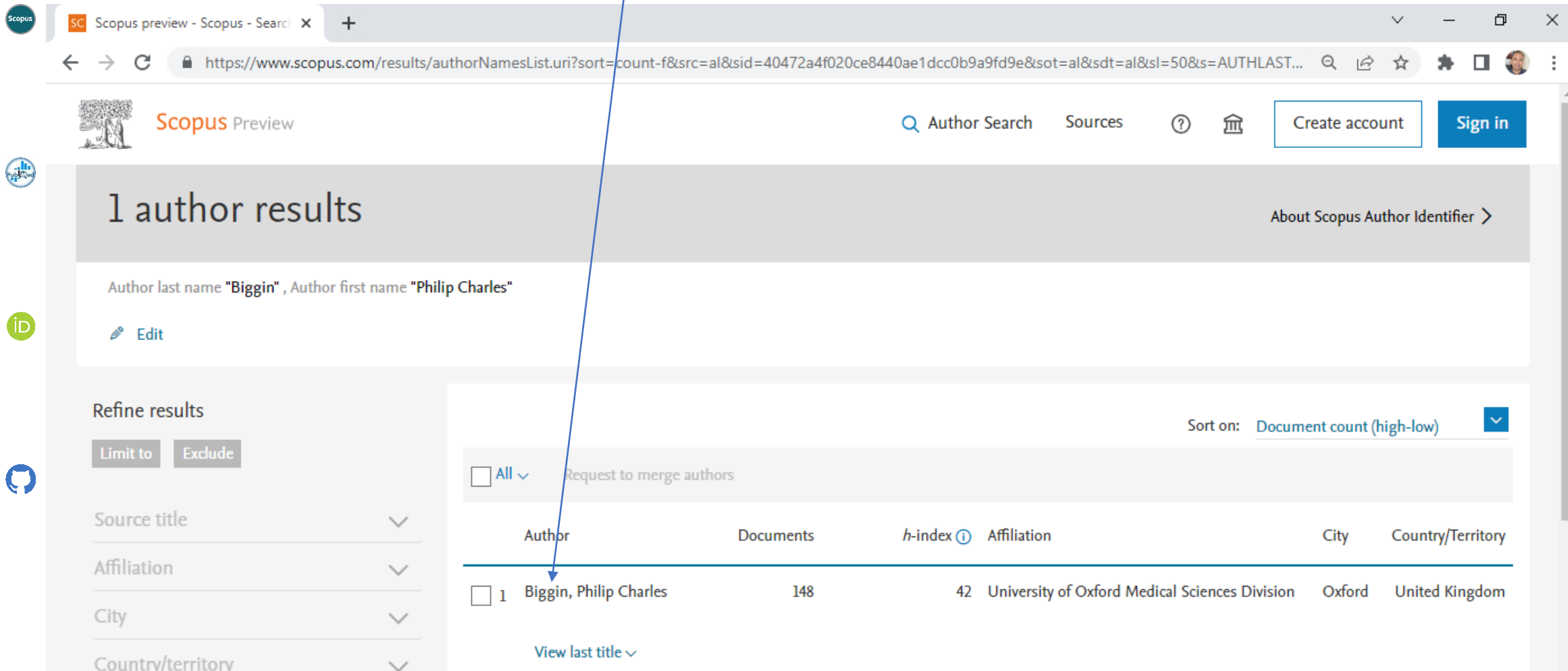
Scopus

Digite sobrenome e nome nos campos indicados. Depois clique em *Search*.

The screenshot shows the Scopus 'Search for an author profile' page. A blue box highlights an informational message: 'Scopus is the world's largest abstract and citation database of peer-reviewed research literature. With over 22,000 titles from more than 5,000 international publishers. You can use this free author lookup to search for any author; or, use the Author Feedback Wizard to verify your Scopus Author Profile. Register for your unique ORCID and use Scopus to import your records.' Below this, there are three input fields: 'Author last name' with the text 'Biggin' and a placeholder 'e.g. Smith'; 'Author first name' with the text 'Philip Charles' and a placeholder 'e.g. J.L.'; and 'Affiliation' with a placeholder 'e.g. University of Toronto'. There is also a checkbox labeled 'Show exact matches only'. A blue 'Search Q' button is located at the bottom right. Three blue arrows originate from the text above: one points to the 'Author last name' field, one points to the 'Author first name' field, and one points to the 'Search Q' button.

Scopus

Foi encontrado o currículo, clique no nome.



The screenshot shows a web browser window with the Scopus search results page. The browser's address bar shows the URL: `https://www.scopus.com/results/authorNamesList.uri?sort=count-f&src=al&sid=40472a4f020ce8440ae1dcc0b9a9fd9e&sot=al&sdt=al&sl=50&s=AUTHLAST...`. The page header includes the Scopus logo, navigation links for "Author Search", "Sources", and "Sign in", and buttons for "Create account" and "Sign in". The main content area displays "1 author results" and a search filter for "Author last name 'Biggin', Author first name 'Philip Charles'". Below this, there is an "Edit" button. On the left, a "Refine results" sidebar is visible with options for "Limit to" and "Exclude", and dropdown menus for "Source title", "Affiliation", "City", and "Country/territory". The main results table is sorted by "Document count (high-low)" and contains one entry for Philip Charles Biggin. A blue arrow points from the text above to the author's name in the table.

Scopus Preview

Author Search Sources ? ? Create account Sign in

1 author results

About Scopus Author Identifier >

Author last name "Biggin", Author first name "Philip Charles"

Edit

Refine results

Limit to Exclude

Source title

Affiliation

City

Country/territory

Sort on: Document count (high-low)

	Author	Documents	<i>h</i> -index	Affiliation	City	Country/Territory
<input type="checkbox"/> 1	Biggin, Philip Charles	148	42	University of Oxford Medical Sciences Division	Oxford	United Kingdom

View last title

Scopus

O Prof. Biggin tem 148 publicações que receberam 5496 citações. Outro parâmetro de interesse é o número de citações por cada ano. Podemos ver que na média há uma tendência de crescimento da citações, o que indica uma influência crescente da produção científica do Prof. Biggin.

The screenshot shows the Scopus author profile for Philip Charles Biggin. The browser address bar displays the URL: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603854881>. The profile header includes the author's name, affiliation (University of Oxford Medical Sciences Division, Oxford, United Kingdom), and ORCID ID (<https://orcid.org/0000-0001-5100-8836>). Below the header are options to edit the profile, set alerts, view potential author matches, and export to SciVal.

