



OPINIÓN

4 diciembre, 2024

## Los avances de la inteligencia artificial en la química: un camino que aún no termina



Por : Daniel Aguayo  
investigador y académico del Instituto de Tecnología para la Innovación en Salud y Bienestar UNAB (ITISB UNAB).

**Las proteínas son fundamentales para numerosos procesos biológicos. Compuestas por cadenas de aminoácidos, su forma específica determina su función en el organismo.**

Este año la Real Academia Sueca de Ciencias anunció un avance revolucionario: el Premio Nobel de Química fue otorgado a David Baker, Demis Hassabis y John Jumper por su trabajo en la comprensión de las estructuras y funciones de las proteínas. Este reconocimiento marca un hito significativo, ya que los investigadores han “descifrado” el código que explica cómo las proteínas, bloques esenciales de la vida, se pliegan en complejas formas tridimensionales.

Las proteínas son fundamentales para numerosos procesos biológicos. Compuestas por cadenas de aminoácidos, su forma específica determina su función en el organismo.

Entender su plegamiento y funcionamiento es luego crucial para el desarrollo de tratamiento de enfermedades como el cáncer y la diabetes, así como para mejorar procesos bioquímicos e industriales. Al predecir la forma de una proteína, los científicos pueden identificar los puntos de unión de pequeñas moléculas, lo que es el primer paso en el diseño de nuevos medicamentos.

Desde el trabajo pionero de Christian Anfinsen en 1961, que demostró que la secuencia de aminoácidos determina la estructura de una proteína, ha resultado un gran desafío predecir esa estructura solamente a partir de la secuencia.

Para resolver este enigma, David Baker, bioquímico en la Universidad de Washington, desarrolló el programa computacional Rosetta, que permite no solo predecir estructuras de proteínas, sino también diseñar proteínas nuevas.

Sin embargo, a pesar de estos avances, el problema del plegamiento de proteínas seguía sin resolverse del todo, lo que llevó a la necesidad de un cambio de paradigma. Aquí es donde la inteligencia artificial (IA) y el aprendizaje automático juegan un papel crucial.

En 2010, Demis Hassabis cofundó DeepMind con la misión de combinar neurociencia con IA para abordar problemas importantes. En 2016, el enfoque se centró en el plegamiento de proteínas, liderado por el químico John Jumper. Usando una amplia base de datos de estructuras de proteínas experimentales, entrenaron a la IA, resultando en el *software* AlphaFold2, capaz de predecir estructuras 3D de proteínas con alta precisión. La versión más reciente, AlphaFold3, también puede incluso identificar sitios de unión a otras moléculas.

Desde su desarrollo, AlphaFold ha predicho las estructuras de más de 200 millones de proteínas, esencialmente todas las proteínas secuenciadas hasta ahora, y su base de datos está disponible gratuitamente, acelerando la investigación en biología, medicina y desarrollo de fármacos.

Las contribuciones de Baker, Hassabis y Jumper no solo han resuelto acertijos científicos, sino que han iniciado una era donde la inteligencia artificial transforma nuestra comprensión biológica. A pesar de los logros de AlphaFold, comprender cómo y por qué una proteína adopta su forma en un entorno biológico real sigue siendo un reto, por lo cual se requiere más investigación.

Por ello, invitamos a las nuevas generaciones de científicos e ingenieros a aplicar su conocimiento y creatividad para enfrentar estos desafíos. La comunidad científica necesita mentes curiosas y apasionadas que profundicen en las complejidades del plegamiento de proteínas y generen innovaciones.

Al celebrar este logro, es evidente que descifrar las estructuras de las proteínas va más allá de un esfuerzo científico: es una puerta de entrada para desvelar los misterios de la vida. Los conocimientos adquiridos tienen el potencial de revolucionar la medicina y abordar algunos de los desafíos más urgentes del mundo. El futuro de la ciencia, guiado por la colaboración y la innovación, nunca ha sido tan prometedor.