

BioBackHack

Revoluciona tu bienestar, hackea tu biología

INTRODUCCIÓN

PROCESO LARGO Y COSTOSO

El descubrimiento de fármacos es un proceso que consume demasiado tiempo con gastos que pueden llegar hasta los \$2.8 billones de dólares y con una duración de alrededor de 12 años para el desarrollo de un nuevo fármaco.

DEFUNCIONES DEBIDO A LA FALTA DE NUEVOS FÁRMACOS

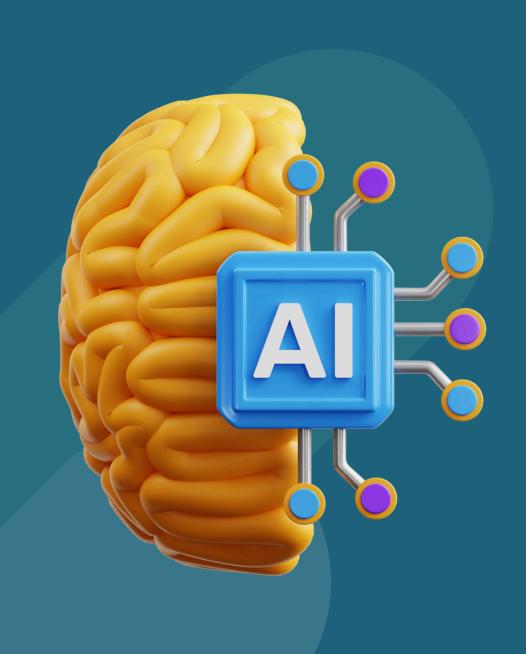
4.95 Millones de muertes fueron causadas por infecciones relacionadas a la resistencia a los fármacos y se pronostica que este número crezca en 10 millones para 2050.



NUEVAS TENDENCIAS

La IA emerge como una herramienta poderosa para resolver desafíos complejos en el descubrimiento, formulación y prueba de fármacos también optimiza los procesos de investigación y desarrollo, reduciendo la necesidad de pruebas en animales costosas y extensas.



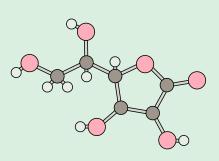


Los métodos convencionales de Al se limitan a evaluar compuestos existentes en bases de datos y son incapaces de generar estructuras químicas realmente nuevas. En contraste la lA generativa es capaz de diseñar nuevas moléculas en lugar de depender de compuestos ya existentes.

MÉTODO TRADICIONAL



Identificar un banco de datos confiable



Representación molecular

Establecer la más adecuada: SMILES o grafos moleculares



Generación Molecular de Novo

Estructuras moleculares completamente nuevas

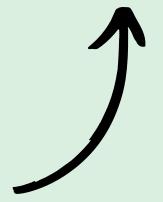


Pruebas clínicas in vitro/ in vivo















Limpieza de Datos

Selección de Modelo

Seleccionar un modelo optimo para la simulación



Generación, Validación y Optimizacion del Modelo

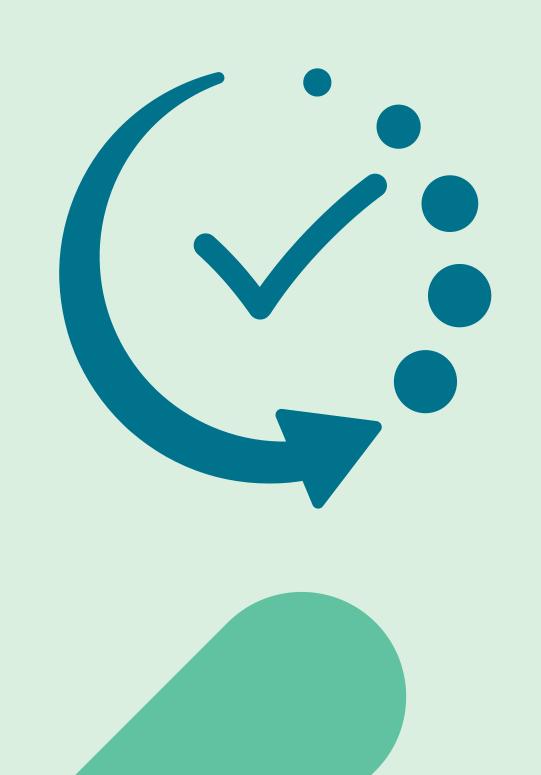
Optimizar el modelo para una mejor predicción

Filtrar el dataset con las propiedades de interés



OBJETIVOS





Los nuevos tratamientos serán más accesibles a la población en general ya que se logrará reducir los costos de desarrollo y por lo tanto, el precio al público.



