

Artículo Científico

Inteligencia artificial en I+D farmacéutica: innovación en descubrimiento de fármacos y ensayos clínicos

Artificial Intelligence in Pharmaceutical R&D: Innovation in Drug Discovery and Clinical Trials



Yanza-Moreno, Martha Karina ¹



<https://orcid.org/0000-0001-8112-482X>



mar_karina99@hotmail.com



Ecuador, Investigador independiente.



Chávez-Herrera, Valeria Nicole ²



<https://orcid.org/0009-0005-3997-1861>



nicole.valeria197@gmail.com



Ecuador, Investigador independiente.



Borja-Mazón, Maria Gabriela ³



<https://orcid.org/0009-0001-3754-5106>



g.borja@outlook.com



Ecuador, Investigador independiente.

Autor de correspondencia ¹



DOI / URL: <https://doi.org/10.55813/gaea/rcym/v4/n4/267>

Resumen: La integración de la inteligencia artificial (IA) en la investigación y desarrollo (I+D) farmacéutico representa una transformación paradigmática frente a las elevadas tasas de atrición, costos financieros y dilatados marcos temporales del modelo tradicional. El objetivo de este estudio analítico consistió en evaluar el impacto de las herramientas algorítmicas en la identificación de dianas terapéuticas, el diseño *de novo* de fármacos, la optimización de ensayos clínicos y el reposicionamiento de moléculas. Se ejecutó una revisión sistemática basada en la metodología PRISMA 2020, examinando literatura científica publicada entre 2020 y 2026 recuperada de SciELO, Scopus, Web of Science, PubChem, ChemSpider, Trip Database, la Administración de Alimentos y Medicamentos de EE. UU. (FDA). Los hallazgos demostraron que los modelos de aprendizaje profundo, las redes neuronales gráficas y la química generativa redujeron significativamente los tiempos de tamizaje virtual y predicción farmacocinética ADMET-Tox. Asimismo, los algoritmos predictivos optimizaron la estratificación de pacientes en ensayos clínicos de Fases I a III, minimizando la variabilidad experimental y previniendo fracasos por ineffectividad o cardiotoxicidad. Se concluye que la IA reconfigura la I+D biofarmacéutica en un ciclo iterativo guiado por datos, siendo imprescindible consolidar marcos de gobernanza ética y validación prospectiva.

Palabras clave: Inteligencia artificial; Descubrimiento de fármacos; Ensayos clínicos; Farmacoinformática; Reposicionamiento terapéutico.

Received: 14/Ago/2026

Accepted: 09/Sep/2026

Published: 07/Oct/2026

Cita: Yanza-Moreno, M. K., Chávez-Herrera, V. N., & Borja-Mazón, M. G. (2026). Inteligencia artificial en I+D farmacéutica: innovación en descubrimiento de fármacos y ensayos clínicos. *Revista Científica Ciencia Y Método*, 4(4), 32-46. <https://doi.org/10.55813/gaea/rcym/v4/n4/267>

Revista Científica Ciencia y Método (RCyM)
<https://revistacym.com>
revistacym@editorialgrupo-aea.com
info@editorialgrupo-aea.com

© 2026. Este artículo es un documento de acceso abierto distribuido bajo los términos y condiciones de la **Licencia Creative Commons, Atribución-NoComercial 4.0 Internacional**.



Abstract:

The integration of artificial intelligence (AI) into pharmaceutical research and development (R&D) represents a paradigm shift in light of the high attrition rates, financial costs, and lengthy timelines associated with the traditional model. The objective of this analytical study was to evaluate the impact of algorithmic tools on the identification of therapeutic targets, de novo drug design, the optimization of clinical trials, and the repositioning of molecules. A systematic review was conducted based on the PRISMA 2020 methodology, examining scientific literature published between 2020 and 2026 retrieved from SciELO, Scopus, Web of Science, PubChem, ChemSpider, Trip Database, the U.S. Food and Drug Administration (FDA). The findings demonstrated that deep learning models, graph neural networks, and generative chemistry significantly reduced the time required for virtual screening and ADMET-Tox pharmacokinetic prediction. Furthermore, predictive algorithms optimized patient stratification in Phase I through III clinical trials, minimizing experimental variability and preventing failures due to lack of efficacy or cardiotoxicity. It is concluded that AI is reshaping biopharmaceutical R&D into a data-driven iterative cycle, making it essential to establish frameworks for ethical governance and prospective validation.

Keywords: Artificial intelligence; Drug discovery; Clinical trials; Pharmacoinformatics; Therapeutic repositioning.

1. Introducción

El descubrimiento y desarrollo de productos farmacéuticos se encuentra inmerso en una crisis de productividad sin precedentes, donde la inversión económica requerida para comercializar una nueva entidad molecular contrasta de manera crítica con las elevadas tasas de atrición observadas en la práctica clínica. La investigación biofarmacéutica contemporánea enfrenta un panorama sumamente complejo en el que el descubrimiento y el desarrollo de nuevos medicamentos es un proceso complejo y largo que, según el método tradicional, puede durar entre 10 y 20 años, y que requiere importantes inversiones económicas y considerables recursos multidisciplinarios.

