

Predicción de propiedades físico-químicas, biológicas y/o (eco)toxicológicas de compuestos químicos mediante modelos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships)

Patricia Serrano Candelas / Project Manager



Organiza:



Colabora:



Financia:



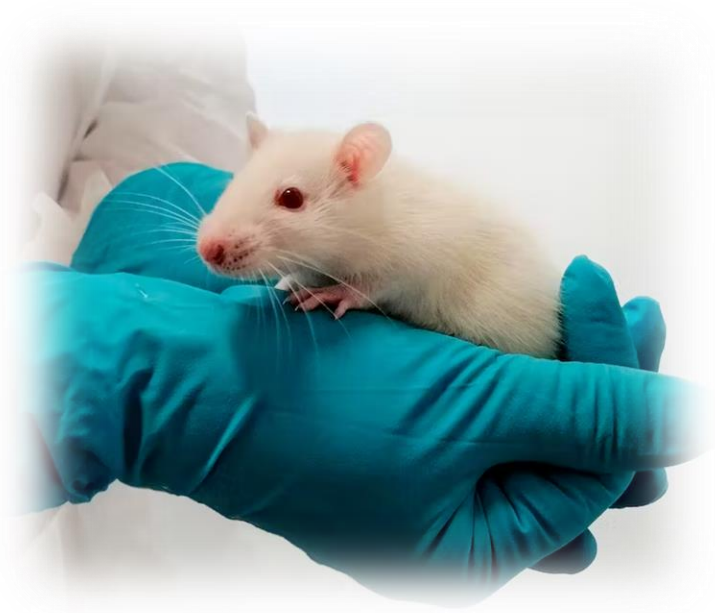
DESCRIPCIÓN OFERTA TECNOLÓGICA

#BIOVALTRANSFIERE

#BIOVALCOLABORA

Modelos QSAR → Métodos alternativos a la experimentación animal *in vivo* → *In vitro*
→ *In silico*

10 millones de animales sacrificados al año en Europa con fines científicos, toxicológicos y regulatorios



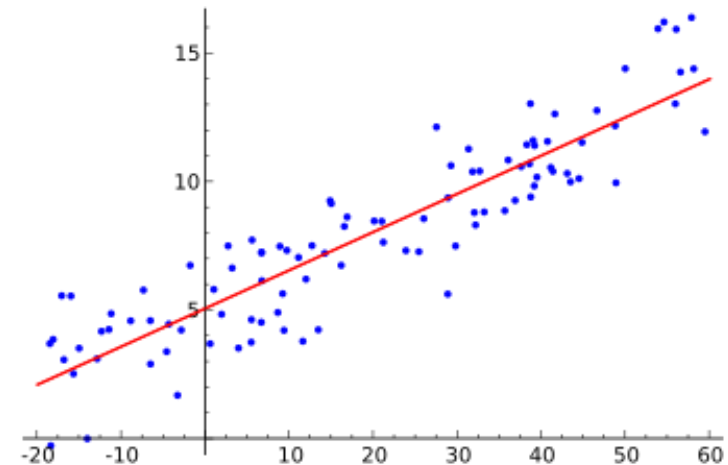
Modelos QSAR → Algoritmos matemáticos complejos

CLASIFICACIÓN

		Predicción	
		Positivos	Negativos
Observación	Positivos	Verdaderos Positivos (VP)	Falsos Negativos (FN)
	Negativos	Falsos Positivos (FP)	Verdaderos Negativos (VN)

- Precisión = $(VP+VN)/(VP+FP+FN+VN)$
- Sensibilidad = $VP/(VP + FN)$
- Especificidad = $VN/(VN+FP)$

