



# Modelagem Molecular Aplicada à Descoberta de Fármacos

MSc. Ana Luiza Martins Karl

@: almkarl@lncc.br

PETRÓPOLIS, 2025



# Conteúdo programado

**01**

Introdução

**02**

Identificação de  
alvos

**03**

Obtenção de  
modelos

**04**

Preparação das  
estruturas

**05**

Docking e  
Triagem Virtual



Prática



# Conteúdo programado

**01** Introdução

**02** Identificação de alvos

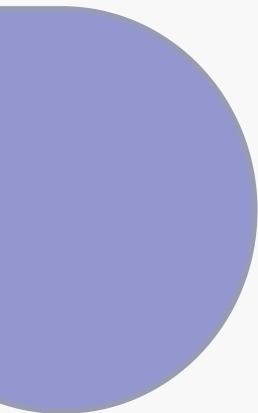
**03** Obtenção de modelos

**04** Preparação das estruturas

**05** Docking e Triagem Virtual

Prática



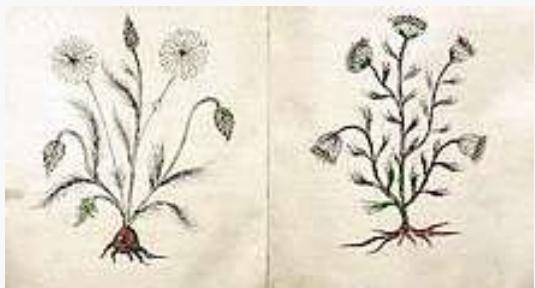


# 01

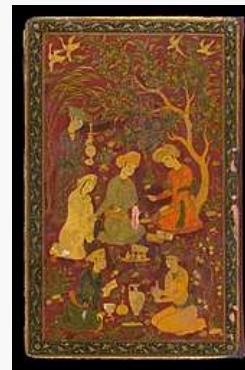
## Introdução

Como a modelagem molecular auxilia no desenvolvimento de fármacos?

