

Revolucionando la Farmacéutica: La Inteligencia Artificial Generativa como asistente bibliográfico

Ángel Canal-Alonso¹, Noelia Egido¹, Pedro Jiménez¹, Javier Prieto¹, Juan Manuel Corchado¹

¹ Departamento de Bioinformática y Biología Computacional, AIR Institute, Carbajosa de la Sagrada, España

E-mail: acanal@air-institute.com

Abstract

La Inteligencia Artificial Generativa (IAG) ha irrumpido con fuerza en la investigación biomédica y farmacéutica, transformando fundamentalmente la forma en que los científicos abordan la revisión de literatura, el diseño de experimentos, y la selección de reactivos y anticuerpos. Este artículo explora cómo la IAG, respaldada por modelos avanzados de aprendizaje automático y procesamiento del lenguaje natural, ha revolucionado estos procesos.

La IAG agiliza la revisión bibliográfica, extrayendo información relevante, identificando patrones y tendencias emergentes en la literatura científica y generando hipótesis innovadoras. También actúa como una herramienta de búsqueda avanzada, permitiendo a los investigadores acceder rápidamente a la información precisa en un océano de datos.

Un ejemplo destacado de esta aplicación es BenchSci, una plataforma que utiliza la IAG para recomendar reactivos y anticuerpos basados en datos experimentales reales y literatura científica. Esta integración de la IAG en el diseño experimental promete acelerar la investigación, reducir costos y mejorar la precisión de los experimentos.

En conjunto, la IAG se presenta como un catalizador de descubrimientos en la investigación farmacéutica y biomédica, ofreciendo un potencial sin precedentes para avanzar en la comprensión y tratamiento de enfermedades, y mejorar la toma de decisiones en la industria..

Keywords: Inteligencia Artificial Generativa, Diseño de Fármacos, Revisión bibliográfica

1. Introducción

La revolución de la Inteligencia Artificial (IA) ha transformado innumerables campos de estudio y aplicaciones en las últimas décadas. Entre sus múltiples ramas, la Inteligencia Artificial Generativa (IAG) ha emergido como una de las más fascinantes y prometedoras. La IAG se refiere a los sistemas de IA que pueden producir contenido nuevo, original y, en muchos casos, indistinguible del creado por humanos. Esta capacidad de generar contenido se manifiesta en múltiples formas: desde la creación de imágenes y música,

hasta la generación de texto y el diseño de moléculas para fármacos.

El nacimiento de la IAG puede rastrearse a los primeros esfuerzos en el aprendizaje automático, donde los algoritmos comenzaron a identificar y replicar patrones a partir de datos. No obstante, fue con el advenimiento de las redes neuronales y, más concretamente, con las redes generativas antagónicas (GANs, por sus siglas en inglés) en 2014, cuando el campo realmente comenzó a tomar forma. Las GANs, propuestas por Ian Goodfellow y sus colegas, operan con dos redes neuronales que trabajan en conjunto: una red generadora que

produce imágenes y una red discriminadora que evalúa esas imágenes. Estas redes "compiten" entre sí en un proceso iterativo hasta que la red generadora crea imágenes que la discriminadora no puede distinguir de las imágenes reales.

Desde entonces, la capacidad y aplicabilidad de la IAG ha crecido de manera exponencial. Sus aplicaciones no se limitan a la generación de contenido multimedia. En el campo de la biología y la medicina, la IAG ha mostrado ser una herramienta valiosa en el diseño y descubrimiento de nuevos fármacos. Al enfrentarse al reto de analizar enormes bibliotecas de compuestos químicos y discernir cuáles podrían tener propiedades terapéuticas deseables, los investigadores han encontrado en la IAG una aliada poderosa para optimizar y acelerar este proceso.

En este artículo, exploraremos cómo la Inteligencia Artificial Generativa se ha posicionado como una herramienta esencial en las revisiones bibliográficas para el diseño de fármacos, delineando su impacto y potencial en este crucial campo de la investigación.

¿En qué consiste la Inteligencia Artificial Generativa y cómo funciona?

La Inteligencia Artificial Generativa (IAG) es un subcampo del aprendizaje automático que se centra en el desarrollo de algoritmos capaces de generar datos nuevos y originales que reflejen características similares a los datos de entrada con los que fueron entrenados. A diferencia de otros modelos de IA que se diseñan para hacer predicciones o clasificaciones, la IAG busca crear.

A continuación, describimos las principales características y mecanismos de funcionamiento de la IAG:

1. Modelos Generativos: Estos modelos se entrenan para entender cómo están distribuidos los datos. Una vez que han "aprendido" esta distribución, pueden generar nuevos ejemplos. Un modelo generativo común es el Autoencoder, que comprime la entrada en una representación más compacta y luego reconstruye la entrada a partir de esa representación.

