

Programa Asignatura Electiva:

**Estadística y Programación para Químicos**, Prof. Roy J. Little

Tema 1. Filosofía del Experimentalista. Fenomenología de Husserl<sup>1</sup> y de Merleau-Ponty. Fenomenología Experimental de Ihde<sup>2</sup>. Aplicaciones de la Fenomenología en la ciencia. 8 horas

Tema 2. Introducción a la Programación Digital<sup>3</sup>. Adiestramiento en el lenguaje Python<sup>4</sup>: Tipos de datos, variables, expresiones, comandos; Funciones; Pruebas condicionales, Iteración; lectura y escritura de archivos. 12 horas

Tema 3. Introducción a la Programación Estadística<sup>5</sup>. El lenguaje R<sup>6</sup> para la Estadística. Regresión lineal simple y múltiple; Componentes principales, Análisis de factores, Discriminación y Clasificación. Introducción a Redes Neuronales<sup>7</sup> 12 horas

Tema 4. Programas para Químicos. El paquete MOPAC<sup>8</sup>. Los programas Ghemical<sup>9</sup> y PyMol<sup>10</sup>. 10 horas.

La evaluación de los estudiantes de la asignatura se basará en un trabajo, individualizado, después de cada tema, para ser entregado a una semana después de la terminación del tema.

Programa Asignatura Electiva:

**Modelaje Molecular y Relaciones Cuantitativas Estructura-Actividad**, Prof. Roy J. Little

Tema 1. Modelaje Molecular. Introducción a la estructura Protéica y la base de datos Protein Data Bank. Programas para visualización de las estructuras: Rasmol<sup>11</sup> y VMD<sup>12</sup>. 14 horas

Tema 2. Programas para el análisis de interacción entre proteínas y sus ligandos: Autodock<sup>13</sup>, Tinker<sup>14</sup>, Dock<sup>15</sup>, Gromacs<sup>16</sup>, NAMD<sup>17</sup>. 14 horas

Tema 3. Análisis Cuantitativa de Relaciones Estructura-Actividad en Fármacos<sup>18</sup>. La ecuación Hansch<sup>19</sup>. Análisis Free-Wilson<sup>20</sup>. Métodos modernos: CoMFA, PLS<sup>21</sup> (cuadrados mínimos parciales o proyección de estructuras latentes), Redes Neuronales y su aplicación en QSAR. 14 horas

La evaluación del estudiante se basará en la presentación de un seminario al finalizar la asignatura, relacionado a un tema por escogerse, en el campo de diseño de fármacos.

### **Discusión de las Electivas**

Una introducción filosófica se piensa necesaria debido al carácter especulativo del tema. La interpretación de estudios de actividad biológica y el modelaje de las interacciones fármaco-receptor forma parte del campo de la inteligencia artificial. En el campo, las interpretaciones de resultados experimentales son muy divergentes y una preparación filosófica ayudaría al estudiante de desarrollar opiniones informados.

El propósito de las dos asignaturas electivas es preparar el estudiante para llevar a cabo

investigación en el campo de modelaje molecular, aplicado al área de las relaciones cuantitativas entre estructura química y la actividad biológica, conocido por sus siglas en Inglés, QSAR o sea Quantitative Structure-Activity Relationships. Siendo que el ambiente nuestro es universitario y no la industria privada, se hará un enfoque en métodos computacionales abiertos, aprovechándose así en el sistema operativo GNU-Linux, y varios programas y utilidades que se basan en dicho sistema y que se caracterizan por ser abiertos y colaborativos. Así, también, al uso del internet como medio de comunicación científica, se hará un énfasis importante. Así, el estudiante tiene la oportunidad de participar activamente in uno de los movimientos sociales mundiales más importantes de la actualidad, el movimiento de software libre (Free Software Movement, FSM, en Inglés).

El campo de estudios QSAR es especializado y, para un candidato a la licenciatura en química, su preparación en los cursos básicos del pensum actual no es adecuada. Así, se han ideado dos asignaturas electivas, la primera como materia recuperativa, de la programación y estadística que no se tratan en el pensum actual. Los temas son imprescindibles para un buen empeño en el campo del QSAR. La segunda electiva entonces trata específicamente el campo de modelaje molecular, como se aplica en el área de diseño de fármacos. A pesar de lo especializado del tema, los métodos que se tratan son de uso muy extenso hoy en día, tratándose de temas de la inteligencia artificial y sistemas expertos, entre otros.

## BIBLIOGRAFÍA

### 1. **The Cambridge Companion to Husserl**

B. Smith and D.W. Smith, eds., Cambridge University Press, 1995

### 2. **Experimental Phenomenology**

D. Ihde, SUNY Press, 1986

### 3. **How to Think Like a Computer Scientist (Learning with Python)**

Allen Downey, Jeffrey Elkner, Chris Meyers  
Green Tea Press, Wellesley, Massachusetts, 2002

### 4. **Direcciones Internet de Python**

<http://diveintopython.org/es/>

<http://www.python.org/doc/NonEnglish.html>

[http://users.servicios.retecal.es/tjavier/python/Un\\_poco\\_de\\_Python.html](http://users.servicios.retecal.es/tjavier/python/Un_poco_de_Python.html)

<http://www.python.org/doc/NonEnglish.html#spanish>

### 5. **Applied Multivariate Statistical Analysis, 2<sup>nd</sup> Ed.**

Richard A. Johnson, Dean W. Wichern  
Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1988

6. <http://www.r-project.org/>

### 7. **Neural Networks in Chemistry and Drug Design, 2<sup>nd</sup> Ed.**

Jure Zupan and Johann Gasteiger  
Wiley-VCH, Weinheim, 1999

8. <http://www.ccl.net/cca/software/LINUX/mopac7/index.shtml>

9. <http://www.uku.fi/~thassine/ghemical/>

10. <http://PyMol.sourceforge.net/>

11. <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/>

12. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

13. <http://www.scripps.edu/pub/olson-web/doc/autodock/>

14. <http://dasher.wustl.edu/tinker/>

15. <http://www.cmpharm.ucsf.edu/kuntz/kuntz.html>

16. <http://www.gromacs.org/>

17. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

18.<http://www.qsar.org/>

19.Tute, M.S., "Principles and Practice of Hansch Analysis: A Guide to Structure-Activity Correlation for the Medicinal Chemist", **Advances in Drug Research**, **6**, 1-77 (1971).

20.Lewi, P.J., "Multivariate Data Analysis in Structure-Activity Relations", **Drug Design**, **X**, 307-342 (1980).

21.Cramer, R.D. III, D.E. Patterson, F.D. Bunce, "Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA). 1. Effect of Shape on Binding of Steroids to Carrier Proteins", **J. Am. Chem. Soc.**, **110**, 5959-5967 (1988).