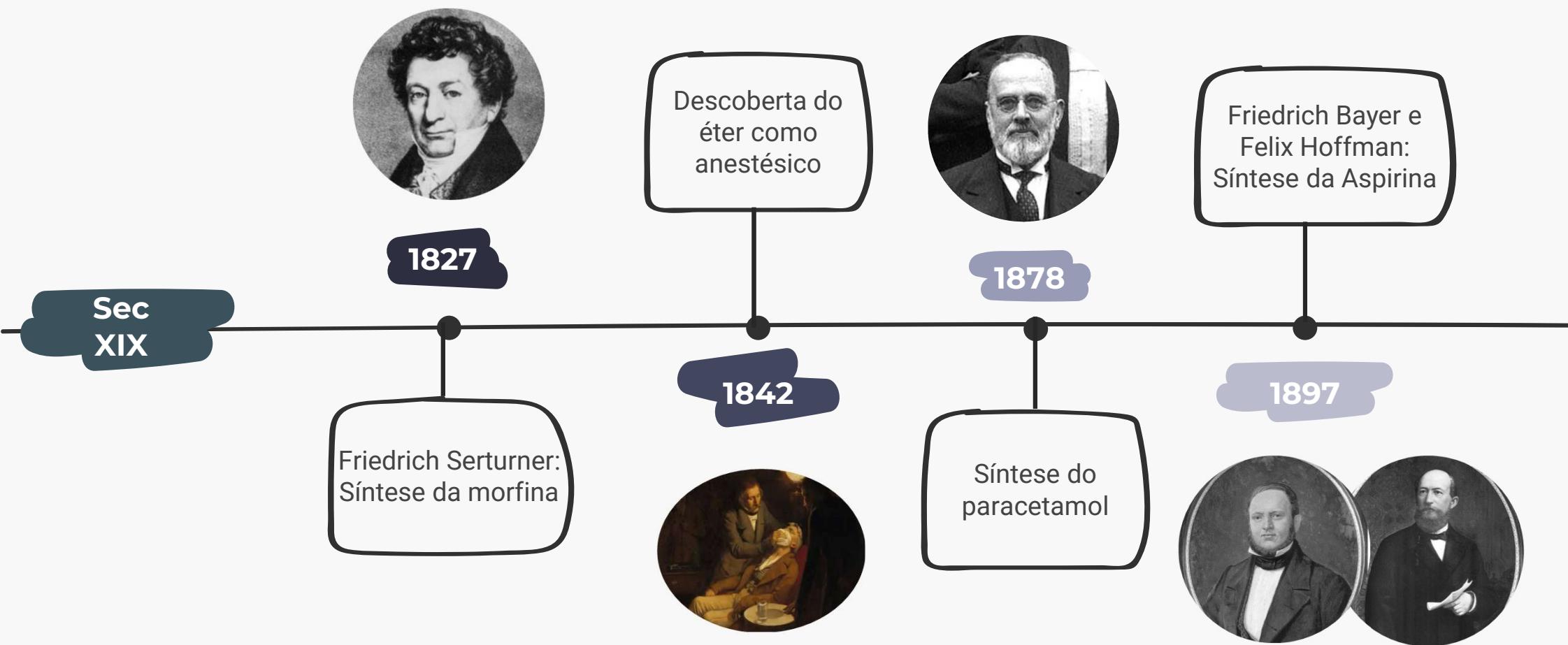
# Descoberta de Medicamentos



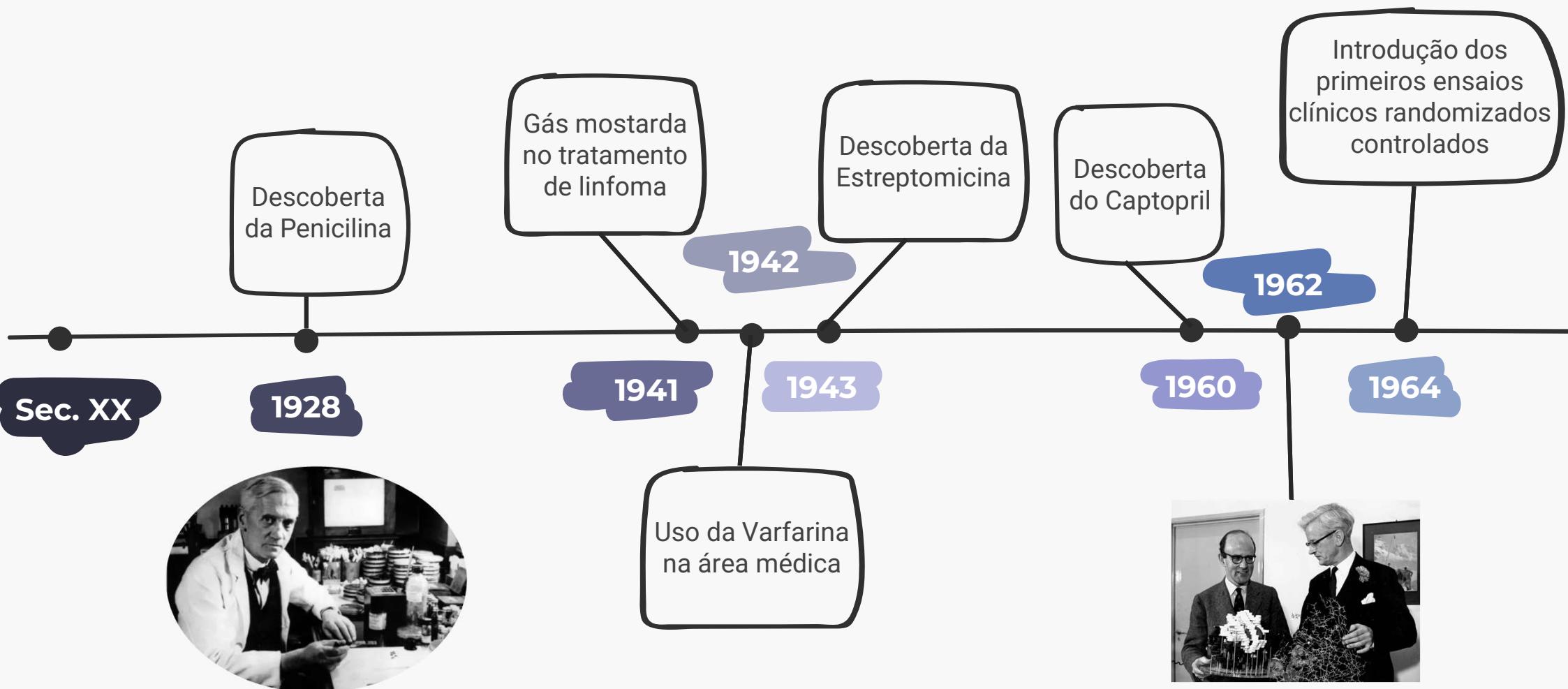
Sec XIX



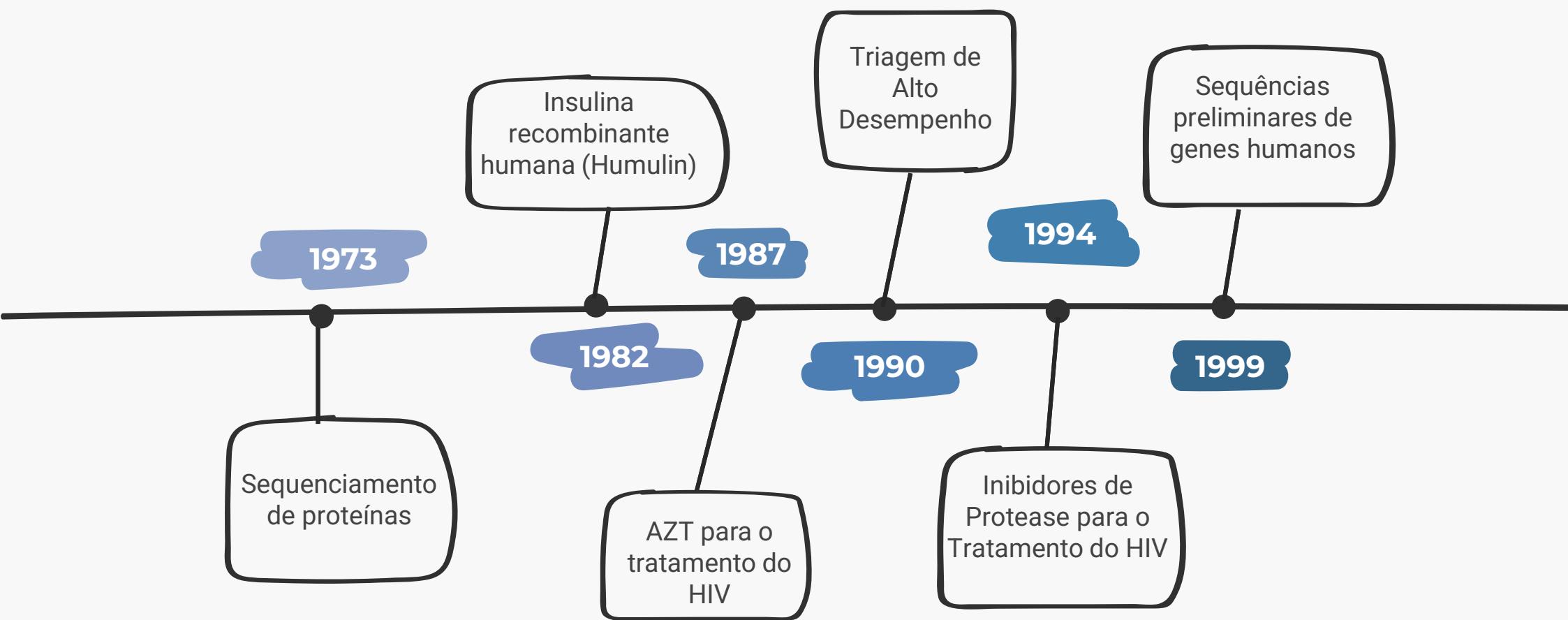
# Descoberta de Medicamentos



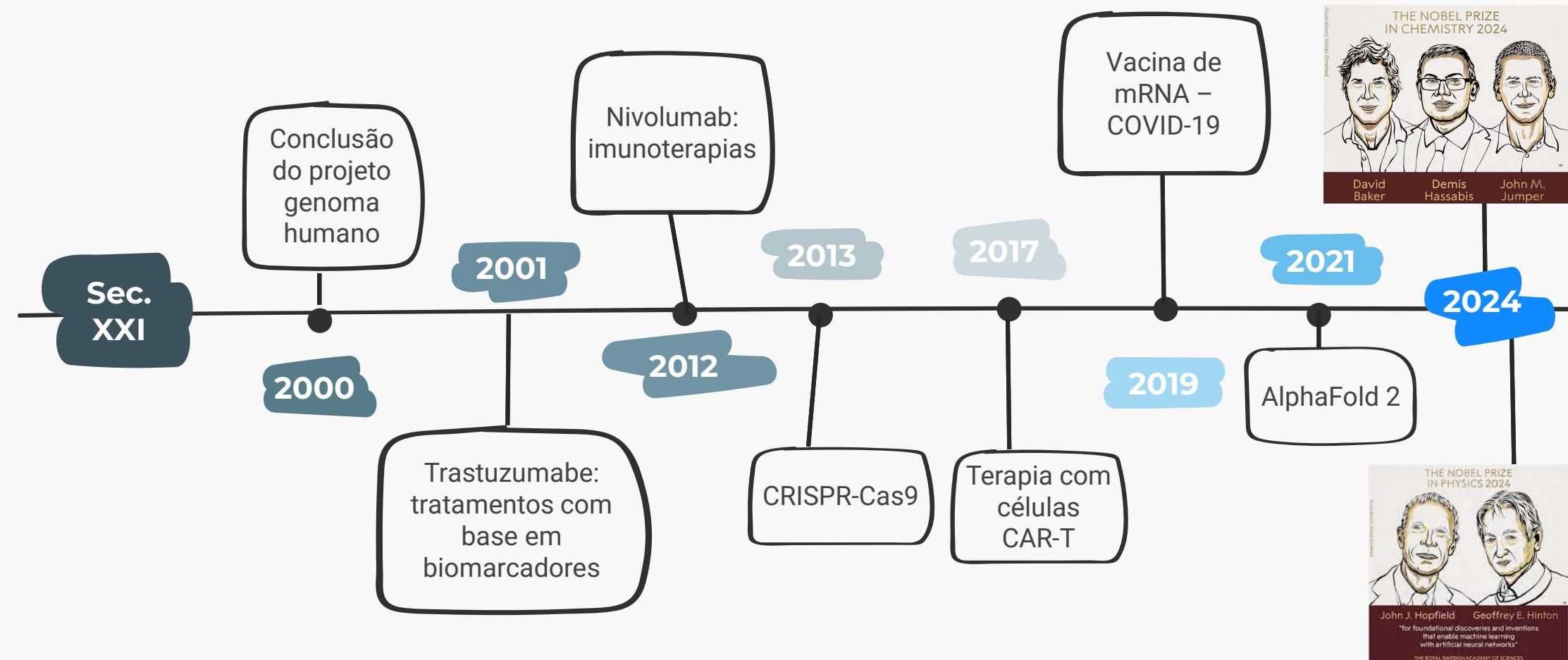
# Descoberta de Medicamentos



# Descoberta de Medicamentos



# Descoberta de Medicamentos





# O que mudou?

Avanços  
tecnológicos

Integração com  
a computação

Quantidade de  
dados

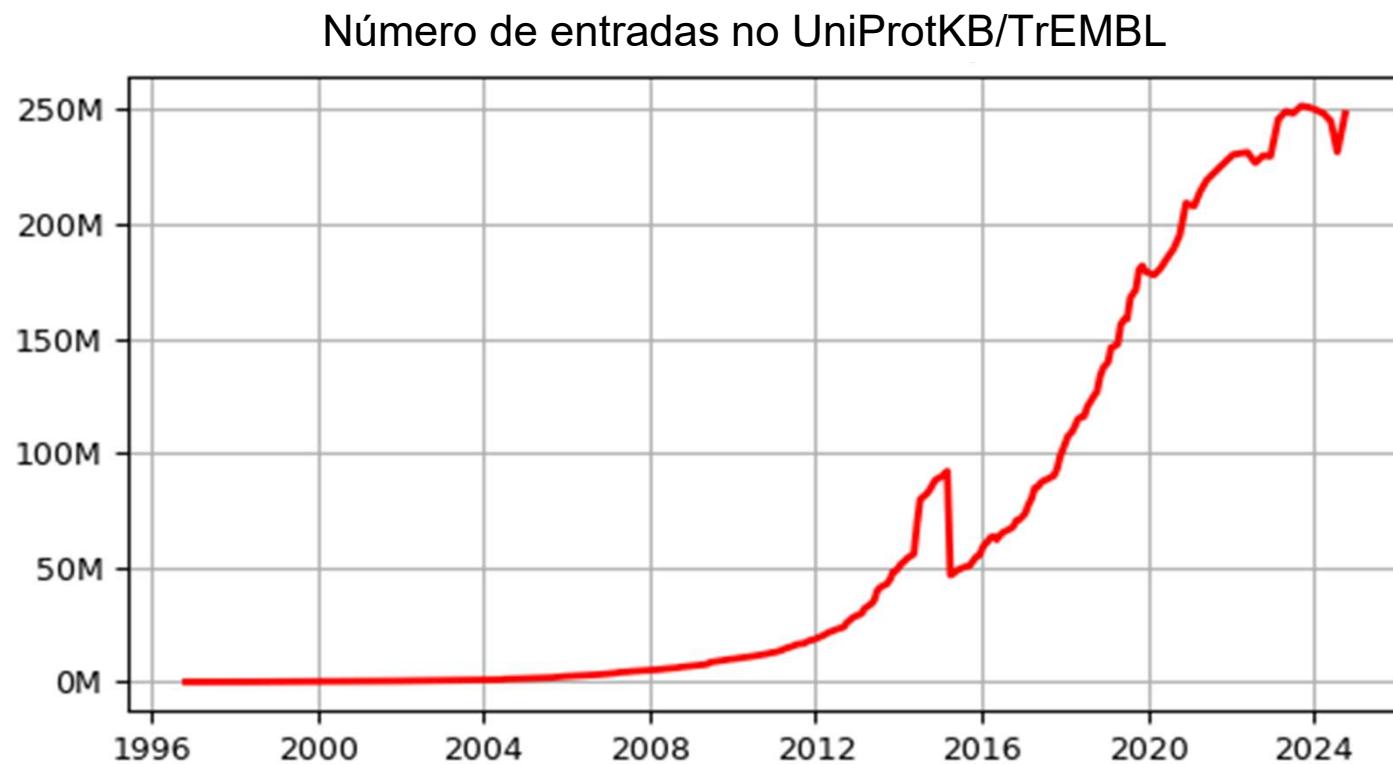
Capacidade de  
processamento

Diminuição dos  
custos

**Decisões  
baseadas em  
conhecimento**

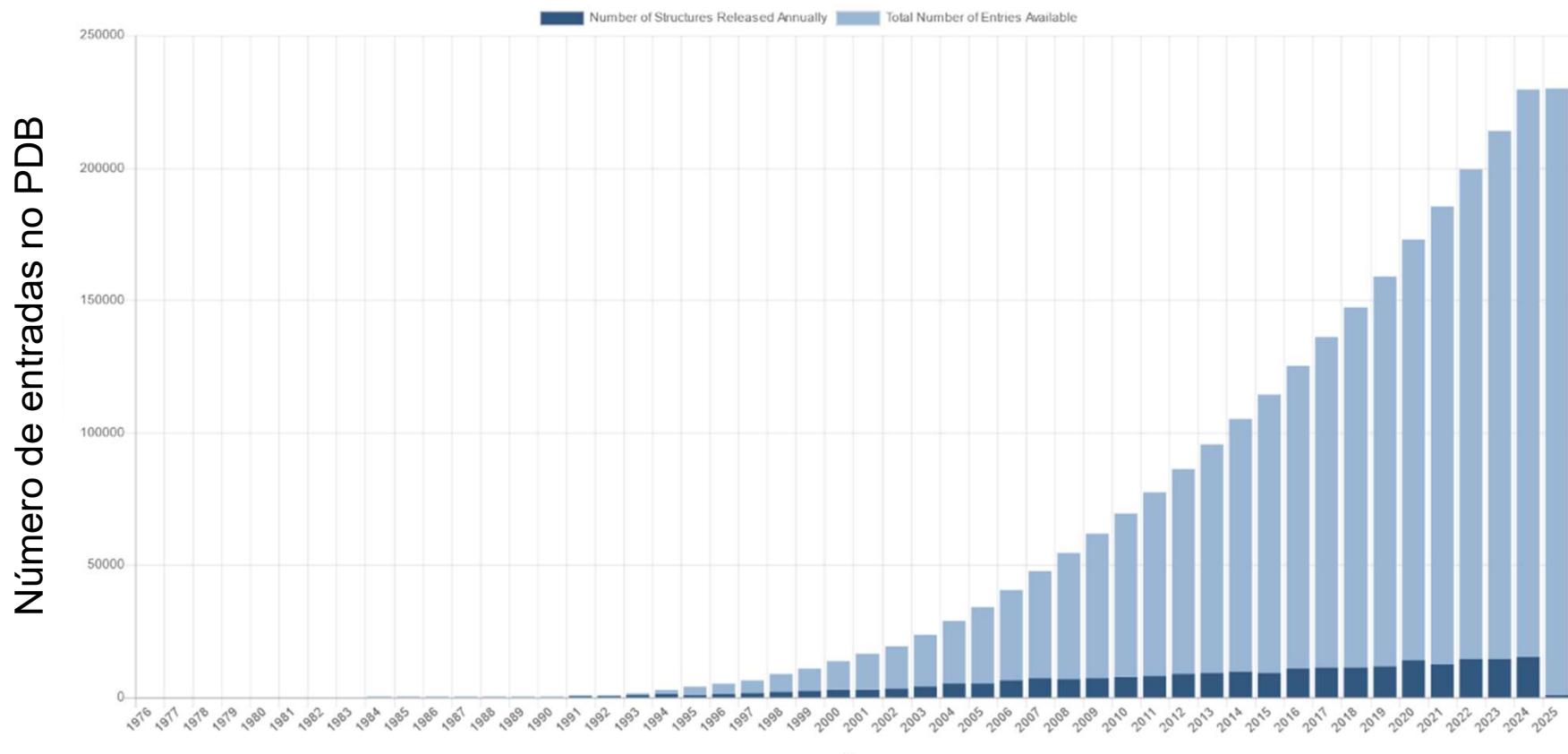


# O que mudou?



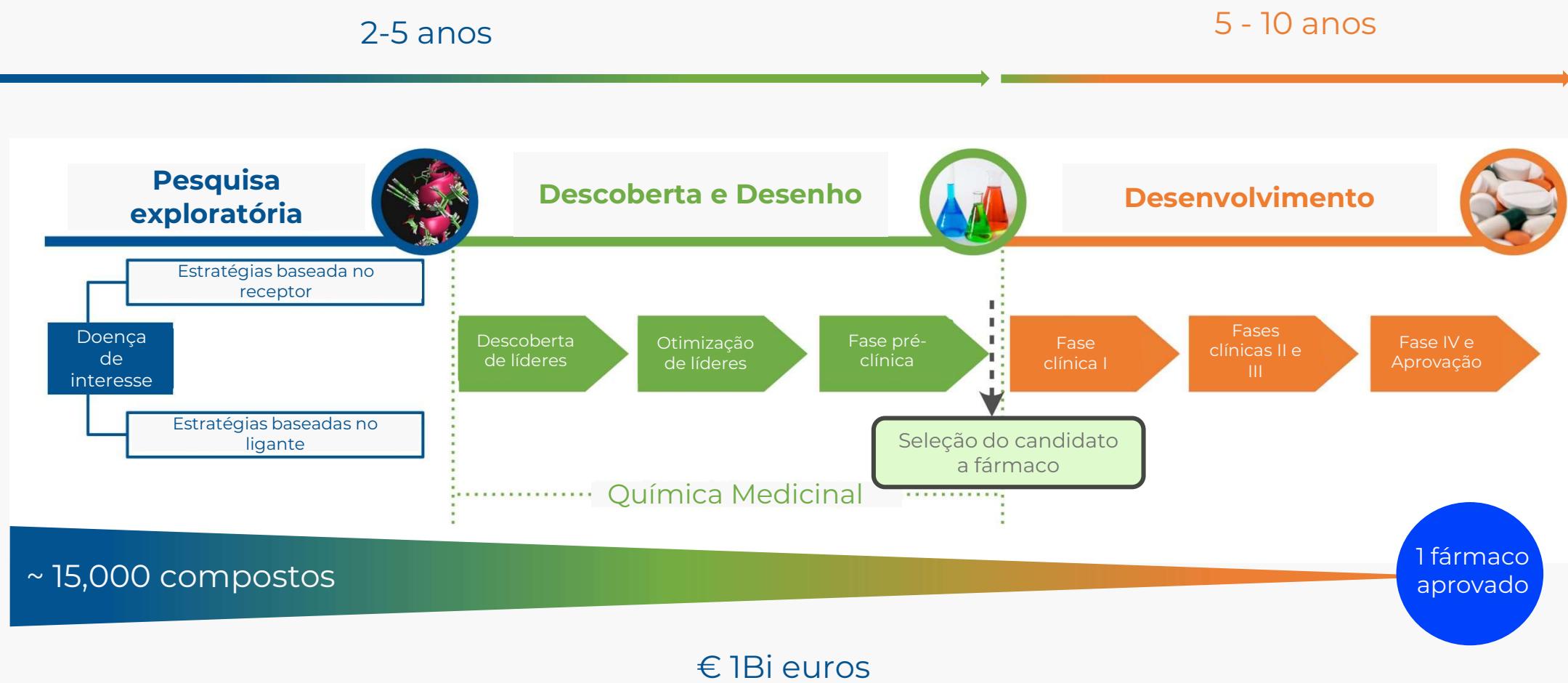
<https://www.ebi.ac.uk/uniprot/TrEMBLstats>

# O que mudou?

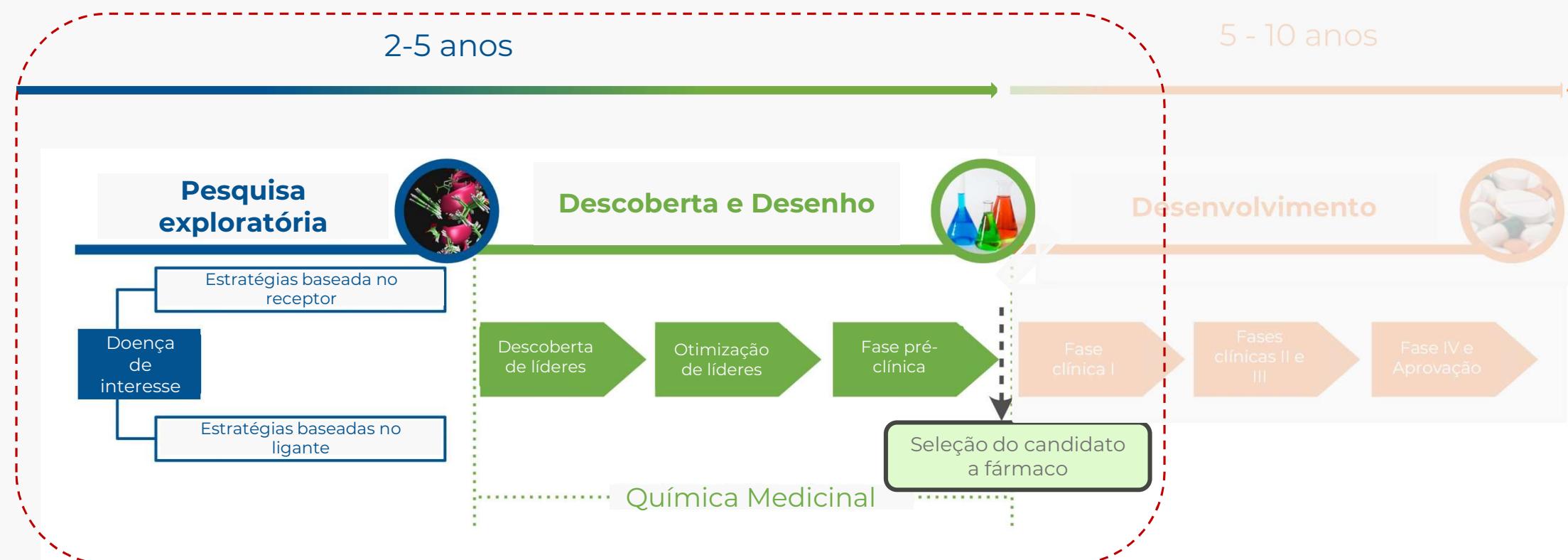


<https://www.rcsb.org/stats/growth/growth-released-structures>

# Desenvolvimento de Fármacos



# Desenvolvimento de Fármacos



## Doença de interesse

## Alvo molecular

## Modelagem Molecular

### Sintomas da covid-19\*

#### Sintomas mais comuns



Tosse



Febre



Fadiga



Congestão nasal



Coriza



Dor de garganta



Dor de cabeça



Diarreia



Cansaço



Dificuldade de respirar\*\*

\*Pessoas infectadas não necessariamente apresentam todos os sintomas. Em alguns casos, podem não ter nenhum deles.

