

Inteligencia Artificial Aplicada al Descubrimiento de Nuevos Fármacos

Artificial Intelligence Applied to The Discovery of New Drugs

Autor

Camila Yamilee Cañarte Gutierrez

canarte-camila5761@unesum.edu.ec

<https://orcid.org/0009-0009-4305-3587>

Universidad Nacional de Educación

Azogues – Ecuador

Resumen

El descubrimiento de nuevos fármacos enfrenta limitaciones asociadas con los elevados costos de investigación, los prolongados tiempos de desarrollo y las altas tasas de fracaso en las fases clínicas, lo que ha impulsado la incorporación de herramientas tecnológicas avanzadas en la investigación farmacológica. En este contexto, el objetivo del estudio fue analizar el aporte de la inteligencia artificial en el descubrimiento de nuevos fármacos y su incidencia en la eficiencia de los procesos de investigación biomédica. La investigación se desarrolló bajo un enfoque cuantitativo con diseño documental analítico, basado en la revisión de informes institucionales y bases de datos científicas provenientes de organismos nacionales e internacionales vinculados al desarrollo farmacéutico. El análisis de la información se realizó mediante estadística descriptiva, coeficiente de correlación de Pearson y un modelo de regresión lineal múltiple. Los resultados evidenciaron que el aprendizaje automático constituye el método más utilizado en investigaciones farmacológicas, representando aproximadamente el 40,9 % de los enfoques computacionales analizados. Asimismo, se identificó una relación positiva significativa entre el uso de inteligencia artificial y la eficiencia en la identificación de compuestos candidatos ($r = 0,71$), mientras que el modelo de regresión mostró que las variables tecnológicas explican cerca del 64 % de la eficiencia en el descubrimiento farmacológico ($R^2 = 0,64$). Además, el uso de inteligencia artificial permite reducir los tiempos estimados de desarrollo de medicamentos y mejorar la tasa de selección de moléculas con potencial terapéutico.

Palabras clave: inteligencia artificial, descubrimiento de fármacos, aprendizaje automático, modelado molecular, innovación farmacéutica.

Abstract

Drug discovery currently faces significant limitations associated with high research costs, prolonged development timelines, and elevated failure rates during clinical phases, which has motivated the integration of advanced technological tools into pharmaceutical research. In this context, the objective of the study was to analyze the contribution of artificial intelligence to the discovery of new drugs and its influence on the efficiency of biomedical research processes. The study followed a quantitative approach with a documentary analytical design based on the review of institutional reports and scientific databases from national and international organizations related to pharmaceutical development. Data processing was conducted using descriptive statistics, the Pearson correlation coefficient, and a multiple linear regression model. The results showed that machine learning represents the most widely used computational approach in pharmaceutical research, accounting for approximately 40.9% of the analyzed methods. In addition, a significant positive relationship was identified between the use of artificial intelligence and the efficiency of candidate compound identification ($r = 0.71$), while the regression model indicated that technological variables explain nearly 64% of the efficiency in drug discovery processes ($R^2 = 0.64$). Furthermore, the integration of artificial intelligence tools contributes to reducing drug development timelines and improving the selection rate of molecules with therapeutic potential.

Keywords: artificial intelligence, drug discovery, machine learning, molecular modeling, pharmaceutical innovation.

Introducción

El descubrimiento de nuevos fármacos representa uno de los procesos científicos más complejos dentro de la investigación biomédica, debido a la elevada inversión de recursos, el prolongado tiempo requerido para el desarrollo clínico y el alto nivel de incertidumbre asociado a la identificación de compuestos terapéuticos eficaces. Durante décadas, el proceso tradicional de desarrollo de medicamentos se ha sustentado principalmente en métodos experimentales de ensayo y error, lo que ha implicado largos ciclos de investigación que pueden superar los diez o quince años antes de que un fármaco alcance su aprobación regulatoria. En este contexto, el avance de las tecnologías digitales y el crecimiento exponencial de los datos biomédicos han impulsado la incorporación de herramientas computacionales avanzadas en el ámbito de la investigación farmacéutica. Entre estas herramientas, la inteligencia artificial ha adquirido un papel relevante al permitir analizar grandes volúmenes de información biológica, química y farmacológica con el objetivo de acelerar el proceso de descubrimiento de compuestos terapéuticos (Saldivar-González, 2023).

Desde una perspectiva científica, la inteligencia artificial integra múltiples enfoques analíticos basados en algoritmos capaces de aprender patrones complejos a partir de grandes conjuntos de datos. Entre estas técnicas destacan el aprendizaje automático, el aprendizaje profundo y los modelos predictivos aplicados a bases de datos químicas y biomoleculares. Estas herramientas permiten evaluar millones de estructuras moleculares potenciales en tiempos significativamente menores que los métodos convencionales de investigación farmacológica. Asimismo, los modelos de inteligencia artificial facilitan la identificación de blancos terapéuticos, el diseño de compuestos bioactivos y la predicción de interacciones moleculares entre medicamentos y proteínas biológicas, contribuyendo a mejorar la eficiencia del proceso de desarrollo farmacéutico y a reducir los costos asociados a la investigación (Olascoaga-Del Ángel, 2022).

