**CheMBL-35: 💊 Khai thác Dữ liệu ChEMBL\_35 trong Trí tuệ Nhân Tạo và Nghiên Cứu vvà Phát triển Thuốc**

**1. Giới thiệu tổng quát**

ChEMBL\_35 là một trong những cơ sở dữ liệu sinh hóa dược lớn nhất thế giới, do EMBL-EBI phát triển. Phiên bản 35 chứa hơn 2.3 triệu compound, 18 triệu đo lường bioactivity và hơn 14.000 target sinh học. Việc sử dụng ChEMBL\_35 kết hợp RDKit, PostgreSQL, và AI/Machine Learning giúc dự đoán hoạt tính, thiết kế scaffold, sàng lọc lead, định hướng thử nghiệm tiền lâm sàng.

**2. 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 (dạng PostgreSQL dump)**

psql -U rd -d chembl\_35 -f chembl\_35\_postgresql.sql

**c. Kết nối từ Python**

from sqlalchemy import create\_engine

engine = create\_engine("postgresql+psycopg2://rd:rd@localhost/chembl\_35")

**3. Cài Python, RDKit và các gói AIMLOps**

**a. Cài Python + Conda**

conda create -n chembl\_env python=3.10 -y

conda activate chembl\_env

**b. Cài RDKit**

conda install -c rdkit rdkit

**c. Cài ML/DS packages theo chuẩn AIMLOps Template**

pip install pandas scikit-learn xgboost optuna streamlit matplotlib seaborn sqlalchemy psycopg2-binary

