# Carlos Vigil Vásquez

Mail: carlos.vigil.v@gmail.com Teléfono: +569 95644768 Github: github.com/cvigilv

## Presentación

Bioquímico graduado de la Pontificia Universidad Católica de Chile con enfoque principalmente en el desarrollo de soluciones computacionales usando modelamiento predictivo y aprendizaje de máquina para la toma de decisiones informada. Cuento con experiencia práctica en las áreas de bioinformática y quimioinformática, descubrimiento y desarrollo de fármacos, biología estructural y psicología. Además cuento con habilidades y experiencia en desarrollo de software, habiendo participado en proyectos de código abierto.

## Antecedentes Académicos

## Título profesional en Bioquímica

Santiago, Chile 2015 - 2022

- Pontificia Universidad Católica de Chile
  - o Nota de Examen de Grado: 6.3/7.0
  - $\circ~$  Nota de Memoria de investigación: 7.0/7.0
  - o Nota de Título: 6.0/7.0; 2 de 3 votos de distinción

o Memoria de investigación titulada "Paradoja de uniones débiles para la predicción de novo de blancos farmacológicos"

#### Antecedentes Laborales

# Laboratorio de Neurobiología del Envejecimiento

Universidad San Sebastián; Santiago, Chile

Dra. Cheril Tapia-Rojas, Ph. D. Mayo 2023 - a la fecha

o Realización de análisis bioinformáticos exhaustivos como parte de un estudio que investiga la correlación entre la proteasa mitocondrial Lonp1 y las enfermedades neurodegenerativas asociadas a la edad.

# Asistente de Investigación - Laboratorio de Diseño Molecular

Pontificia Universidad Católica de Chile; Santiago, Chile

Dr. Andreas Schüller, Ph. D. Julio 2017 - a la fecha

- o Propuesta e implementacion de "SimSpread", modelo predictivo novedoso que combina teoría de grafos y el concepto de similitud química para emplearse en labores de descubrimiento y reposicionamiento de fármacos.
- o Estudio relacionado en el descubrimiento de fármacos con actividad antifúngica usando el modelo predictivo SimSpread, donde se descubrieron 4 compuestos nuevos con actividad antifúngica sobre 8 organismos fúngicos.
- o Autor del paquete de software SimSpread.jl, paquete de software para el lenguaje de programacion Julia que implementa el formalismo de SimSpread para su uso en labores de predicción de uniones en un grafo.
- Asesoramiento y tutor de 3 proyectos derivados del modelo SimSpread, relacionados al aumento del poder predictivo, ampliar el dominio de aplicación y la accesibilidad del método.

# Pasantía de investigación - REFRACT MSCA RISE PROJECT 2019 Dr. Damien Devos, Ph. D. Universidad Pablo de Olavide: Sevilla. España Septiembre 2022 - Diciembre 2022

o Propuesta e implementacion de "ResidueFisher", protocolo bioinformático de código abierto para ayudar en la búsqueda de homología remota entre proteínas ocupando información de secuencia y estructural.

# Asistente de Investigación - Laboratorio de Psicofisiología

Dr. Diego Cosmelli Sánchez, Ph. D. Enero 2022 - Diciembre 2022

Pontificia Universidad Católica de Chile; Santiago, Chile

o Implementación de protocolo de análisis basado en aprendizaje de máquina, modelamiento estadístico y extracción de características de los modelos entrenados para estudio en humanos que resultaron en la identificación del efecto de diferentes prácticas contemplativas (por ejemplo, meditación) en el bienestar de los sujetos estudiados.

### Tesista - Laboratorio de Diseño Molecular

Dr. Andreas Schüller, Ph. D. Agosto 2020 - Junio 2022

Pontificia Universidad Católica de Chile; Santiago, Chile

- o Memoria de investigación titulada "Paradoja de uniones débiles para la predicción de novo de blancos farmacológicos".
- o Propuesta e implementación del modelo "SimSpread", su optimizacion utilizando diferentes esquemas de validación cruzada y evaluación de rendimiento predictivo de los modelos propuestos.

 Extensión del metodo propuesto para incorporar nociones de la teoría de uniones debiles, resultando en un modelo capaz de generar predicciones de mayor novedad manteniendo el rendimiento predictivo visto.

#### Ayudante corrector - Bioestadística

Pontificia Universidad Católica de Chile; Santiago, Chile

Dr. Andreas Schüller, Ph. D. Julio 2017 - Diciembre 2017

### Habilidades

- Lenguages de Máquina: Julia, Python, LaTeX, Bash, Lua
- Modelamiento predictivo: Aprendizaje de máquina (modelos supervisados y no-supervisados), procesamiento
  de datos, manejo de bases de datos, REST API, agrupación de datos y su evaluación, evaluación de modelos
  predictivos, sistemas de recomendación, visualización de datos, bioestadística, estadística y probabilidad, teoría de
  grafos, análisis de redes, Scikit-Learn, Pandas, NumPy, Matplotlib, Seaborn, NetworkX, Pingouin
- Bioinformática: Alineamiento de secuencias, MSA, alineamiento estructural, docking molecular, análisis estructural de proteínas, scripting en PyMOL, evaluación y modelamiento con AlphaFold, análisis ómicos, bioestadística, construcción de árboles filogenéticos
- Quimioinformática: Preparación de descriptores moleculares, análisis de similitud química, preparación de confórmeros, confección de modelos farmacofóricos, RDKit, OpenBabel, representación computacional de compuestos químicos
- Herramientas: Git, GitHub, MySQL, SQLite, slurm
- Plataformas: Linux, MacOS, docker

#### IDIOMAS

- Español: nativo
- Ingles: TOEFL, 101/120 puntos; sobre 24 puntos en las 4 categorías

#### ACTIVIDADES EXTRACURRICULARES

- Co-delegado de la Asociación de Estudiantes de Bioquímica (ANEB): 2018
- Miembro de la Asociación de Estudiantes de Bioquímica (ANEB): 2016 al 2021
- Miembro de la International Society for Computational Biology (ISCB): 2018 & 2021

#### PRODUCTIVIDAD ACADÉMICA

#### Publicaciones:

• C. Vigil-Vásquez, A. Schüller; *De novo* prediction of drug targets and candidates by chemical similarity-guided network-based inference. IJMS (2022). DOI:10.3390/ijms23179666

#### Presentaciones:

- Poster "Antifungal drug discovery by chemical similarity-guided network-based inference": Chilean Bioinformatics Society (Enero, 2022)
- Poster "DDTNBI: de novo target prediction using a social network-derived method": International Society for Computational Biology/European Conference on Computational Biology (Agosto, 2021)
- Poster "A computational chemogenomics method for the prediction of off-target interactions with coagulation factor Xa": European Hematology Association (Agosto, 2020)
- Poster "Limits and potential of in silico target prediction by chemical similarity": International Society for Computational Biology-LA (Octubre, 2018)

### Premios:

- Concurso de investigación de Pregrado Invierno 2017: Proyecto titulado "In silico prediction and prioritization of novel drug targets."
- Concurso de investigación de Pregrado Verano 2020: Proyecto titulado "Use of biochemical networks for the prediction of novel drugs for coagulation factor Xa."