



Josep Porta y Cristina Monforte, codirectores de la Cátedra WeCare: Atención al Final de la Vida.

Cuidados paliativos alargan la vida de crónicos terminales

Cuanto antes se inicien los cuidados paliativos, mejores son los resultados de supervivencia y calidad de vida

BARCELONA
KARLA ISLAS PIECK
karla.islas@diariomedico.com

Los cuidados paliativos no sólo mejoran la calidad de vida de los pacientes con enfermedades crónicas terminales, sino que, además, se traducen en un aumento de su supervivencia, según ha afirmado Josep Porta, jefe del Servicio de Investigación y Educación de Cuidados Paliativos del Instituto Catalán de Oncología (ICO) y codirector de la Cátedra WeCare: Atención al Final de la Vida, de la Universidad Internacional de Cataluña (UIC) y Àltima.

Durante el II Workshop Internacional WeCare, ¿Qué hacemos cuando nos dicen: Yo, así, no quiero vivir más?, que se ha celebrado en Barcelona, ha quedado de manifiesto que los paliativos no se deben contemplar como una herramienta "para ayudar a morir bien a los pacientes", sino más bien "para ayudarles a vivir bien en la última etapa de su vida", ha afirmado Porta, que considera que cada vez existe más evidencia de que

cuanto antes se inicien estos cuidados, mejores son los resultados en términos de calidad de vida y supervivencia.

El primer objetivo -que no es el más importante- debe ser aliviar el dolor y los males-tes físicos del paciente en la medida en que sea posible. Después, es indispensable-

Los cuidados paliativos no se deben ver como una herramienta para ayudar a morir bien a los enfermos terminales, sino para ayudarles a vivir bien en la última etapa de su vida

buscar el origen del sufrimiento -que suele ser multifactorial- para intentar desentrañar la motivación que le lleva a la verbalización del deseo de morir, ha añadido Cristina Monforte, codirectora de la Cátedra WeCare: Atención al Final de la Vida.

A su juicio, es importante tener en cuenta que los deseos de los enfermos pueden fluctuar, "a veces en

cuestión de pocos días u horas". Si la intención de terminar con su vida es consistente y persiste en el tiempo, es fundamental examinar los factores sociales, familiares, emocionales y espirituales que le rodean con el objetivo de intentar entender cuáles podrían tener más peso y ayudarle.

"Lo más importante, que no se tiene que perder de vista en ningún momento, es que nunca se debe abandonar al paciente, ni a su familia", han coincidido ambos expertos. Si el deseo de morir persiste a pesar de todas las ayudas posibles, se puede contemplar la opción de la sedación paliativa discontinua gestionada por el paciente.

Monforte ha recordado que para poder ofrecer unos cuidados paliativos de calidad a los pacientes se requieren profesionales altamente formados, que sean capaces de "abordar todos los aspectos, que son muy difíciles de tratar". Para ella, es fundamental mejorar la investigación en este campo tan crucial.

Un modelo predictor prevé el efecto de químicos en la salud

MADRID
REDACCIÓN

Las bases de datos actuales contienen información de miles de moléculas, entre medicamentos, sustancias naturales y agentes químicos medioambientales, asociadas a enfermedades, ya sea porque tienen efectos adversos o terapéuticos.

Partiendo de este conocimiento acumulado durante años y disponible en bases de datos, científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) liderados por Patrick Aloy, han ideado un modelo predictor que permite asociar fragmentos químicos con efectos positivos o negativos para un 20 por ciento de las enfermedades humanas.

Los datos, publicados en el último *Nature Communications*, pueden tener aplicación para diseñar fármacos más se-

guros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados.

CONDICIONES

Se han analizado 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas. Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo, pero sin concretar qué hacían aquellas sustancias a nivel molecular ni saber las proteínas que alteraban; así se desarrolló una gran cantidad de medicamentos para tratar todo tipo de enfermedades humanas.

Actualmente, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben

afectados en una determinada patología, pero esta vía no ha dado los resultados deseados.

El químico Miquel Duran, del IRB Barcelona, se preguntó si la acumulación de datos actuales que relacionan la estructura química de sustancias con una enfermedad por su efecto terapéutico o adverso permitiría desarrollar un modelo predictor que relacionara una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

"Tenemos suficiente información sobre estructuras químicas para predecir razonablemente bien los efectos que tendrán en un 20 por ciento de todas las enfermedades humanas. Así, la información de estructuras químicas puede ser muy útil para la biomedicina, como por ejemplo para diseñar fármacos más seguros".



Miquel Duran y Patrick Aloy han coordinado este extenso análisis en el IRB de Barcelona.

Terapia génica en ratones para la miocardiopatía hipertrófica

MADRID
REDACCIÓN

Un estudio que se publica hoy en la edición *on-line* de *Nature Communications* demuestra en un modelo murino que es posible revertir la miocardiopatía hipertrófica neonatal -que constituye la cardiopatía hereditaria más prevalente- mediante terapia génica.

Lucie Carrier, del Centro Médico Universitario de Hamburgo (Alemania), y sus colaboradores administraron con un vector viral el gen sin la mutación causante de la patología a los ratones, que no mostraron ningún síntoma durante el período de observación de 34 semanas. Además, comprobaron que la terapia elimi-

naba la síntesis de ARN mensajero mutante.

Estos resultados constituyen una prueba de que la terapia génica podría convertirse en una opción futura para el tratamiento de la miocardiopatía hipertrófica neonatal grave, que actualmente sólo cuenta con un tratamiento eficaz: el trasplante cardíaco.



Recorte en B/N % de ocupación: 5,19 Valor: 42,80€

Periodicidad: Quincenal

Tirada: 5.512

Difusión: 4.537

Los efectos de sustancias químicas en las enfermedades

Científicos del Instituto de Investigación Biomédica de Barcelona han desarrollado un modelo predictor que prevé los efectos de las sustancias químicas en un 20 % de las enfermedades humanas. Para elaborar el trabajo, que ha publicado hoy la revista "Nature Communications", los investigadores han analizado 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de enfermedades humanas. El análisis de fármacos, productos naturales y sustancias medioambientales ha permitido identificar los fragmentos químicos responsables de causar un efecto terapéutico o perjudicial para la salud, lo que puede ser de utilidad para generar fármacos.

Editado por europa press

2 de Diciembre 2014

infosalus.com

IRB BARCELONA

Logran predecir el efecto de los fármacos en un 20% de las enfermedades gracias al 'big data'

Directorio: Barcelona

BARCELONA, 1 Dic. (EUROPA PRESS) -

Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) han desarrollado un modelo predictor que anticipa los efectos de los medicamentos, las sustancias naturales y los agentes químicos medioambientales sobre un 20% de las enfermedades gracias al 'big data' sanitario.

El hallazgo, publicado en 'Nature Communications', puede tener aplicación para "diseñar fármacos más seguros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados", ha informado este lunes el IRB en un comunicado.

El estudio ha llevado el análisis de 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas.

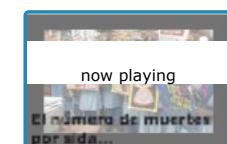
▼ PUBLICIDAD ▼

Vídeos

[Más vídeos de salud: El núm...](#)

1
4
?
0

8+1 0



Comunicados

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo: esta práctica de ensayo y error que acumuló

[Uso de cookies](#)

el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero "esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados".

La acumulación de datos sanitarios que relacionan la estructura química de sustancias a una enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, ha permitido desarrollar un modelo predictor que relaciona una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado, "redescubriendolo y organizándolo", y generar un 20% de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Además, el hallazgo puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades --denominadas comorbilidad--, así como para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.



Print

Facebook

Twitter

Seguir a @infosalus_com

27.9K seguidores

StumbleUpon

PrintFriendly

More

Ofertas Peugeot
Solicita una oferta personalizada del Peugeot que estás buscando.



La diabetes provoca declive cognitivo



Prometedores resultados de una vacuna contra el...



Salud formaliza la unificación de los hospitales...



¿Se aprende a ser madre?

Titulares

Más de 100 rostros conocidos se suman a la campaña de FEBE contra el consumo de alcohol en menores

Expertos internacionales en ciencias de la salud coinciden en los beneficios de los edulcorantes bajos en o sin calorías

Ana Mato, ausente del Comité Ejecutivo del PP seis días después de dimitir como ministra de Sanidad

Echaniz se descarta como próximo ministro de Sanidad en sustitución de Ana Mato

Fundación Reina Sofía gana el XIV Premio Fundación Cofares, por su labor en su centro de Alzheimer

España quedará libre de ébola este martes si la cooperante sigue sin presentar síntomas



El pelo empieza a crecer...

...el cabello deja de caerse inmediatamente y crece de nuevo saludable... ¡Leer más aquí!



Gana €3000 por semana!

Un hombre de 27 años de Madrid gana €3000 por semana trabajando desde su casa!



Curso de Nutrición y Dietética

Estudia a distancia y a tu ritmo. ¡Especialízate y consigue trabajo!



Locura: iPhones desde 17€

Experto en compras desvela cómo los españoles consiguen gangas aprovechando un vacío legal

Publicidad Ligatus

Uso de cookies

Predicen los efectos de las sustancias químicas en un 20% de las enfermedades

EFEFUTURO.- Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB) de Barcelona han desarrollado un modelo que predice los efectos de las sustancias químicas en un 20 % de las enfermedades humanas.

EFFE FUTURO BARCELONA | MIÉRCOLES 03.12.2014



Uno de los centros de investigación biomédica en España. EFE/Toni Garriga

Para elaborar el trabajo, que ha publicado la revista *Nature Communications*, los investigadores han analizado 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de enfermedades humanas.

El análisis de fármacos, productos naturales y sustancias medioambientales ha permitido identificar los fragmentos químicos responsables de causar un efecto terapéutico o perjudicial para la salud humana, lo que puede ser de utilidad para generar fármacos con menos efectos secundarios, relacionar enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados.

Según ha explicado Patrick Aloy, que ha liderado la investigación, partiendo de las bases de datos que contienen información de miles de moléculas, entre medicamentos, sustancias naturales y agentes químicos medioambientales, han ideado este modelo predictor que permite asociar fragmentos químicos con efectos positivos o negativos para un 20 % de las enfermedades humanas”.

