



Febrero 2021

### INTELIGENCIA ARTIFICIAL Y PROTEÍNAS

Me ha parecido muy interesante el artículo de Ewen Callaway «Inteligencia artificial y plegamiento de proteínas» [INVESTIGACIÓN Y CIENCIA, febrero de 2021]. Sin embargo, hay un aspecto que el artículo menciona solo muy por encima y que considero muy importante: ¿qué parte del algoritmo se basa en la interpolación (aprendizaje) y cuál corresponde a las predicciones basadas en modelos físicos?

Cuanto menos basado en la interpolación de datos conocidos sea el proceso, más importante y fundamental será este salto hacia adelante. Este trabajo es una clara prueba de que la inteligencia artificial se va adentrando en todas las ramas de la ciencia. Pero no olvidemos que se trata de un arma de doble filo. Por un lado, la inteligencia artificial nos permite estudiar situaciones muy complejas, en las que las relaciones entre subsistemas no son obvias y las cuales nunca detectaríamos sin su ayuda. Pero, por otro, estas herramientas pueden convertirse en cajas negras, de forma que dejemos de preguntarnos sobre los principios fundamentales relacionados con los fenómenos físicos que rigen los sistemas complejos.

ORIOL VENDRELL  
Cátedra de Química Teórica  
Universidad de Heidelberg

### LA QUÍMICA EN INVESTIGACIÓN Y CIENCIA

INVESTIGACIÓN Y CIENCIA es, sin duda, la revista de referencia de divulgación científica

en español. A través de sus páginas es posible estar al día de los principales avances de la investigación en física, medicina, biología y todas las ciencias con un impacto importante. ¿Todas? No. Una parte, no precisamente pequeña, se resiste a ser reconocida, y no por voluntad de esa ciencia: la química.

Ya desde un primer momento, en las distintas secciones de la web de la revista queda claro que el papel que se le da a la química es el de un mero apéndice de la física, cual libro de segundo de ESO que reserva la química a las últimas clases de la asignatura de física (si sobra tiempo). Sorprende este hecho cuando la química es la ciencia central en infinidad de aplicaciones presentes y futuras, una centralidad aún mayor que el de la física, en mi opinión (y en la de muchos expertos en filosofía de la ciencia). Esta visión reduccionista que consideraba la química como una parte menor de la física fue superada hace tiempo, como se puede ver en los trabajos de Alexandru Balaban y Douglas J. Klein, por ejemplo.

Parece que cada cierto tiempo hay que recordar que la química es fundamental en aspectos tan diversos como la lucha contra el cambio climático, la nanomedicina, la computación cuántica, la explicación del origen de la vida o el desarrollo de vacunas (como varias de las vacunas para la COVID-19 nos muestran). Sin embargo, en INVESTIGACIÓN Y CIENCIA, la química y la teoría de cuerdas están al mismo nivel de importancia. Que nadie se ofenda, pero resulta sorprendente.

«La visión reduccionista que consideraba la química como una parte menor de la física fue superada hace tiempo»  
—Fernando Herranz (CSIC)

Como asiduo lector de INVESTIGACIÓN Y CIENCIA y como químico, creo que la calidad e impacto de la revista sería aún mayor que el que tiene ahora si corrigiera este, en mi opinión, extraño error.

FERNANDO HERRANZ  
Instituto de Química Médica (CSIC)  
Madrid

RESPONDEN LOS EDITORES: *Agradecemos el comentario. Una cuestión que afecta a la divulgación de la química es que, debido*

*precisamente al carácter ubicuo de esta ciencia, sus avances se perciben a menudo como asociados a otras áreas de conocimiento. Un ejemplo representativo lo aportan los premios Nobel de química concedidos en los últimos años. Todos los descubrimientos relacionados han sido tratados en INVESTIGACIÓN Y CIENCIA con anterioridad a la concesión del galardón, si bien es cierto que a menudo se han presentado vinculados a otras ramas: genética (CRISPR), energía (baterías de litio), biotecnología (evolución dirigida de proteínas), etcétera.*

*En INVESTIGACIÓN Y CIENCIA somos plenamente conscientes de que la química es, precisamente por su transversalidad, una de las ciencias con mayor impacto en la sociedad. En 2011, Año Internacional de la Química, la revista publicó cada mes —y en abierto en la web— contenidos relacionados con el desarrollo y las aplicaciones de esta ciencia, y en diciembre un informe especial conmemorativo. A lo largo de 2019, Año Internacional de la Tabla Periódica, publicamos una serie de artículos sobre la historia y evolución de esta obra emblemática, que luego recopilamos en un monográfico. La lista de contenidos sobre química es larga y seguirá creciendo.*

*En cuanto a las secciones de la web, es importante señalar que estas no pretenden establecer ninguna clasificación jerárquica de áreas de conocimiento. Se basan en los criterios de búsqueda que intuitivamente emplean los usuarios, y su objetivo es facilitar dichas búsquedas y la navegación a través de nuestros contenidos.*

*No obstante todo lo anterior, es cierto que, en comparación con otras disciplinas, la química cuenta con una percepción pública que no está a la altura del papel central que desempeña como ciencia. Como medio de divulgación, INVESTIGACIÓN Y CIENCIA debería contribuir más a superar esa grieta.*

#### CARTAS DE LOS LECTORES

INVESTIGACIÓN Y CIENCIA agradece la opinión de los lectores. Le animamos a enviar sus comentarios a:

PRENSA CIENTÍFICA, S. A.  
Valencia 307, 3.º 2.ª, 08009 BARCELONA  
o a la dirección de correo electrónico:  
redaccion@investigacionyciencia.es

La longitud de las cartas no deberá exceder los 2000 caracteres, espacios incluidos. INVESTIGACIÓN Y CIENCIA se reserva el derecho a resumirlas por cuestiones de espacio o claridad. No se garantiza la respuesta a todas las cartas publicadas.