2. Redes Generativas Antagónicas (GANs): Las GANs consisten en dos redes neuronales: la generadora y la discriminadora. La primera intenta crear datos, mientras que la segunda intenta distinguir entre datos reales y datos generados. Durante el entrenamiento, estas redes "compiten" en un juego de gato y ratón hasta que la generadora produce datos tan convincentes que la discriminadora apenas puede diferenciarlos de los datos reales.

3. Modelos de Espacio Latente: Estos modelos representan datos en un espacio dimensional reducido, llamado "espacio latente". La idea es que las variaciones y características esenciales de los datos pueden ser representadas en este espacio reducido. Cuando se requiere generar nuevos datos, el modelo toma puntos en este espacio latente y los "traduce" de nuevo al espacio de datos original.

4. Entrenamiento: La clave para obtener modelos generativos efectivos radica en el entrenamiento. Mediante el uso de grandes cantidades de datos y una retroalimentación constante, los modelos ajustan sus parámetros para producir resultados cada vez más realistas. Con suficiente entrenamiento y datos adecuados, un modelo generativo puede llegar a generar contenido de alta calidad y muy similar al real.

5. Aplicaciones en diversos dominios: Aunque la generación de imágenes es una de las aplicaciones más populares de la IAG, su utilidad abarca dominios tan diversos como la generación de texto, creación de música, diseño de videojuegos y, como mencionamos anteriormente, diseño y descubrimiento de nuevos fármacos.

En resumen, la Inteligencia Artificial Generativa utiliza modelos avanzados de aprendizaje automático para "aprender" patrones y distribuciones intrínsecas de conjuntos de datos y, posteriormente, utiliza ese aprendizaje para crear nuevos datos que reflejan las características de los datos originales. Es esta capacidad de crear lo que le otorga un vasto potencial en múltiples campos y aplicaciones.

La importancia de las revisiones bibliográficas

Las revisiones bibliográficas en la industria farmacéutica, especialmente en el diseño de fármacos, son de suma importancia y cumplen múltiples propósitos esenciales en el proceso de desarrollo y aprobación de nuevos medicamentos.

En primer lugar, el proceso de descubrimiento y diseño de fármacos es uno intrincado y complejo, que involucra la interacción y manipulación de moléculas a niveles microscópicos. Antes de invertir recursos significativos en la investigación y desarrollo (I+D) de un nuevo fármaco, es vital asegurarse de que la dirección elegida está fundamentada en datos y hallazgos científicos previos. Las revisiones bibliográficas proveen un compendio exhaustivo de estos hallazgos, ayudando a los investigadores a comprender mejor el contexto y las bases científicas de sus esfuerzos.

Además, el diseño de fármacos no solo se trata de la eficacia del medicamento propuesto, sino también de su

seguridad. Conocer los efectos secundarios potenciales, las interacciones con otros fármacos y los mecanismos de acción y resistencia son aspectos cruciales. Las revisiones bibliográficas permiten a los científicos acceder a información previa sobre compuestos similares o relacionados, proporcionando una visión valiosa sobre posibles riesgos y oportunidades.

Por otro lado, en un campo que avanza tan rápidamente como la farmacología y la biomedicina, es fundamental mantenerse actualizado. Las revisiones bibliográficas ofrecen una visión panorámica de los avances recientes, técnicas emergentes y descubrimientos clave. De esta manera, los equipos de I+D pueden incorporar rápidamente innovaciones y ajustar sus estrategias según las tendencias y descubrimientos actuales.

Finalmente, las regulaciones en la industria farmacéutica son rigurosas y requieren que cualquier alegato sobre la eficacia y seguridad de un fármaco esté respaldado por evidencia científica robusta. Las revisiones bibliográficas ayudan a consolidar esta evidencia y facilitan el proceso de comunicación y justificación ante los organismos reguladores.

Por todas estas razones, las revisiones bibliográficas son una piedra angular en la industria farmacéutica. No solo orientan y fundamentan la investigación, sino que también garantizan que los medicamentos desarrollados sean tanto efectivos como seguros para los pacientes.

2. Aplicaciones directas

Análisis de texto y resúmenes automatizados

La Inteligencia Artificial (IA) generativa ha experimentado un desarrollo impresionante en los últimos años, especialmente con la irrupción de modelos basados en Transformers. Estos modelos han revolucionado el campo del procesamiento del lenguaje natural (NLP, por sus siglas en inglés) debido a su capacidad para gestionar y comprender información textual de una manera sin precedentes.