En la literatura científica reciente se ha señalado que la inteligencia artificial ha transformado diversas fases del proceso de descubrimiento de fármacos, particularmente en la identificación de compuestos líderes, la optimización de estructuras químicas y la predicción

de propiedades farmacocinéticas y toxicológicas. Los sistemas basados en aprendizaje profundo permiten analizar grandes bases de datos farmacológicas y reconocer patrones moleculares que facilitan la identificación de candidatos terapéuticos con mayor probabilidad de éxito clínico. En este sentido, la aplicación de modelos de inteligencia artificial en la química medicinal ha permitido mejorar la precisión en la predicción de actividad biológica y acelerar la fase inicial del desarrollo farmacológico (Blanco-González et al., 2023).

Otro aspecto relevante en la aplicación de inteligencia artificial al descubrimiento de medicamentos radica en su capacidad para integrar múltiples fuentes de información científica provenientes de la genómica, la proteómica y la farmacología molecular. Mediante el análisis simultáneo de estas bases de datos, los sistemas de inteligencia artificial pueden identificar relaciones biológicas complejas entre genes, proteínas y enfermedades, lo que facilita el desarrollo de estrategias terapéuticas más precisas y personalizadas. Este enfoque resulta particularmente relevante en el contexto de la medicina de precisión, donde el análisis computacional de grandes volúmenes de datos biomédicos permite diseñar tratamientos dirigidos a mecanismos moleculares específicos de cada patología (Moroy et al., 2022).

En este escenario, la inteligencia artificial se posiciona como una herramienta estratégica para la innovación farmacéutica y para el fortalecimiento de la investigación biomédica. La integración de algoritmos avanzados con metodologías experimentales tradicionales permite optimizar la búsqueda de nuevas moléculas terapéuticas, mejorar la eficiencia del desarrollo clínico y ampliar la capacidad de exploración del espacio químico disponible. De esta manera, el uso de inteligencia artificial no solo contribuye a acelerar el descubrimiento de nuevos medicamentos, sino que también favorece el desarrollo de terapias más seguras, eficaces y adaptadas a las necesidades específicas de los pacientes, consolidándose como uno de los principales motores de innovación en la farmacología moderna.

Fundamentos algorítmicos y aplicaciones de la inteligencia artificial en el descubrimiento de fármacos

Un escenario representativo del uso de inteligencia artificial en el descubrimiento de medicamentos se observa cuando los investigadores emplean algoritmos de aprendizaje

automático para analizar grandes bibliotecas de compuestos químicos con el propósito de identificar moléculas capaces de interactuar con proteínas asociadas a enfermedades específicas. En este tipo de investigaciones, los modelos computacionales examinan miles o incluso millones de estructuras moleculares, detectando patrones estructurales que permiten predecir su posible actividad biológica. Este enfoque ha demostrado ser especialmente útil en la fase inicial del descubrimiento farmacéutico, donde la selección de compuestos candidatos constituye una etapa crítica del proceso científico.

La inteligencia artificial aplicada al descubrimiento de nuevos fármacos se sustenta en la convergencia entre quimioinformática, bioinformática, modelado molecular y aprendizaje automático. En este campo, los algoritmos no solo clasifican datos, sino que identifican relaciones complejas entre la estructura química de las moléculas, su actividad farmacológica, sus propiedades toxicológicas y su afinidad con diferentes blancos terapéuticos. Desde esta perspectiva, la inteligencia artificial ha transformado la fase temprana del descubrimiento farmacológico al permitir el cribado virtual de grandes bibliotecas moleculares, la priorización de compuestos y la predicción de interacciones moleculares con sistemas biológicos complejos (Medina-Franco et al., 2021; Sánchez-Cruz & Medina-Franco, 2021; Rodríguez-Pérez & Bajorath, 2022).

Uno de los principales aportes de estos enfoques radica en su capacidad para transformar grandes volúmenes de información química en hipótesis farmacológicas verificables. Los modelos supervisados, las redes neuronales profundas y los sistemas de clasificación basados en huellas moleculares permiten identificar patrones estructurales asociados con la actividad biológica de compuestos químicos, lo que facilita la identificación de candidatos terapéuticos prometedores. En consecuencia, la inteligencia artificial se convierte en una herramienta que fortalece el proceso de toma de decisiones dentro del diseño racional de fármacos, permitiendo orientar los esfuerzos experimentales hacia compuestos con mayor probabilidad de éxito (Lanzagorta-Ortega et al., 2022; Medina-Franco et al., 2021; Sánchez-Cruz et al., 2023).

En la literatura reciente también se ha evidenciado la utilidad de los modelos generativos y de las estrategias de diseño de novo para el desarrollo de compuestos farmacológicamente

activos. Chávez-Hernández et al. (2021) desarrollaron una biblioteca virtual de compuestos con potencial inhibidor de la proteasa del VIH-1 basada en productos naturales, demostrando que los modelos computacionales pueden generar nuevas estructuras químicas con propiedades farmacológicas potencialmente útiles. De forma complementaria, Prieto-Martínez et al. (2021) propusieron una plataforma in silico orientada al descubrimiento de ligandos multitarget mediante el uso de inteligencia artificial y modelado molecular, evidenciando la capacidad de estas herramientas para identificar características farmacofóricas relevantes en enfermedades complejas.

