



TECNOLOGÍA DIGITAL Y COMPARTICIÓN DE DATOS PARA MEJORAR LA SEGURIDAD DE NUEVOS FÁRMACOS

Tradicionalmente, las compañías farmacéuticas no compartían la información sobre la posible toxicidad de los compuestos con los que elaboran los medicamentos, extraída de ensayos clínicos con animales. La evidencia obtenida quedaba en silos, sin la posibilidad de que los datos se compartieran entre las diferentes organizaciones.



ADRIÁN RODRIGO,
Business Solutions for Smart Health de GMV.

Revertir esta situación permitiría su explotación con herramientas computacionales, como la inteligencia artificial (IA), con lo que permite acelerar las investigaciones para evaluar la seguridad al elaborar las medicinas. De compartirse la evidencia acumulada por la industria farmacéutica, sería posible reemplazar parte de los estudios con animales *in vivo* por tecnología de análisis retrospectivo, logrando reducir los tiempos de las investigaciones, utilizar menos animales en los ensayos y conseguir mejores resultados en toxicidad.

De esta manera, para lograr este objetivo, con fondos de la Unión Europea y la Federación Europea de Empresas y Asociaciones Farmacéuticas, se ha desarrollado una plataforma tecnológica con la que explotar información biomédica de diferentes laboratorios, asegurando la privacidad y seguridad de los datos preclínicos, clínicos, así como las evidencias obtenidas por cada uno de ellos. Esta plataforma de información online, denominada Tox Hub, centraliza el acceso a todas las fuentes participantes en el proyecto, así como a bases de datos toxicológicos y eco-toxicológicos.

Uno de los mayores desafíos en la evaluación de la seguridad de los medicamentos es reducir el número de animales utilizados en estudios de toxicidad *in vivo*, acorde a una utilización más ética de ellos en las investigaciones: el conocido por las 3R (reemplazar, reducir y refinar el número de animales utilizados en las evaluaciones de seguridad de los medicamentos). El papel de la tecnología para lograr este objetivo es clave, ya que permite realizar estudios de toxicidad con datos

recopilados de controles históricos, reduciendo significativamente el número de animales utilizados por estas pruebas.

Tratamiento de los datos

La evaluación de la seguridad de los medicamentos es un proceso intensivo en conocimiento, que exige métodos y herramientas para manejar datos y facilitar su intercambio de forma segura, así como para realizar los análisis y modelado predictivo. Inicialmente se requiere integrar la información de diferentes fuentes propietarias (tanto públicas como privadas) que contengan conocimiento biomédico sobre datos (clínicos o preclínicos, evidencia de estudios, etc.), para lo que es necesario previamente homogeneizarla, tratar sus datos para convertirla en información de la que extraer información de valor, evidencias.

A su vez, los métodos computacionales y la tecnología big data, requieren disponer de un volumen de información de datos biomédicos masivo para trabajar, por lo que es necesario compartir la información de numerosas y diversas fuentes. En primera instancia, se han de aplicar técnicas de gobernanza de datos con las que organizar y compartir toda la información en un repositorio común. Para la extracción de datos, la visualización y la predicción de la potencial toxicidad, con especial atención a la evaluación de la predictividad preclínica a la clínica y al descubrimiento de biomarcadores de seguridad, se emplean herramientas



in silico, vía simulación computacional. De esta forma, se posibilita la combinación de datos para su análisis conjunto, aplicando todas las medidas para preservar la confidencialidad de los mismos, dentro de la plataforma segura Tox Hub.

Hasta ahora, los enfoques químico-informáticos se han basado en gran medida en la predicción computacional de la interacción químico-biológica y las consecuencias posteriores para identificar los resultados adversos de los medicamentos. Sin embargo, todavía se ha integrado poca información toxicológica mecanicista en las estrategias de toxicología computacional.

La falta de interacciones directas con toxicólogos experimentales ha obstaculizado el progreso para verificar las herramientas predictivas a nivel biológico, ya que, si bien éstos han generado cantidades masivas de datos basados en pruebas *in vivo* con animales, no han sido integrados sistemáticamente, para aprovechar los

avances de la informática química y la bioinformática. Lograr el intercambio e integración de datos con la químico-informática, la bioinformática, la toxicología experimental y la seguridad clínica de los medicamentos es posible hoy en día aprovechando las tecnologías digitales, por el bien de la seguridad de los medicamentos desarrollados con criterio ético.

Estas herramientas permiten en el marco de la investigación farmacéutica mejorar drásticamente la viabilidad y confiabilidad de la evaluación de la seguridad traslacional durante el proceso de desarrollo de medicamentos.

Tras un exhaustivo proceso para garantizar la sostenibilidad de la plataforma de ToxHub, el consorcio que la ha desarrollado asegura su futura continuación y comercialización como un paquete SaaS (software como servicio) y continuará evolucionando y creciendo tras la integración en la suite *in silico* de la empresa comercializadora.