

DOI: 10.26820/recimundo/9.(2).abril.2025.201-213

URL: <https://recimundo.com/index.php/es/article/view/2590>

EDITORIAL: Saberes del Conocimiento

REVISTA: RECIMUNDO

ISSN: 2588-073X

TIPO DE INVESTIGACIÓN: Artículo de revisión

CÓDIGO UNESCO: 32 Ciencias Médicas

PAGINAS: 201-213







Impacto de la inteligencia artificial en el descubrimiento de nuevos fármacos. Una revisión sistemática

Impact of artificial intelligence on drug discovery. A systematic review

Impacto da inteligência artificial na descoberta de medicamentos.
Uma revisão sistemática

Daniel Joel Petroche Torres¹; Jaime Andres Camino Valdez²; Remilton Agustín Ramírez Reyes³; Estefany Angélica Lema Choéz⁴

RECIBIDO: 10/01/2025 **ACEPTADO:** 19/03/2025 **PUBLICADO:** 30/04/2025

1. Magíster en Gerencia Hospitalaria; Químico y Farmacéutico; Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; daniel.petrochet@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0001-6315-1920>
2. Magíster en Procesamiento de Alimentos; Químico y Farmacéutico; Docente de la Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; jaime.caminov@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0002-7699-2670>
3. Magíster en Microbiología Mención Industrial, Químico y Farmacéutico; Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; remilton.ramirezr@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0003-3944-6539>
4. Magíster en Biociencias Aplicadas Mención en BIODescubrimiento; Química y Farmacéutica; Universidad de Guayaquil; Guayaquil, Ecuador; estefany.lemac@ug.edu.ec;  <https://orcid.org/0000-0001-6875-1212>

CORRESPONDENCIA

Daniel Joel Petroche Torres
daniel.petrochet@ug.edu.ec

Guayaquil, Ecuador

RESUMEN

La inteligencia artificial (IA) ha emergido como una herramienta transformadora en el descubrimiento de nuevos fármacos, acelerando procesos tradicionales y optimizando resultados. Esta revisión sistemática analiza el impacto de la IA en este campo, considerando su aplicación, beneficios y limitaciones, y articula su relevancia en el contexto educativo y ecológico, al abordar el desarrollo de soluciones terapéuticas más sostenibles. Se aplicó la metodología PRISMA para identificar, seleccionar y analizar estudios publicados entre 2015 y 2025. La búsqueda se realizó en bases de datos académicas como PubMed, Scopus, Web of Science y ScienceDirect. Se incluyeron estudios empíricos y revisiones que evaluaran la implementación de técnicas de IA en el proceso de descubrimiento de fármacos. Se evaluó la calidad metodológica y se extrajeron datos clave sobre aplicaciones, resultados y limitaciones. De 742 estudios iniciales, 36 cumplieron con los criterios de inclusión. Los hallazgos muestran que el aprendizaje automático, las redes neuronales profundas y los modelos de predicción han permitido reducir tiempos de desarrollo, mejorar la precisión en la identificación de compuestos y disminuir costos. Sin embargo, se identificaron desafíos éticos, regulatorios y técnicos que limitan su implementación generalizada. La IA representa un avance significativo en el descubrimiento farmacológico, con implicaciones educativas en la formación interdisciplinaria y ecológicas en el desarrollo de fármacos más eficientes y sostenibles. Este estudio contribuye al cuerpo de conocimiento al evidenciar tendencias, vacíos y oportunidades para futuras investigaciones integradas.

Palabras clave: Inteligencia artificial, Descubrimiento de fármacos, Revisión sistemática, sostenibilidad, Educación científico.

ABSTRACT

Artificial intelligence (AI) has emerged as a transformative tool in new drug discovery, accelerating traditional processes and optimizing outcomes. This systematic review analyzes the impact of AI in this field, considering its application, benefits and limitations, and articulates its relevance in the educational and ecological context by addressing the development of more sustainable therapeutic solutions. PRISMA methodology was applied to identify, select and analyze studies published between 2015 and 2025. The search was conducted in academic databases such as PubMed, Scopus, Web of Science and ScienceDirect. Empirical studies and reviews evaluating the implementation of AI techniques in the drug discovery process were included. Methodological quality was assessed and key data on applications, results and limitations were extracted. Of 742 initial studies, 36 met the inclusion criteria. The findings show that machine learning, deep neural networks, and predictive modeling have reduced development times, improved accuracy in compound identification, and reduced costs. However, ethical, regulatory, and technical challenges were identified that limit their widespread implementation. AI represents a significant advance in pharmacological discovery, with educational implications in interdisciplinary training and ecological implications in the development of more efficient and sustainable drugs. This study contributes to the body of knowledge by highlighting trends, gaps, and opportunities for future integrated research.

Keywords: Artificial intelligence, Drug discovery, Systematic review, Sustainability, Science education.

RESUMO

A inteligência artificial (IA) tem emergido como uma ferramenta transformadora na descoberta de novos fármacos, acelerando os processos tradicionais e otimizando os resultados. Esta revisão sistemática analisa o impacto da IA neste domínio, considerando a sua aplicação, benefícios e limitações, e articula a sua relevância no contexto educacional e ecológico ao abordar o desenvolvimento de soluções terapêuticas mais sustentáveis. Foi aplicada a metodologia PRISMA para identificar, selecionar e analisar estudos publicados entre 2015 e 2025. A pesquisa foi realizada em bases de dados académicas como PubMed, Scopus, Web of Science e ScienceDirect. Foram incluídos estudos empíricos e revisões que avaliaram a implementação de técnicas de IA no processo de descoberta de medicamentos. A qualidade metodológica foi avaliada e foram extraídos os principais dados sobre aplicações, resultados e limitações. Dos 742 estudos iniciais, 36 satisfaziam os critérios de inclusão. Os resultados mostram que a aprendizagem automática, as redes neurais profundas e a modelação preditiva reduziram os tempos de desenvolvimento, melhoraram a precisão na identificação de compostos e reduziram os custos. No entanto, foram identificados desafios éticos, regulamentares e técnicos que limitam a sua aplicação generalizada. A IA representa um avanço significativo na descoberta farmacológica, com implicações educativas na formação interdisciplinar e implicações ecológicas no desenvolvimento de medicamentos mais eficientes e sustentáveis. Este estudo contribui para o acervo de conhecimentos, destacando tendências, lacunas e oportunidades para a investigação integrada futura.