Metrics overview

148
Documents by author
5496
Citations by 4475 documents
42
<i>h-index: View h-graph</i>

Document & citation trends

Most contributed Topics 2017–2021

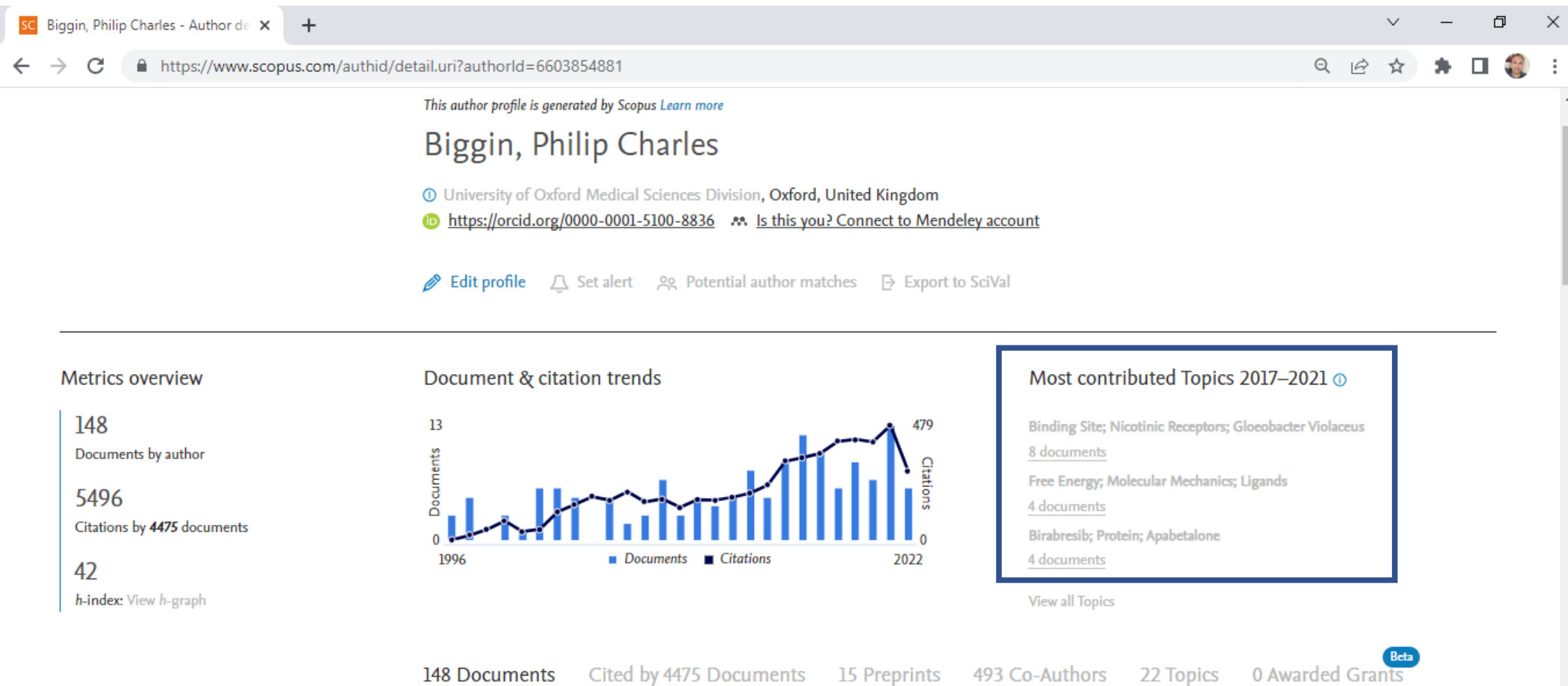
- Binding Site; Nicotinic Receptors; Gloeobacter Violaceus
8 documents
- Free Energy; Molecular Mechanics; Ligands
4 documents
- Birabresib; Protein; Apabetalone
4 documents

View all Topics

148 Documents Cited by 4475 Documents 15 Preprints 493 Co-Authors 22 Topics 0 Awarded Grants

Scopus

A Scopus mostra os tópicos mais pesquisados nos últimos anos pelo cientista, em destaque abaixo. Essa informação nos permite ter uma ideia sobre os assuntos que o pesquisador tem mostrado mais interesse nos últimos anos.



This author profile is generated by Scopus [Learn more](#)

Biggin, Philip Charles

[University of Oxford Medical Sciences Division, Oxford, United Kingdom](#)
<https://orcid.org/0000-0001-5100-8836> [Is this you? Connect to Mendeley account](#)

[Edit profile](#) [Set alert](#) [Potential author matches](#) [Export to SciVal](#)

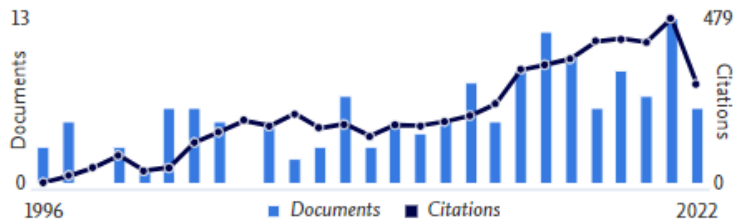
Metrics overview

148
Documents by author

5496
Citations by 4475 documents

42
h-index: [View h-graph](#)

Document & citation trends



Most contributed Topics 2017–2021

- Binding Site; Nicotinic Receptors; Gloeobacter Violaceus
[8 documents](#)
- Free Energy; Molecular Mechanics; Ligands
[4 documents](#)
- Birabresib; Protein; Apabetalone
[4 documents](#)

[View all Topics](#)

[148 Documents](#) [Cited by 4475 Documents](#) [15 Preprints](#) [493 Co-Authors](#) [22 Topics](#) [0 Awarded Grants](#)

Índice h

O Prof. Biggin tem um índice h de 42, segundo o critério que vimos na aula anterior, espera-se um [índice h de 45 ou maior](#) para ser considerado influente. Interessante vemos como é difícil atingir métricas científicas relevantes, mesmo para um pesquisador de uma das mais influentes universidades do mundo.

The screenshot shows the Scopus author profile for Philip Charles Biggin. The browser address bar indicates the URL: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603854881>. The profile includes the following information:

- Author Name:** Biggin, Philip Charles
- Affiliation:** University of Oxford Medical Sciences Division, Oxford, United Kingdom
- ORCID ID:** <https://orcid.org/0000-0001-5100-8836>
- Actions:** Edit profile, Set alert, Potential author matches, Export to SciVal

Metrics overview:

- 148 Documents by author
- 5496 Citations by 4475 documents
- 42** h-index: [View h-graph](#)

Document & citation trends: A combined bar and line chart showing the number of documents (blue bars) and citations (black line) from 1996 to 2022. The x-axis represents years, and the y-axis represents the count. Documents range from 0 to 13, and citations range from 0 to 479.

