

# Propuesta para un modelo de machine learning para el reposicionamiento de medicamentos

---

Carmen Irene Cabrera Rodríguez

Enrique Martínez González

Osmany Pérez Rodríguez

C-512

## Descripción

Desde hace varios años, la disminución de la productividad de la investigación y el desarrollo farmacéutico se ha identificado como un problema importante por su insostenibilidad en el tiempo, tanto por lo que se tarda en introducir un nuevo fármaco, como por los recursos económicos que se destinan para ello. El **reposicionamiento de medicamentos** (también llamado reutilización de medicamentos, reperfilado, redirección o redescubrimiento de drogas) es una estrategia para identificar nuevos propósitos terapéuticos para medicamentos ya aprobados más allá del alcance de su uso original. Esta técnica ofrece varias ventajas sobre el desarrollo de fármacos completamente nuevos, incluida la posibilidad de acelerar el proceso de descubrimiento y reducir las tasas de fallas en las fases de desarrollo clínico y prueba.

En los últimos años, se han desarrollado una serie de enfoques computacionales para un proceso de reutilización de fármacos más sistemático, sin que exista uno totalmente efectivo. Se pueden encontrar enfoques disponibles que cubren el aprendizaje automático (ML) y algoritmos de inteligencia artificial (IA), como los basados en la propagación de redes, la factorización de matrices y la finalización, así como modelos de aprendizaje profundo desarrollados más recientemente. De igual forma, se cuenta con numerosas fuentes de información que incluyen, por ejemplo, registros de salud electrónicos, análisis de asociación de todo el genoma o perfiles de respuesta de expresión génica, mapas de vías, estructuras compuestas, ensayos de unión a objetivos y otros datos de perfiles fenotípicos.

En este proyecto se explorará esta línea de trabajo desde el área del aprendizaje de máquina, en particular desde el aprendizaje profundo. Se plantea proponer un modelo inicial que permita predecir si una droga puede ser reposicionada con un determinado fin, a partir de bases de datos ya existentes con información sobre medicamentos ya reutilizados y el diseño de modelos de representación.