Minicursos

AM

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

Eduardo Krempser, Matheus Müller

PSP	Priscila Capriles	Predição de estrutura de proteínas
DM	Pedro Torres, Pedro Pascutti, Maurício	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
ENG. PTNS	Roberto Lins, Danilo Fernandes Coêlho	Engenharia computacional de proteínas
ADMET	Manuela Leal,	Preditores farmacocinéticos e toxicológicos in silico

Conceitos e aplicações de aprendizado de máquina