

NO DAÑAR, OBEDECER Y PROTEGER:

La revolución asimoviana en la química farmacéutica

CARLOS NARANJO CASTAÑEDA
EUSEBIO JUARISTI

Imagina un futuro en el que robots, como los que imaginó Isaac Asimov (1920-1992) en sus historias de ciencia-ficción, puedan colaborar con científicos para descubrir nuevos medicamentos y tratamientos para las enfermedades. En el número 35 de *El Mercurio Volante* (enero de 2025) apuntamos las bases para la comprensión de tecnicismos relacionados con la inteligencia artificial (IA) y la química farmacéutica. Si lo prefieres, puedes consultarlo para facilitar tu lectura (ver "Lecturas recomendadas" al final de este texto).

Efectivamente, la IA ya está siendo utilizada en la industria farmacéutica para analizar grandes cantidades de datos, simular experimentos y optimizar procesos. Pero ¿qué consecuencias tendría la creación de robots que no solo puedan diseñar y sintetizar nuevos fármacos de manera autónoma, sino que también puedan aprender de experiencias propias y mejorar continuamente su capacidad para optimizar procesos, así como para encontrar soluciones innovadoras?

Para entender el enorme potencial de la IA en la búsqueda y preparación de nuevos fármacos, es importante revisar las leyes de la robótica propuestas inicialmente por Asimov. Aunque inicialmente concebidas para robots de ficción, estas leyes han tenido un impacto sorprendente en la práctica, impulsando avances significativos en el desarrollo de instrumentos y laboratorios autónomos que revolucionan la química farmacéutica.

Específicamente, las tres leyes de la robótica de Asimov consisten en (1) **no dañar**, (2) **obedecer** y (3) **proteger**, que adquieren una relevancia especial en el tema que aquí nos interesa.

No dañar: Las máquinas y laboratorios autónomos deben ser diseñados con medidas de seguridad robustas para minimizar riesgos y garantizar la seguridad de los seres humanos que las manejen, así como para proteger el entorno de las empresas dedicadas a la búsqueda de fármacos.



Obedecer: Las máquinas y los laboratorios autónomos deben mejorar la eficiencia y la exactitud de los métodos analíticos involucrados en la búsqueda de fármacos al seguir instrucciones precisas, evitar errores, ser reproducibles y ser susceptibles a una optimización continua.

Proteger: Las máquinas y los laboratorios autónomos deben estar diseñados para proteger la integridad de los datos recolectados y la confidencialidad de los frutos de la investigación, garantizando la seguridad y la privacidad en la búsqueda de nuevos fármacos.

