

PLAN DE ESTUDIOS

DATOS DEL CURSO			
Código:		Curso:	Químicas artificiales y auto-ensamblaje

Resumen
<p>El curso es de naturaleza teórico-práctica, y tiene como propósito aportar conceptos sobre auto-ensamblaje de partículas virtuales, utilizando herramientas computacionales como las químicas artificiales. La computación con químicas artificiales es una herramienta que permite simular procesos virtuales de reacciones químicas, dichas reacciones desencadenan procesos que pueden ser aplicados a la computación de información y la generación de procesos emergentes como el auto-ensamblaje. El estudiante tendrá la capacidad de implementar conceptos de la química en modelos de simulación para representar fenómenos de la naturaleza como la auto-organización, el auto-ensamblaje, y la replicación como los procesos que realiza la célula. El estudiante deberá realizar presentaciones acerca de los temas a tratar, implementará en el computador simulaciones de los procesos químicos estudiados, y al finalizar, deberá desarrollar un proyecto abordando un problema de ingeniería (Efatmaneshnik & Ryan, J., 2016; Hutton, 2002; Trifonov, 2011; Wagensberg, García Leal, & Lins de Barros, 2010).</p>

Contenido del curso

1. Conceptos básicos de químicas artificiales.
2. Computación con reacciones químicas artificiales.
3. La química de la vida.
 - a. ¿Qué es la vida?
 - b. Los componentes básicos de la vida.
 - c. Contribuciones de las químicas artificiales a la investigación del origen de la vida.
4. Evolución
 - a. Open-ended evolution
 - b. Auto-evolución y auto-ensamblaje
 - c. Crecimiento de la complejidad
5. Químicas artificiales bio-inspiradas
 - a. Cadenas basadas en químicas artificiales.

- b. Estructura espacial y movimiento en las químicas artificiales.
- 6. Auto-organización y fenómenos emergentes
 - a. Ejemplos de sistemas auto-organizados
 - b. Conceptos de auto-organización.
 - c. El fenómeno de emergencia, conceptos explicatorios.
- 7. Aplicaciones de las químicas artificiales
 - a. Principios de implementación
 - b. Búsqueda y optimización inspirada en química
 - c. Químicas artificiales y programación genética.
 - d. Computación química y bioquímica.

Metodología:

- Síntesis por parte del profesor y el alumno de los temas correspondientes a la clase.
- Discusión de los temas previamente preparados por el estudiante mediante lecturas de artículos o capítulos de libro.
- Desarrollo de exposiciones explicativas por parte del estudiante de los diversos temas de la asignatura.
- Uso por parte del estudiante de herramientas computacionales para implementación de algoritmos y aplicación de los mismo al tema de la tesis.
- Escritura de un artículo y un proyecto final con los resultados de la implementación de las herramientas aprendidas en clase.

Competencias del curso			
Ítem	Competencias generales del curso	Sub-ítem	Competencias específicas
1.	<i>Conceptos básicos de químicas artificiales.</i> El estudio de las químicas artificiales se origina a partir de los esfuerzos de entender el origen de la vida. Este ítem pretende introducir la formalización de este tipo de computación y el cómo modelar sistemas bajo este concepto.	1.1	Conceptos de química: Antes de discutir cómo construir químicas artificiales en el computador es necesario familiarizarse con los conceptos básicos de la química que pueden ser modelados.
		1.2	Estudio de los conceptos básicos de la física para interacción de partículas.

		1.3	Estructuras moleculares y uniones químicas.
2.	<i>La química de la vida:</i> El vínculo entre la química y la biología. Concatenación de los bloques primarios de la vida (monómeros) para generar cadenas largas de ADN, ARN	2.1	¿Qué es la vida? ¿Qué es energía?
		2.2	Componentes básicos de la vida. Proteínas, Nucleótidos. Diferenciación celular.
3.	<i>Evolución.</i> Comprender e integrar el concepto de evolución Darwiniana por selección natural	3.1	Selección y fitness
		3.2	Químicas artificiales para evolución
		3.3	Complejidad y open-ended evolution
		3.4	Auto-organización y auto-ensamblaje
4.	<i>Auto-organización y fenómenos emergentes – auto-ensamblaje-:</i> Definir e integrar el concepto de emergencia para la generación de comportamientos similares a la vida de auto-organización y auto-ensamblaje.	4.1	Estudio de sistemas auto-organizados.
		4.2	Conceptos explicativos de auto-organización
		4.3	Caos y complejidad
5.	<i>Aplicaciones de las químicas artificiales:</i> Enumerar y desarrollar las aplicaciones de químicas artificiales para optimización y búsqueda de	5.1	Principios de implementación
		5.2	Búsqueda y optimización inspirada en química

	generación de fenómenos emergentes.	5.3	Químicas artificiales y programación genética.
		5.4	Computación química y bioquímica.

Actividades

- **Semana 7.** Entrega de resumen de los conceptos de los componentes básicos de la vida.
- **Semana 10.** Ejercicio de implementación de simulación para generar fenómenos emergentes e identificarlos.
- **Semana 11.** Identificar el problema de su ejercicio y caracterizar el espacio de búsqueda, NP, NP-completo, NP-hard. Complejidad computacional Vs Complejidad del sistema.
- **Semana 12.** Taller ejercicio sobre división y diferenciación celular.
- **Semana 13.** Propuesta de proyecto final, simulación y computación con química computacional.
- **Semana 16.** Presentación y sustentación de artículo final.

Referencias
<p>Efatmaneshnik, M., & Ryan, J., M. (2016). AGeneralFramework for Measuring System Complexity. <i>Wiley Periodicals 2016</i>, 21(1), 13. https://doi.org/10.1002/cplx</p> <p>Hutton, T. J. (2002). Evolvable Self-Replicating Molecules in an Artificial Chemistry. <i>Artificial Life</i>, 8(4), 341–356. https://doi.org/10.1162/106454602321202417</p> <p>Trifonov, E. N. (2011). Vocabulary of definitions of life suggests a definition. <i>Journal of Biomolecular Structure & Dynamics</i>, 29(2), 259–66. https://doi.org/10.1080/073911011010524992</p> <p>Wagensberg, J., García Leal, A., & Lins de Barros, H. G. P. (2010). Individuals versus Individualities: A Darwinian Approach. <i>Biological Theory</i>, 5(1), 87–95. https://doi.org/10.1162/BIOT_a_00020</p> <p>WOLFANG BANZHAG (2015). Artificial chemistries. London, England: The MIT Press</p>