



# La IA y la estructura de las proteínas

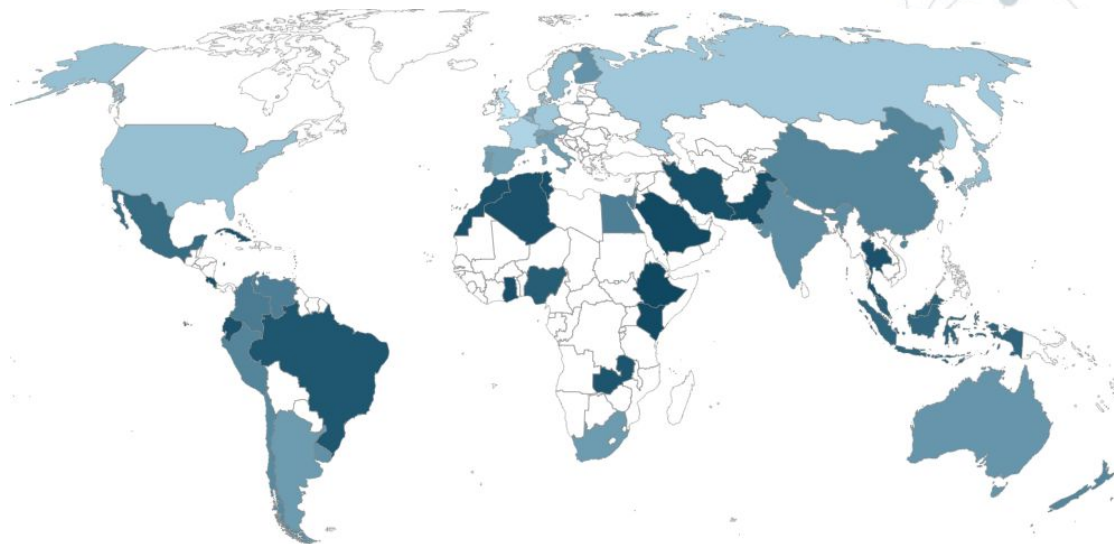
Premio Nobel de Química 2024

Jesus Alvarado Huayhuaz

*Universidad Nacional de Ingeniería  
Universidad de Sao Paulo*

# La Sociedades de Química en el Mundo

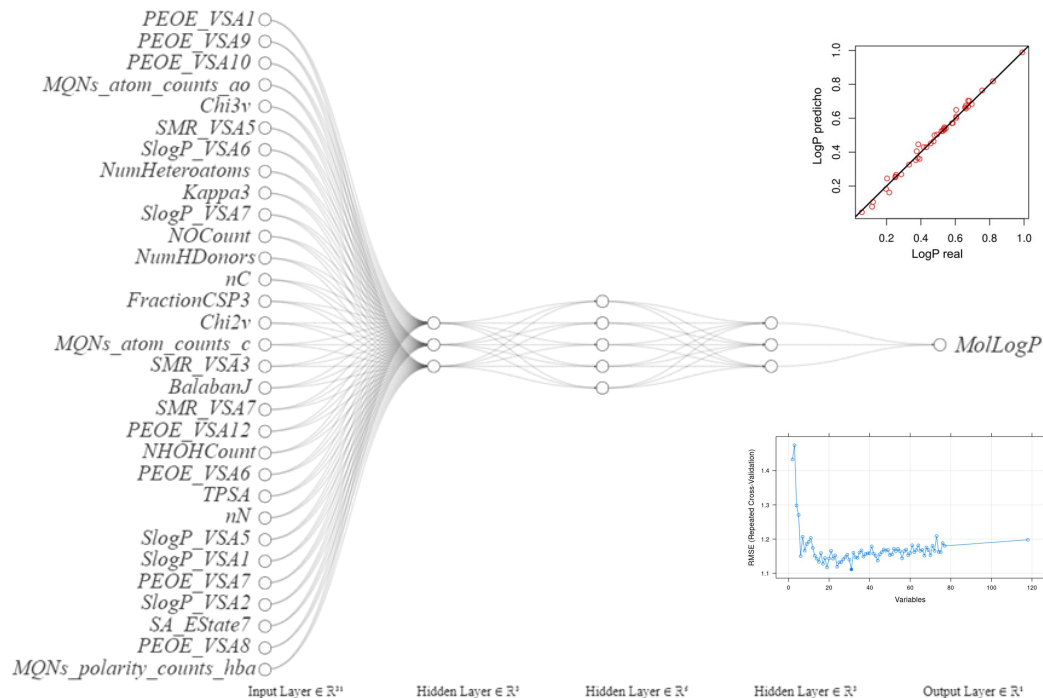
Fundación	Sociedad Química
1912	Asociación Química Argentina (AQA)
1977	Sociedade Brasileira de Química (SBQ)
1928	Sociedad Chilena de Química (SCHQ)
1941	Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas
1956	Sociedad Química de México (SQM)
1933	<b>Sociedad Química del Perú (SQP)</b>
1921	Asociación Química del Uruguay (AQU)
1938	Sociedad Venezolana de Química (SVQ)
1981	Sociedad Ecuatoriana de Química
1985	Asociación Costarricense de Química
1979	Sociedad Cubana de Química
1876	American Chemical Society (ACS)
1867	Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)
1841	Royal Society of Chemistry (RSC)
1857	Société Chimique de France (SCF)
1909	Società Chimica Italiana (SCI)
1903	Real Sociedad Española de Química (RSEQ)
1883	Svenska Kemistsamfundet (SK)
1901	Société Suisse de Chimie (SSC)
1903	Koninklijke Nederlandse Chemische Vereniging
1887	Société Royale de Chimie (SRC)
1897	Österreichische Chemische Gesellschaft (ÖGCh)
1879	Kemisk Forening (KF)
1919	Suomen Kemian Seura (SKS)
1868	Russian Chemical Society
1911	Sociedade Portuguesa de Química (SPQ)