**d. Câu trúc cây thư mục theo AIMLOps**

project-root/

├─ notebook/

│ └─ T1\_1\_qsar\_model.ipynb

├─ src/

│ └─ qsar\_utils.py

├─ data/

│ └─ T1\_1\_qsar\_model\_result.csv

**4. Các bài viết minh hoạ bằng dữ liệu Thực**

Dưới đây là danh sách bài viết thực tiễn đã được xuất bản tại [www.nghiencuuthuoc.com](http://www.nghiencuuthuoc.com/), đánh số theo từng Phần:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Index | English Topic | Chủ đề tiếng Việt | URL |
| 0 |  | CheMBL-35: 💊 Khai thác Dữ liệu ChEMBL\_35 trong Trí tuệ Nhân Tạo và Nghiên Cứu và Phát triển Thuốc | <https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/khai-thac-du-lieu-chembl35-trong-tri.html> |
| 0 |  | CheMBL-35: Phân nhóm 100 chủ đề | https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-nhom-100-chu-e-phan-tong.html |
| 🧪 I. Drug Discovery & Lead Optimization | Khám phá thuốc & tối ưu hóa lead (1–20) | | | |
| 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-xay-dung-mo-hinh-qsar-tu-du\_80.html |
| 2 | Predicting bioactivity from molecular descriptors | Dự đoán hoạt tính sinh học từ các đặc trưng phân tử | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-du-oan-hoat-tinh-sinh-hoc-tu\_18.html |
| 3 | Extracting lead-like compounds | Trích xuất các hợp chất giống lead | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-trich-xuat-cac-hop-chat-giong\_90.html |
| 4 | Filtering rule-of-five compliant molecules | Lọc các phân tử tuân thủ quy tắc Lipinski | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-loc-cac-phan-tu-tuan-thu-quy.html |
| 5 | Analyzing drug-likeness using RDKit | Phân tích tính giống thuốc bằng RDKit | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-tinh-giong-thuoc.html |
| 6 | Virtual screening based on ChEMBL targets | Sàng lọc ảo dựa trên các target trong ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sang-loc-ao-dua-tren-cac.html |
| 7 | Ligand-based drug design using ChEMBL | Thiết kế thuốc dựa trên ligand từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-thiet-ke-thuoc-dua-tren.html |
| 8 | Structure-Activity Relationship (SAR) mining | Khai thác mối quan hệ cấu trúc – hoạt tính (SAR) | https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-khai-thac-moi-quan-he-cau.html |
| 9 | Tanimoto similarity search using ChEMBL + RDKit | Tìm kiếm tương đồng Tanimoto với ChEMBL và RDKit | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-tim-kiem-tuong-ong-tanimoto.html |
| 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-ban-o-khong-gian-hoa-hoc-cua\_16.html |
| 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-du-oan-logp-va-tpsa-cua-cac\_16.html |
| 12 | Screening for CNS-active drugs | Sàng lọc thuốc tác động hệ thần kinh trung ương | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sang-loc-thuoc-tac-ong-he\_16.html |
| 13 | Scaffold hopping analysis | Phân tích thay đổi khung hóa học (scaffold hopping) | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-thay-oi-khung-hoa.html |
| 14 | Prioritizing compounds for synthesis | Ưu tiên hợp chất cho quá trình tổng hợp | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-uu-tien-hop-chat-cho-qua.html |
| 15 | Designing focused libraries from ChEMBL | Thiết kế thư viện hóa học tập trung từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-thiet-ke-thu-vien-hoa-hoc-tap.html |
| 16 | Finding natural product-like molecules | Tìm các phân tử giống sản phẩm tự nhiên | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-tim-cac-phan-tu-giong-san.html |
| 17 | Mining kinase inhibitors from ChEMBL | Khai thác chất ức chế kinase từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-khai-thac-chat-uc-che-kinase.html |
| 18 | Target prediction for orphan molecules | Dự đoán mục tiêu cho các phân tử không rõ target | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-du-oan-muc-tieu-cho-cac-phan.html |
| 19 | Linking ChEMBL with DrugBank for repurposing | Kết nối ChEMBL với DrugBank để tái định hướng thuốc | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-ket-noi-chembl-voi-drugbank-e.html |
| 20 | Comparing ChEMBL scaffolds with FDA drugs | So sánh khung hóa học ChEMBL với thuốc FDA | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-so-sanh-khung-hoa-hoc-chembl.html |
| 🧬 II. Target-Based Analysis | Phân tích theo đích tác dụng (21–40) | | | |
| 21 | Top 50 protein targets by activity count | 50 protein mục tiêu có nhiều hoạt tính nhất | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-50-protein-muc-tieu-co-nhieu.html |
| 22 | Analyzing GPCR-targeted ligands | Phân tích ligand nhắm GPCR | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-ligand-nham-gpcr.html |
