

III Workshop de Dissertações de Mestrado do PPgSI (2016)

FICHA DA PESQUISAⁱ

DADOS GERAIS					
Título do projeto de pesquisa	Ontologia voltada à análise de modelos QSAR.				
Orientando	Maria Weslane de Sousa Almeida.				
Orientador(es)	Patricia Rufino Oliveira.				
Momento atual	<input type="checkbox"/> 2º semestre	<input checked="" type="checkbox"/> 3º semestre	<input type="checkbox"/> 4º semestre	<input type="checkbox"/> 5º semestre	<input type="checkbox"/> 6º semestre
Qualificação	<input type="checkbox"/> Qualificação já realizada em: ____/____/____ <input checked="" type="checkbox"/> Qualificação planejada para: <u>20/10/2016</u>				
Defesa	Prazo máximo para depósito: <u>05/02/2018</u> Depósito planejado para: <u>20/10/2017</u>				
Linha e Área de pesquisa	<input type="checkbox"/> Gestão e desenvolvimento de Sistemas: <input type="checkbox"/> BD <input type="checkbox"/> Eng. de Software		<input type="checkbox"/> Gestão de SI <input type="checkbox"/> IHC		<input checked="" type="checkbox"/> Inteligência de Sistemas: <input checked="" type="checkbox"/> IA <input type="checkbox"/> Proc. Gráfico <input type="checkbox"/> Rec. de Padrões
Área de aplicação	<input type="checkbox"/> Ambientes Corporativos <input type="checkbox"/> Bioinformática <input type="checkbox"/> Biometria <input type="checkbox"/> Economia	<input type="checkbox"/> Educação <input type="checkbox"/> Educação a Distância <input type="checkbox"/> Internet <input type="checkbox"/> Jogos	<input type="checkbox"/> Linguagem Natural <input type="checkbox"/> Linguística <input type="checkbox"/> Processos de Negócio <input type="checkbox"/> Química	<input type="checkbox"/> Redes Sociais <input type="checkbox"/> Robótica <input type="checkbox"/> Saúde <input checked="" type="checkbox"/> Quimioinformática	
Publicações					

DESCRIÇÃO DO PROJETO DE PESQUISA	
Contextualização / motivação	Estudos voltados à química medicinal necessitam de informações dos compostos referentes às propriedades químicas e aos ensaios biológicos que estão disponibilizados em diversas bases de dados.
Problema de pesquisa	Por os dados serem provenientes de diversas bases de dados, nem sempre é fácil determinar se apresentam correspondência entre eles, uma vez que, não existe um modelo capaz de descrevê-los adequadamente.
Objetivo geral da pesquisa	Descrever conceitos e relacionamentos de compostos químicos de acordo com sua atividade biológica, associando as informações de acordo com o método de obtenção (cálculo) dos descritores químicos importantes para estudos em QSAR (Quantitative Structure Analysis Relationships) para determinado alvo.
Trabalhos relacionados	<p>Conceitos de química medicinal: MONTANARI, Carlos A. Química Medicinal. Métodos e fundamentos em planejamento de fármacos. São Paulo: Editora da USP, 2011.</p> <p>Formalização de ensaios biológicos: VEMPATI, Uma D. et al. Formalization, annotation and analysis of diverse drug and probe screening assay datasets using the BioAssay Ontology (BAO). PLoS one, v. 7, n. 11, p. e49198, 2012.</p> <p>Formalização de dados químicos: HASTINGS, Janna et al. The chemical information ontology: provenance and disambiguation for chemical data on the biological semantic web. PLoS One, v. 6, n. 10, p. e25513, 2011.</p>
Justificativa e relevância	Devido ao embasamento teórico suportado por uso de uma ontologia, os dados que estão dispostos em diversas bases de dados podem possuir a mesma anotação e formalização. Além de auxiliar pesquisadores que não possuem conhecimento teórico na química a compreender a relevância dos dados.
Proposta para Solução	(i) será proposta uma abordagem que descreva os dados químicos e biológicos dos compostos químicos; (ii) integração com ontologias já existentes.
Dados	Para o projeto de pesquisa será utilizado conjuntos de dados de compostos químicos a fim de organizar os dados de acordo com sua atividade biológica e os métodos de obtenção de seus descritores.
Validação	Avaliar a estrutura da proposta de acordo com a documentação desenvolvida por meio de um frame.
Limitações	Os conjuntos de dados de Química Medicinal podem não possuir os descritores já calculados. Contudo a falta de dados não impede que os demais dados possam ser padronizados, o que servirá para formalizar as anotações referentes aos dados que poderão ser incluídos posteriormente.
Resultados esperados	Contribuições científicas: Espera-se que a integração e formalização dos dados químicos e biológicos suportado pela proposta auxiliem os estudos em QSAR no planejamento de medicamentos.