\*\*Caso apresente este sintoma, procure um hospital ou serviço de saúde.

Fontes: Heloisa Ravagnani (SBI - DF), Paulo Sergio Ramos (Fiocruz Recife), OMS, NHS, CDC

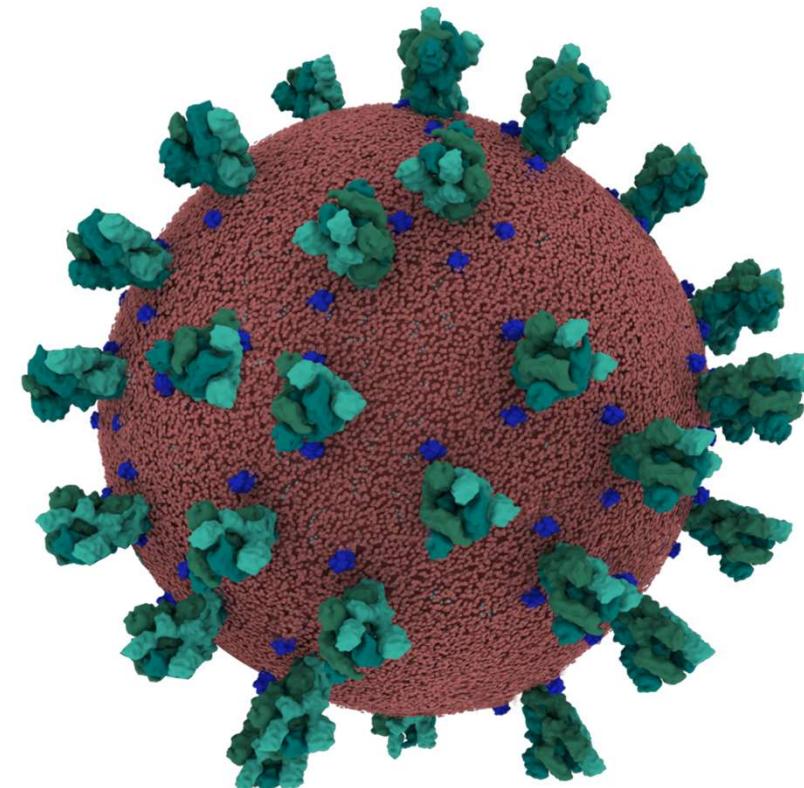
BBC



**Doença de  
interesse**

**Alvo  
molecular**

**Modelagem  
Molecular**



**SARS-CoV-2**

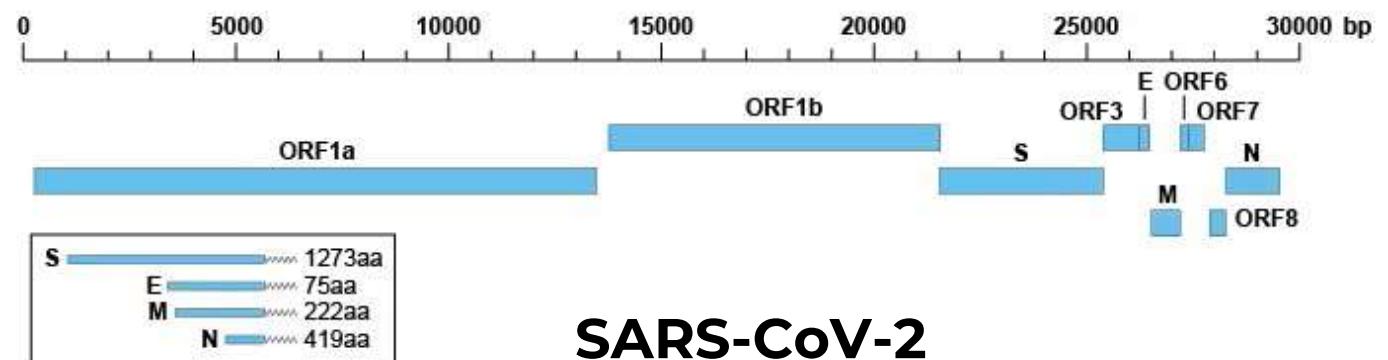
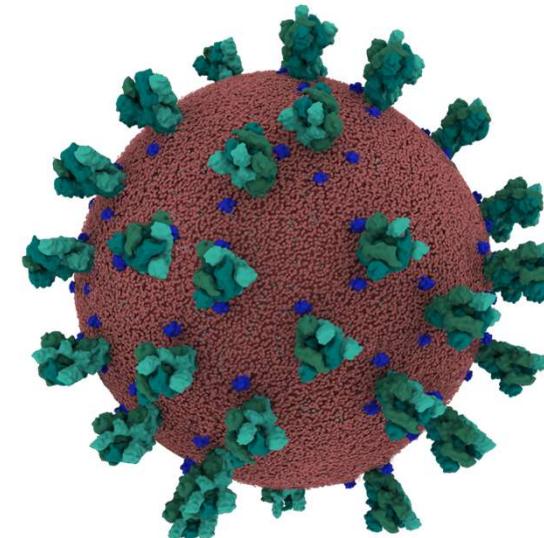