| 23 | Extracting kinase-binding molecules | Trích xuất hợp chất gắn kinase | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-trich-xuat-hop-chat-gan.html |
| 24 | Target class distribution in ChEMBL | Phân bố các nhóm target trong ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-bo-cac-nhom-target-trong.html |
| 25 | Multi-target ligand profiling | Lập hồ sơ ligand đa đích | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lap-ho-so-ligand-ich-phan-25.html |
| 26 | Correlating bioactivity with target taxonomy | Liên hệ hoạt tính với phân loại target | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lien-he-hoat-tinh-voi-phan.html |
| 27 | Disease association of ChEMBL targets | Mối liên hệ giữa target và bệnh học | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-moi-lien-he-giua-target-va.html |
| 28 | Ortholog mapping of targets (human → mouse) | Ánh xạ protein giữa người và chuột | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-anh-xa-protein-giua-nguoi-va.html |
| 29 | Target pathway analysis via UniProt/KEGG | Phân tích pathway của target bằng UniProt/KEGG | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-pathway-cua-target.html |
| 30 | Binding site comparison across targets | So sánh vị trí gắn ligand giữa các target | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-so-sanh-vi-tri-gan-ligand.html |
| 31 | 3D target structure availability from PDB | Khả năng truy xuất cấu trúc 3D của target từ PDB | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-kha-nang-truy-xuat-cau-truc.html |
| 32 | Predicting binding modes via molecular docking | Dự đoán cách thức gắn ligand bằng docking | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-du-oan-cach-thuc-gan-ligand.html |
| 33 | Sequence similarity clustering of targets | Phân nhóm target theo tương đồng chuỗi | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-nhom-target-theo-tuong.html |
| 34 | Heatmap of target-ligand interaction count | Biểu đồ nhiệt về số lượng ligand tương tác target | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-bieu-o-nhiet-ve-so-luong\_17.html |
| 35 | ChEMBL target network visualization | Trực quan hóa mạng lưới target | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-truc-quan-hoa-mang-luoi\_17.html |
| 36 | Target enrichment from gene sets | Làm giàu target từ bộ gene | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lam-giau-target-tu-bo-gene\_17.html |
| 37 | Mining antimicrobial targets in ChEMBL | Khai thác target kháng khuẩn từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-khai-thac-target-khang-khuan\_17.html |
| 38 | Visualization of protein families | Trực quan hóa họ protein từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-truc-quan-hoa-ho-protein-tu\_17.html |
| 39 | Finding targets with dual antagonist/agonist activity | Tìm target có hoạt tính đối kháng và đồng vận | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-tim-target-co-hoat-tinh-oi\_17.html |
| 40 | Top viral/bacterial targets in ChEMBL | Các target virus/vi khan phổ biến nhất | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-cac-target-virusvi-khuan-pho.html |
| 💊 III. Clinical & Translational Insight | Thông tin lâm sàng & ứng dụng chuyển giao (41–60) | | | |
| 41 | Linking ChEMBL drugs to clinical phases | Liên kết dữ liệu thuốc với các pha lâm sàng | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lien-ket-du-lieu-thuoc-voi.html |
| 42 | Drugs with most activity data | Thuốc có nhiều dữ liệu hoạt tính nhất | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-thuoc-co-nhieu-du-lieu-hoat.html |
| 43 | Predicting clinical success from early bioactivity | Dự đoán khả năng thành công lâm sàng | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-du-oan-kha-nang-thanh-cong.html |
| 44 | Time-to-market estimation using ChEMBL history | Ước lượng thời gian ra thị trường từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-uoc-luong-thoi-gian-ra-thi.html |
| 45 | Mapping ChEMBL drugs to WHO ATC codes | Ánh xạ thuốc ChEMBL sang mã ATC của WHO | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-anh-xa-thuoc-chembl-sang-ma.html |
| 46 | Drug repurposing candidates from ChEMBL | Các thuốc tiềm năng tái định hướng | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-cac-thuoc-tiem-nang-tai-inh.html |
| 47 | Comparing clinical vs. preclinical molecules | So sánh thuốc lâm sàng và tiền lâm sàng | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-so-sanh-thuoc-lam-sang-va.html |
| 48 | Linking ChEMBL with clinicaltrials.gov | Liên kết ChEMBL với dữ liệu thử nghiệm lâm sàng | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lien-ket-chembl-voi-du-lieu.html |
