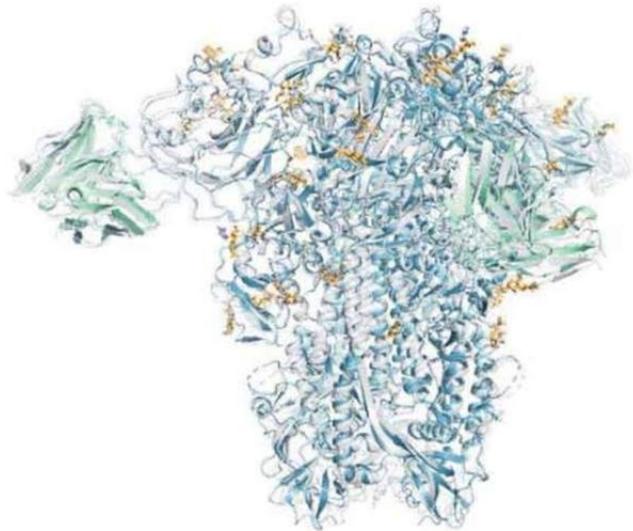


● TECNOLOGÍA

UNA IA DE GOOGLE PREDICE LA ESTRUCTURA E INTERACCIONES DE TODAS LAS MOLÉCULAS DE LA VIDA

CIENCIA. Lograr entender el funcionamiento de estas estructuras ayudaría a comprender y tratar enfermedades mediante un diseño "racional" de fármacos.



RECONSTRUCCIÓN DE ALPHAFOLD 3 DE LA PROTEÍNA SPIKE DE UN VIRUS DEL RESFRIADO COMÚN. IMAGEN DE DEEPMIND.

Agencias

Dentro de cada célula hay miles de millones de máquinas moleculares y entender su funcionamiento es clave para comprender y tratar enfermedades. La última versión de AlphaFold, un sistema de inteligencia artificial de Google, es capaz de predecir la estructura y las interacciones de 'todas' las moléculas de la vida.

Su descripción se publica en la revista Nature y, según sus responsables, AlphaFold 3 lleva "el mundo biológico a la alta definición". Permite a los científicos ver los sistemas celulares en toda su complejidad, a través de sus estructuras, las interacciones y modificaciones.

Se trata, según DeepMind, responsable de esta inteligencia artificial (IA) junto a Isomorphic Labs, de un "modelo revolucionario" que mejora los

anteriores y que trabaja con una precisión sin precedentes.

Dentro de cada célula vegetal, animal y humana hay miles de millones de máquinas moleculares que están formadas por proteínas, ADN y otras moléculas, pero ninguna de ellas funciona por sí sola. Sólo viendo cómo interactúan entre sí, a través de millones de tipos de combinaciones, se puede empezar a entender realmente los procesos de la vida.

El nuevo modelo se basa en los fundamentos de AlphaFold 2, que en 2020 y los años siguientes supuso un 'avance fundamental' en la predicción de la estructura de las proteínas (en 2022 se publicaron las predicciones de la estructura tridimensional de casi todas las proteínas-200 millones-a partir de su secuencia de aminoácidos).

Millones de investigadores de todo el mundo han utilizado

esa versión para hacer descubrimientos en áreas como las vacunas contra la malaria, los tratamientos contra el cáncer y el diseño de enzimas, señala Google DeepMind.

MÁS ALLÁ DE LAS PROTEÍNAS

Ahora, las mejoras sustanciales introducidas en la arquitectura del aprendizaje profundo y el sistema de entrenamiento permiten predecir con mayor precisión la estructura de una amplia gama de sistemas biomoleculares en un marco unificado.

En el caso de las interacciones de las proteínas con otros tipos de moléculas, consigue una mejora de al menos el 50% en comparación con los métodos de predicción existentes, y para algunas categorías importantes de interacción se ha duplicado la exactitud de predicción.

"AlphaFold 3 nos lleva más allá de las proteínas para abar-

car un amplio espectro de biomoléculas. Este salto podría dar lugar a una ciencia más transformadora, desde el desarrollo de materiales biorrenovables y cultivos más resistentes hasta la aceleración del diseño de fármacos y la investigación genómica", agrega.

A partir de una lista de moléculas, AlphaFold 3 es capaz de generar su estructura tridimensional conjunta, mostrando cómo encajan entre sí. Modela grandes biomoléculas como proteínas, ADN y ARN, así como pequeñas moléculas, también conocidas como ligandos.

Además, puede modelar modificaciones químicas de estas moléculas que controlan el funcionamiento saludable de las células y que, cuando se al-

teran, pueden provocar enfermedades.

Esta nueva ventana a las moléculas de la vida revela cómo están todas conectadas y ayuda a comprender cómo esas conexiones afectan funciones biológicas, como la acción de los fármacos, la producción de hormonas y el proceso de reparación de ADN que preserva la salud.

'GOOGLE MAPS' MOLECULAR

Los científicos pueden acceder gratuitamente a la mayoría de sus funciones a través del recién lanzado servidor AlphaFold. Con unos pocos clics, pueden aprovechar la potencia de AlphaFold 3 para modelar estructuras compuestas por proteínas, ADN, ARN y una se-

lección de ligandos, iones y modificaciones químicas.

"AlphaFold 3 tiene el potencial de ser tan innovador como AlphaFold, cuando se lanzó por primera vez. Con el servidor, ya no se trata sólo de predecir estructuras, sino de facilitar generosamente el acceso y permitir a los investigadores plantearse preguntas atrevidas y acelerar los descubrimientos", apunta Céline Bouchoux, del Instituto Francis Crick.

"Comprender el mundo biomolecular que llevamos dentro y cómo las complejas redes de moléculas interactúan en nuestras células, es un punto de partida crucial para entender y tratar las enfermedades con un diseño racional de fármacos", afirma Isomorphic Labs. ☞