



*1821 Universidad de Buenos Aires*

## **Resolución Consejo Directivo**

**Número:**

**Referencia:** EX-2025-04994153- -UBA-DMESA#FCEN - POSTGRADO - Sesión  
10/11/2025

---

### **VISTO:**

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Biológica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Taller Práctico Latinoamericano sobre Descubrimiento de Fármacos Guiado por IA/ML de Código Abierto** para el año 2025,

### **CONSIDERANDO:**

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por la Comisión de Presupuesto y Administración,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada el día 10 de noviembre de 2025,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD  
DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**

**R E S U E L V E:**

**ARTÍCULO 1º:** Aprobar el nuevo curso de posgrado **Taller Práctico Latinoamericano sobre Descubrimiento de Fármacos Guiado por IA/ML de Código Abierto** de 40 horas y 2 semanas de duración, que será dictado por los Dres. Darío Fernández Do Porto y Adrián Turjanski.

**ARTÍCULO 2º:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Taller Práctico Latinoamericano sobre Descubrimiento de Fármacos Guiado por IA/ML de Código Abierto** que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado en el segundo cuatrimestre de 2025.

**ARTÍCULO 3º:** Aprobar un puntaje máximo de dos (2) puntos para la Carrera de Doctorado.

**ARTÍCULO 4º:** Establecer un arancel de **CATEGORÍA MEDIA**, estableciendo que dicho arancel estará sujeto a los descuentos y exenciones estipulados mediante la Resolución CD N.º 1072/19. Disponer que los fondos recaudados ingresen en la cuenta presupuestaria habilitada para tal fin, y sean utilizados de acuerdo a la Resolución 072/0.

**ARTÍCULO 5º:** Disponer que, de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

**ARTÍCULO 6º:** Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, pase a QBIOLÓGICA#FCEN y resérvese.

## ANEXO

### Taller Práctico Latinoamericano sobre Descubrimiento de Fármacos Guiado por IA/ML de Código Abierto

#### PROGRAMA

##### Objetivos:

El objetivo general del workshop es comprender las necesidades actuales de la comunidad de investigación en descubrimiento de fármacos en Latinoamérica e identificar herramientas y estrategias para fomentar la adopción de tecnologías de IA/ML de código abierto que aceleren sus agendas científicas. Además, busca conformar una comunidad de práctica y estimular nuevas colaboraciones entre participantes y organizadores.

##### Programa Analítico:

Fundamentos de IA/ML en quimioinformática y *drug discovery*: introducción a conceptos y aplicaciones, obtención y manejo de datos químicos desde bases públicas. Herramientas abiertas para priorización y *screening* virtual: Ersilia Hub como plataforma de modelos de IA/ML de código abierto, priorización de espacio químico y estrategias de virtual *screening*. Virtual *screening* guiado por estructuras: *TidyScreen* como enfoque de *docking* molecular con software abierto y predicción de poses bioactivas asistida por IA/ML. Integración de IA en predicción estructural y *docking*: desarrollo de índices de similitud basados en IA, *bias docking* y métodos avanzados para la predicción de estructuras de proteínas y de complejos proteína-ligando asistidos por IA. Aplicaciones de IA en biotecnología y farmacéutica: *startups* que aplican IA en manufactura y descubrimiento de fármacos, diseño de enzimas asistido por IA para síntesis de fármacos y mesa redonda sobre los desafíos actuales de la IA en manufactura y *drug discovery*. participantes trabajarán con datos y proyectos reales en sesiones prácticas guiadas.

##### Actividades prácticas:

Descarga y preparación de *datasets* químicos desde bases públicas. Uso de Ersilia Hub para predicción y priorización de compuestos. Virtual *screening* con *TidyScreen* y *docking* molecular con herramientas abiertas. Predicción de poses bioactivas asistida por IA/ML. *Bias docking* aplicado a *pockets* definidos. Predicción estructural de proteínas con *AlphaFold* e integración con *docking* para el análisis de complejos proteína-ligando.

## **BIBLIOGRAFIA**

- Wilkinson MD et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. *Sci Data*. 2016.
- Jumper J et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*. 2021.
- Trott O, Olson AJ. AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking. *J Comput Chem*. 2010.
- Martí, M. A., Turjanski, A. G., & Fernández Do Porto, D. (2025). *Structure-Based Drug Design*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-031-69162-1>