

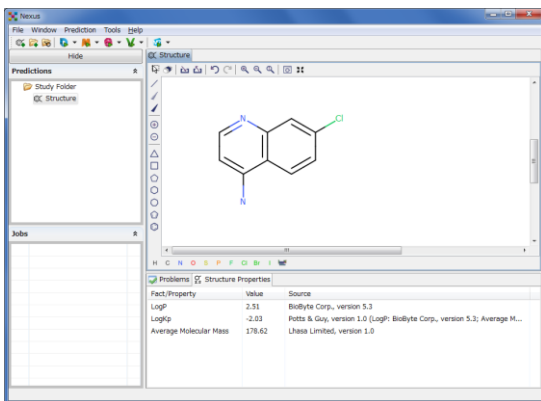
## A knowledge base expert system for the prediction of toxicological hazard



# – 毒性予測ソフトウェア



### ● 構造入力



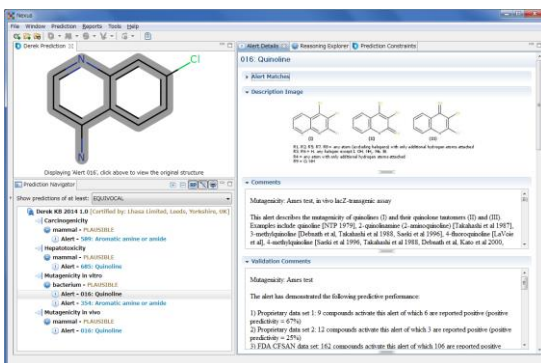
Derek Nexus は、化合物の構造からその毒性を予測する知識ベースのSAR（構造活性相関）エキスパートシステムです。

Derek Nexus は他の毒性予測プログラムのように、統計解析的な手法を用いた定量的毒性予測とは異なり、論文・公共データベースなどの既知の情報から得られた、部分構造毒性相関の経験則を定義した知識ベースにより、定性的な毒性予測を行います。

化合物構造を内蔵の描画ツールより入力、またはMOL・SDファイルなどから読み込むことで、容易に毒性予測が行えます。

予測結果と同時に、毒性予測の根拠になった構造部位を提示します。また、構造毒性相関に関するリファレンスや既知の報告化合物も参照でき、化合物の潜在的毒性の解釈にも活用できます。

### ● 毒性予測とアラートの詳細参照



### ● 知識ベース

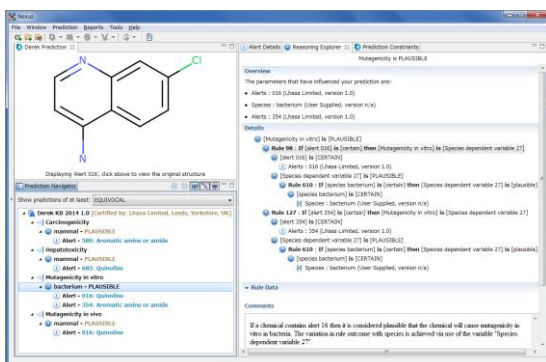
Derek Nexus で用いられる知識ベースは、既知の毒性化合物から共通のルールを導き出し作成されています。

知識ベースの作成には、Collaborative グループのメンバーから提供された情報や文献、公共のデータベースが用いられています。

作成されたルールの妥当性は、Collaborative グループのメンバー並びにLhasa社によりチェックされており、一部のアラートについては評価データを参照することができます。

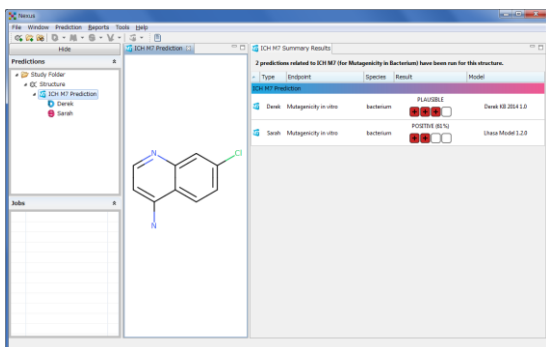
知識ベースの内容はユーザーに公開されており、現在、53のエンドポイントにおける810種のアラートが収録されています。

### ● 毒性予測ルールの参照

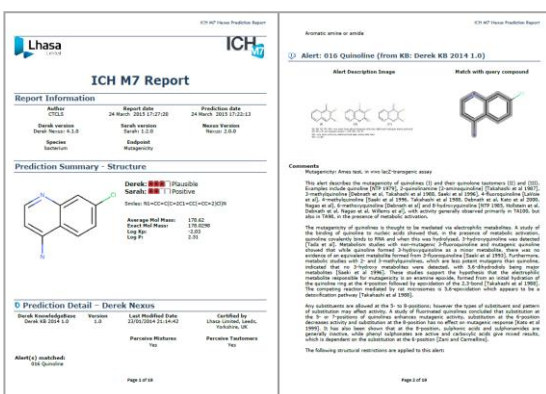


- Mutagenicity
- Hepatotoxicity
- Carcinogenicity
- HERG channel inhibition
- Chromosome damage
- Neurotoxicity
- Genotoxicity
- Teratogenicity
- Skin sensitisation
- Thyroid toxicity
- Irritation
- Respiratory sensitisation

## ● ICH M7 Prediction 機能



## ● ICH M7 レポート



## ● ICH M7ガイドラインへの対応

ICH M7 (潜在的発がんリスクを低減するための医薬品中DNA反応性(変異原性)不純物の評価及び管理)ガイドライン対応に向けた、知識ベースDerek Nexusと統計ベースSarah Nexusの相補的な(Q) SARによる予測結果が同時に得られるICH M7 Prediction機能が装備されています。

構造式を入力して、ICH M7ボタンをクリックするだけで、この両システムの予測結果を単一画面上に表示することができます。サマリーだけでなく、Derek NexusおよびSarah Nexusのそれぞれの予測結果の詳細も確認することが可能です。

また、ICH M7 レポートとして、異なる二種の予測システムの結果を一つのWORDファイルおよびPDFファイルに出力することができます。申請のための添付資料としてご利用いただけます。

\* ICH M7 Prediction機能の利用には、Derek NexusおよびSarah Nexusのライセンスが必要となります。

## ● 自社知識ベースの構築と知識ベースの詳細確認

知識ベースの構築にはDerek Knowledge Editorというツールが用意されています。このツールを用いて、ユーザは自社独自のアラートを作成することが可能です。

また、Derek Knowledge Editorを用いて既存の知識ベースの詳細を参照することが可能です。アラートやエンドポイントのリストの表示や、キーワードや部分構造での検索機能が用意されています。

## ● Derek Knowledge Editor