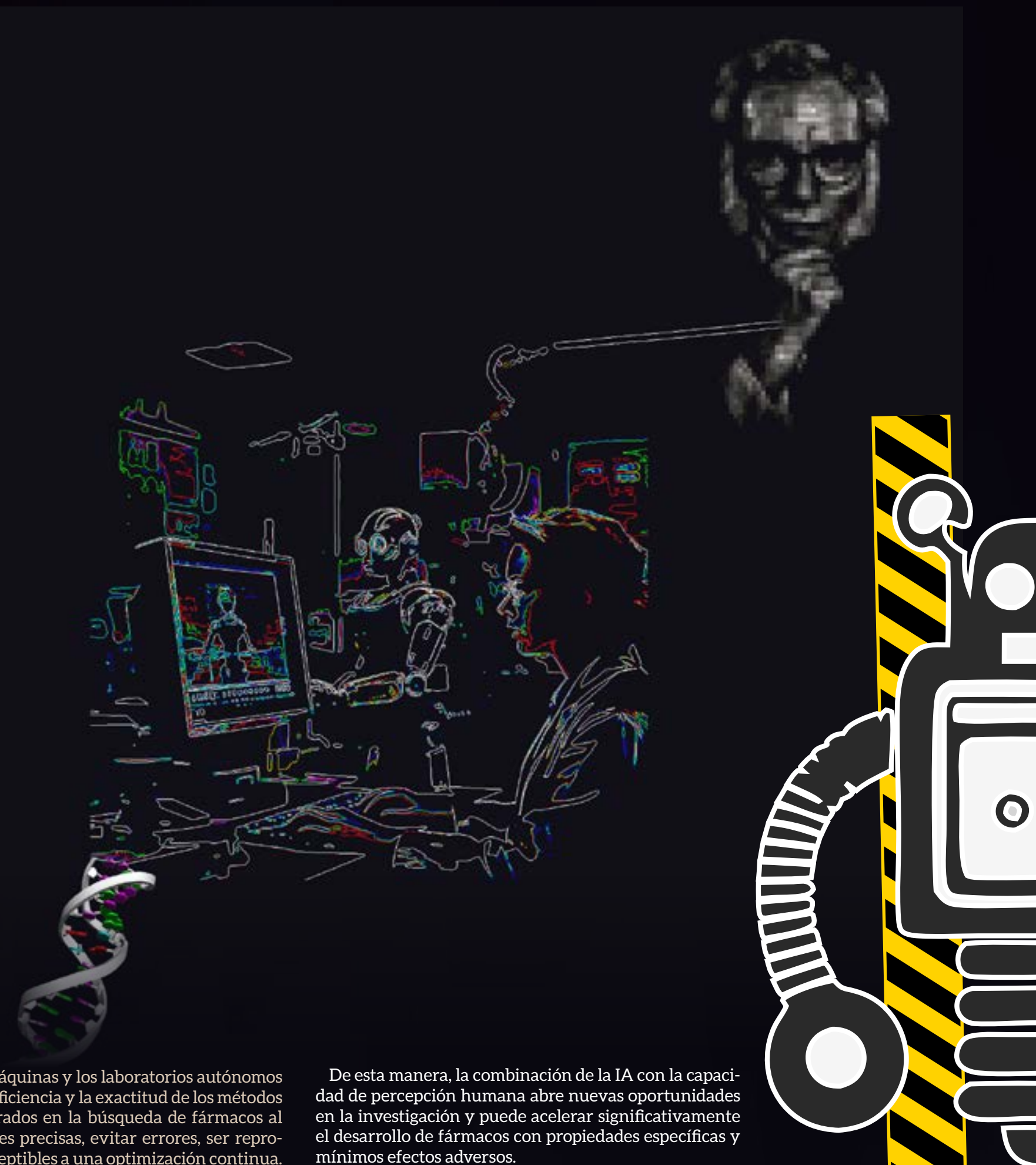
En este sentido, desde la antigüedad, la naturaleza ha sido una fuente de inspiración para el avance de la medicina. En particular, las plantas, los animales y los microorganismos han proporcionado una gran variedad de moléculas con propiedades terapéuticas. En contraste, para los científicos el proceso de descubrimiento y desarrollo de nuevos fármacos es complejo y desafiante.

En especial, la investigación farmacéutica está experimentando una transformación radical gracias a la integración de la IA. Esta tecnología permite explorar un vasto espacio químico (entiéndase por espacio químico al enorme acervo constituido por todas las moléculas que nos rodean), superando incluso las limitaciones que existen en el aislamiento e identificación de los productos naturales.

De esta manera, la combinación de la IA con la capacidad de percepción humana abre nuevas oportunidades en la investigación y puede acelerar significativamente el desarrollo de fármacos con propiedades específicas y mínimos efectos adversos.

En sus novelas de ciencia ficción, Isaac Asimov fue un visionario pionero en la exploración del potencial de la IA. A través de sus relatos y cuentos, Asimov muestra la capacidad de las máquinas controladas por IA para resolver problemas demasiado complejos para un ser humano, así como para generar nuevos conocimientos. En este artículo, profundizaremos en la descripción de las características esenciales de los instrumentos y equipos autónomos, así como en la discusión de aspectos éticos relacionados con el desarrollo de estos entes artificiales.

Bajo este contexto, la autonomía en avances de la investigación científica trasciende la simple automatización de procesos rutinarios y repetitivos. En particular, un **agente autónomo** está constituido por un sistema computacional sofisticado que emula a las neuronas en un cerebro de modo que puede tomar decisiones informadas y actuar de manera independiente en respuesta a estímulos externos, demostrando incluso capacidad de adaptación y respuesta eficaz.



Efectivamente, la autonomía de estos seres artificiales se logra mediante la integración de cuatro módulos fundamentales que trabajan en conjunto para tomar decisiones viables:

Módulo de memoria: almacena y tiene disponible ("recuerda") información de interacciones y experimentos previos lo que permite la toma de decisiones y la realización de las acciones más adecuadas para responder ante los resultados registrados.

