

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYT-SECIHTI: 2000001

Curso: De la Predicción a la Toma de Decisiones: ADMET *In Silico* en el Marco Regulatorio ICH

Folio de validez oficial de la red SEP-CONOCER EC0301 y EC0366



Curso sincrónico TEAMS y/o ZOOM.

Duración: 26 horas (3.5 horas/semana)

Masterclass GRATIS: jueves 23 de abril del 2026 a las 18:00 (hora centro de México)

Iniciamos: sábado 2 de mayo del 2026 (9:00 a 12:00 horas, hora centro de México)

Profesor: M en C Brayan Raziel Cedillo Gonzalez

Grupo DIFACQUIM, Departamento de Farmacia, Facultad de Química, UNAM

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Descripción del curso

Este curso te guía para perfilar compuestos con **ADMET in silico** y crear **modelos QSAR/ML** orientados al **cumplimiento ICH (M7, M12, Q3)**. Inicia con nivelación en **Python (Colab/Jupyter) y Pandas**, sigue con fundamentos ADMET y PK, **curación de datos** (ChEMBL, PubChem, DrugBank), descriptores y reglas de drug-likeness. Aprenderás a usar críticamente **SwissADME, pkCSM, admetSAR, ADMETlab, Toxtree, ADMET-AI** y a construir modelos en **scikit-learn** (split train/test, CV, métricas de regresión y clasificación). Integraremos resultados con **priorización multicriterio** y un **proyecto final** (notebook reproducible + reporte ejecutivo). Dirigido a estudiantes/posgrados, investigadores, profesionales de I+D (farma, biotec, cosmética, nutraceuticos, agroquímicos) y perfiles regulatorios. Requisitos: nociones de química/bioquímica y PK básica (C_{max} , AUC, $t_{1/2}$), estadística elemental y manejo básico de Colab/Jupyter y CSV; deseable familiaridad con **SMILES/descriptores**.

TEMARIO

Módulo 0: Bienvenida e introducción a python (1h)

- Instalación/configuración de Google Colab o Jupyter Notebook.
- Breve introducción a la sintaxis básica de Python y Pandas necesaria para el curso.
- Taller 0: "Hola Mundo" en Python y lectura de un archivo CSV con Pandas.

Módulo 1: Fundamentos y Contexto Industrial (3h)

- La crisis de productividad en la industria farmacéutica: ¿por qué fallan los candidatos?
- El rol de las propiedades ADMET (Absorción, Distribución, Metabolismo, Excreción, Toxicidad) en la optimización de leads.
- Introducción a la Quimioinformática como disciplina clave.
- Farmacocinética básica para computacionales: C_{max} , AUC, vida media, biodisponibilidad.

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- Taller 1: Análisis de casos de estudio reales de fracasos y éxitos vinculados a predicciones ADMET.

Unidad 2. Bases de datos y curación de compuestos (3 h)--6

- Bases de datos públicas (ChEMBL, PubChem, DrugBank): cómo buscar y descargar datos relevantes.
- Cómo descargar, limpiar y usar datasets en quimioinformática.
- Curación de datos: normalización de SMILES, eliminación de duplicados, manejo de tautómeros y estados de protonación.
- Descriptores moleculares: qué son y para qué sirven (descriptores 1D/2D, fingerprints).
- Reglas de filtrado molecular (Lipinski, Veber, Ghose).
- **Taller 2:** Descarga de un dataset, curación y cálculo de reglas de drug-likeness.

Unidad 3. Herramientas computacionales de predicción ADMET (3h)--8

- Plataformas de predicción libre: SwissADME, pkCSM, admetSAR, ADMETlab, Toxtree, ADMET-AI
- Ventajas, desventajas y alcance de cada herramienta.
- Casos reales de fallo de candidatos por propiedades ADMET.
- Interpretación de resultados y análisis de alertas estructurales (ej. toxicidad).
- **Taller 3:** Análisis comparativo de un conjunto de moléculas en 2-3 plataformas web diferentes. Creación de un reporte consolidado.