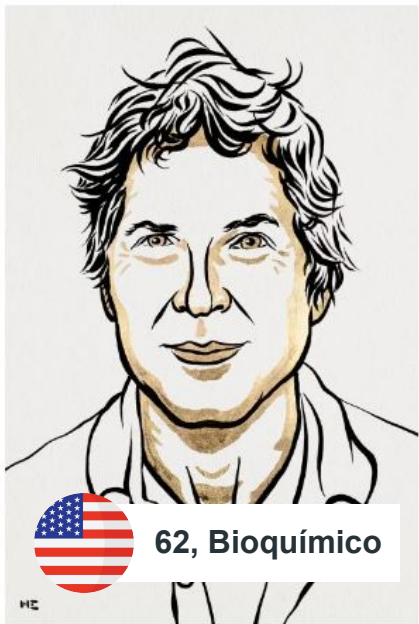
Año de Fundación de la Sociedad



# PREDICCIÓN DEL COEFICIENTE DE PARTICIÓN DE SIDERÓFOROS USANDO REDES NEURONALES ARTIFICIALES



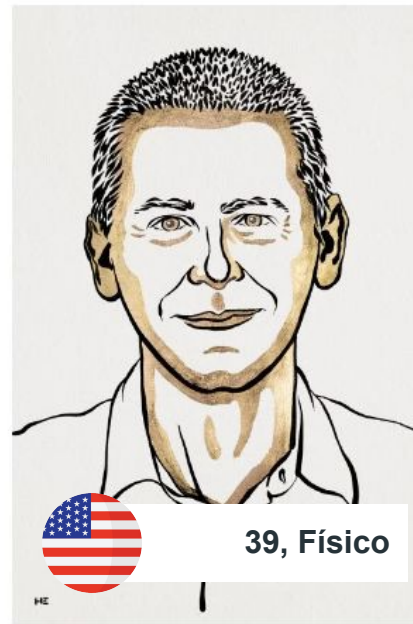
# The Nobel Prize in Chemistry 2024



David Baker



Demis Hassabis



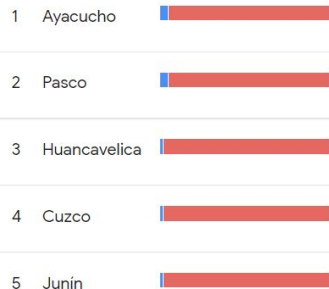
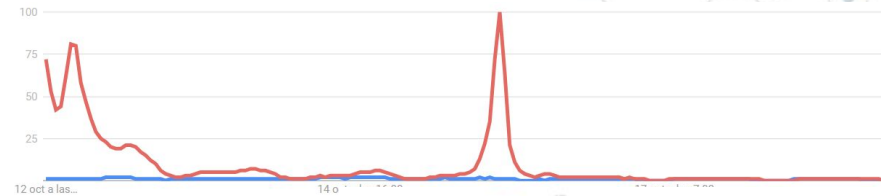
John M. Jumper

