

## ABREVIATURAS

<b>1A9U</b>	código en el <i>Protein Data Bank</i> de la MAPk p38 $\alpha$ con el ligando SB203580
$\chi^2$	análisis estadístico de residuales, chi cuadrada
<b>a_acc</b>	átomos aceptores de puentes de hidrógeno
<b>ADT</b>	auto dock tools
<b>AMBER</b>	<i>mechanical molecular forcefield</i> , diseñado para proteínas
<b>a_nS</b>	número de átomos de azufre
<b>ATF2</b>	factor 2 activador de transcripción
<b>ATP</b>	trifosfato de adenosina
<b>b_ar</b>	número de enlaces aromáticos
<b>b_double</b>	número de dobles enlaces
<b>chi1_C</b>	descriptor de conectividad
<b>CSAID</b>	<i>citokine supressor antiinflammatory drug</i> , fármacos supresores de citocinas
<b>CYP450</b>	citocromo P450
<b>Elk1</b>	proteína Ets-like 1
<b>ERK</b>	cinasa regulada extracelularmente
<b>GA</b>	algoritmo genético tradicional darviniano
<b>GA-LS</b>	algoritmo genético híbrido con búsqueda local
<b>IL-1<math>\beta</math></b>	interleucina 1 – beta
<b>ICE</b>	enzima convertidora de proIL-1 $\beta$
<b>JNK/SAPK</b>	cinasa amino terminal c-Jun / cinasa activada por estrés
<b>LGA</b>	algoritmo genético lamarckiano

<b>LOO</b>	<i>leave one out</i>
<b>LPS</b>	lipopolisacárido
<b>LS</b>	búsqueda local ( <i>local search</i> )
<b>MAP</b>	proteína activada por mitógeno
<b>MAPk</b>	proteína cinasa activada por mitógenos
<b>MAPk p38<math>\alpha</math></b>	proteína cinasa activada por mitógeno de la familia p38 isoforma alfa
<b>Met109</b>	aminoácido metionina en posición 109 del receptor del modelo 1A9U.pdb
<b>MKK3</b>	MAP cinasa cinasa isoforma 3
<b>MKK6</b>	MAP cinasa cinasa isoforma 6
<b>MMFF94s</b>	<i>mechanical molecular forcefield</i> , diseñado para moléculas pequeñas
<b>MOE</b>	<i>molecular operating environment</i>
<b>NSAID</b>	<i>non steroidal antiinflammatory drugs</i> , antiinflamatorios no esteroideos
<b>PCH</b>	esquema polaridad-carga-hidrofobicidad
<b>PDB</b>	<i>Brookhaven Protein Data Bank</i>
<b>PEOE_PC-</b>	suma de todas las cargas parciales, tipo Gasteiger.
<b>pIC<sub>50</sub></b>	-Log de la concentración inhibitoria 50
<b>pka</b>	-Log de la constante de disociación ácida
<b>QSAR</b>	<i>quantitative structure activity relationship</i>
<b>Ras-GTP</b>	proceso de activación celular Ras-Trifosfato de Guanina
<b>SA</b>	método de Monte Carlo ( <i>simulated annealing</i> )
<b>SAR</b>	<i>structure activity relationships</i>
<b>SB203580</b>	ligando inhibidor de la MAPk p38 $\alpha$ elaborado por Gallagher y sus colaboradores.
<b>Ser189</b>	aminoácido serina en posición 189 del receptor del modelo 1A9U.pdb

<b>SK&amp;F</b>	empresa farmacéutica <i>Smith Kline &amp; French</i>
<b>SK&amp;F86002</b>	ligando inhibidor de la MAPk p38 $\alpha$ sintetizado por SK&F
<b>std_dim2</b>	<i>standard dimension 2</i>
<b>TACE</b>	enzima convertidora de pro-TNF $\alpha$
<b>TNF-<math>\alpha</math></b>	factor de necrosis tumoral alfa
<b>Thr181</b>	aminoácido treonina en posición 181 del receptor del modelo 1A9U.pdb
<b>Tyr182</b>	aminoácido tirosina en posición 182 del receptor del modelo 1A9U.pdb
<b>UV</b>	luz ultravioleta
<b>Z</b>	análisis estadístico de valores z
<b>\$PRED</b>	valor de pIC <sub>50</sub> calculado por la ecuación lineal
<b>\$RES</b>	diferencia entre el valor de pIC <sub>50</sub> experimental y pIC <sub>50</sub> calculado por la ecuación lineal de MOE
<b>\$Z-SCORE</b>	valor de Z para los ligandos