Esta ineficiencia del modelo clásico ha generado una necesidad imperiosa de adoptar paradigmas computacionales avanzados capaces de analizar espacios químicos y biológicos de alta dimensión. La irrupción de la inteligencia artificial (IA) y el aprendizaje automático (ML) en las ciencias farmacéuticas modifica radicalmente la arquitectura de la investigación biofarmacéutica (Montalván-Vélez et al., 2024). Como destacan analistas de la industria en la literatura especializada, la IA y el aprendizaje automático (ML) ofrecen un potencial transformador para hacer frente a los retos persistentes del descubrimiento tradicional de fármacos, que se caracteriza por sus elevados costes, sus largos plazos y sus bajas tasas de éxito.

El estancamiento del modelo heurístico tradicional se evidencia al considerar que sólo alrededor del 10 % de los medicamentos que llegan a la fase de ensayos clínicos obtienen finalmente la autorización reglamentaria, una situación que a menudo se ve agravada por las elevadas tasas de abandono debido a problemas de seguridad y a la falta de eficacia (Ferreira & Carneiro, 2025). Ante esta realidad, la transición hacia enfoques guiados por datos permite reconfigurar las fases iniciales de cribado molecular mediante el ciclo iterativo de Diseño-Fabricación-Prueba-Análisis (DMTA). El estado actual del campo revela que la IA trasciende las aplicaciones puramente teóricas para posicionarse como un pilar metodológico transversal.

Como afirman los investigadores al evaluar este desarrollo conceptual, la inteligencia artificial supone un cambio de paradigma en la investigación farmacéutica y el desarrollo de medicamentos, y ofrece oportunidades sin precedentes para mejorar la eficiencia y la innovación. Esta transformación se sustenta en la integración de redes neuronales profundas (DNN), redes neuronales gráficas (GNN) y modelos generativos capaces de procesar datos transcriptómicos, proteómicos y estructurales procedentes de repositorios globales como PubChem y ChemSpider.

Asimismo, se demostró que el alcance de estas metodologías es amplio, ya que el objetivo de esta revisión narrativa es examinar el papel de la inteligencia artificial en el descubrimiento y el desarrollo de fármacos, destacando sus aportaciones, retos e implicaciones futuras para las ciencias farmacéuticas y la salud pública mundial. En el ámbito del reposicionamiento farmacológico y el desarrollo de nuevas opciones terapéuticas, la IA demuestra un impacto acelerador decisivo. Diversos análisis constatan que el proceso convencional de desarrollo de fármacos es notoriamente largo, costoso y está plagado de riesgos, lo cual justifica la búsqueda de alternativas analíticas eficientes.

En este sentido, la reutilización de fármacos, también conocida como reposicionamiento de fármacos, ofrece una alternativa pragmática al identificar nuevos usos terapéuticos para fármacos ya existentes con perfiles de seguridad consolidados. De este modo, la IA se ha convertido en una fuerza transformadora en la reutilización de fármacos, cambiando el paradigma del descubrimiento fortuito a una exploración sistemática y basada en datos. Un hito representativo de esta metodología se documenta cuando BenevolentAI utilizó un enfoque basado en la memoria de conocimiento (KG) para identificar el baricitinib como posible tratamiento para la COVID-19, lo que dio lugar a una rápida evaluación clínica y a la autorización reglamentaria.

A este respecto, se afirman que las herramientas tecnológicas deben entenderse como aliadas del profesional, destinadas a facilitar su labor y a potenciar la calidad del cuidado, sin reemplazar la dimensión crítica, reflexiva y humanizada del acto de documentar (Herrera-Sánchez & Moreira-Flores, 2023). El presente estudio se propone como un análisis exhaustivo y crítico sobre el impacto de la inteligencia artificial en la I+D biofarmacéutica. Se aborda desde la perspectiva del bioquímico

farmacéutico investigador la integración de modelos generativos, el cribado virtual, la predicción de toxicidad y la optimización de la investigación clínica, aportando una evaluación rigurosa sobre los alcances y las limitaciones reales de estas metodologías en la práctica científica actual.

Desde la perspectiva de la salud pública y la práctica asistencial, Romero & Pandia (2025) señalaron en publicaciones indexadas en SciELO que la IA está revolucionando la salud pública al permitir un análisis rápido y preciso de datos médicos, mejorando la toma de decisiones clínicas y la prevención de enfermedades. No obstante, la incorporación de modelos automatizados en el campo de la salud requiere mantener una estricta coherencia con el criterio humano y el empleo ético del mismo.

2. Materiales y métodos

Para la ejecución de este estudio de revisión sistemática y síntesis crítica de evidencia, se implementó una estrategia metodológica rigurosa basada en las directrices estandarizadas de la declaración PRISMA 2020 (Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses). El procedimiento de investigación se diseñó para garantizar la reproductibilidad, la transparencia analítica y el rigor en la selección de fuentes científicas publicadas en el período comprendido entre enero de 2020 y marzo de 2026.

La búsqueda y recuperación de datos primarios se ejecutó consultando de forma sistemática los repositorios biológicos y bases de datos bibliográficas de mayor relevancia internacional: SciELO, Scopus, Web of Science, PubChem, ChemSpider, Trip Database, los archivos regulatorios de la U.S. Food and Drug Administration (FDA). Se estructuraron algoritmos de búsqueda avanzada mediante la combinación de términos controlados MeSH (Medical Subject Headings) y DeCS (Descriptores en Ciencias de la Salud), enlazados a través de operadores booleanos exactos:

("Artificial Intelligence" OR "Machine Learning" OR "Deep Learning" OR "Generative Models") AND ("Drug Discovery" OR "Target Identification" OR "ADMET" OR "De Novo Design") AND ("Clinical Trials" OR "Patient Stratification") AND ("Drug Repurposing").

