Khai thác DỮ liệu CHEMBL, Nhận Tạo và Nghiên Cứu vvà Phát triển Thuốc

I. Giới thiệu Kho dữ liệu CHEMBL,

CHEMBL, 2.5 triệu hợp chất có sẵn cấu trúc hóa học tổn thương dữ liệu, CHEMBL, ERB phân tích. Phân bậc 3 của Tổ chức 2,5 triệu compound, 18 triệu dữ liệu bioactivity và hơn 14.000 target sinh học. Việc sử dụng CHEMBL, 3 dữ liệu hợp PDBHL, PostgreSQL, và AI/Machine Learning giúp dược hoạt tính, thiết kế thuốc, sàng lọc lead, định hướng thử nghiệm lâm sàng.

A. Cài đặt PostgreSQL và CHEMBL_35

a. Cài PostgreSQL

```
sudo apt update
sudo apt install postgresql postgresql-contrib
sudo -u postgres createuser --interactive
sudo -u postgres createdb chembl_35
```

b. Import dữ liệu CHEMBL_35 (dùng PostgreSQL dump)

```
psql -U ai -d chembl_35 -f chembl_35_postgresql.dump
```

c. Kết nối từ Python

```
from sqlalchemy import create_engine
engine = create_engine("postgresql+psycopg2://ai:ai@localhost/chembl_35")
```

d. Cài trình duyệt mục MMLDps

```
project-root/
├── notebook/
│   ├── 1_1_1_qsar_model.ipynb
├── src/
│   ├── 1_1_1_qsar_model.py
├── data/
│   ├── 1_1_1_qsar_model.csv
```

e. Các bài viết mình hay bàng dữ liệu Thuốc

Dưới đây là danh sách bài viết thực hiện dữ được xuất bản tại www.nghiencuuthuoc.com, đánh số theo từng Phần:

Index	English Topic	Chủ đề tiếng Việt	URL
0		CHEMBL 35 - Khai Phá Dữ liệu CHEMBL_35 tăng Tỉ lưu Nhất Tạo và Nghiên Cứu và Phát triển Thuốc	https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/khai-pha-du-lieu-chembl_35-tang-ti-luu-nhat-tao-va-nghien-cuu-va-phat-trien-thuoc
0		CHEMBL 35 Phân nhóm 100 chủ đề	https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-nhom-100-chu-de-phan-tong
1	Drug Discovery & Lead Optimization	Hành phần phổ & 50 của hoạt tính	https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg
1.1	QSAR model building from ChEMBL IC50 data	Xây dựng mô hình QSAR từ dữ liệu IC50 trong ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/dung-mo-hinh-qsar-tu-du_183mm
1.2	Predicting bioactivity from molecular descriptors	Dự đoán hoạt tính sinh học từ bộ đặc trưng phân tử	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-hoat-tinh-sinh-hoc-tu_183mm
1.3	Extracting lead-like compounds	Trích xuất các hợp chất giống lead	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/trich-xuat-cac-hop-chat-giong_183mm
1.4	Filtering rule-of-five compliant molecules	Lọc các phân tử tuân thủ quy tắc Lipinski	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/loc-cac-phan-tu-tuan-thu-quy-tac_183mm
1.5	Analyzing drug likeness using RDKit	Phân tích tính giống thuốc bằng RDKit	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-tinh-giong-thuoc_183mm
1.6	Virtual screening based on ChEMBL targets	Sàng lọc ảo dựa trên các target trong ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/sang-loc-ao-dua-tren-cac_183mm
1.7	Ligand-based drug design using ChEMBL	Thiết kế thuốc dựa trên ligand từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/thiet-ke-thuoc-dua-tren-ligand_183mm
1.8	Structure-Activity Relationship (SAR) mining	Khai thác mối quan hệ cấu trúc - hoạt tính (SAR)	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/khai-thac-moi-quan-he-cau-truc-hoat_183mm
1.9	Tanimoto similarity search using ChEMBL fingerprints	Tìm kiếm tương đồng Tanimoto với ChEMBL vân tay	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/tim-kiem-tuong-dong-tanimoto-voi_183mm
1.10	Chemical space mapping of ChEMBL molecules	Bản đồ không gian hóa học của các phân tử ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/ban-do-khong-gian-hoa-hoc-cua_183mm
1.11	Predicting LogP and TPSA of ChEMBL compounds	Dự đoán LogP và TPSA của các hợp chất ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-logp-va-tpsa-cua-cac_183mm
1.12	Screening for CNS-active drugs	Sàng lọc thuốc tác động hệ thần kinh trung ương	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/sang-loc-thuoc-tac-dong-he-than-kinh_183mm
1.13	Plotting molecular properties	Phân tích tham số không hóa học trên ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-tham-so-khong-hoa-hoc_183mm
1.14	Scaffold hopping analysis	Khai thác chất ức chế kinase từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/khai-thac-chat-uc-che-kinase_183mm
1.15	Prioritizing compounds for synthesis	Sử dụng mô hình chấm điểm để ưu tiên hợp chất	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/su-dung-mo-hinh-cham-diem-de-uu-tien_183mm
1.16	Designing focused libraries from ChEMBL	Thiết kế thư viện hóa học tập trung từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/thiet-ke-thu-vien-hoa-hoc-tap_183mm
1.17	Finding natural product like molecules	Tìm các phân tử giống sản phẩm tự nhiên	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/tim-cac-phan-tu-giong-san-pham_183mm
1.18	Mining kinase inhibitors from ChEMBL	Khai thác chất ức chế kinase từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/khai-thac-chat-uc-che-kinase_183mm
1.19	Target prediction for orphan molecules	Dự đoán mục tiêu cho các phân tử mồ côi	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-muc-tieu-cho-cac_183mm
1.20	Linking ChEMBL with DrugBank for repurposing	Kết nối ChEMBL với DrugBank để tái định hướng thuốc	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/ket-noi-chembl-voi-drugbank-e-html
1.21	Comparing ChEMBL scaffolds with FDA drugs	So sánh khung hóa học ChEMBL với thuốc FDA	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/so-sanh-khung-hoa-hoc-chembl-voi_183mm
1.22	Target-Based Analysis (Phân tích theo đích tác động (21-40)		
1.23	Top 50 protein targets by activity count	Top 50 protein mục tiêu có nhiều hoạt tính nhất	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/top-50-protein-muc-tieu-co-nhieu_183mm
1.24	Analyzing GPCR-targeted ligands	Phân tích ligand nhắm GPCR	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-ligand-nham-gpcr_183mm