Los Transformers, una arquitectura específica dentro del NLP, se caracterizan por su habilidad para manejar secuencias largas de datos y establecer relaciones entre diferentes partes de un texto, sin importar cuán distantes estén entre sí. Esta capacidad los hace excepcionalmente adecuados para analizar la vasta y compleja literatura biomédica, que a menudo presenta textos densos y técnicos repletos de interrelaciones conceptuales.

Dada la avalancha de publicaciones en el ámbito biomédico, los modelos basados en Transformers pueden desempeñar un papel vital en la digestión y síntesis de esta información. Son capaces de resumir automáticamente artículos científicos, destilando el contenido esencial y eliminando la redundancia. Esta automatización no solo facilita el acceso a la información principal, sino que también permite a los investigadores abordar un mayor número de documentos en menos tiempo.

Además, estos modelos avanzados pueden extraer detalles específicos y cruciales, como datos experimentales, resultados y conclusiones, identificando lo que es verdaderamente pertinente para la investigación en cuestión. Su habilidad para realizar análisis de texto profundo permite identificar temas clave, detectar tendencias emergentes en la investigación y establecer relaciones entre diferentes conceptos, moléculas o mecanismos biológicos.

Por si fuera poco, al integrar estos modelos de IA con bases de datos y otras herramientas de búsqueda, se pueden realizar consultas complejas y obtener respuestas específicas, facilitando la identificación de vacíos en el conocimiento o áreas de oportunidad para investigaciones futuras.

En esencia, la IA generativa, particularmente los modelos basados en Transformers, se presenta como un puente entre la sobrecarga informativa y la necesidad de comprensión profunda en el campo biomédico. Estas herramientas no solo optimizan el proceso de revisión literaria, sino que también potencian la capacidad de los investigadores para obtener insights y avanzar en el complejo panorama del diseño y estudio de fármacos.

Generación de nuevas hipótesis

La Inteligencia Artificial generativa ha ido más allá de ser simplemente una herramienta para analizar y resumir la literatura científica. Su potencial reside en su capacidad para fusionar y recombinar la información en formas inesperadas, abriendo puertas a nuevas perspectivas y entendimientos en la investigación biomédica.

Al sumergirse en la vastedad de la literatura científica, los modelos generativos de IA no se limitan a interpretar el contenido de una manera lineal o directa. En cambio, "leen" y procesan miles de artículos, comprendiendo las intrincadas redes de información que abarcan diversos campos de estudio. Este vasto conocimiento les permite detectar patrones, analogías y correlaciones que, debido a la vastedad y complejidad de los datos, podrían pasar desapercibidos para los investigadores humanos.

A partir de este procesamiento, la IA generativa tiene la capacidad de generar nuevas hipótesis, muchas de las cuales pueden ser contraintuitivas o innovadoras. Por ejemplo, un modelo podría identificar relaciones indirectas entre un gen específico y una enfermedad rara, basándose en una serie de estudios aparentemente no relacionados. O podría proponer una interacción potencial entre una proteína y un fármaco, sugiriendo una nueva aplicación terapéutica para un medicamento previamente aprobado.

Estas hipótesis generadas automáticamente pueden ser extremadamente valiosas, ya que desafían y expanden las fronteras del conocimiento actual. Pueden inspirar a los investigadores a explorar áreas previamente no consideradas y a validar las propuestas de la IA con experimentos de laboratorio. Este ciclo de retroalimentación entre la IA y la investigación experimental puede acelerar significativamente el proceso de descubrimiento científico.

Además, en un mundo donde la multidisciplinariedad se está convirtiendo en la norma, los modelos generativos pueden actuar como puentes entre diferentes campos del saber, fusionando la información de disciplinas como la genómica, la proteómica, la farmacología y la epidemiología. Esta integración holística puede desencadenar una nueva era de descubrimientos interdisciplinarios, donde las soluciones a problemas complejos emergen de la intersección de múltiples áreas de expertise.

En resumen, la IA generativa no solo es una herramienta para la digestión y comprensión de la literatura científica, sino que es también una fuente de inspiración y una catalizadora de nuevas líneas de investigación, lo que puede conducir a descubrimientos significativos que transformen la forma en que entendemos y abordamos las enfermedades y su tratamiento.

Detección de patrones y tendencias

La Inteligencia Artificial generativa, equipada con técnicas avanzadas de aprendizaje automático y procesamiento del lenguaje natural (NLP), representa una de las herramientas más revolucionarias para el análisis y la interpretación de la literatura científica en la era contemporánea. Su capacidad para bucear en vastas bases de datos de publicaciones y extraer insights esenciales trasciende la mera automatización, ofreciendo una ventana hacia las profundidades del conocimiento acumulado.