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo.

Sin preocuparse en qué hacían aquellas sustancias a nivel molecular ni saber las proteínas que alteraban, se desarrollaron una gran cantidad de medicamentos para tratar todo tipo de enfermedades, pero esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la biología molecular.

Desde principios del siglo XXI, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados.

El químico Miquel Duran, estudiante de doctorado que trabaja en biología de redes en el IRB Barcelona, se preguntó si la acumulación de datos actuales que relacionan la estructura química de sustancias a enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, permitiría desarrollar un modelo predictor que relacionara una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

“Lo que vemos es que, en efecto, tenemos suficiente información sobre estructuras químicas para predecir razonablemente bien los efectos que tendrán en un 20 % de todas las enfermedades humanas”, ha dicho Duran.

H2, el primer exoesqueleto español para la ayuda a la discapacidad

La vida y la ciencia de Newton, en un cómic para niños gracias a la financiación popular

¿Ha firmado la cláusula Herodes?

Supersólido: ¿un nuevo estado de la materia?



[VER MÁS VÍDEOS](#)

COP20, PORQUE NO HAY "PLAN B" PARA EL PLANETA

- En vivo
 - Comentario
 - Cargar
 - Volver
 - Ajustes
 - Compartir
 - Facebook
 - Twitter

Browse... No file selected.

Iniciar sesión

Mostrar Nombre

O) iniciar sesión con



"Esto significa que la información de estructuras químicas, que en muchas ocasiones y sobre todo en el ámbito de la biología molecular no se tiene en cuenta, puede ser muy útil para la biomedicina, como por ejemplo para diseñar fármacos más seguros", ha subrayado el investigador.

El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado redescubriendolo y organizándolo, y generar un 20 % de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Patrick Aloy ha indicado que **el estudio sirve para disponer de información valiosa para evitar o propiciar el uso de determinados fragmentos químicos en el diseño de fármacos.**

Por ejemplo, su modelo estima que hay un 40 % de fragmentos químicos con efectos terapéuticos que no se están incorporando en el diseño de fármacos mientras que, en cambio, hay fragmentos que causan efectos secundarios que se encuentran en muchos medicamentos.

Los investigadores señalan además que su estudio puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades, la llamada comorbilidad -una lleva al desarrollo de otra- o comorbilidad inversa -una protege de desarrollar otra-, y para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados. EFEFUTURO

Publicado en: Ciencia

EFE.COM

WEBS TEMÁTICAS

PLATAFORMAS

OTRAS ÁREAS

SECCIONES ESPECIALES

Ciencia	Espacio	Humanidades
Dispositivos	videojuegos	Internet
EEVerde	Salud	COP20

ACERCA DE

Agencia EFE

SIGUENOS EN

FFE_tec	EFFiciencia
Facebook	Youtube
Google +	Rss

CONTACTO

Avd. de Burgos, 8. 28036
Madrid (España)
Tel.: 913467100
Tel.: 913467401
Mail:futuro@efe.es

© Agencia EFE, S.A. Avd. de Burgos, 8. 28036 Madrid. España Tel: +34 91 346 7100. Todos los derechos reservados

[Política de privacidad](#) | [Aviso legal](#)

Login

Nombre de usuario

Contraseña

Recuérdame

Log in

[Registro](#) | [Contraseña perdida?](#)

| [Volver al login](#)

Esta web utiliza 'cookies' propias y de terceros para ofrecerte una mejor experiencia y servicio. Al navegar o utilizar nuestro sitio web, aceptas su uso. Puedes saber más sobre qué hacemos con las 'cookies'. Sin embargo, puedes cambiar la configuración de 'cookies' en cualquier momento.

BIOMEDICINA QUÍMICA

Predicen los efectos de las sustancias química en enfermedades

El análisis de fármacos, productos naturales y sustancias medioambientales ha permitido responsables de causar un efecto terapéutico o perjudicial para la salud humana

EFE / BARCELONA

LUNES, 1 DE DICIEMBRE DEL 2014 - 18.28 H

Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB) de Barcelona han desarrollado una herramienta que predice si una sustancia química en un 20 % de las enfermedades humanas. Para elaborar el trabajo, que se publica en la revista Nature Communications, los investigadores han analizado 10.000 moléculas químicas que contienen información sobre las condiciones patológicas, representativas de enfermedades humanas.

El análisis de fármacos, productos naturales y sustancias medioambientales ha permitido identificar aquellas sustancias que tienen la capacidad de causar un efecto terapéutico o perjudicial para la salud humana, lo que puede ser de utilidad para desarrollar tratamientos secundarios, relacionar enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados. Según han explicado los científicos en la presentación de su investigación, partiendo de las bases de datos que contienen información de miles de moléculas y agentes químicos medioambientales, han ideado este modelo predictor que permite asociar las sustancias químicas con efectos negativos para un 20 % de las enfermedades humanas".

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en el organismo sin preocuparse en qué hacían aquellas sustancias a nivel molecular ni saber las proteínas que actuaban como receptores de medicamentos para tratar todo tipo de enfermedades, pero esta práctica de ensayo y error se abandonó con la irrupción de la biología molecular. Desde principios del siglo XXI, los fármacos actúan sobre las proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero el resultado biológico previo no está dando los frutos esperados.

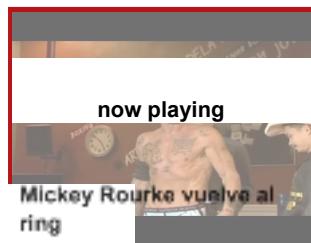
El químico **Miquel Duran**, estudiante de doctorado que trabaja en biología de redes en el IRB, ha explicado que "hasta ahora solo disponíamos de datos actuales que relacionan la estructura química de sustancias a enfermedad por su efecto terapéutico, pero no teníamos la capacidad de desarrollar un modelo predictor que relacionara una estructura química con el efecto que tiene en el organismo". "Ahora, con este modelo predictor, tenemos suficiente información sobre estructuras químicas para predecir razonablemente el efecto que tienen en el organismo de todas las enfermedades humanas", ha dicho Duran. "Esto significa que la información disponible es suficiente para predecir el efecto de una sustancia en el organismo sin tener que someterla a ensayos clínicos", ha añadido.

ocasiones y sobre todo en el ámbito de la biología molecular no se tiene en cuenta, puede ser ejemplo para diseñar fármacos más seguros", ha subrayado el investigador. El estudio permite redescubriendolo y organizándolo, y generar un 20 % de conocimiento nuevo gracias a la tecnología.

Patrick Aloy ha indicado que el estudio sirve para disponer de información valiosa para evitar errores en la diseño de fármacos. Por ejemplo, su modelo estima que hay un terapéuticos que no se están incorporando en el diseño de fármacos mientras que, en cambio, secundarios que se encuentran en muchos medicamentos. Los investigadores señalan aden asociaciones entre dos enfermedades, la llamada comorbilidad -una lleva al desarrollo de otra-, y para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.

MÁS INFORMACIÓN EN VÍDEOS

Últimos vídeos de celebridades y entretenimiento : Mickey Rourke vuelve al ring



EN EL PERIÓDICO

El recibo de la luz ha subido un 12,4% desde enero

Recuperado el cuerpo de la joven desaparecida en la Garrotxa

Alemania, conmocionada por la muerte de una joven agredida en la calle

El Estado Islámico lapida a dos jóvenes por "prácticas indecentes" con otros varones

EN OTROS MEDIOS

Los barrios de mo INMOBILIARIAS)

Calentar tu casa e

Expectación por la petición de Alfons

Así acabaron en el

PUBLICIDAD

- [Archivo](#)

- [servicios](#)

Buscador de abc

buscador

ÚLTIMA HORA Cristiano Ronaldo, Messi y Neuer, los tres candidatos al Balón de Oro

Noticias agencias

Predicen los efectos de las sustancias químicas en un 20% de las enfermedades

01-12-2014 / 17:30 h EFE

Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB) de Barcelona han desarrollado un modelo predictor que prevé los efectos de las sustancias químicas en un 20 % de las enfermedades humanas.

Para elaborar el trabajo, que ha publicado hoy la revista "Nature Communications", los investigadores han analizado 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de enfermedades humanas.

El análisis de fármacos, productos naturales y sustancias medioambientales ha permitido identificar los fragmentos químicos responsables de causar un efecto terapéutico o perjudicial para la salud humana, lo que puede ser de utilidad para generar fármacos con menos efectos secundarios, relacionar enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados.

Según ha explicado Patrick Aloy, que ha liderado la investigación, partiendo de las bases de datos que contienen información de miles de moléculas, entre medicamentos, sustancias naturales y agentes químicos medioambientales, han ideado este modelo predictor que permite asociar fragmentos químicos con efectos positivos o negativos para un 20 % de las enfermedades humanas".

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo.

Sin preocuparse en qué hacían aquellas sustancias a nivel molecular ni saber las proteínas qué alteraban, se desarrollaron una gran cantidad de medicamentos para tratar todo tipo de enfermedades, pero esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la biología molecular.

Desde principios del siglo XXI, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados.

El químico Miquel Duran, estudiante de doctorado que trabaja en biología de redes en el IRB Barcelona, se preguntó si la acumulación de datos actuales que relacionan la estructura química de sustancias a enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, permitiría desarrollar un modelo predictor que relacionara una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

"Lo que vemos es que, en efecto, tenemos suficiente información sobre estructuras químicas para predecir razonablemente bien los efectos que tendrán en un 20 % de todas las enfermedades humanas", ha dicho Duran.

"Esto significa que la información de estructuras químicas, que en muchas ocasiones y sobre todo en el ámbito de la biología molecular no se tiene en cuenta, puede ser muy útil para la biomedicina, como por ejemplo para diseñar fármacos más seguros", ha subrayado el investigador.

El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado redescubriendolo y organizándolo, y generar un 20 % de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Patrick Aloy ha indicado que el estudio sirve para disponer de información valiosa para evitar o propiciar el uso de determinados fragmentos químicos en el diseño de fármacos.

Por ejemplo, su modelo estima que hay un 40 % de fragmentos químicos con efectos terapéuticos que no se están incorporando en el diseño de fármacos mientras

que, en cambio, hay fragmentos que causan efectos secundarios que se encuentran en muchos medicamentos.

