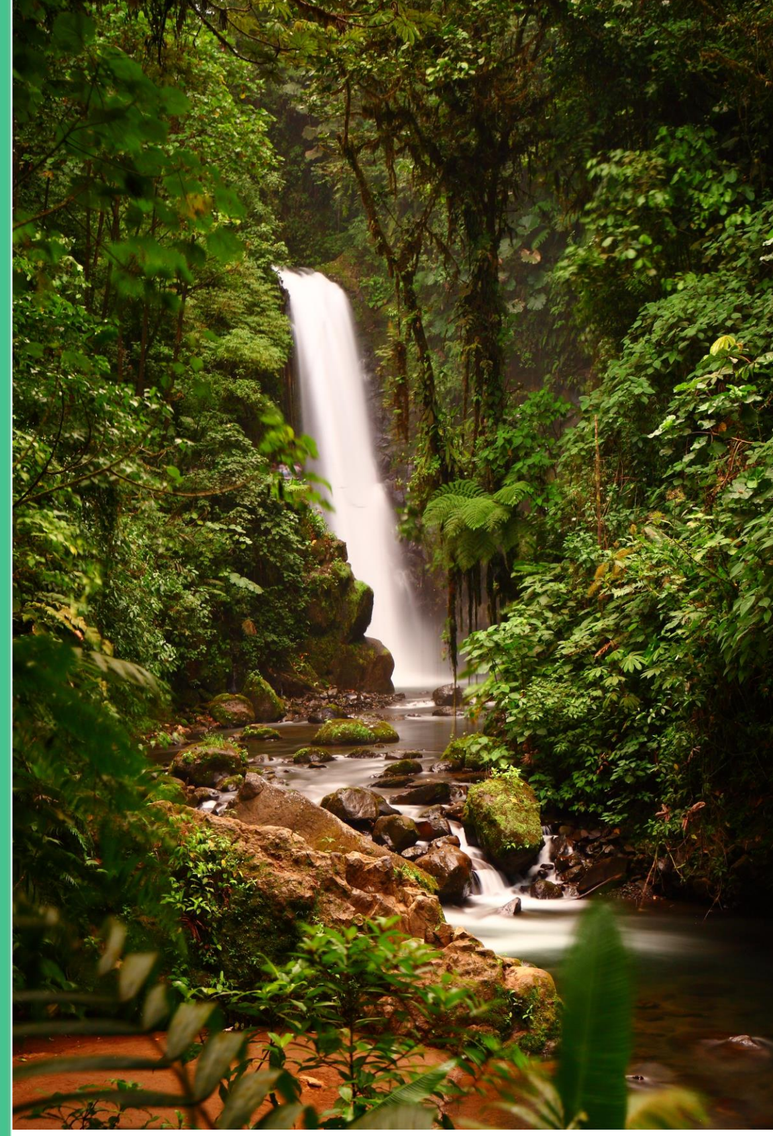
TICAL 2025

Aplicaciones de la IA en Investigación: Ciencias Biomédicas

Dr. William J. Zamora Ramírez

Noviembre 2025



UCR

UNA UNIVERSIDAD NACIONAL COSTA RICA

RED CONARE

Red CLARA

BELLA II
Building the Europe Link to Latin America and the Caribbean

TICAL 2025

Introducción

CNCA
Colaboratorio Nacional de Computación Avanzada

2021

Bio³
COMPUTACIONAL BIOPHYSICS, BIOLOGY AND BIOINFORMATICS GROUP

2022

aToxCIA
Laboratorio de Toxicología Computacional e Inteligencia Artificial
LEBI Laboratorio de Ensayos Biológicos

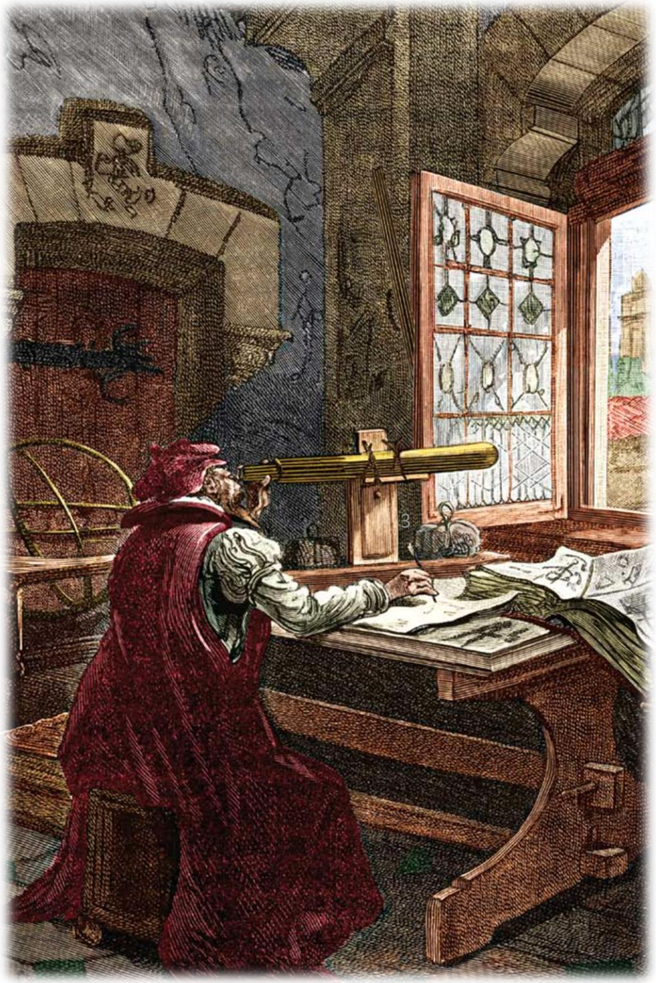
2023

KABRÉ

Kabré representa la plataforma computacional (clúster) del CeNAT, creada para proporcionar a los usuarios herramientas para el análisis, modelado y visualización de datos.

TICAL 2025

Introducción

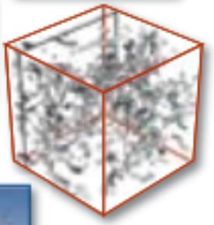


Science Paradigms

- Thousand years ago:
  science was **empirical**
  describing natural phenomena
- Last few hundred years:
  theoretical branch
  using models, generalizations

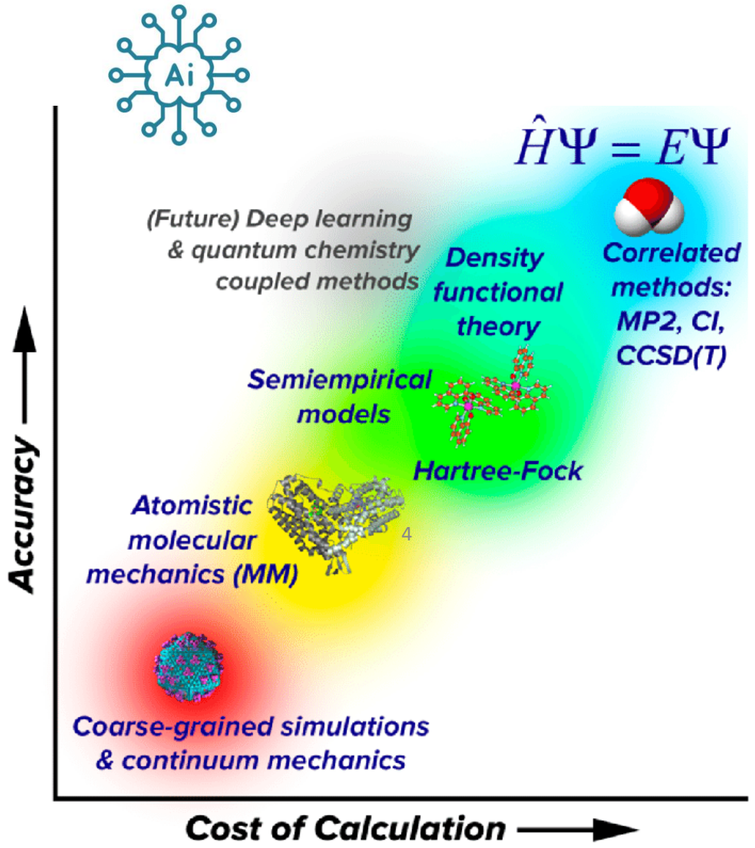
$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{4\pi G\rho}{3} - \mathrm{K}\frac{c^2}{a^2}$$