## Un Nobel en tiempo récord

Nobel de Química	Descubrimiento	Premio Nobel	Tiempo transcurrido
<b>David Baker, John Jumper, Demis Hassabis</b>	<b>2021</b>	<b>2024</b>	<b>3</b>
Emmanuelle Charpentier y Jennifer Doudna (CRISPR)	2012	2020	8
Ahmed Zewail (Femtosegundos)	1987	1999	12
Marie Curie (Radioactividad)	1898	1911	13
Jean-Marie Lehn (Química supramolecular)	1967	1987	20
Linus Pauling (Enlace químico)	1931	1954	23
Frances Arnold (Evolución dirigida de enzimas)	1993	2018	25

● premio nobel 2024  
Término de búsqueda

● peru uruguay  
Término de búsqueda

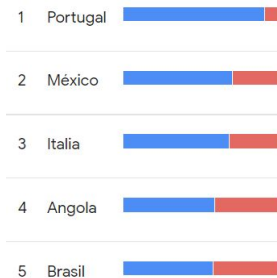


Tendencias (Última actualización: 19 oct, 1:30)

- ☐ utc cajamarca - alianza lima
- ☐ César Vallejo - Cienciano
- ☐ Deportivo Garcilaso - Carlos Mannucci
- ☐ Sport Boys - Melgar
- ☐ River Plate - Vélez
- ☐ Valentina Sampaio
- ☐ Cathy Barriga

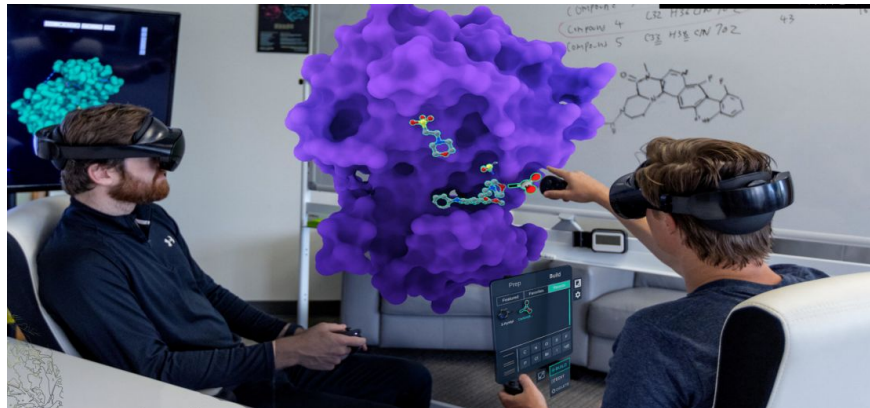
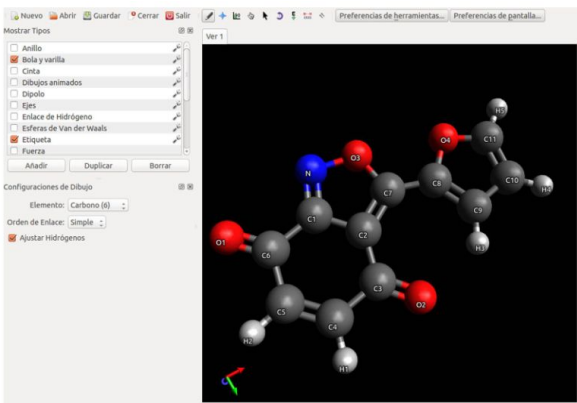
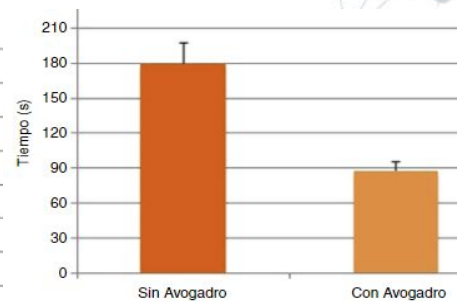
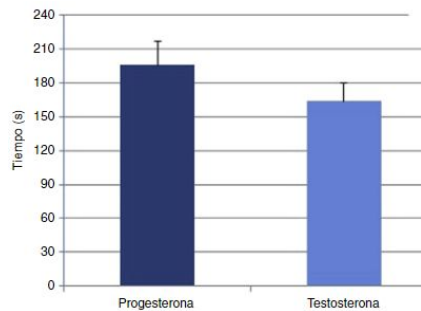
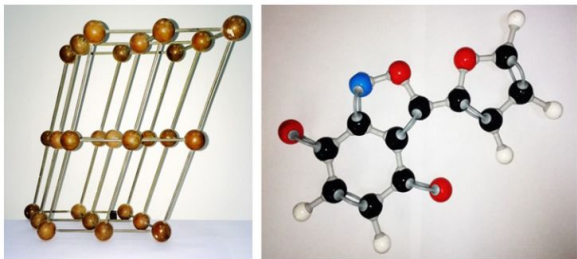
Volumen de búsqueda