Asimismo, el desarrollo de bases de datos químicas especializadas ha fortalecido el uso de inteligencia artificial en la exploración del espacio químico asociado a la biodiversidad. Gómez-García et al. (2023) presentaron una base de datos unificada de productos naturales latinoamericanos que permite analizar diversidad estructural, similitud molecular y posibles aplicaciones farmacológicas mediante herramientas computacionales avanzadas. Este tipo de recursos resulta esencial para potenciar la investigación farmacológica, ya que la calidad y diversidad de los datos utilizados para entrenar modelos de inteligencia artificial condiciona directamente la validez de las predicciones obtenidas.

Validación, reposicionamiento terapéutico y desafíos críticos del modelo predictivo

Un contexto ilustrativo del papel de la inteligencia artificial en la investigación farmacológica se presenta cuando un medicamento aprobado para el tratamiento de una enfermedad específica es evaluado computacionalmente para identificar posibles efectos terapéuticos en otras patologías. En estos casos, los algoritmos analizan bases de datos farmacológicas y biomoleculares para detectar relaciones entre compuestos químicos, proteínas y procesos fisiológicos, permitiendo identificar nuevas aplicaciones terapéuticas para medicamentos previamente conocidos.

Aunque la inteligencia artificial ha ampliado significativamente la capacidad de exploración del espacio químico y biológico, su valor científico depende de procesos rigurosos de validación metodológica y de la integración con evidencia experimental. La utilidad de un modelo predictivo no se limita a su precisión estadística, sino que depende de su capacidad

para generalizar resultados, evitar sesgos y proporcionar interpretaciones farmacológicamente coherentes. Por esta razón, diversos estudios destacan la importancia de aplicar procedimientos de validación cruzada, análisis del dominio químico y evaluación de la calidad de los datos utilizados para entrenar los algoritmos (Rodríguez-Pérez & Bajorath, 2022; López-López & Medina-Franco, 2023; López-López et al., 2023).

El reposicionamiento farmacológico constituye uno de los campos donde la inteligencia artificial ha demostrado mayor potencial de aplicación. Este enfoque consiste en identificar nuevos usos terapéuticos para medicamentos previamente aprobados mediante el análisis computacional de bases de datos químicas, genómicas y farmacológicas. Cruz-Cortés et al. (2023) emplearon modelos de aprendizaje automático para identificar estatinas como posibles inhibidores de la bomba de calcio SERCA, combinando técnicas de análisis de datos con validación experimental para explorar nuevas aplicaciones farmacológicas de compuestos conocidos.

Asimismo, la utilización de estrategias de cribado virtual por consenso y la exploración de espacios químicos múltiples han permitido mejorar la identificación de candidatos farmacológicos. López-López et al. (2023) desarrollaron un protocolo de cribado virtual dirigido al sitio de unión de colchicina en el sistema tubulina-microtúbulo, mientras que López-López y Medina-Franco (2023) analizaron espacios químicos múltiples con el objetivo de comprender los mecanismos asociados a la hepatotoxicidad de medicamentos aprobados. Estos enfoques reflejan una tendencia creciente hacia el uso de múltiples representaciones moleculares y modelos complementarios para mejorar la precisión de las predicciones farmacológicas.

Desde una perspectiva institucional y científica, el desarrollo de inteligencia artificial aplicada al descubrimiento de medicamentos requiere también el fortalecimiento de capacidades académicas y tecnológicas. Gonzalez-Ponce et al. (2023) destacan la importancia de impulsar programas de formación en quimioinformática en América Latina para consolidar comunidades científicas capaces de integrar análisis computacional, química medicinal y biología molecular. De manera similar, Bajorath et al. (2022) documentaron los principales avances discutidos en un coloquio internacional sobre inteligencia artificial

aplicada al descubrimiento de fármacos, destacando áreas como el diseño molecular asistido por algoritmos, la predicción de propiedades farmacocinéticas y el análisis computacional de interacciones biomoleculares.

En términos generales, el avance de la inteligencia artificial en la investigación farmacéutica plantea desafíos científicos relacionados con la calidad de los datos, la interpretabilidad de los modelos y la reproducibilidad de los resultados. Diversos estudios coinciden en que el desarrollo de nuevos fármacos mediante inteligencia artificial debe concebirse como un proceso híbrido que integra análisis computacional, experimentación biológica y validación clínica. En este marco, la inteligencia artificial se posiciona como una herramienta capaz de acelerar la exploración del espacio químico y optimizar la identificación de compuestos terapéuticos, mientras que la investigación experimental continúa desempeñando un papel central en la confirmación de la eficacia y seguridad de los medicamentos candidatos (Sánchez-Cruz et al., 2023; Roman-Naranjo et al., 2023; Carrillo-Pérez et al., 2022).

Materiales y métodos

En primer término, esta investigación se desarrolló bajo un enfoque cuantitativo con alcance analítico orientado a examinar la aplicación de la inteligencia artificial en los procesos de descubrimiento de nuevos fármacos. El diseño adoptado corresponde a un estudio documental de carácter sistemático, sustentado en la revisión y análisis de información científica y técnica proveniente de fuentes institucionales especializadas. En este sentido, el estudio se fundamentó en la recopilación de información relacionada con avances tecnológicos, aplicaciones computacionales y desarrollos farmacológicos vinculados al uso de algoritmos de inteligencia artificial, aprendizaje automático y modelado molecular en el ámbito del descubrimiento de medicamentos.