- Last few decades:
  a **computational** branch
  simulating complex phenomena
- Today: **data exploration** (eScience)
  unify theory, experiment, and simulation
  - Data captured by instruments
    or generated by simulator
  - Processed by software
  - Information/knowledge stored in computer
  - Scientist analyzes database/files
    using data management and statistics



TICAL 2025

Introducción



Ciencias Básicas y Biomédicas

Conocimiento Deductivo

Usar teoría para obtener conclusiones

Inteligencia Artificial

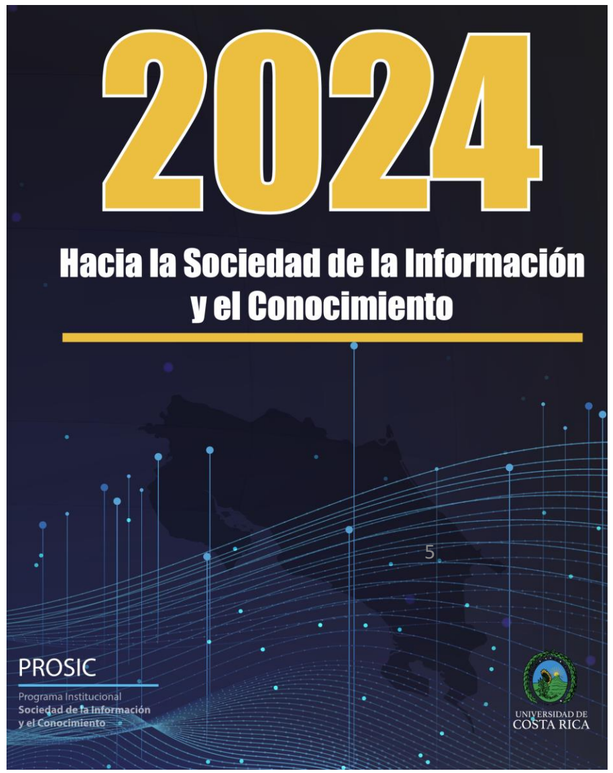
Conocimiento Inductivo

Aprender de los datos para obtener conclusiones

Borges RM et al. Quantum Chemistry Calculations for Metabolomics. Chem Rev. **2021**;121(10):5633-5670. doi: 10.1021/acs.chemrev.0c00901.

TICAL 2025

Introducción



Presente y perspectivas futuras de la Inteligencia Artificial en Costa Rica

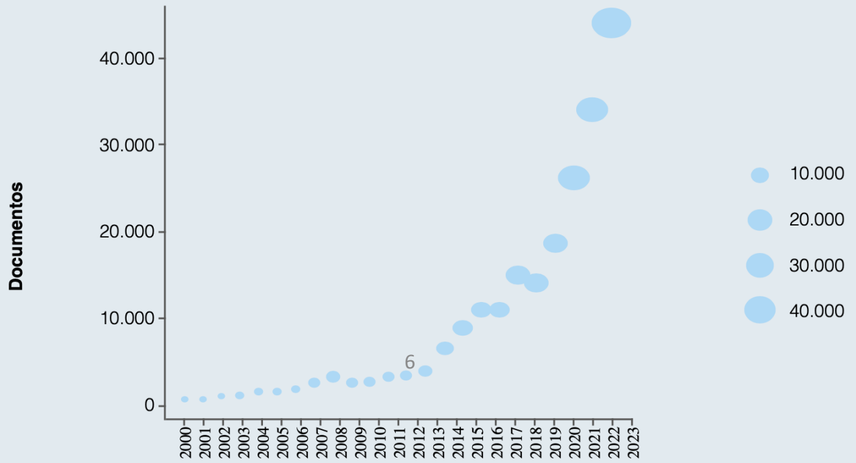
Silvana De Souza Pinheiro, Esteban Meneses,
Antonio Piedra y William J. Zamora Ramírez

TICAL 2025

Introducción

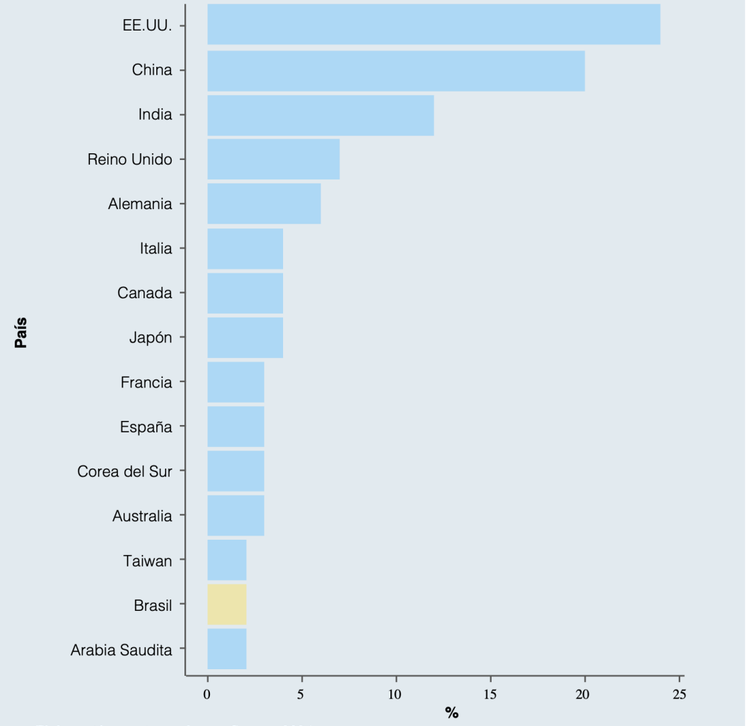
IA A NIVEL MUNDIAL

Figura 7.1. Documentos relacionados con IA o aprendizaje automático según la base de datos de Scopus (2000-2023)



Fuente: Elaboración propia con base a Scopus, 2024.

Figura 7.2. Porcentaje de trabajos relacionados con IA o aprendizaje automático de los principales 15 países según base de datos de Scopus (2000-2023)



Fuente: Elaboración propia con base a Scopus, 2024.