200 mil+
↑ 1.000 %
50 mil+
↑ 1.000 %
20 mil+
↑ 1.000 %
50 mil+
↑ 1.000 %
10 mil+
↑ 1.000 %
2 mil+
↑ 1.000 %
2 mil+
↑ 1.000 %



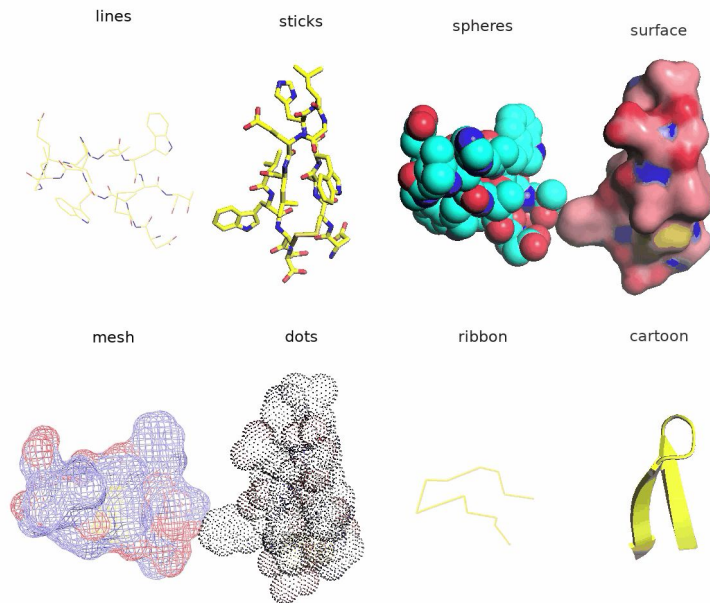


# La importancia de los datos y la información



Torres Quezada, C., *et al.* (2017). Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas para alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica. *Educación química*, 28(1), 22-29.

# La importancia de la visualización



Jesus Alvarado-Huayhuaz

Tipo de entrada

Vista 3D

1D ↔ 3D

Generación de estructura tridimensional a partir del código SMILES

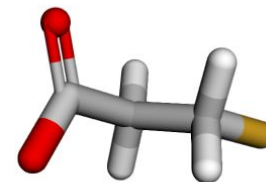
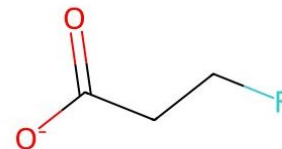
## Visualización en 3D

Ingresa tu código SMILES

CCCC(=O)[O-]

Molecule 2D 😊

Molecule 3D 🐼



<https://quimicaorganica.streamlit.app/>



# Un niño de 6 años ha visualizado más que un adulto mayor

## 6 años:

- Consumo diario de videos: 2 horas al día.
- 1. **Imágenes por segundo:**  
30 frames por segundo.
- 2. **Imágenes por minuto:**  $30 \text{ fps} \times 60 \text{ segundos} = 1800 \text{ imágenes por minuto}$ .
- 3. **Imágenes por hora:**  $1800 \text{ imágenes/minuto} \times 60 \text{ minutos} = 108,000 \text{ imágenes por hora}$ .
- 4. **Imágenes por día:**  $108,000 \text{ imágenes/hora} \times 2 \text{ horas/día} = 216,000 \text{ imágenes por día}$ .
- 5. **Imágenes en 6 años:**  $216,000 \text{ imágenes/día} \times 2190 \text{ días} = \mathbf{472,440,000 \text{ imágenes aproximadamente}}$ .

