



<b>JUAREZ FLORES ANGEL</b> Integrante	Hospital Infantil de México 'Federico Gómez'	Entropía multivariada para analizar expresión genética e interacciones proteína-proteína en distintos tipos de cáncer Entropía multivariada para analizar expresión genética e interacciones proteína-proteína en distintos tipos de cáncer
<b>JURADO CARRERA OMAR DAVID</b> Integrante	Departamento de Biología Celular, CINVESTAV	Uso de inteligencia artificial para la predicción de proteínas intrínsecamente desordenadas Uso de inteligencia artificial para la predicción de proteínas intrínsecamente desordenadas
<b>PALACIOS PÉREZ MIRYAM</b> Integrante	Instituto de Investigaciones Biomédicas	Proteoma y RNAoma antes del Último Ancestro Universal. Proteoma y RNAoma antes del Último Ancestro Universal.

## Introducción

El objetivo del curso es enseñar los Fundamentos de la Teoría de Sistemas Dinámicos y Complejos aplicables a fenómenos biológicos. Los procesos biológicos son sistemas no lineales que conducen a lo que se llama sistemas complejos. En esencia todos los fenómenos biológicos son estocásticos y no lineales y por lo tanto es necesario entender la matemática correspondiente para poder modelarlos. En la actualidad, la literatura científica está inundada de modelos novedosos sobre la naturaleza de las dinámicas no lineales de sistemas biológicos. Se enseñará cómo plantear un modelo matemático de Biología de Poblaciones y Epidemias. Dos tópicos nuevos que incluye este curso son estudiar la complejidad y la estabilidad de la microbiota, y la predicción de proteínas intrínsecamente desordenadas. Se enseñará cómo manejar redes de proteína-proteína en distintos tipos de cáncer. Se enseñará cómo usar métodos bioinformáticos para estudiar la evolución de proteína y de RNA.

Requisitos: Cálculo diferencial e integral; Álgebra Lineal; Ecuaciones Diferenciales Ordinarias. La matemática será explicada con detalle y se asumirá que el estudiante domina la biología, no la matemática.

NOTA: A los alumnos que lo soliciten se les facilitará un material de apoyo correspondiente a estos temas.

## Temario

1. Teoría de sistemas dinámicos (Marco A. José). Once sesiones de 2.5 horas

I Modelos matemáticos y estabilidad

Conceptos básicos; Sobre la importancia de ser No lineal; Puntos fijos; Análisis lineal de estabilidad; Soluciones de ecuaciones diferenciales en la computadora (lineales, no lineales, sistema de ecuaciones diferenciales); Sistemas continuos y sistemas discretos.

2. Bifurcaciones

Definiciones; Tipos de bifurcaciones: de silla, transcriticals, subcriticals, de Hopf; El plano Beta-Gamma.

3. Definiciones; Sistemas conservativos; Sistemas reversibles; Ciclos límite.

4. Dinámica de poblaciones; extinción de poblaciones; modelos epidemiológicos

SIR y SEIR(S).

5. Mapeos en una dimensión

6. La ecuación logística; puntos fijos y telarañas;

7. Matrices aleatorias y método Monte Carlo para estudiar la complejidad y biodiversidad de la ecología de los microbiomas.

Se proporcionarán y se utilizarán programas computacionales en Mathematica y Matlab.

APLICACIONES EN BIOLOGÍA

1. Dr. Angel Juárez Flores: Entropía multivariada para analizar expresión genética e interacciones proteína-proteína en distintos tipos de cáncer. Dos sesiones de 2.5 horas cada una

2. Dra. Miryam Palacios-Pérez: Proteoma y RNAoma antes del Último Ancestro Universal.

Cinco sesiones de 2.5 horas cada una. Métodos bioinformáticos para la modelación estructural de proteínas y RNA. Cuatro sesiones de 2.5 horas cada una.

3. Dr. Omar David Jurado: Uso de inteligencia artificial para la predicción de proteínas intrínsecamente desordenadas. Dos sesiones de 2.5 horas cada una.

