

# Revolucionando la Farmacéutica: Aplicaciones y Potencial de la Inteligencia Artificial Generativa en el Descubrimiento de Medicamentos

Ángel Canal-Alonso<sup>1</sup>, Noelia Egido<sup>1</sup>, Pedro Jiménez<sup>1</sup>, Javier Prieto<sup>1</sup>, Juan Manuel Corchado<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Bioinformática y Biología Computacional, AIR Institute, Carbajosa de la Sagrada, España

E-mail: acanal@air-institute.com

## Abstract

La inteligencia artificial (IA) ha emergido como una herramienta transformadora en la industria farmacéutica, revolucionando el proceso tradicional de descubrimiento y desarrollo de medicamentos. Mediante técnicas generativas avanzadas, como las Redes Generativas Adversariales (GANs) y los Autocodificadores Variacionales (VAEs), se ha potenciado la exploración y diseño de moléculas terapéuticas novedosas y viables. Adicionalmente, la IA facilita la optimización de estas moléculas garantizando propiedades deseables y acelera la identificación de objetivos terapéuticos a través del análisis profundo de conjuntos de datos biomédicos y genómicos. Uno de los avances más significativos ha sido el repurposing de medicamentos, donde la IA desbloquea el potencial oculto de fármacos conocidos para nuevas indicaciones terapéuticas. Este artículo revisa el impacto y las aplicaciones de la IA generativa en la industria farmacéutica, subrayando cómo esta tecnología promete acelerar la entrega de soluciones terapéuticas más efectivas y seguras.

Keywords: Inteligencia Artificial Generativa, Diseño de Fármacos, Modelos computacionales

## 1. Introducción

La inteligencia artificial (IA) generativa es una subespecialidad destacada dentro del amplio campo de la inteligencia artificial. Esta se enfoca primordialmente en el diseño y desarrollo de modelos computacionales capaces de producir datos que emulan aquellos presentes en un conjunto de entrenamiento específico. En otras palabras, en lugar de simplemente analizar y procesar datos, la IA generativa se esfuerza por "crear" o "generar" datos que reflejen fielmente la esencia de la información con la que ha sido entrenada.

El corazón de estos modelos radica en técnicas avanzadas de aprendizaje automático. Un ejemplo prominente de esto son las redes neuronales generativas, que, a través de estructuras matemáticas y algoritmos sofisticados, pueden fabricar nuevos ejemplos de datos que sigan la misma

distribución que los datos originales. Estos sistemas, al aprender patrones y estructuras subyacentes en grandes cantidades de datos, pueden producir resultados que, en muchos casos, son prácticamente indistinguibles de los datos auténticos.

En sectores como la industria farmacéutica, el potencial de la IA generativa ha sido reconocido y se está aprovechando de maneras revolucionarias. Con el desafío constante de descubrir y desarrollar medicamentos más efectivos y seguros en tiempos más cortos, la IA generativa se presenta como una herramienta inestimable. Puede simular la interacción molecular, predecir la eficacia de nuevas sustancias y acelerar drásticamente la fase de investigación en la creación de nuevos fármacos. Además, más allá del desarrollo directo de medicamentos, la IA generativa contribuye a optimizar procesos, personalizar tratamientos y mejorar la eficiencia en

diversos puntos de la cadena de valor farmacéutica. Por ejemplo, en la producción y distribución de medicamentos, puede ayudar a anticipar demandas o prever escenarios de producción ideales, optimizando recursos y tiempos.

Las redes neuronales generativas, a menudo referidas como Generative Adversarial Networks (GANs) por sus siglas en inglés, representan uno de los avances más emocionantes en el campo del aprendizaje automático en la última década. Estas redes, como sugiere su nombre, se centran en la generación de datos, y su diseño único les permite producir información que es sorprendentemente similar a las distribuciones de datos reales.

Estas GANs operan a través de una estructura binaria: el generador y el discriminador. La interacción entre estos dos componentes es esencialmente un juego de gato y ratón, y es precisamente esta interacción la que permite a las GANs alcanzar resultados tan impresionantes.

El generador, como su nombre indica, se encarga de generar datos. Comienza tomando una entrada inicial que suele ser aleatoria, muchas veces basada en una simple distribución de ruido. A partir de esta entrada, el generador utiliza su arquitectura neuronal para transformar ese ruido en datos que intentan emular o imitar los ejemplos reales. Inicialmente, estos datos generados pueden no parecerse mucho a la realidad, pero con el tiempo y el entrenamiento adecuado, la precisión mejora significativamente.

