



## Aplicación en toxicología de modelos predictivos “*in silico*”

**Ponentes:** Enrique Llobet y Vicente Aranda, investigadores en ProtoQSAR SL

**Lugar:** Antigua Escuela de Ingenieros Técnicos Forestales. ETSI MONTES. Universidad Politécnica de Madrid. Avda. José Antonio Novais, 10, 28040 Madrid.

**Fecha:** 16 de junio de 2026

**Horario:** 16.00-17.30 (teoría) y 18:00-19:45 (práctica)

**Registro:** Escribir correo electrónico a [aetox2026@csic.es](mailto:aetox2026@csic.es) mencionando en el asunto “**inscripción al taller precongreso**”, indicando nombre completo, NIF/ID y teléfono de contacto. Límite 30 plazas. Imprescindible estar inscrito/a al congreso. Fecha límite el **1 de junio** de 2026.

### Descripción:

Los modelos computacionales (“*in silico*”) son una herramienta de gran interés en el ámbito toxicológico, porque permiten hacer predicciones de comportamiento de compuestos químicos que se pueden usar para sustituir los estudios en animales, reduciendo el tiempo de espera, el impacto ético (3Rs) y el coste. En este taller 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. La segunda parte del taller consistirá en ejercicios prácticos, con los que te vamos a enseñar a predecir propiedades toxicológicas de manera sencilla con herramientas computacionales.

**Destinatarios:** Este taller va dirigido tanto a estudiantes y recién egresados de ciencias experimentales y de la salud como a profesionales que necesitan evaluar la toxicidad de compuestos químicos, para fines regulatorios o de desarrollo. No requiere conocimientos previos de química computacional.

**Requisitos:** ordenador con acceso a internet y una dirección de correo electrónico.

### Contenidos del taller:

- Introducción a la quimioinformática
- Tipos de modelos *in silico*
- Nociones básicas de QSAR
- Uso de modelos computacionales en toxicología regulatoria
- ProtoPRED y otras herramientas para predecir
- Ejercicios prácticos