Contribuições tecnológicas: Espera-se que a ontologia por meio de sua representação formal e da integração dos dados químicos e biológicos.

MÉTODO DE PESQUISA [para cada item, marque todas as opções adequadas para seu projeto]

Gênero	<input type="checkbox"/> Pesquisa teórica	<input type="checkbox"/> Pesquisa prática	<input checked="" type="checkbox"/> Pesquisa empírica	<input type="checkbox"/> Pesquisa metodológica
Natureza	<input type="checkbox"/> Pesquisa básica/pura	<input checked="" type="checkbox"/> Pesquisa aplicada		
Objetivo	<input type="checkbox"/> Pesquisa descritiva	<input checked="" type="checkbox"/> Pesquisa exploratória	<input type="checkbox"/> Pesquisa explicativa	<input type="checkbox"/> [outro – escrever]
Abordagem	<input type="checkbox"/> Pesquisa quantitativa	<input checked="" type="checkbox"/> Pesquisa qualitativa	<input type="checkbox"/> Pesquisa mista (quali-quant)	
Procedimento(s) técnico(s)	<input type="checkbox"/> Pesquisa experimental <input type="checkbox"/> Pesquisa bibliográfica <input type="checkbox"/> Pesquisa documental <input type="checkbox"/> Pesquisa <i>ex-post-facto</i> <input type="checkbox"/> Pesquisa de levantamento	<input type="checkbox"/> Pesquisa com <i>survey</i> <input type="checkbox"/> Estudo de caso <input type="checkbox"/> Pesquisa participante <input type="checkbox"/> Pesquisa-ação <input type="checkbox"/> Pesquisa etnográfica	<input type="checkbox"/> Pesquisa netnográfica <input type="checkbox"/> Teoria fundamentada em dados (<i>grounded theory</i>) <input checked="" type="checkbox"/> Ciência do projeto (<i>Design science research</i>) <input type="checkbox"/> [outro – escrever]	
Fonte(s) de dados	<input checked="" type="checkbox"/> pesquisa de laboratório	<input type="checkbox"/> pesquisa de campo	<input type="checkbox"/> pesquisa bibliográfica	<input type="checkbox"/> [outro – escrever]
Técnica(s) / Instrumento(s) de coleta de dados	<input type="checkbox"/> medição <input type="checkbox"/> questionário <input type="checkbox"/> entrevista <input type="checkbox"/> grupos focais	<input type="checkbox"/> formulário <input checked="" type="checkbox"/> <i>benchmark</i>	<input type="checkbox"/> observação (direta / participante) <input type="checkbox"/> diário de campo / notas de campo <input type="checkbox"/> análise documental (ou de artefatos) <input type="checkbox"/> [outro – escrever]	
Técnica(s) de análise de dados	Análise quantitativa: <input checked="" type="checkbox"/> Estatística descritiva <input type="checkbox"/> Estatística inferencial <input type="checkbox"/> [outro – escrever]	Análise qualitativa: <input type="checkbox"/> Análise de conteúdo <input type="checkbox"/> Análise do discurso <input type="checkbox"/> [outro – escrever]		

CRONOGRAMA [altere conforme necessário]

	2015												2016												2017												
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
Estudo da literatura																																					
Revisão sistemática																																					
Definição da proposta																																					
Execução da proposta																																					
Coleta/obtenção de dados																																					
Análise dos dados																																					
Validação da proposta																																					
Preparo da qualificação																																					
Exame de qualificação																																					
Escrita da dissertação																																					
Escrita de artigo																																					
Depósito da dissertação																																					
Defesa da dissertação																																					

ⁱ Esta ficha é uma adaptação da usada no “VIII Workshop de Teses e Dissertações em Sistemas de Informação (WTDSI 2015)” realizado como parte do “XI Simpósio Brasileiro de Sistemas de Informação (SBSI 2015)”