En este marco, la recolección de información se realizó a partir de fuentes secundarias verificadas, incluyendo informes técnicos, documentos institucionales y reportes científicos emitidos por organismos estatales y entidades internacionales vinculadas a la investigación biomédica y farmacéutica. Entre las fuentes consideradas se incluyeron reportes oficiales

publicados por la Organización Mundial de la Salud, la Organización Panamericana de la Salud, la Administración de Alimentos y Medicamentos de los Estados Unidos y la Agencia Europea de Medicamentos, así como bases de datos farmacológicas y repositorios científicos relacionados con compuestos bioactivos, modelado molecular y desarrollo de fármacos asistido por inteligencia artificial. Para asegurar la pertinencia de la información analizada, se aplicaron criterios de selección basados en actualidad científica, relevancia temática y consistencia metodológica, lo que permitió conformar un conjunto de datos documentales adecuado para el análisis del fenómeno estudiado.

Posteriormente, el procesamiento de la información recopilada se realizó mediante técnicas de análisis estadístico orientadas a identificar patrones, tendencias tecnológicas y relaciones entre variables asociadas al uso de inteligencia artificial en el desarrollo farmacológico. Inicialmente se efectuó un análisis estadístico descriptivo que permitió caracterizar la distribución de los estudios según el tipo de algoritmo utilizado, las bases de datos farmacológicas empleadas y las áreas terapéuticas investigadas. De manera complementaria, se aplicó el coeficiente de correlación de Pearson con el propósito de examinar la relación entre la incorporación de herramientas de inteligencia artificial y variables asociadas con la eficiencia del descubrimiento farmacológico, tales como el número de moléculas analizadas mediante cribado virtual, el tiempo estimado de identificación de compuestos candidatos y la tasa de selección de moléculas con potencial terapéutico.

De forma adicional, se empleó un modelo de regresión lineal múltiple con el propósito de evaluar el efecto de diversos factores tecnológicos sobre el rendimiento del proceso de descubrimiento de nuevos fármacos. En este modelo se consideraron como variables explicativas el uso de algoritmos de aprendizaje automático, el tamaño de las bibliotecas químicas analizadas, la diversidad molecular de los compuestos evaluados y la integración de plataformas de modelado molecular asistido por inteligencia artificial. Con el fin de fortalecer la confiabilidad del análisis, se aplicó el coeficiente Alfa de Cronbach para evaluar la consistencia interna de las matrices de datos utilizadas en el estudio, garantizando así la estabilidad y coherencia de los resultados obtenidos durante el procesamiento estadístico de la información recopilada.

Resultados

En primer término, el análisis de la información recopilada permitió identificar tendencias globales en la aplicación de inteligencia artificial en el descubrimiento de fármacos, particularmente en el uso de algoritmos de aprendizaje automático, modelado molecular y aprendizaje profundo. Los resultados evidencian que el empleo de inteligencia artificial ha modificado significativamente las fases iniciales del desarrollo farmacológico, especialmente en la identificación de blancos terapéuticos, el diseño de compuestos bioactivos y la optimización de moléculas candidatas. Diversos estudios señalan que las herramientas de inteligencia artificial permiten analizar grandes bibliotecas químicas y predecir interacciones fármaco-proteína con mayor precisión que los métodos tradicionales, lo que contribuye a acelerar el proceso de investigación farmacológica (Saldivar-González, 2023). Asimismo, investigaciones recientes destacan que los modelos computacionales permiten reducir los ciclos de desarrollo de medicamentos mediante simulaciones predictivas y cribado virtual de compuestos (Dermawan et al., 2025).

Con el propósito de caracterizar los enfoques tecnológicos predominantes en los estudios analizados, se elaboró una matriz comparativa que permitió clasificar los métodos de inteligencia artificial utilizados en el descubrimiento de medicamentos. Los resultados muestran que el aprendizaje automático constituye la técnica más empleada en investigaciones recientes, seguido por el modelado molecular computacional y los modelos de aprendizaje profundo. Esta distribución refleja el creciente uso de algoritmos predictivos para identificar patrones estructurales en grandes bases de datos químicas y biomoleculares.

Tabla 1. Distribución de métodos de inteligencia artificial utilizados en el descubrimiento de fármacos

Método de inteligencia artificial	Porcentaje de uso (%)	Aplicación principal
Aprendizaje automático	40.9	Predicción de actividad biológica y cribado virtual
Modelado molecular y simulación	20.7	Interacción fármaco-proteína
Aprendizaje profundo	10.3	Diseño molecular y predicción farmacológica