## Bibliografía

1. R. Liu et al. Identifying critical transitions and their leading biomolecular networks in complex diseases. *Sci Rep.*, 2 (2012) 813. doi:10.1038/srep00813.
2. Feigenbaum, M.J. (1983). Universal behavior in nonlinear systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 7, 16-39.
3. A. Juárez-Flores, M. V. José. Multivariate Entropy Characterizes the Gene Expression and Protein-Protein Networks in Four Types of Cancer. *Entropy*, 20 (2018) 154. doi:10.3390/e20030154.
4. Juárez-Flores, A. et al. (2021). Novel gene signatures for stage classification of the squamous cell carcinoma of the lung. *Scientific Reports*, 11(1), 4835. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-83668-1>
5. Palacios-Pérez M & José MV (2019); Palacios-Pérez M, José MV. The evolution of proteome: From the primeval to the very dawn of LUCA. *Biosystems*. 2019 Jul;181:1-10. doi: 10.1016/j.biosystems.2019.04.007.
6. Prosdociimi F, et al. (2020). The Ancient History of Peptidyl Transferase Center Formation as Told by Conservation and Information Analyses. *Life (Basel)* 5;10(8):134. doi: 10.3390/life10080134.

7. López-Cortés G.I., et al. Neutral evolution test of the spike protein of SARS-CoV-2 and its implications in the binding to ACE2. *Scientific Reports* 2021. PMID: 34552110.
8. Dayhoff G.W. et al. Rapid prediction and analysis of protein intrinsic disorder. *Protein Sci.* 2022, 31 (12), e4496. <https://doi.org/10.1002/pro.4496>
- Referencias:
1. R. Liu et al. Identifying critical transitions and their leading biomolecular networks in complex diseases. *Sci Rep.*, 2 (2012) 813. doi:10.1038/srep00813.
  2. Feigenbaum, M.J. (1983). Universal behavior in nonlinear systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 7, 16-39.
  3. A. Juarez-Flores, M. V. José. Multivariate Entropy Characterizes the Gene Expression and Protein-Protein Networks in Four Types of Cancer. *Entropy*, 20 (2018) 154. doi:10.3390/e20030154.
  4. Juarez-Flores, A. et al. (2021). Novel gene signatures for stage classification of the squamous cell carcinoma of the lung. *Scientific Reports*, 11(1), 4835. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-83668-1>
  5. Palacios-Pérez M & José MV (2019); Palacios-Pérez M, José MV. The evolution of proteome: From the primeval to the very dawn of LUCA. *Biosystems*. 2019 Jul;181:1-10. doi: 10.1016/j.biosystems.2019.04.007.
  6. Prosdocimi F, et al. (2020). The Ancient History of Peptidyl Transferase Center Formation as Told by Conservation and Information Analyses. *Life (Basel)* 5;10(8):134. doi: 10.3390/life10080134.
  7. López-Cortés G.I., et al. Neutral evolution test of the spike protein of SARS-CoV-2 and its implications in the binding to ACE2. *Scientific Reports* 2021. PMID: 34552110.
  8. Dayhoff G.W. et al. Rapid prediction and analysis of protein intrinsic disorder. *Protein Sci.* 2022, 31 (12), e4496. <https://doi.org/10.1002/pro.4496>
  9. López-Cortés GI et al. (2022). The Spike Protein of SARS-CoV-2 Is Adapting Because of Selective Pressures. *Vaccines (Basel)* 10(6):864. doi: 10.3390/vaccines10060864.
  10. May RM (1972) Will a large complex system be stable? *Nature* 238:413–414.
  11. May RM (2001) Stability and complexity in model ecosystems.
  12. Rhor RP, et al. (2014). On the structural stability of mutualistic systems. *Science* 345: 6195.
  13. Bashan A. et al. (2016). Universality of human microbial dynamics. *Nature* 534: 259.

Princeton University Press, Princeton

Libros de texto:

- [1] P. Blanchard, R. Devaney, and G. Hall. (2012) *Differential equations*, Books/Cole. USA. ISBN- 13: 978-0-495-56198-9
- [2] S.H. Strogatz. *Nonlinear dynamics and chaos*. Westviews Press, Perseus Books Group, (1994).
- [3] Devlin K. *Mathematics: The Science of patterns*. Scientific American Library (1994). ISSN 1040-3213.
- [4] Schroeder, Manfred Robert; *Fractals, chaos, power laws\_ minutes from an infinite paradise*; 1991; W.H. Freeman.

## Observaciones

Se grabarán todas las clases vía Zoom y luego se enviarán a todo el alumnado. Se compartirá también el material de cada clase acompañada de artículos pertinentes. Se enviarán antes de cada clase artículo que faciliten la comprensión de cada tema.