Introducción

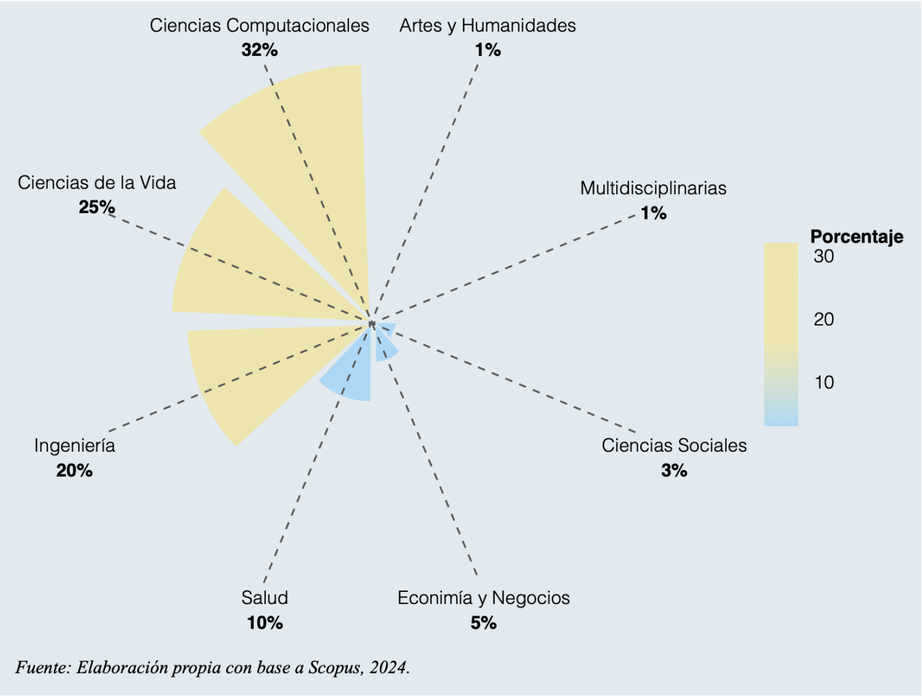
IA A NIVEL MUNDIAL

Tabla 7.1. Áreas de conocimiento a nivel global relacionados con IA o aprendizaje automático según la base de datos de Scopus (2000-2023)

Área del saber	Tópicos incluidos según clasificación de Scopus
Artes y Humanidades	Artes y Humanidades
Ciencias Computacionales	Ciencias Computacionales
Ciencias Sociales	Ciencias Sociales
Ciencias de la Vida	Química, Matemáticas, Neurociencia, Bioquímica, Genética y Biología Molecular, Física y Astronomía, Ciencias de la Tierra y Planetarias, Ciencias Ambientales, Ciencias Agrícolas y Biológicas
Economía y Negocios	Ciencias de la Decisión, Negocios, Gestión y Contabilidad, Economía, Econometría y Finanzas
Ingeniería	Ingeniería, Ciencia de Materiales, Energía, Ingeniería Química
Multidisciplinarias	Multidisciplinarias
Salud	Salud, Medicina, Farmacología, Toxicología, Farmacéutica, Psicología, Inmunología y Microbiología, Enfermería, Odontología, Veterinaria

Fuente: Elaboración propia con base a Scopus, 2024.

Figura 7.3. Porcentaje de 8 distintas áreas del saber relacionados con los documentos publicados en IA aprendizaje automático según la base de datos de Scopus (2000 a 2023)



Fuente: Elaboración propia con base a Scopus, 2024.

Introducción

IA EN LATINOAMÉRICA

Figura 7.4. Representación de los documentos publicados per capita relacionados con la IA o aprendizaje automático según la base de datos de Scopus (2000-2023) en los países de la región ALC

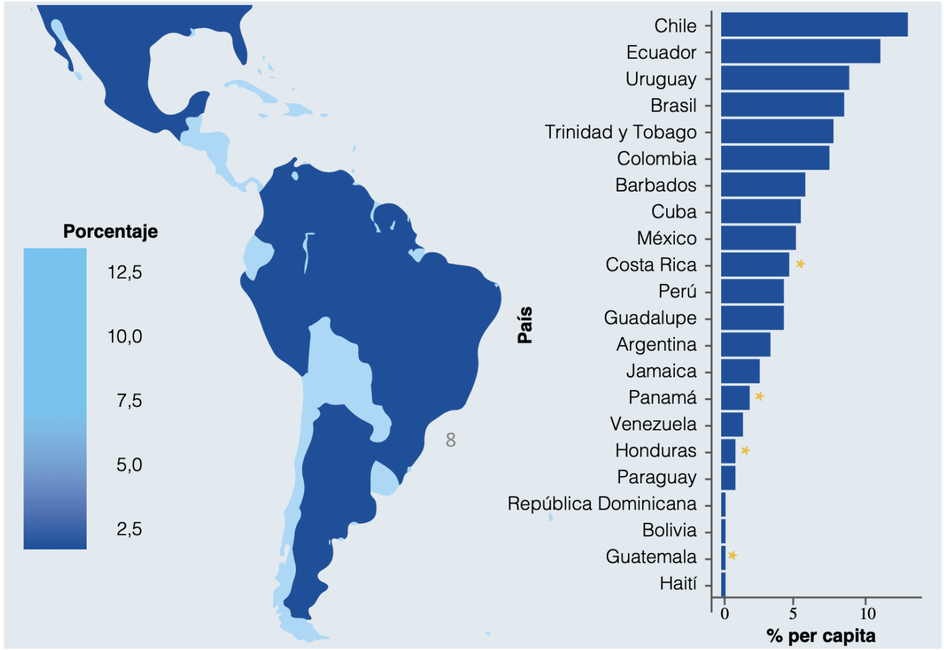
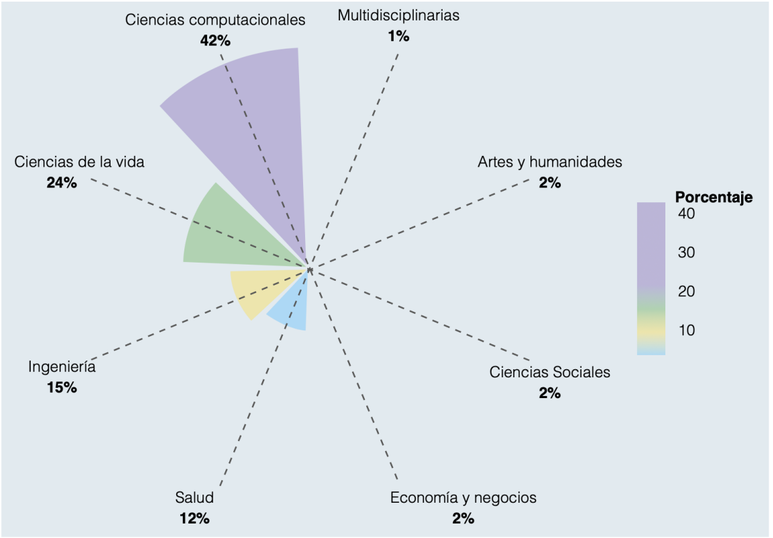


Figura 7.5. Porcentaje de 8 distintas áreas del saber relacionados con los documentos publicados en Costa Rica sobre IA o aprendizaje automático según la base de datos de Scopus (2000-2023)



TICAL 2025

Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos

Artificial Intelligence in the Life Sciences 3 (2023) 100077

Contents lists available at ScienceDirect

Artificial Intelligence in the Life Sciences

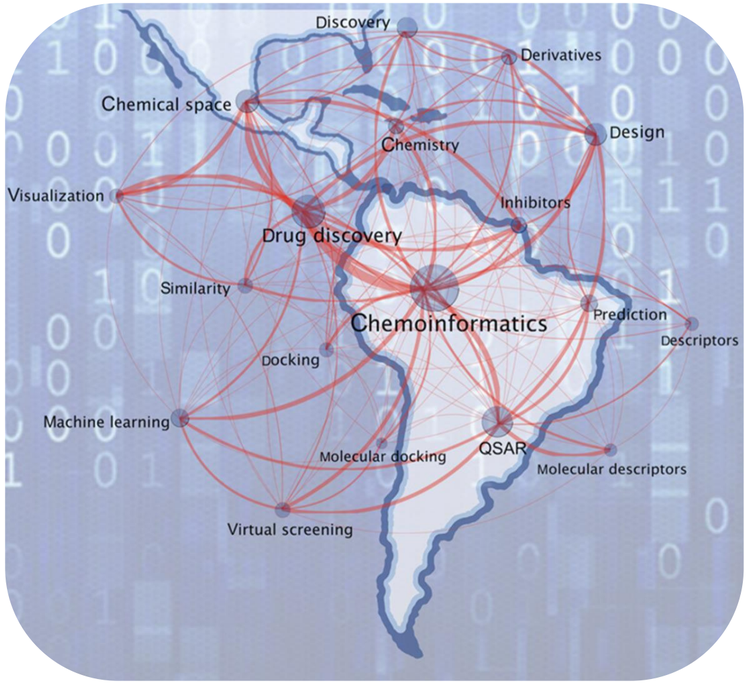
journal homepage: www.elsevier.com/locate/ailsci