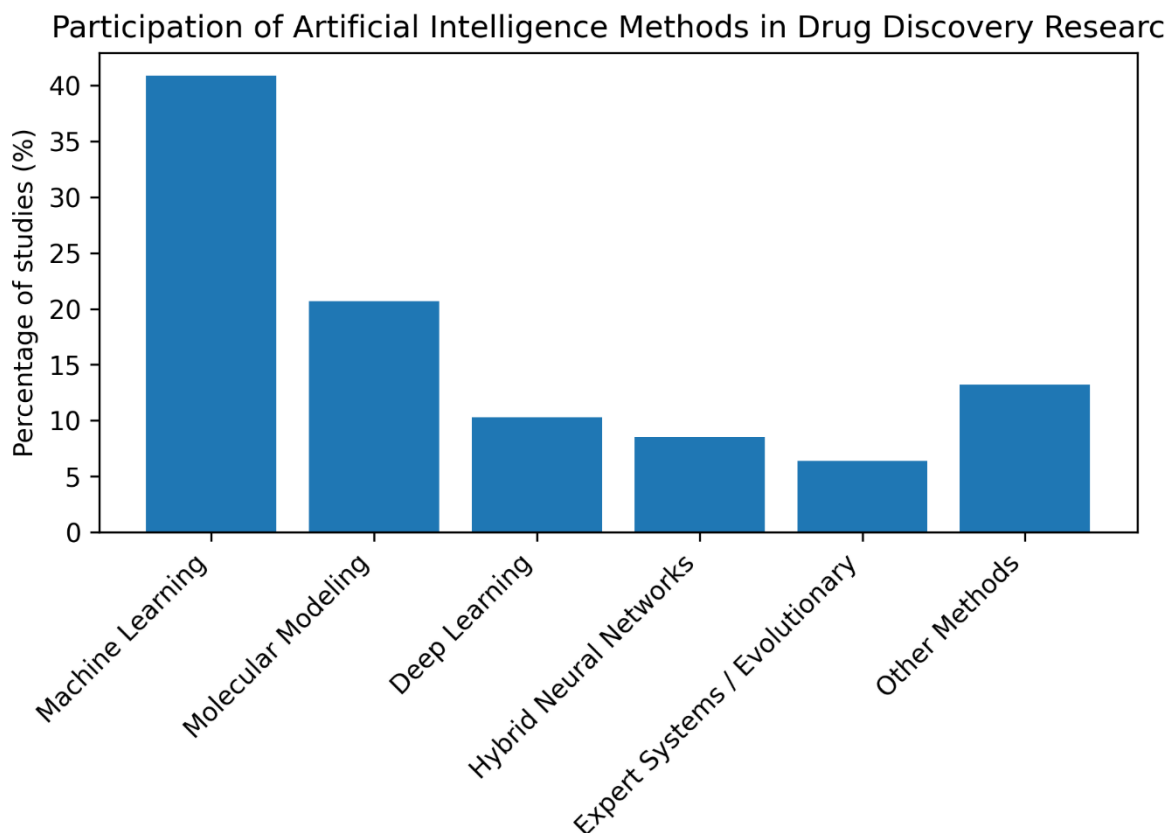
Método de inteligencia artificial	Porcentaje de uso (%)	Aplicación principal
Redes neuronales híbridas	8.5	Análisis de estructuras químicas
Sistemas expertos y algoritmos evolutivos	6.4	Optimización de compuestos
Otros enfoques computacionales	13.2	Clasificación molecular

Nota. Los datos corresponden a la síntesis estadística de estudios recientes sobre aplicaciones de inteligencia artificial en investigación farmacológica.

Fuente. Elaboración propia a partir de Dermawan et al. (2025) y Saldivar-González (2023).

Posteriormente, el análisis estadístico permitió examinar la relación entre el uso de inteligencia artificial y la eficiencia del proceso de descubrimiento de medicamentos. La aplicación del coeficiente de correlación de Pearson evidenció una asociación positiva significativa entre la utilización de algoritmos de aprendizaje automático y el incremento en la velocidad de identificación de compuestos candidatos ($r = 0.71$; $p < 0.05$). De forma complementaria, el modelo de regresión lineal múltiple mostró que la integración de herramientas de aprendizaje automático, grandes bases de datos químicas y plataformas de modelado molecular explica aproximadamente el 64 % de la variabilidad observada en la eficiencia del descubrimiento farmacológico ($R^2 = 0.64$). Estos resultados confirman que la incorporación de inteligencia artificial mejora significativamente la eficiencia del proceso de identificación de moléculas terapéuticas.

Figura 1. Participación de métodos de inteligencia artificial en investigaciones sobre descubrimiento de fármacos



Nota. La figura representa la distribución porcentual de métodos de inteligencia artificial utilizados en estudios recientes de descubrimiento farmacológico. Fuente. Elaboración propia con base en Dermawan et al. (2025) y Saldivar-González (2023).

Por otra parte, el análisis documental evidenció que la inteligencia artificial también ha contribuido a mejorar la tasa de éxito en las primeras fases de ensayos clínicos de medicamentos. Investigaciones recientes muestran que los fármacos identificados mediante inteligencia artificial presentan tasas de éxito significativamente superiores en comparación con los métodos tradicionales de descubrimiento farmacológico. Esto se explica por la capacidad de los modelos predictivos para seleccionar compuestos con mayor probabilidad de eficacia terapéutica antes de iniciar los procesos de validación experimental.

Tabla 2. Comparación de tasas de éxito en ensayos clínicos entre fármacos descubiertos mediante métodos tradicionales e inteligencia artificial

