

O Método Científico



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

walter@azevedolab.net

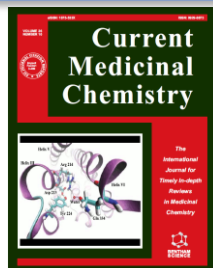
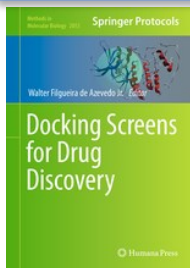
[Biography 01](#) ♥

[Biography 02](#) ♥

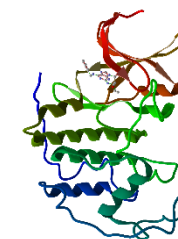
[Biography 03](#) ♥

[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

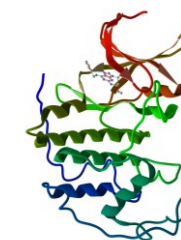
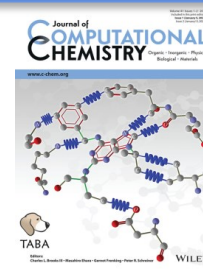
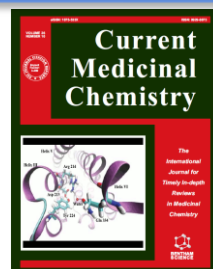
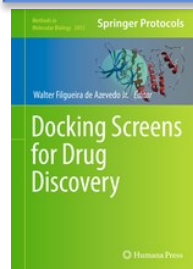


PROUD to be a Springer Author
Read a free preview!



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](#)
- [Impacto na Ciência](#)
- [Referências](#)



Resumo

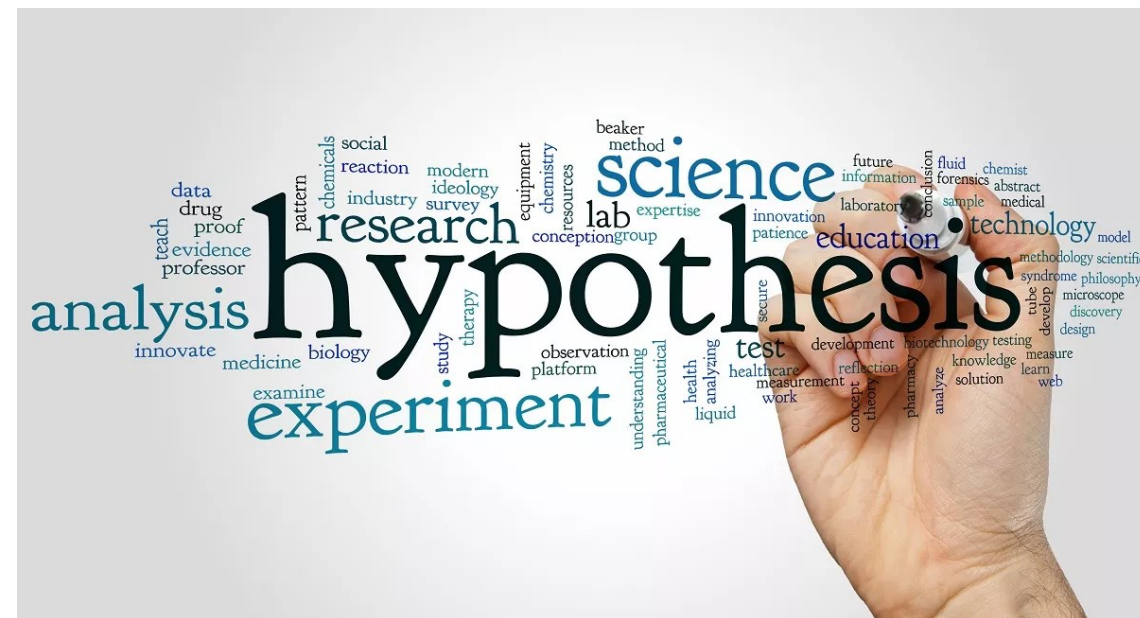
A discussão das métricas usadas e a lista dos pesquisadores mais influentes do mundo foi publicada no periódico Plos Biology (Ioannidis JPA, Boyack KW, Baas J. Updated science-wide author databases of standardized citation indicators. PLoS Biol. 2020 Oct 16;18(10):e3000918. doi:

10.1371/journal.pbio.3000918. PMID: 33064726; PMCID: PMC7567353). Todos os anos os

pesquisadores disponibilizam uma atualização da lista dos pesquisadores usando o mesmo conjunto de métricas. Tal abordagem permite uma comparação sobre a evolução de cada área e uma análise do impacto dos cientistas de cada país, universidades e instituto de pesquisa. Os dados de 2023 estão disponíveis no link da editora Elsevier:

https://elsevier.digitalcommonsdata.com/datasets/btch_xktzyw/6.

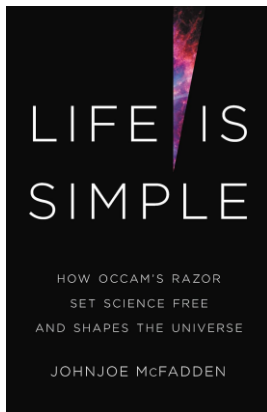
Palavras-chave: Ciência, Navalha de Occam, força de atração gravitacional, força eletromagnética, força nuclear fraca, força nuclear forte, negacionismo, pseudociência, método científico, artigo científico, métricas científicas, índice h, quociente m, Scopus, Plos Biology, standard Science-Metrix classification, impacto científico.



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 ([McFadden, 2021](#)).



MCFADDEN, Johnjoe. **Life Is Simple: How Occam's Razor Set Science Free and Shapes the Universe.** 2021. Basic Books. Edição do Kindle.



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 ([McFadden, 2021](#)).

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 centenas milhões de pessoas teriam a mesma influência na sua vida, por terem o mesmo signo. Há diversas outros disparates em tal crença. Imaginem centenas 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.

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

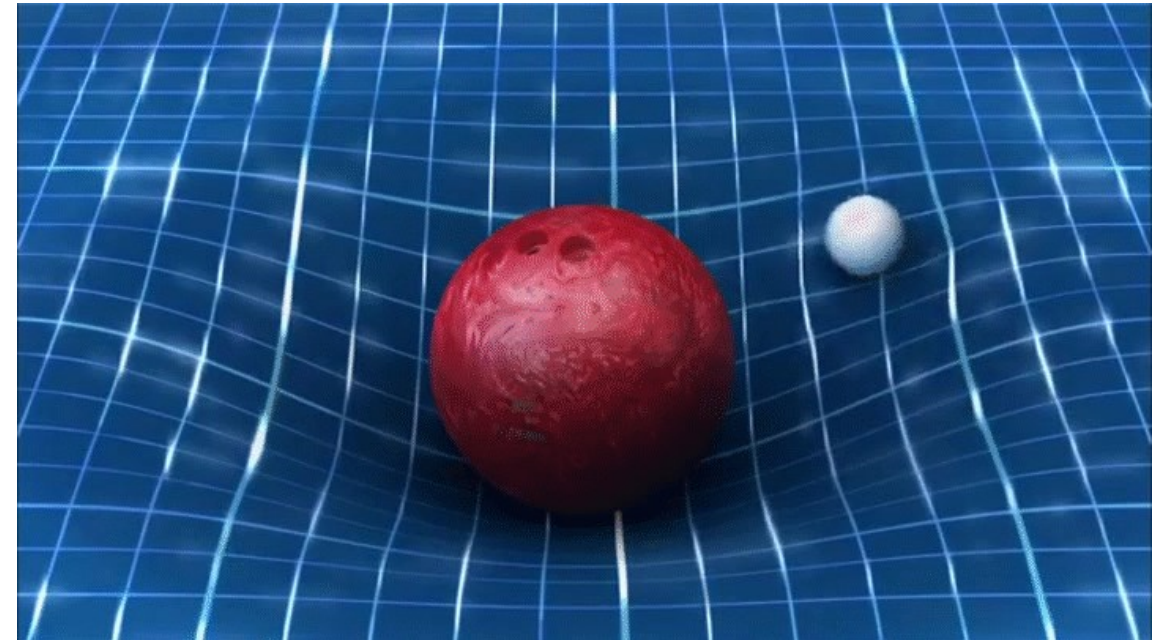
Força de atração gravitacional em N

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.