Most contributed Topics 2017–2021:

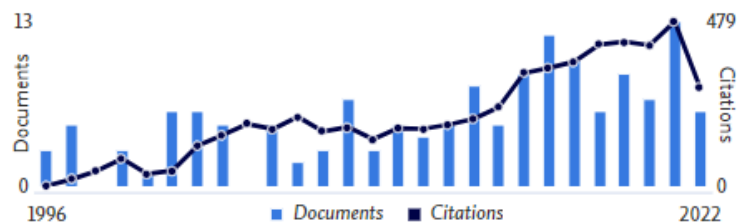
- Binding Site; Nicotinic Receptors; Gloeobacter Violaceus (8 documents)
- Free Energy; Molecular Mechanics; Ligands (4 documents)
- Birabresib; Protein; Apabetalone (4 documents)

[View all Topics](#)

Summary: 148 Documents | Cited by 4475 Documents | 15 Preprints | 493 Co-Authors | 22 Topics | 0 Awarded Grants

Quociente m

Vimos anteriormente que podemos também avaliar o impacto da produção científica de um pesquisador pelo [quociente m](#). Esse parâmetro é mais adequado para uma avaliação geral, não só de pesquisadores mais experientes, como também para jovens pesquisadores. O primeiro artigo do Prof. Biggin (veja gráfico abaixo) foi publicado em 1996, assim ele publica já há 25 anos (2021-1996). Fizemos a subtração com 2021, pois ainda estamos em 2022, o ano ainda não terminou. O cálculo foi realizado em 30 de julho de 2022. O Prof. Biggin tem um quociente m de 1,68, bem próximo do mínimo para ser considerado influente que é de 1,7.



$$\text{quociente } m = \frac{\text{Índice } h}{\text{número de anos que publica}}$$

$$\text{quociente } m = \frac{42}{2021 - 1996} = \frac{42}{25}$$

$$\text{quociente } m = 1,68$$

Publicação do primeiro artigo do Prof. Biggin.

Quociente m

Podemos usar o quociente m não somente para pesquisadores experientes, mas também para jovens pesquisadores. Vamos ver o caso de uma estudante de doutorado, a [Gabriela Bitencourt-Ferreira](#). Esta jovem de 24 anos tem as seguintes métricas da base de dados Scopus.

The screenshot shows a Scopus author profile for Gabriela Bitencourt-Ferreira. The browser address bar shows the URL: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=57200550960>. The profile includes the following information:

- Author Name:** Bitencourt-Ferreira, Gabriela
- Affiliation:** Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil
- ORCID ID:** 57200550960
- Metrics:** 583 Citations by 392 documents, 23 Documents, 14 h-Index
- Actions:** Set alert, Edit profile, More

The "Document & citation trends" chart shows the number of documents and citations from 2018 to 2023. The chart data is as follows:

Year	Documents	Citations
2018	1	0
2019	15	10
2020	1	10
2021	2	15
2022	0	14
2023	0	10

At the bottom of the profile, the following statistics are listed: 23 Documents, Cited by 392 documents, 0 Preprints, 16 Co-Authors, 0 Topics, 0 Awarded Grants. A "Beta" badge is also visible.

Quociente m

Apesar da pouca idade, a Gabriela já tem 23 publicações científicas e índice h de 14. Muitos pesquisadores experientes não tem índice h com esse valor.

The screenshot shows a Scopus author profile for Gabriela Bitencourt-Ferreira. The browser address bar shows the URL: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57200550960>. The profile includes the following information:

- Author Name:** Bitencourt-Ferreira, Gabriela
- Affiliation:** Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil
- ORCID ID:** 57200550960
- Connect to ORCID:** Available
- Connect to Mendeley account:** Available
- Citations:** 583 (Citations by 392 documents)
- Documents:** 23
- h-Index:** 14 (View h-graph)

Below the profile statistics, there is a "Document & citation trends" chart showing the number of documents and citations from 2018 to 2023. The chart shows a significant increase in both metrics starting in 2020.

Year	Documents	Citations
2018	1	0
2019	1	10
2020	15	10
2021	1	15
2022	1	14
2023	0	10

At the bottom of the profile, there are several statistics:

- 23 Documents
- Cited by 392 documents
- 0 Preprints
- 16 Co-Authors
- 0 Topics
- 0 Awarded Grants

A "Beta" badge is visible in the bottom right corner of the profile area.

Quociente m

O primeiro artigo da Gabriela foi publicado em 2018 e ela tem um índice h de 14, com estas informações podemos calcular seu quociente m como mostrado abaixo. Gabriela tem um quociente m de 3,5, bem acima do valor de 1,7, sugerido como valor de referência.

Document & citation trends



Publicação do primeiro artigo da Gabriela.

$$\text{quociente } m = \frac{\text{Índice } h}{\text{número de anos que publica}}$$

$$\text{quociente } m = \frac{14}{2022 - 2018} = \frac{14}{4}$$

$$\text{quociente } m = 3,5$$

Espaço Luz da Ciência



~~Fake News~~

~~Negativismo~~

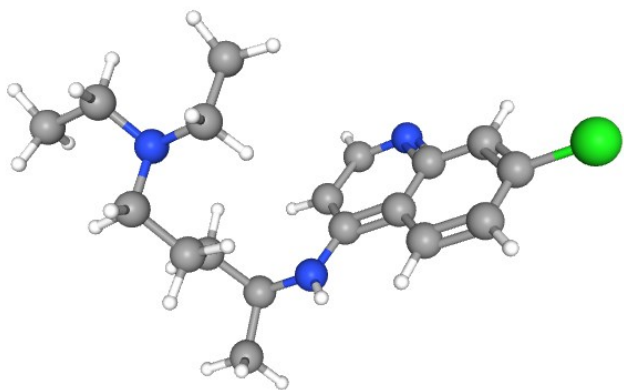


Testes *in silico*
Testes *in vitro*
Testes *in vivo*



Fase I
Fase II
Fase III
Fase IV

Cloroquina ou jujuba para tratar a Covid-19. Qual a melhor?



CHAMPION THE FUTURE OF STEM
Learn about sponsoring our premier middle school STEM research competition

Never Miss a Discovery Stay current with *Science News*. [SUBSCRIBE NOW](#)

MAGAZINE CENTURY OF SCIENCE EXPLORE ▾ ABOUT FOR STUDENTS [DONATE](#)

ScienceNews
INDEPENDENT JOURNALISM SINCE 1921

ALL TOPICS LIFE HUMANS EARTH SPACE PHYSICS CORONAVIRUS

NEWS HEALTH & MEDICINE

Hydroxychloroquine can't stop COVID-19. It's time to move on, scientists say

An abundance of scientific data shows that the drug isn't an effective COVID-19 treatment





Hydroxychloroquine has been touted by some people and dismissed by others. But the overwhelming majority of studies shows that the antimalarial drug isn't an effective treatment for COVID-19.