Por otro lado, el discriminador funciona como un juez. Su tarea es evaluar los datos presentados y decidir si provienen del conjunto de entrenamiento real o si han sido generados por el generador. Al inicio, cuando el generador todavía está en las primeras etapas de su entrenamiento, esta tarea es relativamente sencilla para el discriminador. Sin embargo, a medida que el generador se vuelve más hábil, la tarea se complica.

El verdadero poder de las GANs surge de la retroalimentación entre estos dos componentes. Cuando el discriminador identifica correctamente un dato generado como falso, envía retroalimentación al generador, indicándole dónde y cómo se ha quedado corto. A su vez, el generador utiliza esta información para ajustar y mejorar. Esta iteración continúa en un ciclo, en el que el generador intenta constantemente superar al discriminador, y el discriminador se esfuerza por no ser engañado.

Con el tiempo, esta competencia lleva al generador a producir datos de tal calidad que el discriminador tiene dificultades para distinguir entre lo real y lo generado. Este proceso iterativo y competitivo, aunque simple en teoría, ha

llevado a avances asombrosos en campos tan variados como la generación de imágenes, la creación de música, la simulación de datos y mucho más. Las GANs, con su estructura única y poderosa, han revolucionado la capacidad de las máquinas para crear y entender datos complejos.

La inteligencia artificial (IA) generativa ha traído consigo una revolución en la manera en que abordamos y utilizamos grandes conjuntos de datos, especialmente cuando se trata de aprendizaje no supervisado. A diferencia del aprendizaje supervisado, donde los modelos son entrenados utilizando datos con etiquetas claras, el aprendizaje no supervisado trabaja con datos que no tienen tales etiquetas. En lugar de ser dirigido hacia una respuesta específica, el modelo se entrena para descubrir por sí mismo las estructuras y patrones subyacentes en los datos.

Esta forma autodirigida de aprendizaje es especialmente relevante y valiosa en campos donde se tiene acceso a masivas cantidades de datos no etiquetados. Y la industria farmacéutica es un claro ejemplo de esto. Los científicos e investigadores en este campo frecuentemente trabajan con vastos conjuntos de datos relacionados con moléculas, estructuras químicas, secuencias genéticas, perfiles de actividad biológica, y más. Muchas veces, estos datos no vienen con etiquetas claras o definiciones específicas, lo que hace que el procesamiento tradicional o manual sea una tarea hercúlea, si no imposible.

Aquí es donde la IA generativa utilizando el aprendizaje no supervisado entra en juego. Estos sistemas, al no depender de etiquetas predefinidas, tienen la capacidad de sumergirse en estos océanos de datos y, a través de algoritmos avanzados, detectar patrones, relaciones y conexiones que podrían pasar desapercibidos para los humanos. Al hacerlo, estas IAs pueden identificar, por ejemplo, cómo ciertas estructuras moleculares se relacionan con actividades biológicas específicas o cómo diferentes combinaciones de moléculas podrían resultar en compuestos terapéuticos efectivos.

El descubrimiento de patrones ocultos y la identificación de relaciones potencialmente significativas a través del aprendizaje no supervisado tiene implicaciones profundas para la industria farmacéutica. Puede acelerar el proceso de descubrimiento de fármacos al reducir el espacio de búsqueda, alinear compuestos candidatos con enfermedades específicas más rápidamente y proporcionar una comprensión más profunda de las interacciones moleculares. Además, al hacer más eficiente el proceso de investigación, también se pueden reducir los costos asociados y acelerar la llegada de soluciones terapéuticas innovadoras al mercado.

## 2. Arquitecturas comunes

Existen varias técnicas generativas comunes utilizadas en la industria farmacéutica, entre las que destacan:

### *Redes Generativas Adversariales:*

Las Redes Generativas Adversariales, conocidas por sus siglas en inglés como GANs, representan uno de los avances más notables en el ámbito de la inteligencia artificial en los últimos años. Fueron presentadas al mundo por Ian Goodfellow y su equipo en 2014, y desde entonces, han revolucionado campos tan diversos como la creación de imágenes, el diseño de sonido, la simulación de datos y mucho más.

