



Desarrollan un buscador sobre toxicidad de compuestos químicos

LimTox, una herramienta del CNIO, examina reacciones adversas de las sustancias, con especial énfasis en el daño hepático.



Imagen del buscador 'LimTox'

REDACCIÓN | Madrid - 03-06-2017

2

La complejidad de los datos biomédicos requiere motores de búsqueda sofisticados que estén especialmente 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. En este contexto, acaba nacer un buscador online de información sobre toxicidad de compuestos químicos.

LimTox es una herramienta desarrollada en el **Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CNIO)** y **publicada en la revista *Nucleic Acids Research (NAR)*** que 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.

"En el trabajo en minería de los compuestos químicos, aún hay mucho por hacer"

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".

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.

En este sentido, el sistema 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.



directivos empresas
REVISTA ARI
 La revista de las personas que deciden

LimTox Home Feedback Contact LimTox Resources How to cite Help

Keywords **Compounds** Cytochromes Markers Tox. Endpoints Genes

Troglitazone

What are you searching?

- Name
- Chemical identifiers
- SMILES
- InChI
- Any (Free-text search)
- With CYPs
- With Markers
- Term relations

Source:

- All
- PubMed
- Full text
- NDA
- EPAR
- Abstracts

LimTox (text mining for toxicology)

The LIMTox system is the first text mining approach that tries to extract associations between compounds and a particular toxicological end point at various levels of granularity and evidence types, all inspired by the content of toxicology reports. It integrates direct ranking of associations between compounds and hepatotoxicity through combination of heterogeneous complementary strategies from term co-mention, rules, and patterns to machine learning based text classification. It also provides indirect associations to hepatotoxicity through the extraction of relations reflecting the effect of compounds at the level of metabolism and liver enzymes. Figure 1 provides a general overview of the LIMTox system.

MSD
INVENTING FOR LIFE

MSD,
mejorando la vida
de las personas

“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, excreción y síntesis bioquímica; además, los mecanismos por los que un fármaco puede desencadenar toxicidad hepática son diversos y complicados”, apunta **Krallinger**.

La herramienta online proporciona conocimiento estructurado extraído a partir de los *abstracts* y artículos 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)**. Así, el servidor pretende ayudar a que los investigadores y clínicos encuentren de forma rápida reacciones adversas a través de búsquedas por palabras clave o de consultas concretas sobre compuestos químicos o genes. La herramienta es gratuita y **ya está disponible**.

© Copyright 2016 SaluDigital.es. Todos los derechos reservados - Aviso Legal | Publicidad | Política Cookies | Redacción | Dirección | Alta Newsletter | Baja Newsletter

Calle Batalla de Belchite 5 - 4ª planta, 28045 Madrid (España) - Tlf (34) 91 014 83 70 - info@consalud.es

grupo **Mediforum** **ConSalud.es** **ECSalud.com** **ESTETIC.es** **SALUDIGITAL**