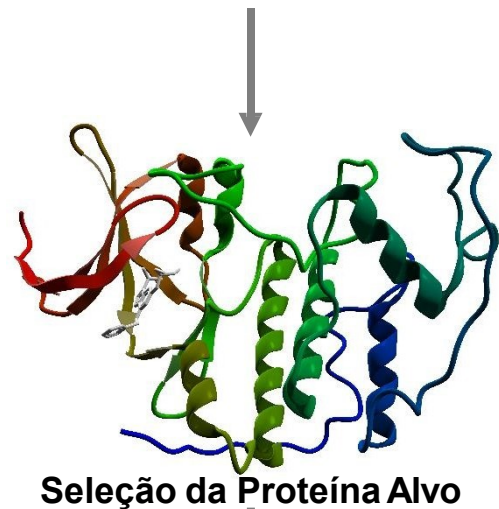
DAVID SHAO/ISTOCK/GETTY IMAGES PLUS

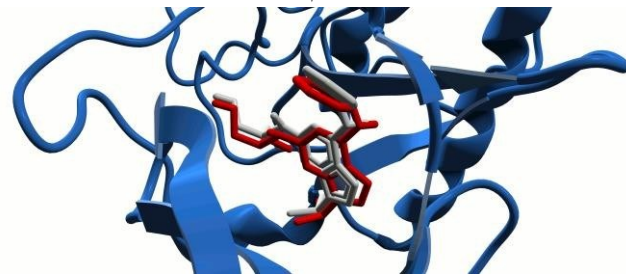
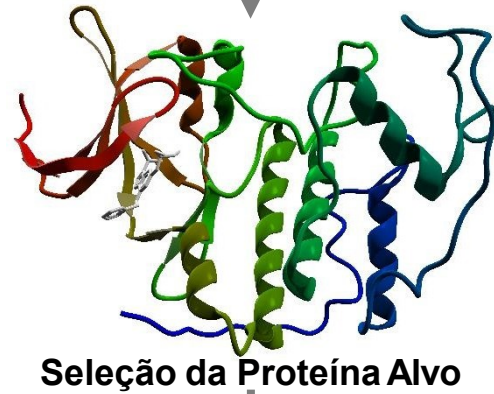


By [Tina Hesman Saey](#)

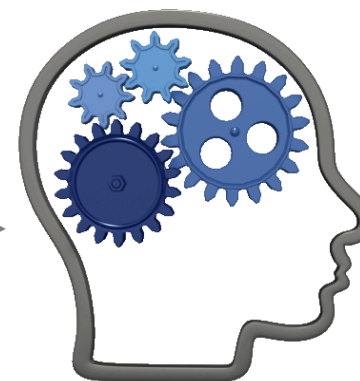
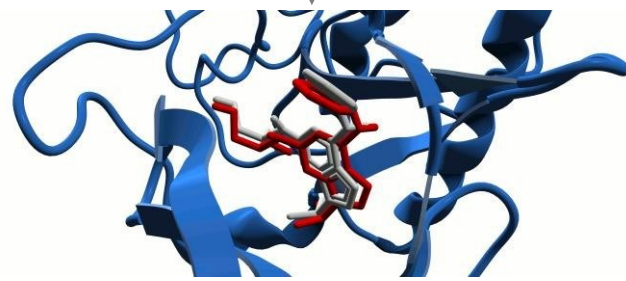
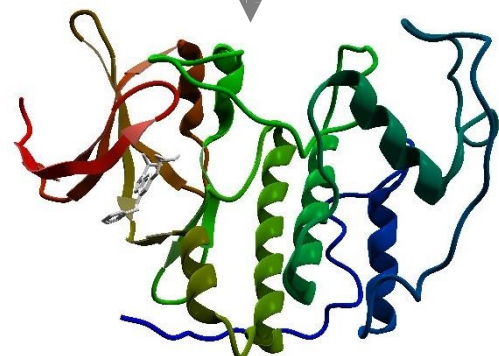
AUGUST 2, 2020 AT 6:00 AM

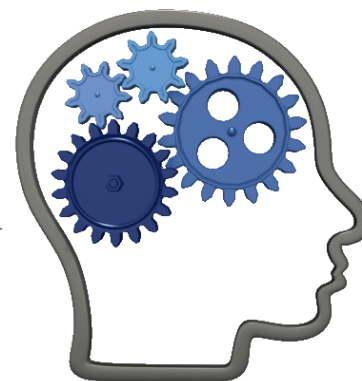
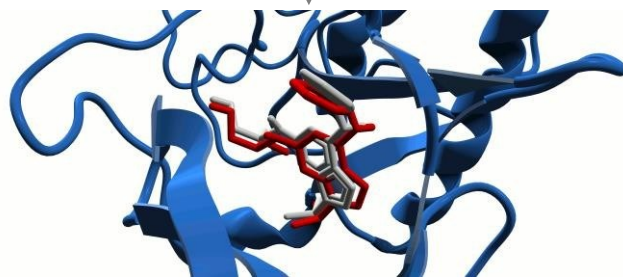
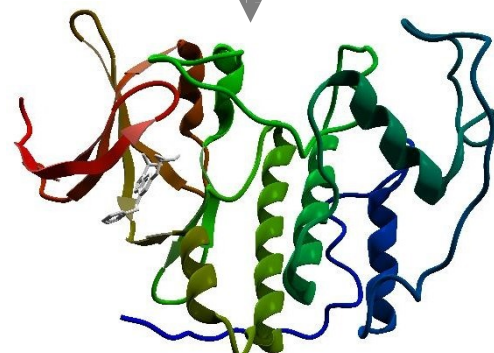




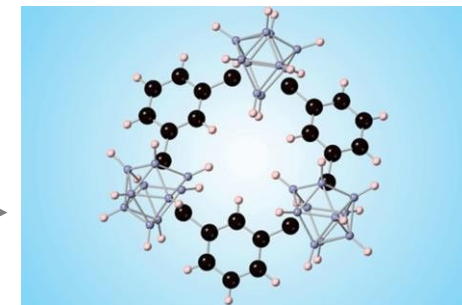


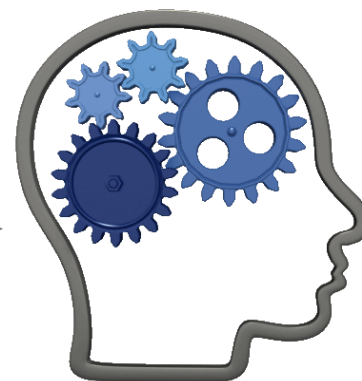
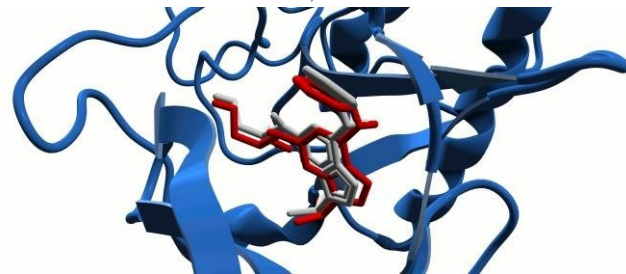
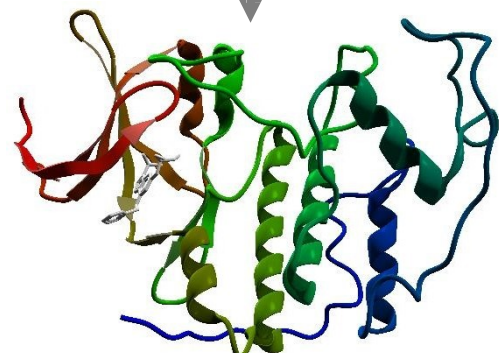
**Validação do Protocolo de
Docagem Molecular**



