

LA IA "RESUCITA" MOLÉCULAS DE CRIATURAS DEL PASADO, COMO EL MAMUT, PARA CREAR ANTIBIÓTICOS

SALUD. Estudio demuestra que aprendizaje profundo sirve para extraer proteínas de todos los organismos extintos.

Agencias

La resistencia a los antibióticos representa un problema de salud pública y 'resucitar' moléculas gracias a tecnologías vanguardistas se ha convertido en una vía prometedora. Ahora, un nuevo estudio demuestra que el aprendizaje profundo sirve para extraer proteínas de todos los organismos extintos, también mamuts.

Los resultados se publican en la revista *Nature Biomedical Engineering*, en un artículo que lidera el español César de la Fuente, de la Universidad de Pensilvania, en Estados Unidos.

"La resistencia a los antimicrobianos es una de las mayores amenazas de nuestro tiempo y se necesitan urgentemente nuevos antibióticos. Hoy informamos del descubrimiento impulsado por la inteligencia artificial (IA) de decenas de miles de potenciales antibióticos en organismos extintos", resume De la Fuente en la red social X.

DESEXTINCIÓN MOLECULAR

La desextinción molecular tiene como objetivo resucitar moléculas para resolver la resistencia a los antibióticos y otros problemas biológicos y biomédicos actuales.

Gracias al aprendizaje automático, el laboratorio de De la Fuente ha descubierto las primeras moléculas terapéuticas en organismos extintos, lanzando -según señala el grupo en su web- el campo de la desextinción molecular.

"Creemos que resucitar moléculas del pasado puede ayudar a resolver problemas actuales, como la resistencia a los antibióticos. De hecho, la biología



LA MAMUTSINA-2 FUE UNO DE LOS COMPUESTOS USADOS EXPERIMENTALMENTE DE MANERA EXITOSA CONTRA PATÓGENOS BACTERIANOS.

de la resurrección es un campo emergente que pretende devolver a la vida cadenas de moléculas y organismos más complejos con el objetivo último de beneficiar a la humanidad".

En el artículo el equipo de la Universidad de Pensilvania muestra que el aprendizaje profundo se puede utilizar para extraer los proteomas -grupo de proteínas elaboradas por un organismo- de todos los organismos extintos disponibles para descubrir péptidos antibióticos.

Para ello, tal y como explica el científico, y para acelerar el descubrimiento, desarrollaron un nuevo modelo de IA llamado APEX, gracias al cual se ha descubierto 'con éxito' numerosos compuestos antibióticos en criaturas del pasado, como el mamut lanudo.

Este modelo es la culminación

de varios años de trabajo, basado en décadas de investigación previa sobre métodos de secuenciación de material genético antiguo.

Anteriormente su laboratorio había explorado los proteomas de nuestros parientes más cercanos, los neandertales y los denisovanos. "Identificamos moléculas antibióticas en humanos modernos y antiguos, incluidos los neandertales. Esto nos llevó a plantear la hipótesis de que moléculas similares podrían conservarse a lo largo de la evolución", dice.

Para explorar esta hipótesis, los investigadores tuvieron que pasar de la extracción de varios proteomas a cientos a la vez, y para ello tuvieron que desarrollar un método más potente.

Así nació APEX, "nuestro nuevo modelo de inteligencia

artificial diseñado para analizar todos los organismos extintos conocidos por la ciencia: el 'extinctoma'", detalla en un hilo en X César de la Fuente.

Los investigadores entrenaron conjuntos de modelos de aprendizaje profundo para la predicción de la actividad antimicrobiana y lo utilizaron para extraer 10.311.899 péptidos.

Los modelos predijeron 37.176 secuencias con actividad antimicrobiana de amplio espectro, 11.035 de las cuales no se encontraban en organismos existentes.

EXPERIMENTOS EN RATONES

El equipo sintetizó 69 péptidos -cadena corta de aminoácidos- y confirmaron experimentalmente su actividad contra patógenos bacterianos. La mayoría de los péptidos mató a las bacte-

rias 'despolarizando' su membrana citoplasmática, contrariamente a lo que ocurre con los péptidos antimicrobianos conocidos, que tienden a dirigirse a la membrana externa, escriben los autores en su artículo.

En particular, los compuestos principales (entre ellos la mamutina-2 del mamut lanudo; la elefasina-2 del elefante de colmillos rectos; la hidrodamina-1 de la antigua vaca marina; la milodonina-2 del perezoso gigante; y la megalocerina-1 del extinto alce gigante) mostraron actividad antiinfecciosa en ratones con abscesos cutáneos o infecciones del muslo.

"Muchos de estos compuestos resultaron eficaces tanto 'in vitro' como en dos modelos preclínicos de ratón, con una actividad comparable a la del antibiótico polimixina B",

apunta el investigador, quien la semana pasada publicó en la revista *Cell*, junto a científicos de la Universidad Tecnológica de Queensland (Australia), una investigación que identificó, con ayuda de la IA, casi un millón de fuentes potenciales de antibióticos en la naturaleza.

La desextinción molecular ayudada por el aprendizaje profundo puede acelerar el descubrimiento de moléculas terapéuticas, concluyen los autores en su artículo de *Nature Biomedical Engineering*.

"Las moléculas descubiertas por APEX (...) son ahora candidatas a antibióticos preclínicos. Nuestro trabajo con IA ha acelerado drásticamente el descubrimiento de antibióticos: ¡ahora se pueden hacer años de trabajo en horas!", dice en la red social. ☞