

Innovación con IA en la creación de nuevos medicamentos

Kevin Iván Olivares Muñoz
Universidad Autónoma de Ciudad Juárez
al197950@alumnos.uacj.mx

Resumen

En los últimos años, los fármacos peptídicos han ganado atención por sus propiedades únicas, como alta especificidad y baja toxicidad, siendo útiles para tratar diversas enfermedades. Tradicionalmente, el descubrimiento de estos fármacos se ha hecho mediante experimentación directa, pero este método es costoso y lento. Ahora, la inteligencia artificial (IA) ofrece nuevas oportunidades, facilitando la generación de nuevos fármacos peptídicos. En este artículo se destaca el potencial que tiene la IA en el descubrimiento de nuevos fármacos peptídicos, sus retos y consideraciones.

En los últimos años, los medicamentos basados en péptidos han ganado mucha atención debido a sus propiedades únicas, como su alta especificidad y afinidad para unirse a otras proteínas, su baja toxicidad y su potencial para tratar una amplia variedad de enfermedades, incluyendo el cáncer, enfermedades inmunológicas, infecciones, trastornos metabólicos y neurológicos. Los péptidos son moléculas formadas

por cadenas cortas de aminoácidos, que son los bloques básicos de las proteínas, y desempeñan un papel fundamental en muchos procesos biológicos. Actualmente, más de 100 medicamentos peptídicos están en uso, principalmente para el tratamiento de la diabetes, utilizando péptidos análogos al GLP-1 (un tipo de hormona), que estimulan la producción de insulina en respuesta a niveles elevados de glucosa en sangre.

Tradicionalmente, el desarrollo de medicamentos peptídicos se ha llevado a cabo de manera empírica, es decir, mediante experimentación directa. Sin embargo, este enfoque presenta muchas limitaciones, como el tiempo que requiere, la necesidad de una experiencia considerable y los altos costos asociados al proceso de prueba y error. En este contexto, la inteligencia artificial (IA) abre nuevas oportunidades, utilizando herramientas más accesibles, como los modelos de lenguaje avanzados (LLMs, por sus siglas en inglés), para resolver problemas complejos. Por ejemplo, aplicaciones como ChatGPT están siendo estudiadas en el ámbito médico y en investigaciones científicas de gran alcance.

La IA incluye una amplia gama de tecnologías, como el aprendizaje automático (machine learning), el aprendizaje profundo (deep learning), el procesamiento de lenguaje natural (natural language processing) y la minería de datos (data mining). Estas tecnologías permiten analizar e interpretar grandes volúmenes de datos químicos y biológicos. Así, la IA puede facilitar la creación de nuevos medicamentos peptídicos mediante la predicción computacional de algoritmos generados. Sin el apoyo de la IA, analizar la enorme cantidad de posibles secuencias de péptidos sería una tarea prácticamente imposible.

Por ejemplo, los modelos de aprendizaje automático pueden entrenarse con grandes conjuntos de datos sobre interacciones proteína-péptido, para identificar patrones y predecir uniones con alta afinidad entre proteínas. Un caso práctico es el uso de un algoritmo llamado In Silico Peptide Synthesizer (InSiPS), que permite diseñar herramientas computacionales para generar nuevas secuencias de proteínas sintéticas que interactúan con objetivos específicos y con

un bajo margen de error. Entre sus aplicaciones, InSiPS ha sido utilizado para predecir péptidos que se unen a la superficie de la proteína spike del SARS-CoV-2, lo que ha sido útil como método de diagnóstico de COVID-19. Otra aplicación destacada es el diseño de péptidos inhibidores de la proteasa HIV-1 (una enzima clave para la replicación del VIH) utilizando RosettaScripts, un sistema de software especializado.

No obstante, a pesar de las ventajas que ofrece la IA en la creación de medicamentos peptídicos, también enfrenta retos importantes. Entre ellos, la disponibilidad de datos de calidad, la validación de estos datos y la infraestructura tecnológica necesaria. Además, las cuestiones éticas juegan un papel fundamental. La transparencia y la integridad en el desarrollo de tecnologías basadas en IA requieren la implementación de directrices y regulaciones, especialmente en temas como la privacidad de los datos y el uso responsable de estas tecnologías en el ámbito de la salud.

Aunque la aplicación de la IA en la generación de péptidos es relativamente reciente, está evolucionando rápidamente. A día de hoy, no existen en el mercado péptidos generados por IA para uso terapéutico. Sin embargo, las posibilidades que ofrece la IA son prácticamente infinitas, y se espera que contribuya al desarrollo de péptidos completamente nuevos que puedan mitigar o curar enfermedades que, hasta ahora, no han podido ser tratadas con éxito con las tecnologías actuales.

Referencia

Nissan, N., Allen, M., Sabatino, D. & Biggar, K. "Future perspective: harnessing the power of artificial intelligence in the generation of new peptide drugs". *Biomolecules*, vol. 14. 2024 <https://doi.org/10.3390/biom14101303>.