

De: Aaron Hernández Cid <aaron.hernandezcid@tec.mx>

Fecha: lunes, 10 de enero de 2022, 16:36

Para: Luis Eduardo Falcón Morales <luis.eduardo.falcon@tec.mx>, Víctor Manuel Treviño Alvarado <vtrevino@tec.mx>, Juan Emmanuel Martínez Ledesma <juanemmanuel@tec.mx>, Liliana Mireya Aguilar Castro <aguilar.liliana@tec.mx>, Adolfo Centeno Tellez <a.centeno@tec.mx>, Sandra Teresita Martín del Campo Barba <smartinde@tec.mx>, Diana Sampogna Mireles <diana.sampogna@tec.mx>, Julián Alejandro Yunes Rojas <jayunes@tec.mx>, Victor Hugo Benitez Baltazar <v.benitez@tec.mx>, Luis Jiménez Ángeles <luis\_jimenez@tec.mx>, Miriam Irene Jimenez Perez <miriamjim@tec.mx>, Silvia Lorena Montes Fonseca <silvalorena.montes@tec.mx>, Julián de la Rosa Millán <juliandlrn@tec.mx>, Ángel Iván Hernández Aguirre <aihernand@tec.mx>, Flavio Fernando Contreras Torres <contreras.flavio@tec.mx>, Ana Victoria Valdivia Padilla <victoria.valdivia@tec.mx>, Yocanxóchitl Perfecto Avalos <yocan@tec.mx>, María Guadalupe Columba Navarrete Bernal <columba.navarrete@tec.mx>, Paola Isabel Angulo Bejarano <pangulobe@tec.mx>, Jaime Alberto Fraustro Valdez <jfraustro@tec.mx>, Roberto Ramírez Niño <roberto.ramirez.nino@tec.mx>, Rafael Espinosa Castañeda <rafael.espinosa.castaneda@tec.mx>, Paola Guadalupe Gordillo Guerra <Paola.gordillo@tec.mx>, Sujay Paul <spaul@tec.mx>, Ana Laura Torres Huerta <atorresh@tec.mx>, Damián Moctezuma Enriquez <Dmoctezu@tec.mx>, Karla Selene Morán Santibáñez <kmoran@tec.mx>, Mariana Flores García <mariana.flores@tec.mx>, Tania Rodríguez Calzada <t.calzada@tec.mx>, Juan Alfonso Campos Gómez <alfonso.campos@tec.mx>, Cesar Raul Garcia Jacas <crjacas@tec.mx>, jluisjm@gmail.com <jluisjm@gmail.com>, m.a.h.almadi <m.a.h.almadi@gmail.com>, César Armando Puente Garza <ca.puente@tec.mx>, Moisés Rangel Silva <moises.rangel@tec.mx>, Iván Pacheco Soto <ipacheco@tec.mx>, Olga López Ríos <ollopez@tec.mx>, Elda Graciela Gómez López <elda.gomez@tec.mx>, Carmen Lizzeth Salinas Salazar <carmen.salinas@tec.mx>, Anely Herrera Peralta <anely@tec.mx>, Pedro Antonio Arau Carrada <pedro.arau@tec.mx>  
CC: Juan Arturo Nolasco Flores <jnolasco@tec.mx>

Asunto: Día 1 CADI : Asistencia y Comandos

Buenas tardes a todos,

Agradezco el entusiasmo y esmero profesores(as) que han puesto en el primer día del CADI, les quiero dejar el link de la asistencia para que la llenen el día de HOY:

<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfrNJzuC698yTVviYE9h4AfZlZ0gDJIE-Tekyb1ZkaVCEesVA/viewform>

Y también aprovecho para recapitular lo que se hizo hoy, por quienes aún tienen problemas en instalar cosas dejo a modo de pasos todo lo hecho el día de hoy:

1. Vayen y descarguen anaconda: <https://www.anaconda.com/products/individual>

Instalar ambiente:

1. Abran anacoda Prompt o terminal y escribe el siguiente comando

conda create -n cadi22 -y python=3.7 # importante que sea Python versión 7 ya que más arriba no funcionará rdkit