La ciencia, en su naturaleza, es incremental y evolutiva, con hallazgos que se construyen sobre trabajos previos. Sin

embargo, el volumen colosal de información publicada diariamente puede dificultar la visibilidad de los nexos sutiles entre investigaciones o la emergencia de patrones a lo largo del tiempo. La IA generativa, con su potencia computacional y algoritmos sofisticados, puede navegar este océano de datos, identificando tendencias y patrones que quizás permanecerían ocultos para el ojo humano.

Un área crítica es la identificación de terapias emergentes. Mientras que los investigadores pueden estar al tanto de los avances en sus campos específicos, la IA puede conectar puntos entre disciplinas, reconociendo potenciales aplicaciones terapéuticas de compuestos o técnicas que inicialmente no estaban orientados a ese propósito. Esta capacidad de "pensar fuera de la caja" es esencial en un campo donde la reutilización de fármacos y la multidisciplinariedad son cada vez más comunes.

La detección temprana de efectos secundarios no esperados es otro beneficio inestimable. A través del análisis de literatura científica, informes de casos, estudios clínicos y otros recursos, la IA generativa puede alertar sobre posibles efectos adversos de un medicamento antes de que se conviertan en problemas mayores. Estas alertas tempranas pueden llevar a revisiones más profundas, modificaciones de dosis o incluso la retirada de un fármaco del mercado, protegiendo así la salud de los pacientes.

Por último, en el ámbito de la salud pública, la capacidad de la IA para identificar factores de riesgo es crucial. Puede reconocer correlaciones entre variables demográficas, ambientales, genéticas o comportamentales y la prevalencia o severidad de ciertas enfermedades. Estos insights pueden guiar políticas de salud, campañas de prevención y estrategias de intervención.

Para los responsables de la toma de decisiones en la industria farmacéutica, la IA generativa es una brújula en un paisaje en constante evolución. Ofrece una visión clara y actualizada de las tendencias, riesgos y oportunidades, asegurando que las decisiones se basen en el conocimiento más completo y actualizado disponible. En un sector donde las apuestas son altas y el margen de error es pequeño, la contribución de la IA generativa es inestimable.

Asistencia en búsqueda de información

La revolución digital ha llevado a una explosión en la cantidad de información disponible para los investigadores, con una avalancha de artículos, informes y estudios publicados diariamente. En este vasto mar de datos, encontrar información específica y relevante puede ser comparable a

buscar una aguja en un pajar. Aquí es donde la Inteligencia Artificial generativa se presenta como una aliada inestimable para la comunidad científica.

Equipada con técnicas punteras de aprendizaje automático y procesamiento del lenguaje natural, la IA generativa se eleva por encima de las herramientas de búsqueda tradicionales. Mientras que los motores de búsqueda convencionales dependen en gran medida de palabras clave y algoritmos simples, los modelos generativos tienen la capacidad de comprender el contexto y la semántica detrás de las consultas, permitiendo una interpretación mucho más rica y matizada de las peticiones del usuario.

Esto significa que, en lugar de depender únicamente de términos específicos, los investigadores pueden realizar consultas complejas, formulando preguntas o describiendo escenarios y objetivos de investigación. Por ejemplo, en lugar de buscar simplemente "efectos de la droga X", un investigador podría consultar "interacciones entre la droga X y proteínas asociadas a la enfermedad Y". El modelo generativo, al comprender la naturaleza y el alcance de la consulta, rastreará la literatura para encontrar documentos que aborden esa interacción específica.

Además, la IA generativa puede clasificar y priorizar los resultados basándose en la relevancia, el impacto y la actualidad, presentando a los investigadores un conjunto curado de documentos que se alinea estrechamente con sus necesidades. Esto elimina la tediosa tarea de filtrar manualmente grandes cantidades de información, permitiendo a los científicos concentrarse en lo que realmente importa: el análisis y la interpretación de los datos.

También vale la pena mencionar que, con el tiempo, estos modelos pueden adaptarse y aprender de las preferencias y comportamientos de los usuarios, mejorando aún más la precisión y pertinencia de sus resultados.

En resumen, la IA generativa, al actuar como una herramienta de búsqueda avanzada, no solo democratiza el acceso a la información científica, sino que también agiliza y optimiza el proceso de investigación. En un mundo donde el tiempo es un recurso precioso y la rapidez en la innovación es esencial, esta tecnología promete ser una pieza clave en el futuro de la investigación científica.

