



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Predicción de bioactividad			
Clave: No llenar este campo	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos:
Carácter: Optativa de elección	Horas por semana	Total horas/semana	Total horas/semestre
Tipo: Teórico	Teoría:	Práctica:	
	3	0	
Modalidad: CURSO HÍBRIDO (PRESENCIAL, VIRTUAL)		Duración del programa: 16 semanas	

Actividad académica con seriación antecedente:
Objetivo general: Conocer los fundamentos, las metodologías y las fuentes de información necesarios para generar modelos predictivos de bioactividad.
Objetivos específicos:
<ul style="list-style-type: none"> Entender la importancia del manejo de bases de datos en química Conocer las metodologías empleadas en la predicción de moléculas bioactivas

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Conceptos básicos de estadística	6	
2	Bases de datos usadas en la predicción de bioactividad	6	
3	Descriptores moleculares y representación molecular	6	
4	Análisis multivariable	6	
5	Algoritmos usados en aprendizaje de máquina	9	
6	Métodos metaheurísticos	9	
7	Validación	6	
Total de horas teóricas:			
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:			

Bibliografía básica actualizada:	
Cherkasov, A. et al. J. Med. Chem. 2014, 57, 4977. R. Nisbet, J. Elder, and G. Miner (Eds) Statistical Analysis and Data Mining Applications. Academic Press 2009. Eddaly, M., Jarbouli, B. Siarry, P. (Eds) Metaheuristics for Machine Learning, Springer 2023.	
Bibliografía complementaria:	
Sugerencias didácticas:	Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:
Exposición oral (X)	Exámenes parciales ()
Exposición audiovisual ()	Examen final escrito (X)
Ejercicios dentro de clase (X)	Trabajos y tareas fuera del aula ()
Ejercicios fuera del aula ()	Exposición de seminarios por los alumnos (X)
Seminarios ()	Participación en clase (X)
Lecturas obligatorias (X)	Asistencia (X)
Trabajo de investigación ()	Seminario ()
Prácticas de taller o laboratorio ()	Otras: ()
Prácticas de campo ()	
Otras: ()	