

QSAR毒性予測ソフトウェア



Leadscope® Model Applier Genetic Toxicity Suite

Leadscope Model Applier は、Leadscope社とFDAにより共同で開発されたQSAR毒性予測ソフトウェアです。各種毒性試験データやヒト副作用データを元に、主成分回帰や部分ロジスティック回帰に則って統計的に毒性発現確率を算出することにより毒性を予測致します。とりわけ、遺伝毒性を予測する予測モデル群 – “Genetic Toxicity Suite”は、ICH M7で議論が進められているDNA反応性(変異原性)不純物のリスク評価にご活用いただけます。

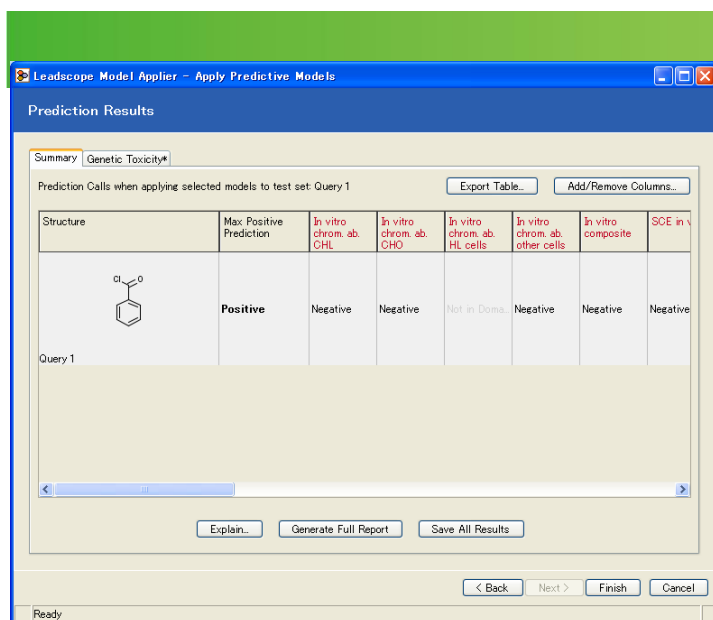


Fig.1: 遺伝毒性に対する毒性予測結果

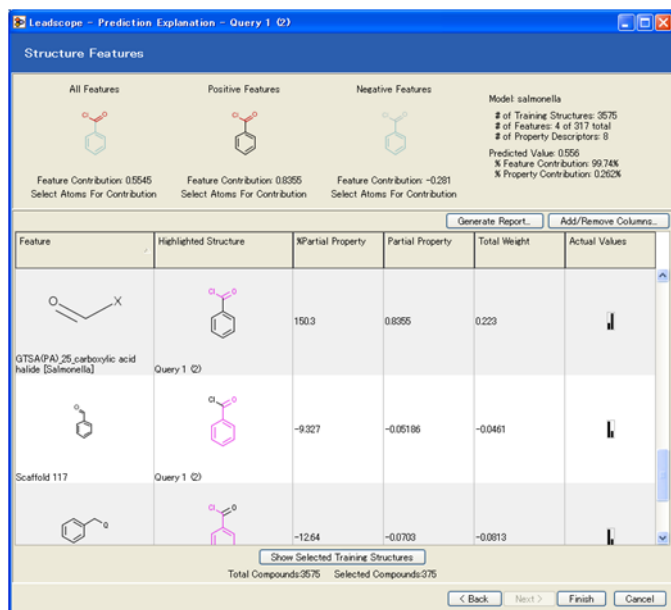


Fig.2: 毒性予測結果に対する予測の根拠

特徴

- QSAR毒性予測ソフトウェア (化合物構造に基づき定量的に毒性予測)
- CRADA契約を通じてFDAと共同開発
- シンプルで操作しやすい画面
- クライアントソフトウェア

毒性予測モデル

- Gene mutation models
 - *in vitro* microbial composite
 - *in vitro* microbial *Salmonella* (composite)
 - *in vitro* microbial *E. coli* composite
 - *in vitro* microbial *E. coli* w strains
 - *in vitro* fungi yeast composite
 - *in vitro* fungi yeast *S. cerevisiae*
 - *in vivo* Drosophila composite
 - *in vivo* Drosophila sex linked recessive lethal
 - *in vivo* Drosophila heritable translocations
 - *in vivo* mammalian composite
 - *in vivo* mammalian dominant lethal
 - *in vitro* CHO V79 hgrpt
- DNA damage models
 - *in vitro* UDS composite
 - *in vitro* UDS rat hepatocytes
 - *in vitro* UDS human lymphocytes
- clastogenicity models
 - *in vivo* micronucleus composite
 - *in vivo* micronucleus mouse
 - *in vivo* chromosome aberrations composite
 - *in vivo* chromosome aberrations mouse
 - *in vivo* chromosome aberrations other rodent

PC稼動環境

OS : Windows XP / Vista / Windows 7
 CPU : Single processor, IA32 or IA64, minimum 1.2 GHz
 RAM : 1GB 以上
 ハードディスク : 1GB 以上