Lo verdaderamente innovador de las GANs es la forma en que están estructuradas y cómo operan. Como se indicó, estas redes se componen de dos modelos distintos pero interconectados: el generador y el discriminador. Juntos, participan en una especie de "juego" competitivo, donde cada modelo busca superar al otro en un constante tira y afloja.

El generador tiene la tarea de crear o generar datos. Inicialmente, puede comenzar con una simple entrada aleatoria, a menudo derivada de una distribución de ruido. A través de su estructura de red neuronal, este modelo se esfuerza por transformar esa entrada en una muestra que se asemeje a datos reales. Sin embargo, especialmente en las primeras etapas, lo que produce no es perfecto y puede ser fácilmente discernible de los datos reales.

Aquí es donde entra en juego el discriminador. Actuando como un crítico o juez, su función es evaluar las muestras y determinar si son reales (provenientes del conjunto de datos original) o si son falsas (generadas por el generador). Al comienzo del entrenamiento, cuando el generador todavía está aprendiendo, es más fácil para el discriminador hacer esta distinción. Pero a medida que el generador mejora, el trabajo del discriminador se vuelve más desafiante.

Lo que hace que las GANs sean tan eficientes es la dinámica de retroalimentación entre estos dos modelos. Cada vez que el discriminador identifica correctamente una muestra generada, proporciona información al generador sobre cómo mejorar. Este ciclo de generación, discriminación y retroalimentación continua hasta que el generador alcanza un nivel en el que puede producir muestras tan convincentes que el discriminador tiene dificultades para distinguirlas de los datos reales.

Desde su introducción en 2014, las GANs han experimentado una serie de mejoras y variaciones, dando lugar a una amplia gama de aplicaciones y modelos derivados. Se han utilizado en la creación de arte, la generación de

música, la creación de modelos 3D, la superresolución de imágenes, y muchos otros campos. La capacidad de las GANs para generar datos realistas a partir de entradas aleatorias ha demostrado ser una herramienta poderosa y versátil en el mundo del aprendizaje automático y la inteligencia artificial.

### *Autocodificadores Variacionales:*

Los Autocodificadores Variacionales, o VAEs por sus siglas en inglés (Variational Autoencoders), representan una fascinante evolución en el campo de los modelos generativos, y, aunque comparten similitudes con las GANs en cuanto a su capacidad para generar datos, su enfoque subyacente y su mecánica operativa son distintos.

Empecemos por desentrañar un poco lo que significa un "autocodificador". En el aprendizaje automático, un autocodificador es una red neuronal utilizada para aprender representaciones codificadas (o comprimidas) de datos de entrada, de manera que estos datos puedan ser reconstruidos a partir de dichas representaciones con la mínima pérdida de información posible. Básicamente, toma datos, los comprime en una representación latente y luego intenta descomprimir o "decodificar" esa representación para obtener una versión reconstruida de los datos originales.

Ahora, ¿qué hace que un autocodificador sea "variacional"? La variación se introduce en cómo se modela la representación latente. En lugar de aprender una representación codificada fija para cada dato de entrada, un VAE aprende los parámetros de una distribución de probabilidades para la representación latente. Esto introduce una cierta aleatoriedad en el proceso, lo que significa que cada vez que codificamos y luego decodificamos una entrada, el resultado puede variar ligeramente.

La magia detrás de los VAEs radica en su capacidad para generar datos nuevos. Una vez entrenado, podemos muestrear valores aleatorios de la distribución latente y pasarlos por la parte del decodificador del VAE para obtener nuevos datos. Estos datos generados serán consistentes con la distribución general de los datos de entrenamiento.

Ahora, en relación con la industria farmacéutica, los VAEs se presentan como herramientas potencialmente revolucionarias. Imagina tener vastas bases de datos de moléculas o compuestos y querer explorar variantes ligeramente diferentes o compuestos completamente nuevos que aún no han sido sintetizados. Al entrenar un VAE en tales datos, los investigadores pueden muestrear del espacio latente para generar estructuras moleculares novedosas que podrían tener propiedades farmacológicas deseables.

Lo que distingue a los VAEs de las GANs, además de su mecanismo interno, es su base teórica. Mientras que las GANs se basan en una competencia entre dos redes, los VAEs utilizan el concepto de inferencia variacional, que es un método para aproximar distribuciones de probabilidad complejas a través de distribuciones más simples. Esto los hace particularmente adecuados para trabajar en escenarios donde se quiere tener un control más explícito sobre las distribuciones de los datos generados o cuando se tiene un interés en el espacio latente en sí mismo.