Trends and challenges in chemoinformatics research in Latin America

Jazmín Miranda-Salas[a], Carlos Peña-Varas[b,c], Ignacio Valenzuela Martínez[b], Dionisio A. Olmedo[d], William J. Zamora[e,f,i], Miguel Angel Chávez-Fumagalli[g], Daniela Q. Azevedo[h], Rachel Oliveira Castilho[h], Vinicius G. Maltarollo[h], David Ramírez[b], José L. Medina-Franco[a,*]

[a] DIFACQUIM Research Group, Department of Pharmacy, School of Chemistry, Universidad Nacional Autónoma de México, Avenida Universidad 3000, México 04510, Mexico
[b] Departamento de Farmacología, Facultad de Ciencias Biológicas, Universidad de Concepción, Concepción 4030000, Chile
[c] Departamento de Ciencias de la Computación, Facultad de Ingeniería, Universidad de Concepción, Concepción 4030000, Chile
[d] Centro de Investigaciones Farmacognósticas de la Flora Panameña (CIFLORPAN), Apartado 0824-00178, Facultad de Farmacia, Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá
[e] CBio3 Laboratory, School of Chemistry, University of Costa Rica, San Pedro, San José, Costa Rica
[f] Laboratory of Computational Toxicology and Biological Testing Laboratory (LEBi), University of Costa Rica, San Pedro, San José, Costa Rica
[g] Computational Biology and Chemistry Research Group, Vicerrectorado de Investigación, Universidad Católica de Santa María, Arequipa 04000, Perú
[h] Department of Pharmaceutical Products, Faculty of Pharmacy, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos, 6627, Belo Horizonte, Minas Gerais 31270-901, Brazil
[i] Advanced Computing Lab (CNCA), National High Technology Center (CeNAT), Pavas, San José, Costa Rica

2023



TICAL 2025

Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos

frontiers | Frontiers in Drug Discovery

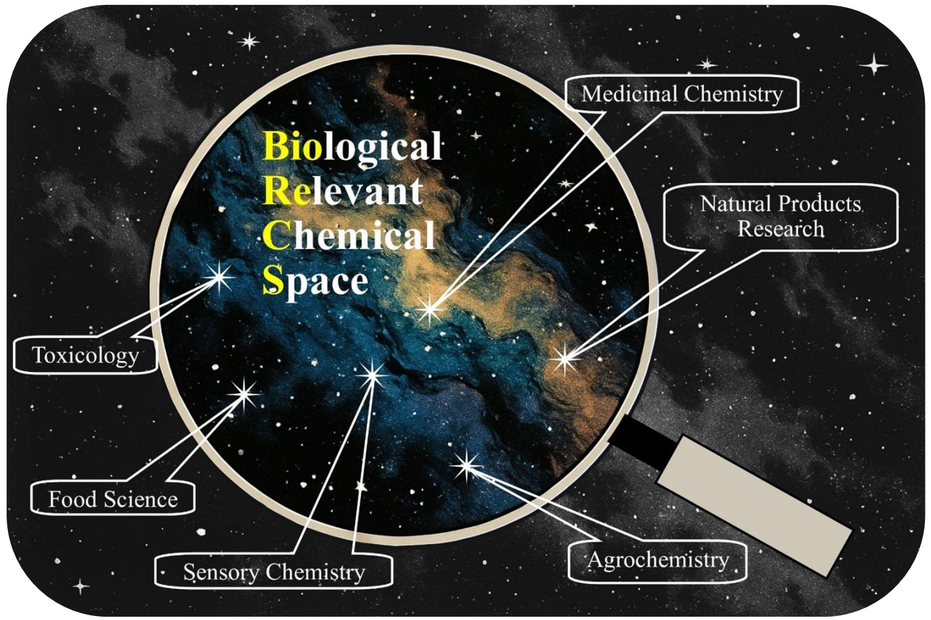
On the biologically relevant chemical space: BioReCS

José L. Medina-Franco[1]*, Edgar López-López[1,2], Juan F. Avellaneda-Tamayo[1] and William J. Zamora[3,4]

[1]DIFACQUIM Research Group, Department of Pharmacy, School of Chemistry, Universidad Nacional Autónoma de México, Avenida Universidad 3000, Mexico City, Mexico, [2]Department of Chemistry and Graduate Program in Pharmacology, Center for Research and Advanced Studies of the National Polytechnic Institute, Section 14-740, Mexico City, Mexico, [3]CBio3 Laboratory, School of Chemistry, University of Costa Rica, San José, Costa Rica, [4]Laboratory of Computational Toxicology and Biological Testing Laboratory (LEBi), University of Costa Rica, San José, Costa Rica

KEYWORDS

chemoinformatics, dark chemical matter, de novo design, food chemicals, metallodrugs, natural products, odor chemicals, peptides



2025

TICAL 2025

Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos

JCIM JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING

Open Access

This article is licensed under CC-BY 4.0

pubs.acs.org/jcim Article

Latin American Natural Product Database (LANaPDB): An Update

Alejandro Gómez-García, Daniel A Acuña Jiménez, William J Zamora, Haruna L Barazorda-Ccahuana, Miguel Á. Chávez-Fumagalli, Marilia Valli, Adriano D Andricopulo, Vanderlan da S Bolzani, Dionisio A Olmedo, Pablo N Solís, Marvin J Núñez, Johny R Rodríguez Pérez, Hoover A Valencia Sánchez, Héctor F Cortés Hernández, Oscar M Mosquera Martinez, and José L Medina-Franco*

2024

JCIM JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING

Open Access

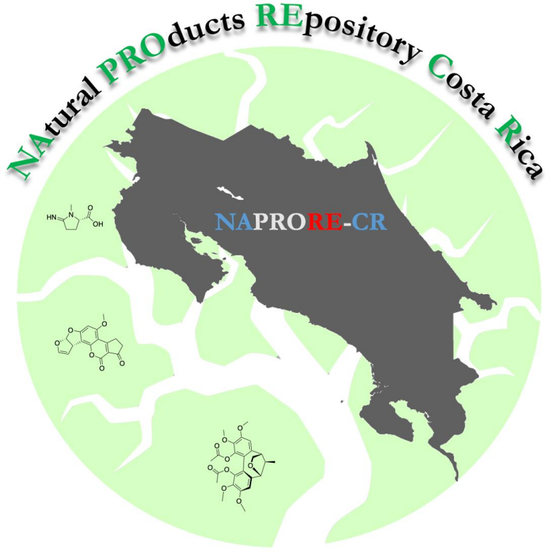
This article is licensed under CC-BY 4.0

pubs.acs.org/jcim Article

Natural Products Repository of Costa Rica (NAPRORE-CR): An Open-Access Database

Published as part of Journal of Chemical Information and Modeling special issue "Computational Chemistry in the Global South: The Latin American Perspective".