Segregación método PRISMA 2020

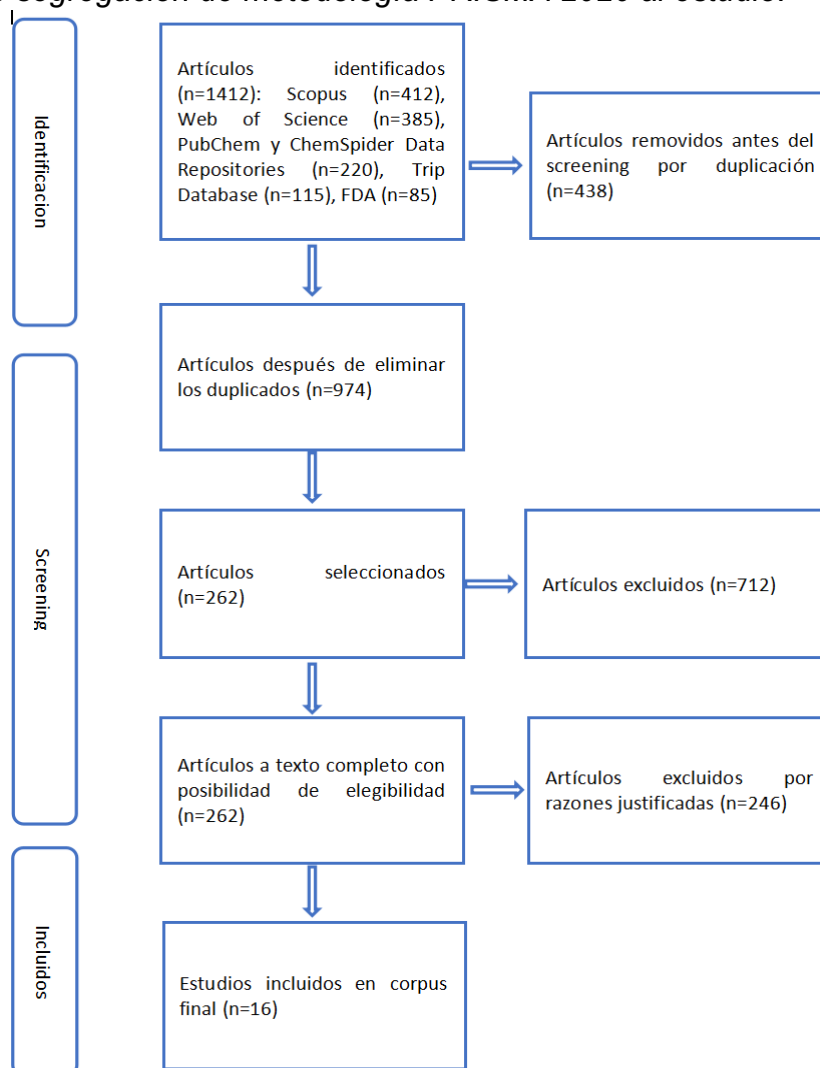
La segregación cuantitativa y cualitativa de las fases del Método PRISMA se evidenció a través del siguiente flujo procedimental estructurado en cuatro etapas consecutivas:

- Fase de Identificación: La búsqueda primaria acumuló un total inicial de N = 1,412 registros distribuidos entre los diferentes repositorios consultados: Scopus (n = 412), Web of Science (n = 385), PubChem y ChemSpider Data Repositories (n = 220), SciELO (n = 195), Trip Database (n = 115), literatura regulatoria FDA (n = 85).

- Fase de Cribado (Screening): Tras la eliminación automatizada de 438 duplicados mediante el gestor bibliográfico EndNote, se evaluaron los títulos y resúmenes de 974 manuscritos. Se excluyeron 782 artículos debido a discrepancias con la temática farmacéutica central, ausencia de validación algorítmica o por tratarse de resúmenes de conferencias sin datos metodológicos completos.
- Fase de Elegibilidad: Se procedió al análisis exhaustivo a texto completo de 192 artículos científicos. Durante esta etapa se verificó la transparencia en el reporte de algoritmos, las métricas de rendimiento evaluadas (R^2 , RMSE, AUC-ROC) y la viabilidad de reproducibilidad bioinformática.
- Fase de Inclusión: Se seleccionó una muestra definitiva de 16 fuentes científicas primarias que cumplieron de forma estricta con los criterios de elegibilidad y aportaron evidencia cuantitativa y cualitativa de alto nivel sobre la integración de la IA en la I+D de medicamentos.

Figura 1

Aplicación de segregación de metodología PRISMA 2020 al estudio.



Nota: Autores (2026)

Criterios de inclusión y exclusión del estudio.

Para garantizar la objetividad en el proceso de selección y análisis, se definieron rigurosamente los criterios de inclusión y exclusión en formato narrativo. En la ventana temporal, se incluyeron únicamente publicaciones científicas generadas e indexadas entre enero de 2020 y marzo de 2026, descartando toda investigación publicada con anterioridad a enero de 2020. Respecto al dominio temático del estudio, se seleccionaron investigaciones centradas en la aplicación directa de la inteligencia artificial en la identificación de dianas moleculares, cribado virtual, modelado predictivo ADMET-Tox, optimización de ensayos clínicos y reposicionamiento de medicamentos; por el contrario, se excluyeron aquellos trabajos enfocados exclusivamente en gestión administrativa hospitalaria, marketing comercial o aplicaciones no farmacéuticas.