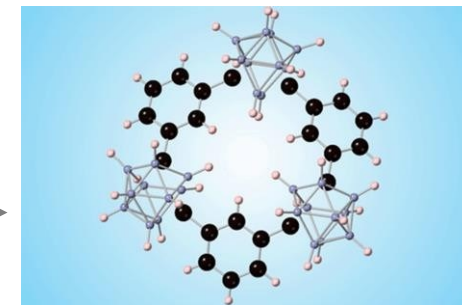


Aprendizado de Máquina

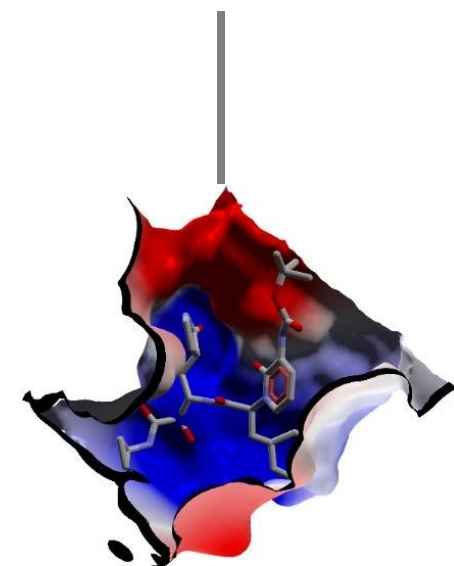




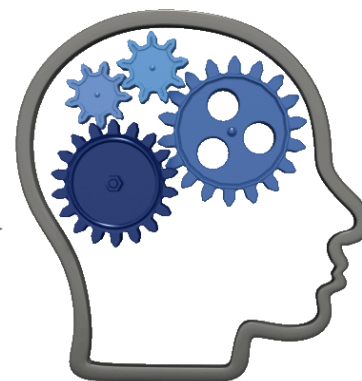
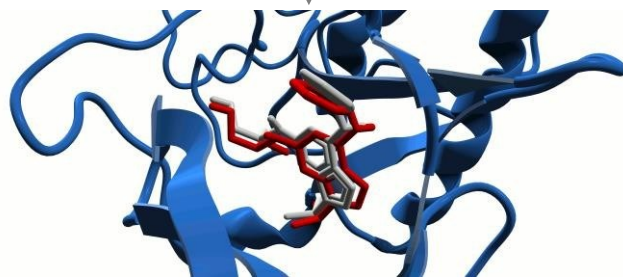
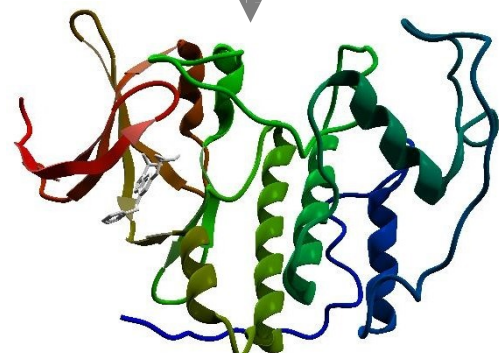
Aprendizado de Máquina



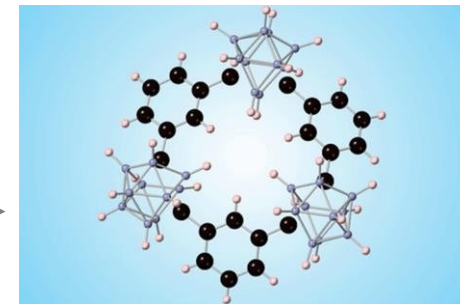
Seleção da Base de Dados



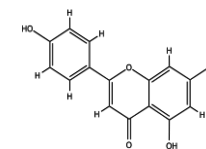
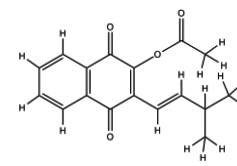
Validação do Protocolo de Docagem Molecular



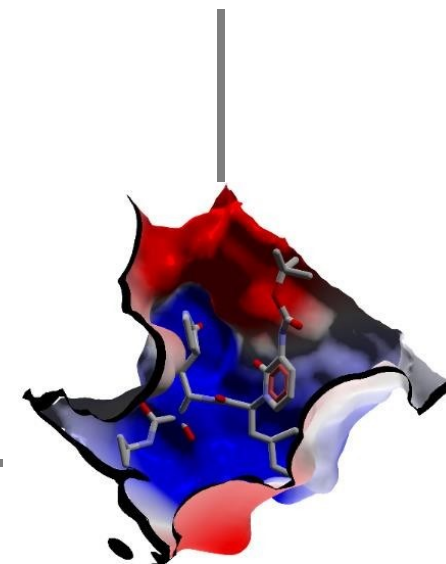
Aprendizado de Máquina



Seleção da Base de Dados



Seleção dos Melhores Ligantes



Busca Virtual

Review > [Curr Med Chem.](#) 2019;26(10):1908-1919. doi: 10.2174/0929867325666180417165247.

Advances in the Understanding of the Cannabinoid Receptor 1 – Focusing on the Inverse Agonists Interactions

Silvana Russo ^{1 2 3}, Walter Filgueira De Azevedo ^{1 2 3}

Affiliations [+](#) expand

PMID: 29667549 DOI: 10.2174/0929867325666180417165247

Abstract

Background: Cannabinoid Receptor 1 (CB1) is a membrane protein prevalent in the central nervous system, whose crystallographic structure has recently been solved. Studies will be needed to investigate CB1 complexes with its ligands and its role in the development of new drugs.

Objective: Our goal here is to review the studies on CB1, starting with general aspects and focusing on the recent structural studies, with emphasis on the inverse agonists bound structures.

Methods: We start with a literature review, and then we describe recent studies on CB 1 crystallographic structure and docking simulations. We use this structural information to depict protein-ligand interactions. We also describe the molecular docking method to obtain complex structures of CB 1 with inverse agonists.

