



Pontificia Universidad
JAVERIANA
Bogotá

Farmacoinformática
Faculta de Ciencias – Carrera de Química Farmacéutica

Universidad Nacional de Colombia

Educación **Continua**
Generamos experiencias educativas

Teléfono: +57 1 320 8320 Ext. 2104
E-mail: direcontinua@javeriana.edu.co



INTENSIDAD HORARIA
12 horas presenciales teóricas
12 horas presenciales taller
12 trabajo autónomo

Fecha de realización: Noviembre 15 al 18

Horarios:

Sesiones teóricas: Martes a viernes de 9 am a 12 m

Sesiones prácticas: Martes a viernes de 2 pm a 5 pm

Total 4 sesiones teóricas y 4 prácticas (taller)

Presentación del curso

El curso de Farmacoinformática es 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.

El curso de Farmacoinformática busca presentar los conceptos básicos y entregar herramientas prácticas de:

1. Nociones básicas sobre el uso de computadoras para el diseño de fármacos
2. Representación, visualización y modelamiento molecular de compuestos bioactivos y macromoléculas.
3. Bases de datos de interés farmacéutico, químico, biológico y medicinal.
4. Modelado molecular y la farmacoinformática en la identificación de moléculas bioactivas
5. Diseño de fármacos basado en el ligando (LBDD) y en la estructura (SBDD).
6. Polifarmacología computacional



Objetivo General

Presentar herramientas computacionales para optimizar los procesos de diseño, optimización y selección de compuestos bioactivos con potencial terapéutico.

Dirigido a

Estudiantes y/o profesionales de Química Farmacéutica, ciencias biológicas y químicas y áreas afines a la salud.

Metodología

Componente teórico

El curso se desarrollará en modalidad presencial. Se desarrollarán exposiciones de los conceptos, contextos y herramientas de las diferentes temáticas por parte del equipo de expertos y ponentes internacionales invitados.

Componente práctico

Se realizarán talleres y solución de problemas asociados a los temas desarrollados en las presentaciones magistrales, con el propósito de permitir que los participantes apliquen los conocimientos adquiridos y los correlacionen en los procesos y proyectos que lideran.



Contenido Académico

Módulo	Tema
INTRODUCCIÓN AL CURSO	Descripción del curso y la metodología
MÓDULO 1. Sistemas operativos	1.1. Nociones básicas sobre el uso de computadoras para el diseño de fármacos. 1.2. Uso de sistema operativo Unix y lenguaje de programación Python / KNIME en ciencias farmacéuticas.
MÓDULO 2. Modelamiento molecular	2. Representación, visualización y modelamiento molecular de compuestos bioactivos y macromoléculas. Uso de PyMol y VMD.
MÓDULO 3. Base de Datos	3. Bases de datos de interés farmacéutico, químico, biológico y medicinal.
MÓDULO 4. Diseño de fármacos asistido por computadora (DiFAC)	4.1. Diseño de fármacos basado en el ligando. - Cribado virtual empleando modelos de clasificación con algoritmos de Machine learning y data science 4.2. Diseño de fármacos basado en la estructura. - Docking Molecular - Dinámica Molecular

Organizador

PUJ – UN – Colegio Nacional de Químicos Farmacéuticos de Colombia

Conferencistas

Dr. David Ramirez Universidad de Concepción, Chile

Dr. Gian Pietro Miscione, Universidad de los Andes

Dr(c). Camilo Ramírez, Politécnico Gran Colombiano

PONENTES INTERNACIONALES INVITADOS

Dr. José Luis Medina, Universidad Nacional Autónoma de México, México

Dra. Nuria Campillo, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, España



Certificado

La Pontificia Universidad Javeriana otorgará certificado de participación a quienes hayan asistido por lo menos al 80% de las sesiones programadas. Este curso no conduce a título de Especialista, Magíster o Doctorado.

Propuesta de programación

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.	Dr. Gian Pietro Miscione
12:00 – 14:00	Almuerzo	
14:00 – 17:00	Sesión Práctica I. Uso de Python + Jupyter notebook	Dr. David Ramírez – Dr(c). Camilo Ramírez
	Sesión práctica II. Uso de KNIME.	Dr. David Ramírez
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 – 17:00	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 – 17:00	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. Sesión Práctica VII. Docking Molecular + Python + SMINA	Dr. David Ramírez Dr. David Ramírez
16:45 – 17:00	Clausura curso Farmacoinformática – sesiones prácticas.	