

---

# PROGETTO DI IDONEITÀ INFORMATICA PRATICA

---

Nome Cognome, aa 2015-2016, CdL CTF

## Sommario

Indice delle Figure.....	1
Indice delle Tabelle .....	2
1. Tamiflu.....	3
1.1 Caratteristiche generali.....	3
1.2 L'influenza aviaria del 2009/2010.....	4
2. Analisi Dati.....	5
3.Valium.....	6
3.1 Caratteristiche generali.....	6
4.Octave/Matlab.....	7
4.1 Il "for" loop .....	7
5. ABBA .....	8
5.1 Caratteristiche generali.....	8
5.2 Target Biologico.....	9

## Indice delle Figure

Figura 1 - il principio attivo del Tamiflu, disegnato con PubChem Sketcher importando il file *.mol dal drugbank database.....	3
Figura 2 - Mortalità durante l'influenza aviaria del 2009/2010, dati da Tabella 2. ....	4
Figura 3 - Il peso del cervello e quello corporeo di una serie di mammiferi sono linearmente correlati.....	5
Figura 4 - confronto tra frequenza di pesi corporei e frequenza di pesi cerebrali.....	5
Figura 5 - Il principio attivo del Valium.....	6

Figura 6 struttura da ChemBI file *.mol importato in PubChem Sketcher.....	8
Figura 7 - struttura dell'acido da ChemBI file *.mol importato in PubChem Sketcher e modificato nel suo sale di potassio. ....	8
Figura 8 - (a) Struttura cristallografica di BlaC-E166A legata covalentemente con Amoxicillin, (b) dettaglio del sito di legame del farmaco .....	9

## Indice delle Tabelle

Tabella 1 – I 4 target su cui opera il principio attivo del Tamiflu, come riportato nel DrugBank database.....	3
Tabella 2 - "Characteristics of pooled dataset of 29,234 patients hospitalised with A(H1N1)pdm09 virus infection included in mortality analysis" .....	4

# 1. Tamiflu

## 1.1 Caratteristiche generali

Secondo il foglietto illustrativo reso disponibile nel database dell'Agenzia Italiana del Farmaco<sup>1</sup> il

Tamiflu è generalmente usato negli adulti:

- Tamiflu è .....
- Tamiflu .....
- Tamiflu può .....

Il suo principio attivo è ....., la cui struttura molecolare è riportata in **Figura 1**. Secondo il DrugBank database<sup>3</sup>, questo principio attivo opera su 4 target distinti come riportato in **Tabella 1** (*NOTA: completare la tabella*).

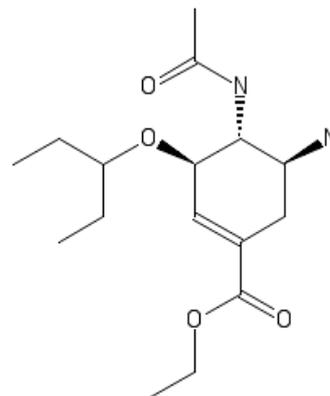


Figura 1 - il principio attivo del Tamiflu, disegnato con PubChem Sketcher<sup>2</sup> importando il file \*.mol dal drugbank database<sup>3</sup>.

Tabella 1 – I 4 target su cui opera il principio attivo del Tamiflu, come riportato nel DrugBank database<sup>3</sup>.

Index	Name	Organisms	Pharmacological Action
1			
2			
3			
4			

<sup>1</sup> <https://farmaci.agenziafarmaco.gov.it>

<sup>2</sup> <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html>

<sup>3</sup> <http://www.drugbank.ca/>

### 1.2 L'influenza aviaria del 2009/2010

Il target principale del Tamiflu è una proteina dell'Influenza A virus (strain A/Chile/1/1983 H1N1). Citando l'articolo di Ref.[1] "Neuraminidase inhibitors were widely used during the 2009–10 influenza A H1N1p andemic, but evidence for their effectiveness in reducing mortality is uncertain." I loro risultati di mortalità sono riportati in **Tabella 2** ed elaborati graficamente in **Figura 2**.

