

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYT-SECIHTI: 2000001

Curso de Modelos QSAR: Principios OECD

Constancia con folio de validez oficial de red SEP-CONOCER EC0301 y próximamente EC
0366



Profesores

Dra. Karina Martínez Mayorga

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

Dr. Abraham Madariaga Mazón

https://www.linkedin.com/in/abraham-madariaga-mazon-6b8599228/?trk=public_profile_browsemap&originalSubdomain=mx

MSc. Bruno Hernández

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

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Master Class GRATIS: 4 de SEPTIEMBRE del 2025

Fecha de Inicio del curso : 15 de SEPTIEMBRE del 2025

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

Duración: 20 horas

Acerca del curso

El curso tiene como objetivo brindar las herramientas necesarias para valorar la pertinencia, aplicación y validez de modelos QSAR en función del espacio químico, algoritmos empleados y calidad de los datos. Se explicarán los cinco principios establecidos por la OCDE con ejemplos prácticos, se compararán herramientas computacionales como T.E.S.T. y Sarah/Derek Nexus, y se enseñará la elaboración de reportes bajo los formatos QMRF y QPRF. Como conocimientos previos, se recomienda contar con nociones básicas de química, estadística, manejo de datos, así como haber cursado el *“Curso de Modelos QSAR: Fundamentos”*. Esta formación es clave para profesionales involucrados en el diseño racional de fármacos, evaluación toxicológica computacional, normatividad química y métodos alternativos a la experimentación in vivo.

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.

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



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.

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: \$ 1,499.00 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://www.pharbiois.com/inscribirme-qsar-oecd> (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