Aplicación de la IA generativa en la asistencia al diseño de experimentos y selección de reactivos y anticuerpos

El diseño experimental y la selección de reactivos y anticuerpos adecuados son pasos cruciales en la investigación biomédica y farmacológica. La elección de los reactivos y anticuerpos correctos puede influir significativamente en la validez y reproducibilidad de un experimento. Sin embargo, con el vasto número de reactivos y anticuerpos disponibles en el mercado, identificar el más adecuado para un experimento particular puede ser una tarea desalentadora.

Aquí es donde entra la Inteligencia Artificial generativa, transformando y optimizando este proceso de selección. Mediante el uso de técnicas avanzadas de aprendizaje automático y análisis de grandes volúmenes de datos, la IA generativa puede ayudar a los investigadores a identificar reactivos y anticuerpos que han mostrado ser efectivos y específicos en experimentos similares anteriores.

Ejemplo de BenchSci

Un ejemplo prominente de la aplicación de la IA en este ámbito es BenchSci. Esta plataforma utiliza la Inteligencia Artificial para decodificar y estructurar información compleja de millones de fichas técnicas de anticuerpos y papeles de investigación. El sistema de BenchSci permite a los usuarios ingresar parámetros específicos de su experimento, como el tipo de tejido o la aplicación (por ejemplo, inmunohistoquímica o Western blot), y recibir recomendaciones de anticuerpos basadas en datos experimentales reales.

La magia detrás de BenchSci es su capacidad para extraer y entender información de publicaciones científicas, identificando en qué contextos se ha utilizado un anticuerpo particular y con qué grado de éxito. Esto elimina gran parte del trabajo de adivinación en la selección de anticuerpos, y reduce la probabilidad de invertir en anticuerpos que no funcionarán como se espera.

Además de proporcionar recomendaciones basadas en la literatura, BenchSci también ofrece comparaciones visuales de productos, mostrando imágenes experimentales del uso real de los anticuerpos. Esto permite a los investigadores hacer una evaluación informada de la eficacia y especificidad del anticuerpo en cuestión.

En resumen, la integración de la Inteligencia Artificial generativa en el proceso de diseño experimental y selección de reactivos y anticuerpos promete acelerar la investigación, reducir costos y mejorar la reproducibilidad y precisión de los experimentos. Herramientas como BenchSci demuestran cómo la IA puede actuar como un aliado potente para los investigadores, ayudándolos a tomar decisiones informadas y a avanzar en su trabajo con confianza.

Conclusiones

La Inteligencia Artificial Generativa (IAG) ha emergido como una herramienta transformadora en el campo de la investigación farmacéutica y biomédica. Su capacidad para analizar, comprender y generar contenido basado en la vasta literatura científica ofrece beneficios significativos que están redefiniendo la forma en que se abordan los desafíos de diseño de fármacos y la toma de decisiones en la industria.

En primer lugar, la IAG ha demostrado su habilidad para acelerar y optimizar el proceso de revisión bibliográfica. Con la capacidad de resumir, extraer información relevante y detectar patrones en grandes volúmenes de literatura científica, los investigadores pueden obtener una visión más profunda y rápida de las investigaciones previas, lo que les permite tomar decisiones fundamentadas y reducir el tiempo dedicado a la búsqueda manual.

Además, la IAG se ha revelado como un generador incansable de nuevas hipótesis y perspectivas en la investigación biomédica. Al analizar múltiples estudios y correlacionar datos de manera innovadora, esta tecnología puede inspirar líneas de investigación completamente nuevas y descubrimientos significativos. Su capacidad para detectar relaciones complejas entre genes, proteínas, enfermedades y fármacos tiene un potencial inmenso en la identificación de nuevas terapias y en la comprensión de las bases moleculares de las enfermedades.

La IA generativa también ha demostrado ser un aliado invaluable en la detección temprana de efectos secundarios no esperados y en la identificación de factores de riesgo en la salud pública. Esta capacidad de prever problemas potenciales puede salvar vidas y mejorar la seguridad de los tratamientos farmacológicos.

Por último, en la asistencia al diseño de experimentos y selección de reactivos y anticuerpos, la IA generativa, como ejemplificada por BenchSci, demuestra su capacidad para simplificar procesos críticos, ahorrar tiempo y recursos, y garantizar la reproducibilidad de los experimentos.

En resumen, la IA generativa se ha consolidado como una herramienta multidimensional y poderosa que impulsa la investigación farmacéutica y biomédica. A medida que la tecnología continúa avanzando y se integra aún más en la toma de decisiones y el diseño de fármacos, es de esperar que aceleremos el ritmo de descubrimientos y avances en el campo, mejorando la calidad de vida de las personas y la eficacia de los tratamientos médicos.

References

Garcia-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

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.