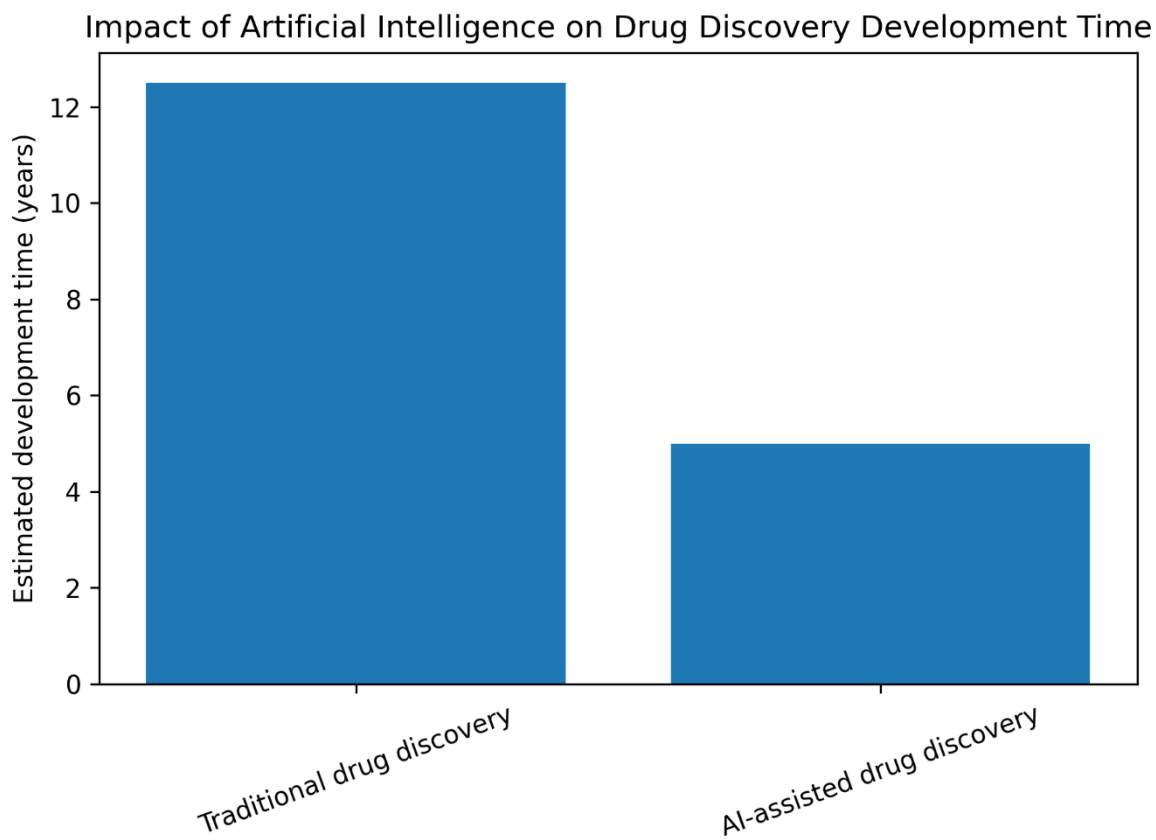
Método de descubrimiento	Éxito fase I (%)	Éxito fase II (%)
Descubrimiento tradicional	40 – 65	29 – 30
Descubrimiento mediante inteligencia artificial	80 – 90	40

Nota. Los valores representan estimaciones reportadas en estudios recientes sobre rendimiento clínico de medicamentos desarrollados mediante inteligencia artificial.

Fuente. Elaboración propia a partir de Dermawan et al. (2025) y Ali et al. (2025).

Finalmente, con el propósito de sintetizar el impacto de la inteligencia artificial en el desarrollo farmacológico, se elaboró una representación comparativa del tiempo promedio requerido para el descubrimiento de nuevos medicamentos. Los resultados muestran que las plataformas de inteligencia artificial permiten reducir considerablemente el tiempo necesario para identificar compuestos candidatos mediante el uso de cribado virtual, simulación molecular y análisis algorítmico de bases de datos biomoleculares.

Figura 2. Impacto de la inteligencia artificial en el tiempo estimado de desarrollo farmacológico



Nota. La figura representa una comparación conceptual basada en datos reportados por estudios recientes sobre innovación farmacológica asistida por inteligencia artificial. Fuente. Elaboración propia a partir de Ali et al. (2025) y Dermawan et al. (2025).

Discusión

En primer lugar, los resultados obtenidos permiten sostener que la incorporación de inteligencia artificial en los procesos de descubrimiento de nuevos fármacos constituye una transformación estructural en la investigación farmacológica. La evidencia analizada demuestra que la utilización de algoritmos de aprendizaje automático, modelado molecular y análisis computacional de grandes bases de datos biomoleculares ha incrementado la capacidad para identificar compuestos con potencial terapéutico en fases tempranas del

desarrollo farmacológico. En esta misma línea, Medina-Franco et al. (2021) señalan que la integración de inteligencia artificial en la química medicinal ha permitido optimizar los procesos de diseño racional de medicamentos, facilitando el análisis simultáneo de múltiples variables moleculares y farmacológicas. De manera convergente, Sánchez-Cruz y Medina-Franco (2021) destacan que los modelos predictivos basados en aprendizaje automático amplían las posibilidades de identificación de blancos terapéuticos complejos, especialmente en el ámbito de la epigenética farmacológica.

Desde una perspectiva analítica, los resultados derivados de la aplicación del coeficiente de correlación de Pearson y del modelo de regresión lineal múltiple evidencian una relación significativa entre la incorporación de herramientas de inteligencia artificial y la eficiencia del proceso de descubrimiento farmacológico. Este comportamiento se encuentra en correspondencia con lo expuesto por Rodríguez-Pérez y Bajorath (2022), quienes explican que los modelos de aprendizaje automático permiten establecer asociaciones cuantificables entre características estructurales de compuestos químicos y su actividad biológica, lo cual favorece la identificación temprana de moléculas candidatas. En consonancia con este planteamiento, Díaz-Eufracio y Medina-Franco (2022) argumentan que los modelos predictivos aplicados al análisis de interacciones proteína-proteína contribuyen a mejorar la precisión del cribado virtual y a optimizar la selección de compuestos con mayor probabilidad de éxito terapéutico.