**Doença de  
interesse**

**Alvo  
molecular**

**Modelagem  
Molecular**



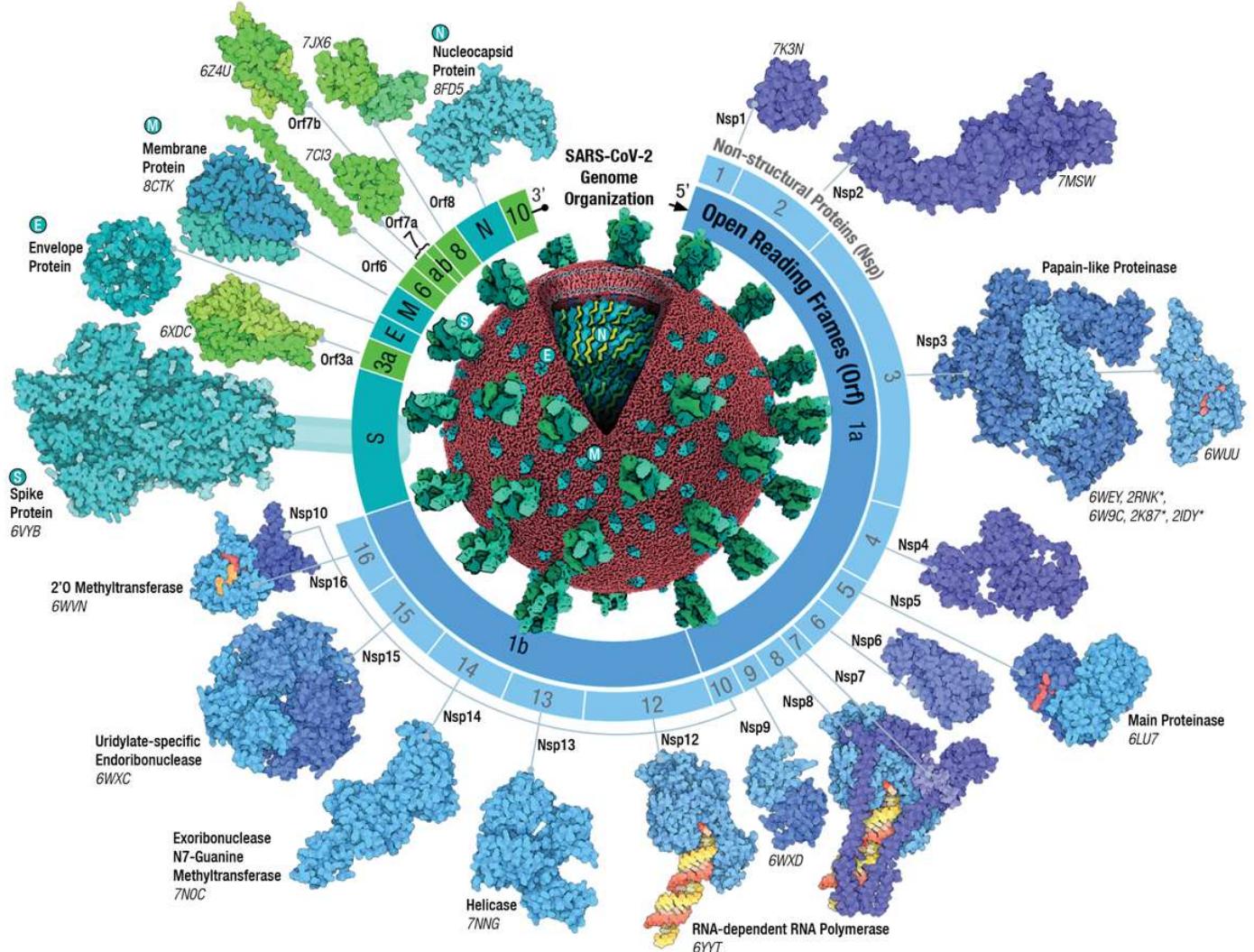
**SARS-CoV-2**



## Doença de interesse

## Alvo molecular

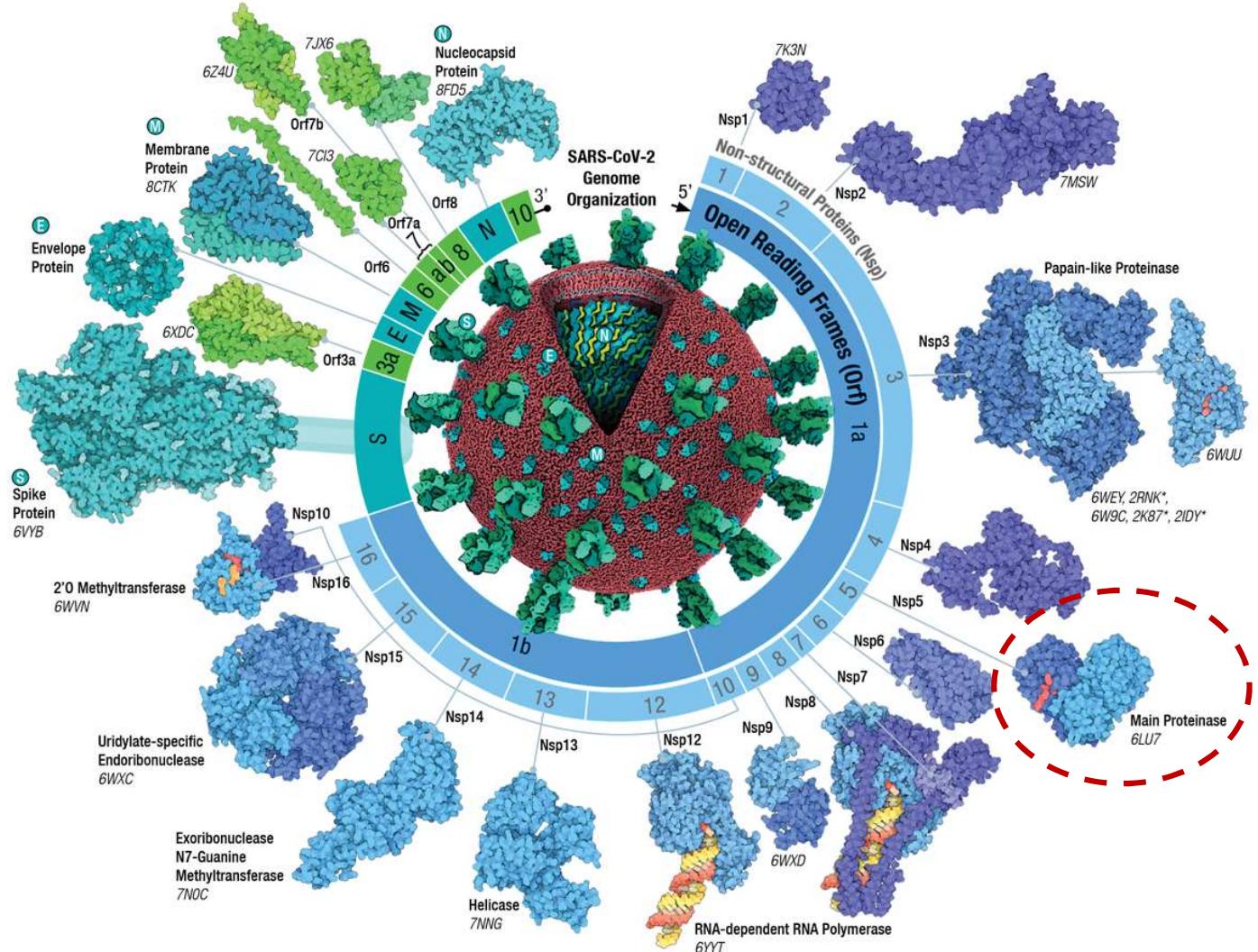
## Modelagem Molecular



## Doença de interesse

## Alvo molecular

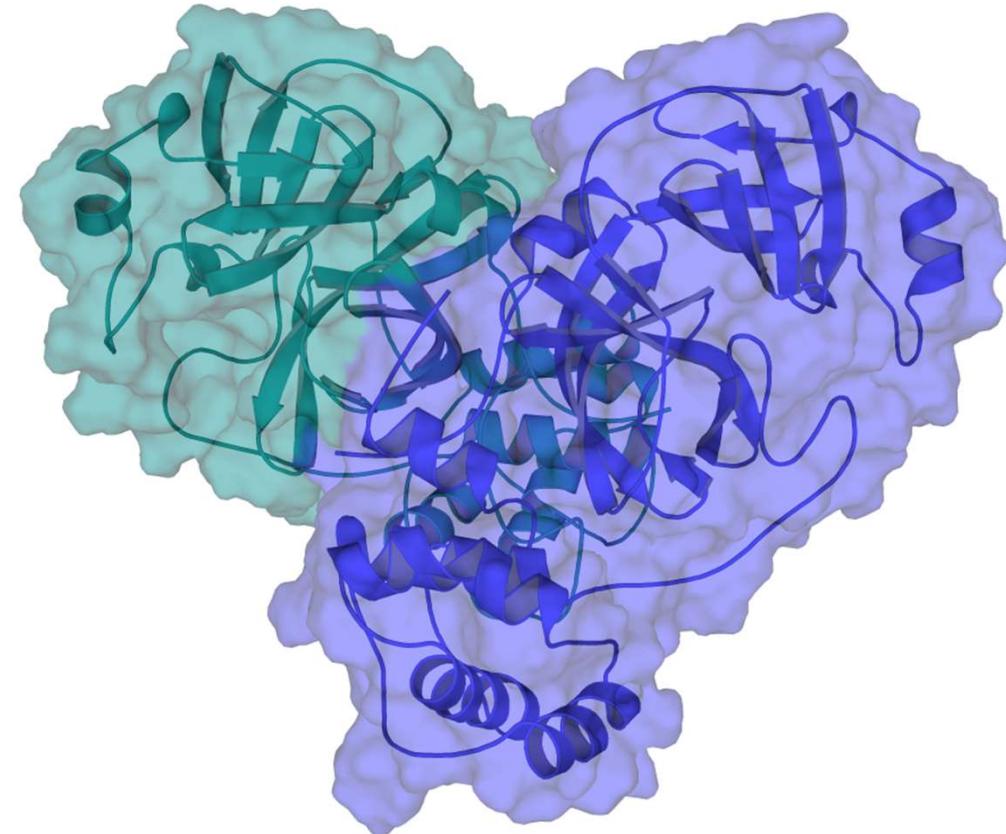
## Modelagem Molecular



**Doença de  
interesse**

**Alvo  
molecular**

**Modelagem  
Molecular**



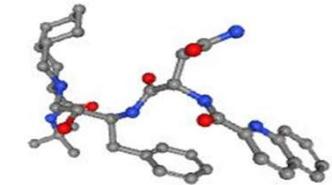
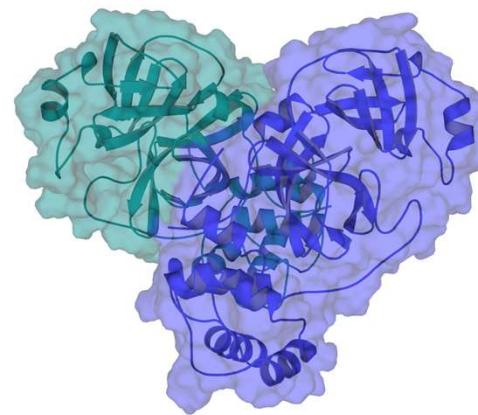
**PROTEASE PRINCIPAL**



**Doença de  
interesse**

**Alvo  
molecular**

**Modelagem  
Molecular**



**ALVO MOLECULAR  
(RECEPTOR)**

**PEQUENAS MOLÉCULAS  
QUÍMICAS (LIGANTES)**

ATOM	1	N	MET	A	1	12.850	-7.068	39.523	1.00	69.41	N
ATOM	2	CA	MET	A	1	13.375	-6.064	40.442	1.00	70.57	C
ATOM	3	C	MET	A	1	12.434	-5.800	41.618	1.00	68.11	C
ATOM	4	O	MET	A	1	11.263	-6.193	41.598	1.00	61.92	O
ATOM	5	CB	MET	A	1	13.690	-4.761	39.697	1.00	61.10	C
ATOM	6	CG	MET	A	1	12.758	-4.456	38.532	1.00	55.09	C



# Modelagem molecular

**Conjunto de técnicas computacionais** que utilizam **representações matemáticas** e **algoritmos** para simular/prever a estrutura, dinâmica e interações de moléculas, **auxiliando na compreensão de processos químicos e biológicos.**

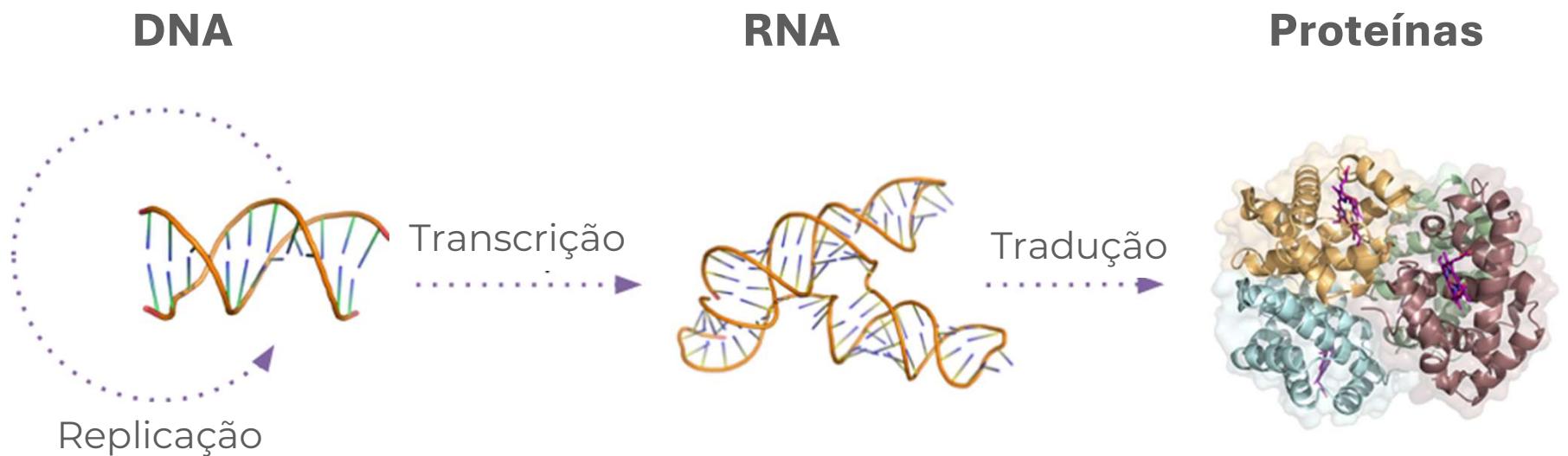


# 02

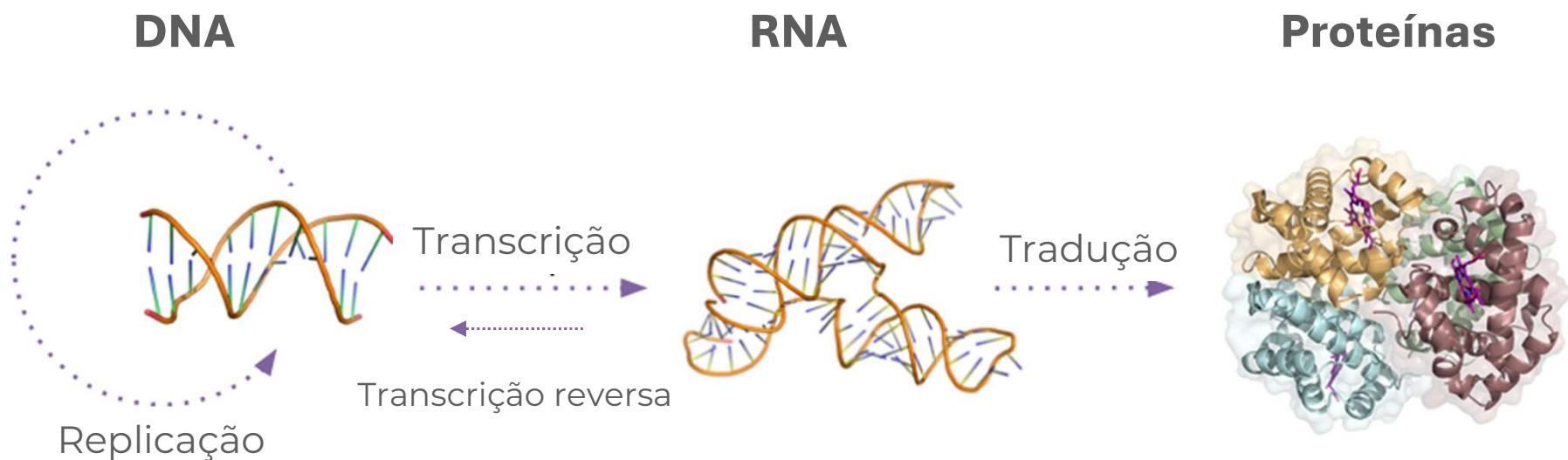
## Identificação de alvos

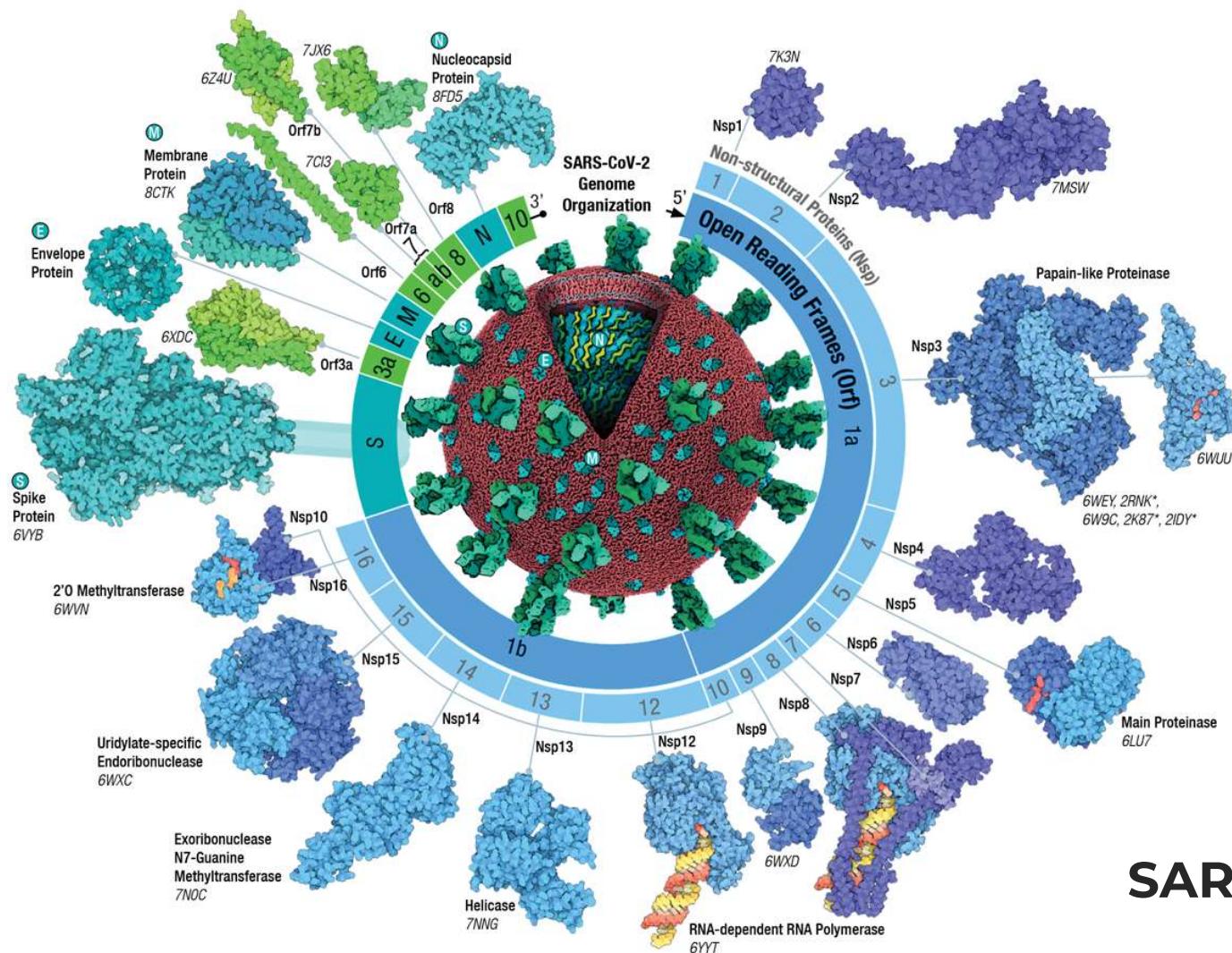
Como selecionar um alvo molecular?