Results: Analysis of the crystallographic structure and docking results revealed the residues responsible for the specificity of the inverse agonists for CB 1. Most of the intermolecular interactions

FULL TEXT LINKS

[BenthamScience Full-Text Article](#)

ACTIONS

[Cite](#)

[Favorites](#)

SHARE



PAGE NAVIGATION

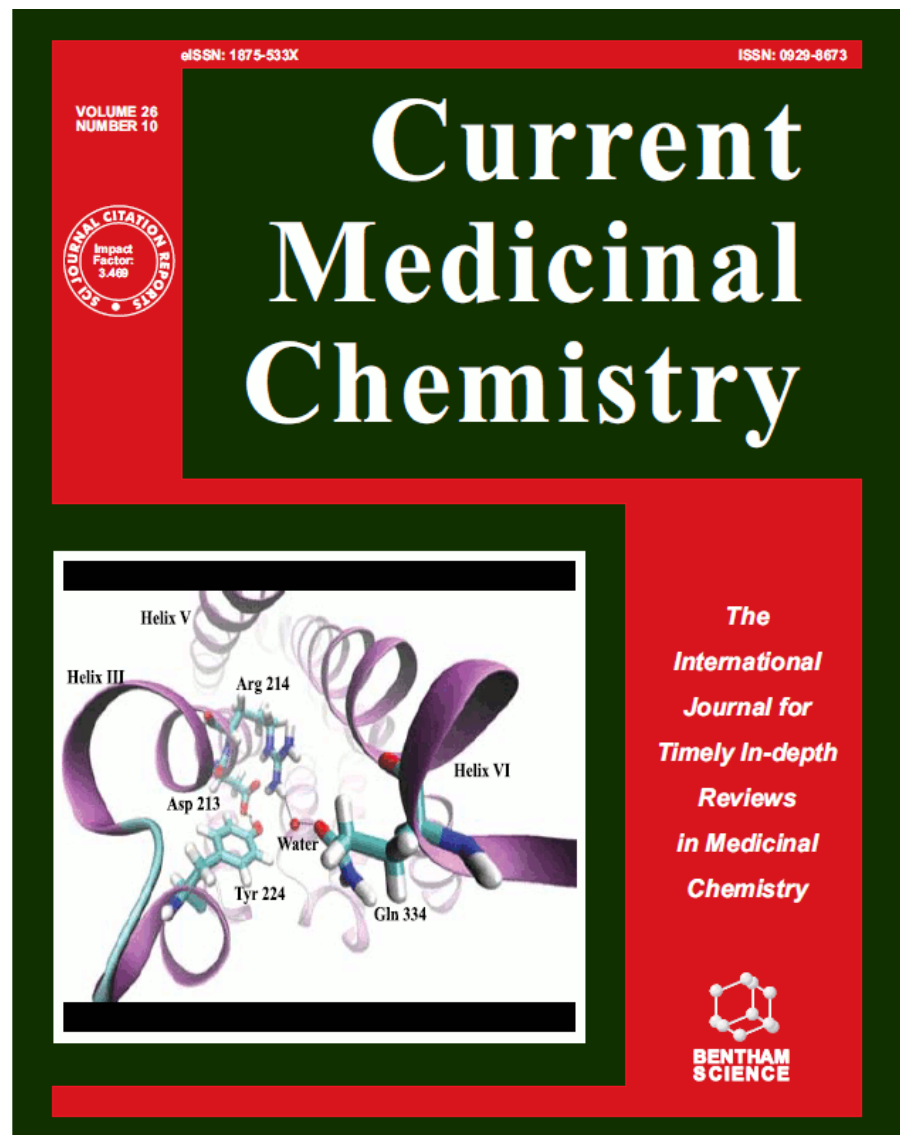
[< Title & authors](#)

[Abstract](#)

[Similar articles](#)

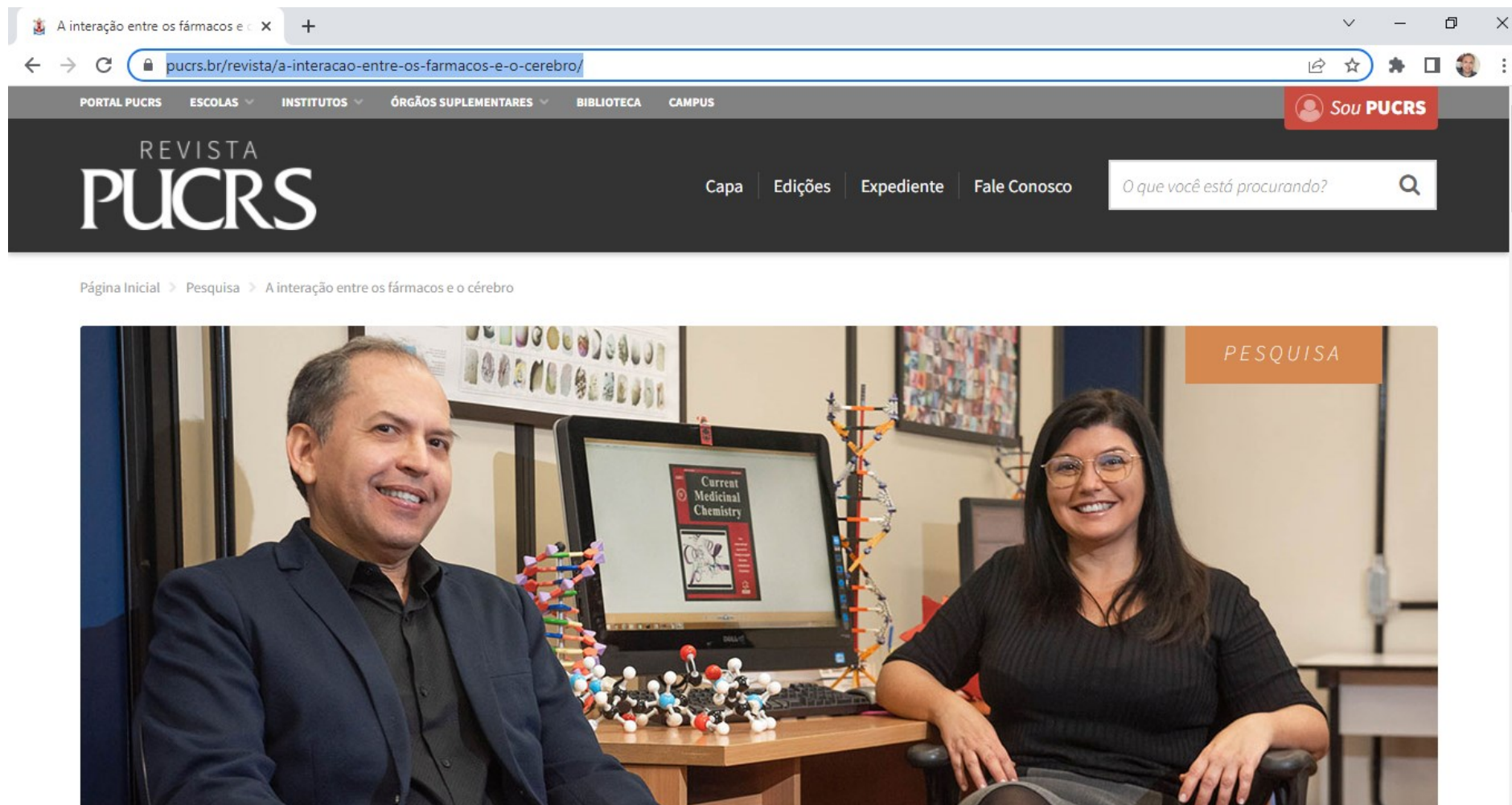
[Cited by](#)

[Publication types](#)



Fonte:

<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/29667549/>



A screenshot of a web browser displaying the PUCRS journal website. The browser's address bar shows the URL [pucrs.br/revista/a-interacao-entre-os-farmacos-e-o-cerebro/](https://www.pucrs.br/revista/a-interacao-entre-os-farmacos-e-o-cerebro/). The website header includes navigation links for PORTAL PUCRS, ESCOLAS, INSTITUTOS, ÓRGÃOS SUPLEMENTARES, BIBLIOTECA, and CAMPUS. A search bar on the right contains the text "O que você está procurando?". The main content area features a large photograph of a man and a woman sitting at a desk in a laboratory. The man is on the left, wearing a dark suit, and the woman is on the right, wearing a black top and glasses. On the desk, there is a computer monitor displaying a journal cover titled "Current Medicinal Chemistry", a keyboard, and several molecular models. An orange box in the top right corner of the photo contains the word "PESQUISA". Below the photo, a breadcrumb trail reads "Página Inicial > Pesquisa > A interação entre os fármacos e o cérebro".