## 80 años:

Para simplificar, asumimos que no consume contenido digital (ni videojuegos, ni videos, etc.), pero su exposición a imágenes será a través de medios tradicionales como televisión, cine y el entorno visual cotidiano.

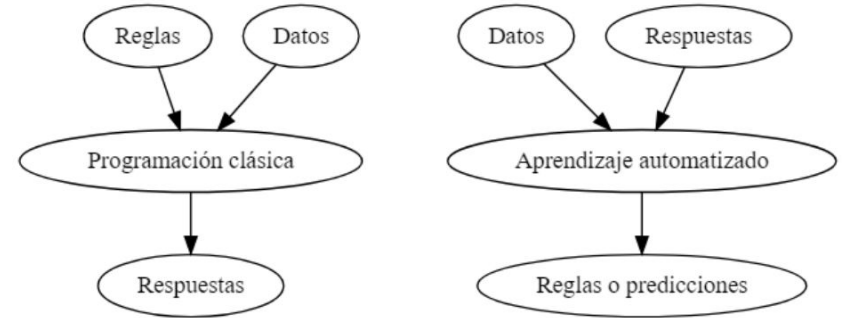
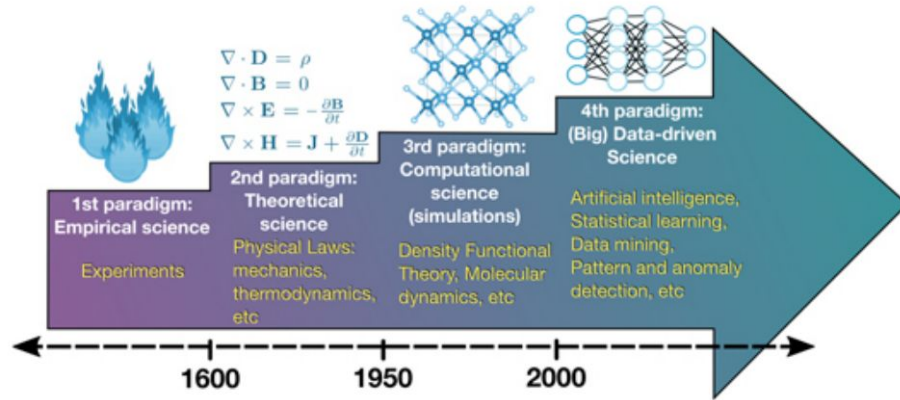
- Supongamos que, por día, ve alrededor de 2000 imágenes (de medios tradicionales, libros, publicidad y el entorno).
- 1. **Imágenes diarias:**  
2000 imágenes al día aproximado.
- 2. **Imágenes en 80 años:**  $2000 \text{ imágenes/día} \times 365 \text{ días/año} \times 80 \text{ años} = \mathbf{58,400,000 \text{ imágenes aproximadamente}}$ .



