

# FARMACOINFORMÁTICA

---

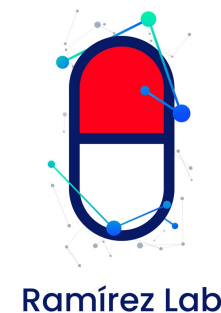
**David Ramírez**

[dramirezs@udec.cl](mailto:dramirezs@udec.cl)

***Web lab:*** [ramirezlab.github.io](https://ramirezlab.github.io)



*Pharmacoinformatics & Drug Design Lab  
Departamento de Farmacología  
Facultad de Ciencias Biológicas  
Universidad de Concepción*



## Conferencistas Internacionales Invitados



**Dr. David Ramírez**

Profesor Asistente  
Departamento de Farmacología  
Facultad de Ciencias Biológicas  
Universidad de Concepción



**Dr. José Luis  
Medina Franco**

Profesor Titular  
Departamento de Farmacia  
Facultad de Química  
Universidad Nacional Autónoma de  
México (UNAM) - México



**Dra. Nuria Eugenia  
Campillo Martin**

Investigadora CIB Margarita salas  
Grupo Química Médica y Biológica Traslacional  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas  
(CSIC) - España

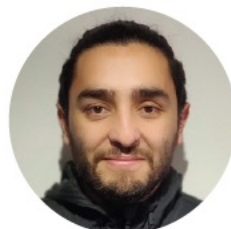
Chief Scientific Officer & Co-founder  
Altena Biotech - España

## Conferencistas Nacionales Invitados



**Dr. Gian Pietro Miscione**

Profesor Asociado  
Departamento de Química  
Universidad de los Andes  
Colombia



**Dr.(c) Camilo Ramirez**

Profesor Titular  
Facultad de Ingeniería  
Politécnico Gran Colombiano  
Colombia

### Organizadores

**Rosa Angela Caro Rojas**  
Directora  
Carrera de Química Farmacéutica  
Facultad de Ciencias  
Pontificia Universidad Javeriana

**Janneth Gonzalez Santos.**  
Profesora Asociada.  
Departamento de Nutrición y Bioquímica.  
Facultad de Ciencias  
Pontificia Universidad Javeriana

**Juan Camilo Marín Loaiza.**  
Profesor Asociado  
Departamento de Farmacia  
Facultad de Ciencias  
Universidad Nacional de Colombia-Sede Bogotá.

# Farmacoinformática:

**Disciplina donde la tecnología juega un papel fundamental en los aspectos que involucran el ciclo del medicamento, desde las ciencias básicas para el descubrimiento de nuevas moléculas bioactivos, pasando por manufactura hasta llegar a ensayos clínicos y farmacovigilancia.**

# Descripción:

La asignatura de carácter teórico-práctico y tiene como principal objetivo presentar herramientas computacionales para optimizar los procesos de diseño, optimización y selección de compuestos bioactivos con potencial terapéutico. El curso se orienta en el empleo de métodos computacionales desde el uso de bases de datos de interés farmacéutico, químico, biológico y medicinal, pasando por herramientas para estudiar los mecanismos moleculares de la interacción de un ligando con su respectivo receptor, hasta la aplicación de algoritmos de aprendizaje automático para crear modelos que permitan ayudar en la toma de decisiones cuando se requiera diseñar y/o optimizar una entidad química. Incluyendo el uso de nuevas tecnologías para enfrentar los desafíos del proceso de diseño de fármacos.

# Contenidos

Martes 15 de noviembre		
09:00 – 09:15	Presentación e introducción	
09:15 – 10:00	Nociones básicas sobre el uso de computadoras para el diseño de fármacos.	Dr. David Ramírez
10:00 – 10:45	Uso de sistema operativo Unix y lenguaje de programación Python / KNIME en diseño de fármacos.	Dr. David Ramírez
10:45 – 11:00	Break	
11:00 – 12:00	Conferencia 1: Simulating enzymes intimate life to make a better world	Dr. Gian Pietro Miscione
12:00 – 14:00	Almuerzo	

Miércoles 16 de noviembre		
09:00 – 10:00	Representación, visualización y modelamiento molecular de compuestos bioactivos y macromoléculas. Uso de PyMol y VMD.	Dr. David Ramírez
10:00 – 10:45	Bases de datos de interés farmacéutico, químico, biológico y medicinal.	Dr. David Ramírez
10:45 – 11:00	Break	
11:00 – 12:00	Conferencia 2 (online)	Dr. José Luis Medina
12:00 – 14:00	Almuerzo	
14:00 – 16:00	Sesión Práctica I. Uso de Python + Jupyter notebook	Dr. David Ramírez – Dr(c). Camilo Ramírez
	Sesión práctica II. Uso de KNIME.	Dr. David Ramírez
16:00 – 18:00	Sesión Práctica III. Farmacoinformática + Python	Dr. David Ramírez Dr.(c) Camilo Ramírez
	Sesión Práctica VI. Farmacoinformática + KNIME	Dr. David Ramírez

Jueves 17 de noviembre		
09:00 – 10:00	Diseño de fármacos basado en el ligando I	Dr. David Ramírez
10:00 – 10:45	Diseño de fármacos basado en la estructura I	Dr. David Ramírez
10:45 – 11:00	Break	
11:00 – 12:00	Conferencia 3 (online)	Dra. Nuria Campillo
12:00 – 14:00	Almuerzo	
14:00 – 18:00	Sesión Práctica V. Cribado virtual empleando modelos de clasificación con algoritmos de Machine <u>learning</u> y data <u>science</u>	Dr. David Ramírez – Dr(c). Camilo Ramírez
Viernes 18 de noviembre		
09:00 – 10:00	Diseño de fármacos basado en la estructura II	Dr. David Ramírez
10:00 – 10:45	Polifarmacología Computacional	Dr. David Ramírez
10:45 – 11:00	Break	
11:00 – 12:00	Conferencias varias. Casos de éxito (3, cada una de 15 <u>mins</u> + 5 de preguntas)	
12:00 – 12:15	Clausura curso Farmacoinformática – sesiones teóricas.	
12:15 – 14:00	Almuerzo	
14:00 – 16:45	Sesión Práctica VI. Cribado Virtual usando <u>ZINCPharmer</u> .	Dr. David Ramírez
	Sesión Práctica VII. <u>Docking Molecular</u> + Python + SMINA	Dr. David Ramírez
16:45 – 17:00	Clausura curso Farmacoinformática – sesiones prácticas.	



**Evento gratuito**

# CURSO Farmacoinformática

**15 al 18 de noviembre**

Lugar: Pontificia Universidad Javeriana

**Plenarias magistrales**

Martes a viernes

9:00 a.m. a 12:00 p.m. (50 cupos)

**Talleres prácticos**

Martes a viernes

2:00 p.m. a 6:00 p.m. (20 cupos)

**Conferencistas >**

Facultad de Ciencias  
Sede Bogotá

Organiza



Colegio Nacional de  
Químicos Farmacéuticos  
de Colombia



Pontificia Universidad  
**JAVERIANA**  
Bogotá



UNIVERSIDAD  
**NACIONAL**  
DE COLOMBIA