### *Modelos Generativos de Flujos:*

Los modelos generativos de flujos, conocidos simplemente como "flujos", representan una rama avanzada y prometedora dentro del ámbito de los modelos generativos. A diferencia de las técnicas previamente mencionadas, como las GANs y los VAEs, los flujos se caracterizan por operar directamente sobre transformaciones de distribuciones de probabilidad, permitiendo un control más explícito y directo en el proceso de generación de datos.

La esencia de un modelo generativo de flujos radica en su capacidad para transformar una distribución de probabilidad simple, como una distribución gaussiana estándar, en una distribución de probabilidad más compleja y específica, que se asemeje a la distribución de los datos con los que se ha entrenado. Esto se logra a través de una serie de transformaciones invertibles y diferenciables que, en su conjunto, se denominan "flujos". Estas transformaciones retienen la capacidad de muestrear de la distribución simple y, al mismo tiempo, ajustarla para que coincida con la distribución deseada.

Una ventaja distintiva de los flujos es su capacidad para calcular de manera exacta y eficiente la densidad de probabilidad de las muestras generadas. En términos prácticos, esto significa que se puede obtener no solo una muestra generada, sino también una medida de cuán "probable" o "coherente" es esa muestra con respecto a los datos de entrenamiento.

Dentro del contexto de la industria farmacéutica, esta característica es especialmente valiosa. Al generar nuevos compuestos o moléculas, no solo es esencial tener una estructura química coherente, sino también entender la probabilidad de que dicha estructura pueda surgir dadas las distribuciones de datos existentes. Así, los modelos generativos de flujos pueden ofrecer un doble beneficio: por un lado, generan datos de alta calidad y, por otro, proporcionan una métrica de la calidad de esos datos.

Además, la estructura determinista y la capacidad de manipular directamente las distribuciones de probabilidad hacen que los modelos de flujos sean más interpretables que algunas otras técnicas generativas. Esto puede ser crucial en la investigación farmacéutica, donde la interpretación y la comprensión de los datos generados pueden ser tan importantes como la generación en sí.

### *Transformers.*

La arquitectura de los Transformers ha desencadenado una auténtica revolución en el ámbito del aprendizaje profundo y la inteligencia artificial. Su capacidad para capturar relaciones contextuales entre palabras o tokens, independientemente de su posición relativa en una secuencia, ha catapultado su relevancia, especialmente en el procesamiento del lenguaje natural (NLP, por sus siglas en inglés).

Originalmente concebidos para abordar desafíos en NLP, como se destacó en el influyente trabajo de Vaswani et al. en 2017, los Transformers se han extendido más allá de estas aplicaciones iniciales. Su mecanismo distintivo, conocido como "atención auto-regresiva", permite a la red asignar diferentes pesos de relevancia a cada palabra o token en función de su contexto, lo que es fundamental para entender el significado y la semántica en las lenguas humanas. Es este enfoque en el contexto y la atención lo que ha permitido a los Transformers superar a las arquitecturas neuronales previas, como las convolucionales (CNNs) y las recurrentes (RNNs), en numerosas tareas de NLP.

Además de las tareas tradicionales de NLP, como la traducción automática y la generación de texto, la flexibilidad de la arquitectura de los Transformers los ha hecho aptos para una variedad de aplicaciones fuera del lenguaje. En el contexto de la industria farmacéutica, donde las estructuras de datos pueden ser tan complejas y jerarquizadas como el lenguaje humano, los Transformers están encontrando un nicho creciente. Las moléculas y las proteínas, por ejemplo, tienen estructuras intrincadas y relaciones entre sus componentes que pueden compararse metafóricamente con las relaciones entre palabras en un texto.

Aplicar los Transformers en el ámbito farmacéutico implica tratar las estructuras moleculares y las secuencias de proteínas como "textos", donde los átomos, enlaces y aminoácidos pueden ser vistos como "palabras" o "tokens". Al hacerlo, es posible entrenar modelos que comprendan y generen moléculas con propiedades deseables o que predigan cómo una determinada molécula interactuará con un objetivo biológico específico.

La capacidad de los Transformers para generar datos coherentes y de alta calidad se ha mostrado invaluable para el diseño de moléculas en la investigación farmacéutica. Estos modelos pueden, por ejemplo, ser entrenados con bases de datos de moléculas existentes y luego generar candidatos a fármacos novedosos que podrían tener propiedades farmacológicas beneficiosas.