Daniel A. Acuña-Jiménez, Jose Rodríguez-Zúñiga, Daniela Gutiérrez-Ramírez, Ricardo Quesada-Grosso, Valery Conejo-López, Kelvin Arce-Villalobos, William J. Zamora,* and José L. Medina-Franco*



2025

TICAL 2025

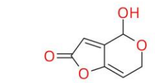
Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos

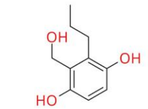
Table 1. Natural Product Databases in the Updated Version of LANaPDB

Database	Number of compounds	Source	General description	References
$NuBBE_{DB}$ (Brazil)	2223	plants, microorganisms, terrestrial and marine animals	Natural products of Brazilian biodiversity. Developed by the São Paulo State University and the University of São Paulo.	53,54
SistematX (Brazil)	9514	plants	Database composed of secondary metabolites and developed at the Federal University of Paraiba.	55,56
UEFS (Brazil)	503	plants	Natural products that have been separately published, but there is no common publication or public database for it. Developed at the State University of Feira de Santana.	57
NPDB EjeCol (Colombia)	236	plants, plants-derived food	Natural products and foods derived from plants present in the Eje Cafetero Región of Colombia, database created and curated at the Technological University of Pereira.	25
NAPRORE-CR (Costa Rica)	~1600	plants, microorganisms	Developed in the CBio3 and LaToxCIA Laboratories of the University of Costa Rica.	*a*
LAIPNUDELSAV (El Salvador)	214	plants	Developed by the Research Laboratory in Natural Products of the University of El Salvador.	*a*
UNIIQUIM (Mexico)	1112	plants	Natural products isolated and characterized at the Institute of Chemistry of the National Autonomous University of Mexico.	58
BIOFACQUIM (Mexico)	750	plants, fungus *Propolis*, marine animals	Natural products isolated and characterized in Mexico at the School of Chemistry of the National Autonomous University of Mexico and other Mexican institutions.	59,60
CIFPMA (Panama)	363	plants	Natural products that have been tested in over 25 in vitro and in vivo bioassays for different therapeutic targets, developed at the University of Panama.	61,62
PeruNPDB (Peru)	280	animals, plants	Natural products representative of Peruvian biodiversity. Created and curated at the Catholic University of Santa Maria.	63

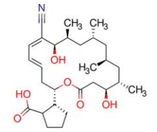
*a*The database has not been published yet.



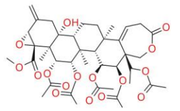
NPRCR.58.81.390
Patulin
Penicillium sp.
Induces terminal UPR in OSCC cells (2.5-10 μM), could induce apoptosis in OSCC cells



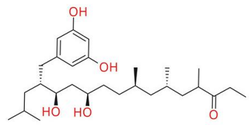
NPRCR.56.0.374
Mirandamycin
CR1223-D (microbial extract)
Broad-spectrum antibacterial activity against *E. coli*, *P. aeruginosa*, *V. cholerae*, MRSA and *M. tuberculosis*



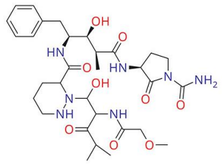
NPRCR.46.0.337
Borrelidin
Undefined marine microorganisms
Threonyl-tRNA synthetase inhibitor, inducer of UPR in oral cancer cells



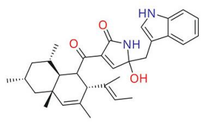
NPRCR.64.88.427
Correolide
Spachea correare
Selective blocker of the voltage-gated potassium channel $K_v1.3$



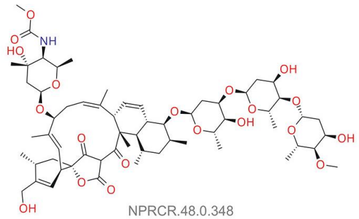
NPRCR.52.77.364
Baulamicyn A
Streptomyces tempisquensis
In vitro activity against SbnE (IC_{50} = 4.8 μM) and AsbA (IC_{50} = 180 μM)



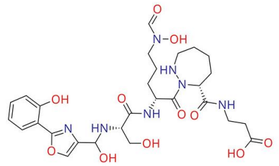
NPRCR.47.74.340
Actinoramide A
Streptomyces ballenaensis
Antimalarial activity (EC_{50} = ~200 nM) in five tested parasite lines (Dd2, HB3, 7G8, GB4, cp250)



NPRCR.40.68.317
Codinaeopsin
Codinaeopsis sp.
Antimalarial activity against *Plasmodium falciparum* (IC_{50} = 4.7 μM)



NPRCR.48.0.348
Lobophorin CR1
Undefined marine/terrestrial microorganisms
Inhibitor of OSCC cell lines UMSCC1 and UMSCC14 A growth (1.25-80 μM)

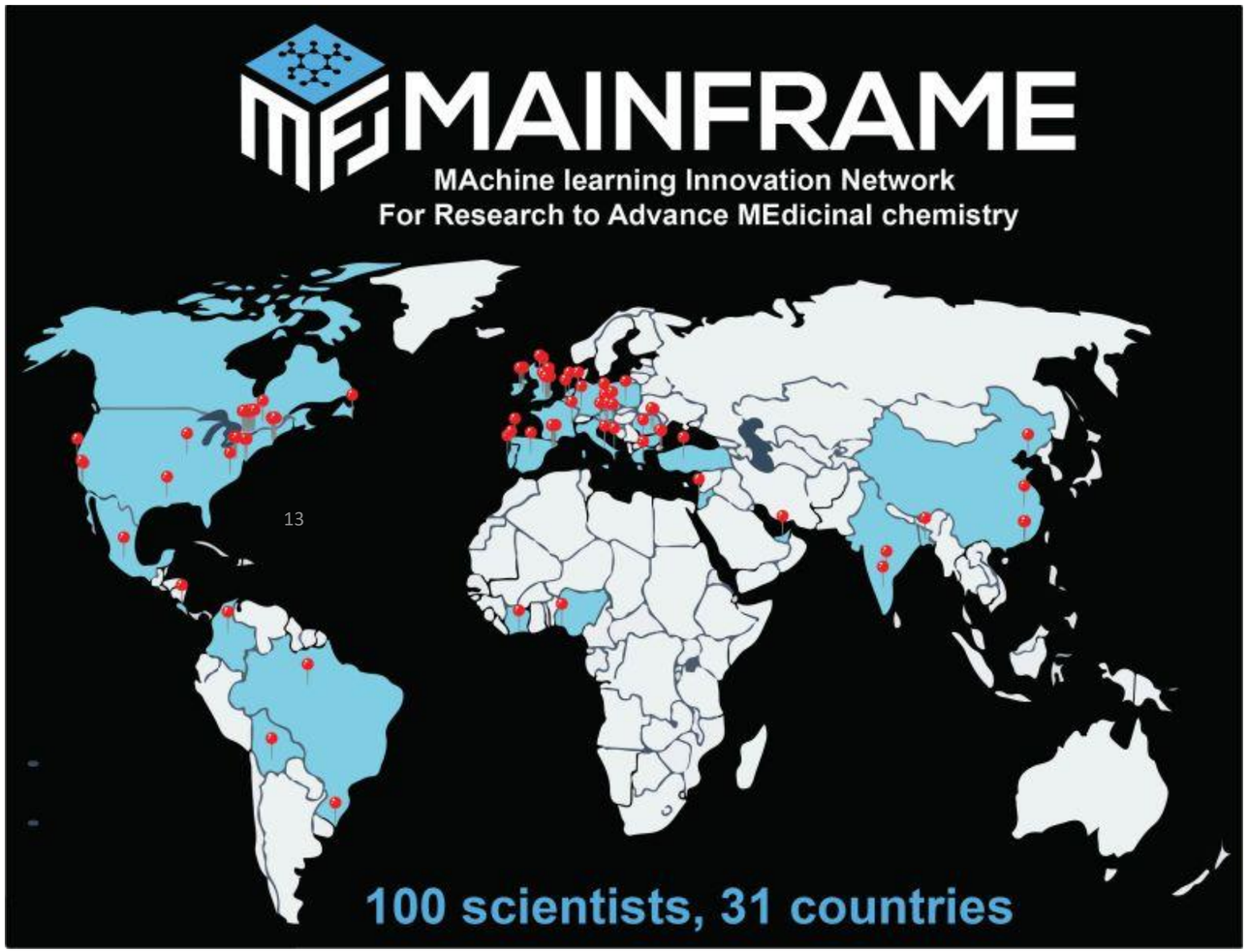


NPRCR.44.72.331
Cahuitamycin C
Streptomyces gandocaensis
Acinetobacter baumanni biofilm inhibitor (IC_{50} = 14.5 μM)