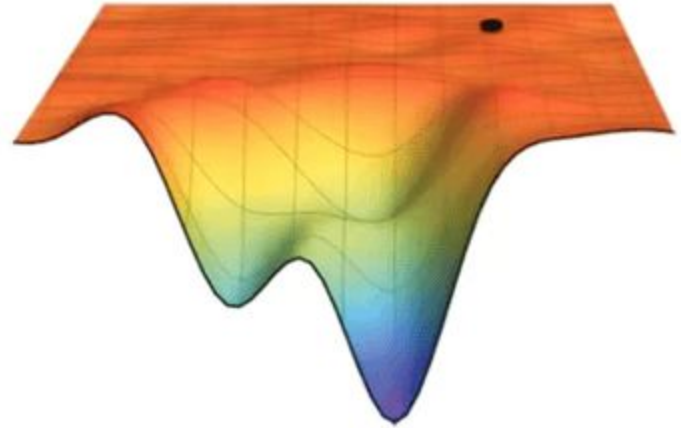
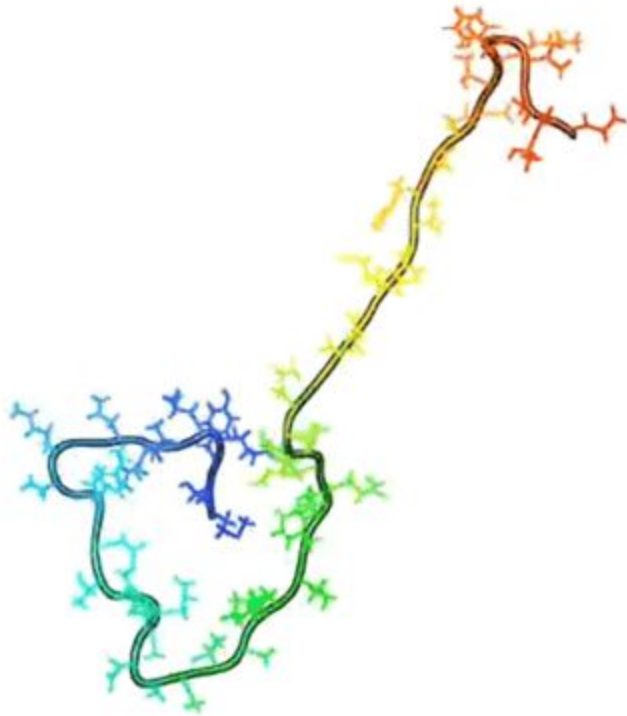
# Paradigmas en la ciencia y en la programación

Schleder et al.: “From dft to machine learning: recent approaches to materials science—a review” (2019).

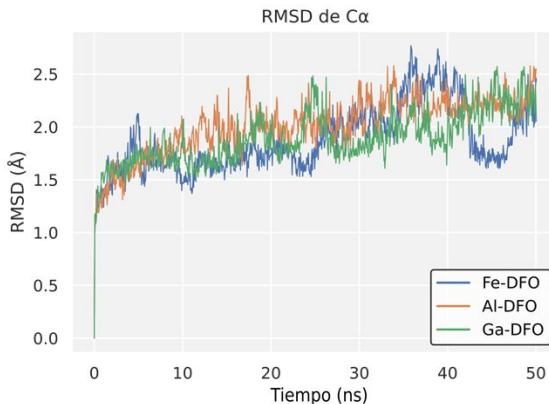
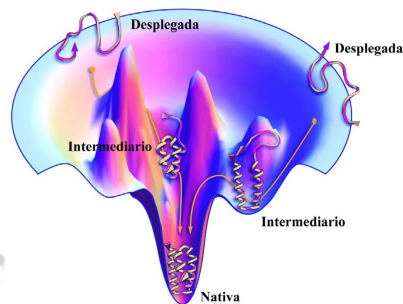
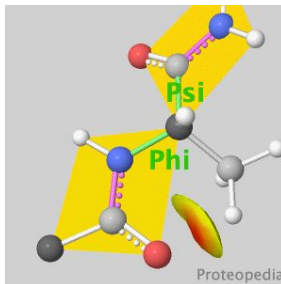
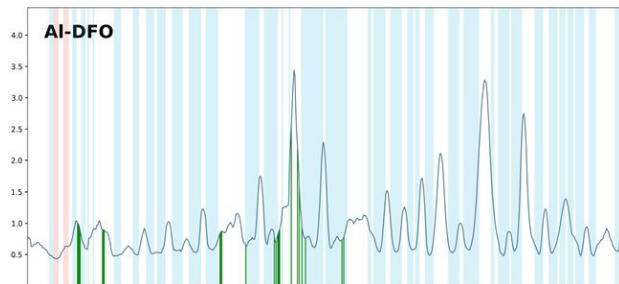
F. Chollet: Deep learning with python (2019)



