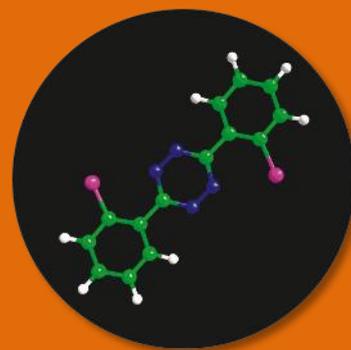


# Prédire les propriétés des substances par méthodes QSAR/QSPR

Vers une utilisation réglementaire



**DURÉE** : 1 jour

**PRIX** : 690 € HT

## SESSION

A – 12/09/17 – Paris  
Paris

## 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.

**LE REPAS EST OFFERT**

## Objectifs

**Comprendre les principes de base des méthodes fondées sur les relations structure-propriété pour l'(éco)toxicité et les propriétés physicochimiques. Juger de la pertinence des prédictions issues des méthodes QSAR\*/QSPR\* et « read-across » dans un contexte réglementaire (REACH). Connaître les sources d'information (base de données, logiciels) les plus pertinentes pour l'utilisation de ces méthodes.**

## 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.

Réalisation d'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.