Los investigadores señalan además que su estudio puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades, la llamada comorbilidad -una lleva al desarrollo de otra- o comorbilidad inversa -una protege de desarrollar otra-, y para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.

Noticias relacionadas

- Las bebidas azucaradas con fructosa o glucosa no son perjudiciales para la salud

El consumo moderado de bebidas azucaradas con fructosa y glucosa durante 2 semanas no tiene **efectos** diferenciales en el ayuno o el colesterol tras las comidas, los triglicéridos, la glucosa, ...

- La gran niebla tóxica que acabó con la vida de 12.000 londinenses

Las personas con problemas respiratorios, sobre todo ancianos y niños, fueron las primeras en sufrir los **efectos** de ese cóctel mortal.

- Una joven científica a la vanguardia

Estudió **químicas**, hizo un máster, después su tesis y desde entonces investiga en materiales.

- Los peligros de blanquear dinero mediante la compra de lotería premiada

El próximo 22 de diciembre, después de que se repartan todos los premios de la Lotería de Navidad y el champán riegue las calles de los municipios agraciados, algunas cejas se enarcarán en el ...

- La prueba del talón detectará nueve enfermedades antes de final de año

Antes de que finalice este 2014 Castilla-La Mancha va a ampliar el número de **enfermedades** del cribado neonatal, conocido como prueba del talón, de tal manera que serán nueve las patologías ...



Por comunidades

[Andalucía](#)

[Aragón](#)

[Baleares](#)

[Cantabria](#)

[Castilla La Mancha](#)

[Castilla y León](#)

[Cataluña](#)

[Ceuta](#)

[Comunidad Valenciana](#)

[País Vasco](#)

[Córdoba](#)

[Extremadura](#)

[Galicia](#)

[La Rioja](#)

[Madrid](#)

[Melilla](#)

[Murcia](#)

[Navarra](#)

NOTICIAS DE AGENCIAS

01/12/2014 13:01

Logran predecir el efecto de los fármacos en un 20% de las enfermedades gracias al 'big data'

Barcelona, Europa Press Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) han desarrollado un modelo predictor que anticipa los efectos de los medicamentos, las sustancias naturales y los agentes químicos medioambientales sobre un 20% de las enfermedades gracias al 'big data' sanitario. El hallazgo, publicado en 'Nature Communications', puede tener aplicación para "diseñar fármacos más seguros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados", ha informado este lunes el IRB en un comunicado.

El estudio ha llevado el análisis de 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas.

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo: esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la biología molecular.

Desde principios del siglo XXI y hasta la actualidad, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero "esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados".

La acumulación de datos sanitarios que relacionan la estructura química de sustancias a una enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, ha permitido desarrollar un modelo predictor que relaciona una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado, "redescubriendo y organizándolo", y generar un 20% de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Además, el hallazgo puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades --denominadas comorbilidad--, así como para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.

- [Fotogalerías](#)
- [Fotos](#)
- [Gráficos](#)
- [Blogs](#)
- [Lo último](#)
- [Lo más](#)
- [Temas](#)
- [Tiempo](#)
- [Microsíervos](#)
- [Practicopedia](#)

[biología](#)

Logran predecir el efecto de los fármacos en un 20% de las enfermedades gracias al 'big data'

lainformacion.com

lunes, 01/12/14 - 14:02

[0]

Científicos del Instituto de [Investigación](#) Biomédica (IRB Barcelona) han desarrollado un modelo predictor que anticipa los efectos de los medicamentos, las sustancias naturales y los agentes químicos medioambientales sobre un 20% de las [enfermedades](#) gracias al 'big data' sanitario.

Temas

- [Biología](#)
- [Comunidad de Madrid](#)
- [Enfermedades](#)
- [Genética](#)
- [Investigación](#)
- [Investigación médica](#)

BARCELONA, 1 (EUROPA PRESS)

Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) han desarrollado un modelo predictor que anticipa los efectos de los medicamentos, las sustancias naturales y los agentes químicos medioambientales sobre un 20% de las enfermedades gracias al 'big data' sanitario.

El hallazgo, publicado en 'Nature Communications', puede tener aplicación para "diseñar fármacos más seguros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados", ha informado este lunes el IRB en un comunicado.

El estudio ha conllevado el análisis de 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas.

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo: esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la **biología** molecular.

Desde principios del siglo XXI y hasta la actualidad, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero "esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados".

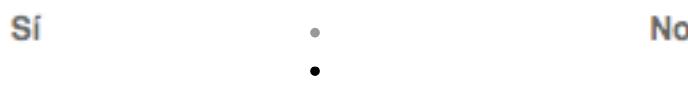
La acumulación de datos sanitarios que relacionan la estructura química de sustancias a una enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, ha permitido desarrollar un modelo predictor que relaciona una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado, "redescubriéndolo y organizándolo", y generar un 20% de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

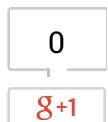
Además, el hallazgo puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades --denominadas comorbilidad--, así como para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.

(EuropaPress)

¿Te ha gustado este artículo?



[13 Twittear](#)



0 [Recomendar en Facebook](#)

0 [meneame](#)




Director: Manuel Romero | Lunes, 01 diciembre 2014 |

Suscríbete al BOLETÍN | RSS

Buscar en lavozlibre.com



LAVOZLIBRE ➤

[PORTADA](#) | [ACTUALIDAD](#) | [CONFLICTO](#) | [MEDIOS](#) | [OPI-BLOGS](#) | [CULTURA](#) | [DEPORTES](#) | [SALUD](#) | [OCIO](#) | [VIVA LA VIDA](#) | [TECNOLOGÍA](#) | [MADRID](#)

IRB BARCELONA

Logran predecir el efecto de los fármacos en un 20% de las enfermedades gracias al 'big data'

Europa Press

lunes, 01 de diciembre de 2014, 14:01

BARCELONA, 1 (EUROPA PRESS)

Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) han desarrollado un modelo predictor que anticipa los efectos de los medicamentos, las sustancias naturales y los agentes químicos medioambientales sobre un 20% de las enfermedades gracias al 'big data' sanitario.

El hallazgo, publicado en 'Nature Communications', puede tener aplicación para "diseñar fármacos más seguros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados", ha informado este lunes el IRB en un comunicado.

El estudio ha conllevado el análisis de 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas.

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo: esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la biología molecular.

Desde principios del siglo XXI y hasta la actualidad, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero "esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados".

La acumulación de datos sanitarios que relacionan la estructura química de sustancias a una enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, ha permitido desarrollar un modelo predictor que relaciona una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado, "redescubriendolo y organizándolo", y generar un 20% de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Además, el hallazgo puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades --denominadas comorbilidad--, así como para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.



Comentarios

Comenta esta información

Usuario:

Comentario:

Recomendar 0Twittear 0G+1 0

Plan de empleo de la Comunidad de Madrid.
www.emprendelo.es



Barcelona celebra el Día de la Constitución hasta con cinco actos distintos



El paro baja en 14.688 personas en el mejor noviembre desde 1996



El Barça cambia la 'senyera' por la 'estelada'



Tania Sánchez gana las primarias y será la candidata de IU en Madrid



Los Alba lloran a la Duquesa en un nuevo e íntimo funeral
'Isabel' bate récord de temporada con su lacrimógeno final

Desarrollan un modelo predictor que prevé los efectos de las sustancias químicas en la salud

Las bases de datos actuales contienen información de miles de moléculas, entre medicamentos, sustancias naturales y agentes químicos medioambientales, asociadas a enfermedades, ya sea porque tienen efectos adversos o terapéuticos.

FUENTE | [IRB Barcelona](#)

02/12/2014

Partiendo de este conocimiento acumulado durante años y disponible en bases de datos, científicos del [Instituto de Investigación Biomédica](#) (IRB Barcelona) liderados por el investigador ICREA Patrick Aloy, han ideado un modelo predictor que permite asociar fragmentos químicos con efectos positivos o negativos para un 20% de las enfermedades humanas.

El estudio se publica en [Nature Communications](#) y puede tener aplicación para diseñar fármacos más seguros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados. El estudio ha llevado el análisis de 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas.

LA FARMACOLOGÍA ANTERIOR A LOS 80 CON LA VISIÓN DEL SIGLO XXI

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo. Sin preocuparse en que hacían aquellas sustancias a nivel molecular ni saber las proteínas que alteraban se desarrollaron una gran cantidad de medicamentos para tratar todo tipo de enfermedades. Esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la biología molecular. Desde principios del siglo XXI, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología. Esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados.

El químico Miquel Duran, estudiante de doctorado que trabaja en biología de redes en el IRB Barcelona, se preguntó si la acumulación de datos actuales que relacionan la estructura química de sustancias a enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, permitiría desarrollar un modelo predictor que relacionara una estructura química con el efecto que tendría en humanos. "Lo que vemos es que, en efecto, tenemos suficiente información sobre estructuras químicas para predecir razonablemente bien los efectos que tendrán en un 20% de todas las enfermedades humanas", dice Duran. "Esto significa que la información de estructuras químicas, que en muchas ocasiones y sobre todo en el ámbito de la biología molecular no se tiene en cuenta, puede ser muy útil para la biomedicina, como por ejemplo para diseñar fármacos más seguros", asegura el investigador. El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado redescubriendolo y organizándolo, y generar un 20% de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

DISEÑOS MÁS SEGUROS, COMORBILIDAD Y REPOSICIONAMIENTO DE FÁRMACOS

Patrick Aloy explica que el estudio sirve para disponer de información valiosa para evitar o propiciar el uso de determinados fragmentos químicos en el diseño de fármacos. Por ejemplo, su modelo estima que hay un 40% de fragmentos químicos con efectos terapéuticos que no se están incorporando en el diseño de fármacos mientras que, en cambio, hay fragmentos que causan efectos secundarios que se encuentran en muchos medicamento en uso.

Los investigadores señalan además que su estudio puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades, la llamada comorbilidad -una lleva al desarrollo de otra- o comorbilidad inversa -una protege de desarrollar otra-, y para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados. Este trabajo ha sido posible gracias a la financiación aportada por el Ministerio de Economía y Competitividad, la Comisión Europea y el Consejo Europeo de Investigación al laboratorio dirigido por Patrick Aloy en Bioinformática Estructural y Biología de Redes en el IRB Barcelona.