REGRESIÓN

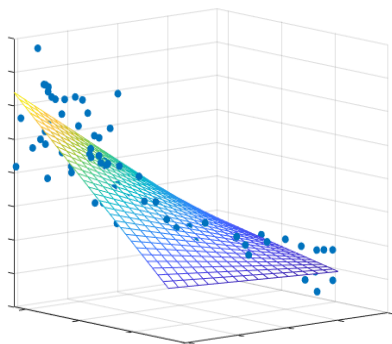


- Coeficiente de correlación

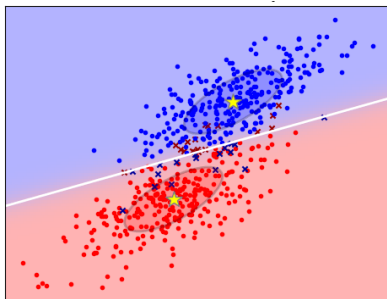
Modelos QSAR → Algoritmos matemáticos complejos

Modelos lineales

- Regresión lineal múltiple

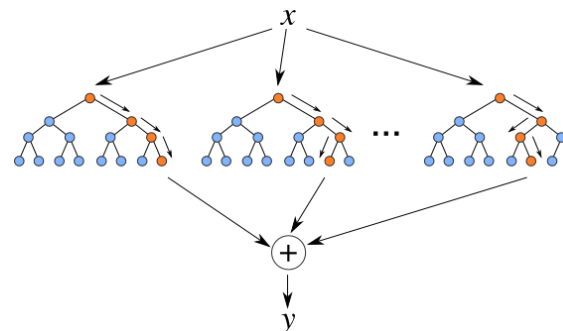


- Análisis discriminante lineal

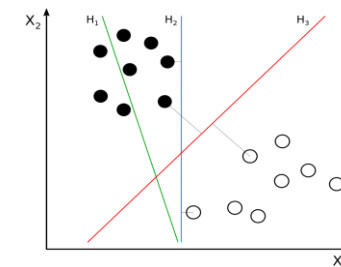
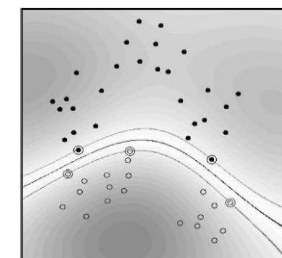


Modelos no lineales

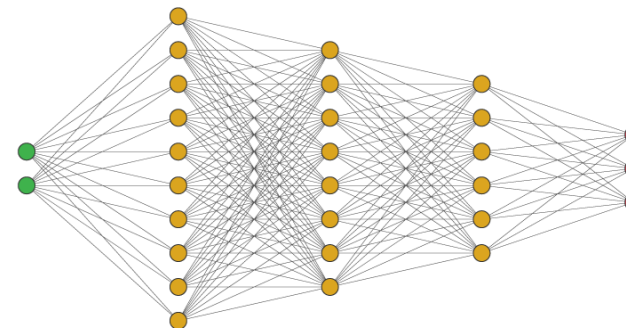
- Bosques aleatorios



- Máquina de vectores de soporte



- Redes neuronales



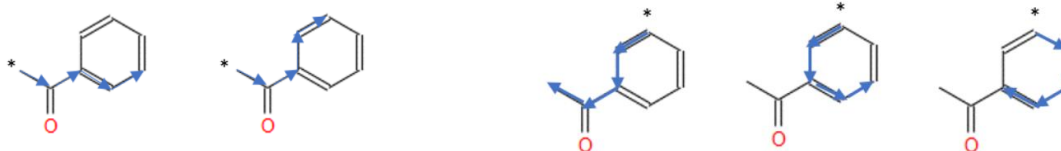
Modelos QSAR → Se basan en el cálculo de descriptores moleculares

- Propiedades físicas: solubilidad, temperatura de fusión, etc.

