

# 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*



# FARMACOINFORMÁTICA

---



**David Ramírez**  
[dramirezs@udec.cl](mailto:dramirezs@udec.cl)  
**Web lab:** [ramirezlab.github.io](https://ramirezlab.github.io)



**Monitor:**  
**Carlos Peña**  
[carlosalepena@udec.cl](mailto:carlosalepena@udec.cl)



Ramírez Lab

# 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

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 <u>PyMol</u> 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

Dia 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	<p>Sesión Práctica VI. Cribado Virtual usando ZINCPharmer.</p> <p>Sesión Práctica VII. Docking Molecular + Python + SMINA</p> <p>Sesión VIII. Farmacología de sistemas - Cytoscape</p>	<p>Dr. David Ramírez</p> <p>Dr. David Ramírez</p>
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	

# Requisitos

## **Instalación de software gratuito:**

KNIME: <https://www.knime.com/>

CytoScape: <https://cytoscape.org/>

MobaXterm: <https://mobaxterm.mobatek.net/>

Pymol: <https://pymol.org/2/>

## **Software (gratuito) opcional a instalar para optimizar clases:**

CONDA (o versiones):

<https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/index.html>

VMD: <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Maestro (Académico):

<https://www.schrodinger.com/products/maestro>