CONTROL DE ENFERMEDADES

Será posible proveer un nuevo tratamiento efectivo en un periodo de tiempo más corto, logrando controlar propagación de un nuevo agente infeccioso que aún no ha sido estudiado



OPTIMIZACIÓN



Las farmacéuticas serán capaces de obtener más ganancias con menos dinero, personal y reactivos, haciendo que la inversión se centre en validar la eficiencia del nuevo tratamiento y en la compra de maquinaria.



PERSONALIZACIÓN



Los especialistas serán capaces de diseñar moléculas con características únicas y tendrán un mayor control sobre los resultados esperados.



ESTADO DEL ARTE





Esta empresa ofrece un conjunto de herramientas computacionales para el descubrimiento de fármacos, incluyendo módulos para el diseño de fármacos basado en la estructura, la optimización de ligandos y la predicción de propiedades. Utilizan algoritmos de IA y aprendizaje automático para mejorar la precisión y eficiencia de sus simulaciones.



Esta empresa se especializa en software de modelado y simulación para el descubrimiento y desarrollo de fármacos. Sus plataformas de software, como GastroPlus y ADMET Predictor, utilizan IA y aprendizaje automático para predecir las propiedades de absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad (ADMET) de los candidatos a fármacos.



Aunque no es directamente un simulador de descubrimiento de fármacos, el sistema de IA AlphaFold de DeepMind ha revolucionado la predicción de la estructura de proteínas. Las estructuras precisas de las proteínas son cruciales para comprender los objetivos de los fármacos y diseñar terapias efectivas.



Esta empresa utiliza IA y aprendizaje profundo para acelerar el descubrimiento y desarrollo de fármacos. Su plataforma, PandaOmics, integra varias fuentes de datos y modelos para identificar objetivos prometedores de fármacos y diseñar nuevas moléculas.

Modelo Canvas



Socios clave

- FDA
- Cofepris
- Centros de investigación



Actividades Clave

- Investigación
- Desarrollo de software
- Pruebas clínicas



Diferenciador

- El sistema no depende de fármacos previamente creados
- Respuesta rápida



Propuesta de Valor

- Soluciones biotecnológicas en el desarrollo de fármacos
- Optimización de recursos
- Control de enfermedades más ágil
- Personalización de moléculas



Relación Clientes

- Business to business.
- Atención al cliente personalizada



Segmento de Clientes

- Industria farmacéutica privada
- Instituciones académicas y centros de investigación



Canales

 Empresas de Software y Tecnología ya establecidas

•

Costos fijos

- Salarios
- Servicios públicos
- Alquiler

Costos de producción

- Maquinaria para realizar pruebas
- Reactivos

Costos variables

- Servicios en la nube
- Energía eléctrica

Costos operativos

- Mantenimiento (maquinaria y software)
- Publicidad y marketing
- Capacitación de personal



Fuentes de Ingresos

- Suscripciones para el uso del sitio web
- Regalías por cada molécula comercializada

FUENTES

Antimicrobial Resistance Collaborators. Global burden of bacterial antimicrobial resistance in 2019: a systematic analysis. Lancet. 2022 Feb 12;399(10325):629-655. doi: 10.1016/S0140-6736(21)02724-0.

<u>Chávez-Hernández AL, López-López E and Medina-Franco JL (2023), Yin-yang in drug discovery: rethinking de novo design and development of predictive models.</u>
<u>doi: 10.3389/fddsv.2023.1222655</u>

Swanson, K., Liu, G., Catacutan, D. B., Arnold, A., Zou, J., & Stokes, J. M. (2024). Generative AI for designing and validating easily synthesizable and structurally novel antibiotics. Nature Machine Intelligence, 6(3), 338–353. https://doi.org/10.1038/s42256-024-00809-7

Singh, N., Vayer, P., Tanwar, S., Poyet, J., Tsaioun, K., & Villoutreix, B. O. (2023). Drug discovery and development: introduction to the general public and patient groups. Frontiers in Drug Discovery, 3. https://doi.org/10.3389/fddsv.2023.1201419

Wouters, O. J., McKee, M., & Luyten, J. (2020). Estimated research and development investment needed to bring a new medicine to market, 2009-2018. JAMA, 323(9), 844. https://doi.org/10.1001/jama.2020.1166

Vora, L. K., Gholap, A. D., Jetha, K., Thakur, R. R. S., Solanki, H. K., & Chavda, V. P. (2023). Artificial intelligence in pharmaceutical technology and drug delivery design. Pharmaceutics, 15(7), 1916. https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15071916