Fonte: <https://www.pucrs.br/revista/a-interacao-entre-os-farmacos-e-o-cerebro/>

A interação entre os fármacos e o cérebro

https://www.pucrs.br/revista/a-interacao-entre-os-farmacos-e-o-cerebro/

REVISTA PUCRS

Capa Edições Expediente Fale Conosco

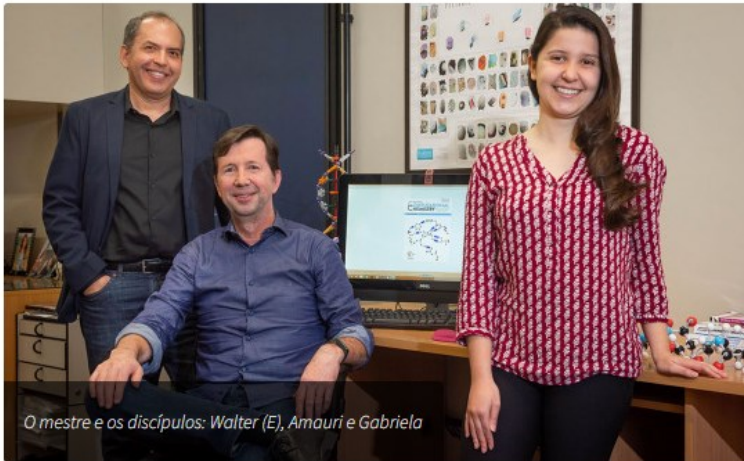
Software ajuda na construção de modelos

No trabalho de conclusão do curso de Especialização em Bioinformática da PUCRS, Amauri Duarte da Silva, orientado pelo professor Walter de Azevedo Jr., criou um software para auxiliar no desenvolvimento de novos fármacos, utilizando aprendizado de máquina e uma técnica que ajuda a prever a afinidade entre um ligante (um possível medicamento) e uma proteína. De nome Taba – Tool to Analyze the Binding Affinity – é uma ferramenta de código aberto, disponível para a comunidade científica. Os resultados foram publicados na capa do Journal of Computational Chemistry, sendo superiores aos obtidos por outros programas.

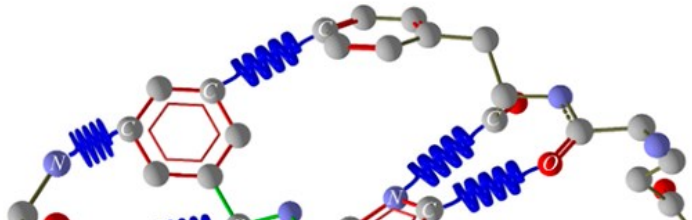
Para estudar a interação de fármacos com proteínas, pode ser utilizada a Física Quântica, mas o custo computacional é muito alto. “Com a simplificação, a conta fica mais rápida, só que pouco realista. Temos que achar um meio termo”, esclarece o professor. Hoje é feita uma equação para cada proteína.

A ferramenta calcula as distâncias médias entre pares de átomos envolvendo proteína e ligante. Através de valores de afinidade experimentais, pode-se prever o que ocorre com outras substâncias estudadas. Além da ativação da proteína, os fármacos também são utilizados como inibidores de receptores relacionados a alguma doença.

Graduado em Administração de Empresas – Análise de Sistemas pela PUCRS, Duarte atua no Serviço Federal de Processamento de Dados. Como pesquisador em Biologia Celular



O mestre e os discípulos: Walter (E), Amauri e Gabriela



A interação entre os fármacos e o cérebro

https://www.pucrs.br/revista/a-interacao-entre-os-farmacos-e-o-cerebro/

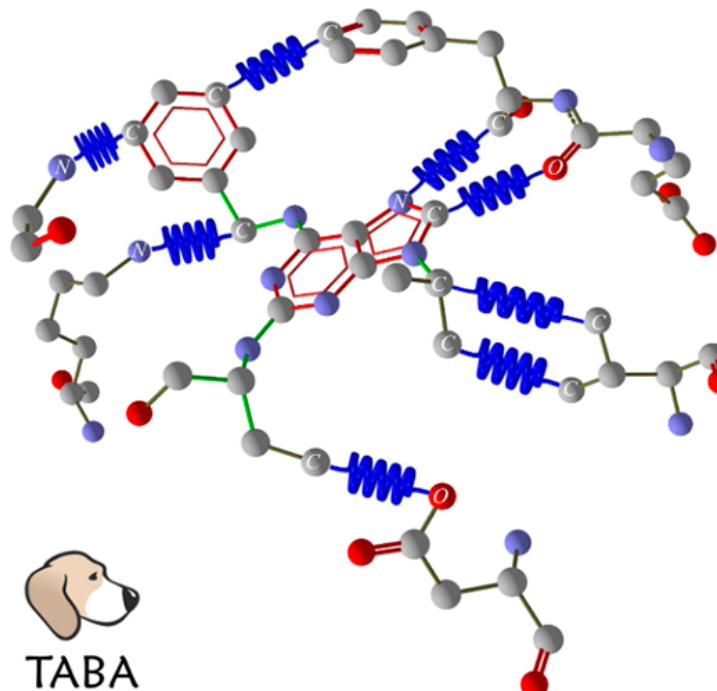
REVISTA
PUCRS


Capa Edições Expediente Fale Conosco

A ferramenta calcula as distâncias médias entre pares de átomos envolvendo proteína e ligante. Através de valores de afinidade experimentais, pode-se prever o que ocorre com outras substâncias estudadas. Além da ativação da proteína, os fármacos também são utilizados como inibidores de receptores relacionados a alguma doença.

