

Farmacoinformática 2022

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 Sesión práctica II. Uso de KNIME.	Dr. David Ramírez – Dr(c). Camilo Ramírez Dr. David Ramírez
16:00 – 18:00	Sesión Práctica III. Farmacoinformática + Python Sesión Práctica VI. Farmacoinformática + KNIME	Dr. David Ramírez Dr.(c) Camilo Ramírez 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 learning y data science	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 mins + 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 ZINCPharmer.	Dr. David Ramírez
	Sesión Práctica VII. Docking Molecular + Python + SMINA	Dr. David Ramírez
16:45 – 17:00	Clausura curso Farmacoinformática – sesiones prácticas.	