Uso de cookies

Este sitio web utiliza cookies para que usted tenga la mejor experiencia de usuario. Si continúa navegando está dando su consentimiento para la aceptación de las mencionadas cookies y la aceptación de nuestra política de cookies, píncle el enlace para mayor información.

[ACEPTAR](#)

ENFERMEDADES SALUD Y BIENESTAR TELEVISIÓN PROFESIONAL

DIABETES

NUTRICIÓN

NIÑOS

MUJER

CHEQUEA TU SALUD

BÚSQUEDA...



01

DIC. 14

Logran predecir el efecto de los fármacos en un 20% de las enfermedades gracias al 'big data'

A las 14:01

Like

1

Twittear

2

8+1

0

Share

0



BARCELONA, 1 (EUROPA PRESS)

Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) han desarrollado un modelo predictor que anticipa los efectos de los medicamentos, las sustancias naturales y los agentes químicos medioambientales sobre un 20% de las enfermedades gracias al 'big data' sanitario.

El hallazgo, publicado en 'Nature Communications', puede tener aplicación para "diseñar fármacos más seguros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados", ha informado este lunes el IRB en un comunicado.

El estudio ha llevado el análisis de 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas.

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo: esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la biología molecular.

Desde principios del siglo XXI y hasta la actualidad, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero "esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados".

La acumulación de datos sanitarios que relacionan la estructura química de sustancias a una enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, ha permitido desarrollar un modelo predictor que relaciona una estructura química con el efecto que tendría en humanos.

El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado, "redescubriendolo y organizándolo", y generar un 20% de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Además, el hallazgo puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades --denominadas comorbilidad--, así como para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.



Copyright 2014 MedicinaTV

Los contenidos profesionales médicos, enfermedades, salud y bienestar de este sitio web son únicamente para fines informativos, y no es utilizable como consejo médico, diagnóstico o tratamiento. El uso de este sitio está sujeto a nuestros [términos de uso](#) y [política de privacidad](#) y a nuestra [política de cookies](#).

Síguenos



Contacta con nosotros



December 2, 2014

Other search tools: Drugs | Health | News

770 people on this site

powered by chartbeat

Submit News Contact Us About



Predictive model provides information for treating 20% of human diseases

Published on December 1, 2014 at 8:02 AM · No Comments

Recommend 1 Share

1 g+1 Tweet 5

The analysis of drugs, natural products, and chemical substances found in the environment allows the identification of the chemical fragments responsible for a therapeutic or deleterious effect on human health.

This knowledge may be valuable for the design of drugs with fewer secondary effects, for associating diseases, and for identifying new uses for drugs currently on the market.

The predictive model developed by researchers at IRB Barcelona provides information for the treatment of 20% of human diseases.

Current data bases hold information on thousands of molecules—including drugs, natural substances, and chemical agents found in the environment—that are associated with diseases, either because they have adverse effects or exert a therapeutic action. Using this information, gathered over many years and available in data bases, scientists headed by ICREA researcher Patrick Aloy at the Institute for Research in Biomedicine (IRB Barcelona) have devised a predictive model that allows them to associate chemical fragments with positive or negative effects in 20% of human diseases. Published today in *Nature Communications*, the study may have applications for the design of safer drugs, the detection of comorbidity, and the extension of current drug uses.

The study has involved the analysis of 10,000 chemical molecules, which together comprise 98,077 fragments associated with 1,176 diseases—these representative of all human diseases.

Pharmacology prior to the '80s seen from the 21st century

Until the '80s, pharmacologists designed a chemical substance and studied its effect on a model organism. Without examining the impact of these substances at the molecular level or the proteins that they altered, these scientists developed many drugs for a wide range of diseases. This system of trial and error, which produced a large body of information, was abandoned with the advent of molecular biology. Since the beginning of the 21st century, drugs have been designed to alter the behaviour of proteins or genes that have previously been identified as being affected in certain diseases. Based on prior knowledge of biology, this approach is not producing the results expected.

The chemist Miquel Duran, a PhD student working on network biology at IRB Barcelona, questioned whether the accumulation of current data that associate the chemical structure of substances with disease through its therapeutic or deleterious effect would allow the development of a predictive model that related the chemical structure of a compound with its effect in humans. "In effect, we have enough information on chemical structures to reasonably predict their effects in 20% of human diseases," explains Duran. "This implies the data on chemical structures, which on many occasions and above all in the field of molecular biology is not taken into account, can be most useful for biomedicine, for example for the design of safer drugs," says the researcher. The study allows the information accumulated to be re-examined and reorganised and to produce 20% of new knowledge thanks to the exploitation of computerized data.

The design of safer drugs, prediction of disease co-morbidities and repositioning of drugs

Patrick Aloy explains that the study allows access to valuable information that can serve to avoid or foster the use of certain chemical fragments for drug design. For example, his model predicts that 40% of chemical fragments with therapeutic effects are not included in drugs currently on the market; in contrast, fragments that cause secondary effects are.

The researchers also indicate that their study may serve to detect associations between two diseases, the so-called co-morbidity—meaning one leads to the development of the other—or inverse comorbidity—namely that one protects against the development of the other. The study may also reveal potential new uses of current drugs.

Trending Stories



Grand Challenges Canada announces \$1.2 million in grant for 11 new global health...



Perfectionism drives depression in bipolar/anxiety comorbidity



People treated with lithium drug are at risk of acute kidney damage



Parkinson's disease can migrate from gut to brain, shows research



New oral medication shows promise in treating fibromyalgia



Tips to help children manage grief during holidays

BMW



The BMW kidney grille is a hallmark of all



3122 211 70

Amplia

Latest News

This site uses cookies. By continuing to browse the site you are agreeing to our use of cookies. Find out more here.

(<http://www.radiointereconomia.com>)

[INTERECONOMIA TV \(HTTP://WWW.INTERECONOMIA.TV\)](http://WWW.INTERECONOMIA.TV) [EL TELEDIARIO \(HTTP://WWW.ELTELEDIARIO.COM\)](http://WWW.ELTELEDIARIO.COM) [LA GACETA \(HTTP://WWW.GACETA.ES\)](http://WWW.GACETA.ES)

[NEGOCIOS \(HTTP://WWW.NEGOCIOS.COM\)](http://WWW.NEGOCIOS.COM) [PUNTO PELOTA \(HTTP://WWW.PUNTOPELOTA.ES\)](http://WWW.PUNTOPELOTA.ES) [RADIO INTER \(HTTP://WWW.GACETA.ES/OIR-RADIO-INTER\)](http://WWW.GACETA.ES/OIR-RADIO-INTER)



ÚLTIMA HORA (/ULTIMA-HORA)



[IBEX 35 \(HTTP://WWW.RADIOINTERECONOMIA.COM/ECONOMIA/LA-BOLSA/IBEX-35/\)](http://WWW.RADIOINTERECONOMIA.COM/ECONOMIA/LA-BOLSA/IBEX-35/)

(<http://www.radiointereconomia.com>) (<https://play.spotify.com/user/intereconom%C3%ADa>) (<https://twitter.com/Rlntereconomia>) (<https://www.facebook.com/RadioIntereconomia>) (<http://www.youtube.com/user/Intereconomiabute>)

[AUDIOS \(/AUDIOS\)](#) [PROGRAMAS \(/PROGRAMAS\)](#) [EMISORAS \(/EMISORAS\)](#)

IBEX 35 10.702,6 (0.28%)

EURO STOXX 50 3.234,97 (0.06%)

DOW JONES 17.776,80 (-0.29%)

DAX 9.952,05 (-0.12%)

PATROCINADO POR



(<https://www.bancosantander.es>)

PREDICEN LOS EFECTOS DE LAS SUSTANCIAS QUÍMICAS EN UN 20% DE LAS ENFERMEDADES

([HTTP://WWW.RADIOINTERECONOMIA.COM/2014/12/01/PREDICEN-LOS-EFECTOS-DE-LAS-SUSTANCIAS-QUIMICAS-EN-UN-20-DE-LAS-ENFERMEDADES/](http://WWW.RADIOINTERECONOMIA.COM/2014/12/01/PREDICEN-LOS-EFECTOS-DE-LAS-SUSTANCIAS-QUIMICAS-EN-UN-20-DE-LAS-ENFERMEDADES/))

01/12/2014 (16:46)

Barcelona (<http://www.radiointereconomia.com/paises/europa/espana/cataluna/barcelona-cataluna/barcelona/>), 1 dic.- Científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB) de Barcelona (<http://www.radiointereconomia.com/paises/europa/espana/cataluna/barcelona-cataluna/barcelona/>) han desarrollado un modelo que predice los efectos de las sustancias químicas en un 20 % de las enfermedades humanas.

PUBLICIDAD

Para elaborar el trabajo, que ha publicado hoy la revista Nature Communications, los investigadores han analizado 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de enfermedades humanas.

El análisis de fármacos, productos naturales y sustancias medioambientales ha permitido identificar los fragmentos químicos responsables de causar un efecto terapéutico o perjudicial para la salud (<http://www.radiointereconomia.com/salud/>) humana, lo que puede ser de utilidad para generar fármacos con menos efectos secundarios, relacionar enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados.

Según ha explicado Patrick Aloy, que ha liderado la investigación, partiendo de las bases de datos que contienen información de miles de moléculas, entre medicamentos, sustancias naturales y agentes químicos medioambientales, han ideado este modelo predictor que permite asociar fragmentos químicos con efectos positivos o negativos para un 20 % de las enfermedades humanas".

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo.

Sin preocuparse en qué hacían aquellas sustancias a nivel molecular ni saber las proteínas que alteraban, se desarrollaron una gran cantidad de medicamentos para tratar todo tipo de enfermedades, pero esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento (<http://www.radiointereconomia.com/conocimiento/>), se abandonó con la irrupción de la biología molecular.

Desde principios del siglo XXI, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología, pero esta aproximación basada en el conocimiento (<http://www.radiointereconomia.com/conocimiento/>) biológico previo no está dando los frutos esperados.

