



01.06.2017

FUENTE | CNIO Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas

Un buscador online de información sobre toxicidad de compuestos químicos

LimTox busca reacciones adversas y toxicidad de los compuestos, con especial énfasis en el daño hepático. La obtención de información biológica y química relevante es crucial para el conocimiento científico y la toma de decisiones. La herramienta ya está disponible para todos los usuarios y es gratuita.

La Unidad de Minería de Textos en Biología (<https://www.cnio.es/es/grupos/plantillas/presentacion.asp?grupo=50010585>) ha presentado en un artículo publicado en la revista *Nucleic Acids Research* (<https://academic.oup.com/nar/article-lookup/doi/10.1093/nar/gkx462>) (NAR) la herramienta online LimTox (<http://limtox.bioinfo.cnio.es/>), desarrollada en el Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas (<https://www.cnio.es/es/index.asp>) (CNIO). El software incorpora la última tecnología en minería de textos, lenguaje y aprendizaje automático para potenciar el motor de búsqueda biomédico. LimTox permite la recuperación y clasificación de elementos químicos y biológicos de interés, las interacciones entre ellos, la visualización de las estructuras químicas de los compuestos detectados de forma automática en los textos y la generación de redes de relación entre ellos.

La complejidad de los datos biomédicos requiere motores de búsqueda sofisticados que estén específicamente diseñados para proporcionar resultados que se ajusten a los términos de búsqueda. Además, hay un interés creciente por herramientas que se integren de forma sencilla y que sean capaces de construir bases de conocimiento biológico y de analizar datos experimentales.

"El trabajo en minería de datos asociados a genes ha avanzado considerablemente pero en el caso de los compuestos químicos, aún hay mucho por hacer", explica Martin Krallinger, jefe de la Unidad de Minería de Textos en Biología del CNIO y responsable del artículo. "LimTox supone una aportación importante en este campo", añade.

La obtención de información biológica y química relevante que aparece tanto en la literatura científica como en los informes de las agencias regulatorias es crucial para el conocimiento científico y la toma de decisiones en áreas como la química-biología, desarrollo de fármacos, toxicología y farmacogenética.

LimTox se centra en las reacciones adversas y la toxicidad de los compuestos químicos, con especial atención en el daño hepático, incluyendo la alteración de la función hepática y la hepatocarcinogénesis. También permite el acceso sistemático a información relevante sobre otros efectos secundarios (nefrotoxicidad, cardiotoxicidad...), alteraciones de parámetros bioquímicos relacionados con la función del hígado y de enzimas clave del metabolismo de los fármacos (citocromos P450 o CYPs).

"Entre todos los posibles efectos adversos de un fármaco, la hepatotoxicidad representa uno de los más relevantes, y puede condicionar críticamente el desarrollo o la vida de un medicamento. Por ello el hígado es fundamental en los estudios de toxicología, debido a su papel central en el metabolismo, excreción y síntesis bioquímica; además, los mecanismos por los que un fármaco puede desencadenar toxicidad hepática son diversos y complicados", explica Krallinger.

La herramienta online proporciona conocimiento estructurado extraído a partir de los abstracts y artículos completos de la biblioteca biomédica PubMed, los informes de la Agencia Europea del Medicamento (EMA, por sus siglas en inglés) y los informes de solicitud de nuevos fármacos de la Agencia Estadounidense de Alimentos y Medicamentos (FDA, por sus siglas en inglés).

El servidor LimTox ayudará a que investigadores y clínicos encuentren de forma rápida y eficaz reacciones adversas a través de sencillas búsquedas por palabras clave o de consultas concretas sobre compuestos químicos o genes.

Este trabajo ha sido financiado por el proyecto eTOX (IMI-115002), el proyecto OpenMinted de H2020 (654021) financiado por la Comisión Europea, el Plan de Impulso de las Tecnologías del Lenguaje de la Agenda Digital (PITL) de la Secretaría de Estado de Telecomunicaciones del Ministerio de Energía, Turismo y Agenda Digital, el Instituto de Salud Carlos III y FEDER a través del PE I+D+i 2013-2016 (grant PT13/0001/00).

Referencia bibliográfica:

LimTox: a web tool for applied text mining of adverse event and toxicity associations of compounds, drugs and genes. Andres Cañada, Salvador Capella-Gutierrez, Obdulia Rabal, Julen Oyarzabal, Alfonso Valencia and Martin Krallinger (*Nucleic Acids Research* 2017). DOI: 10.1093/nar/gkx462