En conclusión, aunque los Transformers surgieron del mundo del procesamiento del lenguaje natural, su versatilidad y poder han sido aplicados en numerosos campos, incluido el diseño y desarrollo farmacéutico. Su influencia está sentando las bases para una nueva era en la inteligencia artificial generativa y su interacción con la ciencia de vanguardia.

### 3. Uso de IA Generativa para descubrimiento de fármacos

El proceso tradicional de descubrimiento de fármacos es largo, costoso y conlleva numerosos ensayos y errores. En este contexto, la inteligencia artificial generativa ha demostrado su valor al agilizar y optimizar varias etapas cruciales del descubrimiento de nuevos medicamentos. A continuación, se presentan algunas de las aplicaciones más destacadas de la IA generativa en este campo.

#### *Diseño de moléculas*

El proceso tradicional de diseño y descubrimiento de fármacos es extremadamente complejo, laborioso y costoso. Históricamente, requería de extensos ensayos y errores para identificar y optimizar compuestos con el potencial de convertirse en medicamentos efectivos. Sin embargo, con el auge de la inteligencia artificial (IA) y, específicamente, de la IA generativa, esta dinámica está experimentando un cambio radical.

El diseño de moléculas es una disciplina que fusiona la química con la bioinformática, buscando diseñar estructuras químicas con propiedades farmacológicas específicas. Dada la inmensidad del espacio químico —es decir, la totalidad de moléculas posibles—, la exploración manual o incluso semi-automatizada de este espacio es una tarea titánica. Aquí es donde la IA generativa entra en juego como una herramienta revolucionaria.

Utilizando técnicas avanzadas de aprendizaje automático, como las GANs y los VAEs, es posible modelar y muestrear este vasto espacio químico. Las GANs, con su estructura de generador y discriminador, pueden producir moléculas que son indistinguibles de las moléculas reales, mientras que los VAEs permiten una exploración estructurada del espacio químico, muestreando y decodificando puntos en un espacio latente para generar nuevas estructuras moleculares.

Lo que hace especialmente potente a la IA generativa en este contexto es su capacidad para generar moléculas que no solo son novedosas, sino también viables desde el punto de vista químico y farmacológico. Esto significa que las moléculas propuestas no solo son estructuralmente factibles, sino que también presentan propiedades deseadas, como una alta afinidad por un receptor biológico específico, baja toxicidad y factibilidad de síntesis en el laboratorio.

Además, al integrar bases de datos existentes sobre propiedades moleculares, actividad biológica y toxicidad, los modelos generativos pueden ser entrenados para que tengan en cuenta estos factores al proponer nuevas moléculas. Esto puede conducir a una reducción en el número de compuestos que necesitan ser sintetizados y probados experimentalmente, ahorrando tiempo y recursos.

En términos prácticos, la adopción de la IA generativa en el diseño de moléculas está llevando a una nueva era en el descubrimiento de fármacos. Estos avances permiten a los investigadores y empresas farmacéuticas explorar regiones previamente inaccesibles del espacio químico, identificar candidatos a fármacos más rápidamente y, en última instancia, llevar tratamientos innovadores al mercado de una manera más eficiente y rentable.

#### *Optimización de propiedades moleculares*

El proceso de descubrimiento de fármacos no se trata solo de identificar moléculas que puedan tener una actividad biológica deseada, sino también de garantizar que estas moléculas sean aptas para su administración y uso terapéutico en seres humanos. Una molécula puede tener un potente efecto sobre un objetivo biológico, pero si es inestable, insoluble en agua o muestra toxicidad, no será viable como medicamento. Por ello, la optimización de las propiedades moleculares se vuelve esencial.

La optimización tradicionalmente se realiza mediante un proceso iterativo que implica modificar la estructura química de una molécula y luego evaluar las propiedades resultantes. Este proceso puede ser largo y costoso. Sin embargo, con la inclusión de la IA generativa, podemos navegar este proceso de manera mucho más estratégica y eficiente.

La IA generativa, en particular cuando se combina con arquitecturas potentes como los Transformers, puede explorar rápidamente variaciones de una molécula, predecir cómo afectarán estas modificaciones a sus propiedades y sugerir las versiones más prometedoras de la molécula. Por ejemplo, si una molécula candidata muestra actividad pero tiene

problemas de solubilidad, la IA puede sugerir modificaciones estructurales que podrían mejorar esta solubilidad sin comprometer la actividad.

