

Taller intensivo de Farmacoinformática 2023

Sesiones teóricas: 4 días de 9 am a 12 m (12 h)

Sesiones prácticas: 4 días de 2 pm a 5 pm (12 h)

Total 4 sesiones teóricas y 4 prácticas (taller) más 12 horas de trabajo autónomo

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.

Día 1 Lunes 20 NOVIEMBRE AUDITORIO B VIME		
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: Aproximaciones de Bioinformática Estructural y Química Biológica para el Diseño de Nuevos Fármacos	Dr. Carlos Lagos
12:00 – 13:00	Conferencia 2: Desarrollo de péptidos sintéticos y potenciales aplicaciones biotecnológicas.	Dra. Paula Santana
13:00 – 15:20	Almuerzo	
15:20 – 18:15 Sala computación LPasteur	Sesión práctica I. Uso de Python + Jupyter notebook	Dr. David Ramírez –
	Sesión práctica II. Uso de KNIME.	Dr. David Ramírez
	Sesión práctica III. Visualización datos con Python	
Día 2 MARTES 21 DE NOVIEMBRE AUDITORIO FACULTAD		
15:00 – 16:00	Representación, visualización y modelamiento molecular de compuestos bioactivos y macromoléculas. Uso de PyMol y VMD.	Dr. David Ramírez

16:00 – 16:45	Bases de datos de interés farmacéutico, químico, biológico y medicinal.	Dr. David Ramírez
16:45 – 17:00	Break	
17:00 – 18:00	Conferencia 2:	Dra. Carolina Mascayano
Día 3 Miércoles 22 DE NOVIEMBRE AUDITORIO B VIME		
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: Farmacodinamia de anfetaminas. Aproximación bioinformática y experimental	Dr. Miguel Reyes
12:00 – 13:30	Almuerzo	
13:45 – 16:40 Sala computación LPasteur	Sesión Práctica IV. Farmacoinformática + KNIME Sesión Práctica V. Machine Learning	Dr. David Ramírez
Día 4 Jueves 23 DE NOVIEMBRE AUDITORIO FACULTAD		
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 – 14:00 Sala computación LPasteur	Sesión Práctica VI. Cribado Virtual usando ZINCPharmer. Sesión Práctica VII. Docking Molecular + Python + SMINA Sesión VIII. Farmacología de sistemas - Cytoscape	Dr. David Ramírez Dr. David Ramírez
14:00 – 15:00	Almuerzo	
15:00 – 16:00	Conferencia 2: Inteligencia artificial con impacto social	Dra. Violeta Chang
16:00 – 16:20	Clausura curso Farmacoinformática	