

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Curso teórico-práctico: principios de la OECD para el desarrollo de modelos QSAR



Profesores

Dra. Karina Martínez Mayorga

Dr. Abraham Madariaga Mazón

MSc. Bruno Hernández

Grupo de Química Biológica y Computacional (QUIBIC) del Instituto de Química de la
UNAM.

inicia: 15 de julio del 2024

100% online (asincrónico: google classroom/sincrónico: GoogleMeet)

duración: 15 h

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Presentación:

La aplicación y la pertinencia de un modelo QSAR se basa en el conjunto de elementos empleados para la obtención de la correlación y en los métodos estadísticos para evaluarlo. La correcta selección de los conjuntos moleculares para la generación del modelo QSAR resulta de suma importancia en la validación de este, ya que debe guardar relación con el espacio químico bajo estudio. Esta serie de cursos tienen como objetivo brindar las herramientas necesarias para determinar la aplicación, la pertinencia y calidad de un estudio QSAR.

Objetivos:

- Familiarizar al participante con los principios de la OECD para el desarrollo de modelos QSAR
- Conocer los principales programas computacionales utilizados en el desarrollo de modelos (Q)SAR.

TEMARIO

1. Los cinco principios establecidos por la OECD para métodos (Q)SAR. (Ejemplos en cada punto)
 - 2.1 “Endpoint” definido.
 - 2.2 Algoritmo no ambiguo en los casos aplicables: Regresión lineal múltiple, redes neuronales, entre otros.
 - 2.3 Dominio de aplicabilidad definido: Métodos de determinación del dominio de aplicabilidad.
 - 2.4 Bondad de ajuste, robustez y predictividad. Validación interna y externa y estadísticos de la predicción.

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



2.5 Interpretación mecanicista.

2. Fundamentos y principios de los métodos y programas computacionales más utilizados en los análisis (Q)SAR. Resolución de ejemplos y problemas

3.1 T.E.S.T (Hierarchical Clustering, Nearest Neighbor Method, FDA y Consensus)

3.2 Sarah / Derek Nexus

3.3 Comparación de métodos y modelos generados “in house”

3. Presentación de resultados. Esquema de reportes tipo QMRFs y QPRF

Inversión: \$ **1499.00 MXN (85.6 USD)**. Para inscribirse en México, realizar pago a 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. **Pagos en México y fuera de México:** <https://bit.ly/3qTKNH6> (PayPal, Mercado Pago (pagos con TDC a MSI) y por Stripe). Tenemos descuentos desde 5-10% a alumnos, profesores de tiempo completo, haber tomado cursos en pharbiois.com