1.25	Extracting kinase-binding molecules	Trích xuất hợp chất gắn kinase	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/trich-xuat-hop-chat-gan-kinase_183mm
1.26	Target class distribution in ChEMBL	Phân bố các nhóm target trong ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-bo-cac-nhom-target-trong_183mm
1.27	Multi-target ligand profiling	Lập hồ sơ ligand đa đích	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/lap-ho-so-ligand-da-dich_183mm
1.28	Correlating bioactivity with target taxonomy	Liên hệ hoạt tính với phân loại target	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/lien-he-hoat-tinh-voi-phan-loai-target_183mm
1.29	Disease association of ChEMBL targets	Hồi liên hệ giữa target và bệnh học	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/hoi-lien-he-giua-target-va-benh_183mm
1.30	Ortholog mapping of targets (human vs mouse)	Ánh xạ protein giữa người và chuột	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/anh-xa-protein-giua-nguoi-va-chuot_183mm
1.31	Target pathway analysis via Enrichr/KEGG	Phân tích pathway của target bằng Enrichr/KEGG	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-pathway-cua-target_183mm
1.32	Binding site comparison across targets	So sánh vị trí gắn ligand giữa các target	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/so-sanh-vi-tri-gan-ligand_183mm
1.33	3D target structure availability from PDB	Kiểm tăng trưởng cấu trúc 3D của target từ PDB	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/kiem-tang-truong-cau-truc-3d-cua_183mm
1.34	Predicting binding modes via molecular docking	Dự đoán cách phân gắn ligand bằng docking	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-cach-phan-gan-ligand-bang_183mm
1.35	Sequence similarity clustering of targets	Phân nhóm target theo tương đồng chuỗi	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-nhom-target-theo-tuong-dong_183mm
1.36	Heatmap of target-ligand interaction count	Bản đồ nhiệt số liệu tương tác target-ligand	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/ban-do-nhiet-so-lieu-tuong-tac-target_183mm
1.37	ChEMBL target network visualization	Trực quan hóa mạng lưới target	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/truc-quan-hoa-mang-luoi-target_183mm
1.38	Target enrichment from gene sets	Làm giàu target từ bộ gene	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/lam-giau-target-tu-bo-gene_183mm
1.39	Mining antimicrobial targets in ChEMBL	Khai thác target kháng khuẩn trong ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/khai-thac-target-khang-khuan_183mm
1.40	Visualization of protein families	Trực quan hóa họ protein trong ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/truc-quan-hoa-ho-protein-trong_183mm
1.41	Finding targets with dual pharmacological/genomic activity	Tìm target có hoạt tính đã kháng và dược lý/gen	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/tim-target-co-hoat-tinh-da_183mm
1.42	Top virals/bacterial targets in ChEMBL	Các target virus/vi khuẩn phổ biến trong ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/cac-target-virus-vi-khuan-pho-bien_183mm
1.43	Clinical & Translational Insight (Thống tin lâm sàng & ứng dụng chuyển giao (41-60)		
1.44	Linking ChEMBL drugs to clinical phases	Liên kết dữ liệu thuốc với các giai đoạn lâm sàng	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/lien-ket-du-lieu-thuoc-voi-cac_183mm
1.45	Drugs with most activity data	Thuốc có nhiều dữ liệu hoạt tính nhất	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/thuoc-co-nhieu-du-lieu-hoat_183mm
1.46	Predicting clinical success from early bioactivity	Dự đoán khả năng thành công lâm sàng từ hoạt tính sớm	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-kha-nang-thanh-cong_183mm
1.47	Time-to-market estimation using ChEMBL history	Ước lượng thời gian ra thị trường từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/uoc-luong-thoi-gian-ra-thi-truong_183mm
1.48	Mapping ChEMBL drugs to WHO ATC codes	Ánh xạ thuốc ChEMBL sang mã ATC của WHO	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/anh-xa-thuoc-chembl-sang-ma-atc_183mm
1.49	Drug repurposing candidates from ChEMBL	Các thuốc tiềm năng tái định hướng	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/cac-thuoc-tiem-nang-tai-dinh-huong_183mm
1.50	Comparing clinical vs. preclinical molecules	So sánh thuốc lâm sàng và tiền lâm sàng	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/so-sanh-thuoc-lam-sang-va-tien-lam_183mm
1.51	Linking ChEMBL with clinicaltrials.gov	Liên kết ChEMBL với dữ liệu thử nghiệm lâm sàng	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/lien-ket-chembl-voi-du-lieu_183mm
