



UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD POLITÉCNICA

Campus de la UNA
SAN LORENZO-PARAGUAY

RESOLUCIÓN N° 1629/2025

POR LA CUAL SE APRUEBA Y SE HABILITA EL PROYECTO DEL CURSO DENOMINADO “SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE BIOMOLÉCULAS”.

01 de diciembre de 2025

VISTO Y CONSIDERANDO: El Memorando DI/552/2025, del Director Prof. Dr. Diego Pedro Pinto Roa, de la Dirección Investigación de la FP-UNA, en el que solicita la aprobación por resolución del curso denominado “Simulación Computacional de Biomoléculas”, a ser desarrollado en la Facultad Politécnica en el marco del proyecto de investigación PINV01-277 financiado por el CONACYT.

El curso tiene por objetivo dotar al alumno de los conceptos y herramientas teóricos básicos para abordar las técnicas de simulación computacional de biomoléculas aplicadas a problemas biológicos. Se pretende presentar la variedad de herramientas computacionales disponibles en la actualidad para el estudio de los determinantes moleculares de los fenómenos bioquímicos y biofísicos.

Que el curso tiene fecha propuesta el 02 al 06 de febrero de 2026, las clases se desarrollarán de lunes a viernes, cada día tendrá una parte teórica (de 9 a 12h) y otra práctica (de 14 a 17h), los docentes Prof. Dr. Santiago Di Lella, Prof. Dr. Víctor Martínez Chamorro, Prof. Dr. José Domingo Colbes Sanabria.

La Ley N° 4995/2013 de Educación Superior.
El Estatuto de la Universidad Nacional de Asunción.

POR TANTO: en uso de sus facultades y atribuciones legales,

**LA DECANA DE LA FACULTAD POLITÉCNICA
RESUELVE:**

Art. 1° Aprbar el proyecto del curso denominado “Simulación Computacional de Biomoléculas”, a ser desarrollado en la Facultad Politécnica en el marco del proyecto de investigación PINV01-277 financiado por el CONACYT, detallados en el ANEXO de la presente Resolución.

Art. 2° Habilitar el curso denominado “Simulación Computacional de Biomoléculas”, a ser desarrollado en la Facultad Politécnica en el marco del proyecto de investigación PINV01-277 financiado por el CONACYT, el 02 al 06 de febrero del 2026.

Art. 3° Comunicar, copiar y archivar.

Prof. Abg. Joel Arsenio Benítez Santacruz
Secretario de la Facultad

Prof. Ing. Silvia Teresa Leiva León, MSc.
Decana





Campus de la UNA
SAN LORENZO-PARAGUAY

UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD POLITÉCNICA

ANEXO RESOLUCIÓN N° 1629/2025

Pág. 1/3

Universidad Nacional de Asunción

Facultad Politécnica

Dirección de Investigación



Proyecto de Cursos Cortos

Título: "Simulación Computacional de Biomoléculas"

Docentes

- Prof. Dr. Santiago Di Lella.
- Prof. Dr. Víctor Martínez Chamorro.
- Prof. Dr. José Domingo Colbes Sanabria.



Central - San Lorenzo
San Lorenzo, Diciembre 2025



Campus de la UNA
SAN LORENZO-PARAGUAY

UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD POLITÉCNICA

ANEXO RESOLUCIÓN N° 1629/2025

Pág. 2/3

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE BIOMOLÉCULAS

Docentes

Prof. Dr. Santiago Di Lella

Conicet – Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

Prof. Dr. Víctor Martínez-Chamorro

Facultad Politécnica, Universidad Nacional de Asunción

Prof. Dr. José Colbes

Facultad Politécnica, Universidad Nacional de Asunción

Objetivo

Dotar al alumno de los conceptos y herramientas teóricos básicos para abordar las técnicas de simulación computacional de biomoléculas aplicadas a problemas biológicos.

Se pretende presentar la variedad de herramientas computacionales disponibles en la actualidad para el estudio de los determinantes moleculares de los fenómenos bioquímicos y biofísicos.

Organización

El curso se realizará en modalidad teórico-práctica, con una duración de 5 días (una semana), con 6 horas al día (3 horas de teoría y 3 horas de actividades prácticas).