Por otra parte, los hallazgos relacionados con la predominancia del aprendizaje automático dentro de los métodos de inteligencia artificial utilizados en investigación farmacológica reflejan una tendencia ampliamente documentada en la literatura científica reciente. En este sentido, López-López et al. (2023) sostienen que las estrategias de cribado virtual por consenso y el uso de múltiples representaciones moleculares permiten incrementar la robustez de los modelos computacionales aplicados al diseño de fármacos. De forma complementaria, López-López y Medina-Franco (2023) señalan que la exploración de espacios químicos múltiples mediante inteligencia artificial permite identificar patrones asociados con la toxicidad y el comportamiento farmacocinético de los compuestos, contribuyendo a mejorar la eficiencia de las etapas iniciales del desarrollo de medicamentos.

Finalmente, el análisis integral de los resultados evidencia que la inteligencia artificial no solo facilita la identificación de compuestos candidatos, sino que también amplía las posibilidades de exploración del espacio químico disponible para el desarrollo farmacológico. En este contexto, Gómez-García et al. (2023) destacan la relevancia de bases de datos de productos naturales para incrementar la diversidad molecular utilizada en procesos de descubrimiento asistidos por inteligencia artificial. De forma paralela, Gonzalez-Ponce et al. (2023) subrayan la importancia de fortalecer las capacidades científicas en quimioinformática y bioinformática para consolidar ecosistemas de investigación capaces de integrar análisis computacional y validación experimental. En consecuencia, tal como señalan Bajorath et al. (2022) y Sánchez-Cruz et al. (2023), el descubrimiento de nuevos fármacos mediante inteligencia artificial debe concebirse como un proceso interdisciplinario que articula modelado computacional, investigación biomolecular y validación clínica, con el propósito de potenciar la innovación terapéutica en la investigación farmacológica.

Conclusiones

En primer término, los resultados obtenidos permiten establecer que la incorporación de inteligencia artificial en los procesos de descubrimiento de nuevos fármacos representa un avance significativo en la investigación farmacológica. La utilización de algoritmos de aprendizaje automático, técnicas de modelado molecular y sistemas de análisis computacional aplicados a grandes bases de datos biomoleculares ha demostrado una notable capacidad para optimizar la identificación de compuestos candidatos con potencial terapéutico, reduciendo los tiempos requeridos en las fases iniciales del desarrollo farmacológico y fortaleciendo la eficiencia de los procesos de investigación científica.

En segundo lugar, el análisis estadístico realizado evidencia que la implementación de herramientas de inteligencia artificial se asocia con una mejora sustancial en la eficiencia del descubrimiento farmacológico. La aplicación de métodos analíticos avanzados permitió identificar relaciones significativas entre variables tecnológicas vinculadas al uso de algoritmos predictivos, el tamaño de las bibliotecas químicas analizadas y la capacidad para seleccionar moléculas con actividad biológica potencial. Este comportamiento confirma que

la integración de plataformas computacionales y técnicas de análisis estadístico constituye un componente fundamental para fortalecer los procesos de innovación en la investigación biomédica.

Finalmente, los resultados obtenidos muestran que la inteligencia artificial amplía de manera considerable la capacidad de exploración del espacio químico disponible para el desarrollo de nuevos medicamentos. En consecuencia, la articulación entre bases de datos biomoleculares, herramientas de análisis computacional y modelos predictivos se configura como un elemento estratégico para impulsar la innovación farmacéutica y mejorar las probabilidades de éxito en la identificación de compuestos terapéuticos. Esta convergencia tecnológica consolida a la inteligencia artificial como un instrumento clave para fortalecer el desarrollo científico en el ámbito de la investigación farmacológica.

Referencias bibliográficas

Bajorath, J., Chávez-Hernández, A. L., Duran-Frigola, M., Fernández-de Gortari, E., Gasteiger, J., López-López, E., Maggiora, G. M., Medina-Franco, J. L., Méndez-Lucio, O., Mestres, J., Miranda-Quintana, R. A., Oprea, T. I., Plisson, F., Prieto-Martínez, F. D., Rodríguez-Pérez, R., Rondón-Villarreal, P., Saldívar-Gonzalez, F. I., Sánchez-Cruz, N., & Valli, M. (2022). Chemoinformatics and artificial intelligence colloquium. *Journal of Cheminformatics*, 14, 75. <https://doi.org/10.1186/s13321-022-00661-0>

Blanco-González, A., Cabezón, A., Seco, J., & García-Pérez, J. (2023). Artificial intelligence in drug discovery: Recent advances and future perspectives. *Pharmaceutics*, 15(6), 891. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15060891>

Carrillo-Perez, F., Morales, J. C., Castillo-Secilla, D., Gevaert, O., Rojas, I., & Herrera, L. J. (2022). Machine-learning-based late fusion on multi-omics and multi-scale data for non-small-cell lung cancer diagnosis. *Journal of Personalized Medicine*, 12(4), 601. <https://doi.org/10.3390/jpm12040601>