1.52	FDA-approved ChEMBL drugs analysis	Phân tích thuốc ChEMBL đã được FDA phê duyệt	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-thuoc-chembl-da_183mm
1.53	Trends in target class approval	Xu hướng phê duyệt theo nhóm target	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/xu-huong-phe-duyet-theo_183mm
1.54	Withdrawn drugs and their ChEMBL profiles	Thế và thuốc bị rút khỏi thị trường	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/the-va-thuoc-bi-rut-khoi-thi-truong_183mm
1.55	Oncology-focused drug trend in ChEMBL	Xu hướng thuốc ung thư trong ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/xu-huong-thuoc-ung-thu-trong_183mm
1.56	Antiviral compounds mapping to COVID-19 targets	Phân tích kháng virus hướng ứng với đích COVID-19	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-kang-virus-huong-ung-voi_183mm
1.57	Neuropsychiatric drug insights from ChEMBL	Phân tích thuốc thần kinh - tâm thần	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-thuoc-than-kinh-tam-than_183mm
1.58	Drug safety, frugs and bioactivity profile	Cảnh báo an toàn liên kết với hồ sơ hoạt tính sinh học	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/canh-bao-an-toan-lien-ket-voi_183mm
1.59	Comparing ChEMBL drugs with Essential Medicines	So sánh ChEMBL với danh mục thuốc thiết yếu WHO	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/so-sanh-chembl-voi-danh-muc_183mm
1.60	Pharmacovigilance risk signals in ChEMBL	Dữ liệu tín hiệu cảnh báo dược lý	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-lieu-tin-hieu-canh-bao_183mm
1.61	Pediatric drug insights from ChEMBL	Phân tích thuốc dành cho trẻ em	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-thuoc-danh-cho-tre_183mm
1.62	Orphan drug discovery via ChEMBL	Khám phá thuốc hiếm từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/kham-pha-thuoc-hiem-tu-chembl_183mm
1.63	ChEMBL – Real-world evidence mapping	Bản đồ bằng chứng thực tế ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/ban-do-bang-chung-thuc-te-chembl_183mm
1.64	AI & Machine Learning for Drug Discovery (Trí tuệ nhân tạo trong khám phá thuốc (61-80)		
1.65	QSAR with Random Forest and CNN/GNN descriptors	QSAR với Random Forest và đặc trưng từ CNN/GNN	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/qsar-voi-random-forest-va-dac-trung-tu_183mm
1.66	Deep learning models for activity prediction	Mô hình học sâu để dự đoán hoạt tính	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/mo-hinh-hoc-sau-de-du-doan-hoat_183mm
1.67	Kinase2 optimization for IC50 prediction	Tối ưu hóa XGBoost để dự đoán IC50	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/toi-uu-hoa-xgboost-de-du-doan_183mm
1.68	Autoencoder fingerprints for ChEMBL data	Đang Autoencoder, cho dữ liệu ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/dang-autoencoder-cho-du-lieu-chembl_183mm
1.69	Feature selection in ChEMBL machine learning	Chọn đặc trưng trong mô hình hóa ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/chon-dac-trung-trong-mo-hinh-hoa_183mm
1.70	Hyperparameter tuning with Optuna for drug models	Tinh chỉnh siêu tham số bằng Optuna cho mô hình thuốc	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/tinh-chinh-sieu-tham-so-bang-html
1.71	Evaluating overfitting in QSAR models	Đánh giá overfitting trong mô hình QSAR	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/danh-gia-overfitting-trong-mo-hinh_183mm
1.72	Uncertainty-aware QSAR predictions	Dự đoán tương đương gắn các hợp chất	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-tuong-duong-gan-cac-hop_183mm
1.73	Dimensionality reduction for chemical descriptors	Giảm chiều dữ liệu cho đặc trưng hóa học	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/giam-chieu-du-lieu-cho-da-html
1.74	Predicting drug target interactions using ML	Dự đoán tương tác thuốc - đích bằng học máy	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-tuong-tac-thuoc-html
1.75	Streamlit dashboard for bioactivity exploration	Dashboard Streamlit để khám phá hoạt tính sinh học	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/dashboard-streamlit-e-kham-html
1.76	Plotting IC50 distribution across targets	Vẽ phân bố IC50 trên các đích khác nhau	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-bo-ic50-tren-cac-dich-html
1.77	Interactive similarity search app	Ứng dụng tìm kiếm tương đồng tương tác	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/ung-dung-tim-kiem-tuong-dong-html
1.78	3D plotting of molecular chemical space	Vẽ 3D không gian hóa học phân tử	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/ve-3d-khong-gian-hoa-hoc-phan-html