| 49 | FDA-approved ChEMBL drugs analysis | Phân tích thuốc ChEMBL đã được FDA phê duyệt | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-thuoc-chembl-uoc.html |
| 50 | Trends in target class approval | Xu hướng phê duyệt theo nhóm target | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-xu-huong-phe-duyet-theo-nhom.html |
| 51 | Withdrawn drugs and their ChEMBL profiles | Hồ sơ thuốc bị rút khỏi thị trường | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-ho-so-thuoc-bi-rut-khoi-thi.html |
| 52 | Oncology-focused drug trend in ChEMBL | Xu hướng thuốc ung thư trong ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-xu-huong-thuoc-ung-thu-trong.html |
| 53 | Antiviral compounds mapping to COVID-19 targets | Phân tử kháng virus tương ứng với đích COVID-19 | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tu-khang-virus-tuong-ung.html |
| 54 | Neuropsychiatric drug insights from ChEMBL | Phân tích thuốc thần kinh – tâm thần | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-thuoc-than-kinh-tam.html |
| 55 | Drug safety flags and bioactivity profile | Cảnh báo an toàn liên kết với hoạt tính sinh học | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-canh-bao-toan-lien-ket-voi.html |
| 56 | Comparing ChEMBL drugs with WHO Essential Medicines | So sánh ChEMBL với danh mục thuốc thiết yếu WHO | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-so-sanh-chembl-voi-danh-muc.html |
| 57 | Pharmacovigilance risk signals in ChEMBL | Dữ liệu tín hiệu cảnh báo dược lý | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-du-lieu-tin-hieu-canh-bao.html |
| 58 | Pediatric drug insights from ChEMBL | Phân tích thuốc dành cho trẻ em | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-thuoc-danh-cho-tre.html |
| 59 | Orphan drug discovery via ChEMBL | Khám phá thuốc hiếm từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-kham-pha-thuoc-hiem-tu-chembl.html |
| 60 | ChEMBL → Real-world evidence mapping | Liên kết dữ liệu ChEMBL với dữ liệu thực tế | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lien-ket-du-lieu-chembl-voi.html |
| 🤖 IV. AI & Machine Learning for Drug Discovery | Trí tuệ nhân tạo trong khám phá thuốc (61–80) | | | |
| 61 | QSAR with Random Forest and ChEMBL descriptors | QSAR với Random Forest và đặc trưng từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-qsar-voi-random-forest-va-ac.html |
| 62 | Deep learning models for activity prediction | Mô hình học sâu để dự đoán hoạt tính | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-mo-hinh-hoc-sau-e-du-oan-hoat.html |
| 63 | XGBoost optimization for IC50 prediction | Tối ưu hóa XGBoost để dự đoán IC50 | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-toi-uu-hoa-xgboost-e-du-oan\_16.html |
| 64 | AutoML pipelines for ChEMBL data | Dòng AutoML cho dữ liệu ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-dong-automl-cho-du-lieu\_16.html |
| 65 | Feature selection in ChEMBL-based models | Chọn đặc trưng trong mô hình từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-chon-ac-trung-trong-mo-hinh\_16.html |
| 66 | 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-tinh-chinh-sieu-tham-so-bang.html |
| 67 | Evaluating overfitting in QSAR models | Đánh giá overfitting trong mô hình QSAR | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-anh-gia-overfitting-trong-mo.html |
| 68 | Unsupervised clustering of ChEMBL compounds | Phân cụm không giám sát các hợp chất ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-cum-khong-giam-sat-cac.html |
| 69 | Dimensionality reduction for chemical descriptors | Giảm chiều dữ liệu cho đặc trưng hóa học | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-giam-chieu-du-lieu-cho-ac.html |
| 70 | Predicting drug-target interactions using ML | Dự đoán tương tác thuốc–đích bằng học máy | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-du-oan-tuong-tac-thuocich.html |
| 71 | Streamlit dashboard for bioactivity exploration | Dashboard Streamlit để khám phá hoạt tính sinh học | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-dashboard-streamlit-e-kham.html |
| 72 | Plotting IC50 distribution across targets | Vẽ phân bố IC50 trên các đích tác dụng | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-ve-phan-bo-ic50-tren-cac-ich.html |
| 73 | Interactive similarity search app | Ứng dụng tìm kiếm tương đồng tương tác | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-ung-dung-tim-kiem-tuong-ong.html |
| 74 | 3D plotting of molecular chemical space | Vẽ 3D không gian hóa học phân tử | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-ve-3d-khong-gian-hoa-hoc-phan.html |
| 75 | Comparative barplots for molecule classes | Biểu đồ so sánh các lớp hợp chất | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-bieu-o-so-sanh-cac-lop-hop.html |
