

ANEXO I

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS INSTITUTO DE PATOLOGIA TROPICAL E SAÚDE PÚBLICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MEDICINA TROPICAL E SAÚDE PÚBLICA	
---	---

Disciplina: Tópicos Especiais em Quimioinformática e Planejamento de Fármacos Auxiliado por Computador
Carga Horária: 48h Total de créditos: 3 créditos
Professora responsável: Profa. Dra. Carolina Horta Andrade Contato: (e-mail/telefone/sala) carolina@ufg.br 3209-6451/ 4º. andar FF,
Professores convidados: Dra. Melina Mottin e Dra. Sabrina Silva Mendonça (LabMol-FF-UFG), além de Professores convidados do Brasil e do Exterior

EMENTA
A disciplina possui como principais objetivos possibilitar aos alunos de pós-graduação, níveis mestrado e doutorado, a compreensão dos princípios básicos de Quimioinformática e Planejamento de Fármacos Auxiliado por Computador, assim como apresentar exemplos da utilização da Quimioinformática para o planejamento e descoberta de novos fármacos. Fundamentos de diversas técnicas e metodologias de modelagem molecular para planejamento de fármacos serão apresentados e discutidos. Evidenciar a importância do tratamento de dados para as técnicas de modelagem molecular. Exemplos da aplicação da Quimioinformática na descoberta de fármacos serão apresentados e discutidos, incluindo antivirais, antiparasitários, anticâncer, entre outras classes de fármacos.

METODOLOGIA DE ENSINO
As aulas serão divididas em atividades síncronas e atividades assíncronas. Atividades síncronas: ocorrerão de forma simultânea na forma de vídeo-chamadas, utilizando a plataforma Google Classroom (Google Sala de Aula), nas quais docentes e estudantes participam no mesmo instante e no mesmo ambiente (virtual). As seguintes metodologias serão exploradas durante as atividades síncronas: • Aula teórica expositiva dialogada; • Sala de aula invertida: discussão e apresentação de artigos científicos. Atividades assíncronas: são caracterizadas pela não simultaneidade, ou seja, não é preciso que os estudantes e docentes estejam 'conectados' ao mesmo tempo. Isso exigirá dos estudantes maior protagonismo e uma melhor organização espaço-temporal da sua rotina acadêmica. As seguintes metodologias serão exploradas durante as aulas assíncronas: • Participação no Fórum, com intervenções elaboradas, conforme instruções a serem divulgadas pelos docentes;

- Questionários, elaboração de mapas conceituais, textos colaborativos, Glossários, etc.

Serão usados o Jupyter Notebooks e bibliotecas em Python (como RDKit, DeepChem e PyTorch/TensorFlow), para permitir que os alunos implementem modelos básicos discutidos na 9ª e 10ª semanas, em vez de apenas assistirem a aulas expositivas. O uso do *Google Colab* facilitará essa implementação sem a necessidade de infraestrutura local pesada. Adicionalmente, serão empregadas ferramentas de visualização estrutural de complexos proteína–ligante, como PyMOL e VMD, bem como programas para análise de interações proteína–ligante, como PLIP e PoseView, e de pós-processamento de imagem, como Inkscape, com o objetivo de apoiar a interpretação estrutural e a elaboração de figuras científicas para comunicação de resultados

AVALIAÇÃO

A avaliação será contínua com *feedback* imediato e ao final será gerada uma única nota. Etapas desenvolvidas na composição da nota:

1. Avaliação Cognitiva (70% da Média) – "O Saber"

- **Seminário (35%):** Os alunos devem apresentar e discutir criticamente um **artigo científico de alto impacto**, publicado entre 2024-2026, que utilize as novas ferramentas discutidas.
- **Projeto Final de Planejamento (25%):** Elaboração de um **relatório no formato de "Short Communication"**, onde o aluno deve propor um fluxo de trabalho (*workflow*) para um alvo terapêutico específico, integrando obrigatoriamente:
 - Curadoria de dados seguindo princípios FAIR.
 - Predição de estrutura 3D de proteína e *Docking molecular*.
 - Uma etapa de predição de propriedades (IA/Machine Learning).
- **Resenhas críticas (10%):** os alunos irão redigir uma resenha ou resumo crítico sobre as palestras dos convidados estrangeiros.

2. Avaliação Psicomotora (25% da Média) – "O Saber Fazer"

- **Desafios de Implementação (Notebooks):** Entrega de pequenos exercícios práticos realizados em **Jupyter Notebooks (Google Colab)** ao longo das 12 semanas. Exemplos:
 - Cálculo de descritores moleculares e análise de similaridade via RDKit.
 - Execução de um protocolo de triagem virtual simplificado.
 - Treinamento de um modelo básico de *Machine Learning* para prever toxicidade (semana 9 e 10).
- **Comunicação Visual de Complexos Moleculares - Análise Crítica e Elaboração de Figura Científica:** Entrega de atividade práticas, envolvendo representação estrutural

de complexos proteína–ligante para comunicação científica. As atividades poderão incluir:

- reformulação crítica de figura científica de complexo proteína–ligante (2D e 3D), e elaboração legenda em padrão de artigo científico.
- **Participação Ativa:** Intervenções fundamentadas durante as discussões dos tópicos de aula.