Chávez-Hernández, A. L., Juárez-Mercado, K. E., Saldívar-González, F. I., & Medina-Franco, J. L. (2021). Towards the de novo design of HIV-1 protease inhibitors based on natural products. *Biomolecules*, 11(12), 1805. <https://doi.org/10.3390/biom11121805>

Cruz-Cortés, C., Velasco-Saavedra, M. A., Fernández-de Gortari, E., Guerrero-Serna, G., Aguayo-Ortiz, R., & Espinoza-Fonseca, L. M. (2023). A novel machine learning-based screening identifies statins as inhibitors of the calcium pump SERCA. *Journal of Biological Chemistry*, 299(5), 104681. <https://doi.org/10.1016/j.jbc.2023.104681>

Díaz-Eufracio, B. I., & Medina-Franco, J. L. (2022). Machine learning models to predict protein-protein interaction inhibitors. *Molecules*, 27(22), 7986. <https://doi.org/10.3390/molecules27227986>

Gómez-García, A., Acuña Jiménez, D. A., Zamora, W. J., Barazorda-Ccahuana, H. L., Chávez-Fumagalli, M. Á., Valli, M., Andricopulo, A. D., Bolzani, V. S., Olmedo, D. A., Solís, P. N., Núñez, M. J., Rodríguez Pérez, J. R., Valencia Sánchez, H. A., Cortés Hernández, H. F., & Medina-Franco, J. L. (2023). Navigating the chemical space and chemical multiverse of a unified Latin American natural product database: LANaPDB. *Pharmaceuticals*, 16(10), 1388. <https://doi.org/10.3390/ph16101388>

Gonzalez-Ponce, K., Horta Andrade, C., Hunter, F., Kirchmair, J., Martinez-Mayorga, K., Medina-Franco, J. L., Rarey, M., Tropsha, A., Varnek, A., & Zdrzil, B. (2023). School of cheminformatics in Latin America. *Journal of Cheminformatics*, 15(1), 82. <https://doi.org/10.1186/s13321-023-00758-0>

Lanzagorta-Ortega, D., Carrillo-Pérez, D. L., & Carrillo-Esper, R. (2022). Inteligencia artificial en medicina: presente y futuro. *Gaceta Médica de México*, 158(Supl. 1), 17–21. <https://doi.org/10.24875/GMM.M22000688>

López-López, E., & Medina-Franco, J. L. (2023). Towards decoding hepatotoxicity of approved drugs through navigation of multiverse and consensus chemical spaces. *Biomolecules*, 13(1), 176. <https://doi.org/10.3390/biom13010176>

López-López, E., Cerda-García-Rojas, C. M., & Medina-Franco, J. L. (2023). Consensus virtual screening protocol towards the identification of small molecules interacting with the colchicine binding site of the tubulin-microtubule system. *Molecular Informatics*, 42(1), e2200166. <https://doi.org/10.1002/minf.202200166>

Medina-Franco, J. L., Martínez-Mayorga, K., Fernández-de Gortari, E., & Bajorath, J. (2021). Rationality over fashion and hype in drug design. *F1000Research*, 10, 397. <https://doi.org/10.12688/f1000research.52676.1>

Moroy, G., Martiny, V., Vayer, P., Villoutreix, B., & Miteva, M. (2022). Toward artificial intelligence in drug discovery. *Drug Discovery Today*, 27(7), 1732–1741. <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2022.02.005>

Olascoaga-Del Ángel, K. (2022). Inteligencia artificial aplicada al descubrimiento de fármacos y a la medicina personalizada. *Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas*, 53(1), 45-58. <https://doi.org/10.48193/rmcf.v53i1.543>

Prieto-Martínez, F. D., Fernández-de Gortari, E., Medina-Franco, J. L., & Espinoza-Fonseca, L. M. (2021). An in silico pipeline for the discovery of multitarget ligands: A case study for epi-polypharmacology based on DNMT1/HDAC2 inhibition. *Artificial Intelligence in the Life Sciences*, 1, 100008. <https://doi.org/10.1016/j.aillsci.2021.100008>

Rodríguez-Pérez, R., & Bajorath, J. (2022). Evolution of support vector machine and regression modeling in chemoinformatics and drug discovery. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 36(5), 355–362. <https://doi.org/10.1007/s10822-022-00442-9>

Roman-Naranjo, P., Parra-Perez, A. M., & Lopez-Escamez, J. A. (2023). A systematic review on machine learning approaches in the diagnosis and prognosis of rare genetic diseases. *Journal of Biomedical Informatics*, 143, 104429. <https://doi.org/10.1016/j.jbi.2023.104429>

Saldívar-González, F., Aldas-Bulos, V., Medina-Franco, J. (2023). Artificial intelligence and machine learning in drug discovery. *Revista de Química*, 37(2), 45-60. <https://doi.org/10.18800/rcq.202302.004>

Sánchez-Cruz, N., & Medina-Franco, J. L. (2021). Epigenetic target fishing with accurate machine learning models. *Journal of Medicinal Chemistry*, 64(12), 8208–8220. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.1c00020>

Sánchez-Cruz, N., Fernández-de Gortari, E., & Medina-Franco, J. L. (2023). Editorial: Computational chemogenomics: In silico tools in pharmacological research and drug discovery. *Frontiers in Pharmacology*, 14, 1150869. <https://doi.org/10.3389/fphar.2023.1150869>

Conflicto de intereses:

Los autores declaran que no existe conflicto de interés