TICAL 2025

Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos



TICAL 2025

Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos

> Inteligencia Artificial y Descubrimiento de Fármacos en Moléculas Pequeñas

> $6M en Fondos para el Programa

SGC

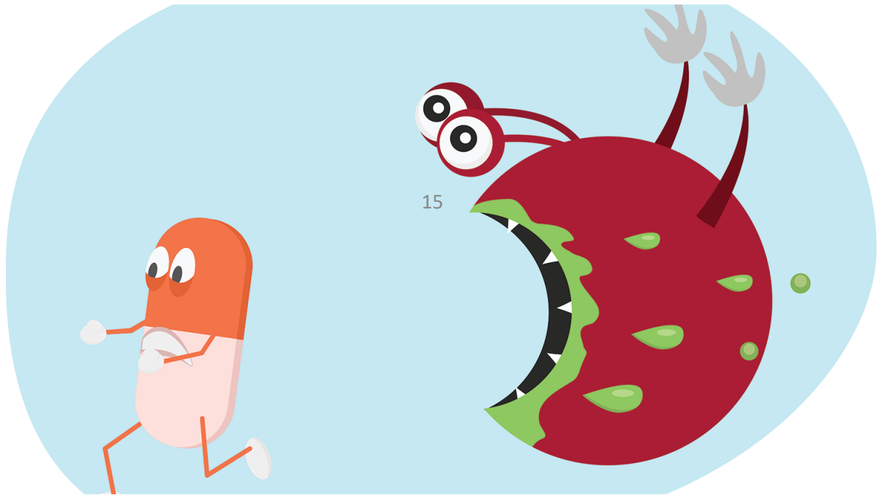
The Structural Genomics Consortium (SGC) - 2009

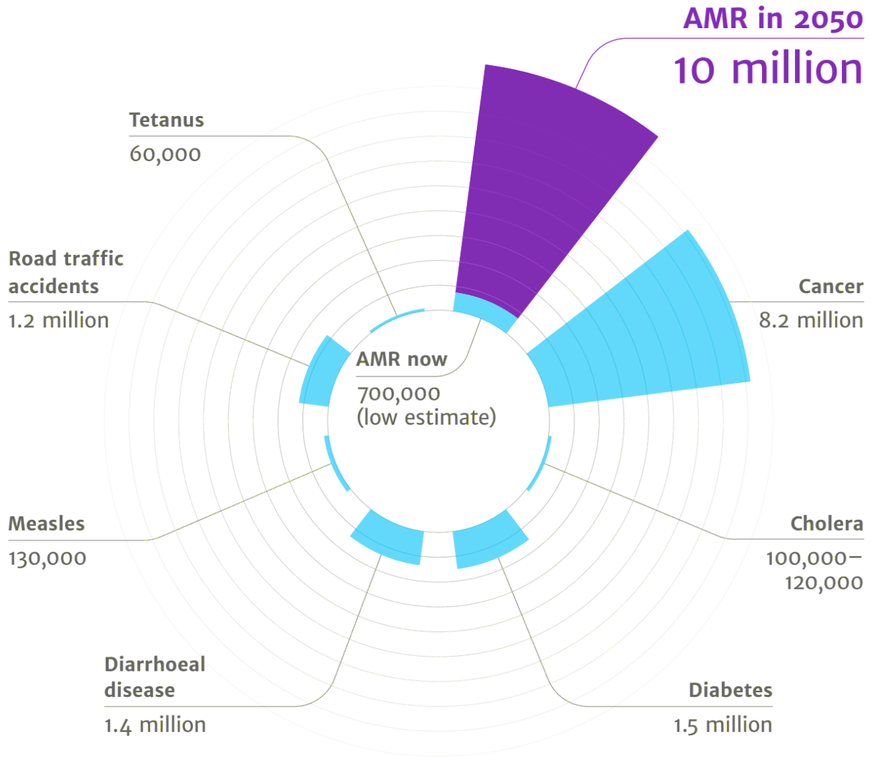
TICAL 2025

Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos

> Resistencia Antimicrobiana (AMR)





TICAL 2025

Investigación Activa

Búsqueda y Diseño de Fármacos

Microbial Biotechnology

WILEY

MICROBIAL BIOTECHNOLOGY

RESEARCH ARTICLE OPEN ACCESS

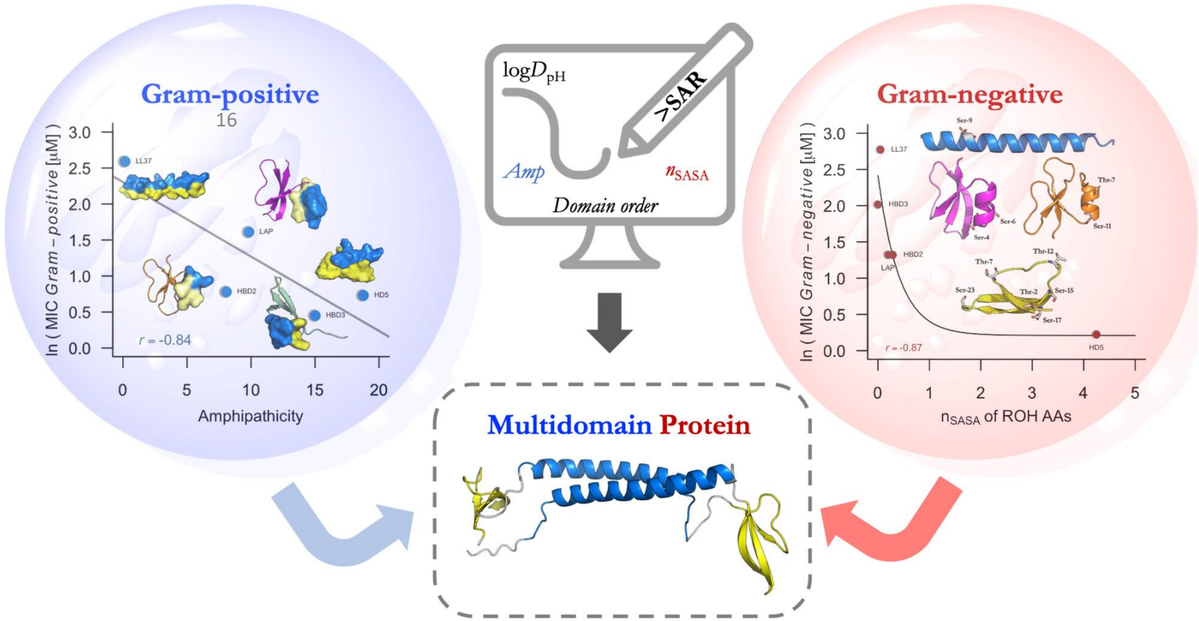
2025

Structure–Antimicrobial Activity Relationships of Recombinant Host Defence Peptides Against Drug-Resistant Bacteria

Sergi Travé-Asensio[1] | Aida Tort-Miró[1] | Silvana Pinheiro[2,3] | Elena García-Fruitós[1] | Anna Arís[1] | William J. Zamora[2,3]

[1]IRTA, Ruminant Production, Torre Marimon, Caldes de Montbui, Catalonia, Spain | [2]CBio[3] Laboratory, School of Chemistry, University of Costa Rica, San José, Costa Rica | [3]Laboratory of Computational Toxicology and Artificial Intelligence (LaToxCIA), Biological Testing Laboratory (LEBi), University of Costa Rica, San José, Costa Rica