Tabella 2 - "Characteristics of pooled dataset of 29,234 patients hospitalised with A(H1N1)pdm09 virus infection included in mortality analysis"

Characteristic (denominator)	All hospitalised patients n (%)	Deceased n (%)	Survived n (%)
<b>Number of patients†</b>	29,234 (100.0)	2,784 (9.5)	26,450 (90.5)
<b>Number of male cases (n=29,226)†</b>	14,431 (49.4)	1,433 (51.5)	12,998 (49.1)

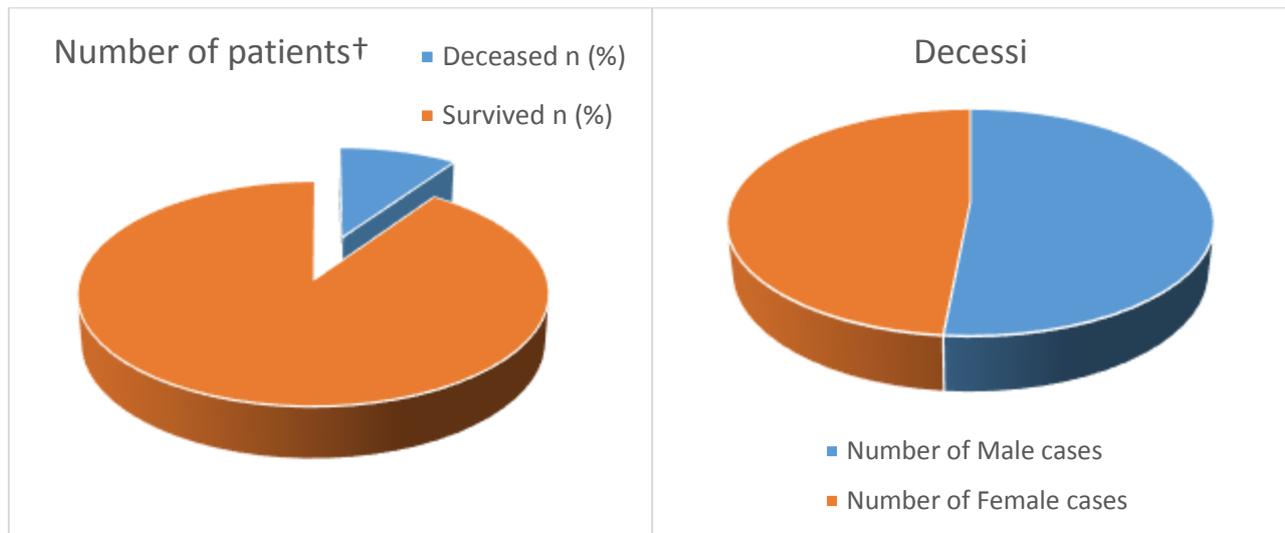


Figura 2 - Mortalità durante l'influenza aviaria del 2009/2010, dati da Tabella 2.

## 2. Analisi Dati

Il dataset presente al seguente link:

<http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/datasets/regression/x01.txt> riporta il peso del cervello e quello corporeo di 62 mammiferi (NOTA: salvare i dati come testo, usare il Blocco Note di Windows per sostituire le virgole ai punti, e aprire il file con Excel).

I dati sono elaborati in **Figura 3** e **Figura 4**.

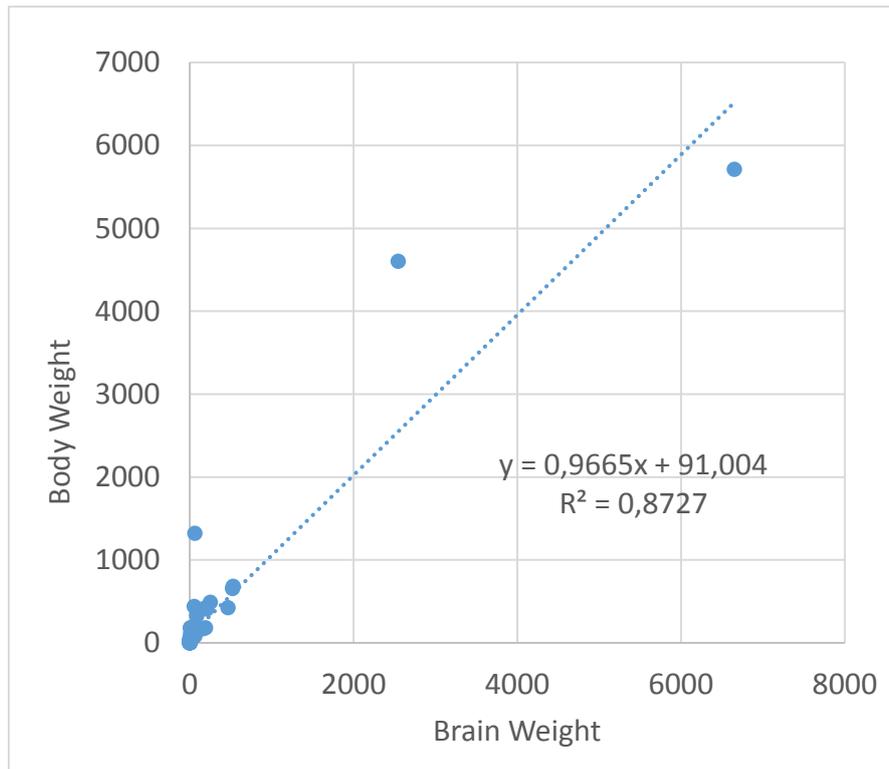


Figura 3 - Il peso del cervello e quello corporeo di una serie di mammiferi sono linearmente correlati.