Todavía estás a tiempo de ganar un viaje a ABU DABI

5

(http://www6.smartadserver.com/h/cc?imgid=11406171&insid=3643145&pgid=442202&uid=9026423724149089039&tat=%24dt%3d11&systat=%24ac%3d1313611012%3b%24qf%3dhigh%3b%24qpc%3d08001%3b%24qpp%3d0%3b%24qf%3d228_3356_886761%3b%24dma%3d0%3b%24b%3d12330%3b%24o%3d12100%3b%24sh%3d1200%3b%24sw%3d1920&go=http%3a%2f%2fwww.formulasantander.com%2f

Predicen los efectos de las sustancias químicas en un 20% de las enfermedades <http://www.radiointereconomia.com/2014/12/01/predicen-los-efectos-de-las-sustancias-quimicas-en-un-20%-de-las-enfermedades/>



"Lo que vemos es que, en efecto, tenemos suficiente información sobre estructuras químicas para predecir razonablemente bien los efectos que tendrán en un 20 % de todas las enfermedades humanas", ha dicho Duran.

"Esto significa que la información (<http://www.radiointereconomia.com/la-informacion/>) de estructuras químicas, que en muchas ocasiones y sobre todo en el ámbito de la biología molecular no se tiene en cuenta, puede ser muy útil para la biomedicina, como por ejemplo para diseñar fármacos más seguros", ha subrayado el investigador.

El estudio permite agrupar el conocimiento (<http://www.radiointereconomia.com/conocimiento/>) acumulado redescubriendolo y organizándolo, y generar un 20 % de conocimiento (<http://www.radiointereconomia.com/conocimiento/>) nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Patrick Aloy ha indicado que el estudio sirve para disponer de información valiosa para evitar o propiciar el uso de determinados fragmentos químicos en el diseño de fármacos.

Por ejemplo, su modelo estima que hay un 40 % de fragmentos químicos con efectos terapéuticos que no se están incorporando en el diseño de fármacos mientras que, en cambio, hay fragmentos que causan efectos secundarios que se encuentran en muchos medicamentos.

Los investigadores señalan además que su estudio puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades, la llamada comorbilidad -una lleva al desarrollo de otra- o comorbilidad inversa -una protege de desarrollar otra-, y para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados. EFE

Última hora de economía

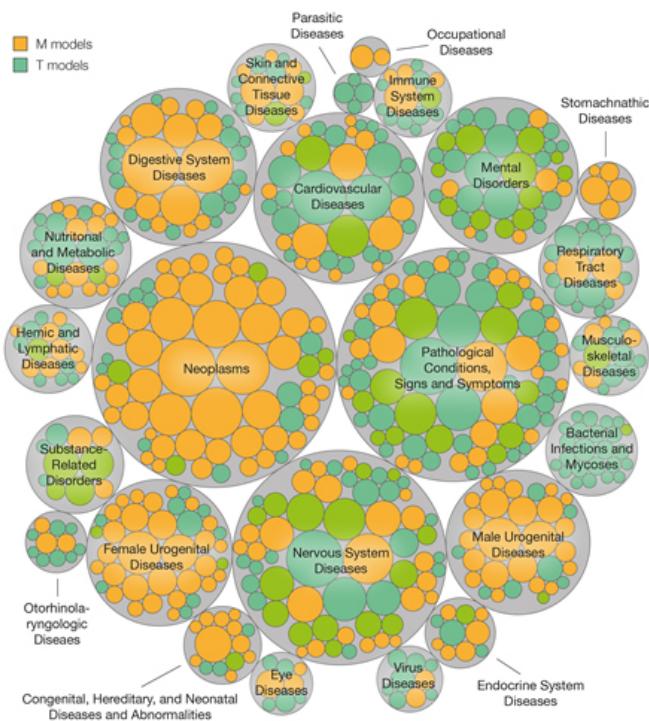
- [Moscovici insiste en que España debe reducir déficit, pero evita decir cómo](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/moscovici-insiste-en-que-espana-debe-reducir-deficit-pero-evita-dicir-como/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/moscovici-insiste-en-que-espana-debe-reducir-deficit-pero-evita-dicir-como/>) 02/12/2014
- [Moscovici ve legal el plazo extra dado a Francia para reconducir presupuesto](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/moscovici-ve-legal-el-plazo-extra-dado-a-francia-para-reconducir-presupuesto/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/moscovici-ve-legal-el-plazo-extra-dado-a-francia-para-reconducir-presupuesto/>) 02/12/2014
- [Asempleo prevé recuperación económica y creación de empleo para cerrar el año](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/asempleo-preve-recuperacion-economica-y-creacion-de-empleo-para-cerrar-el-ano/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/asempleo-preve-recuperacion-economica-y-creacion-de-empleo-para-cerrar-el-ano/>) 02/12/2014
- [PSOE pide en Senado la paralización de los sondeos en Mediterráneo y Canarias](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/psoe-pide-en-senado-la-paralizacion-de-los-sondeos-en-mediterraneo-y-canarias/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/psoe-pide-en-senado-la-paralizacion-de-los-sondeos-en-mediterraneo-y-canarias/>) 02/12/2014
- [Los principales datos de la pieza de los contratos de Fitur con Gürteil](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/los-principales-datos-de-la-pieza-de-los-contratos-de-fitur-con-gurtel/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/los-principales-datos-de-la-pieza-de-los-contratos-de-fitur-con-gurtel/>) 02/12/2014
- [Sindicatos catalanes lamentan que empleo que se crea es "precario y temporal"](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/sindicatos-catalanes-lamentan-que-empleo-que-se-crea-es-precario-y-temporal/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/sindicatos-catalanes-lamentan-que-empleo-que-se-crea-es-precario-y-temporal/>) 02/12/2014
- [Richard Stallman: Los móviles serían "el sueño de Stalin" para poder vigilar](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/richard-stallman-los-moviles-serian-el-sueno-de-stalin-para-poder-vigilar/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/richard-stallman-los-moviles-serian-el-sueno-de-stalin-para-poder-vigilar/>) 02/12/2014
- [CCOO dice que el dato de paro muestra la estacionalidad del mercado laboral](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/ccoo-dice-que-el-dato-de-paro-muestra-la-estacionalidad-del-mercado-laboral/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/ccoo-dice-que-el-dato-de-paro-muestra-la-estacionalidad-del-mercado-laboral/>) 02/12/2014
- [Martes, 2 de diciembre de 2014 \(12.00 GMT\)](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/martes-2-de-diciembre-de-2014-12-00-gmt/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/martes-2-de-diciembre-de-2014-12-00-gmt/>) 02/12/2014
- [Báñez dice que España está ante un cambio estructural del mercado de trabajo](http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/banez-dice-que-espana-esta-ante-un-cambio-estructural-del-mercado-de-trabajo/) (<http://www.radiointereconomia.com/2014/12/02/banez-dice-que-espana-esta-ante-un-cambio-estructural-del-mercado-de-trabajo/>) 02/12/2014

Más noticias económicas de última hora. (<http://www.radiointereconomia.com/economia/>)





Researchers Design a Model to Predict the Effects of Chemical Substances on Health



This shows the scheme of the predictive model of chemical substances and their association with human diseases. The orange and green circles show adverse and therapeutic effects respectively. The size of the circles is proportional to the number of molecules that hold the same structural fragment. Image: Miquel Duran. IRB Barcelona

December 01, 2014

Barcelona, Spain (Scicasts) — Current data bases hold information on thousands of molecules--including drugs, natural substances, and chemical agents found in the environment-- that are associated with diseases, either because they have adverse effects or exert a therapeutic action.

Using this information, gathered over many years and available in data bases, scientists headed by ICREA researcher Patrick Aloy at the Institute for Research in Biomedicine (IRB Barcelona) have devised a predictive model that allows them to associate chemical fragments with positive or

<http://scicasts.com/bio-it/1858-drug-development/8723-researchers-design-a-model-to-predict-the-effects-of-chemical-substances-on-health/>

negative effects in 20% of human diseases. Published today in *Nature Communications*, the study may have applications for the design of safer drugs, the detection of comorbidity, and the extension of current drug uses.

The study has involved the analysis of 10,000 chemical molecules, which together comprise 98,077 fragments associated with 1,176 diseases--these representative of all human diseases.

Pharmacology prior to the '80s seen from the 21st century

Until the '80s, pharmacologists designed a chemical substance and studied its effect on a model organism. Without examining the impact of these substances at the molecular level or the proteins that they altered, these scientists developed many drugs for a wide range of diseases. This system of trial and error, which produced a large body of information, was abandoned with the advent of molecular biology. Since the beginning of the 21st century, drugs have been designed to alter the behaviour of proteins or genes that have previously been identified as being affected in certain diseases. Based on prior knowledge of biology, this approach is not producing the results expected.

The chemist Miquel Duran, a PhD student working on network biology at IRB Barcelona, questioned whether the accumulation of current data that associate the chemical structure of substances with disease through its therapeutic or deleterious effect would allow the development of a predictive model that related the chemical structure of a compound with its effect in humans. "In effect, we have enough information on chemical structures to reasonably predict their effects in 20% of human diseases," explains Duran. "This implies the data on chemical structures, which on many occasions and above all in the field of molecular biology is not taken into account, can be most useful for biomedicine, for example for the design of safer drugs," says the researcher. The study allows the information accumulated to be re-examined and reorganized and to produce 20% of new knowledge thanks to the exploitation of computerized data.

The design of safer drugs, prediction of disease comorbidities and repositioning of drugs

Patrick Aloy explains that the study allows access to valuable information that can serve to avoid or foster the use of certain chemical fragments for drug design. For example, his model predicts that 40% of chemical fragments with therapeutic effects are not included in drugs currently on

<http://scicasts.com/bio-it/1858-drug-development/8723-researchers-design-a-model-to-predict-the-effects-of-chemical-substances-on-health/>

the market; in contrast, fragments that cause secondary effects are.

The researchers also indicate that their study may serve to detect associations between two diseases, the so-called co-morbidity--meaning one leads to the development of the other-- or inverse comorbidity-- namely that one protects against the development of the other. The study may also reveal potential new uses of current drugs.

Article adapted from a Institute for Research in Biomedicine (IRB Barcelona) news release.