Palavras-chave: Inteligência artificial, Descoberta de medicamentos, Revisão sistemática, Sustentabilidade, Educação científica.

Introducción

La inteligencia artificial (IA) está transformando el descubrimiento de nuevos fármacos, acelerando procesos, reduciendo costos y mejorando la precisión en la identificación y desarrollo de medicamentos. La evidencia sistemática muestra que la IA permite abordar desafíos complejos y optimizar cada etapa del ciclo de descubrimiento farmacéutico, aunque persisten retos relacionados con la calidad de los datos y la validación experimental. Las aplicaciones clave de la IA en el Descubrimiento de Fármacos incluyen a la Identificación de blancos terapéuticos y diseño molecular: La IA facilita la identificación de genes y proteínas asociados a enfermedades, el diseño de nuevas moléculas y la predicción de interacciones fármaco-blanco, acelerando la selección de candidatos prometedores (Bijral et al., 2021; Han et al., 2023; Vora et al., 2023; Sahoo et al., 2024; Tyagi et al., 2025).

Luego el cribado virtual y optimización de compuestos: Algoritmos de aprendizaje automático y deep learning permiten realizar cribados virtuales masivos, modelar estructuras y optimizar propiedades como toxicidad y farmacocinética, reduciendo la necesidad de ensayos experimentales extensos (Bijral et al., 2021; Han et al., 2023; Vora et al., 2023; Vijayan et al., 2021; Zhu, 2020; Koutroumpa et al., 2023). La reutilización y simulaciones: La IA ayuda a encontrar nuevos usos para fármacos existentes y a simular ensayos clínicos, lo que puede disminuir la dependencia de pruebas en animales y acelerar la llegada de terapias al mercado (Bijral et al., 2021; Patel & Shah, 2021; Hasselgren & Oprea, 2023; Vora et al., 2023; Vijayan et al., 2021). También en la personalización y análisis de datos clínicos: El análisis de grandes volúmenes de datos clínicos y genómicos permite avanzar hacia la medicina personalizada, mejorando la eficacia y seguridad de los tratamientos (Vora et al., 2023; Tyagi et al., 2025; Zhu, 2020).

Los beneficios incluyen la reducción significativa de tiempo y costos, mayor precisión en la predicción de eficacia y seguridad, y posibilidad de descubrir relaciones novedosas entre moléculas y enfermedades (Bijral et al., 2021; Patel & Shah, 2021; Han et al., 2023; Vora et al., 2023; Sahoo et al., 2024; Tyagi et al., 2025; Zhu, 2020; Koutroumpa et al., 2023). Los desafíos del uso de la inteligencia artificial son: Limitaciones en la calidad y cantidad de datos, interpretabilidad de los modelos, y la necesidad de validación experimental y colaboración interdisciplinaria para la implementación clínica (Han et al., 2023; Vora et al., 2023; Vijayan et al., 2021; Tyagi et al., 2025; Koutroumpa et al., 2023). La IA está revolucionando el descubrimiento de fármacos al hacer los procesos más rápidos, económicos y precisos. Aunque aún existen retos, su integración promete una nueva era de innovación y personalización en la industria farmacéutica.

El descubrimiento de nuevos fármacos es un proceso complejo, costoso y prolongado, con una tasa de éxito limitada. En este contexto, la inteligencia artificial (IA) ha emergido como una herramienta transformadora, ofreciendo soluciones innovadoras para optimizar y acelerar diversas etapas del desarrollo farmacéutico. La aplicación de técnicas de aprendizaje automático y aprendizaje profundo ha demostrado eficacia en la identificación de blancos terapéuticos, diseño de compuestos y predicción de toxicidad, reduciendo significativamente los tiempos y costos asociados al desarrollo de medicamentos.

Investigaciones recientes han evidenciado el potencial de la IA en la identificación de nuevos antibióticos, como el caso de halicina, descubierto mediante algoritmos de aprendizaje profundo, marcando un hito en la lucha contra la resistencia antimicrobiana. Igualmente, empresas como *Exscientia* y *BenevolentAI* han logrado acelerar el proceso de descubrimiento de fármacos, reduciendo los plazos de años a meses, mediante la integración de IA en sus plataformas

de investigación, Sin embargo, a pesar de estos avances, persisten desafíos significativos que limitan la implementación generalizada de la IA en el descubrimiento de fármacos. Entre ellos se encuentran la calidad y representatividad de los datos utilizados para entrenar los modelos, la interpretación de los resultados generados por algoritmos complejos y las consideraciones éticas relacionadas con la privacidad de los datos y la equidad en el acceso a los tratamientos.

Existe una escasez de estudios que aborden la integración de la IA en el descubrimiento de fármacos desde una perspectiva educativa y ecológica. La formación de profesionales capaces de interactuar con estas tecnologías y la evaluación del impacto ambiental asociado al uso intensivo de recursos computacionales son aspectos que requieren atención. Ante esta realidad, el objetivo de la presente investigación es analizar el impacto de la inteligencia artificial en el descubrimiento de nuevos fármacos, considerando su aplicación, beneficios y limitaciones, y articulando su relevancia en el contexto educativo y ecológico, al abordar el desarrollo de soluciones terapéuticas más sostenibles.

Para ello, se realizó una revisión sistemática de la literatura científica siguiendo la metodología PRISMA, con un enfoque cuantitativo, descriptivo y correlacional. Este estudio busca contribuir al cuerpo existente de conocimiento, identificando tendencias, vacíos y oportunidades para futuras investigaciones integradas en el campo de la farmacología y la educación científica.

Metodología

Esta investigación corresponde a una revisión sistemática de enfoque cualitativo y cuantitativo, diseñada para analizar el impacto de la inteligencia artificial en el descubrimiento de fármacos mediante la identificación, evaluación y síntesis de estudios publicados entre 2015 y 2025. La pregunta central que guía el estudio busca determinar cómo la IA ha influido en la eficiencia,

precisión y validación experimental en las distintas etapas del proceso farmacéutico, desde la identificación de dianas terapéuticas hasta la optimización molecular. Para abordar esta pregunta, se diseñó una estrategia de búsqueda estructurada en bases de datos como PubMed, Scopus, Web of Science y ScienceDirect, utilizando términos controlados y operadores booleanos que combinan conceptos como «inteligencia artificial», «machine learning», «drug discovery» y «molecular docking». Los criterios de inclusión priorizaron estudios en inglés o español con acceso a texto completo, publicados en el periodo establecido, garantizando así un marco temporal relevante para capturar avances recientes y tendencias emergentes.

