



La Inteligencia Artificial (IA) en el descubrimiento de moléculas



El descubrimiento de nuevas moléculas es un proceso largo y costoso

SIN EMBARGO, LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL (IA) PROMETE **ACELERAR** EL PROCESO, AUMENTAR LA **PRECISIÓN**, **REDUCIR** COSTES



¿CÓMO PUEDE LA IA HACER MÁS EFICIENTE EL DESCUBRIMIENTO DE MOLÉCULAS?

Utilizando algoritmos avanzados y grandes volúmenes de datos, se puede:



Identificar patrones y predecir qué moléculas podrían ser eficaces contra ciertas enfermedades



Analizar enormes bibliotecas de compuestos químicos en cuestión de minutos



Simular cómo reaccionarán estas moléculas en el cuerpo humano

Principales técnicas de IA utilizadas para identificar o diseñar moléculas

Gráficos de conocimiento

Permiten visualizar complejas interacciones biológicas que podrían pasar desapercibidas con métodos tradicionales.

IA generativa

Es un tipo de inteligencia artificial que crea nuevas moléculas desde cero, basándose en patrones aprendidos de datos existentes.

Algoritmos de predicción estructural

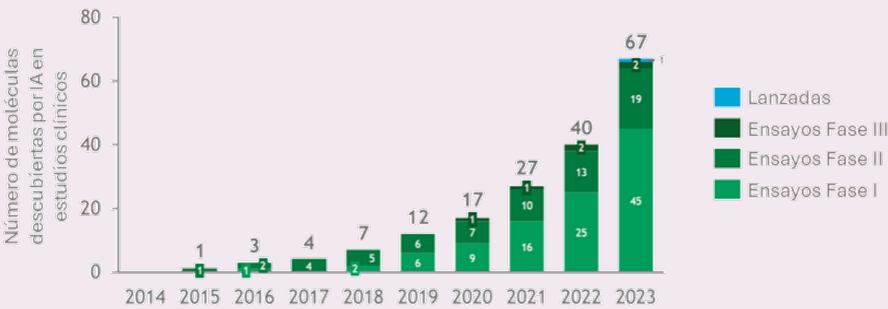
Son programas que predicen la forma tridimensional de las proteínas, lo cual es crucial para diseñar medicamentos.

Repurposing de moléculas

Es el uso de inteligencia artificial para encontrar nuevas aplicaciones para medicamentos ya existentes.

Ensayos clínicos de moléculas descubiertas con IA

- Ha habido un importante crecimiento en el número de moléculas descubiertas por IA, especialmente en los últimos años



- El éxito de los ensayos clínicos de moléculas descubiertas por IA



La **tasa de éxito** de los ensayos Fase I es de **80-90%**, muy superior a la tasa de éxito del desarrollo tradicional (~40%)



La colaboración entre la industria farmacéutica y compañías biotecnológicas especializadas en IA ha sido fundamental para este éxito inicial



La inteligencia artificial está mostrando un potencial increíble para transformar el descubrimiento de moléculas, haciendo este proceso más eficiente y posiblemente más exitoso