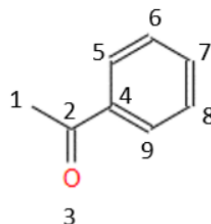
- Grupos funcionales

Descriptor	Definición	Valor
nBen	Número de grupos benzeno	1
nC=O	Número de grupos C=O	1
nCOOH	Número de grupos COOH	0

- Caminos moleculares

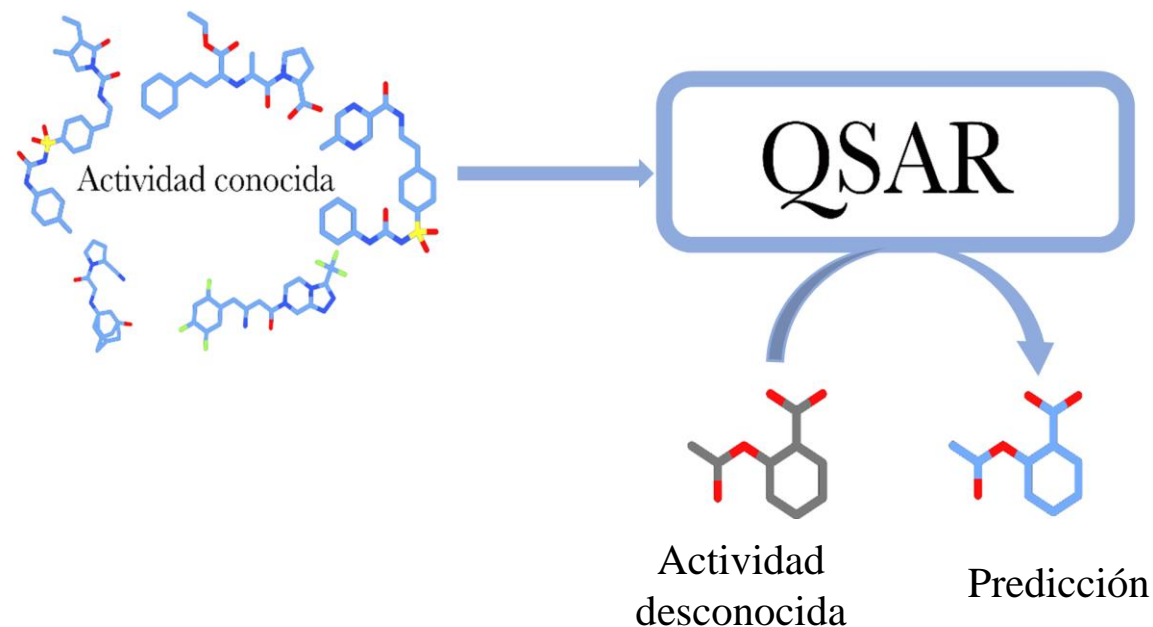


- Conectividad entre átomos



Modelos QSAR

- Relacionan estructura y actividad
- Predicción virtual de propiedades de compuestos



Cursos ProtoQSAR:

- Predicciones toxicológicas *in silico* con propósito regulatorio: (Q)SAR y read across
<https://protoqsar.com/qsar-read-across/>
- Métodos computacionales aplicados al descubrimiento de fármacos y la toxicología
https://protoqsar.com/curso_python_qsar/

Ventajas herramientas computacionales



Elevada eficacia predictiva



Ahorro de recursos materiales y económicos asociados a la experimentación



Análisis de gran cantidad de sustancias

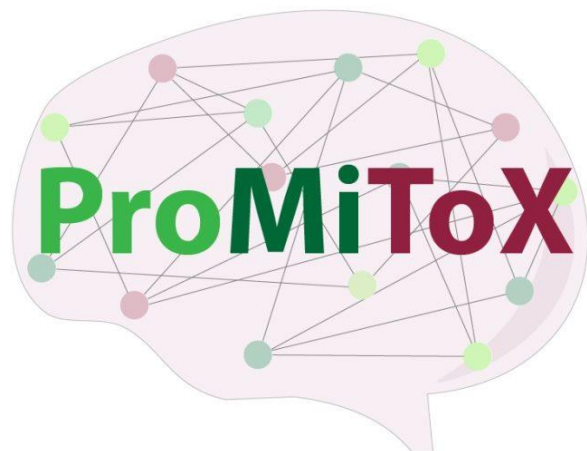


Principio de las 3R: reemplazar, reducir y refinar los ensayos en animales



Validez regulatoria (REACH, CLP, ICH, BPR...)