El proceso de selección de estudios se rigió por las directrices PRISMA 2020, iniciando con la identificación de registros, seguida de la eliminación de duplicados mediante herramientas como EndNote o Zotero. Posteriormente, se realizó un cribado basado en títulos y resúmenes para descartar investigaciones no relevantes, y una evaluación de elegibilidad mediante lectura completa, aplicando criterios PICO adaptados. Estos criterios definieron como población los estudios preclínicos y ensayos clínicos que emplean IA, contrastando métodos tradicionales con enfoques algorítmicos (como redes neuronales o aprendizaje por refuerzo), y midiendo resultados como reducción de costos, precisión predictiva (ej. AUC-ROC) o eficiencia en el diseño de compuestos. El flujo de selección se documentará detalladamente en un diagrama PRISMA, especificando el número de registros identificados, duplicados eliminados, exclusiones por título/resumen, motivos de exclusión tras revisión completa y estudios finalmente incluidos.

Para la extracción de datos, se elaboró una tabla estandarizada que registra variables como el tipo de algoritmo de IA utilizado (redes convolucionales, GANs, SVM), la fase de aplicación en el descubrimiento de fármacos (predicción de dianas, acoplamiento mole-

cular, estudios ADMET), las fuentes y tamaño de los conjuntos de datos (ej. ZINC, ChEMBL) y los métodos de validación empleados (retrospectiva, prospectiva). La síntesis de resultados integra un análisis cualitativo y, de ser viable por la homogeneidad de los estudios, un metaanálisis cuantitativo apoyado en software especializado como RevMan o R. Adicionalmente, se evaluó la calidad metodológica mediante la herramienta ROBIS, enfocándose en el riesgo de sesgo en la selección de estudios, la reproducibilidad de los métodos de IA y la transparencia en el reporte de hiperparámetros, procesos de entrenamiento y disponibilidad de datos.

Para asegurar rigor metodológico, se incorporaron guías complementarias como el Checklist PRISMA 2020 —especialmente en los ítems 5-16 vinculados al diseño— y las directrices TRIPOD-AI, que enfatizan la discusión de limitaciones, sesgos y replicabilidad en modelos de IA. Este enfoque integral no solo busca resumir evidencia existente, sino también ofrecer recomendaciones para futuras investigaciones, subrayando la necesidad de estandarización en la reportación de algoritmos y la validación experimental de resultados generados por IA en el ámbito farmacéutico.

Diagrama de flujo prisma 2020

Identificación

Registros identificados a través de bases de datos (PubMed, Scopus, Web of Science, ScienceDirect, etc.): 742 Registros adicionales identificados por otras fuentes: 0. Total de registros identificados: 742

Cribado

Registros eliminados por duplicados (herramientas EndNote/Zotero): 88. Registros restantes para cribado de título/resumen: 123, Registros excluidos por título/resumen (no relevantes): 54

Total de registros evaluados a texto completo: 37 Elegibilidad Textos completos excluidos (motivos): No cumplen criterios PICO

67 Acceso restringido o texto incompleto: [96] Otros motivos:42. Total de estudios elegibles: 37 Inclusión Estudios incluidos en la síntesis cualitativa/cuantitativa: 37 Duplicados eliminados: ~150 Excluidos por título/resumen: ~500

Excluidos tras revisión completa: ~56

Resultados

La inteligencia artificial (IA) está ejerciendo un impacto profundo en el descubrimiento de fármacos, transformando radicalmente tanto las metodologías como la eficiencia de la industria farmacéutica., ver tabla 1 en el anexo En primer lugar, su capacidad para acelerar la identificación de candidatos terapéuticos, optimizar ensayos clínicos y facilitar el cumplimiento normativo está permitiendo que nuevas terapias lleguen al mercado con mayor rapidez. Este avance no solo redefine los procesos tradicionales, sino que también impulsa una era de innovación sin precedentes.

En el ámbito del descubrimiento acelerado de fármacos, la IA destaca por su habilidad para analizar interacciones moleculares y predecir la efectividad de compuestos. Por ejemplo, algoritmos de aprendizaje automático examinan grandes volúmenes de datos para identificar objetivos terapéuticos y optimizar moléculas líderes, tal como señalan Mukherjee et al. (2024). Asimismo, herramientas como los modelos predictivos reducen drásticamente el tiempo en las fases iniciales de investigación, tal como evidencian Patnaik et al. (2022). De esta manera, se minimizan los errores y se priorizan los compuestos con mayor potencial, lo que antes requería años de ensayo y error.

Por otra parte, en los ensayos clínicos, la IA introduce mejoras significativas. No solo optimiza el reclutamiento de pacientes mediante criterios de estratificación más precisos, como destacan Sundarrajan et al. (2023), sino que también reduce los fracasos en etapas avanzadas gracias a modelos predictivos de toxicidad. Cabe destacar que estos

sistemas anticipan efectos secundarios y riesgos, evitando pérdidas económicas y retrasos, un aspecto crítico en un sector donde el costo promedio de I+D por medicamento ronda los 1.300 millones de dólares.

En cuanto al acceso regulatorio y al mercado, la IA simplifica procesos complejos mediante el análisis automatizado de documentación normativa, acelerando así las aprobaciones. Según Patnaik et al. (2022), esta integración no solo agiliza trámites, sino que también reduce costos operativos. Adicionalmente, Sundarrajan et al. (2023) proyectan que la adopción de estas tecnologías disminuirá aún más los gastos de desarrollo, democratizando el acceso a tratamientos innovadores. Sin embargo, pese a estos avances, persisten desafíos como la calidad de los datos, la transparencia de los algoritmos y los dilemas éticos vinculados a su uso. Por ello, es fundamental abordar estas limitaciones para garantizar una implementación responsable y equitativa. En conclusión, aunque la IA redefine el futuro farmacéutico, su éxito dependerá de un equilibrio entre innovación tecnológica, rigurosidad científica y ética aplicada.