**Relembrando...**  
**Dogma Central da Biologia Molecular**



## Relembrando... **Dogma Central da Biologia Molecular**

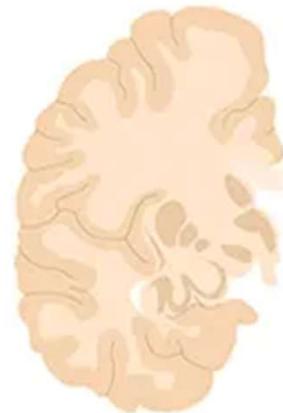




# SARS-CoV-2



# Doença de Alzheimer



Cérebro saudável



Cérebro doente



Confusão de tempo e espaço



Problemas para acompanhar conversas



Perda de memória



Dificuldade com tarefas familiares

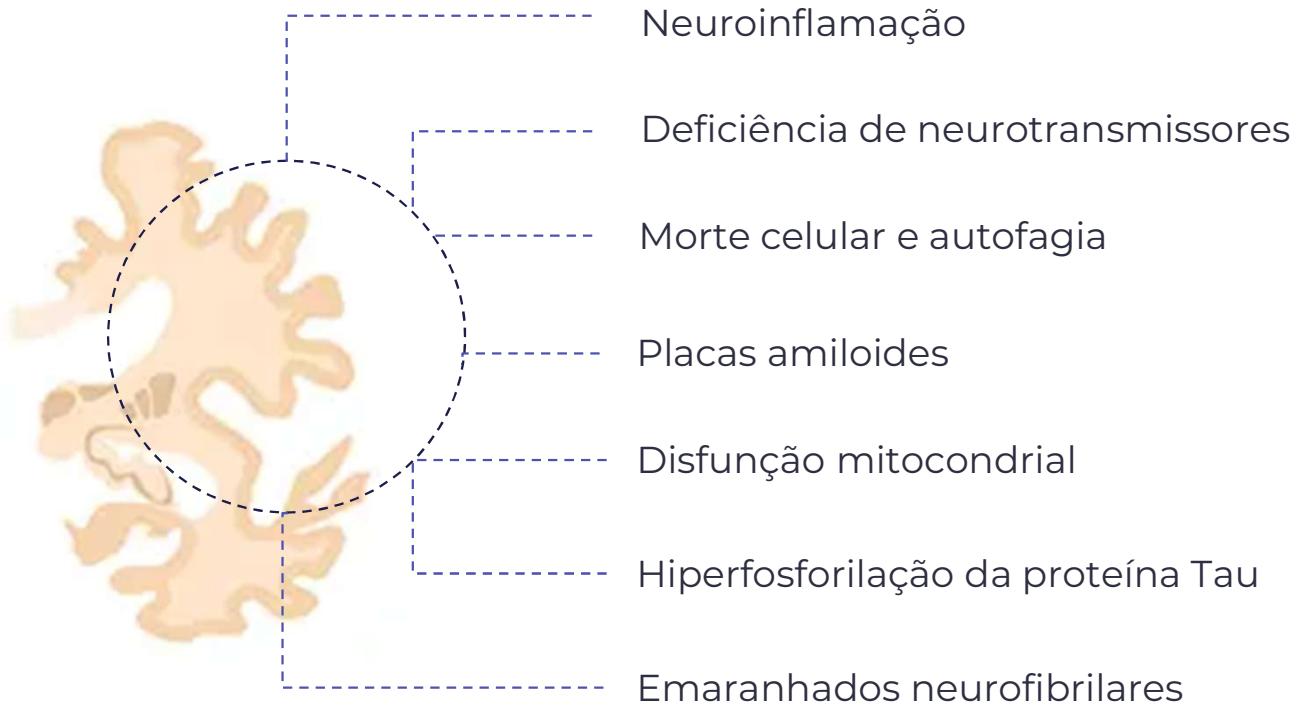


Perda de objetos



Mudanças de humor ou personalidade

# Doença de Alzheimer





# Identificação de alvos terapêuticos

- Identificação de genes associados a doenças
- Descoberta de biomarcadores
- Validação funcional de variantes genéticas
- Mapeamento de vias biológicas

**Integração das ciências ômicas:**  
genômica,  
transcriptômica,  
proteômica etc.





# Identificação de alvos terapêuticos



## Validação biológica

---

Estudos de perda ou ganho de função, Knockout ou knockdown do gene do alvo, uso de compostos químicos e peptídeos, cultura de células, etc.



## Validação funcional

---

Avaliação de mudanças em vias metabólicas, verificação de mudanças em células ou organismos, como proliferação celular, apoptose, inflamação, etc.



## Validação clínica

---

Identificação de biomarcadores associados ao alvo, ensaios clínicos em humanos





03

# Obtenção de modelos

Representando o sistema molecular

**As moléculas são descritas computacionalmente através de arquivos texto onde estão contidas as informações dos átomos que as compõem, assim como suas ligações.**

No caso dos sistemas biológicos, os formatos mais comuns dessa representação são:

- **PDB** (*Protein Data Bank file format*);
- MOL/MOL2;
- XYZ;
- Topology files (PSF, PRMTOP)



**As moléculas são descritas computacionalmente através de arquivos texto onde estão contidas as informações dos átomos que as compõem, assim como suas ligações.**

ATOM	1	N	MET	A	1	12.850	-7.068	39.523	1.00	69.41	N
ATOM	2	CA	MET	A	1	13.375	-6.064	40.442	1.00	70.57	C
ATOM	3	C	MET	A	1	12.434	-5.800	41.618	1.00	68.11	C
ATOM	4	O	MET	A	1	11.263	-6.193	41.598	1.00	61.92	O
ATOM	5	CB	MET	A	1	13.690	-4.761	39.697	1.00	61.10	C
ATOM	6	CG	MET	A	1	12.758	-4.456	38.532	1.00	55.09	C



**230.083**

Estruturas tridimensionais  
experimentalmente preditas no  
*Protein Data Bank\**

**191.011**

Difração de Raios-x em Cristais

**24.154**

Microscopia  
eletrônica

**14.338**

Ressonância magnética nuclear

\*Dados de 20 de janeiro de 2025



**230.083**

Estruturas tridimensionais  
experimentalmente preditas no  
*Protein Data Bank\**

**191.011**

Difração de Raios-x em Cristais

**24.154**

Microscopia  
eletrônica

**14.338**

Ressonância magnética nuclear



Alto custo



Condições experimentais  
difícies de serem alcançadas



# Métodos computacionais para a predição de modelos tridimensionais

**Postulado de Anfinsen (hipótese da termodinâmica):** toda a informação necessária para o enovelamento de uma proteína está contida em sua sequência de aminoácidos.



# Métodos computacionais para a predição de modelos tridimensionais

## Template-based

Modelagem comparativa

>40% identidade de sequência

*Threading*

<40% identidade de sequência

## Template-free

*Ab-initio*

Baseados em forças físicas

*De novo*

Baseados em dados empíricos



# CASP

***Critical Assessment of Protein Structure Prediction (CASP)*** é uma competição de métodos para a predição de estruturas de proteínas

● Desde 1994 - 16 edições ●

Modeller - método template-based

Robetta - método ab initio

**AlphaFold (2022) - 92,4% sucesso na predição**



# AlphaFold

\*Google DeepMind

## Article

# Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold

---

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>

---

Received: 11 May 2021

---

Accepted: 12 July 2021

---

Published online: 15 July 2021

---

Open access

---

 Check for updates

---

John Jumper<sup>1,4</sup>✉, Richard Evans<sup>1,4</sup>, Alexander Pritzel<sup>1,4</sup>, Tim Green<sup>1,4</sup>, Michael Figurnov<sup>1,4</sup>, Olaf Ronneberger<sup>1,4</sup>, Kathryn Tunyasuvunakool<sup>1,4</sup>, Russ Bates<sup>1,4</sup>, Augustin Žídek<sup>1,4</sup>, Anna Potapenko<sup>1,4</sup>, Alex Bridgland<sup>1,4</sup>, Clemens Meyer<sup>1,4</sup>, Simon A. A. Kohl<sup>1,4</sup>, Andrew J. Ballard<sup>1,4</sup>, Andrew Cowie<sup>1,4</sup>, Bernardino Romera-Paredes<sup>1,4</sup>, Stanislav Nikolov<sup>1,4</sup>, Rishabh Jain<sup>1,4</sup>, Jonas Adler<sup>1</sup>, Trevor Back<sup>1</sup>, Stig Petersen<sup>1</sup>, David Reiman<sup>1</sup>, Ellen Clancy<sup>1</sup>, Michał Zielinski<sup>1</sup>, Martin Steinegger<sup>2,3</sup>, Michałina Pacholska<sup>1</sup>, Tamas Berghammer<sup>1</sup>, Sebastian Bodenstein<sup>1</sup>, David Silver<sup>1</sup>, Oriol Vinyals<sup>1</sup>, Andrew W. Senior<sup>1</sup>, Koray Kavukcuoglu<sup>1</sup>, Pushmeet Kohli<sup>1</sup> & Demis Hassabis<sup>1,4</sup>✉



# AlphaFold

Article

## Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3

---

<https://doi.org/10.1038/s41586-024-07487-w>

---

Received: 19 December 2023

---

Accepted: 29 April 2024

---

Published online: 8 May 2024

---

Open access

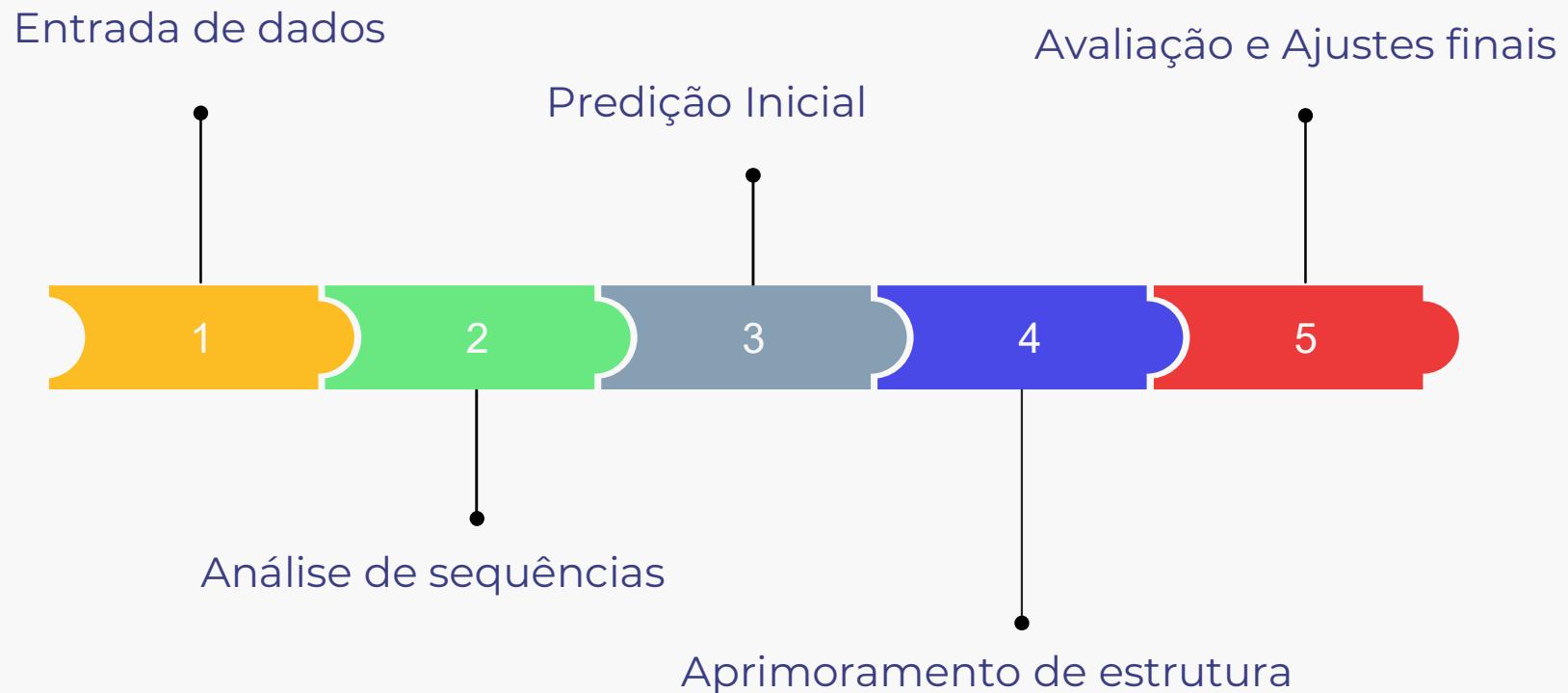
---

 Check for updates

Josh Abramson<sup>1,7</sup>, Jonas Adler<sup>1,7</sup>, Jack Dunger<sup>1,7</sup>, Richard Evans<sup>1,7</sup>, Tim Green<sup>1,7</sup>, Alexander Pritzel<sup>1,7</sup>, Olaf Ronneberger<sup>1,7</sup>, Lindsay Willmore<sup>1,7</sup>, Andrew J. Ballard<sup>1</sup>, Joshua Bambrick<sup>2</sup>, Sebastian W. Bodenstein<sup>1</sup>, David A. Evans<sup>1</sup>, Chia-Chun Hung<sup>2</sup>, Michael O'Neill<sup>1</sup>, David Reiman<sup>1</sup>, Kathryn Tunyasuvunakool<sup>1</sup>, Zachary Wu<sup>1</sup>, Akvilė Žemgulytė<sup>1</sup>, Eirini Arvaniti<sup>3</sup>, Charles Beattie<sup>3</sup>, Ottavia Bertolli<sup>3</sup>, Alex Bridgland<sup>3</sup>, Alexey Cherepanov<sup>4</sup>, Miles Congreve<sup>4</sup>, Alexander I. Cowen-Rivers<sup>3</sup>, Andrew Cowie<sup>3</sup>, Michael Figurnov<sup>3</sup>, Fabian B. Fuchs<sup>3</sup>, Hannah Gladman<sup>3</sup>, Rishub Jain<sup>3</sup>, Yousuf A. Khan<sup>3,5</sup>, Caroline M. R. Low<sup>4</sup>, Kuba Perlin<sup>3</sup>, Anna Potapenko<sup>3</sup>, Pascal Savy<sup>4</sup>, Sukhdeep Singh<sup>3</sup>, Adrian Stecula<sup>4</sup>, Ashok Thillaisundaram<sup>3</sup>, Catherine Tong<sup>4</sup>, Sergei Yakneen<sup>4</sup>, Ellen D. Zhong<sup>3,6</sup>, Michal Zielinski<sup>3</sup>, Augustin Žídek<sup>3</sup>, Victor Bapst<sup>1,8</sup>, Pushmeet Kohli<sup>1,8</sup>, Max Jaderberg<sup>2,8</sup>, Demis Hassabis<sup>1,2,8</sup> & John M. Jumper<sup>1,8</sup>