Instalar paquetes en su ambiente nuevo

1. En tu nuevo ambiente creado debes listar primero y activar  
conda env list #Permite ver el listado de los ambientes activos  
conda activate cadi22 #activa tu ambiente del cadi  
python #ve que versión de Python tiene instalada debe decir 3.7  
quit() #sal de tu ambiente

2. Ahora instala nuevos paquetes  
conda install jupyter notebook -y #instala jupyter  
conda install -c rdkit rdkit -y  
conda install scikit-learn -y  
conda install -c sepandhaghighi pycm -y

En Mac debe funcionar con

```
!pip install rdkit-pypi  
!pip install scikit-learn
```

Demonstración con archivos .mol .sdf

1. Bajen el archive zip y guardenlo en el mismo directorio de su ambiente para ello una vez terminada la instalación, cierren las terminales y vuelve a abrirlas y escribe  
conda activate cadi22

esto permite que ahora estes en el ambiente del cadi  
escribe

```
jupyter notebook #abre Jupyter  
ve en el menú desplegable de new y elige python3
```

en este momento ya estarás en el ambiente de google Chrome y puedes escoger el directorio donde estas trabajando, de preferencia donde descargaste el zip file.

Asegurate de esto escribiendo pwd que te indica la ruta del directorio de tu libreta de jupyter, después puedes desplegar los contenidos con ls y verás un listado.

El directorio que contiene tus archivos lo puedes especificar con

```
path="path/to/my/working/directory/"
```

Ahora debes descargar otras librerías de rdkit con

```
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw
from rdkit.Chem.Draw import IPythonConsole
from rdkit import rdBase
from rdkit import rdBase
```

Abrir la estructura de un archivo .mol o de un formato inchi (debe arrojar una estructura)

```
x=Chem.MolFromSmiles("CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O")
```

```
x1=Chem.MolFromSmiles("C1=CC=CC=C1")
```

```
x4=
```

```
Chem.MolFromInchi("InChI=1S/C29H31N7O.CH4O3S/c1-21-5-10-25(18-27(21)34-29-31-13-11-26(33-29)24-4-3-12-30-19-24)32-28(37)23-8-6-22(7-9-23)20-36-16-14-35(2)15-17-36;1-5(2,3)4/h3-13,18-19H,14-17,20H2,1-2H3,(H,32,37)(H,31,33,34);1H3,(H,2,3,4)")
```

Definir un objeto que contiene información que se usará después (aquí no se abre una estructura)

```
x2=Chem.SDMolSupplier(path+"aspirin.sdf")
```

```
x3=Chem.SmilesMolSupplier(path+"imatinib.smi", delimiter="\t", titleLine=True)
```

Ahora obtén el número de átomos

```
[mol.GetNumAtoms() for mol in x2 if mol is not None]
```

Espero que el pequeño tutorial sirva de repaso, mañana comenzaremos con pequeños grupos para recapitular lo anterior. Pido de favor que no olviden firmar su asistencia. Las clases ya se subieron al drive:

[https://drive.google.com/drive/u/0/folders/1jO8zGR7gUB-o5j\\_VFV5g9xKm\\_ZNQRl0U](https://drive.google.com/drive/u/0/folders/1jO8zGR7gUB-o5j_VFV5g9xKm_ZNQRl0U)

Saludos,

Aarón Hernández-Cid

Profesor

EIC Bioingeniería Toluca

Tecnológico de Monterrey

Tel: +52 (722) 279 9990 ext. 2169

Intercampus 80-865-2169

aaron.hernandezcid@tec.mx

El contenido de este mensaje de datos no se considera oferta, propuesta ni aceptación del Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey. El contenido de este mensaje de datos es confidencial y se entiende dirigido y para uso exclusivo del destinatario, por lo que no podrá distribuirse y/o difundirse por ningún medio sin la previa autorización del Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey. Si usted no es el destinatario, se prohíbe su utilización total o parcial para cualquier fin.

The content of this data transmission is not considered as an offer, proposal or acceptance of Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey. The content of this data transmission is confidential and it is intended to be delivered only to the addressee, therefore, it shall not be distributed and/or disclosed through any means without previous authorization of Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey. If you are not the addressee you are forbidden to use it, either totally or partially, for any purpose.