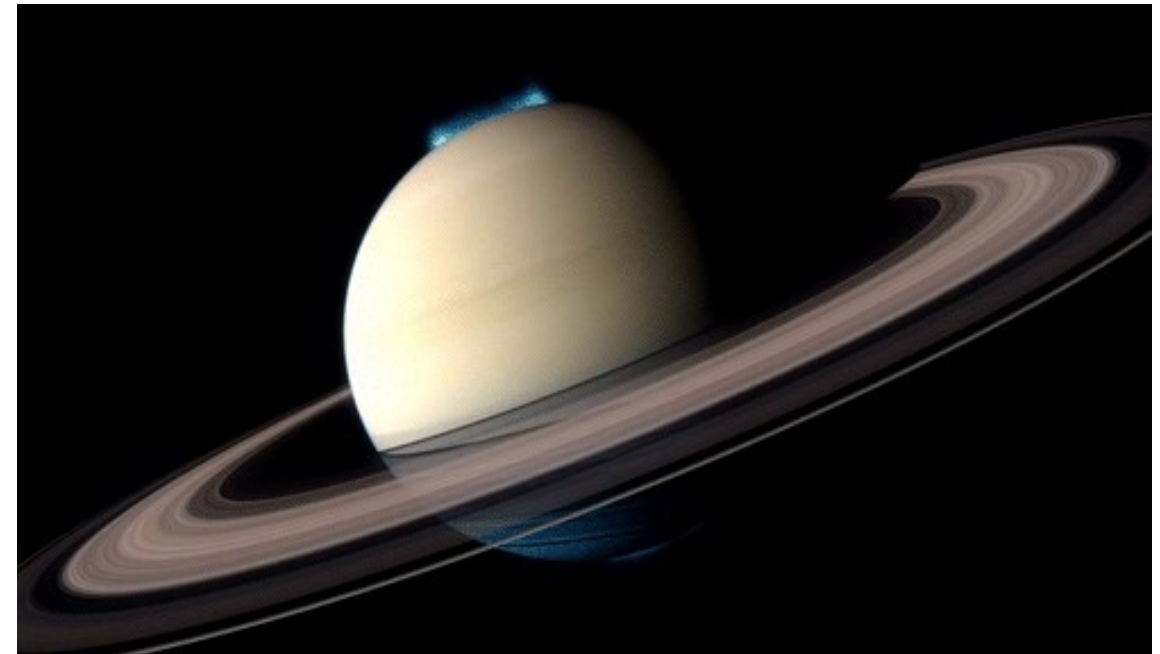
A massa de Saturno é de $5,69 \cdot 10^{26}$ kg, (fonte: <http://www.solarviews.com/cap/sat/PIA03156.htm>). A força de atração gravitacional de Saturno sobre uma pessoa de 70 kg no planeta Terra é calculada como indicado abaixo ($F_{g,S}$).

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

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



HALLIDAY, David; RESNICK, Robert; WALKER, Jearl.
Fundamentos da Física - Gravitação, Ondas e Termodinâmica - Volume 2.
GEN | LTC. Edição do Kindle.



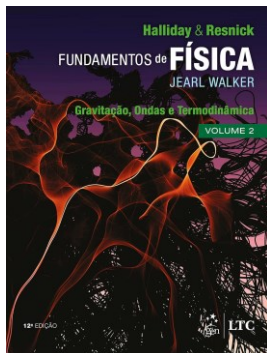
Desmascarando a Pseudociência

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 ($F_{g,C}$). 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.

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

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



HALLIDAY, David; RESNICK, Robert; WALKER, Jearl.
Fundamentos da Física - Gravitação, Ondas e Termodinâmica - Volume 2.
GEN | LTC. Edição do Kindle.



Desmascarando a Pseudociência

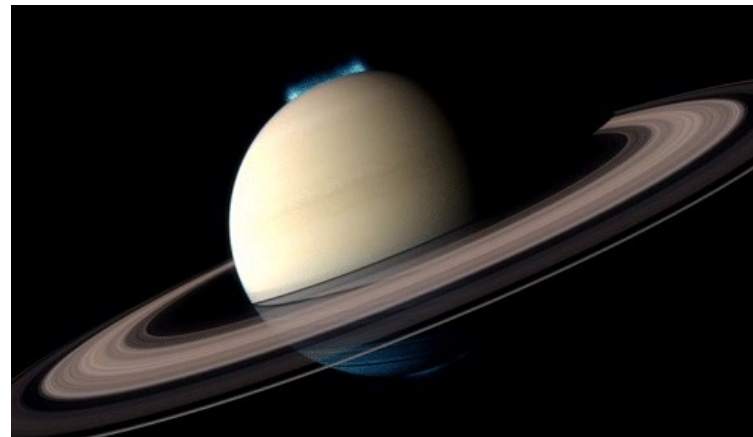
Ou seja, Saturno exerce uma influência sobre você 10 vezes menor que a xícara de café. Há pessoas, infelizmente muitas, que não saem de casa sem antes lerem o horóscopo. A próxima vez que perguntarem seu signo, diga: “Sou do signo da xícara de café”.

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



$$F_{g,C} > F_{g,S}$$

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



Desmascarando a Pseudociência

Convencido que seu signo é a xícara de café? Ou do chá? 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