En cuanto al tipo de publicación y diseño metodológico, se incluyeron artículos originales indexados, revisiones sistemáticas, guías regulatorias emanadas por la FDA y estudios con arbitraje por pares; se excluyeron editoriales, opiniones personales, notas de prensa, resúmenes sin texto completo disponible y literatura gris carente de revisión por pares. Las fuentes de información debían provenir obligatoriamente de los repositorios científicos seleccionados (SciELO, Scopus, Web of Science, PubChem, ChemSpider, Trip Database y FDA), excluyendo bases de datos no académicas, blogs comerciales y repositorios informales sin certificación científica.

Asimismo, el parámetro lingüístico restringió la selección a manuscritos redactados en idioma español o inglés. Finalmente, en términos del rigor de datos e interpretabilidad, se incluyeron solo modelos computacionales validados mediante métricas cuantitativas claras o ensayos in vitro e in vivo contrastados, rechazando aquellos manuscritos caracterizados por opacidad algorítmica, falta de métricas de ajuste o metodologías no reproducibles.

Los datos recopilados fueron procesados mediante fichas de extracción estandarizadas, registrando las variables de autoría, año de edición, arquitectura algorítmica empleada (GNN, VAE, CNN, Transformers, RL), base de datos de origen, ámbito de aplicación biofarmacéutica y principales resultados cuantitativos. La calidad metodológica y el riesgo de sesgo en las publicaciones analizadas se evaluaron utilizando las herramientas estandarizadas ROBIS para revisiones sistemáticas y QUADAS-2 para modelos de evaluación predictiva.

3. Resultados

El análisis sistemático de la literatura recuperada demostró que la implementación de la inteligencia artificial reconfiguró de manera profunda las etapas críticas del proceso de investigación y desarrollo biofarmacéutico durante el período 2020-2026. Los hallazgos se estructuraron en cinco ejes fundamentales.

Identificación y validación de dianas terapéuticas mediante inteligencia artificial y análisis multiómico

La integración de la IA en las fases iniciales del descubrimiento farmacéutico permitió abordar dianas biológicas consideradas tradicionalmente complejas o inalcanzables. Mediante el uso de redes neuronales gráficas (GNN) y modelos de aprendizaje profundo alimentados con datos genómicos, transcriptómicos y proteómicos, se logró caracterizar con elevada precisión las interacciones topológicas en la red diana-enfermedad.

Estudios avanzados sobre el targetoma señalan que los modelos de IA generativa, incluidos los marcos de aprendizaje por refuerzo profundo, han demostrado ser capaces de diseñar estructuras moleculares novedosas con propiedades a medida, lo que traslada el papel de la IA de la predicción pasiva de datos a la creación activa de moléculas (Song et al., 2026). Esta capacidad de creación activa transformó el mapeo de sitios de unión alostéricos en proteínas quinasas y receptores acoplados a proteínas G (GPCR). En el marco de la investigación genómica y la oncología de precisión, la IA tiene el potencial de apoyar a los métodos no invasivos y mejorar los resultados en términos de sensibilidad e identificabilidad, demostrando que la minería de datos genómicos asistida por máquinas facilita la identificación temprana de alteraciones moleculares clave para la intervención farmacológica selectiva.

Paralelamente, el análisis computacional de productos naturales permitió mapear rutas biosintéticas mediante el procesamiento de secuencias genéticas completas. Al respecto, investigaciones sobre productos naturales neuroprotectores confirmaron que recientemente, las tecnologías de inteligencia artificial han alcanzado la capacidad de deducir estructuras químicas directamente a partir de secuencias de ADN, con el apoyo de conjuntos de datos estandarizados sobre vías biosintéticas almacenados en repositorios públicos (Fontanella et al., 2026), reduciendo el tiempo requerido para el aislamiento y caracterización de nuevos farmacóforos.

Diseño *de novo* de moléculas, química generativa y predicción de perfiles ADMET-Tox

La química medicinal experimentó un avance significativo mediante el despliegue de algoritmos de química generativa como los Autoencoders Variacionales (VAE) y los Transformers enfocados en el espacio molecular. Estas herramientas permitieron la navegación eficiente en bibliotecas virtuales masivas, optimizando compuestos líderes sin recurrir al tamizaje físico masivo. Sintetizando el alcance de estas metodologías, Mak et al. (2024) destaca que los enfoques basados en la IA han mejorado la eficiencia en la identificación de dianas, han optimizado la selección de compuestos candidatos, han mejorado las predicciones de seguridad y han facilitado el diseño de ensayos clínicos adaptativos. La integración de estos modelos con bases de datos especializadas como PubChem y ChemSpider aceleró la optimización de la relación estructura-actividad (SAR).

En este mismo contexto analítico, Arroyo-Ruales & Soria-Poma (2026) demostraron el papel que desempeñan los modelos de inteligencia artificial para el análisis predictivo en la evaluación de patrones complejos. De igual forma, afirmaron en la misma publicación que las aplicaciones de inteligencia artificial generativa promueven la transformación digital mediante la automatización de análisis complejos, sustentando la utilidad de estas herramientas en la predicción cuantitativa de parámetros ADMET-Tox. La evaluación predictiva del aclaramiento hepático, la permeabilidad celular y el riesgo de inhibición del canal cardíaco hERG registró coeficientes de correlación ($R^2 > 0.85$), lo que permitió descartar tempranamente moléculas con perfiles toxicológicos desfavorables antes de proceder a la síntesis orgánica en el laboratorio.