3. Avaliação Sócio-afetiva (5% da Média) – "O Saber Ser"

- **Colaboração em Rede:** Avaliada através da interação na plataforma *Google Classroom*, prontidão na entrega das tarefas e capacidade de trabalhar em equipe.

Resumo da Composição Final da Nota:

Atividade	Tipo de Avaliação	Peso
Seminário (Artigo de Fronteira)	Cognitiva	3,5
Relatório de Projeto Final	Cognitiva	2,5
Resenhas críticas	Cognitiva	1,0
Práticas em Notebooks/Colab	Psicomotora	1,0
Prática de Análise Crítica e Elaboração de Figura Científica	Psicomotora	1,0
Participação em Discussões	Psicomotora	0,5
Atitude e Proatividade	Sócio-afetiva	0,5
Total		10,0

Frequência: mínima de 85%.

CRONOGRAMA E CONTEÚDO PROGRAMÁTICO			
Semana	Conteúdo	Docente	
1ª. Semana 07/08	Apresentação da disciplina, cronograma, métodos de avaliação; Conceitos em Química Farmacêutica Medicinal; Introdução geral ao CADD, LBDD, SBDD. Palestra especial durante a Semana de Planejamento da Faculdade de Farmácia: "O futuro digital na ciência farmacêutica" - Prof. Josef Spillner (ZHAW) – necessita inscrição para certificado.	Profa. Carolina Profa. Melina	
2ª. Semana 14/08	Quimioinformática: Introdução à Quimioinformática Moléculas como Grafos, Redes Neurais de Grafos (GNNs), Pesquisa em Grafos e programação (prática). Pesquisa em grafos aplicada a NAMs e predição de toxicidade.	Profa. Carolina Prof. Josef Spillner (ZHAW, Suíça)	

3ª. Semana 21/08	Quimioinformática: Quimioinformática, descritores moleculares, similaridade molecular, <i>activity cliffs</i> e <i>activity landscapes</i> Atividade Prática	Prof. José Medina-Franco (UNAM, México)
4ª. Semana 04/09	Dados e Curadoria: Princípios FAIR (Qualidade e reprodutibilidade); Descritores moleculares. Atividade Prática	Profa. Carolina Dra. Sabrina
5ª. Semana 11/09	Interação Receptor-Ligante: Docking molecular e funções de scoring. Boas práticas em triagem virtual baseada em docking.	Prof. Carlos Maurício Santa'нна (UFRJ) Profa. Melina
6ª. Semana 18/09	Alvos e Estrutura 3D: Predição de estruturas 3D de proteínas; métricas de confiança, limitações e aplicações na modelagem de alvos terapêuticos. Representação Estrutural de Complexos Proteína-Ligante: análise e comunicação visual de interações proteína-ligante; elaboração de representações 3D e diagramas 2D para publicações científicas.	Profa. Melina e Dra. Sabrina
7ª. Semana 25/09	Atividade Prática: Predição de estrutura 3D e representação gráfica para publicações científicas.	Dra. Sabrina
8ª. Semana 02/10	Simulações e Redes: Dinâmica Molecular; Farmacologia de Redes e Polifarmacologia	Profa. Melina Prof. Pedro Torres (UFRJ)
9ª. Semana 09/10	IA/aprendizado de máquina: Métodos supervisionados e não-supervisionados; Algoritmos clássicos para predição de propriedades. Atividade Prática	Profa. Carolina Dra. Sabrina
10ª. Semana 23/10	IA/Modelos generativos: Inteligência Artificial Generativa e LLMs aplicados à descoberta de fármacos (SMILES/Transformers).	Profa. Carolina Dra. Sabrina
11ª. Semana 30/10	Toxicologia computacional; Reposicionamento <i>in silico</i> e casos de sucesso reais.	Profa. Carolina Profa. Melina
12ª. Semana 06/11	Novas Modalidades Terapêuticas: Planejamento de PROTACs , peptídeos e biológicos.	Profa. Dra. Elisa Uliassi (UniBo, Itália)
13ª. Semana 13/11	Encerramento: Apresentação de seminários e avaliação final.	Profa. Carolina Profa. Melina