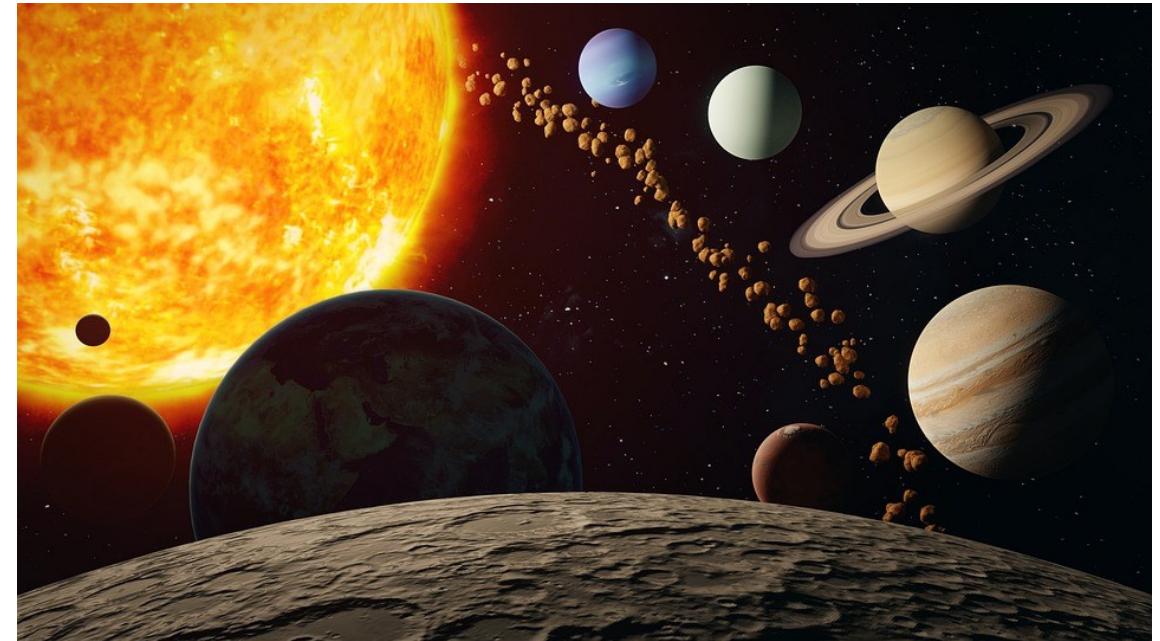
Depende da carga elétrica e da distância. Considerando-se as cargas elétricas envolvidas e a distância entre a Terra e Saturno, a atração devido à cargas é ainda menor que a atração gravitacional.

Força nuclear fraca

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

Força nuclear forte

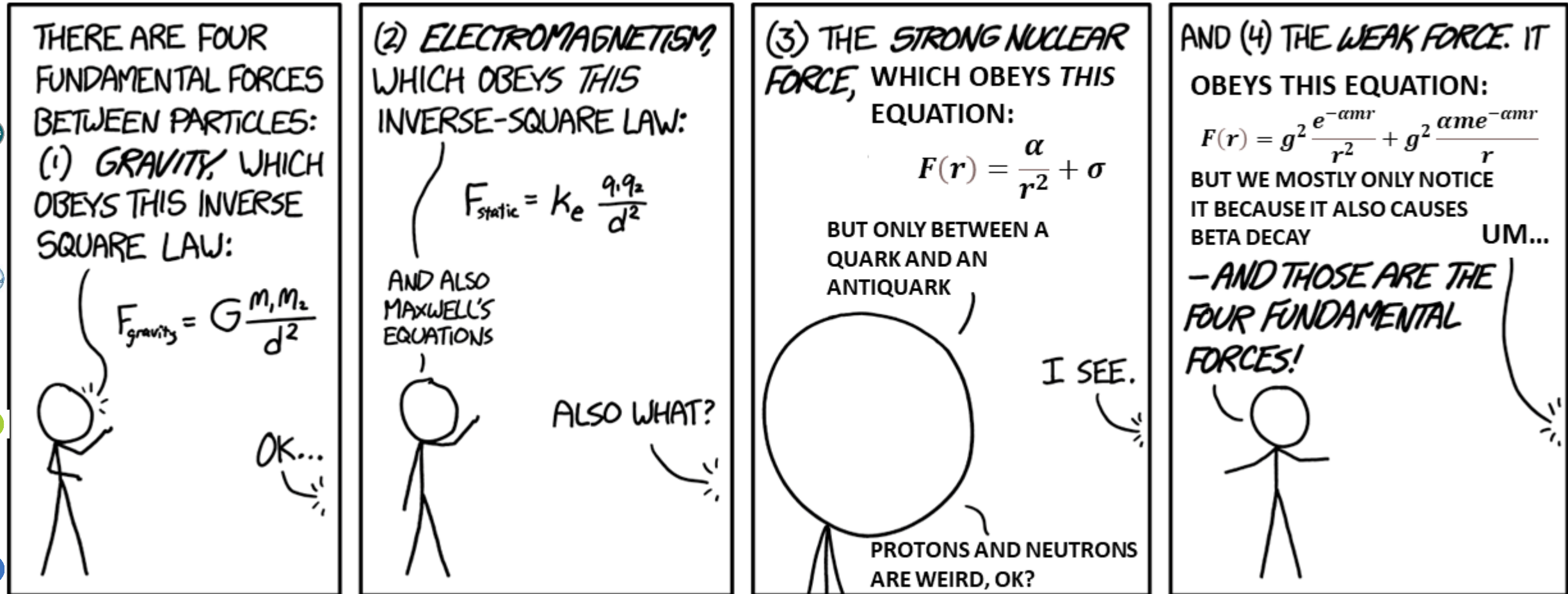
Atua em partículas elementares e também tem curtíssimo alcance. Resumindo, se não é a força gravitacional que está atuando a longa distância, definitivamente não serão as outras.



Nosso sistema solar.

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

Desmascarando a Pseudociência



As forças da natureza.

Fonte: <https://sciencemeetsfiction.com/2020/12/29/what-is-the-equation-for-the-strong-nuclear-force/>

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

No diagrama ao lado temos um resumo das principais ideias do método segundo apresentado por [Holman 2023](#).

Faça perguntas sobre o funcionamento de algum aspecto do Universo. Siga os passos abaixo para buscar uma resposta para uma das questões feitas.

1. Inicie com uma afirmação (hipótese) para ser testada que se baseia na sua questão inicial.

Uma hipótese científica válida tem as seguintes características.

(i) Não pode ser provada ser absolutamente verdadeira

(ii) Pode ser mostrada ser incorreta.

2. Faça uma previsão baseada na hipótese inicial.

3. Procure por qualquer informação relevante já disponível pertinente à validade da hipótese e previsão.



Um Tour pelo Método Científico

4. Faça observações ou projete um experimento para testa a previsão. Examine os resultados das observações ou experimento. Os resultados terão um aspecto se a hipótese é aceitável e outro se é incorreta. A hipótese é aceitável e útil desde que não tenha sido demonstrada estar incorreta.

5. Revise ou mude a hipótese se requerida pelos resultados. Quando temos várias hipóteses possivelmente aceitáveis, sempre escolha a mais simples (Navalha de Occam).

6. Faça os métodos e resultados públicos para comentários e estudos futuros. Se você é um cientista profissional, publique num periódico científico (jornal) com avaliação por pares.

7. Repita com um novo experimento ou observações para testar a hipótese refinada e revisada.

Baseado no trecho “The Scientific Method in a Nutshell” do livro [Holman, Gordon. The Scientific Method: Why science is a crucial process for human progress, not just another academic subject or belief \(pp. 4-5\). Edição do Kindle.](#)



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.



The Scientific Method

Why science is a crucial process for human progress, not just another academic subject or belief

Gordon Holman

HOLMAN, Gordon. **The Scientific Method: Why science is a crucial process for human progress, not just another academic subject or belief.** 2023. Edição do Kindle.

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. Usando o método científico, é necessário testar os fertilizantes. Depois de observar os resultados, a conclusão é que a hipótese é aceitável para as condições testadas.