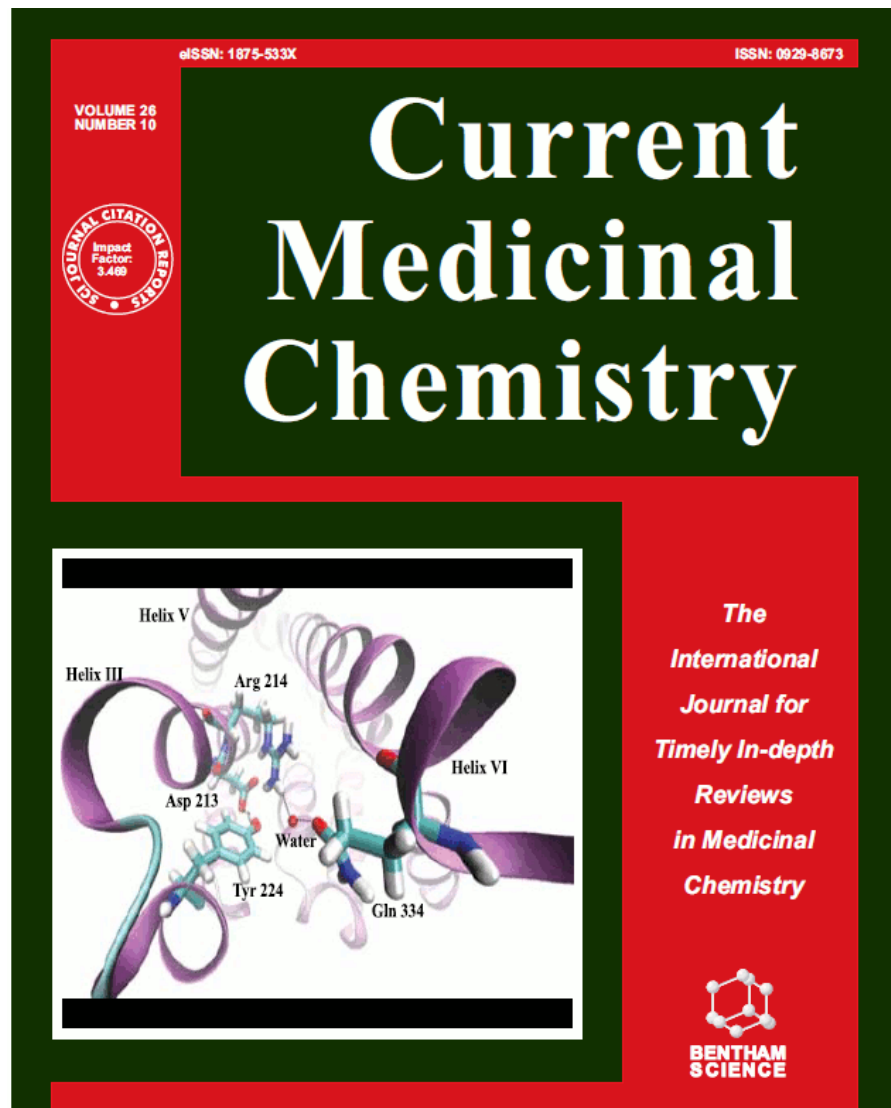
Graduado em Administração de Empresas – Análise de Sistemas pela PUCRS, Duarte atua no Serviço Federal de Processamento de Dados. Começará o mestrado em Biologia Celular e Molecular em 2020. A estudante de iniciação científica Gabriela Bitencourt-Ferreira participou do estudo, realizando testes adicionais da ferramenta.

Informações sobre a ferramenta e as pesquisas:
<https://azevedolab.net>




TABA

2 novas notificações



Editorial Board :: Current Medicinal Chemistry

benthamscience.com/journals/current-medicinal-chemistry/editorial-board/#top

REGISTER TO OUR FREE NEWSLETTER FOR UPDATES

Search Advanced Search

Home Journals & eBooks Articles by Disease Marketing Opportunities For Authors, Editors & Librarians Contact Us

Current Medicinal Chemistry

Volume 28, 42 Issues, 2021
ISSN: 1875-533X (Online)
ISSN: 0929-8673 (Print)
This journal supports open access

Impact Factor: **4.53**

5 Year Impact Factor: **4.676**

Subscribe to this Journal

Track Your Manuscript:
Enter Correct Manuscript
Reference Number:

Submit Reference Number

COPE COMPLIANT

ABOUT THE JOURNAL

- ⇒ Journal Home
- ⇒ Editorial Policies
- ⇒ Fabricating and Stating False Information
- ⇒ Editorial Board
- ⇒ Meet the Executive Guest Editor(s)
- ⇒ Board Recruitment Workflow
- ⇒ Join Editorial Board
- ⇒ Indexing Information

← → ↻ benthamscience.com/journals/current-medicinal-chemistry/editorial-board/#top

52 Shares

-
-
-
-
-
-
-

Editor-in-Chief

Co-Editors

Associate Editors

Regional Editors

Frontiers Section Editor

Country Editor

Section Editors

Editorial Board Members

Associate Editorial Board Member

Executive Guest Editors

- ⇒ Open Access Funding
- ⇒ Publishing Ethics and Rectitude
- ⇒ Archiving Policies
- ⇒ Manuscript Transfer Facility

FOR GUEST EDITORS

- ⇒ Thematic Issue Proposal
- ⇒ Forthcoming Thematic Issues
- ⇒ Guest Editor Guidelines

FOR REVIEWERS

- ⇒ Reviewer Guidelines
- ⇒ Peer Review Workflow
- ⇒ Become a Reviewer

FOR LIBRARIANS & READERS

- ⇒ Contents & Abstracts
- ⇒ Open Access Articles
- ⇒ Free Copies Online
- ⇒ Thematic Issues
- ⇒ Journal Catalog 2020
- ⇒ Journal Catalog 2021
- ⇒ Most Accessed Articles
- ⇒ Most Cited Articles
- ⇒ PURCHASE ARTICLES
- ⇒ Order Reprints
- ⇒ Subscribe
- ⇒ Trial Requests

Editor-in-Chief

Atta-ur-Rahman, FRS
(32052 citations)
 Honorary Life Fellow
 Kings College
 University of Cambridge
 Cambridge
 UK

Biography

Honorary Advisors

John Gurdon
(Nobel Laureate)
 The Gurdon Institute
 University of Cambridge
 Cambridge
 UK

Biography

Jean-Marie Lehn
(Nobel Laureate)
 Laboratoire de Chimie
 Supramoléculaire ISIS
 Université de Strasbourg
 Strasbourg
 France

Ferid Murad
(Nobel Laureate)
 Stanford University
 Stanford, CA
 USA

Editor-in-Chief

Co-Editors

Associate Editors

Regional Editors

Frontiers Section Editor

Country Editors

Section Editors

Editorial Board Members

Associate Editorial Board Member

Executive Guest Editors

Section Editors



Section: Bioinformatics in Drug Design and Discovery

Walter Filgueira de Azevedo Jr

Laboratory of Computational Systems Biology
Pontifical Catholic University of Rio Grande do Sul
Porto Alegre
Brazil

Biography

Section: Targeted Biologics

Stefano Bruno

Dipartimento di Scienze degli Alimenti e del Farmaco
Università di Parma
Parma
Italy

Biography



Section: Targeted Biologics

Paul W. Buehler

Food and Drug Administration
Rockville
United States



Que a luz da ciência acabe com
as trevas do negacionismo.