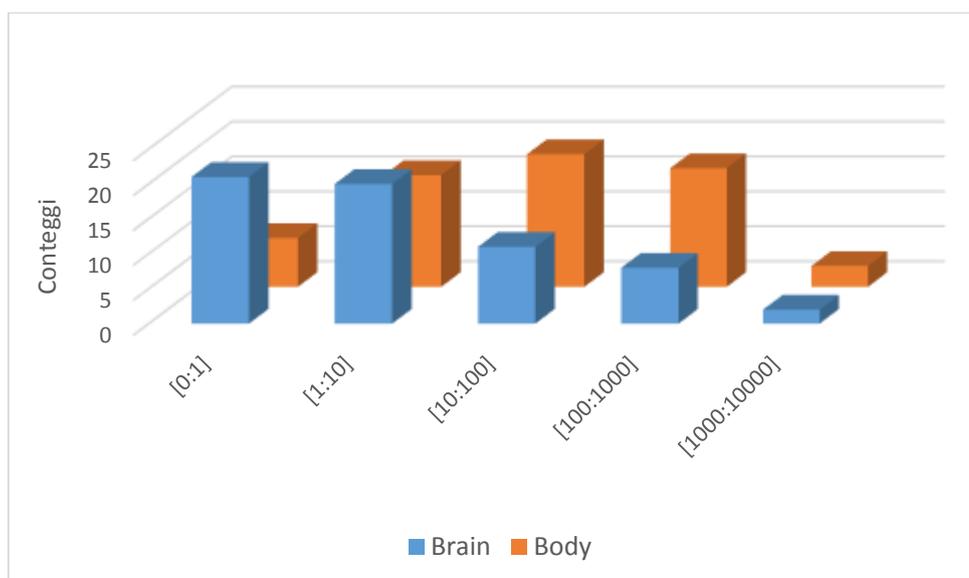


Figura 4 - confronto tra frequenza di pesi corporei e frequenza di pesi cerebrali.

## 3.Valium

### 3.1 Caratteristiche generali

Secondo il foglietto illustrativo reso disponibile nel database dell'Agenzia Italiana del Farmaco<sup>4</sup>, le indicazioni terapeutiche del Valium sono ....

Il suo principio attivo è .....e il codice SMILEY del principio attivo, che può essere trovato sul DrugBank database<sup>5</sup>, è ..... Dal codice SMILEY è possibile disegnare la sua struttura molecolare con PubChem Sketcher<sup>6</sup> (vedi Figura 5).

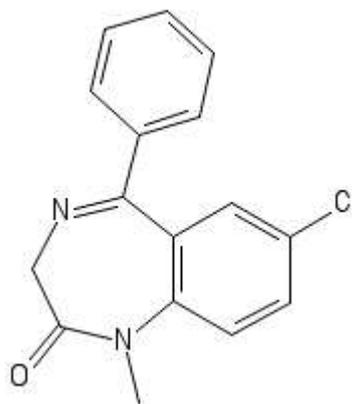


Figura 5 - Il principio attivo del Valium.

Sempre secondo il DrugBank Database<sup>5</sup>, la molecola interagisce con molteplici target. Il primo è ..... il cui UniProt ID è ..... e la cui funzione è “.....  
(NOTA: cliccando sull'uniprot ID è possibile ottenere le informazioni sulla proteina stessa)

---

<sup>4</sup> <https://farmaci.agenziafarmaco.gov.it/bancadatifarmaci/>

<sup>5</sup> <http://www.drugbank.ca/>

<sup>6</sup> <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html>

## 4. Octave/Matlab

Per usare l'emulatore di Octave, aprire <http://octave-online.net>

### 4.1 Il "for" loop

Un "for" loop si può utilizzare per contare i numeri da 1 a 10:

```
for k=1:10;    % per k da 1 a 10
    disp(k);   % mostra k
end           % fine del loop
```

Il "for" loop si può usare per creare una funzione sommatoria:

```
function y = somma(x); % crea la funzione somma per sommare tutti i numeri da 1 a x
    y=0;                % inizializza y (y sarà il risultato della funzione)
    for i=1:x;          % per i da 1 a x
        y=y+i;         % y(i) =y(i-1)+i
    end;               % fine del loop
end;                  % fine della funzione
```

questa funzione somma tutti i numeri da 1 a x:

$$y = 1 + 2 + 3 + \dots + (x-1) + x$$

che si può scrivere in modo compatto come:

$$y = \sum_{i=1}^x i$$

Testare la funzione calcolando la sommatoria di 3, 4, 21, 34, 51.