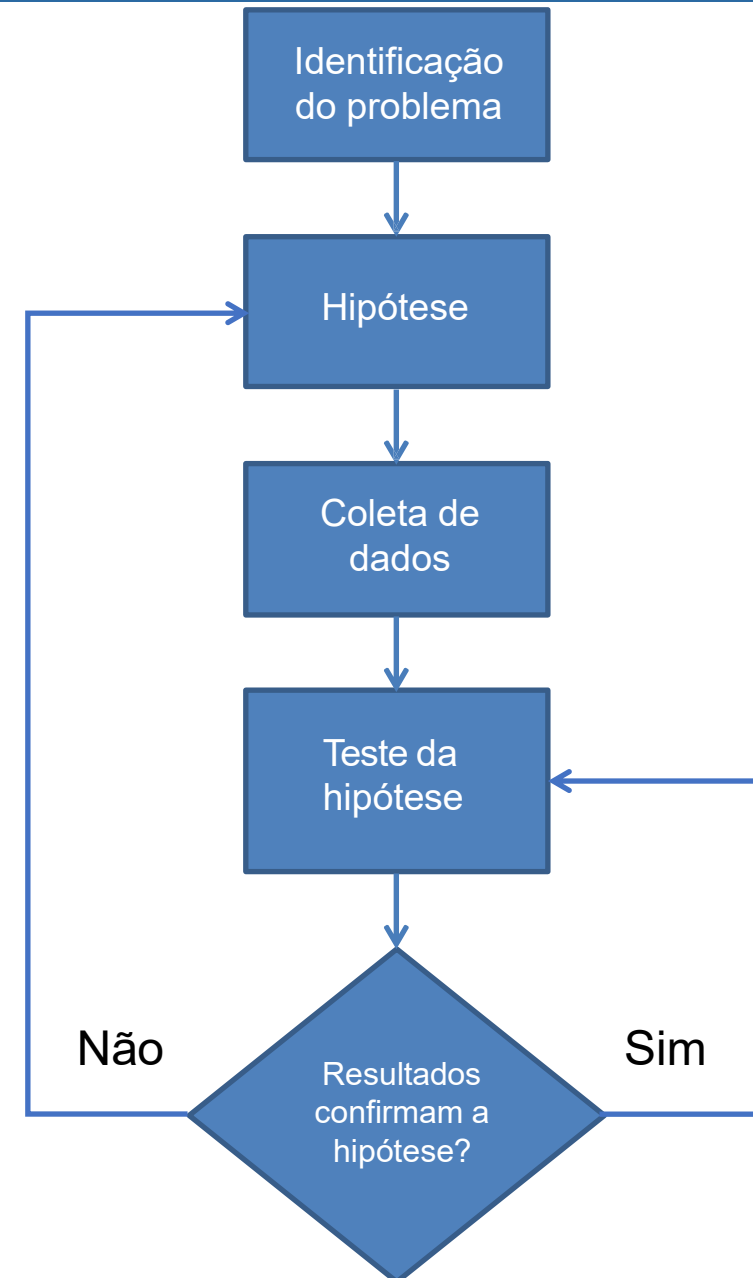


Fonte: <https://www.thoughtco.com/scientific-method-p2-373335>

Um Tour pelo Método Científico

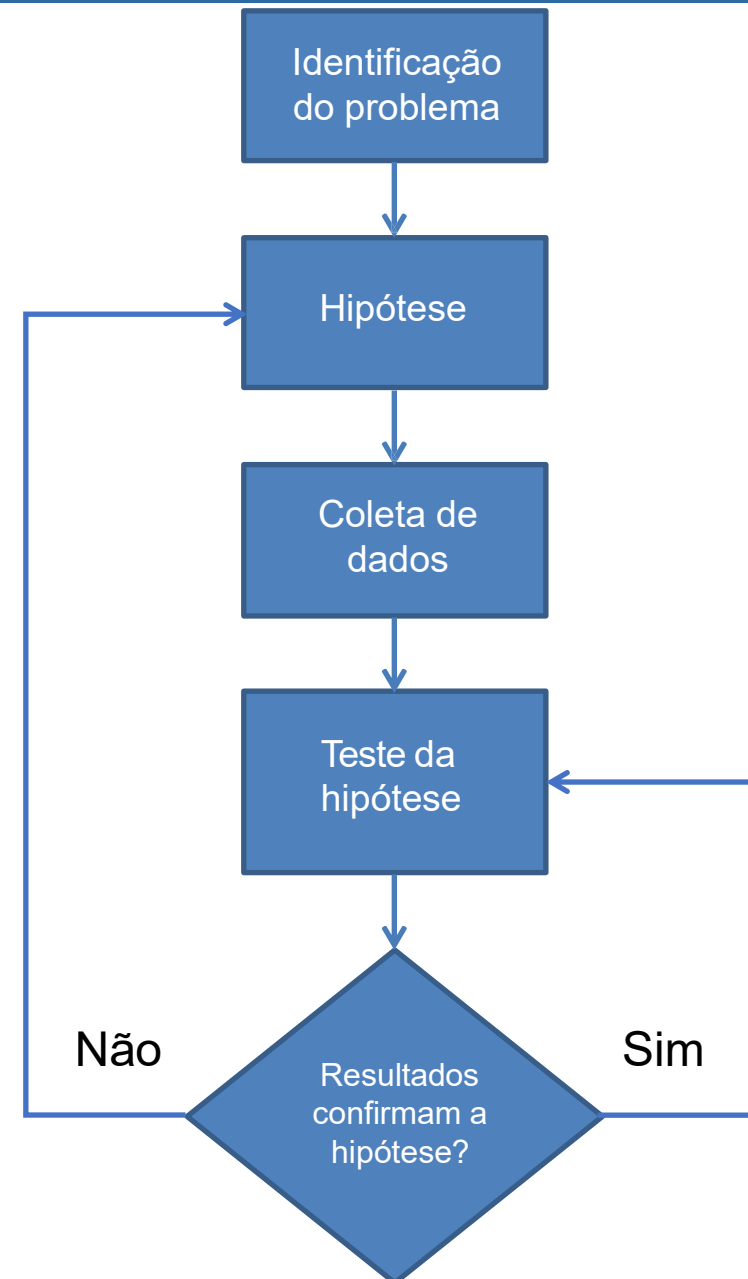
O fluxograma ao lado ilustra os principais passos para a aplicação do método científico. Para a **identificação do problema**, escolhemos o que estamos interessados em estudar. Uma vez definido o problema, podemos elaborar uma **hipótese** para explicá-lo. A elaboração da hipótese é uma tentativa de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



