



RÉF : RC35

## Prédire les propriétés des substances par méthodes QSAR/QSPR

VERS UNE UTILISATION RÉGLEMENTAIRE

**OBJECTIFS** Comprendre les principes de base des méthodes fondées sur les relations structure-propriété pour l'(éco)toxicité et les propriétés physico-chimiques. Juger de la pertinence des prédictions issues des méthodes QSAR\*/QSPR\*\* et « read-across » dans un contexte réglementaire (REACH). Connaître les bonnes pratiques à employer pour une utilisation robuste de ces méthodes sur la base de guides et de documents de référence.

### PUBLIC

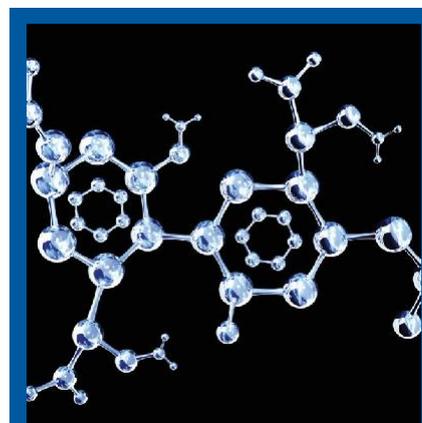
Ingénieurs des services santé, sécurité, environnement de l'industrie chimique, ingénieurs en charge de REACH, consultants des bureaux d'études, chargés d'affaires réglementaires.

### CONTENU

- Rappels sur l'utilisation des méthodes prédictives QSAR/QSPR et « read-across » dans le contexte de REACH pour l'acquisition des données et la limitation d'essais sur animaux.
- Le concept de similarité chimique dans les méthodes QSAR/QSPR : définition et implications en (éco)toxicologie et physicochimie prédictive.
- Analyse des sources d'incertitudes liées à la dérivation et à l'application de ces méthodes :
  - validation des approches QSAR/QSPR : les principes de l'OCDE et leur application pratique,
  - stratégies à adopter lors de l'analyse critique d'outils QSAR/QSPR.
- Présentation des documents officiels pour l'utilisation d'un modèle QSAR/QSPR dans le cadre de REACH.
- Développer un « read-across » ou former une catégorie chimique.
- Travail dirigé, à l'aide d'outils informatisés, sur des études de cas portant sur les principes généraux et les erreurs à éviter lors de l'utilisation d'un modèle QSAR/QSPR et « read-across ».

\* QSAR : Quantitative Structure-Activity Relationships.

\*\* QSPR : Quantitative Structure-Property Relationships.

**DURÉE 1 jour****PRIX 720 € HT**  
(le repas est offert)**SESSION**  
A - 14 juin - Paris