Módulo 4: Fundamentos de Modelado QSAR/ML para ADMET (6h)

- **Parte 4.1 (3h): Conceptos Teóricos**
 - ¿Qué es un modelo QSAR? Supuestos y limitaciones.
 - Introducción al Machine Learning para predicción de propiedades (regresión y clasificación).
 - La importancia de la división entrenamiento/test y la validación cruzada.
 - Métricas de performance: RMSE, MAE (regresión); Accuracy, Precision, Recall, ROC-AUC (clasificación).
- **Parte 4.2 (3h): Práctica Guiada**
 - **Taller 4:** Construcción de un modelo de clasificación sencillo (ej. permeable/no permeable) usando Scikit-learn y descriptores de RDKit. Evaluación de su performance.

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Módulo 5: Integración y Priorización (6h)

- Parte 5.1 (3h): Estrategias de Priorización
 - Cómo manejar y reconciliar resultados contradictorios entre diferentes herramientas o modelos.
 - Definición de criterios de priorización específicos para un proyecto (ej.: absorción oral > metabolismo > toxicidad).
 - Técnicas simples de multicriterio para la toma de decisiones (ej.: scoring systems, radar plots).
- Parte 5.2 (3h): Proyecto Integrador
 - Taller 5 (Proyecto Final): Se proporciona un conjunto de compuestos novedosos. Los participantes, en grupos, deberán:
 1. Curar los datos.
 2. Obtener predicciones de herramientas web.
 3. (Opcional para grupos avanzados) Ejecutar un modelo propio simple.
 4. Integrar todos los resultados en un dashboard o tabla de scoring.
 5. Priorizar los compuestos y justificar su elección basándose en el perfil ADMET predicho.

Módulo 6: "Del perfilado ADMET a la aplicabilidad regulatoria: introducción a las guías ICH" (60 min)

- Contexto: ¿Por qué la industria farmacéutica requiere predicciones ADMET?
- Marco regulatorio: introducción a las guías ICH
 - ICH M7: evaluación de impurezas con potencial mutagénico.
 - ICH M12: identificación de metabolitos en desarrollo de fármacos.
 - ICH Q3: límites de impurezas en productos farmacéuticos.
- Ejemplos de cómo los modelos in silico ADMET ayudan a cumplir con estas guías:
 - Identificación temprana de mutagenicidad (M7).
 - Predicción de metabolismo y formación de metabolitos (M12).
 - Evaluación de toxicidad de impurezas (Q3).
- Reflexión final: transición de la investigación académica al cumplimiento industrial.

Módulo 7: Presentación de Proyectos y Cierre (2h)

- Presentaciones breves (5-10 min) de cada grupo con su priorización y justificación.
- Discusión grupal: retos, limitaciones y lecciones aprendidas.
- Cierre del curso: resumen de aprendizajes y recursos para continuar.

Evaluación y Entregables

- Entrega y resolución de las tareas vinculadas a cada Taller (40%).

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- Proyecto Final Grupal (60%):
 - Notebook de Python/Jupyter completamente documentado y reproducible.
 - Reporte ejecutivo en PDF (2-3 páginas) que explique el proceso, los resultados y la justificación de la priorización, dirigido a un "jefe de proyecto" que puede no ser experto en modelado.

inversión: \$ **1,499.00 MXN** (aprox 70.00 USD). Para inscribirse hacer pago a la cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04 a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com o ventas@pharbiois.com. También puede pagar en: <https://www.pharbiois.com/inscribirme-admet> por **PayPal**, MERCADO PAGO (TDD, TDC, OXXO, etc) o stripe. Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura, haber tomado 2 o más cursos/diplomados en pharbiois. 5 % estudiantes de Posgrado y posdocs, profesores de tiempo parcial, haber tomado un curso en pharbios.com.

Comentarios de alumnos que ha tomado el curso