




# PROTEÍNAS GENERADAS POR INTELIGENCIA ARTIFICIAL

Dr. Roberto Morales Estrella  
Profesor Investigador de la  
UAEM

28 febrero de 2023




Partiendo de la premisa de que toda tecnología es resultado del talento humano, proyectando ampliar nuestra capacidad de hacer y de construir, pero también de destruir, como lo es toda la tecnología aplicada a la industria bélica, los robots autónomos, y la bomba nuclear.

La Inteligencia Artificial (AI) se ha insertado en campos de la biomedicina, como es el caso de dos AI, una denominada AlfaFold 2 y la otra lleva el nombre de RoseTTA Fold, con las cuales los investigadores David Baker, Demis Hassabis y John Jumper, desarrollaron sistemas de aprendizaje profundo, que les permitió predecir la estructura tridimensional de las proteínas, con mayor precisión y en minutos, cuando antes eran años de trabajo experimental en laboratorio. Sus antecedentes fueron DALL-E (IA que genera imágenes a partir de textos) y el popular GPT (IA que genera lenguaje escrito) como los llamados modelos de lenguaje grande LLM, para predecir la estructura de la proteína.

El trabajo de los investigadores fue reconocido con el premio, que otorga el banco BBVA “Fronteras del Conocimiento en la categoría de biología y biomedicina”, por revolucionar el estudio y diseño de proteínas mediante la AI e impulsar con su trabajo científico, la construcción de nuevos conocimientos.

Es muy difícil entender y manejar la complejidad que se observa en una célula viva, pero con estas tecnologías de AlfaFold 2 y RoseTTA Fold, es posible predecir interacciones entre proteínas y diseñar nuevas para poder crear vacunas o fármacos con los que se pueda hacer frente al cáncer y a otras enfermedades como el COVID.

Las proteínas son la esencia de la vida, junto con los aminoácidos, se localizan en todo organismo biológico; los investigadores entrenaron a los algoritmos en la secuencia de aminoácidos de proteínas, la IA predijo más de 600 millones de estructuras de proteínas, a partir de las letras de los aminoácidos, incluidas las esotéricas de los microorganismos del suelo, las aguas marinas y nuestros cuerpos.



La empresa Deep Mind, aplicó la AI, AlfaFol d2 logrando predecir la estructura de más de 200 millones de proteínas; tanto aminoácidos como proteínas son fundamentales para la vida de todo organismo biológico, son altamente complejas, por lo que desarrollar un conocimiento profundo en el menor tiempo posible, es fundamental para hacer frente a los desafíos que representan las enfermedades actuales y las nuevas que están por surgir, dado el cambio climático, que ya está impactando toda forma de vida de una u otra manera.

Este tipo de IA es generativa, se le conoce así a un conjunto de métodos de Deep learning que tienen la capacidad de aprender de contenidos u objetos de sus propios datos, es decir es una IA que aprende, su funcionamiento es a partir de las redes neuronales.

La industria farmacéutica es una de las principales beneficiarias de la IA generativa, dado que puede detectar tumores comparando imágenes de órganos sanos, con imágenes de órganos dañados o enfermos. Las redes neuronales tienen la capacidad de detectar anomalías en los escaneos de pacientes identificando diferencias. El mal uso por los ciberdelincuentes es un riesgo latente con más frecuencia.

Jennifer Doudna y Emmanuelle Charpentier, premios Nobel de Química 2020; exploraron las proteínas con el CRISPR (Repeticiones Palindrómicas cortas, agrupadas y regularmente interespaciales) que es la micro-tecnología para editar el genoma de todo ser biológico, en la región conocida como ADN (proteína- ácido desoxirribonucleico) desarrollaron la tecnología CRISPR-Cas9 que permite cambiar el código genético en unas semanas, cuando era un trabajo de investigación lento, difícil y en más de las veces imposible.

Por lo que ha tenido un impacto profundo en la medicina, dado que pueden revertir síntomas de enfermedad en organismo vivos, como los ratones que fueron curados de desórdenes genéticos en el hígado; según investigadores del Instituto Tecnológico de Massachussets, ya se han realizado tratamientos, a nivel experimental, de la anemia de células falciformes, el cáncer, y la ceguera hereditaria.

No hay que dejar de mencionar que en materia de edición genética en humanos, se corren riesgos éticos, urge una cultura ética-tecnológica y una regulación, que además de evitar el mal uso de la tecnología, propicie la disminución en la pobreza y la desigualdad social.