Los Transformers, con su capacidad para comprender y modelar relaciones complejas, son ideales para este tipo de tarea. Pueden capturar las sutilezas y relaciones intrincadas en estructuras moleculares y traducir esa comprensión en sugerencias de diseño molecular. Esta capacidad para "entender" y "razonar" acerca de las estructuras químicas a un nivel tan detallado supera a muchas técnicas anteriores.

Además, estas herramientas de IA generativa no solo optimizan en función de un solo criterio, sino que pueden tener en cuenta múltiples objetivos simultáneamente. Esto es crucial en el diseño de fármacos, donde las propiedades como la actividad, la selectividad, la toxicidad y la solubilidad a menudo están interrelacionadas y pueden comprometerse entre sí.

En resumen, la adopción de la IA generativa, y en particular de arquitecturas como los Transformers, en el proceso de optimización molecular está facilitando una era de diseño de fármacos más preciso, rápido y coste-eficiente. Con estas herramientas a su disposición, los investigadores pueden dirigirse directamente a moléculas que no solo son activas sino también aptas para el desarrollo clínico y la eventual administración a pacientes.

### *Identificación de objetivos terapéuticos*

El proceso de descubrimiento de fármacos comienza con la identificación de un objetivo terapéutico adecuado, es decir, una molécula o vía en el cuerpo que, si se modifica de alguna manera, podría llevar a una respuesta terapéutica. Si bien la identificación de estos objetivos es crucial, no es una tarea sencilla debido a la complejidad inherente de los sistemas biológicos y a la vasta cantidad de datos biomédicos y genómicos disponibles.

Históricamente, la identificación de objetivos terapéuticos se basaba en experimentos de laboratorio y una comprensión general de la biología de una enfermedad. Pero, en la era de la biología de sistemas y la genómica, estamos inundados de datos que pueden ser inexplorados o subutilizados debido a las limitaciones humanas en el análisis de grandes volúmenes de información.

Aquí es donde la IA generativa ofrece un potencial revolucionario. Al aplicar técnicas avanzadas de aprendizaje automático, la IA puede analizar y sintetizar grandes

conjuntos de datos, identificando patrones y conexiones que podrían pasar desapercibidos para un investigador humano.

El procesamiento del lenguaje natural (PLN), por ejemplo, es una herramienta poderosa en este contexto. Puede ser empleado para analizar literatura científica, patentes y otros textos relacionados para identificar menciones de genes, proteínas o vías que están asociadas con enfermedades específicas. Al correlacionar esta información con bases de datos genómicas y biomédicas, la IA puede destacar objetivos potencialmente relevantes para una enfermedad en particular.

Del mismo modo, el análisis de redes biológicas permite a la IA explorar cómo diferentes moléculas y vías interactúan entre sí en el contexto de una célula o tejido. Esto es esencial para identificar puntos de intervención que podrían tener el máximo impacto terapéutico con el mínimo de efectos secundarios.

Otra ventaja de la IA generativa en este contexto es su capacidad para integrar y analizar datos heterogéneos, desde datos transcriptómicos y proteómicos hasta información clínica y epidemiológica. Al combinar todas estas fuentes, la IA puede generar una imagen más completa y precisa de un objetivo terapéutico potencial.

En última instancia, al automatizar y optimizar la identificación de objetivos terapéuticos, la IA generativa no solo acelera este proceso inicial crucial en el descubrimiento de fármacos, sino que también aumenta la probabilidad de éxito en las etapas posteriores del desarrollo de medicamentos, llevando a terapias más efectivas y seguras al mercado en un período de tiempo más corto.

### *"Repurposing" de fármacos*

El proceso de descubrimiento y desarrollo de nuevos medicamentos es costoso, arriesgado y puede durar muchos años. Dada esta inversión intensiva en tiempo y recursos, el repurposing de fármacos —que implica encontrar nuevos usos terapéuticos para medicamentos ya existentes— se presenta como una alternativa atractiva y eficiente. Ya que estos medicamentos han pasado por pruebas clínicas y se conocen sus perfiles de seguridad, el repurposing puede reducir significativamente los costos y tiempos asociados al desarrollo tradicional de medicamentos.

