

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

## Curso Creación de modelos QSAR con Inteligencia Artificial

Constancia con folio de red SEP-CONOCER EC0301 (validez oficial/curricular)

**Profesore: Dr Erick Correa Padilla**

<https://scholar.google.com/citations?user=qCaGKSsAAAAJ&hl=es>

**Modalidad:** sincrónico

**Plataforma:** ZOOM

**Duración:** 20 horas

**Idioma:** Español

**Inicia:** 2 de junio del 2025 de 7:00 a 10 PM (hora centro de México=

### Descripción del curso

Curso enfocado en el diseño de fármacos asistido por inteligencia artificial. Cubre programación en Python, machine learning, quimioinformática, modelos QSAR y optimización molecular. Ideal para quienes buscan aplicar herramientas computacionales modernas al desarrollo farmacéutico.

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500  
[pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com)

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



## TEMARIO

### **Modulo 1. Diseño de Fármacos con Inteligencia Artificial**

- Python, Google Colaboratory e Inteligencia Artificial en programación
- Estructuras de datos: variables, listas, tuplas y diccionarios
- Bucles “if, elif y else”, “for” y “while’
- Numpy: arreglos, índices y operaciones con arreglos
- Dataframes con pandas
- Pyplot
- Plotly express
- Aprendizaje Supervisado y No Supervisado
- Aprendizaje Supervisado: clasificación y regresión
- Aprendizaje No Supervisado: agrupación y reducción de dimensionalidad

### **Módulo 2: Introducción a la quimio informática.**

- Representación de moléculas en Python: SMILES, InChI,
- Cálculo de huellas dactilares y similitud química.
- Cálculo de descriptores moleculares.
- Evaluación de ADMET (Absorción, Distribución, Metabolismo, Excreción y Toxicidad): Herramientas computacionales para predecir propiedades farmacocinéticas y toxicológicas.

### **Módulo 3: Predicción de actividad biológica: Modelos QSAR**

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



## asistidos por

- Inteligencia Artificial.
- Aprendizaje automático: clasificación y regresión.
- Algoritmos de regresión.
- Algoritmos de Selección de características, Validación interna y externa, y reducción de dimensionalidad.
- Dominio de aplicabilidad.
- Espacio Químico.

## Módulo 4: Diseño y Optimización de Fármacos

- Relación estructura-actividad (SAR): Análisis de cómo los cambios estructurales afectan la actividad biológica.
- Farmacóforo, química combinatoria, bio-isósteros y estructuras privilegiadas.
- Optimización de propiedades farmacocinéticas y farmacodinámicas: Modificación de la estructura para mejorar la absorción, distribución, metabolismo y excreción, así como la potencia y selectividad.

## Evaluación final del curso

inversión: \$ **1,999.00 MXN** (100.00 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](mailto:pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com). También puede pagar en: <https://www.pharbiois.com/incrirmeqsarconai> por **PayPal**, MERCADO PAGO (TDD, TDC, OXXO, etc) o stripe. Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura, haber tomado 2 o más

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500  
[pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com)

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

[www.pharbiois.com](http://www.pharbiois.com)



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**

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500  
[pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com)