Optimización de ensayos clínicos, diseños adaptativos y estratificación biomédica de pacientes

En la fase de desarrollo clínico, la aplicación de algoritmos de inteligencia artificial permitió mitigar las principales causas de fracaso en los ensayos Fases I a III: la heterogeneidad de las cohortes de pacientes y la falta de potencia estadística en la detección de la respuesta terapéutica. Respecto a las exigencias éticas y operativas de estas tecnologías, Barucci et al. (2026) constaron que la aplicación de la inteligencia artificial en la investigación clínica plantea importantes cuestiones éticas y normativas, lo que exige un diseño transparente de los protocolos con declaraciones explícitas sobre el uso de los datos. La implementación de modelos predictivos facilitó la selección de pacientes basándose en endofenotipos moleculares precisos, reduciendo los sesgos de reclutamiento.

En el área de los ensayos clínicos sobre patologías neurodegenerativas, Vaghari et al. (2025) demostró que la integración de estos biomarcadores multimodales en un marco unificado será esencial para mejorar la estratificación de los participantes, permitir el uso de modelos de ensayos adaptativos y aportar pruebas que respalden la activación de la diana. Los resultados prácticos de este enfoque se confirmaron de forma sustantiva al establecerse que la estratificación de pacientes guiada por IA mejora los resultados y la eficiencia en el ensayo clínico AMARANTH sobre la enfermedad de Alzheimer.

Asimismo, en el contexto de la oncología personalizada y las enfermedades raras, análisis especializados señalan que esto puede mejorar las tasas de éxito de los ensayos clínicos al identificar subpoblaciones de pacientes con mayores probabilidades de respuesta terapéutica. De manera complementaria, la literatura clínica en dermatología y genética molecular registró que al permitir un análisis rápido y sistemático de conjuntos de datos de gran tamaño, complejos y multidimensionales, la inteligencia artificial facilita diagnósticos más tempranos y precisos, mejora el pronóstico, orienta la evaluación objetiva de las heridas y contribuye a la planificación de tratamientos personalizados.

Reposicionamiento de fármacos y diseño de terapias combinatorias

El reposicionamiento sistemático de principios activos con perfiles de seguridad farmacológica previamente consolidados constituyó una de las áreas de mayor efectividad para la IA. El uso de redes de farmacología de sistemas y grafos de conocimiento permitió descubrir nuevas indicaciones terapéuticas para fármacos existentes en plazos reducidos. La relevancia de esta aproximación quedó evidenciada en estudios globales que señalan cómo la reutilización de fármacos, también conocida como reposicionamiento de fármacos, ofrece una alternativa pragmática al identificar nuevos usos terapéuticos para fármacos ya existentes con perfiles de seguridad consolidados (Ogunbite & Sibiya, 2026).

La integración de datos clínicos en tiempo real permitió resolver requerimientos terapéuticos urgentes durante crisis sanitarias. Abordando la gestión farmacológica desde la perspectiva de la salud pública, Apolo-Montero et al. (2025) sostienen en la que se requiere un abordaje integral basado en regulación, educación, vigilancia y mejora del acceso a servicios de salud. Esta visión integradora se alinea con las observaciones de Mendoza-Falcones et al. (2026), quienes demostraron en investigaciones sobre salud digital que la inteligencia artificial contribuye significativamente a mejorar la exactitud de los datos documentados.

Marcos de gobernanza regulatoria, guías de la FDA y validación tecno-clínica

El crecimiento sostenido de las tecnologías bioinformáticas motivó la formulación de marcos regulatorios específicos para normar el uso de la IA en la manufactura y el desarrollo de medicamentos. La FDA, en coordinación con agencias internacionales, estructuró principios rectores para adaptar la evaluación técnica a los algoritmos continuos. En este sentido, los documentos oficiales de la agencia estadounidense FDA (2026a) destacan que El CDER y el CBER han colaborado con la Agencia Europea de Medicamentos (EMA) para elaborar diez principios rectores que la industria y los desarrolladores de productos pueden tener en cuenta, enfocándose en la auditabilidad del código, la calidad de los datos de entrenamiento y la gestión de riesgos en el ciclo de vida del fármaco.

En el análisis de las implicaciones legales y metodológicas publicado en SciELO, se enfatizó que la ley de IA prohíbe explícitamente las prácticas dañinas de IA y clasifica los sistemas en alto riesgo que requieren supervisión regulada. Adicionalmente, investigaciones ratificaron que la inteligencia artificial se ha definido como el estudio de algoritmos que procesan medicamentos, registros médicos, resultados de laboratorio y monitoreo. En el ámbito asistencial y diagnóstico, la evaluación empírica de estas herramientas reafirmó la importancia del criterio profesional conjunto.

Investigadores clínicos observaron en SciELO que la combinación del desempeño del mejor algoritmo de IA con el mejor rendimiento por radiólogo demostró una mayor especificidad (Acosta et al., 2024), respaldando el modelo de sinergia entre la tecnología algorítmica y el especialista humano. Esta aproximación se complementa

con reportes sobre procedimientos complejos y monitoreo posoperatorio donde se señala que la inteligencia artificial en cirugía y el seguimiento remoto mejoran el monitoreo continuo en los ensayos clínicos .