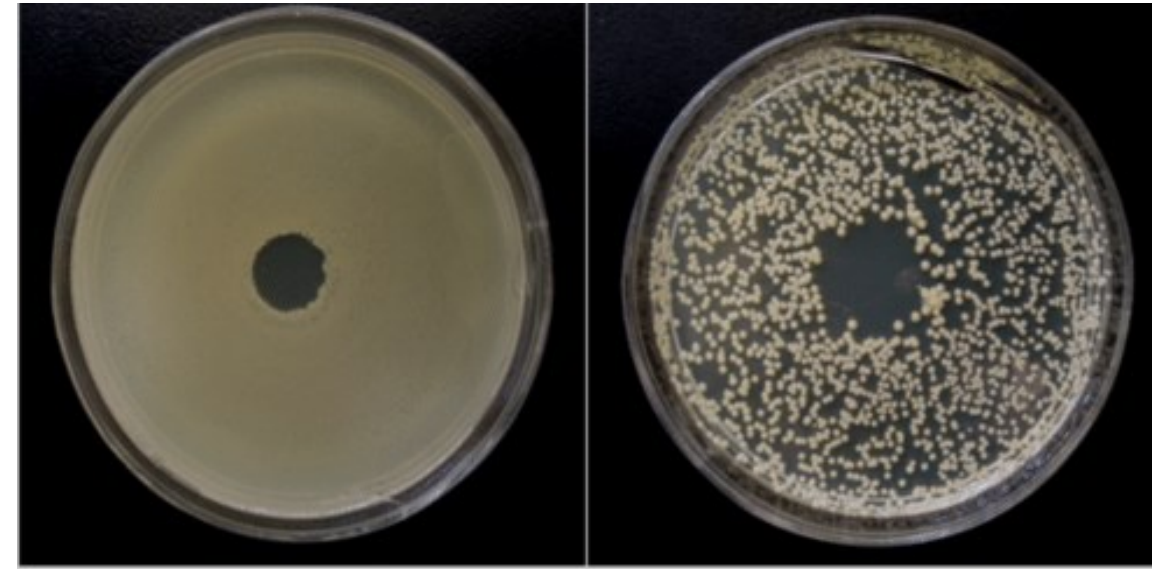
Um Tour pelo Método Científico

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, indicando que a hipótese é aceitável, esta passa a ser aceita pela comunidade científica. Os resultados indicando que a hipótese é aceitável devem ser publicados em periódicos científicos com avaliação realizada por pares. 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.

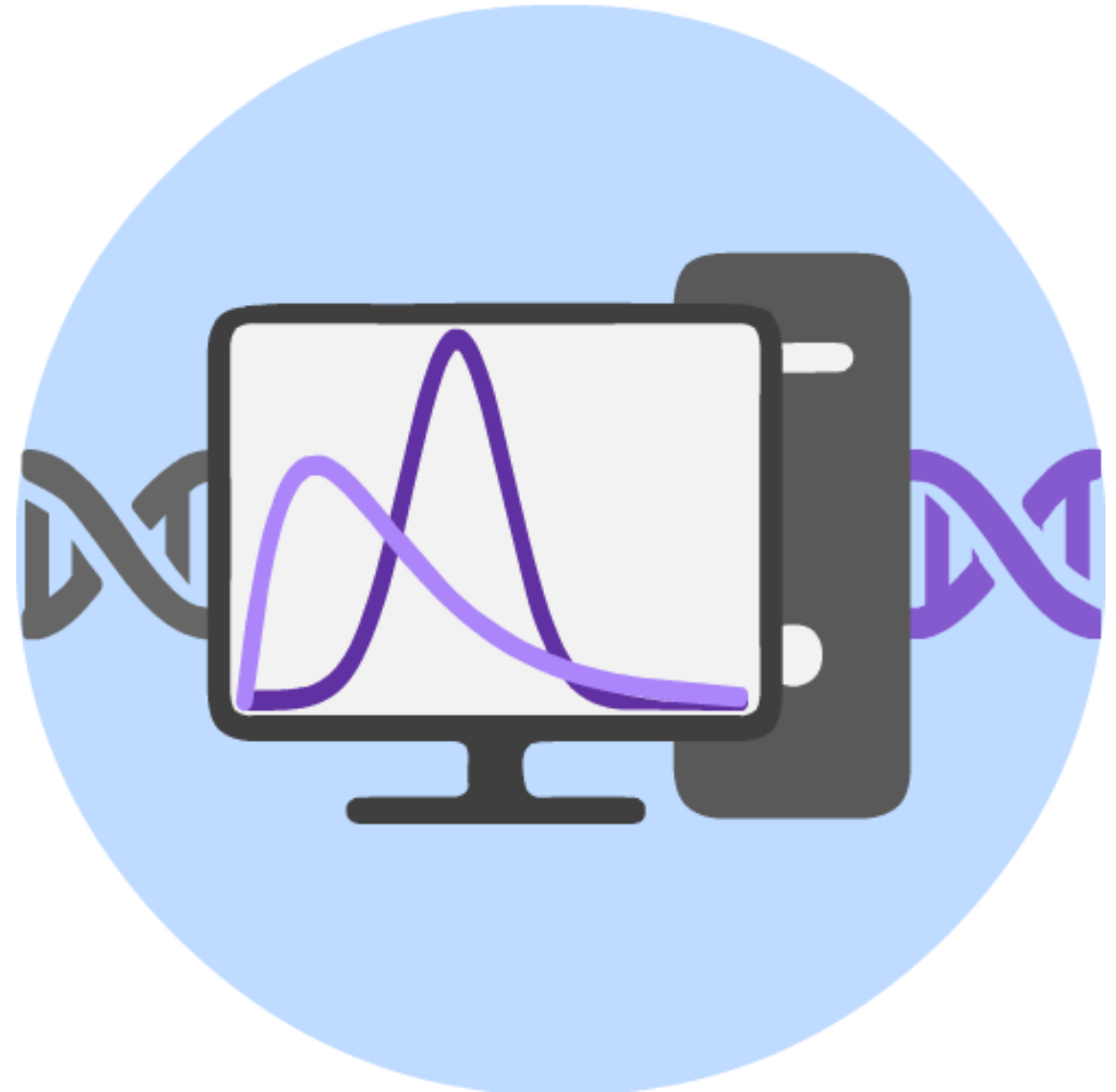


Fonte: https://www.researchgate.net/figure/A-Petri-dish-with-Caso-agar-after-48-hours-seeded-by-10-2-cfu-ml-of-Ecoli-bacteria_fig3_267706870

Experimento Mental

A partir desses resultados, temos que a hipótese é aceitável para a bactéria *E. coli*, podemos testar para outra espécie de bactéria. Se observarmos o mesmo comportamento, temos mais um experimento que indica que a hipótese é aceitável. Assim, teríamos que testar para diferentes espécies de bactérias para vermos abrangência da aceitabilidade da hipótese.

Se conseguirmos dados para um número estatisticamente relevante de espécies de bactérias, podemos afirmar que a hipótese que temperatura influencia a taxa de crescimento de bactérias é aceitável para várias espécies. 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 aceitabilidade da 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, vídeos 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.