Módulo de planificación y razonamiento: permite al ser artificial planificar y "razonar" de manera efectiva. La planificación conlleva identificar las secuencias de acciones necesarias para alcanzar un objetivo específico. Por otro lado, el proceso de razonamiento implica alcanzar las conclusiones pertinentes, así como tomar decisiones basadas en la información disponible y el análisis de los pasos lógicos requeridos.

Módulo de creación de perfiles (Perfilado): es una herramienta poderosa para la que los entes autónomos puedan "reaccionar" y proceder eficazmente. Es posible crear perfiles individuales que simulen situaciones específicas y asignen las tareas correspondientes.

Básicamente el perfilado es como darle una personalidad al ser inteligente, para que se comporte y responda de manera única. Por ejemplo, si queremos que el robot sea como un químico, podemos darle un perfil que lo haga comunicarse de manera más técnica y precisa sobre los componentes y las reacciones químicas de interés. El perfil podría decir cosas como "La fórmula química del agua es H_2O " o bien "La reacción química entre el ácido clorhídrico (HCl) y el hidróxido de sodio (NaOH) produce sal común (NaCl) y agua (H_2O)."

El Módulo de percepción es el puente entre el mundo exterior y el ente artificial autónomo durante el proceso de la toma de decisiones. Su función es interpretar la información proveniente del entorno y transformarla en un formato que pueda ser procesado por el robot. Esto incluye la interpretación de información multimodal, como texto, imágenes y estímulos auditivos (frecuencias de ondas sonoras).

En el tema que nos concierne, ¿cómo logran las máquinas descifrar el lenguaje de las moléculas y desarrollar la capacidad de crear nuevos compuestos sin contar con una capacitación profunda en los conceptos y principios de la química?

La respuesta radica en la capacidad que tienen los robots y otros instrumentos provistos de IA para analizar y procesar grandes cantidades de datos relacionados con propiedades estructurales, fisicoquímicas y farmacológicas. Aunque estas máquinas inteligentes no poseen un conocimiento químico-farmacéutico tradicional, pueden ser entrenadas para identificar patrones estructura/actividad y relaciones estructura/propiedad en los datos químicos disponibles.

En este sentido, las moléculas se pueden describir de diversas maneras, utilizando desde fórmulas estructurales bidimensionales hasta modelos tridimensionales más detallados. Además, las moléculas se pueden caracterizar a través de propiedades como la solubilidad, la reactividad molecular, la eficacia terapéutica, o los datos espectrales de técnicas como la resonancia magnética nuclear (RMN) o la espectrometría de masas (EM), que son herramientas que ayudan a conocer la composición y estructura de las moléculas.

Dichas propiedades estructurales son fundamentales para entender el comportamiento molecular. Sin embargo, para aprovechar toda esta información mediante la IA, se debe transformar a un formato numérico que una computadora pueda procesar. La conversión de las propiedades moleculares en formatos numéricos permite que los algoritmos de IA puedan aprender y analizar estos datos, lo que puede llevar a descubrimientos y aplicaciones innovadoras.

¿Cómo están revolucionando los agentes inteligentes la investigación científica en general y avance de la química en particular?