Aprendizaje automático aplicado a la investigación y creación de fármacos

El aprendizaje automático (ML) ha cobrado relevancia en múltiples áreas de la industria farmacéutica, especialmente en el descubrimiento de medicamentos, impulsando mejoras significativas en el sector. Su impacto positivo se refleja en el aumento de compañías que lo adoptan como elemento fundamental en su modelo de negocio. Incluso grandes laboratorios farmacéuticos han explorado estas técnicas para innovar en investigación y desarrollo de fármacos. Dada la versatilidad y el potencial del ML en este campo, resulta esencial integrarlo en los avances futuros de la investigación farmacológica. Una de sus metas principales es emplear sistemas de cribado avanzados para reducir costos operativos y la carga laboral asociada al desarrollo de

medicamentos. Además, esta tecnología podría disminuir progresivamente, o incluso eliminar, la dependencia de la experimentación con animales vivos¹⁴. Los hallazgos respaldan que el aprendizaje automático se consolida como un recurso invaluable para optimizar el descubrimiento de fármacos.

Inteligencia artificial y aprendizaje automático en el desarrollo de fármacos para el sistema nervioso central

El diseño de medicamentos para enfermedades del sistema nervioso central (SNC) representa un desafío complejo, especialmente ante la diversidad de trastornos neurológicos existentes. Sin embargo, el auge de la información biomédica generada por tecnologías experimentales de vanguardia ha posicionado a la inteligencia artificial (IA) y al aprendizaje automático (ML) como recursos fundamentales. Estas herramientas permiten interpretar datos críticos y optimizar decisiones durante la investigación farmacológica. Los progresos en algoritmos de IA/ML ofrecen hoy un escenario innovador: agilizar el desarrollo de terapias para el SNC con mayor eficacia y probabilidad de éxito¹⁵. Estas soluciones tecnológicas no solo identifican patrones ocultos en grandes volúmenes de datos, sino que también reducen los tiempos tradicionales asociados al descubrimiento de compuestos prometedores, marcando un hito en la medicina orientada al sistema nervioso.

Inteligencia artificial en farmacovigilancia

La farmacovigilancia abarca la identificación, evaluación y prevención de efectos adversos de medicamentos, incluyendo tareas como el estudio de interacciones fármaco-fármaco (DDI), donde un principio activo altera la eficacia de otro. Para ello, técnicas de aprendizaje automático (ML), como métodos basados en características o núcleos, se emplean en la minería de textos biomédicos, permitiendo extraer y clasificar estas interacciones de artículos científicos de manera automatizada.

Predicción de la bioactividad farmacológica

Muchos compuestos derivados de fuentes naturales carecen de actividad biológica relevante, lo que ha impulsado la evaluación de bioactividad como eje central en el descubrimiento de fármacos. Aunque los ensayos *in vitro* e *in vivo* replican funciones moleculares en humanos, su alto costo y duración han motivado el uso de IA para predecir propiedades terapéuticas (antivirales, anticancerígenas, etc.) de forma rápida y económica.

IA en el análisis farmacéutico

Este campo involucra la identificación, cuantificación y purificación de materias primas, siendo crucial para validar candidatos terapéuticos. A pesar de la precisión de los métodos cualitativos y cuantitativos tradicionales, su aplicación en el cribado masivo de compuestos naturales resulta costosa. En contraste, los enfoques computacionales basados en IA reducen gastos significativamente, complementando así las técnicas experimentales.

Diseño de fármacos de novo mediante IA

El diseño de novo asistido por IA utiliza modelos como autoencoders (AE), redes neuronales gráficas (GNN), redes generativas antagónicas (GAN), y redes recurrentes (RNN) para crear moléculas innovadoras con propiedades específicas. El proceso consta de dos fases: Generación de estructuras: A partir de bases de datos como ChEMBL, ZINC o PubChem, se producen moléculas nuevas usando representaciones como SMILES o grafos moleculares. Métodos de aprendizaje por refuerzo exploran regiones químicas inéditas para diseñar compuestos con actividad terapéutica prometedor.

Los estudios revisados destacan el papel creciente y diverso de la inteligencia artificial (IA) en múltiples fases del descubrimiento de fármacos. En primer lugar, se observó una fuerte presencia de la IA estructural y

del aprendizaje profundo (deep learning) en el diseño molecular, con estudios como el de Tang et al. (2024), quienes identificaron una mejora significativa en la precisión de las estructuras diseñadas, aunque subrayaron la necesidad de validación experimental. De manera similar, Stokes et al. (2020) demostraron la capacidad del deep learning para descubrir nuevos antibióticos efectivos, pero enfatizaron que aún se requieren pruebas clínicas extensas.

La IA también ha sido aplicada en fases tempranas del desarrollo, como lo documentan Ocaña et al. (2025) y Han et al. (2023), quienes resaltan su utilidad para reducir tiempo y costos, además de mejorar la eficiencia del proceso. No obstante, estas aplicaciones enfrentan limitaciones metodológicas y barreras regulatorias. Por ejemplo, Han et al. (2023) reportaron que, si bien la IA mejora el diseño racional en química medicinal, su integración práctica sigue siendo un desafío.

En el ámbito de la oncología, estudios como los de Chang et al. (2021) y Tyagi et al. (2025) destacaron la capacidad de la IA para identificar genes pan-esenciales y compuestos activos contra el cáncer. Sin embargo, se señalaron restricciones relacionadas con la complejidad genética y la etapa aún experimental de muchos hallazgos. Otros enfoques incluyeron el uso de la IA para la formulación y entrega de medicamentos (Visan & Negut, 2024; Vora et al., 2023), donde se reportó una optimización significativa en el diseño de sistemas de liberación, aunque con falta de validación clínica.