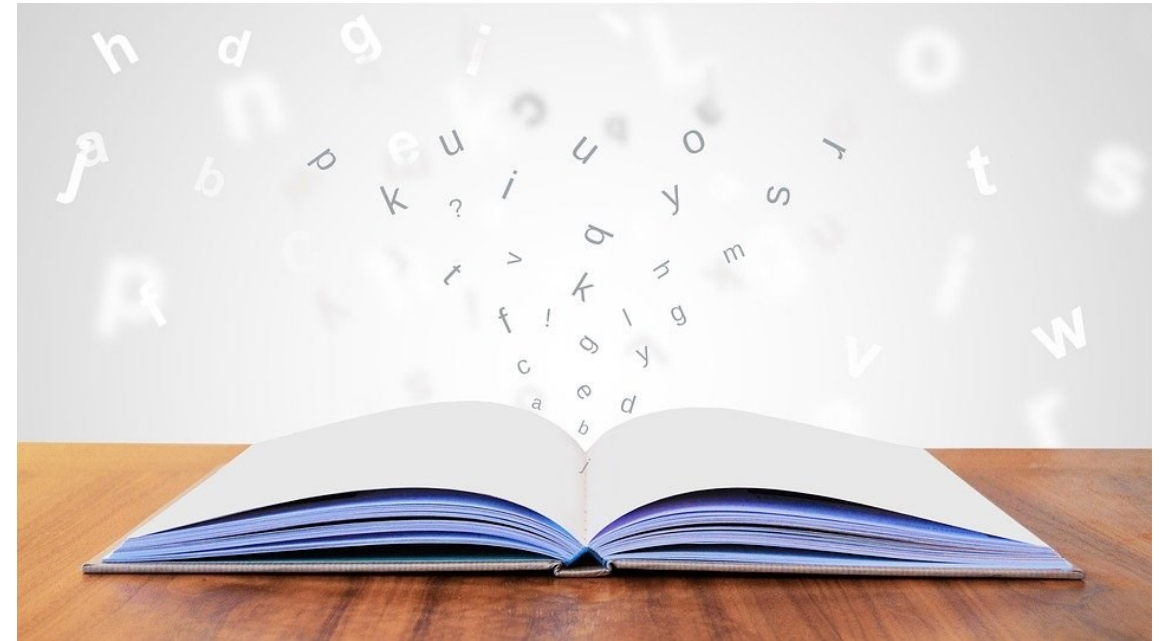
Fonte: <https://pixabay.com/illustrations/science-technology-education-1182713/>

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 tiveram 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 direto 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 químicos 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/tafa>. © 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/tafa>. © 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,

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

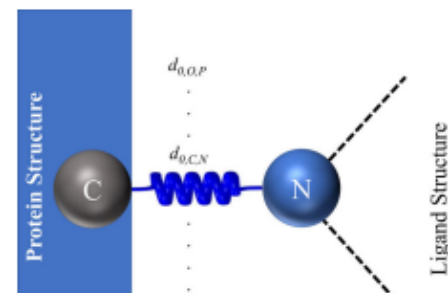
In summary, we could consider our protein-ligand system as composed of an atom-spring-atom system, where we take the first atom from the protein structure and the second one from

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,

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

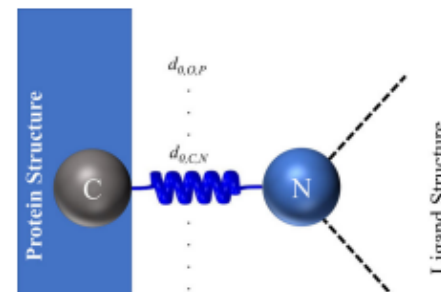
In summary, we could consider our protein-ligand system as composed of an atom-spring-atom system, where we take the first atom from the protein structure and the second one from

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 section. 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

Aqui iremos explorar uma base de dados de artigos científicos e currículos de pesquisadores, a base de dados scopus.com. Como na base de dados [Web Of Science](https://www.webofscience.com), a base 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 [Twitter](#) [Facebook](#) [YouTube](#)

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?

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 métodos computacionais para o estudo da interação de fármacos com proteínas.

Scopus - Search for an author p x +

https://www.scopus.com/freelookup/form/author.uri?zone=TopNavBar&origin=NO%20ORIGIN%20DEFINED

Em pausa

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 Q

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 the search form fields. The 'Author last name' field contains 'Biggin' and the 'Author first name' field contains 'Philip Charles'. The 'Search' button is located at the bottom right of the form. A blue box also highlights an information message at the top of the form.

Author last name
Biggin
e.g. Smith

Author first name
Philip Charles
e.g. J.L.

Affiliation
e.g. University of Toronto

Show exact matches only

Search Q

Information 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.

Scopus

Foi encontrado o currículo, clique no nome.

The screenshot shows a web browser window with the Scopus website. The address bar displays the URL: <https://www.scopus.com/results/authorNamesList.uri?sort=count-f&src=al&sid=6190b6de35b4b241e747225c9b1c85ed&sot=al&sdt=al&sl=50&s=AU...>. The page header includes the Scopus logo and navigation links for Author Search, Sources, and user options like 'Create account' and 'Sign in'. The main content area displays '1 author results' and identifies the author as 'Author last name "Biggin", Author first name "Philip Charles"'. Below this, there is an 'Edit' link. A 'Refine results' sidebar is visible on the left. The main results table shows one entry for Philip Charles Biggin, with 163 documents, an h-index of 43, and affiliation at the University of Oxford Medical Sciences Division in Oxford, United Kingdom. A blue arrow points from the text 'Foi encontrado o currículo, clique no nome.' 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: [v]

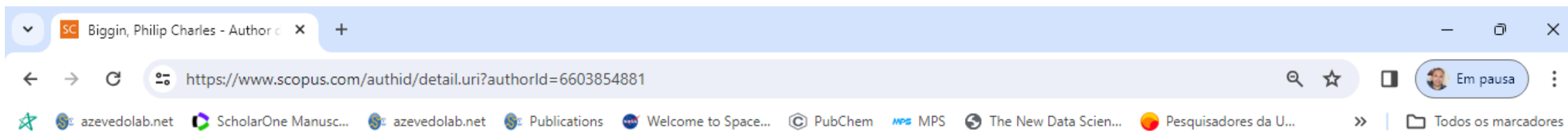
All Request to merge authors

	Author	Documents	h-index	Affiliation	City	Country/Territory
<input type="checkbox"/> 1	Biggin, Philip Charles	163	43	University of Oxford Medical Sciences Division	Oxford	United Kingdom


View last title v

Scopus

O Prof. Biggin tem 163 publicações que receberam 6384 citações. Outro parâmetro de interesse é o número de citações por cada ano.



Biggin, Philip Charles

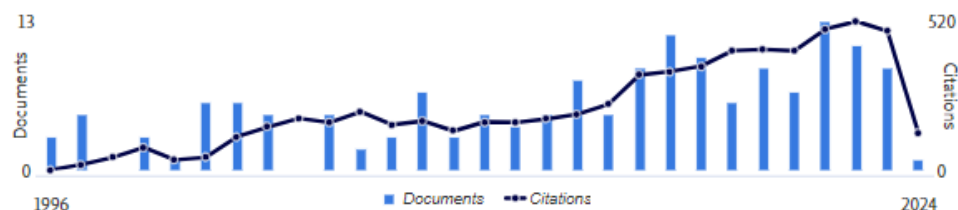
University of Oxford Medical Sciences Division, Oxford, United Kingdom  6603854881  <https://orcid.org/0000-0001-5100-8836>

Is this you? [Connect to Mendeley account](#)

6,384 Citations by 5,245 documents	163 Documents	43 h-Index View h-graph	View all metrics >
---------------------------------------	------------------	--	---------------------------------------

[Set alert](#) [Edit profile](#) [More](#)

Document & citation trends



Scopus Preview

Scopus Preview users can only view a limited set of features. Check your institution's access to view all documents and features.

[Check access](#)

Índice h

O Prof. Biggin tem um índice h de 43, segundo alguns cientistas, espera-se um [índice h de 45 ou maior](#) para que um pesquisador seja considerado influente. Interessante vermos como é difícil atingir métricas científicas relevantes, mesmo para um pesquisador de uma das mais influentes universidades do mundo.