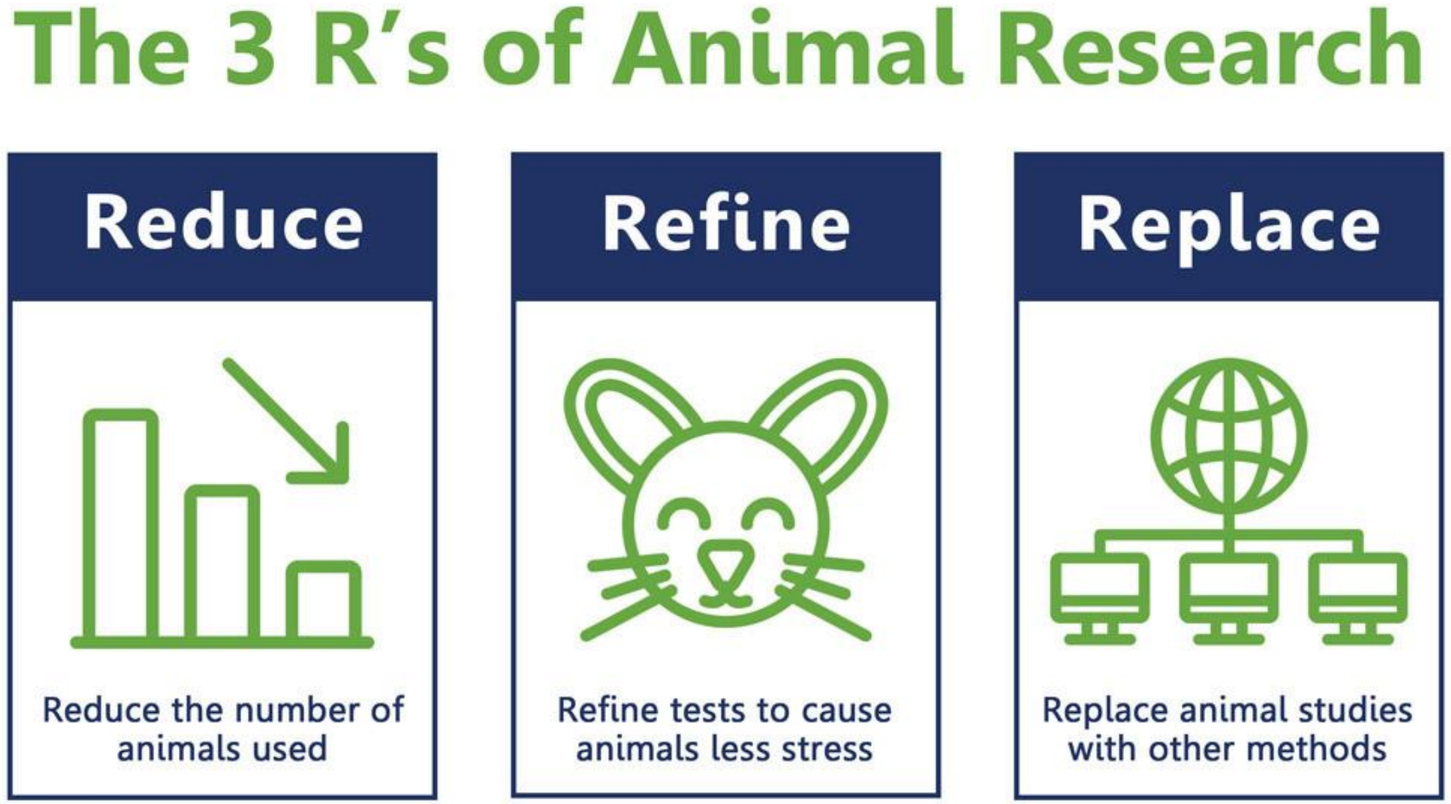
Correspondence: Elena García-Fruitós (elena.garcia@irta.cat) | Anna Arís (anna.aris@irta.cat) | William J. Zamora (william.zamoraramirez@ucr.ac.cr)



TICAL 2025

Investigación Activa

Toxicología Computacional



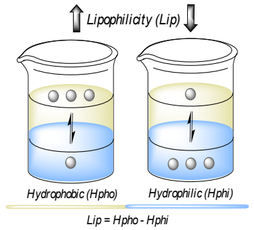
Investigación Activa

Toxicología Computacional

B-assessment

> Potencial de bioacumulación de diferentes sustancias.

-Factor Bio-concentración (BCF)
-Factor Bio-accumulación (BAF)
-Factor Biomagnificación (BMF)



"Air"

$\log K_{o/a}$

"n-octanol"

$\log P_{o/w}$

TICAL 2025

Investigación Activa

Toxicología Computacional

Portal de la INVESTIGACIÓN
Ciencia • Cultura • Sociedad

ENGLISH VERSION

SOBRE LA VICERRECTORÍA | INVESTIGACIÓN | PRODUCCIÓN CIENTÍFICA | COMUNICACIÓN | INNOVACIÓN Y EMPRENDIMIENTO | ÁREA PARA INVESTIGADORES

NOTICIAS

Grupo de investigación de la UCR gana reto mundial en diseño de medicamentos

19. 02. 21

María Laura Molina Cordero / maria.molinacordero@ucr.ac.cr
Rev: Manrique Vindas Segura / manrique.vindas@ucr.ac.cr

El profesor, Dr. William J. Zamora Ramírez, y el estudiante, Kenneth López Pérez, forman parte del nuevo grupo de investigación en bioinformática, biofísica y biología computacional (CB3 Group) de la Escuela de Química de la UCR.

A la izquierda el Bach. Kenneth López Pérez y a la derecha el Dr. William J. Zamora Ramírez.

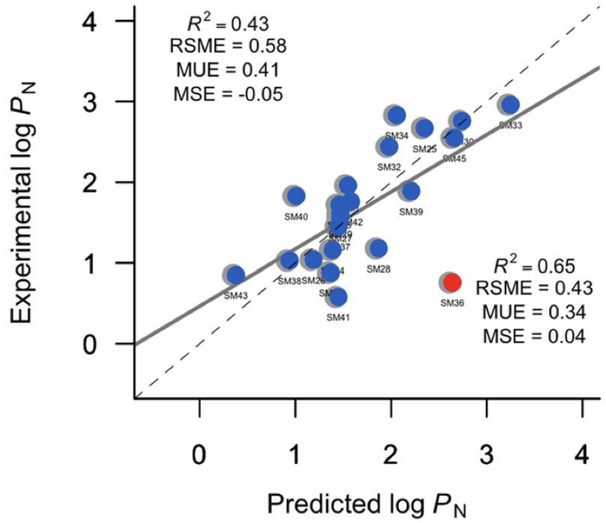
Home › Journal of Computer-Aided Molecular Design › Article

Multiple linear regression models for predicting the *n*-octanol/water partition coefficients in the SAMPL7 blind challenge