Requisitos

Se requiere que los estudiantes traigan sus propias computadoras portátiles para la sesión práctica, o que puedan usar una sala de computadoras en la Universidad, con sistema operativo Linux. Los programas de análisis básicos se pueden instalar fácilmente: Xmgrace, VIM, VMD. La sesión práctica incluye el empleo de software para simulaciones MD. Se utilizará el paquete de programas AMBER.

Programa analítico

1.- Simulación computacional de biomoléculas en ciencia: relación entre experimento, teoría y simulación. Simulación computacional en química. Concepto de superficie de energía potencial. Metodologías y estrategias para explorar superficies energéticas potenciales.

2.- Visión general de los métodos ab-initio. Ecuaciones de Hartree-Fock. Funciones base. Determinación de propiedades moleculares. Métodos semi-empíricos: descripción general e implementaciones. Métodos semi-empíricos basados en parametrización. Descripción general de la teoría funcional de la densidad y sus teoremas fundamentales. Implementación de Kohn-Sham. Ventajas y desventajas de los diferentes métodos.

3.- Métodos de mecánica molecular. Campos de fuerza en modelado molecular. Modelos de agua: SPC, TIP3P y TIP4P. Modelos polarizables. Campos de fuerza para biomoléculas: potenciales AMBER y CHARMM. Parametrización. Esquemas de grano grueso.

4.- Conceptos básicos de termodinámica estadística. Hipótesis ergódica. Esquema de simulación de Monte Carlo. Esquema de simulación de dinámica molecular. Determinación de propiedades estructurales y dinámicas. Regulación de temperatura y presión. Termostato Berendsen. Dinámica de Langevin.

5.- Cálculos de energía libre. Funciones termodinámicas de entropía y energía. Muestreo mejorado. Muestreo de paraguas. Integración termodinámica. Dinámica molecular dirigida y aproximación de no equilibrio: ecuación de Jarzynski.





Campus de la UNA
SAN LORENZO-PARAGUAY

UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN
FACULTAD POLITÉCNICA

ANEXO RESOLUCIÓN N° 1629/2025

Pág. 3/3

6.- Dinámica proteica. Estabilidad y caracterización de proteínas. Desviación cuadrática media y fluctuaciones cuadráticas medias. Modos normales y modos esenciales. Función de distribución radial. Análisis de dinámica molecular.

7.- Interacción entre biomoléculas. Interacciones proteína-ligando. Cálculos de afinidad. Cambio de entropía conformacional. Cambio de energía libre de solvatación.

8.- Metodologías híbridas de mecánica cuántica-mecánica molecular (QM-MM). Modelización de fenómenos reactivos. Efectos del entorno. Esquemas aditivos y sustractivos. Acoplamiento cuántico-clásico. Cálculos del mecanismo de reacción.

9.- Introducción al aprendizaje de máquina. Conceptos básicos del aprendizaje supervisado: datos, modelos y criterios de selección. Evaluación de desempeño y nociones de generalización. Idea general del aprendizaje profundo y ejemplos de aplicación.

10.- Acoplamiento (*docking*) molecular. Principios del docking para predecir sitios de unión y afinidad. Muestreo conformacional y funciones de puntuación. Aplicación al diseño de fármacos.

11.- Aplicaciones a problemas biológicos específicos y discusión de trabajos.

Bibliografía básica

- Leach, A. (2001) Molecular Modelling: Principles and Applications. (2nd Edition) Prentice Hall.
- Allen, M. P. and Tildesley, D. J. (2001) Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press.
- Ponder, J. and Case, D. Force fields for protein simulations (2003) Adv. Prot. Chem. 66, 27-85.
- Senn, H. M. and Thiel, W. QM/MM Methods for Biomolecular Systems (2009) Angew. Chem. Int. Ed., 48: 1198-1229.
- Senn, H. M. and Thiel, W. QM/MM studies of enzymes (2007) Curr. Op. Chem. Biol., 11:182-187.
- Mitra, S., Datta, S., Perkins, T., and Michaidilis, G. Introduction to Machine Learning and Bioinformatics (2008). CRC Press.
- Coumar, M. S. (2021). Molecular docking for computer-aided drug design: Fundamentals, techniques, resources and applications. Academic Press.