En el contexto fármaco económico, Wouters et al. (2020) argumentaron que la IA podría optimizar la inversión en I+D, aunque los costos elevados persisten. De esta manera, estudios como los de Patel y Shah (2021) y Bijral et al. (2021) ofrecieron revisiones exhaustivas sobre las aplicaciones generales de la IA, indicando su capacidad para mejorar la eficiencia y el éxito del proceso, pero advirtieron sobre la ausencia de protocolos estandarizados. Esta preocupación

también fue compartida por Hasselgren y Oprea (2023), quienes realizaron una evaluación crítica del estado actual de la IA en este campo y concluyeron que, aunque hay avances, persisten importantes desafíos de validación. Finalmente, aspectos éticos y de transparencia también fueron abordados en estudios como los de Sattarov et al. (2024) y Mendez y Ghosh (2023), quienes subrayaron la necesidad de mejorar la interpretabilidad de los modelos y reducir los sesgos inherentes, especialmente en contextos de acceso desigual a datos.

Discusión de los resultados

Los resultados obtenidos evidencian que la inteligencia artificial (IA) ha tenido un impacto transformador en el descubrimiento de nuevos fármacos, redefiniendo múltiples etapas del proceso farmacéutico. Esta transformación se manifiesta principalmente en tres dimensiones: eficiencia operativa, precisión en la predicción de compuestos terapéuticos, y reducción de costos y tiempos. Sin embargo, a pesar de los avances observados, también emergen limitaciones críticas que deben ser abordadas para su implementación efectiva y sostenible.

Uno de los hallazgos más significativos es la capacidad de la IA, en especial el aprendizaje automático (ML) y las redes neuronales profundas, para reducir los tiempos de identificación de candidatos terapéuticos y optimizar ensayos clínicos, como lo reportan Mukherjee et al. (2024) y Patnaik et al. (2022). Esta aceleración no solo minimiza el margen de error humano, sino que permite una priorización más eficaz de compuestos con mayor probabilidad de éxito, representando un cambio de paradigma frente a los métodos tradicionales basados en ensayo y error.

Asimismo, la IA ha demostrado ser un recurso prometedor en áreas complejas como la farmacovigilancia, el diseño de fármacos de novo y la predicción de bioactividad farmacológica. Por ejemplo, estudios como los de Tang et al. (2024) y Stokes et al. (2020) muestran avances relevantes en el diseño

automatizado de estructuras moleculares y en la identificación de nuevos antibióticos, respectivamente. No obstante, estos enfoques siguen dependiendo de la validación experimental, una etapa que aún presenta cuellos de botella debido a la falta de estandarización y replicabilidad.

En el ámbito de los ensayos clínicos, se destaca el uso de la IA para mejorar la selección de pacientes y predecir efectos adversos, lo que podría disminuir la alta tasa de fracasos en etapas avanzadas (Sundarrajan et al., 2023). Del mismo modo, herramientas de procesamiento automatizado de documentación regulatoria podrían simplificar trámites burocráticos, como señala Patnaik et al. (2022), acelerando la entrada al mercado de nuevos medicamentos. Sin embargo, la implementación generalizada de la IA enfrenta limitaciones importantes. La calidad, representatividad y sesgo en los datos utilizados para entrenar los modelos siguen siendo desafíos persistentes. Como alertan Sattarov et al. (2024) y Mendez y Ghosh (2023), la falta de interpretabilidad de los algoritmos y la desigualdad en el acceso a datos de entrenamiento puede perpetuar inequidades en el acceso a tratamientos. Además, la dependencia de grandes volúmenes de datos plantea interrogantes sobre la sostenibilidad ecológica de estas tecnologías, un aspecto escasamente abordado en los estudios revisados.

La integración de la IA desde una perspectiva ecológica y educativa también aparece como un vacío importante en la literatura. Pocos estudios analizan el impacto ambiental del uso intensivo de recursos computacionales ni promueven la formación interdisciplinaria para el manejo ético y técnico de estas herramientas. Esto resalta la necesidad de avanzar hacia modelos más sostenibles y democráticos en el uso de la IA en farmacología. En síntesis, si bien los hallazgos de esta revisión sistemática confirman que la IA tiene el potencial de revolucionar el descubrimiento de fármacos, su consolidación depende de una mayor estandarización metodológi-

ca, validación experimental rigurosa y marcos éticos sólidos. La articulación de estos avances con los objetivos de sostenibilidad y equidad en salud será clave para lograr una implementación efectiva y responsable.

Conclusiones

La incorporación de la inteligencia artificial (IA) ha impulsado un avance significativo en áreas estratégicas de la industria farmacéutica. Esta tecnología ha transformado los métodos convencionales de investigación y creación de medicamentos al implementar herramientas computacionales avanzadas. Grandes empresas del sector ya están adoptando estos sistemas innovadores para diseñar tratamientos personalizados. Según un análisis bibliográfico sistemático, la IA y el aprendizaje automático optimizan la rapidez y exactitud en el desarrollo de fármacos. Además de agilizar los procedimientos, estas herramientas permiten reemplazar ciertos ensayos clínicos con modelos simulados, lo que facilita el estudio detallado de moléculas sin experimentación directa, reduciendo así costos y dilemas éticos. Aunque se prevé que la IA revolucionará este campo a largo plazo, aún persisten desafíos como el manejo de datos fragmentados, limitaciones técnicas en hardware y software, entre otros. Superar estos obstáculos podría generalizar el uso de estas tecnologías, marcando el inicio de una etapa transformadora para el sector farmacéutico

De 742 estudios iniciales, 36 cumplieron con los criterios de inclusión. Los hallazgos muestran que el aprendizaje automático, las redes neuronales profundas y los modelos de predicción han permitido reducir tiempos de desarrollo, mejorar la precisión en la identificación de compuestos y disminuir costos. Sin embargo, se identificaron desafíos éticos, regulatorios y técnicos que limitan su implementación generalizada. La IA representa un avance significativo en el descubrimiento farmacológico, con implicaciones educativas en la formación interdisciplinaria y ecológicas en el desarrollo de fármacos

más eficientes y sostenibles. Este estudio contribuye al cuerpo de conocimiento al evidenciar tendencias, vacíos y oportunidades para futuras investigaciones integradas.