Biggin, Philip Charles

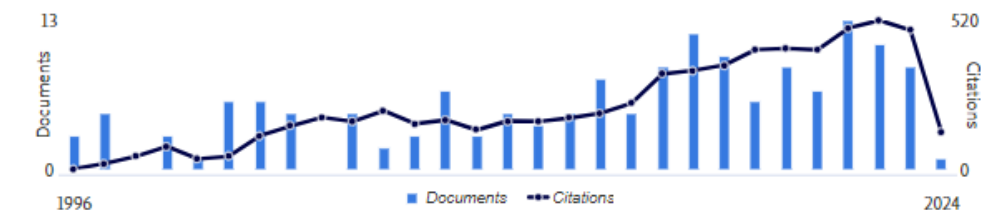
University of Oxford Medical Sciences Division, Oxford, United Kingdom 6603854881 <https://orcid.org/0000-0001-5100-8836>

Is this you? [Connect to Mendeley account](#)

6,384 Citations by 5,245 documents	163 Documents	43 h-Index View h-graph	View all metrics >
---------------------------------------	------------------	--	---------------------------------------

[Set alert](#) [Edit profile](#) [More](#)

Document & citation trends



Scopus Preview

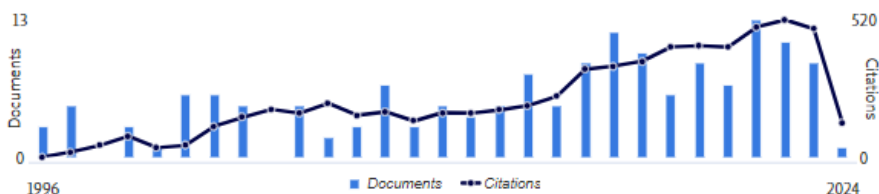
Scopus Preview users can only view a limited set of features. Check your institution's access to view all documents and features.

[Check access](#)

Quociente m

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 27 anos (2023-1996). Fizemos a subtração com 2023, pois o cálculo foi realizado em 27 de março de 2024. O Prof. Biggin tem um quociente m de 1,59, bem próximo do mínimo para ser considerado influente que é de 1,6.

Document & citation trends



Publicação do primeiro artigo do Prof. Biggin.

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

$$\text{quociente } m = \frac{43}{2023 - 1996} = \frac{43}{27}$$

$$\text{quociente } m = 1,59$$

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 25 anos tem as seguintes métricas da base de dados Scopus (coleta realizada em 27 de março de 2024).

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

- Author name: Bitencourt-Ferreira, Gabriela
- Affiliation: Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil
- ORCID ID: 57200550960
- Connect to ORCID: [Connect to ORCID](#)
- Is this you? [Connect to Mendeley account](#)

Key metrics are displayed in a row:

- 676 Citations by 484 documents
- 23 Documents
- 16 h-Index [View h-graph](#)
- [View all metrics >](#)

Below the metrics, there are options to [Set alert](#), [Edit profile](#), and [More](#).

The "Document & citation trends" chart shows the number of documents (blue bars) and citations (black line) from 2018 to 2024. The left y-axis represents Documents (0 to 15), and the right y-axis represents Citations (0 to 185). The x-axis shows years from 2018 to 2024.

Year	Documents	Citations
2018	1	0
2019	15	100
2020	1	100
2021	2	150
2022	0	140
2023	0	140
2024	0	100

On the right side, there is a "Scopus Preview" section with a message: "Scopus Preview users can only view a limited set of features. Check your institution's access to view all documents and features." and a [Check access](#) button.

Quociente m

Apesar da pouca idade, a Gabriela já tem 23 publicações científicas e índice h de 16. 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 displays the URL: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57200550960>. The profile information includes:

- Author Name:** Bitencourt-Ferreira, Gabriela
- Affiliation:** Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil
- ORCID ID:** 57200550960
- Connect to ORCID:** [Connect to ORCID](#)
- Mendeley:** [Is this you? Connect to Mendeley account](#)

Key metrics are displayed in a row:

- 676** Citations by 484 documents
- 23** Documents
- 16** h-Index [View h-graph](#)
- [View all metrics >](#)

Below the metrics, there are options to [Set alert](#), [Edit profile](#), and [More](#).

The **Document & citation trends** chart shows the following data:

Year	Documents	Citations
2018	1	0
2019	15	10
2020	1	10
2021	2	15
2022	0	14
2023	0	14
2024	0	10

On the right side, there is a **Scopus Preview** notification: "Scopus Preview users can only view a limited set of features. Check your institution's access to view all documents and features." Below this is a [Check access](#) button.

Quociente m

O primeiro artigo da Gabriela foi publicado em 2018 e ela tem um índice h de 16, com estas informações podemos calcular seu quociente m como mostrado abaixo. Gabriela tem um quociente m de 3,2, bem acima do valor de 1,6, sugerido como valor de referência (cálculo realizado em 27 de março de 2024).

Document & citation trends



Publicação do primeiro artigo da Gabriela.

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

$$\text{quociente } m = \frac{16}{2023 - 2018} = \frac{16}{5}$$

$$\text{quociente } m = 3,2$$

Impacto na Ciência

A avaliação do impacto em ciência é um assunto de grande interesse, pois mostra se os investimentos realizados pelos governos estão gerando pesquisas de impacto. Como boa parte das pesquisas usam recursos públicos, espera-se que estas gerem um retorno para a sociedade que a está financiando. Com objetivo de mostrar quais cientistas impactam a ciência, um grupo de pesquisadores da *Stanford University* propôs uma análise estatística que mede o impacto das publicações dos pesquisadores em 22 campos divididos em 174 subáreas ([Ioannidis et al., 2020](#)). O referido estudo disponibiliza duas listas com os pesquisadores mais impactantes em suas áreas (os que são os 2% mais impactantes). A listagem considera os pesquisadores que são influentes ao longo da carreira e aqueles que foram influentes no ano anterior da publicação da análise. Um cientista pode figurar nas duas listas, ou seja, ser influente ao longo da carreira e ainda continuar influente no último ano da análise.

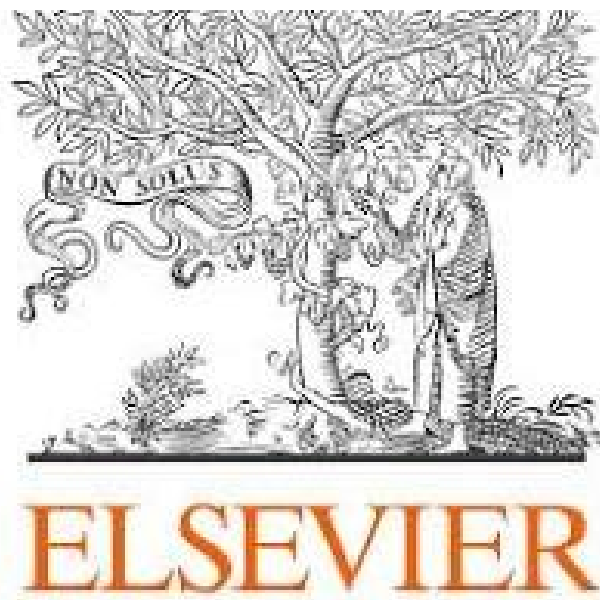
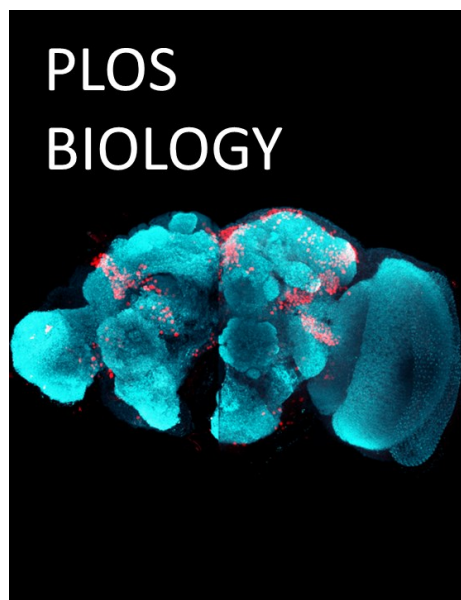
PLOS
BIOLOGY