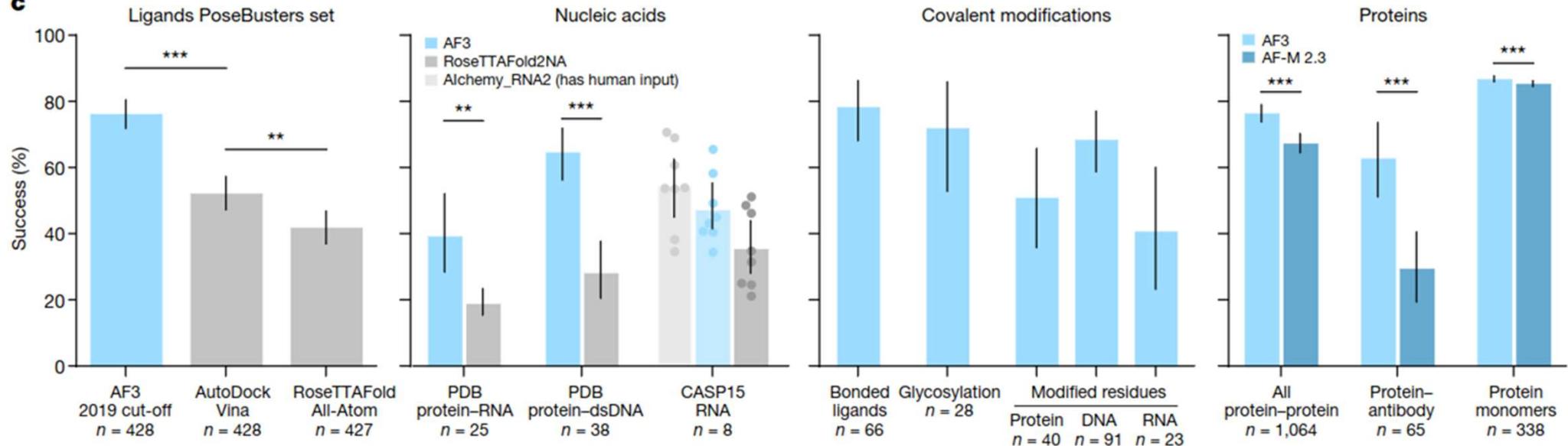


# Alpha Fold: metodologia



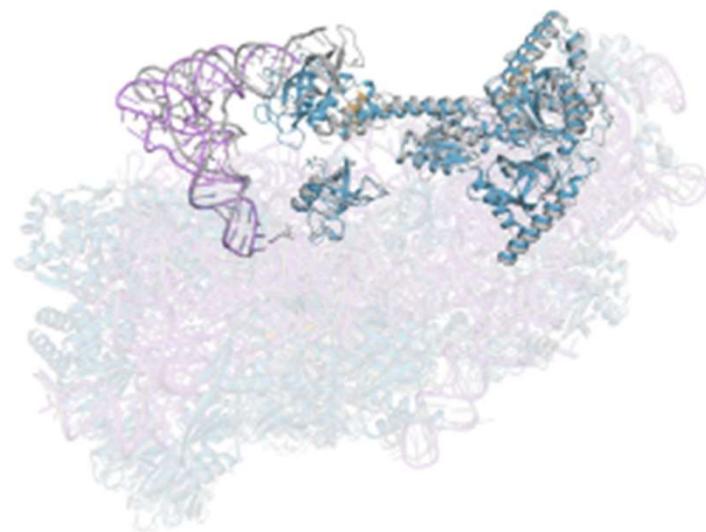
# Alpha Fold 3

c

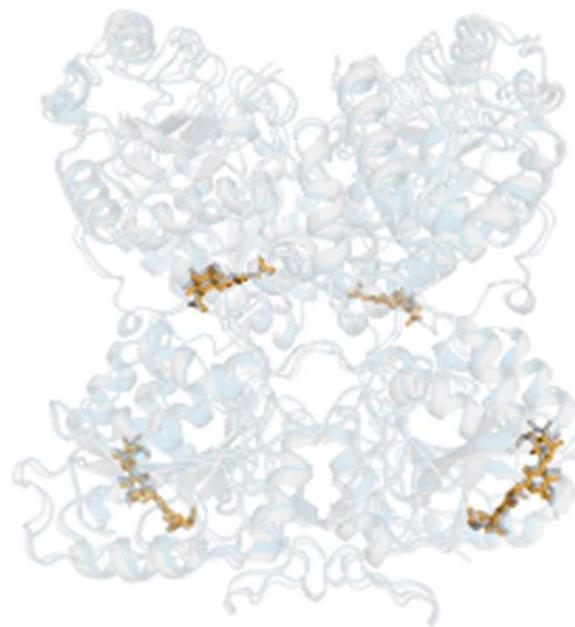


# Alpha Fold 3

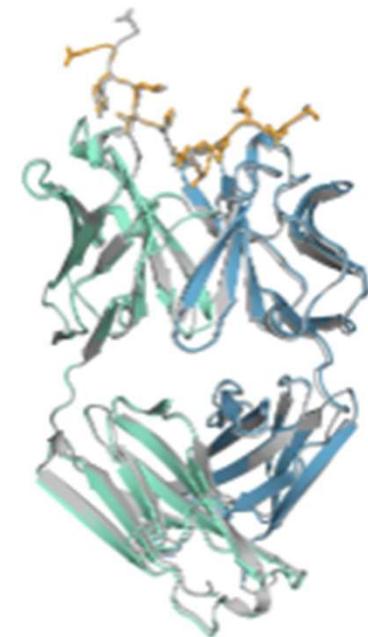
a



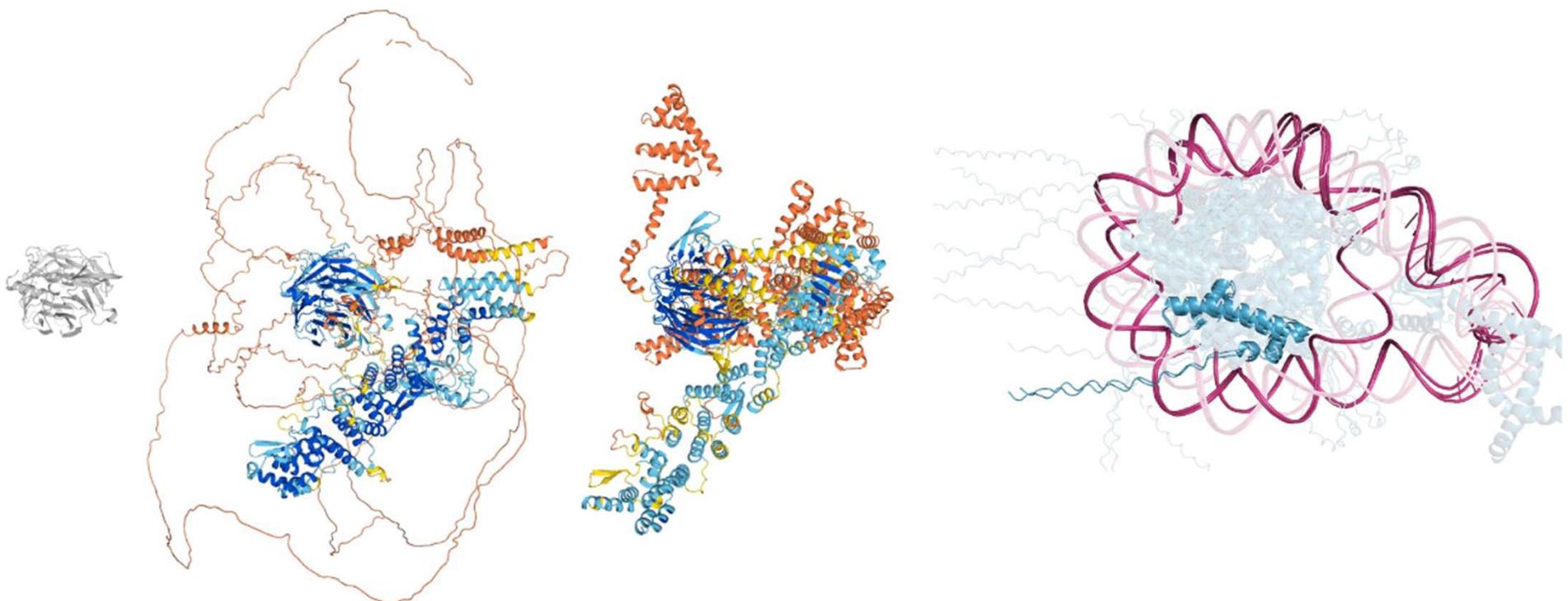
b



c



# Alpha Fold 3



# Alpha Fold Server

AlphaFold Server BETA Server About FAQs

AlphaFold Server allows you to model a structure consisting of many biological molecules Learn more ▾

Upload JSON Clear

Molecule type: Protein Copies: 1 Input ⋮ ⌂

+ Add entity Save job

Continue and preview job

History ✓ Completed ✓ Saved draft ✓ In progress ✓ Examples ✓ Failed

Name	Modified	⋮
ptp_lar	2024-05-20 19:38	⋮
insulin_receptor	2024-05-20 18:52	⋮

# Obtenção de modelos tridimensionais

**230.083**

Estruturas experimentalmente  
preditas no *PDB*\*

**1.068.577**

Estruturas preditas  
computacionalmente no *PDB*\*

\*Dados de 20 de janeiro de 2025





# mãos na massa



Acesse: <https://www.rcsb.org/>



# 04

## Preparação das estruturas

Modelando as condições experimentais

# Preparação das estruturas

Ao simular computacionalmente a interação entre átomos, é fundamental definir as condições experimentais que reproduzam o ambiente onde essa interação naturalmente ocorreria.



# Preparação das estruturas

As estruturas obtidas experimental ou computacionalmente podem conter erros como:

- Átomos ausentes
- Resíduos de aminoácidos incompletos ou faltantes
- Erros na coordenação de cofatores e íons
- Erros de coordenadas ou com ligações incorretas



# Preparação das estruturas

Além disso, é preciso considerar:

- Adição de hidrogênios
- Protonação e carga dos resíduos
- Remoção de águas não estruturais e outros solventes
- Verificar posição e carga de cofatores
- Correção de tautômeros e estados de ionização de ligantes



# Preparação das estruturas

A correta parametrização do sistema é essencial para garantir bons resultados

“Todos os modelos estão errados, alguns são úteis”  
George Box

**Lembre-se:** os experimentos de modelagem molecular são baseados nas leis da física, especialmente nas da mecânica clássica. Por isso, é fundamental que os **tipos de átomos e suas cargas estejam devidamente definidos.**





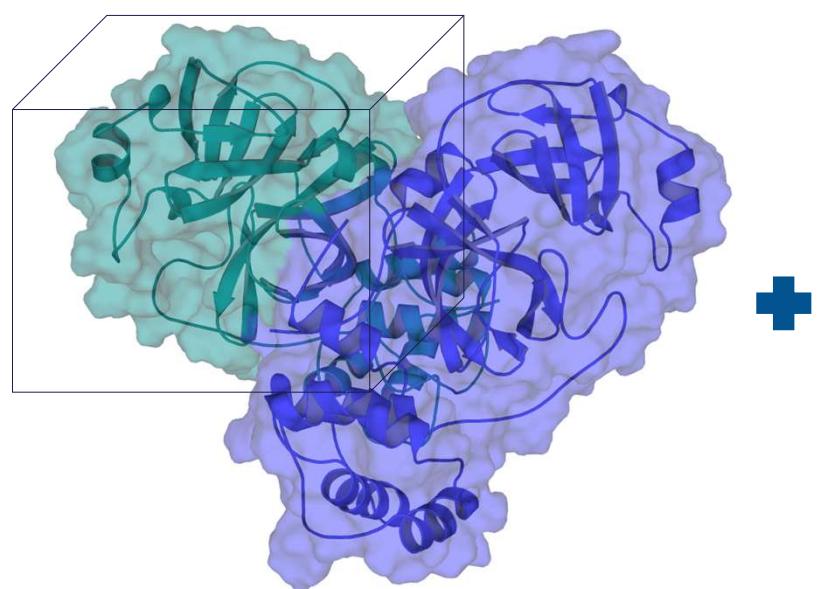
05

# Docking molecular e Triagem Virtual

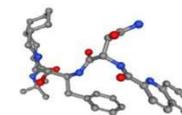
Realizando experimentos de docking

# Docking molecular

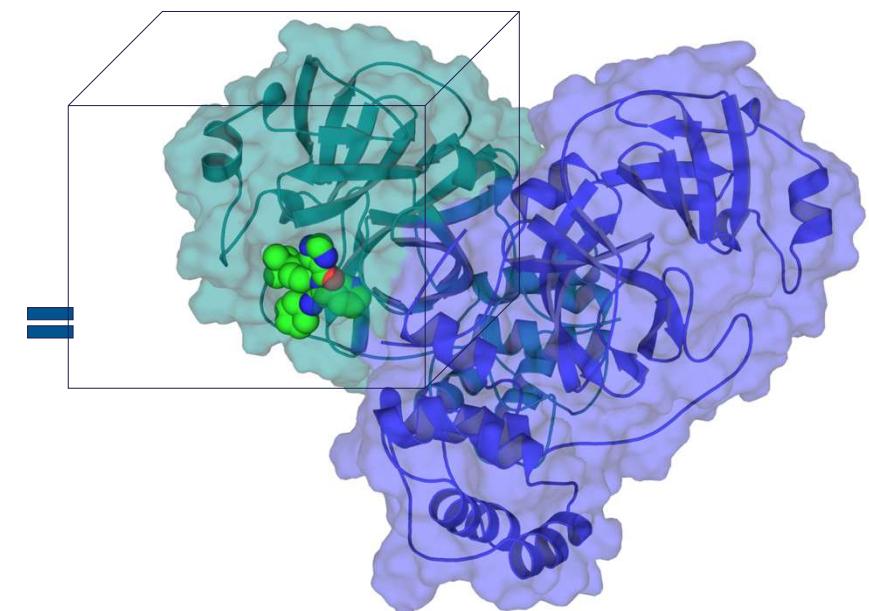
**Previsão dos detalhes do reconhecimento molecular receptor-ligante**