Publication: A chemo-centric view of human health and disease. Miquel Duran-Frigola, David Rossell & Patrick Aloy. Nature Communications (December 01, 2014): Click here to view.

Researchers design model to predict effects of chemical substances on health

Date: December 1, 2014

Source: Institute for Research in Biomedicine-IRB

The analysis of drugs, natural products, and chemical substances found in the environment allows the identification of the chemical fragments responsible for a therapeutic or deleterious effect on human health.

This knowledge may be valuable for the design of drugs with fewer secondary effects, for associating diseases, and for identifying new uses for drugs currently on the market.

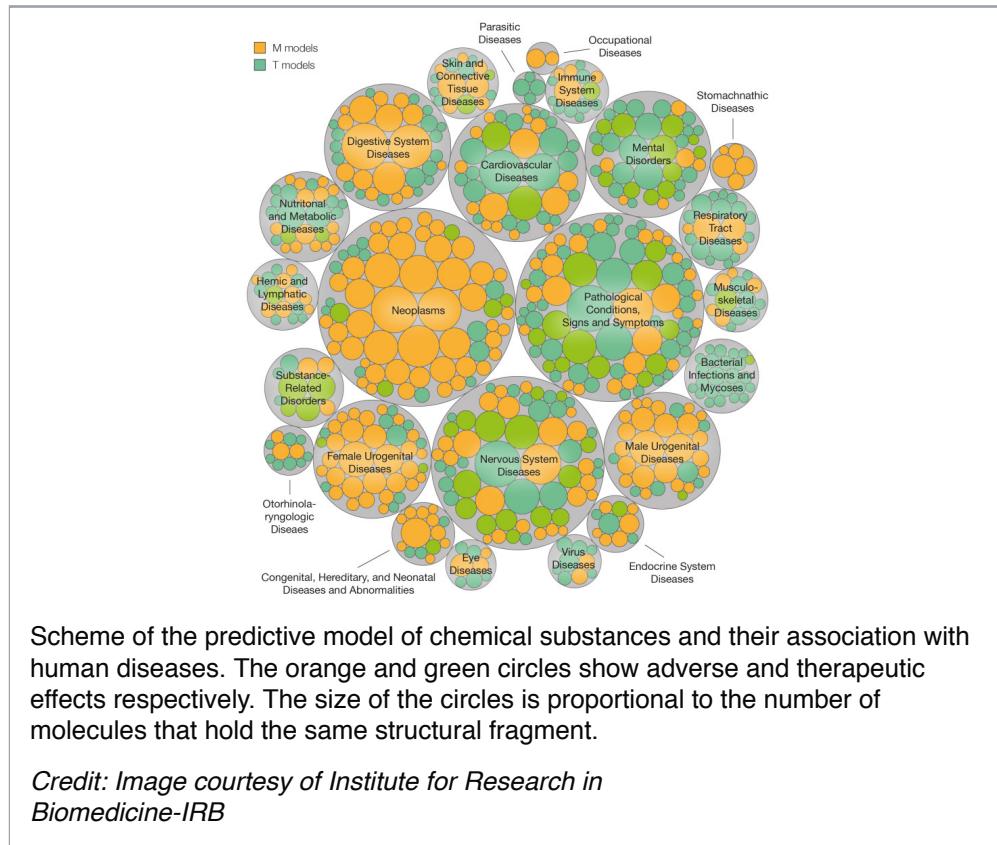
The predictive model developed by researchers at IRB Barcelona provides information for the treatment of 20% of human diseases.

Current data bases hold information on thousands of molecules -- including drugs, natural substances, and chemical agents found in the environment -- that are associated with diseases, either because they have adverse effects or exert a therapeutic action. Using this information, gathered over many years and available in data bases, scientists headed by ICREA researcher Patrick Aloy at the Institute for Research in Biomedicine (IRB Barcelona) have devised a predictive model that allows them to associate chemical fragments with positive or negative effects in 20% of human diseases. Published in *Nature Communications*, the study may have applications for the design of safer drugs, the detection of comorbidity, and the extension of current drug uses.

The study has involved the analysis of 10,000 chemical molecules, which together comprise 98,077 fragments associated with 1,176 diseases -- these representative of all human diseases.

Pharmacology prior to the '80s seen from the 21st century

Until the '80s, pharmacologists designed a chemical substance and studied its effect on a model organism. Without examining the impact of these substances at the molecular level or the proteins that they altered, these scientists developed many drugs for a wide range of diseases. This system of trial and error, which produced a large body of information, was abandoned with the advent of molecular biology. Since the beginning of the 21st century, drugs have been designed to alter the behaviour of proteins or genes that have previously been



Scheme of the predictive model of chemical substances and their association with human diseases. The orange and green circles show adverse and therapeutic effects respectively. The size of the circles is proportional to the number of molecules that hold the same structural fragment.

Credit: Image courtesy of Institute for Research in Biomedicine-IRB

identified as being affected in certain diseases. Based on prior knowledge of biology, this approach is not producing the results expected.

The chemist Miquel Duran, a PhD student working on network biology at IRB Barcelona, questioned whether the accumulation of current data that associate the chemical structure of substances with disease through its therapeutic or deleterious effect would allow the development of a predictive model that related the chemical structure of a compound with its effect in humans. "In effect, we have enough information on chemical structures to reasonably predict their effects in 20% of human diseases," explains Duran. "This implies the data on chemical structures, which on many occasions and above all in the field of molecular biology is not taken into account, can be most useful for biomedicine, for example for the design of safer drugs," says the researcher. The study allows the information accumulated to be re-examined and reorganised and to produce 20% of new knowledge thanks to the exploitation of computerized data.

The design of safer drugs, prediction of disease co-morbidities and repositioning of drugs

Patrick Aloy explains that the study allows access to valuable information that can serve to avoid or foster the use of certain chemical fragments for drug design. For example, his model predicts that 40% of chemical fragments with therapeutic effects are not included in drugs currently on the market; in contrast, fragments that cause secondary effects are.

The researchers also indicate that their study may serve to detect associations between two diseases, the so-called co-morbidity -- meaning one leads to the development of the other -- or inverse comorbidity -- namely that one protects against the development of the other. The study may also reveal potential new uses of current drugs.

Story Source:

The above story is based on [materials](#) provided by **Institute for Research in Biomedicine-IRB**. *Note: Materials may be edited for content and length.*

Journal Reference:

1. Miquel Duran-Frigola, David Rossell, Patrick Aloy. **A chemo-centric view of human health and disease.** *Nature Communications*, 2014; 5: 5676 DOI: [10.1038/ncomms6676](https://doi.org/10.1038/ncomms6676)

Cite This Page:

[MLA](#) [APA](#) [Chicago](#)

Institute for Research in Biomedicine-IRB. "Researchers design model to predict effects of chemical substances on health." ScienceDaily. ScienceDaily, 1 December 2014. <www.sciencedaily.com/releases/2014/12/141201090554.htm>.

Science Newsline

Biology

[Home](#) | [Top News](#) | [Most Popular](#) | [Video](#) | [Multimedia](#) | [News Feeds](#) | [Feedback](#)
[Medicine](#) | [Nature & Earth](#) | [Biology](#) | [Technology & Engineering](#) | [Space & Planetary](#) | [Psychology](#) | [Physics & Chemistry](#) | [Economics](#) | [Archaeology](#)

[Top](#) > [Biology](#) > Researchers Design a Model to ... >



Related »

Nature X-rays Reveal How Soil Bacteria
3/4/12 Carry Out Surprising Chemistry
By SLAC National Accelerator
Laboratory

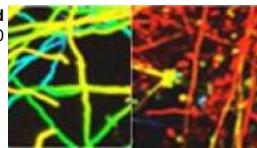
Researchers working at the U.S. Department of Energy's (DOE) SLAC National Accelerator Laboratory have used powerful X-rays to help decipher how certain natural antibiotics defy a longstanding set of ...

Work
 11/18/14



Finding New Ways to Make Drugs
 By Australian National University

Lead
 5/1/10



Fighting Fungal Infections with Bacteria
 By Society for General Microbiology

Schneider Understanding Natural Compounds
 11/12/14

Medicine is drifting towards a major problem. An increasing number of bacteria is no longer sensitive to known antibiotics. Doctors urgently need to find new ways of fighting these ...

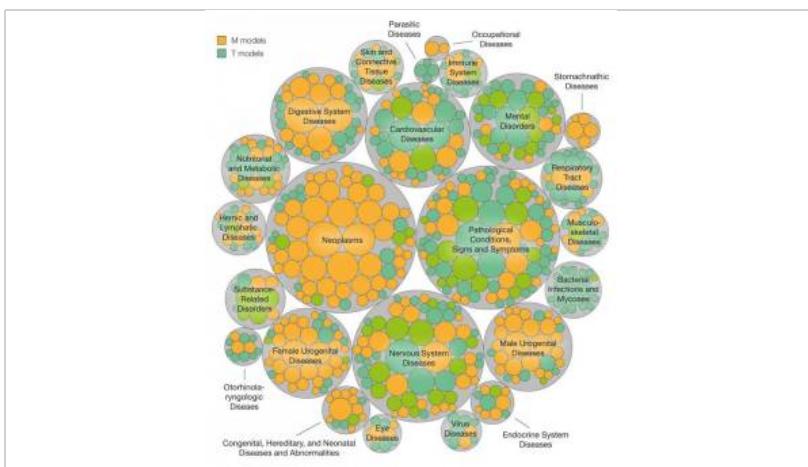
Baran Scripps Research Team
 11/7/11

Achieves Critical Step to Opening Elusive Class of Compounds to Drug Discovery
 By Scripps Research Institute
 Taxanes are a family of compounds that includes one of the most important cancer drugs ever discovered, Taxol® among other cancer treatments. But the difficulty producing these complex molecules ...

[More »](#)

Researchers Design a Model to Predict the Effects of Chemical Substances on Health

Published: December 1, 2014.