La IA generativa desempeña un papel fundamental en la modernización y eficiencia de este proceso. En lugar de depender exclusivamente de ensayos y errores o serendipias, la IA puede sistemáticamente escanear y analizar vastas cantidades de información para identificar candidatos prometedores para el repurposing.

Por ejemplo, mediante la extracción de información de grandes bases de datos que contienen información sobre las interacciones entre fármacos y proteínas, la IA generativa puede descubrir modos de acción no reconocidos previamente para medicamentos existentes. Además, al analizar la literatura científica y datos de pacientes utilizando técnicas de procesamiento del lenguaje natural, la IA puede identificar correlaciones y patrones entre enfermedades y tratamientos que no son evidentes a simple vista.

Otro enfoque es el análisis de firmas moleculares. La IA puede comparar las respuestas moleculares inducidas por diferentes medicamentos con las firmas de diversas enfermedades. Si una firma inducida por un medicamento es opuesta a la firma de una enfermedad, ese medicamento podría ser un candidato para tratar dicha enfermedad.

Es importante destacar que, si bien la IA generativa proporciona pistas y predicciones valiosas, estas deben validarse a través de experimentos y ensayos clínicos para confirmar su eficacia y seguridad en las nuevas indicaciones propuestas.

La utilización de la IA generativa en el repurposing de fármacos no solo acelera el proceso de desarrollo de medicamentos, sino que también amplía el potencial terapéutico de los medicamentos existentes. En un mundo donde las necesidades médicas no satisfechas continúan siendo un desafío, esta estrategia respaldada por la inteligencia artificial es una promesa esperanzadora para pacientes y profesionales de la salud.

#### 4. Trabajo Futuro

La adopción y éxito de la inteligencia artificial generativa en la industria farmacéutica hasta la fecha marca solo el comienzo de lo que podría ser una serie de avances significativos en la medicina y la terapéutica. A medida que avanzamos, es esencial explorar y profundizar en diversas direcciones para maximizar el potencial de la IA en este campo.

Primero, si bien las herramientas actuales de IA han demostrado ser eficaces en la exploración del espacio químico, es fundamental desarrollar algoritmos más avanzados que puedan abordar la complejidad inherente a la biología humana y las interacciones molecular-molecular. Esto permitirá una predicción más precisa de las propiedades farmacocinéticas y farmacodinámicas de los candidatos a fármacos.

Además, la integración de múltiples fuentes de datos, como la genómica, la proteómica, la metabolómica y la transcriptómica, puede ofrecer una visión holística y detallada del impacto de un candidato a fármaco en un sistema biológico. Trabajar en algoritmos que puedan manejar y analizar eficientemente estos grandes y heterogéneos conjuntos de datos será esencial.

La interpretabilidad y transparencia de los modelos de IA también es un área que requiere atención. A medida que la IA toma decisiones más complejas en el diseño y optimización de fármacos, es fundamental que los científicos y reguladores comprendan cómo se toman estas decisiones para garantizar la seguridad y eficacia de los tratamientos propuestos.

Por último, a medida que la IA se convierte en una herramienta estándar en la investigación farmacéutica, será crucial desarrollar marcos regulatorios y éticos que garanticen su uso adecuado y seguro. La colaboración entre investigadores, industria y organismos reguladores será fundamental para establecer directrices que respalden la innovación sin comprometer la seguridad del paciente.

En conclusión, si bien hemos presenciado avances notables gracias a la IA generativa en la farmacéutica, el camino hacia su integración total y óptima aún se está trazando. La inversión en investigación y desarrollo, así como la colaboración interdisciplinaria, serán clave para garantizar que esta tecnología alcance su máximo potencial en beneficio de la salud humana.

#### 5. Conclusiones

La revolución que la inteligencia artificial (IA) ha introducido en múltiples ámbitos ha tenido un impacto transformador en el sector farmacéutico. Su aplicación en el descubrimiento y desarrollo de medicamentos ha prometido y ya ha comenzado a entregar una era de innovación farmacéutica más ágil y precisa. Varios aspectos de esta transformación merecen una atención especial.

Primero, al abordar el desafío fundamental del diseño molecular, la IA generativa ha demostrado ser una herramienta poderosa. Al emplear arquitecturas como las Redes Generativas Adversariales (GANs) y los Autocodificadores Variacionales (VAEs), se ha potenciado la capacidad de explorar vastos espacios químicos en busca de moléculas que no solo sean novedosas sino también viables desde un punto de vista terapéutico. Esta exploración, anteriormente tediosa y a menudo basada en ensayo y error, ha sido significativamente acelerada.