Scopus

Impacto na Ciência

Vários aspectos tornam essa análise extremamente importante ([Ioannidis et al., 2020](#)). Entre elas destacamos a abrangência. A análise não foca num campo isolado do conhecimento humano. Ela envolve 22 campos incluindo as áreas da saúde, ciências naturais, exatas e tecnológicas. Outro aspecto que merece atenção é que a análise não se restringe aos cientistas experientes. É possível medir o impacto da pesquisa científica de jovens pesquisadores, desde que tenham pelo menos cinco artigos publicados. Esses resultados são interessantes, pois servem de estímulo aos jovens pesquisadores para que foquem suas pesquisas em áreas que realmente estão impactando a ciência e trazendo progresso para sociedade como um todo.

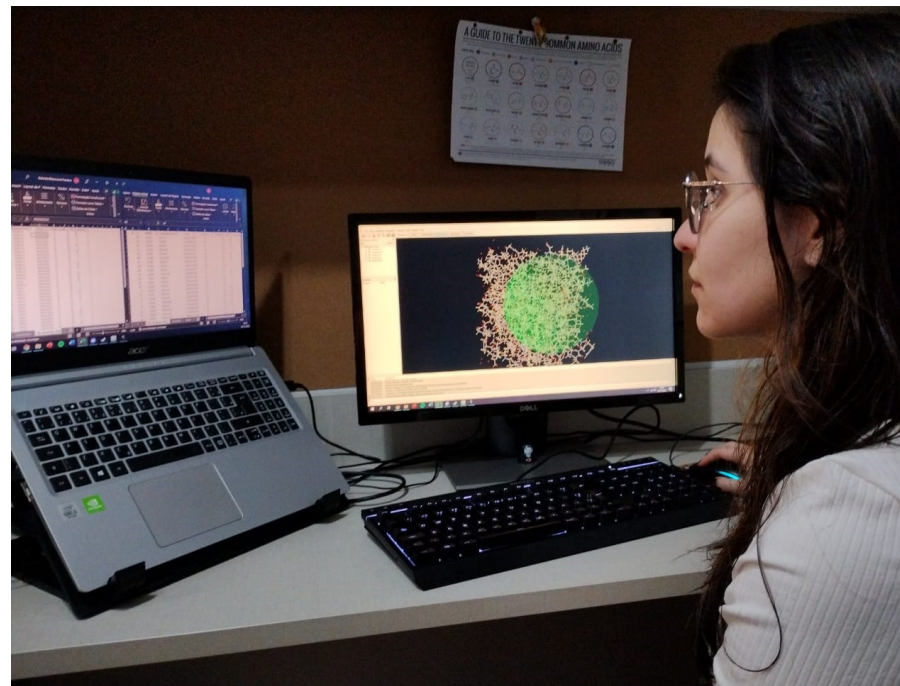


Impacto na Ciência

Nos anos de 2022 e 2023 a Gabriela Bitencourt-Ferreira foi considerada uma das pesquisadoras mais influentes do mundo (coleta realizada em 27 de março de 2024) pela revista científica Plos Biology usando métricas previamente definidas ([Ioannidis et al., 2020](#)). Vejam as reportagens abaixo.



Reportagem da Rede Globo sobre mulheres gaúchas na ciência que fizeram história. Link [here](#)



Gabriela Bitencourt Ferreira foi reconhecida como pesquisadora influente pelo impacto dos seus estudos em 2021 / Foto: Arquivo pessoal. 10 pesquisadores da PUCRS estão entre os mais influentes do mundo. Link [aqui](#).

Impacto na Ciência

No estudo original de 2020 ([Ioannidis et al., 2020](#)) e na atualização das listas em todos anos posteriores, tive a honra de figurar entre os pesquisadores mais influentes ao longo da carreira, bem como no último ano analisado. Vejam as reportagens abaixo.



UNIFAL-MG
no ranking Elsevier BV - 2023
com pesquisadores entre os
mais influentes do mundo



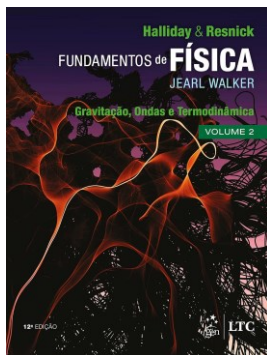
Walter Filgueira de Azevedo Jr.

Referência na área de bioinformática, o professor desenvolve estudos sobre aprendizado de máquina, sistemas complexos e biologia de sistemas computacionais. Possui +7500 citações de +200 publicações, [na Scopus](#). Em 1998, participou de um projeto de pesquisa com a NASA que enviou proteínas para cristalizar em ambiente de microgravidade a bordo do [Ônibus Espacial Discovery \(STS-95\)](#).

Referências



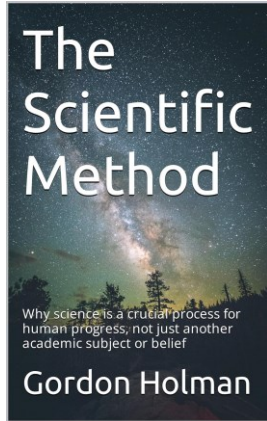
da Silva AD, Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo WF Jr. Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity. J Comput Chem. 2020; 41(1): 69-73.



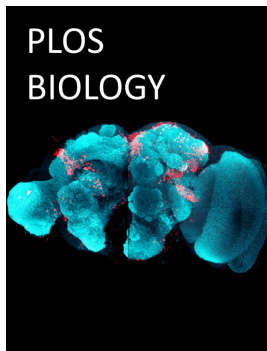
HALLIDAY, David; RESNICK, Robert; WALKER, Jearl. **Fundamentos da Física - Gravitação, Ondas e Termodinâmica - Volume 2.** GEN | LTC. Edição do Kindle.



Referências

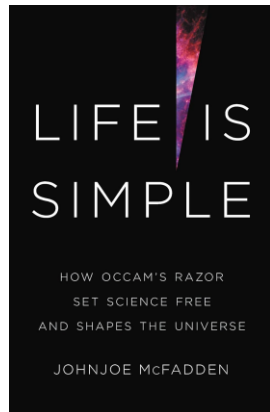


HOLMAN, Gordon. **The Scientific Method: Why science is a crucial process for human progress, not just another academic subject or belief.** 2023. Edição do Kindle.



Ioannidis JPA, Boyack KW, Baas J. Updated science-wide author databases of standardized citation indicators. PLoS Biol. 2020; 18(10): e3000918.

Referências



MCFADDEN, Johnjoe. **Life Is Simple: How Occam's Razor Set Science Free and Shapes the Universe**. 2021. Basic Books. Edição do Kindle.



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