Published: 12 July 2021
Volume 35, pages 923–931, (2021) Cite this article

Journal of Computer-Aided Molecular Design

Kenneth Lopez, Silvana Pinheiro & William J. Zamora



2021

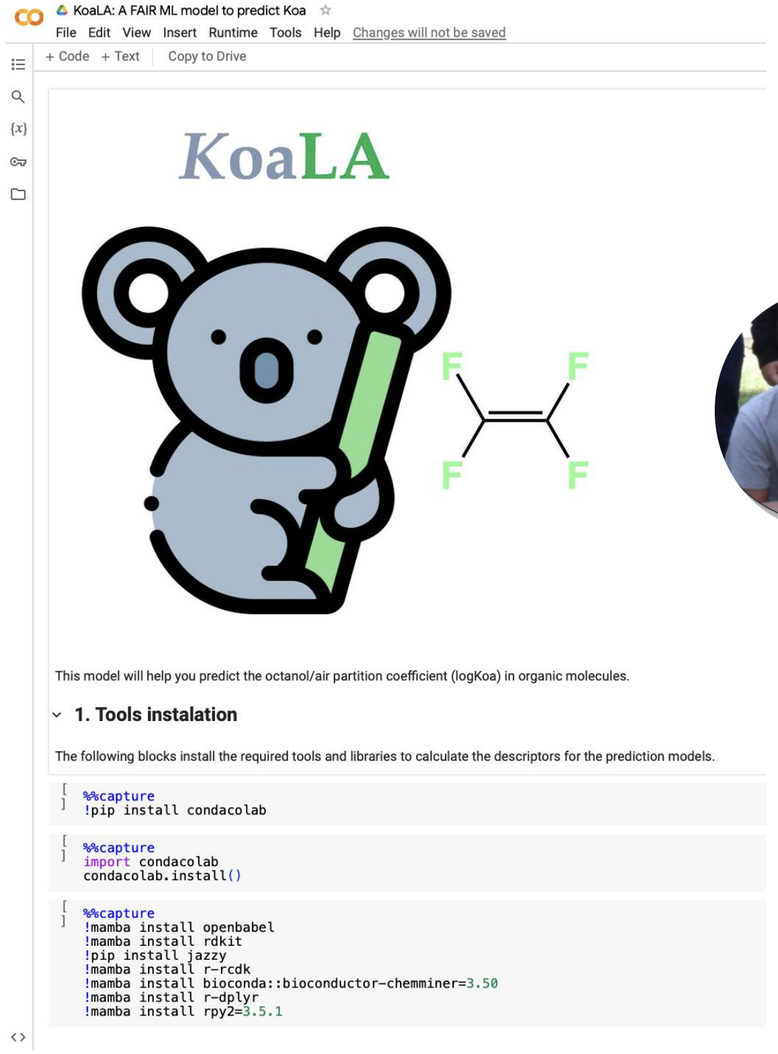
TICAL 2025

Investigación Activa

Toxicología Computacional

Findable Accessible Interoperable Reusable

CNCA
Colaboratorio Nacional de Computación Avanzada

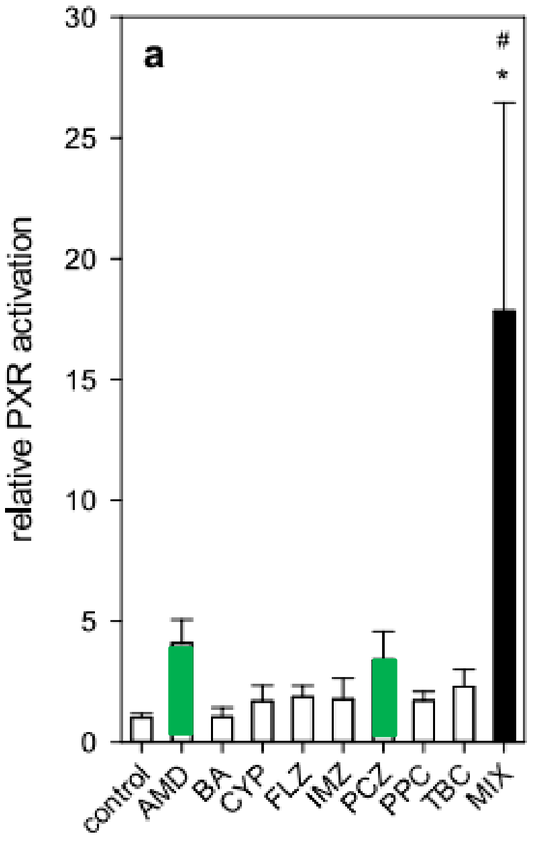


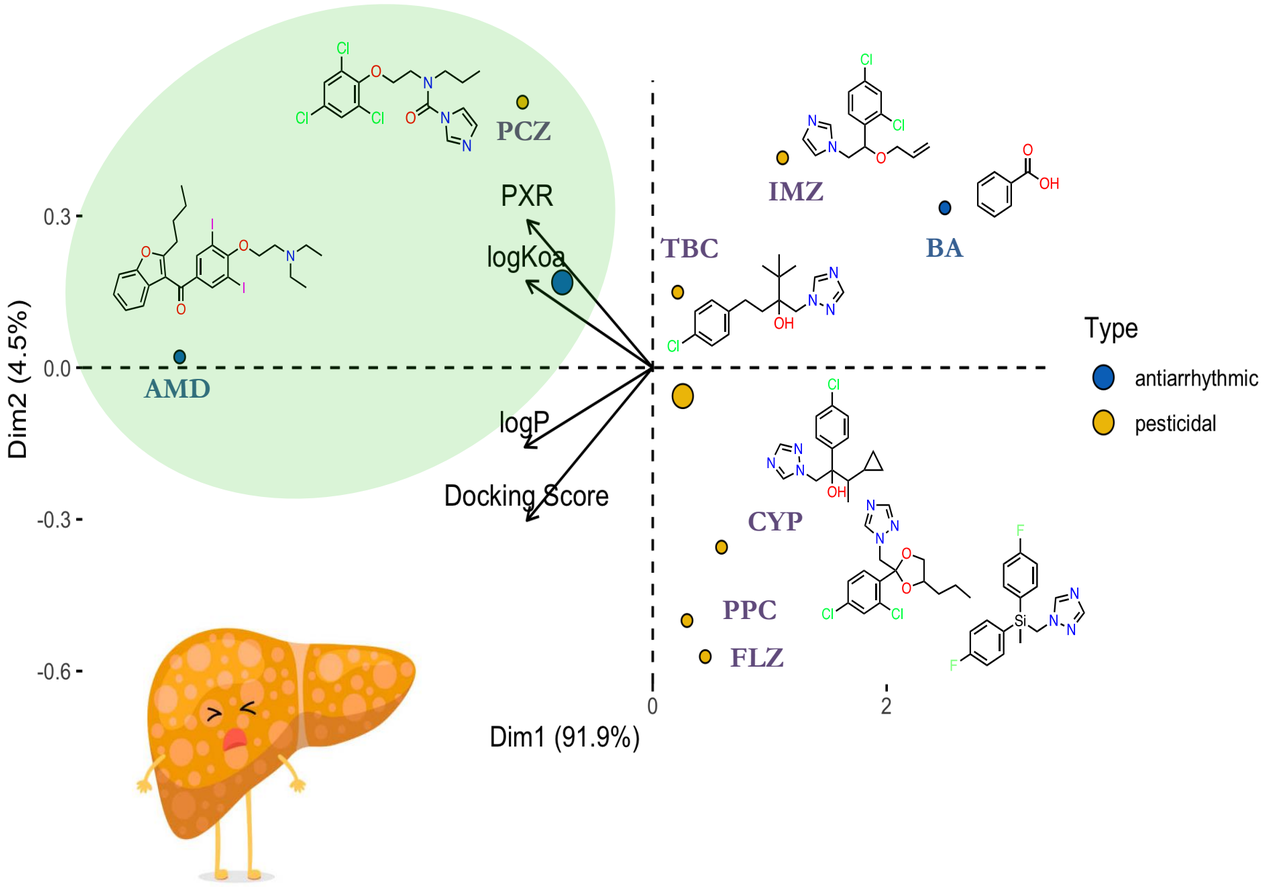
Antonio Piedra

TICAL 2025

Investigación Activa

Toxicología Computacional





TICAL 2025

¡GRACIAS!
THANKS!

¿Alguna pregunta? Any questions?

william.zamoraramirez@ucr.ac.cr
william.zamora.ramirez@una.ac.cr