2019-2021



Modelos de predicción de reacciones de hipersensibilidad de formulaciones cosméticas, ambientadores y productos de limpieza del hogar basados en algoritmos de aprendizaje automático

QSAR: toxicidad humana (sensibilidad cutánea, irritación cutánea y ocular)



SECRETARÍA DE ESTADO
DE DIGITALIZACIÓN E
INTELIGENCIA ARTIFICIAL



PROYECTOS RELACIONADOS

#BIOVALTRANSFIERE

#BIOVALCOLABORA

2021-2026



Ontology-driven and artificial intelligence-based repeated dose toxicity testing of chemicals for next generation risk assessment

QSAR = toxicología humana



Horizon 2020
European Union funding
for Research & Innovation



PROYECTOS RELACIONADOS

#BIOVALTRANSFIERE

#BIOVALCOLABORA

2021-2023



Structure-activity relationship modelling of REACH-relevant endpoints to predict the toxicity of engineered nanomaterials



Doctorados empresariales *Innodocto*

2019-2023

Bioactive

Identificación de nuevos compuestos bioactivos generados por bacterias intestinales

2020-2024

HepatoDEEP

Desarrollo de un sistema experto multitarea basada en redes neuronales profundas para la predicción de hepatotoxicidad



PROYECTOS RELACIONADOS

#BIOVALTRANSFIERE

#BIOVALCOLABORA

2022-2024



Desarrollo y validación de pinturas y revestimientos, basadas en modelos quimio-informáticos, para la prevención y control de infecciones relacionadas con la asistencia sanitaria

QSAR: Cribado de compuestos biocidas



GENERALITAT
VALENCIANA



AVI AGÈNCIA VALENCIANA
DE LA INNOVACIÓ



2016-2019



COMputational tool for the assessment and substitution of Biocidal Active Substances of Ecotoxicological concern

QSAR: ecotoxicidad productos biocidas (microorganismos, algas, crustáceos y peces)



2022-2023

SulfaT*OX*

Investigación para la generación de modelos para maximizar la producción de energía verde mediante valorización energética de residuos