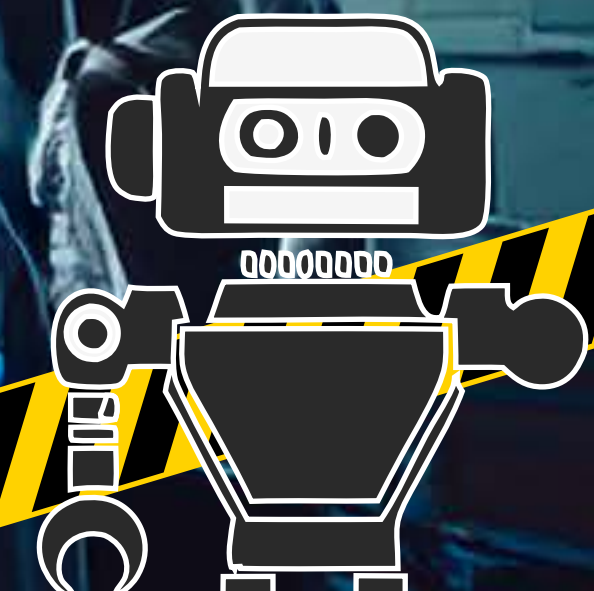
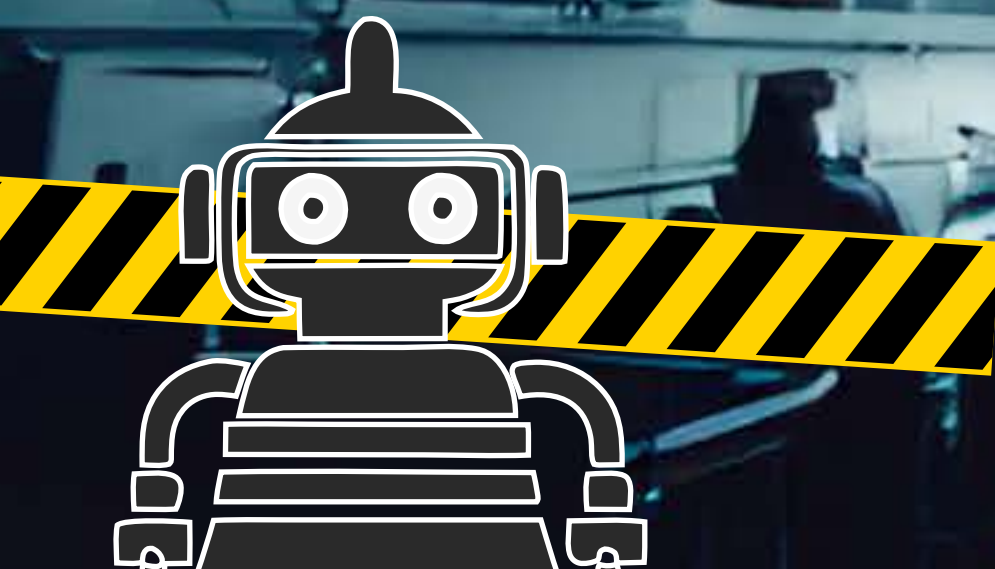
En el caso particular de la química farmacéutica, los agentes inteligentes están revolucionando la química farmacéutica al demostrar su capacidad para automatizar tareas rutinarias con mucha eficiencia y reproducibilidad; es decir, sin cometer los errores que se presentan en cualquier actividad humana.

A continuación, presentamos algunos ejemplos ilustrativos del uso de la IA en el área de la química farmacéutica.

Coscientist impulsado por el asistente provisto con IA GPT-4. Este robot diseña, organiza y lleva a cabo experimentos complejos de manera autónoma, habiendo logrado resultados excelentes en la síntesis de fármacos como la aspirina o el paracetamol. Este avance abre posibilidades para crear moléculas análogas con mayor eficiencia terapéutica y sin efectos secundarios indeseables, lo que tiene un impacto significativo en la salud pública.

ProtAgent es un sistema innovador multiagente que simula diversas funciones humanas, como la gerencia de proyectos y la ingeniería de datos. Destaca la capacidad de ProtAgent en la identificación de los genes asociados con el cáncer de páncreas. El sistema identificó con precisión más de 20 genes relevantes, con una exactitud del 80%. Este logro abre nuevas oportunidades a la investigación genética para la exploración y diseño de nuevas dianas farmacológicas innovadoras en el tratamiento del cáncer.

CALMS es un sistema de asistencia diseñado para optimizar la eficiencia en el manejo de un laboratorio. Su función principal es mejorar la operación de los instrumentos necesarios. CALMS emplea algoritmos sofisticados que facilitan la automatización de tareas y la realización de acciones precisas utilizando equipos típicos de laboratorio.



Es evidente que la investigación farmacéutica está al borde de experimentar una revolución tecnológica. Los agentes hechos por el hombre provistos de IA están demostrando su capacidad para automatizar tareas rutinarias, facilitar la aplicación de técnicas avanzadas y acelerar descubrimientos valiosos en el área de la medicina, aunque esta revolución también plantea desafíos.

Por ejemplo, Asimov enfatizó la importancia de la responsabilidad humana en el desarrollo y aplicación de la vida inteligente artificial. Se ha dicho que los seres humanos deben ser responsables de las acciones de los robots, y que deben tomar medidas para prevenir daños o abusos en materia de privacidad de datos, derechos de propiedad intelectual y acceso equitativo a terapias impulsadas por IA.