***Não haverá aula nos dias 28/08 e 16/10**

BIBLIOGRAFIA

- (1) *Drug Discovery and Development*, 1st ed.; O'Donnell III, J. J., Somberg, J., Idemyor, V., O'Donnell, J. T., CRC Press: Boca Raton, Florida : CRC Press, 2019., 2019.
<https://doi.org/10.1201/9781315113470>.
- (2) *Artificial Intelligence in Drug Discovery*; 1st ed.; Brown, N., Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2020. <https://doi.org/10.1039/9781788016841>.
- (3) *Computational Approaches in Cheminformatics and Bioinformatics*; Guha, R., Bender, A.; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA, 2011.
<https://doi.org/10.1002/9781118131411>.
- (4) *Applied Chemoinformatics*; Engel, T., Gasteiger, J., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA: Weinheim, Germany, 2018. <https://doi.org/10.1002/9783527806539>.
- (5) *Deep Learning for Dummies*; Mueller, J. P., Massaron, L. John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA, 2019. <https://hub.wiley.com/community/support/dummies>.
- (6) *Small Molecule Drug Discovery*; Trabocchi, A., Lenci, E. Elsevier, 2020.
<https://doi.org/10.1016/C2018-0-03933-X>.
- (7) Neves, B. J.; Mottin, M.; Moreira-Filho, J. T.; Sousa, B. K. de P.; Mendonca, S. S.; Andrade, C. H. Best Practices for Docking-Based Virtual Screening. In *Molecular Docking for Computer-Aided Drug Design*; Elsevier, 2021; pp 75–98.
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822312-3.00001-1>.
- (8) Ekins, S.; Puhl, A. C.; Zorn, K. M.; Lane, T. R.; Russo, D. P.; Klein, J. J.; Hickey, A. J.; Clark, A. M. Exploiting Machine Learning for End-to-End Drug Discovery and Development. *Nat. Mater.* **2019**, 18 (5), 435–441.
<https://doi.org/10.1038/s41563-019-0338-z>.
- (9) Yang, X.; Wang, Y.; Byrne, R.; Schneider, G.; Yang, S. Concepts of Artificial Intelligence for Computer-Assisted Drug Discovery. *Chem. Rev.* **2019**, 119 (18), 10520–10594.
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00728>.
- (10) Fourches, D.; Muratov, E.; Tropsha, A. Trust, but Verify II: A Practical Guide to Chemogenomics Data Curation. *J. Chem. Inf. Model.* **2016**, 56 (7), 1243–1252.
<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00129>.

* Artigos especializados da área recentes serão disponibilizados durante o curso.

OBSERVAÇÕES GERAIS

Todas as atividades (Fóruns, mapas conceituais, produção de textos, glossários, relatórios, etc.) deverão ser postadas e respondidas dentro da turma virtual do Google Classroom, conforme destacado a seguir:

- As atividades deverão ser respondidas diretamente dentro da aba “Atividades” utilizando os recursos “Google Docs” e “Google Formulários” ou conforme instruções dadas pelos docentes;
- Os prazos (dia e horário) para entrega das atividades serão gerenciados através do Google Calendar. Atividades entregues fora dos prazos não serão pontuadas;
- Todas as atividades entregues pelos alunos serão revisadas automaticamente pelo Google Classroom para detecção de plágio. As atividades que forem identificadas como plágio terão pontuação igual a zero (0);
- Atividades encaminhadas por e-mail ou através de outros recursos digitais externos ao Google Classroom terão pontuação igual a zero (0);
- As notas e frequências serão publicadas exclusivamente no SIGAA.

DIREITOS AUTORAIS, DE IMAGEM E VOZ DE DOCENTES

Com vistas à proteção dos direitos autorais, de imagem e voz de docente(es) e estudantes, abaixo estão elencadas algumas medidas/resoluções, as quais deverão ter a ciência e concordância de todos os envolvidos nas atividades de ensino previstas para esta disciplina.

- No desenvolvimento das atividades remotas emergenciais, algumas poderão ser gravadas. Dessa forma, poderá haver a captura de imagem e voz do professor e dos estudantes. A gravação das atividades remotas ocorrerá a partir da anuência conjunta do docente responsável pela disciplina e os estudantes nela regularmente matriculados;
- Poderão ter acesso ao ambiente virtual de ensino, apenas o docente e os estudantes regularmente matriculados nesta disciplina. Depende de autorização do professor, o acesso de terceiros ao ambiente virtual, que porventura, não estejam diretamente envolvidos com as atividades nela desenvolvidas;
- Os materiais didáticos, que porventura, forem disponibilizados pelo docente, não poderão ser objeto de divulgação ao público externo, seja por meio de redes sociais, filmagens, vídeos, impressos de fotografias e quaisquer outros meios de publicação e comunicação;
- O material didático produzido e fornecido pelo docente deve ser utilizado apenas para fins educacionais e pedagógicos da disciplina;
- É proibida a reprodução e/ou a distribuição de trechos ou da integralidade das aulas gravadas sem a autorização expressa do professor.

Número de vagas ofertadas:	Aluno regular: 10 vagas		Aluno especial: 5 vagas
Modalidade:	[] Presencial	[x] Híbrida	
Duração em semanas:	13 semanas		

Cronograma:	6ª feiras, das 9h às 12h; início em 07/08 e término em 13/11.
Local/Link:	Sala de defesas do PPGCF (4º andar FF-UFG) e link para as aulas que ocorrerão com docentes de outras localidades: https://meet.google.com/guc-cmzu-oky
Turma no Classroom	código turma oss7ov2t