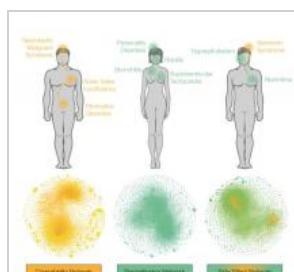
Current data bases hold information on thousands of molecules--including drugs, natural substances, and chemical agents found in the environment-- that are associated with diseases, either because they have adverse effects or exert a therapeutic action. Using this information, gathered over many years and available in data bases, scientists headed by ICREA researcher Patrick Aloy at the Institute for Research in Biomedicine (IRB Barcelona) have devised a predictive model that allows them to associate chemical fragments with positive or negative effects in 20% of human diseases. Published today in *Nature Communications*, the study may have applications for the design of safer drugs, the detection of comorbidity, and the extension of current drug uses.

The study has involved the analysis of 10,000 chemical molecules, which together comprise 98,077 fragments associated with 1,176 diseases--these representative of all human diseases.

Pharmacology prior to the '80s seen from the 21st century

Until the '80s, pharmacologists designed a chemical substance and studied its effect on a model organism. Without examining the impact of these substances at the molecular level or the proteins that they altered, these scientists developed many drugs for a wide range of diseases. This system of trial and error, which produced a large body of information, was abandoned with the advent of molecular biology. Since the beginning of the 21st century, drugs have been designed to alter the behaviour of proteins or genes that have previously been identified as being affected in certain diseases. Based on prior knowledge of biology, this approach is not producing the results expected.

The chemist Miquel Duran, a PhD student working on network biology at IRB Barcelona, questioned whether the accumulation of current data that associate the chemical structure of substances with disease through its therapeutic or deleterious effect would allow the development of a predictive model that related the chemical structure of a compound with its effect in humans. "In effect, we have enough information on chemical structures to reasonably predict their effects in 20% of human diseases," explains Duran. "This implies the data on chemical structures, which on many occasions and above all in the field of molecular biology is not taken into account, can be most useful for biomedicine, for example for the design of safer drugs," says the researcher. The study allows the information accumulated to be re-examined and reorganized and to produce 20% of new knowledge thanks to the exploitation of computerized data.



These are examples of information obtained with the study: relationship between diseases, reuse of drugs, and therapeutic and adverse effects of the substances. Credit: Miquel Duran, IRB Barcelona



IRB Barcelona researchers Miquel Duran (left) and Patrick Aloy are the authors of the *Nature Communications* published today. Credit: IRB Barcelona

The design of safer drugs, prediction of disease co-morbidities and repositioning of drugs

Patrick Aloy explains that the study allows access to valuable information that can serve to avoid or foster the use of certain chemical fragments for drug design. For example, his model predicts that 40% of chemical fragments with therapeutic effects are not included in drugs currently on the market; in contrast, fragments that cause secondary effects are.

The researchers also indicate that their study may serve to detect associations between two diseases, the so-called co-morbidity--meaning one leads to the development of the other- or inverse comorbidity--namely that one protects against the development of the other. The study may also reveal potential new uses of current drugs.

The above story is based on materials provided by [Institute for Research in Biomedicine \(IRB Barcelona\)](#).

Translate this page: [Chinese](#) [French](#) [German](#) [Italian](#) [Japanese](#) [Korean](#) [Portuguese](#) [Russian](#) [Spanish](#)

Comment

280

All comments are reviewed before being posted. We cannot accept messages that refer a product, or web site. If you are looking for a response to a question please use our another [feedback](#) page.



Menú

- [Noticias](#)
- [Institucional](#)
- [Investigación](#)
- [Materiales Educativos](#)
- [Biblioteca multimedia](#)
- [Preguntas frecuentes](#)
- [Boletín](#)
- [Buscar](#)
- [Contáctenos](#)
- [Enlaces - Directorio](#)
- [Glosario](#)
- [Noticias x Mes](#)
- [Temas](#)
- [Top 15](#)



Buscar

Categorías

- [Todas las Categorías](#)
- [Aportes](#)
- [Ejercicios](#)
- [Informan / Escriben](#)
- [La prensa](#)
- [Noticias del Sertox](#)
- [Recomendamos](#)
- [Toxicología al día](#)
- [Trivia toxicológica](#)
- [zNo sólo de tóxicos](#)

Blogs



Manifiesto amianto



Manifiesto por la Prohibición mundial del amianto.

Firmá acá

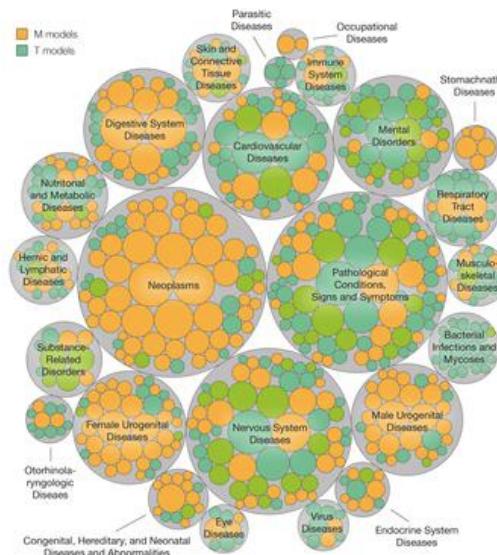


Recomendamos: Una mirada centrada en los químicos y sus efectos en la salud y la enfermedad humana



Buenas ideas...
(Foto: SerTox)

Un modelo predice los efectos de las sustancias químicas en la salud. agenciasinc.es. 01/12/14. El análisis de fármacos, productos naturales y sustancias medioambientales permite identificar los fragmentos químicos responsables de causar un efecto terapéutico o perjudicial para la salud humana. Este conocimiento puede ser de utilidad para generar fármacos con menos efectos secundarios, relacionar enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados. El modelo predictor ideado por los investigadores del IRB Barcelona da información para el tratamiento de un 20% de enfermedades humanas.



Representación de sustancias químicas relacionadas con enfermedades humanas. Los círculos naranjas son efectos adversos y los círculos verdes, efectos terapéuticos. El tamaño de los círculos es proporcional al número de moléculas que contienen un mismo fragmento estructural. / Miquel Duran, IRB Barcelona

Las bases de datos actuales contienen información de miles de moléculas, entre medicamentos, sustancias naturales y agentes químicos medioambientales, asociadas a enfermedades, ya sea porque tienen efectos adversos o terapéuticos.

Partiendo de este conocimiento acumulado durante años y disponible en bases de datos, científicos del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) liderados por el investigador ICREA Patrick Aloy, han ideado un modelo predictor que permite asociar fragmentos químicos con efectos positivos o negativos para un 20% de las enfermedades humanas.

El estudio se publica hoy en Nature Communications y puede tener aplicación para diseñar fármacos más seguros, detectar asociaciones entre enfermedades y dar nuevos usos a fármacos ya aprobados.

El estudio ha conllevado el análisis de 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas, representativas de todas las enfermedades humanas.

Farmacología anterior a los 80 'con la visión del siglo XXI'

Hasta los años 80, los farmacólogos diseñaban una sustancia química y estudiaban el efecto que tenía en un organismo modelo. Sin preocuparse en que hacían aquellas sustancias a nivel molecular ni saber las proteínas que alteraban se desarrollaron una gran cantidad de medicamentos para tratar todo tipo de enfermedades. Esta práctica de ensayo y error que acumuló mucho conocimiento, se abandonó con la irrupción de la biología molecular.

Desde principios del siglo XXI, los fármacos se diseñan para alterar el comportamiento de proteínas o genes que previamente se saben afectados en una determinada patología. Esta aproximación basada en el conocimiento biológico previo no está dando los frutos esperados.

El químico Miquel Duran, estudiante de doctorado que trabaja en biología de redes en el IRB Barcelona, se preguntó si la acumulación de datos actuales que relacionan la estructura química de sustancias a enfermedad por su efecto terapéutico o adverso, permitiría desarrollar un modelo predictor que relacionara una estructura química con el efecto que

Login

Nickname	<input type="text"/>
Contraseña	<input type="password"/>
<input type="button" value="Login"/>	



[+ info](#)
[Logout](#)

Enlaces Relacionados

Noticia más leída sobre Artículos y Textos Científicos:
[De Martín Cañas: Herbalife + hepatotoxicidad](#)

Votos del Artículo

Puntuación Promedio: 0
votos: 0

Por favor tómate un segundo y vota por este artículo:



Publicidad



tendría en humanos.

"Lo que vemos es que, en efecto, tenemos suficiente información sobre estructuras químicas para predecir razonablemente bien los efectos que tendrán un 20% de todas las enfermedades humanas", dice Duran.

"Esto significa que la información de estructuras químicas, que en muchas ocasiones y sobre todo en el ámbito de la biología molecular no se tiene en cuenta, puede ser muy útil para la biomedicina, como por ejemplo para diseñar fármacos más seguros", asegura el investigador. El estudio permite agrupar el conocimiento acumulado redescubriendolo y organizándolo, y generar un 20% de conocimiento nuevo gracias a la explotación de los datos informatizados.

Diseños más seguros, comorbilidad y reposicionamiento de fármacos

Patrick Aloy explica que el estudio sirve para disponer de información valiosa para evitar o propiciar el uso de determinados fragmentos químicos en el diseño de fármacos. Por ejemplo, su modelo estima que hay un 40% de fragmentos químicos con efectos terapéuticos que no se están incorporando en el diseño de fármacos mientras que, en cambio, hay fragmentos que causan efectos secundarios que se encuentran en muchos medicamentos en uso.

Los investigadores señalan además que su estudio puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades, la llamada comorbilidad -una lleva al desarrollo de otra- o comorbilidad inversa -una protege de desarrollar otra-, y para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados.

Este trabajo ha sido posible gracias a la financiación aportada por el Ministerio de Economía y Competitividad, la Comisión Europea y el Consejo Europeo de Investigación en el laboratorio dirigido por Patrick Aloy en Bioinformática Estructural y Biología de Redes en el IRB Barcelona.

Referencia bibliográfica: Miquel Duran-Frigola, David Rossell & Patrick Aloy. A chemocentric view of human health and disease. Nature Communications (1 December 2014) doi: 10.1038/ncomms6676

Enviado por [icp](#) el 01 diciembre 2014 00:00:00 (31 Lecturas)

Me gusta
Compartir { 5 }

Agrega un comentario...

Comentar con...

