

08 DE MAYO DE 08

Investigadores lanzan un juego en Internet sobre plegamiento proteico

Los juegos en Internet de múltiples jugadores nos hacen pensar en títulos increíblemente exitosos, tales como “El mundo del arte de la guerra” y “Ultima”. El 8 de mayo, investigadores del Instituto Médico Howard Hughes (HHMI) en la Universidad de Washington acercan el arcano mundo del plegamiento proteico al terreno de juegos en Internet con el lanzamiento de “Pliégalo”, juego gratis en el cual jugadores de todo el mundo compiten diseñando proteínas. La ventaja para el mundo real: Los científicos probarán las proteínas diseñadas por los jugadores para ver si son compuestos que podrían ser viables para nuevas drogas.

Los usuarios pueden acceder al juego vía Internet en www.fold.it

El desarrollo del juego en Internet es una extensión natural de la búsqueda del investigador del HHMI, David Baker, para comprender la forma en la que las proteínas -los ladrillos de construcción de las células- se pliegan en formas tridimensionales únicas. Durante la última década, Baker y sus colegas han logrado un progreso constante en el desarrollo de algoritmos computacionales para predecir la forma en la que una cadena lineal de aminoácidos se plegará en la forma característica de una proteína determinada. La comprensión detallada de la estructura de una proteína puede ofrecer a los científicos mucha información -al revelar complejidades de la función biológica de las proteínas y sugerir nuevas ideas para el diseño de drogas-.

La predicción de las formas que tomarán las proteínas naturales es uno de los desafíos preeminentes de la biología, y el modelado de incluso una proteína pequeña requiere de la fabricación de trillones de cálculos. Durante los últimos tres años, voluntarios de todo el mundo -que ahora son cerca de 200.000- han donado tiempo en sus computadoras cuando están inactivas para realizar esos cálculos en una red distribuida llamada *Rosetta@home*. La lógica computacional detrás de la red es un algoritmo llamado *Rosetta* que utiliza la técnica de Monte Carlo para encontrar el mejor “encaje” para todas las partes de una proteína dada.

Pero a medida que los voluntarios de *Rosetta* observaban sus computadoras a ciegas intentando encontrar una solución al probar de forma metódica cada combinación y forma posibles para encontrar el mejor encaje, empezaron a pensar que un poco de intervención humana podría acelerar las cosas. “¡La gente escribía diciendo: `¡Oigan! ¡La computadora está haciendo cosas tontas! Sería fantástico si pudiéramos ayudar a dirigirla!”, recuerda Baker, quien se encuentra en la Universidad de Washington (UW) donde desarrolló el algoritmo y la red *Rosetta*.

Baker no sabía cómo podría lograrlo hasta hace aproximadamente 18 meses, cuando fue de excursión al Monte Rainier con su vecino David Salesin, científico computacional de la Universidad de Washington, quien también tiene un laboratorio de investigación en el cercano Adobe Systems. Baker y Salesin comenzaron a discutir maneras de hacer que *Rosetta* fuera más interactiva. Con un gusto inherente por la competición, Salesin pensó que un juego en Internet de múltiples jugadores era la forma de lograrlo. Para cuando volvieron de nuevo al coche, ya se habían decidido por esa idea. Salesin le dio a Baker los nombres de tres colegas, liderados por el científico computacional de UW Zoran Popović, que podrían ayudar a Baker a crear el juego.

Durante varios meses después, Popović y sus estudiantes Adrien Treuille y Seth Cooper, crearon el programa, y el equipo lo probó en pequeña escala. Un juego entre los equipos de la Universidad de California y de la Universidad de Illinois despertó fervor y vítores inesperados entre los espectadores. “Participaron 30 ó 40 personas”, dice Baker. “La competición fue muy intensa”.

“Pliégalo” lleva a los jugadores a través de una serie de niveles de práctica diseñados para enseñar los fundamentos del plegamiento proteico, antes de darles rienda suelta con proteínas verdaderas de la naturaleza. “Nuestra meta principal era asegurarnos de que cualquier persona podría hacerlo, aunque no supieran qué era la bioquímica o el plegamiento proteico”, dice Popović. Por el momento, el juego sólo utiliza proteínas cuyas estructuras tridimensionales han sido resueltas por los investigadores. Pero, Popović dice, “pronto introduciremos rompecabezas para los cuales no sabemos la solución”.

Baker tiene mucha esperanza de que el juego acelere el a veces aburrido trabajo de la predicción de estructuras. Pero la parte del juego que lo entusiasma más hará su debut el próximo otoño, cuando los jugadores podrán diseñar proteínas completamente nuevas. Se podría encontrar utilidad para proteínas nuevas en una serie de usos, desde productos farmacéuticos hasta productos químicos industriales o para limpiar la contaminación. Baker piensa que, con la habilidad de cualquier persona con una computadora y una

conexión a Internet, el ritmo de descubrimiento podría aumentar vertiginosamente. “Mi sueño es que un niño de 12 años de Indonesia resulte ser un prodigio y construya una curación para el VIH”, dice.