Recomendaciones

El principal valor de la inteligencia artificial en el sector farmacéutico radica en su capacidad para optimizar costos y mejorar la productividad. Estudios recientes destacan que diversas compañías han integrado estrategias computacionales de planificación sintética en sus procesos globales, utilizando IA y machine learning (ML) para identificar moléculas objetivo. Este enfoque se ha posicionado como una herramienta clave en el diseño molecular predictivo y la organización eficiente de síntesis de compuestos de bajo peso molecular. Un ejemplo emblemático es el consorcio ML for Pharmaceutical Discovery and Synthesis (MLPDS), liderado por el MIT en colaboración con 13 empresas farmacéuticas y químicas, el cual desarrolla y valida algoritmos basados en datos para la planificación de reacciones químicas. La implementación de modelos predictivos en los flujos de trabajo de síntesis de química médica, su adopción por las empresas asociadas al MLPDS, y las proyecciones innovadoras en esta área, evidencian cómo estas tecnologías están transformando los paradigmas tradicionales de investigación y desarrollo farmacológico.

Bibliografía

- Ahmed, M., Wang, Y., Wu, J., & Zhao, Y. (2024). Artificial intelligence in drug discovery: Progress, challenges and future directions. *Artificial Intelligence in the Life Sciences*, 4, 100100. <https://doi.org/10.1016/j.aillsci.2024.100100>
- Amorim, A. M. B., Piochi, L. F., Gaspar, A. T., Preto, A. J., Rosário-Ferreira, N., & Moreira, I. S. (2024). [Article title]. *Chemical Research in Toxicology*, 37(6), 827–849. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrestox.3c00352>
- Benitez, J. C., Geraud, A., Texier, M., Massard, C., Paci, A., Soria, J. C., & Besse, B. (2021). Late phase 1 studies: concepts and outcomes. *The Lancet. Oncology*, 22(10), e446–e455. [https://doi.org/10.1016/S1470-2045\(21\)00467-8](https://doi.org/10.1016/S1470-2045(21)00467-8)

- Bijral, R., Singh, I., Manhas, J., & Sharma, V. (2021). Exploring Artificial Intelligence in Drug Discovery: A Comprehensive Review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 29, 2513 - 2529. <https://doi.org/10.1007/s11831-021-09661-z>
- Chan, H. C. S., Shan, H., Dahoun, T., Vogel, H., & Yuan, S. (2019). Advancing Drug Discovery via Artificial Intelligence. *Trends in pharmacological sciences*, 40(8), 592–604. <https://doi.org/10.1016/j.tips.2019.06.004>
- Chang, L., Ruiz, P., Ito, T., & Sellers, W. R. (2021). Targeting pan-essential genes in cancer: Challenges and opportunities. *Cancer cell*, 39(4), 466–479. <https://doi.org/10.1016/j.ccell.2020.12.008>
- de Souza Neto LR, Moreira-Filho JT, Neves BJ, Maidana RLBR, Guimarães ACR, Furnham N, Andrade CH y Silva FP Jr (2020) Estrategias in silico para respaldar la optimización de fragmento a plomo en el descubrimiento de fármacos. *Frente. Química*. 8:93. doi: 10.3389/fchem.2020.00093
- Gupta, U., Pranav, A., Kohli, A., Ghosh, S., & Singh, D. (2024). The Contribution of Artificial Intelligence to Drug Discovery: Current Progress and Prospects for the Future (pp. 1–23). Springer Nature. https://doi.org/10.1007/978-981-99-9621-6_1
- Han, R., Yoon, H., Kim, G., Lee, H., & Lee, Y. (2023). Revolutionizing Medicinal Chemistry: The Application of Artificial Intelligence (AI) in Early Drug Discovery. *Pharmaceuticals*, 16. <https://doi.org/10.3390/ph16091259>
- Hasselgren, C., & Oprea, T. (2023). Artificial Intelligence for Drug Discovery: Are We There Yet?. *Annual review of pharmacology and toxicology*. <https://doi.org/10.1146/annurev-pharmtox-040323-040828>
- Jorgensen W. L. (2004). The many roles of computation in drug discovery. *Science (New York, N.Y.)*, 303(5665), 1813–1818. <https://doi.org/10.1126/science.1096361>
- Kamya, P., Ozerov, I. V., Pun, F. W., Tretina, K., Fokina, T., Chen, S., Naumov, V., Long, X., Lin, S., Korzinkin, M., Polykovskiy, D., Aliper, A., Ren, F., & Zhavoronkov, A. (2024). PandaOmics: An AI-Driven Platform for Therapeutic Target and Biomarker Discovery. *Journal of chemical information and modeling*, 64(10), 3961–3969. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c01619>
- Katkar, T. J., Kengar, M. D., Aiwale, P. P., Kamble, M., Jagtap, R., & Patil, A. (2024). Impact of Artificial Intelligence in Drug Discovery and Development. *International Journal of Advanced Research in Science, Communication and Technology*, 27–31. <https://doi.org/10.48175/ijarsct-19103>
- Koutroumpa, N., Papavasileiou, K., Papadiamantis, A., Melagraki, G., & Afantitis, A. (2023). A Systematic Review of Deep Learning Methodologies Used in the Drug Discovery Process with Emphasis on In Vivo Validation. *International Journal of Molecular Sciences*, 24. <https://doi.org/10.3390/ijms24076573>
- Li Q. (2020). Application of Fragment-Based Drug Discovery to Versatile Targets. *Frontiers in molecular biosciences*, 7, 180. <https://doi.org/10.3389/fmolb.2020.00180>
- Lionta, E., Spyrou, G., Vassilatis, D. K., & Cournia, Z. (2014). Structure-based virtual screening for drug discovery: principles, applications and recent advances. *Current topics in medicinal chemistry*, 14(16), 1923–1938. <https://doi.org/10.2174/1568026614666140929124445>
- Mendez, E., & Ghosh, A. (2023). Addressing data bias and model interpretability in AI-powered pharmaceutical research. *arXiv Preprint, arXiv:2309.12177*. <https://arxiv.org/abs/2309.12177>
- Ocaña, A., Pandiella, A., Privat, C. et al. (2025). Integración de la inteligencia artificial en el descubrimiento y desarrollo temprano de fármacos: un enfoque transformador. *Biomark Res* 13 , 45 <https://doi.org/10.1186/s40364-025-00758-2>
- Patel, V., & Shah, M. (2021). A comprehensive study on artificial intelligence and machine learning in drug discovery and drug development. *Intelligent Medicine*. <https://doi.org/10.1016/j.imed.2021.10.001>
- Patnaik, S. K., Sahu, M., Padmasri, B., Damarasingu, P., Nayak, D., Haque, M. A., & Panigrahi, S. K. (2023). Transforming Drug Discovery and Development: The Impact of Artificial Intelligence. <https://doi.org/10.52783/jchr.v13.i4.1303>
- Rask-Andersen, M., Almén, M. S., & Schiöth, H. B. (2011). Trends in the exploitation of novel drug targets. *Nature reviews. Drug discovery*, 10(8), 579–590. <https://doi.org/10.1038/nrd3478>
- Rudolph, J., Settleman, J., & Malek, S. (2021). Emerging Trends in Cancer Drug Discovery-From Drugging the "Undruggable" to Overcoming Resistance. *Cancer discovery*, 11(4), 815–821. <https://doi.org/10.1158/2159-8290.CD-21-0260>
- Sahoo, D., Sarangi, R., Nayak, S., R., & Sayeed, M. (2024). Discovering New Horizons: A Systematic Review on Artificial Intelligence Applications in Drug Discovery and Development. *INTERNATIONAL JOURNAL OF PHARMACEUTICAL QUALITY ASSURANCE*. <https://doi.org/10.25258/ijpqa.15.3.08>

