

Einladung zum 62. ZEBET-Seminar

Gemeinsames Seminar der BfR AG (Q)SAR und ZEBET

Data Mining Techniken zur Vorhersage toxischer Aktivitäten und deren Umsetzung im `lazar` Vorhersagesystem

Dr. Christoph Helma, *in silico toxicology c.helma*,
c/o Abt. für maschinelles Lernen der Universität Freiburg

Data Mining Techniken werden in den letzten Jahren verstärkt zur Vorhersage toxischer Aktivitäten und zur Modellierung von (Quantitativen) Struktur-Aktivitätsbeziehungen eingesetzt. Der erste Teil des Vortrags behandelt die prinzipielle Vorgangsweise, den derzeitigen Stand der Technik sowie die Einsatzmöglichkeiten und Limitationen im Rahmen der Chemikalienbewertung.

Im zweiten Teil wird die Umsetzung dieser Erkenntnisse im Vorhersageprogramm `lazar` (<http://www.predictive-toxicology.org/lazar/>) sowie dessen Anwendung zur Vorhersage der Säugetierkanzerogenität dargestellt. Die dabei erzielbare Vorhersagegenauigkeit hängt im wesentlichen von der im Trainingsdatensatz zur Verfügung stehenden Information ab. Da mit Hilfe von `lazar` eine relativ genaue Unterscheidung zwischen gut und schlecht vorher-sagbaren Verbindungen möglich ist, eignet sich das `lazar` System nicht nur zur Erstellung nachvollziehbarer und überprüfbarer Vorhersagen, sondern auch zur Identifikation von Informationsdefiziten und für eine effiziente Planung experimenteller Untersuchungen.

TERMIN: **Dienstag, 3. Mai 2005, 10:00 Uhr bis ca. 12:00 Uhr**

ORT: **Bundesinstitut für Risikobewertung (BfR)**

Bereich Marienfelde
Großer Sitzungssaal (D 146)
Diedersdorfer Weg 1, 12277 Berlin

KONTAKT: Bundesinstitut für Risikobewertung (BfR)
FG 37 / ZEBET - Alternativmethoden zu Tierversuchen
Diedersdorfer Weg 1, 12277 Berlin-Marienfelde
Tel.: 030-8412-2275 (Dr. Manfred Liebsch) / -2273 (Sekretariat)
Fax: 030-8412-2958
Mail: liebsch.zebet@bfr.bund.de

Dr. Matthias Herzler - AG (Q)SAR im BfR
Tel. 030-8412-4402
Mail: m.herzler@bfr.bund.de

ANMELDUNG: Die Teilnahme ist frei, eine Anmeldung ist nicht erforderlich.

Da Herr Dr. Helma derzeit im Rahmen der ZEBET Forschungsförderung unterstützt wird, findet im Anschluss an das Seminar ein nicht öffentliches Abstimmungsgespräch mit BfR Kollegen statt, die an der Arbeit interessiert sind.