

Aplicación de modelos predictivos para parámetros ADMET

Día: 9 de julio 2024

Horario: 13:30 -15:00 h

Modalidad: híbrido

Ponente: Martina Palomino (Investigadora en ProtoQSAR-MOLDRUG)

Descripción

Los modelos *in silico* son una herramienta de gran interés en el ámbito toxicológico, se pueden usar para sustituir a los estudios en animales, reduciendo el impacto ético, el coste de recursos y el tiempo de espera. En este taller vamos a enseñar a como predecir propiedades ADME y toxicológicas de manera fácil usando modelos QSAR. Además, explicaremos las nociones básicas sobre técnicas computacionales para que sepas reconocer las más habituales (read-across, QSAR, etc.) y entender sus principales características, ventajas y limitaciones.

Programa

13:30-14:00 h. Introducción a los métodos computacionales para la predicción de propiedades ADMET

- ¿Quiénes somos?
- Nuestros proyectos en el área de salud
- ¿Por qué usar modelos computacionales?
- Tipos de modelo: QSAR, Read-across
- ¿Como se desarrolla un modelo QSAR?

14:00-14:15 h. Aplicación de métodos *in silico* en el contexto regulatorio

- Principios la OECD
- Aplicación en normativa REACH, ICH, cosméticos, etc.

14:15-15:00 h. Demostración práctica de herramientas de predicción

- Resumen de herramientas de predicción
- Introducción a ProtoPRED
- Predicción con ProtoADME
- Predicción ICH con ProtoPRED
- Introducción a Chemopredictionsuite

Inscríbete a través de este enlace:

<https://form.typeform.com/to/U7bRfqcl>

