

Palestras

Horário	Segunda 19/08	Terça 20/08	Quarta 21/08	Quinta 22/08	Sexta 23/08
08:45 - 09:00	Abertura do evento				
09:00 - 09:50	Palestra Abertura	Palestra 4	Palestra 7	Palestra 11	Palestra 14
09:50 - 10:30	Palestra 1	Palestra 5	Palestra 8	Palestra 12	Palestra 15
10:30 - 11:00	Coffe break	Coffe break	Coffe break	Coffe break	Coffe break
11:00 - 11:40	Palestra 2	Sessão pôster	Palestra 9	Sessão pôster	Palestra 16
11:40 - 12:00	Apresentação oral	Apresentação oral	Apresentação oral	Apresentação oral	Apresentação oral
12:00 - 12:40	Palestra 3	Palestra 6	Palestra 10	Palestra 13	Palestra Encerramento
12:40 - 14:00	Almoço	Almoço	Almoço	Almoço	Almoço
14:00 - 15:30	Minicursos	Minicursos	Minicursos	Minicursos	-
15:30 - 17:00	Minicursos	Minicursos	Minicursos	Minicursos	-
17:00 - 17:30	Coffe break	Coffe break	Coffe break	Coffe break	-
17:30 - 19:00	Minicursos	Minicursos	Minicursos	Minicursos	-

Palestra Abertura	Roberto Lins	Sobre rádios quebrados, a biblioteca de Borges e a associação de proteínas
Palestra 1	Leandro Martinez	Campos de força clássicos e dinâmica molecular
Palestra 2	Matheus Müller	Técnicas de aprendizado de máquina e deep learning
Palestra 3	Fábio Custódio	Inteligência artificial em predição de estruturas de proteínas
Palestra 4	Leandro Martinez	Estrutura e termodinâmica de solvatação em sistemas complexos
Palestra 5	Kaline Coutinho	Método Monte Carlo aplicado a simulação de sistemas moleculares
Palestra 6	Marcelo Castilho	Focusing on hotspots for improved target selection and hit-to-lead optimization
Palestra 7	Claudio Cavasotto	Métodos avançados no planejamento de fármacos baseado em estrutura
Palestra 8	Rafaela Salgado	Planejamento de fármacos para tratamento de doenças negligenciadas
Palestra 9	Laurent Dardenne	Atracamento molecular receptor-ligante e triagem virtual em larga escala
Palestra 10	Isabella Guedes	Inteligência artificial no planejamento de fármacos
Palestra 11	Gerd Bruno	Modelagem de biomoléculas com métodos semipíricos de química quântica
Palestra 12	Jerônimo Lameira	Estudo computacional do mecanismo catalítico de enzimas que degradam o politereftalato de etileno
Palestra 13	Priscila Capriles	Aplicação de Dinâmica Molecular de Biomembranas e Carreadores no Câncer de Mama
Palestra 14	Jorge Gonzalez	Cálculo de energia livre proteína-ligante: métodos alquímicos
Palestra 15	Ingrid Martins	Métodos computacionais aplicados ao estudo de interações entre macromoléculas biológicas dependentes do pH
Palestra 16	João Herminio	Aplicação e desenvolvimento de métodos computacionais para a descoberta e aprimoramento de biofármacos
Palestra Encerramento	Hugo Verli	Busca pelas bases estruturais para as funções biológicas de carboidratos

Minicursos

Horário (19 a 22/08)	Lab. 4	Lab. 5	Lab. 6	Auditório
14:00 - 15:30	PSP	DOCKING (turma 1)	FREE ENERGY	
15:30 - 17:00	DM (turma 1)	DOCKING (turma 2)	ENG. PTNS	
17:00 - 17:30	Coffe break	Coffe break	Coffe break	Coffe break
17:30 - 19:00	DM (turma 2)	ADMET	QUANT	AM

PSP	Priscila Capriles	Predição de estrutura de proteínas
DM	Pedro Torres, Pedro Pascutti, Mauricio	Dinâmica molecular básica
DOCKING	Laurent Dardenne, Isabella Guedes	Atracamento molecular receptor-ligante e triagem virtual em larga escala
QUANT	Gerd Bruno, Igor Barden	Métodos químico-quânticos e descritores de reatividade aplicados a sistemas biológicos
FREE ENERGY	Jorge Gonzalez, Ernesto Caffarena	Cálculo de energia livre por métodos alquímicos utilizando Amber24
ENG. PTNS	Roberto Lins, Danilo Fernandes Coêlho	Engenharia computacional de proteínas
ADMET	Manuela Leal,	Preditores farmacocinéticos e toxicológicos <i>in silico</i>
AM	Eduardo Krempser, Matheus Müller	Conceitos e aplicações de aprendizado de máquina