



Institut Hospital del Mar  
d'Investigacions Mèdiques

## Nueva herramienta informática para predecir los efectos adversos de los fármacos de forma más fiable

*200.000 personas mueren cada año en Europa a causa de estos efectos adversos, 7 veces más que en accidentes de tráfico*

Barcelona, 3 de noviembre de 2015 -Un nuevo método computacional integrado permite predecir los efectos adversos de fármacos, a menudo letales, de forma mucho más fiable que con los métodos computacionales tradicionales. Esta mejora de la capacidad de anticiparse a los posibles efectos adversos de los fármacos puede representar salvar en un futuro muchas vidas. El trabajo ha sido realizado dentro del marco del proyecto europeo eTOX por investigadores del IMIM (Instituto Hospital del Mar de Investigaciones Médicas), la Universidad Pompeu Fabra y la empresa Chemotargets, y ha sido elegido como portada de la revista *Chemical Research in Toxicology*.

La mayoría de herramientas informáticas que se utilizan hoy en día para detectar posibles efectos adversos de compuestos candidatos a nuevos fármacos, se basan únicamente en la detección de fragmentos, en la estructura del fármaco, que son potencialmente susceptibles de transformarse, para formar metabolitos reactivos, que pueden tener propiedades tóxicas. Es lo que se llama toxicidad idiosincrásica y es un gran dolor de cabeza para la industria farmacéutica ya que tiende a detectarse en etapas ya tardías de desarrollo del medicamento o incluso cuando ya está en el mercado, causando su retirada.

Según Jordi Mestres, coordinador del Grupo de investigación en Farmacología de Sistemas del Programa de Informática Biomédica (GRIB) del IMIM y la UPF "Con este trabajo hemos contribuido a complementar la detección de estos fragmentos poco estables, con información sobre el mecanismo de acción de los fármacos, basada en tres aspectos: la semejanza con otros fármacos, la predicción de su perfil farmacológico, y la interferencia con determinadas rutas biológicas". "La integración óptima de estos cuatro métodos permite mejorar nuestra capacidad de anticiparnos a estos efectos adversos y por lo tanto hacer más fiables las predicciones, lo que supone un impacto muy positivo en la sociedad" explica el investigador.

En Europa casi 200.000 personas mueren cada año por los efectos adversos de los medicamentos, 7 veces más que en accidentes de tráfico. Se estima que el 5% de las hospitalizaciones son debidas a efectos adversos y que son la quinta causa más común de muerte hospitalaria. Hay que tener en cuenta además que las personas de edad avanzada suelen tomar más de un fármaco a la vez, lo que multiplica las posibilidades de sufrir efectos adversos, no sólo debido a cada uno de los fármacos individualmente sino también debido a las interacciones potenciales entre ellos. En una sociedad cada vez más envejecida, este problema se agrava.

Los costes humanos y económicos de los efectos adversos son muy elevados. Es por ello que el descubrimiento de nuevos fármacos se está enfocando cada vez más hacia la predicción de los posibles efectos adversos en las fases más iniciales del desarrollo de un nuevo fármaco. Este trabajo

quiere marcar el camino de una nueva generación de herramientas computacionales más fiables en cuanto a la predicción de los efectos adversos de pequeñas moléculas, de modo que se puedan aplicar durante la fase preclínica de optimización del fármaco y pueda llegar con más garantías de seguridad en la fase clínica y en definitiva a un uso más seguro para la población.

### **Artículo de referencia**

“Large-Scale Predictive Drug Safety: From Structural Alerts to Biological Mechanisms”. Ricard Garcia-Serna, David Vidal, Nikita Remez, and Jordi Mestres. Chemical Research in Toxicology 28 (2015) 1875. <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.chemrestox.5b00260>

### **Contacto**

Servicio de Comunicación IMIM: Marta Calsina 93 316 0680 [mcalsina@imim.es](mailto:mcalsina@imim.es), Rosa Manaut 618509885 [rmanaut@imim.es](mailto:rmanaut@imim.es) . [www.imim.es](http://www.imim.es)

**Interés en el software:** Chemotargets SL, Parque Científico de Barcelona. [ctlink@chemotargets.com](mailto:ctlink@chemotargets.com)