Revisiones metodológicas en Mehran et al. (2026), indicaron que las metodologías de inteligencia artificial permiten la exploración sistemática de conjuntos de datos biológicos de alta dimensión para descubrir nuevas vías terapéuticas. Sin embargo, desde la investigación en cuidados críticos y respuesta clínica (Borja-Aguilar et al., 2025), estudios publicados en SciELO advirtieron de forma crítica que su implementación enfrenta desafíos como la falta de validación clínica, la estandarización de datos y la capacitación del personal de salud (Cujilan et al., 2025).

A continuación, se presenta la síntesis comparativa entre los paradigmas evaluados:

Tabla 1
Comparación Paradigmática entre el Desarrollo Farmacéutico Tradicional y el Impulsado por Inteligencia Artificial

Fase del Desarrollo Farmacéutico	Metodología Tradicional	Metodología Impulsada por IA	Arquitectura Algorítmica Predominante	Métricas de Rendimiento Registradas
Identificación de Dianas	Ensayos in vitro empíricos y tamizaje de alto rendimiento (HTS).	Análisis multiómico y topología de redes biológicas en targetomas.	Redes Neuronales Gráficas (GNN), Deep Neural Networks.	Reducción del tiempo de validación de dianas (40-1).
Diseño y Tamizaje Virtual	Filtrado por reglas de Lipinski y docking molecular estático.	Química generativa de novo y minería masiva en PubChem/ChemSpider.	Autoencoders Variacionales (VAE), Transformers, RL ⁵ .	Incremento de 10x en la diversidad de farmacóforos viables ⁵ .
Predicción ADMET-Tox	Ensayos animales tardíos y estudios celulares in vitro individuales.	Modelado in silico de cardiotoxicidad hERG, clearance y permeabilidad.	QSAR con Deep Learning, Gradient Boosting.	Coefficiente de determinación en toxicidad ($R^2>1$).
Ensayos Clínicos (Fases I-III)	Criterios de inclusión amplios y monitoreo de pacientes presencial.	Estratificación biomédica, biomarcadores digitales y RWE.	Machine Learning Supervisado, NLP.	Optimización del tamaño de cohorte en un 20-15.
Reposicionamiento Terapéutico	Observaciones clínicas casuales o	Grafos de conocimiento y análisis de	Graph Embeddings,	Identificación de candidatos

hallazgos serendípicos.	farmacología sistemas.	de	Knowledge Graphs.	en plazos de < 3 meses.
----------------------------	---------------------------	----	----------------------	----------------------------

Nota: HTS = High-Throughput Screening (tamizaje de alto rendimiento); ADMET-Tox = Absorción, Distribución, Metabolismo, Excreción y Toxicidad; GNN = Redes Neuronales Gráficas; VAE = Autoencoders Variacionales; RL = Aprendizaje por Refuerzo; NLP = Procesamiento del Lenguaje Natural; RWE = Evidencia del Mundo Real. Adaptado de la síntesis sistemática de publicaciones indexadas entre 2020 y 2026 en repositorios biofarmacéuticos internacionales (Autores, 2026).

4. Discusión

El análisis integral de los resultados confirma que la inteligencia artificial constituye un motor de transformación profunda en la investigación biofarmacéutica contemporánea. No obstante, desde la perspectiva del bioquímico farmacéutico investigador, es fundamental contrastar los impresionantes logros computacionales con las limitaciones biológicas y metodológicas que persisten en la práctica experimental *in vitro* e *in vivo*. Existe una brecha sustancial entre la predicción *in silico* y la respuesta fisiológica compleja en organismos vivos.

Aunque las redes neuronales profundas y las arquitecturas generativas demuestren una capacidad sobresaliente para diseñar moléculas con alta afinidad de unión teórica a dianas específicas, la biología de los sistemas vivos introduce variables estocásticas, procesos metabólicos dinámicos y mecanismos de resistencia que los modelos computacionales aún no logran replicar en su totalidad. La validez de los algoritmos de química generativa depende críticamente de la representatividad y calidad de las bases de datos primarias como PubChem y ChemSpider; sesgos o imprecisiones en los datos moleculares de entrenamiento se traducen inevitablemente en predicciones imprecisas o artefactos *in silico*.

En el ámbito de la evaluación ADMET-Tox, la opacidad intrínseca de los modelos de aprendizaje profundo el denominado problema de la "caja negra" representa un obstáculo de primer orden para la validación de mecanismos de acción farmacológica. Para el investigador biofarmacéutico y las agencias regulatorias como la FDA (2026b) y la EMA, comprender la fundamentación fisicoquímica y biológica de la predicción de un evento adverso o una inhibición metabólica es tan crucial como la precisión estadística del modelo. La falta de interpretabilidad en las predicciones algorítmicas puede comprometer la toma de decisiones clínicas y ralentizar la aprobación de nuevas entidades químicas.

En la optimización de los ensayos clínicos, la estratificación biomédica mediante algoritmos demuestra ser una herramienta eficaz para reducir la heterogeneidad de las cohortes de prueba. Sin embargo, este enfoque conlleva el riesgo de introducir sesgos de selección si las poblaciones utilizadas para entrenar los modelos carecen de la diversidad genética y demográfica adecuada. La aplicación irrestricta de algoritmos entrenados en subpoblaciones específicas podría derivar en medicamentos que muestren un perfil óptimo en el ensayo clínico, pero que

evidencien respuestas terapéuticas dispares o toxicidades no anticipadas al comercializarse en poblaciones globales heterogéneas.