I risultati sono **6**, **10**, ..... rispettivamente.

## 5. ABBA

### 5.1 Caratteristiche generali

Secondo il "Riassunto delle caratteristiche del prodotto" reso disponibile nel database dell'Agenzia Italiana del Farmaco<sup>7</sup>, il farmaco esiste in due formati:

- .....
- .....

Secondo lo stesso document, l'ABBA contiene i seguenti principi attivi:

- ..... (Figura 6)
- ..... (Figura 7, NOTA: il nome inglese del principio attivo si può cercare su Wikipedia)

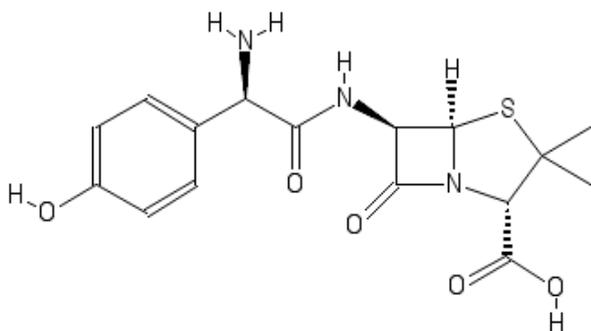


Figura 6 struttura da ChemBI<sup>8</sup> file \*.mol importato in PubChem Sketcher<sup>9</sup>

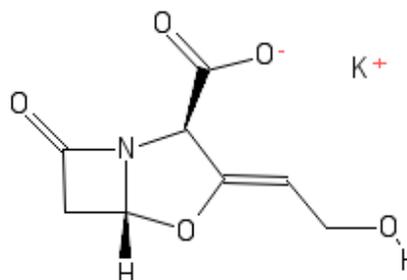


Figura 7 - struttura dell'acido da ChemBI<sup>8</sup> file \*.mol importato in PubChem Sketcher<sup>9</sup> e modificato nel suo sale di potassio.

<sup>7</sup> <https://farmaci.agenziafarmaco.gov.it/bancadatifarmaci/>

<sup>8</sup> <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>

<sup>9</sup> <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html>

## 5.2 Target Biologico

Secondo il DrugBank<sup>10</sup> il primo target del Amoxicillin è **Penicillin-binding protein 1A**. Cercando i due nel Protein Data Bank<sup>11</sup>, trovo la struttura cristallografica 3N7W la cui struttura e sito di legame sono riportati in Figura 8.

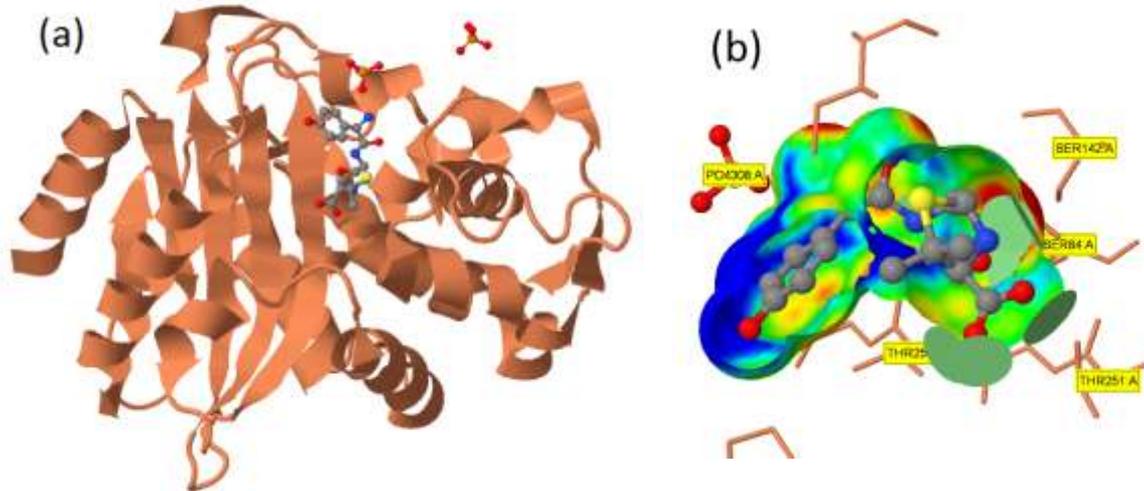


Figura 8 - (a) Struttura cristallografica di BlaC-E166A legata covalentemente con Amoxicillin, (b) dettaglio del sito di legame del farmaco

<sup>10</sup> <http://www.drugbank.ca/>

<sup>11</sup> <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>