| 76 | Target-ligand network graph using NetworkX | Đồ thị mạng lưới target-ligand bằng NetworkX | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-o-thi-mang-luoi-target-ligand.html |
| 77 | Correlation heatmap of physicochemical properties | Biểu đồ nhiệt tương quan các tính chất lý hóa | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-bieu-o-nhiet-tuong-quan-cac.html |
| 78 | Violin plot for multi-target activity spectrum | Biểu đồ violin cho phổ hoạt tính đa đích | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-bieu-o-violin-cho-pho-hoat.html |
| 79 | Radar chart of drug-likeness scores | Biểu đồ radar của các điểm giống thuốc | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-bieu-o-radar-cua-cac-iem.html |
| 80 | Timeline of drug approval dates | Dòng thời gian về ngày phê duyệt thuốc | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-dong-thoi-gian-ve-ngay-phe.html |
| 🧫 V. Molecular Informatics & Design | Tin sinh học phân tử và thiết kế hóa học (81–90) | | | |
| 81 | Linking ChEMBL with UniProt for protein info | Liên kết ChEMBL với UniProt để tra protein | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lien-ket-chembl-voi-uniprot-e.html |
| 82 | Merging ChEMBL with PubChem CID data | Gộp dữ liệu ChEMBL với CID từ PubChem | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-gop-du-lieu-chembl-voi-cid-tu.html |
| 83 | DrugBank interaction cross-validation | Kiểm chứng chéo tương tác với DrugBank | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-kiem-chung-cheo-tuong-tac-voi.html |
| 84 | Linking ChEMBL to FDA label data | Liên kết ChEMBL với dữ liệu nhãn FDA | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-lien-ket-chembl-voi-du-lieu\_17.html |
| 85 | Annotating ChEMBL targets with PDB structures | Chú thích target ChEMBL bằng cấu trúc PDB | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-chu-thich-target-chembl-bang.html |
| 86 | Integrating adverse event data (SIDER/FAERS) | Tích hợp dữ liệu tác dụng phụ (SIDER/FAERS) | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-tich-hop-du-lieu-tac-dung-phu.html |
| 87 | Gene–compound mapping with bioactivity overlays | Ánh xạ gene – hợp chất với lớp phủ hoạt tính | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-anh-xa-gene-hop-chat-voi-lop.html |
| 88 | ChEMBL + BindingDB similarity validation | So sánh tương đồng giữa ChEMBL và BindingDB | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-so-sanh-tuong-ong-giua-chembl.html |
| 89 | Converting ChEMBL SMILES to InChIKeys | Chuyển SMILES từ ChEMBL thành InChIKey | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-chuyen-smiles-tu-chembl-thanh.html |
| 90 | Merging ChEMBL with chemical vendor data | Gộp ChEMBL với dữ liệu nhà cung cấp hóa chất | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-gop-chembl-voi-du-lieu-nha.html |
| 91 | Case study: JAK inhibitors from ChEMBL | Ca lâm sàng: chất ức chế JAK từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-ca-lam-sang-chat-uc-che-jak.html |
| 92 | Finding selective COX-2 inhibitors | Tìm các chất ức chế COX-2 chọn lọc | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-tim-cac-chat-uc-che-cox-2.html |
| 93 | Comparative analysis of antihypertensive agents | Phân tích so sánh thuốc hạ huyết áp | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-so-sanh-thuoc-ha.html |
| 94 | Mechanism-of-action clustering of ChEMBL drugs | Phân nhóm theo cơ chế tác dụng của thuốc ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-nhom-theo-co-che-tac.html |
| 95 | Extracting structure alerts for toxicity | Trích xuất tín hiệu cấu trúc gây độc | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-trich-xuat-tin-hieu-cau-truc.html |
| 96 | Multi-task learning for pan-target inhibition | Học đa nhiệm cho ức chế toàn đích | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-hoc-nhiem-cho-uc-che-toan-ich.html |
| 97 | Matched molecular pair analysis from ChEMBL | Phân tích cặp phân tử giống nhau từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-phan-tich-cap-phan-tu-giong.html |
| 98 | Drug synergy potential prediction using ChEMBL | Dự đoán tiềm năng hiệp đồng thuốc từ ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-du-oan-tiem-nang-hiep-ong.html |
| 99 | Epigenetic modulator screening via ChEMBL | Sàng lọc chất điều biến epigenetic qua ChEMBL | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-sang-loc-chat-ieu-bien.html |
| 100 | Rare disease drug lead identification | Tìm kiếm hợp chất lead cho bệnh hiếm gặp | http://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/chembl-35-tim-kiem-hop-chat-lead-cho\_16.html |