QSAR: cribado de compuestos inhibidores de arqueas sulfatorreductoras



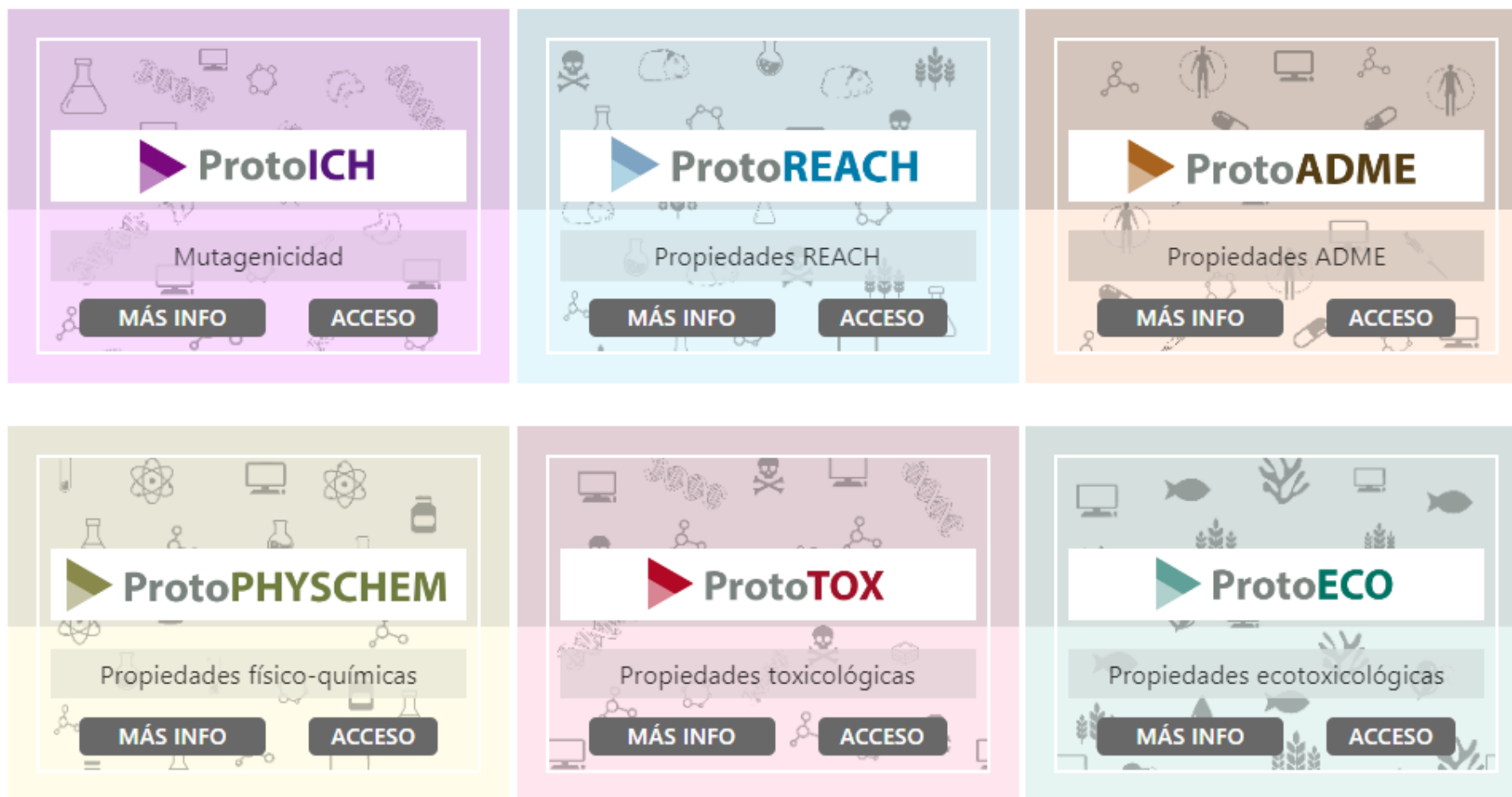
GENERALITAT
VALENCIANA

iVACE
INSTITUTO VALENCIANO DE
COMPETITIVIDAD EMPRESARIAL

Pidi
i+d pyme



Creación de la plataforma computacional ProtoPRED



<https://protopred.protoqsar.com/>





[Formulario de contacto](#)
[Iniciar sesión](#)
[ACERCA DE](#)



[ProtoICH](#)
[ProtoREACH](#)
[ProtoPHYSCHEM](#)
[ProtoTOX](#)
[ProtoECO](#)
[ProtoADME](#)

[PRUEBE NUESTRA DEMO](#)



ProtoTOX es una herramienta computacional para la predicción de propiedades toxicológicas de compuestos químicos, mediante el uso de modelos QSAR propios.

Modelos QSAR en ProtoTOX

Irritación cutánea
Código REACH: 8.1.1

Irritación ocular
Código REACH: 8.2.2

Sensibilidad cutánea
Código REACH: 8.3

Mutagenicidad (test de Ames)
Código REACH: 8.4.1

Genotoxicidad (Micronúcleos)
Código REACH: 8.4.2

Aberración cromosómica
Código REACH: 8.4.3

Toxicidad oral aguda
Código REACH: 8.5.1

Toxicidad en el desarrollo
Código REACH: 8.7.2

Carcinogenicidad
Código REACH: 8.9.1

Neurotoxicidad



POSIBLES USOS / APLICACIONES / SERVICIOS

- ☐ Predicción propiedades
- ☐ Cribado de moléculas
- ☐ Registro REACH
- ☐ Registro ICH M7
- ☐ Descubrimiento de compuestos terapéuticos
- ☐ Estudio de mecanismos de acción
- ☐ Etc.

POSIBLES COLABORACIONES

- ☐ Empresas
- ☐ Universidades
- ☐ Centros tecnológicos
- ☐ Institutos de Investigación
- ☐ Etc.

NECESIDADES

- ☐ Datos experimentales



¡GRACIAS!

Patricia Serrano – Project Manager

pserrano@protoqsar.com

<https://protoqsar.com/>