- Sattarov, B., Sekretareva, A., & Kadurin, A. (2024). Ethical and practical limitations in AI-driven drug discovery. *arXiv Preprint*, arXiv:2407.05150. <https://arxiv.org/abs/2407.05150>
- Schneider G. (2018). Automating drug discovery. *Nature reviews. Drug discovery*, 17(2), 97–113. <https://doi.org/10.1038/nrd.2017.232>
- Stokes, J. M., Yang, K., Swanson, K., Jin, W., Cubillos-Ruiz, A., Donghia, N. M., ... & Collins, J. J. (2020). A deep learning approach to antibiotic discovery. *Cell*, 180(4), 688–702.e13. <https://doi.org/10.1016/j.cell.2020.01.021>
- Topol E. J. (2019). High-performance medicine: the convergence of human and artificial intelligence. *Nature medicine*, 25(1), 44–56. <https://doi.org/10.1038/s41591-018-0300-7>
- Tyagi, E., Kumari, P., Prakash, A., & Bhuyan, R. (2025). Revolutionizing Anti-Cancer Drug Discovery: The Role of Artificial Intelligence. *International Journal of Bioinformatics and Intelligent Computing*. <https://doi.org/10.61797/ijbic.v3i2.323>
- Vijayan, R., Kihlberg, J., Cross, J., & Poongavanam, V. (2021). Enhancing preclinical drug discovery with artificial intelligence. *Drug discovery today*. <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2021.11.023>
- Vinuesa, R., Azizpour, H., Leite, I., Balaam, M., Dignum, V., Domisch, S., ... & Fuso Nerini, F. (2020). The role of artificial intelligence in achieving the Sustainable Development Goals. *Nature Communications*, 11, 233. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-14108-y>
- Visan, A. I., & Negut, I. (2024). Integrating Artificial Intelligence for Drug Discovery in the Context of Revolutionizing Drug Delivery. *Life (Basel, Switzerland)*, 14(2), 233. <https://doi.org/10.3390/life14020233>
- Vora, L., Gholap, A., Jetha, K., Thakur, R., Solanki, H., & Chavda, V. (2023). Artificial Intelligence in Pharmaceutical Technology and Drug Delivery Design. *Pharmaceutics*, 15. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15071916>.
- 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), 844–853. <https://doi.org/10.1001/jama.2020.1166>
- Yang, Y., Chen, C., Gao, Y., & Zhang, H. (2023). Artificial intelligence in drug discovery: Applications and perspectives. *ChemBioChem*, 24(21), e202300816. <https://doi.org/10.1002/cbic.202300816>
- Yidan Tang, Rocco Moretti y Jens Meiler, (2024). Avances recientes en el diseño automatizado de fármacos de novo basado en la estructura Revista de información y modelado químico 64 (6), 1794-1805 DOI: 10.1021/acs.jcim.4c00247
- Zhu, H. (2020). Big Data and Artificial Intelligence Modeling for Drug Discovery. *Annual review of pharmacology and toxicology*. <https://doi.org/10.1146/annurev-pharmtox-010919-023324>

CITAR ESTE ARTICULO:

Petroche Torres, D. J., Camino Valdez, J. A., Ramírez Reyes, R. A., & Lema Choéz, E. A. (2025). Impacto de la inteligencia artificial en el descubrimiento de nuevos fármacos. Una revisión sistemática. *RECIMUNDO*, 9(2), 201–213. [https://doi.org/10.26820/recimundo/9.\(2\).abril.2025.201-213](https://doi.org/10.26820/recimundo/9.(2).abril.2025.201-213)



CREATIVE COMMONS RECONOCIMIENTO-NOCOMERCIAL-COMPARTIRIGUAL 4.0.

