



Institut Hospital del Mar
d'Investigacions Mèdiques

Nova eina informàtica per predir els efectes adversos dels fàrmacs de forma més fiable

200.000 persones moren cada any a Europa a causa d'aquests efectes adversos, 7 vegades més que en accidents de tràfic

Barcelona, 3 de novembre de 2015 –Un **nou mètode computacional integrat permet predir els efectes adversos de fàrmacs, sovint letals, de forma molt més fiable que amb els mètodes computacionals tradicionals**. Aquesta millora de la capacitat d'anticipar-se als possibles efectes adversos dels fàrmacs pot representar salvar en un futur moltes vides. El treball ha estat realitzat dins del marc del projecte europeu **eTOX** per investigadors de l'**IMIM** (Institut Hospital del Mar d'Investigacions Mèdiques), la **Universitat Pompeu Fabra** i l'empresa **Chemotargets**, i ha estat escollit com a portada de la revista *Chemical Research in Toxicology*.

La majoria d'eines informàtiques que s'empren avui dia per detectar possibles efectes adversos de compostos candidats a nous fàrmacs, es basen únicament en la detecció de fragments, en l'estructura del fàrmac, que són potencialment susceptibles de transformar-se, per formar metabòlits reactius, que poden tenir propietats tòxiques. És el que s'anomena toxicitat idiosincràtica i és un gran maldecap per a la indústria farmacèutica ja que tendeix a detectar-se en etapes ja tardanes de desenvolupament del medicament o inclús quan ja està en el mercat, causant la seva retirada.

Segons **Jordi Mestres**, coordinador del Grup de recerca en Farmacologia de Sistemes del Programa d'Informàtica Biomèdica (GRIB) de l'IMIM i la UPF “*Amb aquest treball hem contribuït a complementar la detecció d'aquests fragments poc estables, amb informació sobre el mecanisme d'acció dels fàrmacs, basada en tres aspectes: la semblança amb altres fàrmacs, la predicció del seu perfil farmacològic, i la interferència amb determinades rutes biològiques*”. “*La integració òptima d'aquests quatre mètodes permet millorar la nostra capacitat d'anticipar-nos a aquests efectes adversos i per tant fer més fiables les prediccions, el que suposa un impacte molt positiu en la societat*” explica l'investigador.

A Europa casi 200.000 persones moren cada any pels efectes adversos dels medicaments, 7 vegades més que en accidents de tràfic. S'estima que el 5% de les hospitalitzacions són degudes a efectes adversos i que són la cinquena causa més comú de mort hospitalària. Cal tenir en compte a més que les persones d'edat avançada solen prendre més d'un fàrmac alhora, el que multiplica les possibilitats de patir efectes adversos, no només degut a cada un dels fàrmacs individualment sinó també a causa de les interaccions potencials entre ells. En una societat cada cop més envellida, aquest problema s'agreuja.

Els costos humans i econòmics dels efectes adversos són molt elevats. És per això que el descobriment de nous fàrmacs s'està enfocant cada vegada més cap a la predicció dels possibles efectes adversos en les fases més inicials del desenvolupament d'un nou fàrmac. Aquest treball vol marcar el camí d'una nova generació d'eines computacionals més fiables pel que fa a la predicció dels

efectes adversos de petites molècules, de manera que es puguin aplicar durant la fase preclínica d'optimització del fàrmac i pugui arribar amb més garanties de seguretat a la fase clínica i en definitiva a un ús més segur per la població.

Article de referència

“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>

Contacte

Servei de Comunicació IMIM: Marta Calsina 93 316 0680 mcalsina@imim.es, Rosa Manaut 618509885 rmanaut@imim.es . www.imim.es

Interès en el software: Chemotargets SL, Parc Científic de Barcelona. ctlink@chemotargets.com