Esta problemática subraya la necesidad de adoptar enfoques analíticos rigurosos y transversales, la tecnología automatizada debe actuar como un elemento de soporte complementario que potencie el rigor analítico, sin desplazar el juicio profesional crítico ni la responsabilidad ética en la evaluación de los datos. Asimismo, la integración exitosa de la IA en los procesos de investigación exige transformaciones estructurales en la capacitación profesional, la gobernanza de datos y la cultura organizacional dentro de los laboratorios e instituciones científicas.

Entre las limitaciones del presente estudio, cabe señalar la rápida velocidad de obsolescencia que caracteriza a las tecnologías informáticas, lo que dificulta la realización de evaluaciones prospectivas a largo plazo sobre el impacto de la IA en la supervivencia poscomercialización de los medicamentos lanzados en la última década. Asimismo, la heterogeneidad en las métricas de rendimiento reportadas en la literatura científica dificulta la ejecución de metaanálisis cuantitativos estandarizados.

A pesar de estas limitantes, los hallazgos reafirman que el paradigma del descubrimiento farmacéutico asistido por inteligencia artificial no sustituye la experimentación bioquímica fundamental, sino que la potencia. La convergencia equilibrada entre el poder de cómputo avanzado, la minería de datos multiómicos, la rigurosidad en el diseño experimental in vitro/in vivo y la supervisión del bioquímico farmacéutico investigador constituirá la clave para garantizar la traducción eficiente de descubrimientos digitales en terapias efectivas, seguras y accesibles para la sociedad.

5. Conclusiones

C Los resultados de esta investigación demuestran que la inteligencia artificial reconfiguró de manera profunda y sustantiva la investigación y desarrollo farmacéutico durante el período 2020-2026. Se alcanzaron plenamente los objetivos planteados al evidenciar la capacidad de los modelos algorítmicos para acelerar el descubrimiento de medicamentos, optimizar la conducción de ensayos clínicos y transformar el desarrollo de terapias innovadoras, transitando de un modelo empírico lineal a ciclos iterativos de alto rendimiento guiados por datos.

En el descubrimiento de dianas terapéuticas y el diseño molecular, la implementación de redes neuronales gráficas, modelos generativos y el análisis de macrodatos moleculares demostraron ser altamente eficientes. Estas herramientas acortaron los tiempos de tamizaje virtual y optimización de compuestos líderes, permitiendo explorar espacios químicos masivos y predecir con elevada precisión parámetros farmacocinéticos y perfiles de toxicidad ADMET-Tox antes de la síntesis experimental en laboratorio.

En la optimización de los ensayos clínicos, la integración de la IA logró mitigar las elevadas tasas de atrición histórica. La estratificación biomédica de pacientes mediante biomarcadores digitales y datos del mundo real permitió estructurar cohortes de prueba más homogéneas, optimizar la potencia estadística de los estudios clínicos en Fases I a III y prevenir fracasos por falta de eficacia o eventos adversos inesperados. Asimismo, el reposicionamiento de fármacos mediante grafos de conocimiento consolidó una alternativa rápida y costo-efectiva para identificar nuevas indicaciones terapéuticas en principios activos previamente aprobados.

El aporte científico fundamental de este trabajo radica en ofrecer un análisis sintético e interdisciplinario que integra la perspectiva de la bioquímica farmacéutica con los avances de la informática médica y los nuevos marcos de gobernanza regulatoria promovidos por agencias internacionales. Se establece de forma inequívoca que la inteligencia artificial debe ser concebida como un pilar analítico complementario que requiere validación experimental continua y una rigurosa supervisión ética.

La trascendencia de este estudio reside en proporcionar una guía crítica y estructurada que orienta a la comunidad científica biofarmacéutica en la adopción responsable de metodologías computacionales. Se concluye que la correcta convergencia entre la inteligencia artificial, la rigurosidad metodológica *in vitro/in vivo* y el criterio analítico del investigador biofarmacéutico resultará indispensable para acelerar la disponibilidad de medicamentos más seguros, eficaces y personalizados, respondiendo con mayor agilidad a las demandas globales de salud pública.

CONFLICTO DE INTERESES

“Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses”.

DECLARACIÓN SOBRE EL USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL GENERATIVA

“Los autores declaran que no utilizaron herramientas de inteligencia artificial generativa en la elaboración de este manuscrito.”

Referencias Bibliográficas

- Acosta Marin, V., Ramos, O., Acosta Freitas, V., Aponte, O., Korsun, N., Gutierrez, F., Santiago, A. M., Ramirez, A. K., Marin, C. E., Acosta, M., & Gonzalez, C. (2024). Algoritmos de inteligencia artificial para la evaluación de mamografías: ¿Están listos? Artículo de revisión. *Revista Venezolana de Cirugía*, 77(2), 75–79. <https://doi.org/10.48104/rvc.2024.77.2.4>
- Apolo-Montero, D. A., Castillo-Romero, C. C., Samaniego-Flores, V. M., Limongi-Basantes, D. S., & Meléndez-Carrasco, G. P. (2025). Automedicación con antibióticos en Ecuador y Latinoamérica: magnitud, determinantes y propuestas