1.79	Comparative fingerprints for molecule classes	Biểu đồ so sánh các lớp hợp chất	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/bieu-do-so-sanh-cac-lop-html
1.80	Target-ligand network graph using Networkx	Đồ thị mạng lưới target-ligand bằng Networkx	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/do-thi-mang-luoi-target-ligand-bang-html
1.81	Correlation heatmap of physicochemical properties	Biểu đồ nhiệt tương quan các tính chất lý hóa	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/bieu-do-nhiet-tuong-quan-cac-html
1.82	Violin plot for multi-target activity spectrum	Biểu đồ violin cho phổ hoạt tính đa đích	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/bieu-do-violin-cho-pho-html
1.83	Radar chart of drug-likeness scores	Biểu đồ radar cảm các điểm giống thuốc	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/bieu-do-radar-cua-cac-html
1.84	Timeline of drug approval dates	Dòng thời gian về ngày phê duyệt thuốc	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/dong-thoi-gian-ve-ngay-html
1.85	V. Molecular Informatics & Design (Tin sinh học phân tử và thiết kế hóa học (81-90)		
1.86	Linking ChEMBL with UniProt for protein IDs	Liên kết ChEMBL với UniProt để lấy protein	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/lien-ket-chembl-voi-uniprot-de-html
1.87	Merging ChEMBL with PubChem CID data	Gộp dữ liệu ChEMBL với CID từ PubChem	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/gop-du-lieu-chembl-voi-cid-html
1.88	Drug/Best interaction cross validation	Kiểm chứng chéo tương tác thuốc/tốt nhất	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/kiem-chung-cheo-tuong-tac-thuoc-html
1.89	Linking ChEMBL to FDA label data	Liên kết ChEMBL với dữ liệu nhãn FDA	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/lien-ket-chembl-voi-du-lieu_183mm
1.90	Processing ChEMBL targets with PDB structures	Xử lý thích target ChEMBL bằng cấu trúc PDB	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/xu-ly-thich-target-chembl-bang-html
1.91	Integrating adverse event data (SIDER/FAERS)	Tích hợp dữ liệu tác dụng phụ (SIDER/FAERS)	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/tich-hop-du-lieu-tac-dung-phu-html
1.92	Gene-compound mapping with bioactivity data	Ánh xạ gene - hợp chất với tập dữ liệu hoạt tính	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/anh-xa-gene-hop-chat-voi-tap-html
1.93	ChEMBL + BindingDB similarity validation	So sánh tương đồng giữa ChEMBL và BindingDB	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/so-sanh-tuong-dong-giua-chembl-html
1.94	Converting ChEMBL SMILES to CHEMBL InchiKey	Chuyển SMILES từ CHEMBL thành InchiKey	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/chuyen-smiles-tu-chembl-thanh-html
1.95	Merging ChEMBL with chemical vendor data	Gộp ChEMBL với dữ liệu nhà cung cấp hóa chất	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/gop-chembl-voi-du-lieu-html
1.96	Case study: JAK inhibitors from ChEMBL	Ca nghiên cứu: chất ức chế JAK từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/ca-nghien-cuu-chat-uc-che-html
1.97	Finding selective COX-2 inhibitors	Tìm các chất ức chế COX-2 chọn lọc	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/tim-cac-chat-uc-che-cox-2-html
1.98	Comparative analysis of antihypertensive agents	So sánh các thuốc hạ huyết áp	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/so-sanh-thuoc-ha-html
1.99	Blackbeam-of-action Clustering of CHEMBL drugs	Phân nhóm theo cơ chế tác dụng của thuốc CHEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-nhom-theo-co-che-html
1.100	Extracting structure alerts for toxicity	Trích xuất tín hiệu cấu trúc gây độc	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/trich-xuat-tin-hieu-html
1.101	Multi-task learning for pan-target inhibition	Học đa nhiệm cho ức chế toàn đích	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/hoc-da-nhiem-cho-uc-che-toan-html
1.102	Matched molecular pair analysis from ChEMBL	Phân tích cặp phân tử giống nhau từ ChEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/phan-tich-cap-phan-tu-giong-html
1.103	Drug synergy potential prediction using CHEMBL	Dự đoán tiềm năng hiệp đồng thuốc từ CHEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/du-doan-tiem-nang-hiep-dong-html
1.104	Epigenetic modulator screening via CHEMBL	Sàng lọc chất điều biến epigenetic bằng CHEMBL	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/sang-loc-chat-dieu-bien-html
1.105	Rare disease drug lead identification	Tìm kiếm hợp chất lead của bệnh hiếm	http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sg/tim-kiem-hop-chat-lead-cua_183mm