

| 全般                       | BD Explorer  | BD Mini II                |
|--------------------------|--|---------------------------|
| ソフトウェア形態                 | Windows application  | エクセル（マクロ）                 |
| 消化管モデル                   | S1I7C4 model   | Two compartment（胃と小腸）     |
| パラメータ計算 理論モデル            | Open (GUT frwk)  | Open (GUT frwk)           |
| 積分方法                     | 数値積分   | Fa式                       |
| 積分エラー対策                  | 過溶解防止（計算スピード速）   | 必要なし                      |
| 薬物粒子移動                   | 明示的（ラグランジュ）  | —                         |
| 溶出過程・析出                  | BD Explorer  | BD Mini II                |
| 非攪拌水層                    | Asymptotic / Hintz Johnson / Wang Flanagan / Fluid dynamic | Asymptotic                |
| 粒子形状                     | 球形近似 / 直方体   | 球形近似                      |
| 表面pH                     | ○  | ○                         |
| 溶解度-胆汁ミセル                | Modified HH Eq.  | Modified HH Eq.           |
| 拡散係数-胆汁ミセル               | ○（濃度依存）  | ○（濃度依存）                   |
| 粒子再成長析出                  | Noyes-Whitney  | —                         |
| フリー体析出                   | 古典的核形成   | —                         |
| 膜透過過程                    | BD Explorer  | BD Mini II                |
| 非攪拌水層                    | ○  | ○                         |
| Particle drifting effect | ○  | ○                         |
| 胆汁ミセル結合率                 | ○（動的）  | ○（静的）                     |
| 構造種差                     | 消化管構造を反映   | 消化管構造を反映                  |
| 大腸吸収                     | 消化管構造を反映   | Negligibleと仮定             |
| Paracellular             | 電場Renkinモデル  | 電場Renkinモデル               |
| トランスポーター                 | 非対称3コンパートメント定常状態モデル（Apical/Basalの表面積比1:3）                  | —                         |
| 消化管代謝                    | Anatomical Fg model  | Anatomical Fg model       |
| 肝初回通過効果                  | 1-CLh/Q（Qは動的）  | 1-CLh/Q（Qは静的）             |
| 生理学的パラメータ                | BD Explorer  | BD Mini II                |
| 胃内pH                     | 動的   | 静的                        |
| 小腸pH                     | 静的   | 静的                        |
| 胃内溶液量                    | 動的   | 静的                        |
| 小腸溶液量                    | 動的（平均約 150 mL）   | 静的(130 mL)                |
| 胆汁酸濃度                    | 動的<br>空腹平均 3 mM<br>飽食平均 15 mM                              | 静的<br>空腹 3 mM<br>飽食 15 mM |
| 小腸滞留時間                   | 210 min  | 210 min                   |
| 動物種                      | ヒト / イヌ  | ヒト / ラット / イヌ             |
| その他                      | BD Explorer  | BD Mini II                |
| 溶出試験（通常）                 | ○  | —                         |
| 溶出試験（pHシフト）              | ○  | —                         |
| In vitro 膜透過モデル          | 非対称3コンパートメント定常状態モデル  | —                         |
| D/P 予測                   | ○  | ○                         |
| GIS module               | 構築可  | —                         |
| Population機能             | ○  | —                         |
| 経口吸収性分類                  |  | FaRLS                     |