Aquí es importante considerar que la innovación tecnológica no puede ser una excusa para ignorar la ética. En particular, en el proceso de promoción de aplicaciones de la IA, siempre debemos adherirnos a los principios éticos y asegurar que no se violen la dignidad y los derechos humanos.

A continuación, algunos casos ilustrativos de la conexión entre ética y el desarrollo de fármacos mediante la IA.

La información confidencial, como son los datos personales y genómicos, debe ser protegida para evitar filtraciones o su mal uso. Para lograr esto es fundamental establecer los mecanismos apropiados para la protección de datos, como son la anonimización y la encriptación.

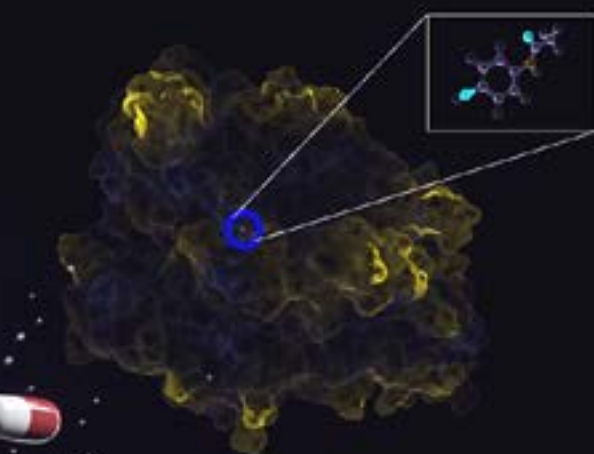
Así pues, la innovación tecnológica es el motor que impulsa el desarrollo deseado en el campo farmacéutico. En particular, la aplicación de la IA abre nuevas oportunidades en la investigación y el desarrollo de nuevos fármacos. Por lo tanto, es fundamental que los investigadores sigan explorando el potencial de la IA en el diseño de fármacos, aprovechando al máximo sus ventajas únicas en el análisis de datos y el reconocimiento de patrones, que conllevan a la implementación de herramientas y métodos más potentes para el desarrollo de medicinas más eficientes y seguras.



Paracetamol



Aspirina



Ligando enzimático

La integración de la IA en los esquemas del trabajo diario para la elaboración de los productos farmacéuticos nos lleva a reflexionar sobre la visión de Isaac Asimov. En sus obras, Asimov exploró la coyuntura y oportunidades, así como los desafíos de la interacción entre humanos y máquinas. En efecto, en la actualidad estamos viviendo una situación en la que las herramientas de IA se están convirtiendo en parte integral de la investigación química y farmacéutica.

Para garantizar que la tecnología de IA se utilice de manera responsable y ética, debemos buscar inspiración en Asimov. Su enfoque en la colaboración y la comunicación entre humanos y máquinas nos ofrece una guía valiosa para asegurarnos de que la IA se utilice para *enriquecer la humanidad, en lugar de reemplazarla*. Así, la aceptación generalizada de las herramientas provistas de IA en la investigación farmacéutica ofrece una oportunidad única para reflexionar sobre nuestros valores y principios.

¿Qué tipo de futuro queremos crear? ¿Cómo podemos asegurarnos de que la tecnología se utilice para beneficio de la humanidad? Estas son las preguntas que se planteó Asimov y que nosotros debemos hacernos a medida que avanzamos en esta nueva era de la investigación.



LECTURAS RECOMENDADAS

- Naranjo Castañeda, C.; Juaristi, E. "El moderno Prometeo: La Inteligencia Artificial en el desarrollo de fármacos", *Mercurio Volante*, suplemento de *Hipocrita Lector*, 2025, No. 35, 2-9.
- Caldas Ramos, M.; Collison, C.; White, A. D. "A Review of Large Language Models and Autonomous Agents in Chemistry". *Chem. Sci.* 2025, 16, 2514
- Fu, L.; Jia, G.; Liu, Z.; Pang, X.; Cui, Y. "The Applications and Advances of Artificial Intelligence in Drug Regulation: A Global Perspective". *Acta Pharm. Sin. B* 2025, 15, 1-14.

CARLOS NARANJO CASTAÑEDA
Alumno de doctorado del departamento de Química en el Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (Cinvestav).

EUSEBIO JUARISTI
Profesor-investigador titular de dicho departamento, pertenece a El Colegio Nacional.