Receptor



Ligante

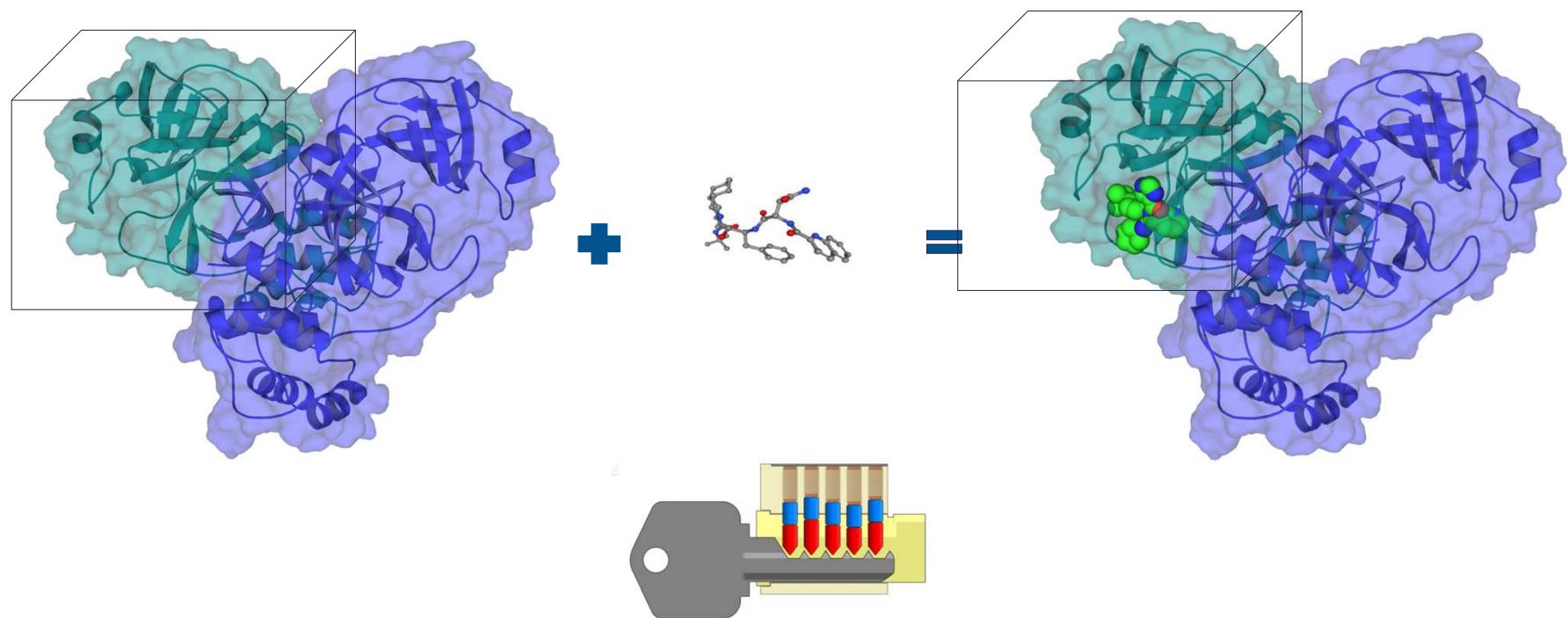


Complexo proteína-  
ligante



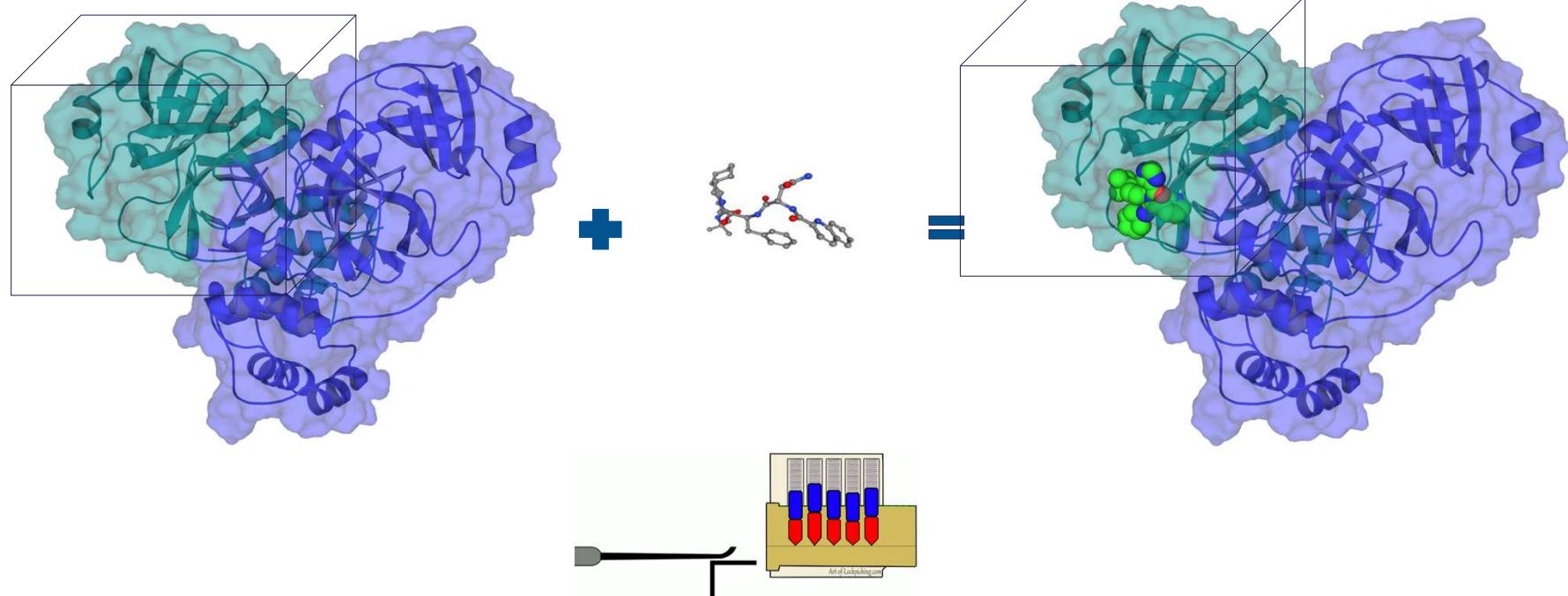
# Docking molecular

Baseado no modelo chave-fechadura, proposto por Emil Fischer (1894)



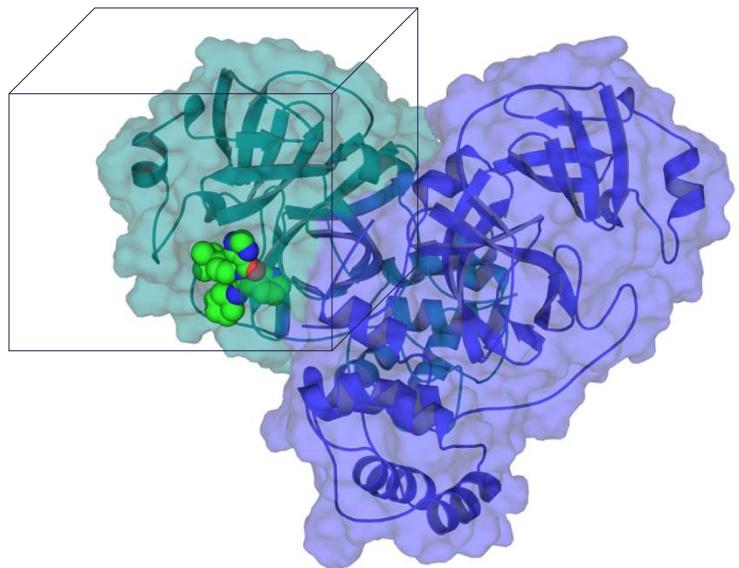
# Docking molecular

Baseado no modelo chave-fechadura, proposto por Emil Fischer (1894)



# Docking molecular

**Previsão dos detalhes do reconhecimento molecular receptor-ligante**



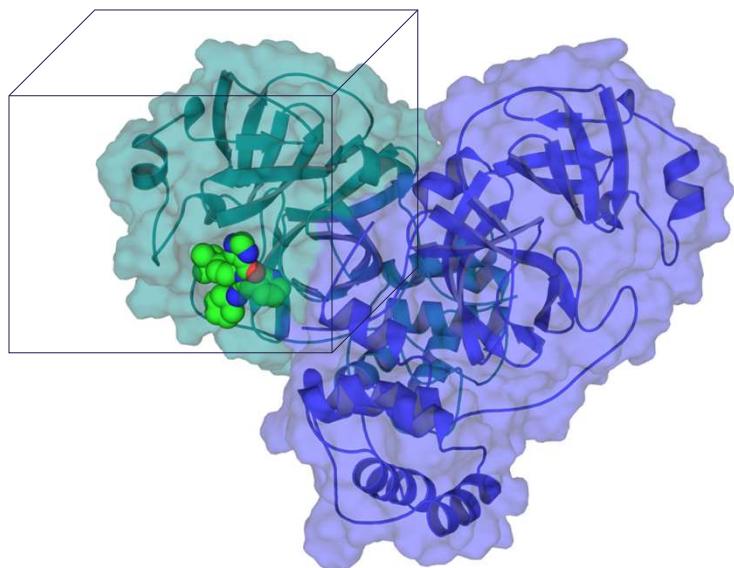
**Dois principais componentes:**

- Método de busca;
- Função de Avaliação;



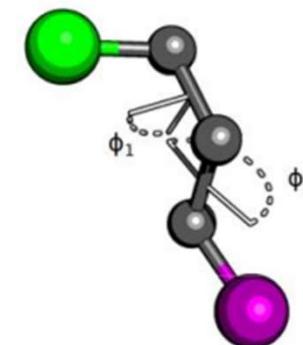
# Docking molecular

**Previsão dos detalhes do reconhecimento molecular receptor-ligante**



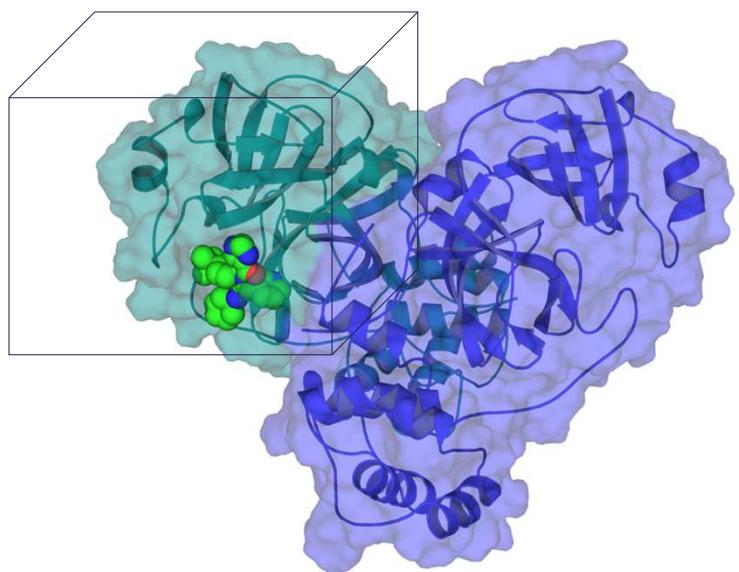
**Dois principais componentes:**

- Método de busca;



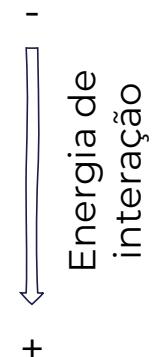
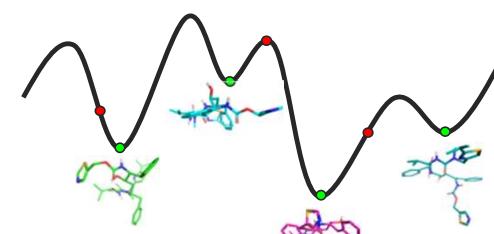
# Docking molecular

**Previsão dos detalhes do reconhecimento molecular receptor-ligante**



**Dois principais componentes:**

- Função de Avaliação;