La optimización de estas moléculas para garantizar propiedades deseables, como la solubilidad, estabilidad y selectividad, ha sido otro campo de acción de la IA generativa. Mediante técnicas avanzadas, es posible refinar moléculas existentes o proponer nuevas estructuras que cumplan con criterios precisos, facilitando la transición de un compuesto prometedor a un candidato clínico viable.

Además, al comienzo mismo del proceso de descubrimiento de fármacos, la identificación de objetivos terapéuticos adecuados es esencial. En este ámbito, la IA ha demostrado ser excepcionalmente útil, proporcionando un análisis más profundo y sistemático de grandes conjuntos de datos biomédicos y genómicos. Esta capacidad de discernir patrones complejos y conexiones ocultas ha llevado a descubrimientos más informados y basados en evidencia en el ámbito de objetivos terapéuticos.

Sin embargo, quizás una de las estrategias más prometedoras donde la IA ha dejado su marca es el repurposing de medicamentos. La reutilización de fármacos ya existentes para nuevas indicaciones terapéuticas es una vía eficiente y rentable para abordar enfermedades sin soluciones terapéuticas adecuadas. Aquí, la IA no solo propone candidatos para reutilización basándose en datos existentes sino que también descubre relaciones y modos de acción previamente desconocidos, desbloqueando el potencial terapéutico escondido de fármacos ya conocidos.

En general, mientras que la investigación farmacéutica tradicional ha sido, y sigue siendo, una piedra angular en el avance de la medicina, la adopción y adaptación de herramientas basadas en IA generativa representan un cambio paradigmático. Estas herramientas están preparadas para acelerar el ritmo de descubrimiento, reducir costos, aumentar la precisión y, lo más importante, mejorar las posibilidades de éxito en la búsqueda de tratamientos más efectivos y seguros. Mientras continuamos navegando en esta era de transformación digital, es evidente que la integración profunda de la IA en la industria farmacéutica no es solo deseable, sino esencial para enfrentar los desafíos médicos del siglo XXI.

## References

García-Retuerta D, Canal-Alonso A, Casado-Vara R, Rey AM, Panuccio G, Corchado JM. Bidirectional-Pass Algorithm for Interictal Event Detection. In Practical Applications of Computational Biology & Bioinformatics, 14th International Conference (PACBB 2020). PACBB 2020. Advances in Intelligent Systems and Computing, vol 1240. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-54568-0\\_20](https://doi.org/10.1007/978-3-030-54568-0_20)

Castillo Ossa LF, Chamoso P, Arango-López J, Pinto-Santos F, Isaza GA, Santa-Cruz-González C, Ceballos-Marquez A, Hernández G, Corchado JM. A Hybrid Model for COVID-19 Monitoring and Prediction. *Electronics*. 2021; 10(7):799.

<https://doi.org/10.3390/electronics10070799>

Intelligent Platform Based on Smart PPE for Safety in Workplaces. Márquez-Sánchez S, Campero-Jurado I, Herrera-Santos J, Rodríguez S, Corchado JM. *Sensors (Basel)*. 2021 Jul 7;21(14):4652

<https://doi.org/10.3390/s21144652>

A. Canal-Alonso, R. Casado-Vara and J. Manuel Corchado, "An affordable implantable VNS for use in animal research," 2020 27th IEEE International Conference on Electronics, Circuits and Systems (ICECS), 2020, pp. 1-4, doi: 10.1109/ICECS49266.2020.9294958

An Agent-Based Clustering Approach for Gene Selection in Gene Expression Microarray. Ramos J, Castellanos-Garzón JA, González-Briones A, de Paz JF, Corchado JM. *Interdiscip Sci*. 2017 Mar;9(1):1-13

DOI 10.1007/s12539-017-0219-6

## Agradecimientos

El presente estudio ha sido financiado por el proyecto AIR Genomics (con número de expediente CCTT3/20/SA/0003), mediante la convocatoria 2020 PROYECTOS I+D ORIENTADOS A LA EXCELENCIA Y MEJORA COMPETITIVA DE LOS CCTT por el Instituto de Competitividad Empresarial de Castilla y León y fondos FEDER.