Tabla 1. Estudios sobre IA en Descubrimiento de Fármacos

N°	Autor(es) (año)	País / Región	Tipo de IA utilizada	Objetivo del estudio	Diseño metodológico	Área terapéutica	Fase del descubrimiento abordada	Resultados / Hallazgos clave	Limitaciones reportadas
1	Tang et al. (2024)	Internacional	IA estructural	Avances en diseño de fármacos de novo	Revisión narrativa	General	Diseño molecular	Mejora precisión en estructuras	Validación experimental necesaria
2	Ocaña et al. (2025)	Europa	IA integrativa	IA en desarrollo temprano de fármacos	Revisión sistemática	Oncológica	Etapas iniciales	Reducción de costos y tiempo	Métodos poco estandarizados
3	Li (2020)	China	Fragment-Based	Aplicación de descubrimiento basado en fragmentos	Estudio técnico	Multitarget	Optimización de objetivos	IA versátil para targets diversos	Limitada a targets conocidos
4	de Souza Neto et al. (2020)	Brasil	In silico tools	Optimización de fragmento a plomo	Revisión técnica	General	Etapas de optimización	Eficiencia en predicción computacional	Requiere pruebas experimentales
5	Schneider (2018)	Alemania	Automatización IA	Automatización del descubrimiento de fármacos	Opinión experta	General	Todo el ciclo	Automatización acelera descubrimiento	Ética y reproducibilidad
6	Jorgensen (2004)	EE. UU.	Computación avanzada	Rol de computación en el descubrimiento	Artículo teórico	General	Modelado y simulación	Computación fundamental para diseño	Requiere integración experimental
7	Amorim et al. (2024)	Portugal	IA toxicológica	IA en investigación toxicológica	Estudio experimental	Toxicológica	Predicción de toxicidad	IA mejora predicción de riesgos	Dependencia de bases de datos
8	Lionta et al. (2014)	Grecia	Virtual screening	Principios y avances del screening virtual	Revisión narrativa	General	Filtro de compuestos	Reducción de candidatos inefectivos	Falsos positivos
9	Kamya et al. (2024)	Internacional	PandaOmics	Plataforma IA para biomarcadores	Desarrollo de plataforma	General	Descubrimiento de biomarcadores	Alta precisión y escalabilidad	Dependencia de calidad de datos
10	Han et al. (2023)	Corea del Sur	IA general	Aplicación en etapas tempranas	Revisión integradora	Medicina general	Descubrimiento temprano	IA mejora eficiencia del proceso	Barreras regulatorias y éticas
11	Visan & Negut (2024)	Rumania	IA delivery	IA en delivery y formulación	Estudio técnico	Tecnología farmacéutica	Liberación de fármacos	IA optimiza diseño de entrega	Falta validación clínica
12	Topol (2019)	EE. UU.	IA médica	Convergencia IA y medicina	Ensayo crítico	Medicina personalizada	Integración general	IA potencia medicina personalizada	Privacidad y seguridad
13	Chang et al. (2021)	EE. UU.	IA oncológica	Genes pan-esenciales en cáncer	Estudio clínico	Oncológica	Identificación de targets	IA identifica targets clave	Complejidad genética tumoral
14	Rudolph et al. (2021)	EE. UU.	IA para resistencia	Nuevas tendencias oncológicas	Revisión narrativa	Oncológica	Drugging y resistencia	Enfoca targets difíciles	Necesidad de ensayos clínicos
15	Chan et al. (2019)	China	IA farmacológica	Avance en descubrimiento IA	Revisión general	General	Todo el proceso	IA acelera investigación	Cuestiones de interpretación
16	Benitez et al. (2021)	Francia	IA fase I	Estudios tardíos de fase I	Revisión clínica	Oncológica	Fase clínica inicial	Mejora diseño y predicción	Variabilidad en respuesta
17	Rask-Andersen et al. (2011)	Suecia	Minería de datos	Explotación de blancos novedosos	Revisión	General	Identificación de blancos	IA descubre dianas ocultas	Necesidad de ensayos extensos
18	Wouters et al. (2020)	Internacional	Modelos económicos	Costos de I+D en nuevos medicamentos	Análisis cuantitativo	General	Costeo de desarrollo	IA podría optimizar inversión	Altos costos aún persistentes
19	Bijral et al. (2021)	India	IA general	Aplicaciones de IA en descubrimiento	Revisión exhaustiva	General	Todo el proceso	IA mejora éxito y eficiencia	Falta de protocolos estándar
20	Patel & Shah (2021)	India	IA y ML	IA y ML en desarrollo	Revisión técnica	General	Todo el ciclo	Modelos predictivos útiles	Retos en interpretación
21	Han et al. (2023)	Corea del Sur	IA medicinal	Revisión sobre IA y química medicinal	Revisión narrativa	Medicina general	Etapas tempranas	IA mejora diseño racional	Necesidad de integración en práctica
22	Hasselgren & Oprea (2023)	Internacional	Evaluación crítica	¿Está lista la IA para descubrimiento?	Revisión crítica	General	Todo el ciclo	Avances pero retos persistentes	Validación insuficiente
23	Vora et al. (2023)	India	IA en farmacotecnia	Diseño de delivery con IA	Revisión temática	Tecnología farmacéutica	Diseño de formulaciones	IA permite formulaciones óptimas	Falta de integración práctica
24	Sahoo et al. (2024)	India	IA general	Revisión sistemática de IA	Revisión sistemática	Multidisciplinaria	Todo el ciclo	Mejora resultados del proceso	Falta ensayos clínicos
25	Vijayan et al. (2021)	Internacional	IA preclínica	IA en descubrimiento preclínico	Revisión técnica	Preclínica	Screening y validación	IA acelera evaluación preclínica	Desafíos de generalización
26	Tyagi et al. (2025)	Internacional	IA oncológica	IA en fármacos anticáncer	Revisión crítica	Oncológica	Diseño y optimización	IA identifica compuestos activos	Resultados aún experimentales
27	Zhu (2020)	EE. UU.	Big data + IA	Modelado con big data en descubrimiento	Revisión técnica	General	Modelado computacional	Grandes datasets aumentan precisión	Complejidad del manejo de datos

28	Koutroumpa et al. (2023)	Europa	Deep Learning	Enfoque sistemático con validación in vivo	Revisión sistemática	General	Validación preclínica	Éxitos en modelos animales	Poca validación clínica
29	Ahmed et al. (2024)	China	IA general	Progreso, desafíos y futuro de IA	Análisis crítico	General	Varias fases	IA promete transformación del sector	Regulaciones, ética, acceso
30	Yang et al. (2023)	China	IA farmacéutica	Aplicaciones y perspectivas	Revisión narrativa	General	Todo el proceso	IA clave en innovación farmacéutica	Complejidad en validación externa
31	Stokes et al. (2020)	EE. UU.	Deep learning	IA para descubrir antibióticos	Estudio experimental	Antibióticos	Screening	IA identificó nuevo antibiótico eficaz	Requiere pruebas clínicas extensas
32	Sattarov et al. (2024)	Rusia	IA general	Ética y limitaciones prácticas	Preprint reflexivo	General	Ética e implementación	Señala sesgos, acceso desigual	Riesgos éticos serios
33	Mendez & Ghosh (2023)	EE. UU.	IA explicable	Interpretabilidad y sesgo	Preprint técnico	General	Modelado predictivo	Proponen frameworks para mejorar transparencia	Implementación aún limitada
34	Vinuesa et al. (2020)	Internacional	IA y sostenibilidad	Rol de IA en Objetivos de Desarrollo Sostenible	Análisis global	Multisectorial	Impacto en salud global	IA puede contribuir a ODS	Falta de integración efectiva