# Triagem Virtual: docking em larga escala

**Identifica compostos promissores para interagir  
com um alvo biológico**

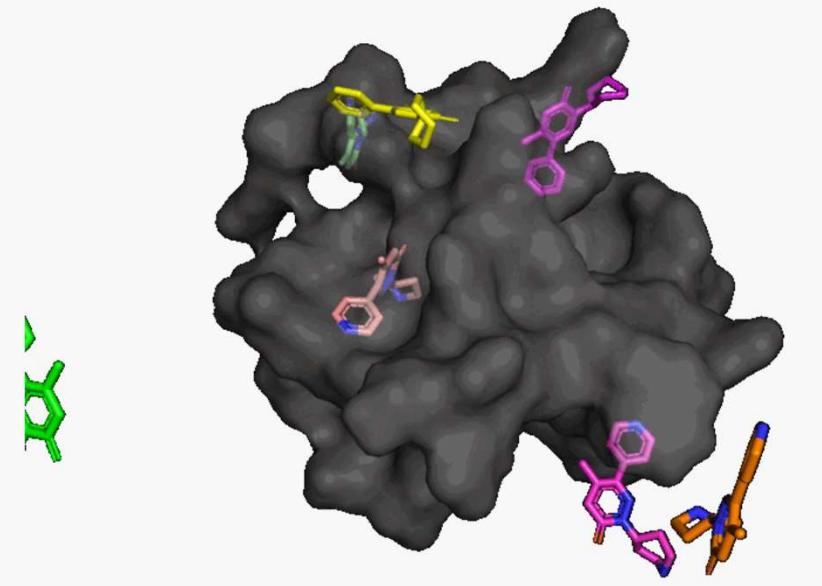
- Docking de milhares de moléculas químicas;
- Alto custo computacional – milhares de simulações;
- Filtragem e seleção de compostos químicos para as etapas posteriores;



# Triagem Virtual: docking em larga escala

**Identifica compostos promissores para interagir  
com um alvo biológico**

- Docking de milhares de moléculas químicas;
- Alto custo computacional – milhares de simulações;
- Filtragem e seleção de compostos químicos para as etapas posteriores;



# Reposicionamento de fármacos



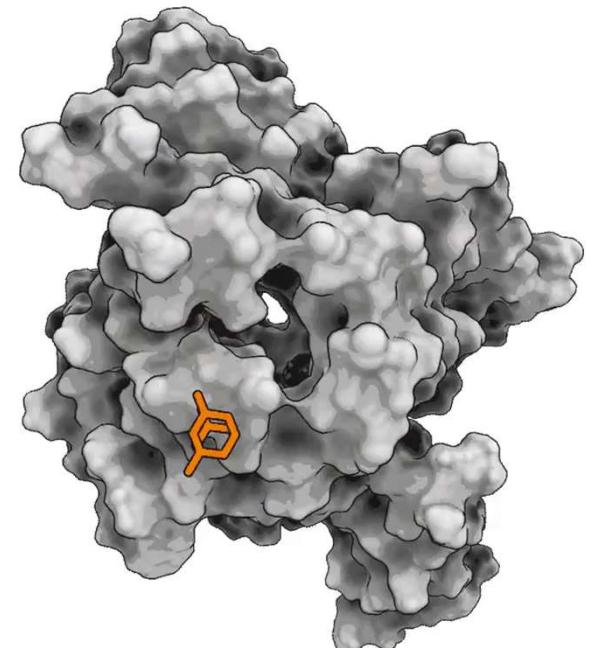
Identificação de novos alvos para medicamentos conhecidos



# Dinâmica molecular

**Simula o comportamento de átomos e moléculas ao longo do tempo com base em leis da física clássica**

- Alto custo computacional;
- Grande capacidade de previsão da dinâmica do sistema ao longo do tempo;
- Estimação da estabilidade e energia de ligação do complexo;
- Grande quantidade de dados;



# IA na descoberta de fármacos

**New machine learning and physics-based scoring functions for drug discovery**

[Isabella A. Guedes](#), [André M. S. Barreto](#), [Diogo Marinho](#), [Eduardo Krempser](#), [Mélaine A. Kuenemann](#), [Olivier Sperandio](#), [Laurent E. Dardenne](#)✉ & [Maria A. Miteva](#)✉

[Scientific Reports](#) **11**, Article number: 3198 (2021) | [Cite this article](#)

# IA na descoberta de fármacos

New machine learning and physics-based scoring functions for drug discovery

[Isabella A. Guedes](#), [André M. S. Barreto](#), [Diogo Marinho](#), [Eduardo Krempser](#), [Mélaine A. Kuenemann](#), [Olivier](#)

[Sperandio](#), [Laurent E. Dardenne](#)  & [Maria A. N.](#)

[Scientific Reports](#) **11**, Article number: 3198 (202

**SOFTWARE**

**Open Access**



## GNINA 1.0: molecular docking with deep learning

Andrew T. McNutt<sup>1</sup>, Paul Francoeur<sup>1</sup>, Rishal Aggarwal<sup>2</sup>, Tomohide Masuda<sup>1</sup>, Rocco Meli<sup>3</sup>, Matthew Ragoza<sup>1</sup>, Jocelyn Sunseri<sup>1</sup> and David Ryan Koes<sup>1\*</sup> 

# IA na descoberta de fármacos

New machine learning and physics-based scoring functions for drug discovery

[Isabella A. Guedes](#), [André M. S. Barreto](#), [Diogo Marinho](#), [Eduardo Krempser](#), [Mélaine A. Kuenemann](#), [Olivier Sperandio](#), [Laurent E. Dardenne](#)  & [Maria A. Miteva](#) 

[Scientific Reports](#) 11, Article number: 3198 (2021)

 SOFTWARE

Open Access



GNINA 1.0: molecular docking with deep learning

MACHINE LEARNING AND DEEP LEARNING | January 25, 2021

ew Ragoza<sup>1</sup>,

**Accelerating *De Novo* Drug Design against Novel Proteins Using Deep Learning**

Sowmya Ramaswamy Krishnan, Navneet Bung, Gopalakrishnan Bulusu\*, and Arijit Roy\*

# IA na descoberta de fármacos

New machine learning and physics-based scoring functions for drug discovery

Isabella A. Guedes, André M. S. Barreto, Diogo Marinho, Eduardo Krempser, Mélaine A. Kuenemann, Olivier Sperandio, Laurent E. Dardenne & Maria A. Miteva

Scientific Reports 11, Article number: 3198 (2021)

SOFTWARE  
[See this article](#)

Open Access

MACHINE LEARNING AND DEEP LEARNING | January 25, 2021  
Accelerating *De Novo* Drug Design aga

Sowmya Ramaswamy Krishnan, Navneet Bung, Gopalakrishnan Bulusu\*, ar

nature  
protocols

PROTOCOL

<https://doi.org/10.1038/s41596-021-00659-2>

 Check for updates

Artificial intelligence-enabled virtual screening of ultra-large chemical libraries with deep docking

Francesco Gentile<sup>1</sup>, Jean Charle Yaacoub<sup>1,3</sup>, James Gleave<sup>1,3</sup>, Michael Fernandez<sup>1</sup>, Anh-Tien Ton<sup>1</sup>, Fuqiang Ban<sup>1</sup>, Abraham Stern<sup>2</sup> and Artem Cherkasov<sup>1</sup>

# IA na descoberta de fármacos

New machine learning and physics-based scoring

nature biotechnology

Review article

<https://doi.org/10.1038/s41587-024-02127-0>

## Machine learning for functional protein design

Received: 1 July 2023

Accepted: 5 January 2024

Published online: 15 February 2024

Pascal Notin<sup>1,2,5</sup>✉, Nathan Rollins<sup>3,5</sup>✉, Yarin Gal<sup>2</sup>, Chris Sander<sup>1,4</sup> &

Debora Marks<sup>1,4</sup>✉

Sowmya Ramaswamy Krishnan, Navneet Bung, Gopalakrishnan Bulusu\*, and Arijit Roy\*

Open Access



PROTOCOL

<https://doi.org/10.1038/s41596-021-00659-2>

de Masuda<sup>1</sup>, Rocco Meli<sup>3</sup>, Matthew Ragoza<sup>1</sup>,



## Deep Learning of ultra-large chemical libraries with deep docking

Francesco Gentile<sup>1</sup>✉, Jean Charle Yaacoub<sup>1,3</sup>, James Gleave<sup>1,3</sup>, Michael Fernandez<sup>1</sup>,  
Anh-Tien Ton<sup>1</sup>✉, Fuqiang Ban<sup>1</sup>, Abraham Stern<sup>2</sup> and Artem Cherkasov<sup>1</sup>✉

# IA na descoberta de fármacos

## New machine learning and physics-based functions for drug discovery

Isabella A. Guedes, André M. S. Barreto, Diogo Marinho, Eduardo Krempser, Mé

Review article Laurent E. Dardenne & Maria A. Miteva

<https://doi.org/10.1038/s41551-021-01352-w>

## Machine learning for functional protein design

Scientific Reports | (11), Article number: 3146 (2021) | [Get this article](#)

Received: 1 July 2023

Pascal Notin<sup>1,2,5</sup>, Nathan Rollins<sup>3,5</sup>, Yarin Gal<sup>2</sup>, Chris Sander<sup>1,4</sup> &

Debora Marks<sup>6</sup>, Andrew J. McNutt<sup>1</sup>, Paul Francoeur<sup>1</sup>, Rishal Aggarwal<sup>2</sup>, Tomohide Masuda<sup>1</sup>, Rocco Meli<sup>3</sup>, Matthew Ragoza<sup>1</sup>,

Accepted: 5 January 2024

Published online: 5 February 2024

Sowmya Ramaswamy Krishnan, Navneet Bung, Gopalakrishnan Bulusu\*, and Arijit Roy\*

Structural bioinformatics

## ADMET-AI: a machine learning ADMET platform for evaluation of large-scale chemical libraries

Kyle Swanson  <sup>1,2,\*</sup>, Parker Walther<sup>3</sup>, Jeremy Leitz<sup>2</sup>, Souhrud Mukherjee<sup>2</sup>, Joseph C. Wu<sup>4</sup>, Rabindra V. Shivnaraive  <sup>2,\*</sup>, James Zou  <sup>1,5,\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Computer Science, Stanford University, 353 Jane Stanford Way, Stanford, CA 94305, USA

<sup>2</sup>Greenstone Biosciences, 3160 Porter Drive, Suite 140, Palo Alto, CA 94304, USA

<sup>3</sup>Carleton College, One North College Street, Northfield, MN 55057, USA

<sup>4</sup>Stanford Cardiovascular Institute, Stanford University, 265 Campus Drive, Stanford, CA 94305, USA

<sup>5</sup>Department of Biomedical Data Science, Stanford University, 1265 Welch Road, Stanford, CA 94305, USA

\*Corresponding author. Department of Computer Science, Stanford University, 353 Jane Stanford Way, Stanford, CA 94305, USA.

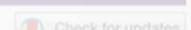
E-mail: swanson@stanford.edu (K.S.); Greenstone Biosciences, 3160 Porter Drive, Suite 140, Palo Alto, CA 94304, USA. E-mail: robinshiv@greenstonebio.com

(R.V.S.); Department of Computer Science, Stanford University, 353 Jane Stanford Way, Stanford, CA 94305, USA. E-mail: jamesz@stanford.edu (J.Z.)

Associate Editor: Alfonso Valencia

PROTOCOL

<https://doi.org/10.1038/s41596-021-00659-2>



## Artificial intelligence-enabled virtual screening of ultra-large chemical libraries with deep docking

Francesco Gentile  <sup>1</sup>, Jean Charle Yaacoub <sup>1,3</sup>, James Gleave <sup>1,3</sup>, Michael Fernandez <sup>1</sup>,

Anh-Tien Ton  <sup>1</sup>, Fuqiang Ban <sup>1</sup>, Abraham Stern <sup>2</sup> and Artem Cherkasov  <sup>1</sup>

# IA na descoberta de fármacos

Structural bioinformatics

New machine learning and physics-based **scADMET**-AI: a machine learning ADMET platform for evaluation of large-scale chemical libraries  
functions for drug discovery

nature biotechnology

Isabella A. Guedes, André M. S. Barreto, Diogo Marinho, Eduardo Krempser, Mélaine A. Kuenemann, Olivier

Review article Laurent E. Dardenne & Maria A. Miteva

<https://doi.org/10.1038/s41551-021-0121-1>

Machine learning for functional

Scientific Reports | (2021) 11:3168 | Article number: 3168 (2021) | [Cite this article](#)

JCTC  
Journal of Chemical Theory and Computation

[pubs.acs.org/JCTC](https://pubs.acs.org/JCTC)



Article

## TorchMD: A Deep Learning Framework for Molecular Simulations

Stefan Doerr, Maciej Majewski, Adrià Pérez, Andreas Krämer, Cecilia Clementi, Frank Noe, Toni Giorgino, and Gianni De Fabritiis\*



Cite This: *J. Chem. Theory Comput.* 2021, 17, 2355–2363



Read Online

deep  
PROTOCOL  
<https://doi.org/10.1038/s41596-021-00659-2>  
o Meli<sup>3</sup>, Matthew Ragoza<sup>1</sup>,  
Check for updates  
d virtual screening  
ries with

ave<sup>1,3</sup>, Michael Fernandez<sup>1</sup>,  
tem Cherkasov<sup>1</sup>  
Check for updates



# mãos na massa



Acesse: [github.com/aluizakarl/mcEA02\\_eamc2025](https://github.com/aluizakarl/mcEA02_eamc2025)



# Obrigada!

@: almkarl@lncc.br; almk.karl@gmail.com

 <https://www.linkedin.com/in/aluizakarl/>

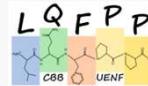
 <https://github.com/aluizakarl>



**GMMsB**  
GRUPO DE MODELAGEM MOLECULAR DE SISTEMAS BIOLÓGICOS

 **LNCC**  
Laboratório Nacional de  
Computação Científica

 **Venancio**  
Research group



 **UENF**

 **CNPq**  
Conselho Nacional de Desenvolvimento  
Científico e Tecnológico

 **FAPERJ**  
Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo  
à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro

MINISTÉRIO DA  
CIÊNCIA, TECNOLOGIA  
E INOVAÇÃO

GOVERNO FEDERAL  
**BRAZIL**  
UNIÃO E RECONSTRUÇÃO