Plug-in social de Facebook

Recomendar esto



Artículos e imágenes de:



Artículos y Textos Científicos



País: España

[Inicio](#) | [Webmaster](#) | [Código de Conducta](#) | [Code of Conduct](#) | Feed [RSS en Español](#) (Also in [English](#))

Todos los logos y marcas registradas son propiedad de sus respectivos dueños. Los comentarios son propiedad de quienes lo envían, todo el resto © 2006-2011 by Sertox.

Webs Asociadas: [www.country2.com](#) / [Radio FM Estacion San Pedro](#) / [Lombó Teatro Salamanca - Zamora](#)

PHP-Nuke Copyright © 2005 by Francisco Burzi. This is free software, and you may redistribute it under the GPL. PHP-Nuke comes with absolutely no warranty, for details, see the [license](#).
Página Generada en: 0.04 Segundos

PUBLICIDAD

Martes, 02 de diciembre de 2014

EDITORIAL
Juan Blanco

Red Neurosalud

Bot 2.0 app
PLUS VA CONTIGO

| Opinión | Apps | Primera Persona | Autonomías | Actualidad Gráfica | Entrevistas | A Fondo | Medicamentos | ConSalud TV | Barómetro | CMDR |
| Pacientes | Médicos | Farmacias | Enfermería | Tecnología | Industria | Cardiología | Pediatría | Oncología | Hombre | Mujer | Nutrición | Estética | Vida Sana | Biotecnología

Big Data para predecir el efecto de los fármacos y poder crear otros nuevos mejorados

27 02-12-2014

comentarios 0

Twittear 1

Me gusta 0

Compartir

8+ 0



Seguir a @Consalud_es

Redacción | Madrid

Se trata de un modelo creado por científicos de **Barcelona** capaz de identificar los fragmentos químicos en los medicamentos que causan los efectos secundarios. También analizan otras sustancias que podrán dar información para el tratamiento de un 20% de enfermedades humanas.

Con ello, se podrán crear nuevos fármacos con menos efectos secundarios, relacionar enfermedades y dar nuevos usos más productivos a los medicamentos que ya existen. Lo que han logrado, en concreto, los investigadores del **Instituto de Investigación Biomédica de Barcelona** han logrado crear un modelo que daría información para el tratamiento de un 20% de enfermedades humanas.

Esto es posible gracias a todo el conocimiento acumulado en bases de datos sobre miles de moléculas entre medicamentos, sustancias naturales y agentes químicos medioambientales asociados a enfermedades, que pueden tener efectos adversos (los llamados efectos secundarios) o terapéuticos.

En concreto, el estudio (publicado en **Nature Communications**), ha analizado 10.000 moléculas químicas que contienen 98.077 fragmentos asociados a 1.176 condiciones patológicas que representan a todas las enfermedades humanas.

SE DESCUBREN NUEVOS FRAGMENTOS QUÍMICOS CON PROPIEDADES TERAPÉUTICAS

La aplicación de esta investigación, liderada por el investigador **Patrick Aloy**, podrá conllevar diseños más seguros. Por ejemplo, se estima que hay un 40% de fragmentos químicos con efectos terapéuticos que no se incorporan en el diseño de fármacos mientras que hay otros que causan efectos secundarios y están presentes en muchos medicamentos.

Los círculos naranjas son efectos adversos y los círculos verdes, efectos terapéuticos. El tamaño de los círculos es proporcional al número de moléculas que contienen un



PORTADA

Pfizer completa la adquisición de las vacunas de Baxter

Adquiere así la cartera de vacunas contra la meningitis causada por el meningococo del grupo C y la vacuna contra la encefalitis transmitida por garrapatas infectadas con el virus de TBE.

PUBLICIDAD



AppSaludable



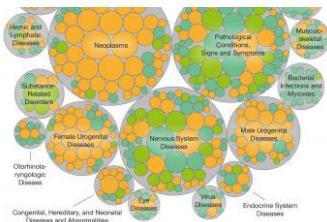
Más que Dos



Recomendada para el acompañamiento y

mismo fragmento químico

Los investigadores señalan además que su estudio puede servir para detectar asociaciones entre dos enfermedades, la llamada comorbilidad y la comorbilidad, y para indicar nuevos posibles usos para fármacos ya aprobados. La investigación ha contado con financiación del **Gobierno, de la Comisión Europea y del Consejo Europeo de Investigación.**



Porque salud necesitamos todos... ConSalud.es

socialización del embarazo

GRATIS. Disponible en Apple.

Más Apps

- Alermita
- 30 años de VIH
- 100% Vision
- CeliCity
- Sleep Better

PUBLICIDAD

Normas de uso

- Esta es la opinión de los internautas, no de ConSalud.es
- No está permitido verter comentarios contrarios a las leyes españolas o injuriantes.
- ConSalud.es se reserva el derecho de eliminar los comentarios que considere fuera del tema

Deje su comentario

(

)

(

)

Udf758
Enviar
Borrar

Comentarios # 0

A.M.A.
agrupación mutual
aseguradora
LA MUTUA DE LOS PROFESIONALES SANITARIOS

LA CONFIANZA ES MUTUAL

www.amaseguros.com 902 30 30 10

EUROGALENUS
EXECUTIVE SEARCH CONSULTANTS

Pacientes Médicos	Opinión Enfermería	A Fondo Entrevistas	Salud de la Mujer Salud del Hombre	Biotecnología Pediatría
Farmacias	Primera Persona	Actualidad Gráfica	Apps	Estética
Medicamentos Vida Sana	Industria Tecnología	Multimedia Autonormias	Oncología Cardiología	Nutrición



© Copyright 2013 - AVISO LEGAL - PUBLICIDAD - REDACCIÓN - DIRECCIÓN - BAJA NEWSLETTER - ALTA NEWSLETTER
ConSalud - Calle Batalla de Belchite 5 - 4º, 28045 Madrid (España) - Tfif (34) 91 014 83 70- info@consalud.es

Researchers design a model to predict the effects of chemical substances on health

2 December 2014 - 2am PST

Pharma Industry / Biotech Industry

Adapted media release

The analysis of drugs, natural products, and chemical substances found in the environment allows the identification of the chemical fragments responsible for a therapeutic or deleterious effect on human health.

This knowledge may be valuable for the design of drugs with fewer secondary effects, for associating diseases, and for identifying new uses for drugs currently on the market.

The predictive model developed by researchers at IRB Barcelona provides information for the treatment of 20% of human diseases.

Current data bases hold information on thousands of molecules - including drugs, natural substances, and chemical agents found in the environment - that are associated with diseases, either because they have adverse effects or exert a therapeutic action. Using this information, gathered over many years and available in data bases, scientists headed by ICREA researcher Patrick Aloy at the Institute for Research in Biomedicine (IRB Barcelona) have devised a predictive model that allows them to associate chemical fragments with positive or negative effects in 20% of human diseases. Published in *Nature Communications*, the study may have applications for the design of safer drugs, the detection of comorbidity, and the extension of current drug uses.

The study has involved the analysis of 10,000 chemical molecules, which together comprise 98,077 fragments associated with 1,176 diseases - these representative of all human diseases.

Pharmacology prior to the '80s seen from the 21st century

Until the '80s, pharmacologists designed a chemical substance and studied its effect on a model organism. Without examining the impact of these substances at the molecular level or the proteins that they altered, these scientists developed many drugs for a wide range of diseases. This system of trial and error, which produced a large body of information, was abandoned with the advent of molecular biology. Since the beginning of the 21st century, drugs have been designed to alter the behaviour of proteins or genes that have previously been identified as being affected in certain diseases. Based on prior knowledge of biology, this approach is not producing the results expected.

The chemist Miquel Duran, a PhD student working on network biology at IRB Barcelona, questioned

whether the accumulation of current data that associate the chemical structure of substances with disease through its therapeutic or deleterious effect would allow the development of a predictive model that related the chemical structure of a compound with its effect in humans. "In effect, we have enough information on chemical structures to reasonably predict their effects in 20% of human diseases," explains Duran. "This implies the data on chemical structures, which on many occasions and above all in the field of molecular biology is not taken into account, can be most useful for biomedicine, for example for the design of safer drugs," says the researcher. The study allows the information accumulated to be re-examined and reorganised and to produce 20% of new knowledge thanks to the exploitation of computerized data.

The design of safer drugs, prediction of disease co-morbidities and repositioning of drugs

Patrick Aloy explains that the study allows access to valuable information that can serve to avoid or foster the use of certain chemical fragments for drug design. For example, his model predicts that 40% of chemical fragments with therapeutic effects are not included in drugs currently on the market; in contrast, fragments that cause secondary effects are.

The researchers also indicate that their study may serve to detect associations between two diseases, the so-called co-morbidity - meaning one leads to the development of the other - or inverse comorbidity - namely that one protects against the development of the other. The study may also reveal potential new uses of current drugs.

This study, conducted by the Structural Bioinformatics and Network Biology lab headed by Patrick Aloy, has been supported by the Ministry of Economy and Competitiveness, the European Commission, and the European Research Council.

Adapted by MNT from original media release

References

[A chemo-centric view of human health and disease](#), Miquel Duran-Frigola, David Rossell & Patrick Aloy, *Nature Communications*, doi: 10.1038/ncomms6676, published 1 December 2014.

Source: [Institute for Research in Biomedicine-IRB](#)

Additional information

Click 'references' tab above for source.

Visit our [Pharma Industry / Biotech Industry](#) category page for the latest news on this subject.

Citations

Please use one of the following formats to cite this article in your essay, paper or report:

MLA

Institute for Research in Biomedicine-IR. "Researchers design a model to predict the effects of chemical

substances on health." *Medical News Today*. MediLexicon, Intl., 2 Dec. 2014. Web. 3 Dec. 2014. <<http://www.medicalnewstoday.com/releases/286272.php>>

APA

Institute for Research in Biomedicine-IR. (2014, December 2). "Researchers design a model to predict the effects of chemical substances on health." *Medical News Today*. Retrieved from <http://www.medicalnewstoday.com/releases/286272.php>.

Please note: If no author information is provided, the source is cited instead.

This page was printed from: **<http://www.medicalnewstoday.com/releases/286272.php>**

Visit **www.medicalnewstoday.com** for medical news and health news headlines posted throughout the day, every day.

© 2004-2014 All rights reserved. MNT is the registered trade mark of MediLexicon International Limited.