- de intervención. *Revista Científica Ciencia y Método*, 3(4), 14-23. <https://doi.org/10.55813/gaea/rcym/v3/n4/94>
- Arroyo-Ruales, W. E., & Soria-Poma, X. (2026). Modelo de Inteligencia artificial para el diagnóstico del dengue. *Revista Científica Ciencia Y Método*, 4(1), 1-13. <https://doi.org/10.55813/gaea/rcym/v4/n1/126>
- Barucci, A., Colcelli, V., De Masi, S., Falconi, M., Leo, M. C., Marzola, A., Romagnuolo, I., Sforzi, C., & Pini, R. (2026). Ethical and regulatory frameworks for artificial intelligence in clinical research: A European perspective on the Artificial Intelligence Act for ethics committees and researchers. *European Cardiology Review*, 21, Artículo e01. <https://doi.org/10.15420/ecr.2025.59>
- Borja-Aguilar, M. N., Trejo-Carvajal, L. A., & Cambizaca-Mora, G. del P. (2025). Enfermería e inteligencia artificial en la unidad de cuidados intensivos. Revisión sistemática integrativa. *Revista Científica Zambos*, 4(2), 54–70. <https://doi.org/10.69484/rcz/v4/n2/108>
- Cujilan Guamán, J. A., Chele Sudiaga, N. E., Gavilanes Burnhan, V. A., Tacle Flores, J. V., & Boza Ruiz, R. A. (2025). Impacto de la inteligencia artificial en la predicción de eventos críticos en las unidades de cuidados intensivos: Implicaciones para la práctica y la toma de decisiones en enfermería. *Más Vida*, 7(2), 62–76. <https://doi.org/10.47606/ACVEN/MV0270>
- Ferreira, F. J., & Carneiro, A. S. (2025). AI-driven drug discovery: A comprehensive review. *ACS Omega*, 10(23), 23889–23903. <https://doi.org/10.1021/acsomega.5c00549>
- Fontanella, F., D'Alessandro, T., Nardone, E., De Stefano, C., Vicidomini, C., & Roviello, G. N. (2026). Artificial intelligence for natural products drug discovery in neurodegenerative therapies: A review. *Biomolecules*, 16(1), Artículo 129. <https://doi.org/10.3390/biom16010129>
- Herrera-Sánchez, P. J., & Moreira-Flores, M. M. (2023). Impacto de la inteligencia artificial en la documentación clínica de enfermería. *Revista Científica Ciencia y Método*, 1(1), 1–13. <https://doi.org/10.55813/gaea/rcym/v1/n1/6>
- Mak, K. K., Wong, Y. H., & Pichika, M. R. (2024). Artificial intelligence in drug discovery and development. En F. J. Hock & M. K. Pugsley (Eds.), *Drug discovery and evaluation: Safety and pharmacokinetic assays* (pp. 1461–1498). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-031-35529-5_92
- Mehran, M. J., Mohammadzadeh, S., Bolideei, M., Barzigar, R., Haider, K. H., Jadgal, N., & Bahrami, Y. (2026). Artificial intelligence in drug discovery: Integrative advances from data to therapeutic innovation. *Drug Development Research*, 87(2), Artículo e70229. <https://doi.org/10.1002/ddr.70229>
- Mendoza-Falcones, L. M., Guida-Acevedo, G. N., Herrera-Esquivel, C. A., & Herrera-Sánchez, P. J. (2026). Bioética y equidad en el acceso a los servicios de salud en Ecuador y América Latina. *Journal of Economic and Social Science Research*, 6(1), 121–140. <https://doi.org/10.55813/gaea/jessr/v6/n1/234>
- Montalván-Vélez, C. L., Mogrovejo-Zambrano, J. N., Romero-Vitte, I. J., & Pinargote-Carrera, M. L. D. C. (2024). Introducción a la inteligencia artificial: Conceptos

- básicos y aplicaciones cotidianas. *Journal of Economic and Social Science Research*, 4(1), 173–183. <https://doi.org/10.55813/gaea/jessr/v4/n1/93>
- Ogunbite, A. B., & Sibiya, M. (2026). A narrative review of artificial intelligence for drug repurposing: Lessons from COVID-19 and oncology (2020–2025). *CPT: Pharmacometrics & Systems Pharmacology*, 15(7), Artículo e70272. <https://doi.org/10.1002/psp4.70272>
- Romero Llerena, M. A., & Pandia Yañez, E. J. (2025). La inteligencia artificial en la salud pública: Mejorando la atención médica y previniendo enfermedades. *Aula Virtual*, 6(13), 1686–1705. <https://doi.org/10.5281/zenodo.17247148>
- Song, H., Liang, Z., Zhang, X., Yang, F., Zheng, M., & Xin, G. (2026). Artificial intelligence algorithms drive the deciphering of traditional Chinese medicine by analyzing the chemicalome, targetome, and bioactivome. *Targetome*, 2(2), Artículo e010. <https://doi.org/10.48130/targetome-0026-0002>
- U.S. Food and Drug Administration. (2026a). *Digital health technologies (DHTs) for drug development*. <https://www.fda.gov/science-research/science-and-research-special-topics/digital-health-technologies-dhts-drug-development>
- U.S. Food and Drug Administration. (2026b). *Guiding principles of good AI practice in drug development*. <https://www.fda.gov/about-fda/artificial-intelligence-drug-development/guiding-principles-good-ai-practice-drug-development>
- Vaghari, D., Mohankumar, G., Tan, K., Lowe, A., Shering, C., Tino, P., & Kourtzi, Z. (2025). AI-guided patient stratification improves outcomes and efficiency in the AMARANTH Alzheimer's Disease clinical trial. *Nature Communications*, 16, Artículo 6244. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-61355-3>