## La paradoja de Levinthal



# Análisis de datos de proteínas



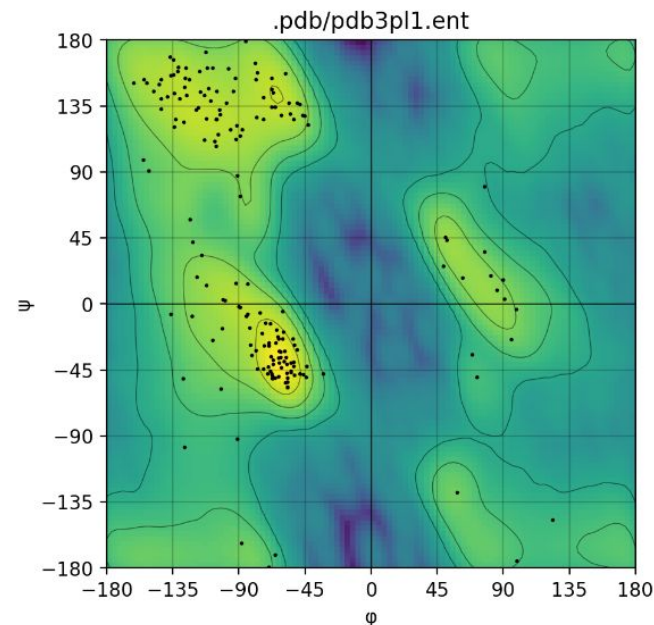
## Generador de Diagrama de Ramachandran

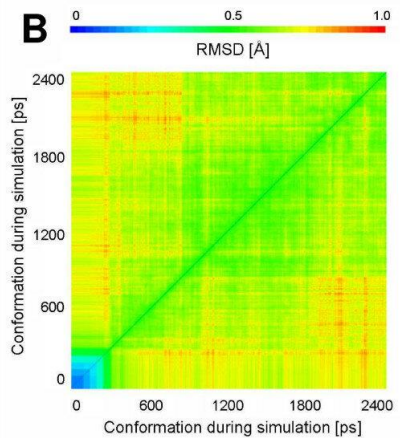
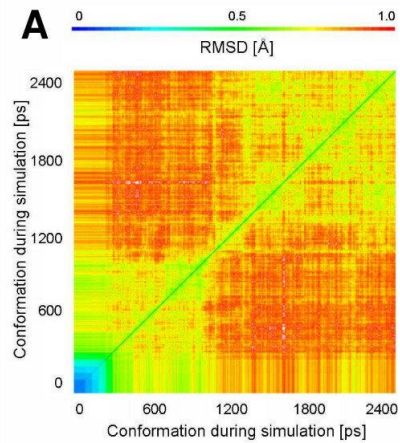
Autor: Jesus Alvarado

Escribe el código PDB de 4 dígitos, por ejemplo:

3PL1

Resultado 📄

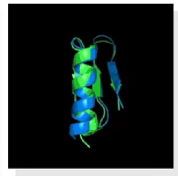
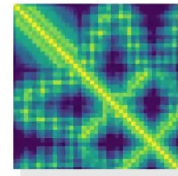
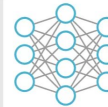
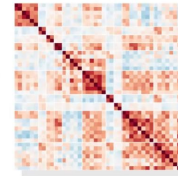




¿Cuál de estas proteínas presenta una mayor movilidad?

## Visión Computacional

SQETRRKKKCTEMKKKFKN  
CEVRCDESNHCVEVRCS  
DTKYTLC

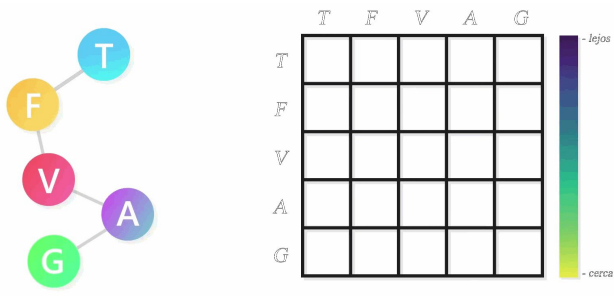




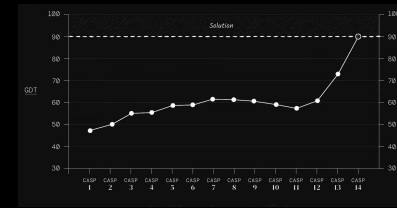
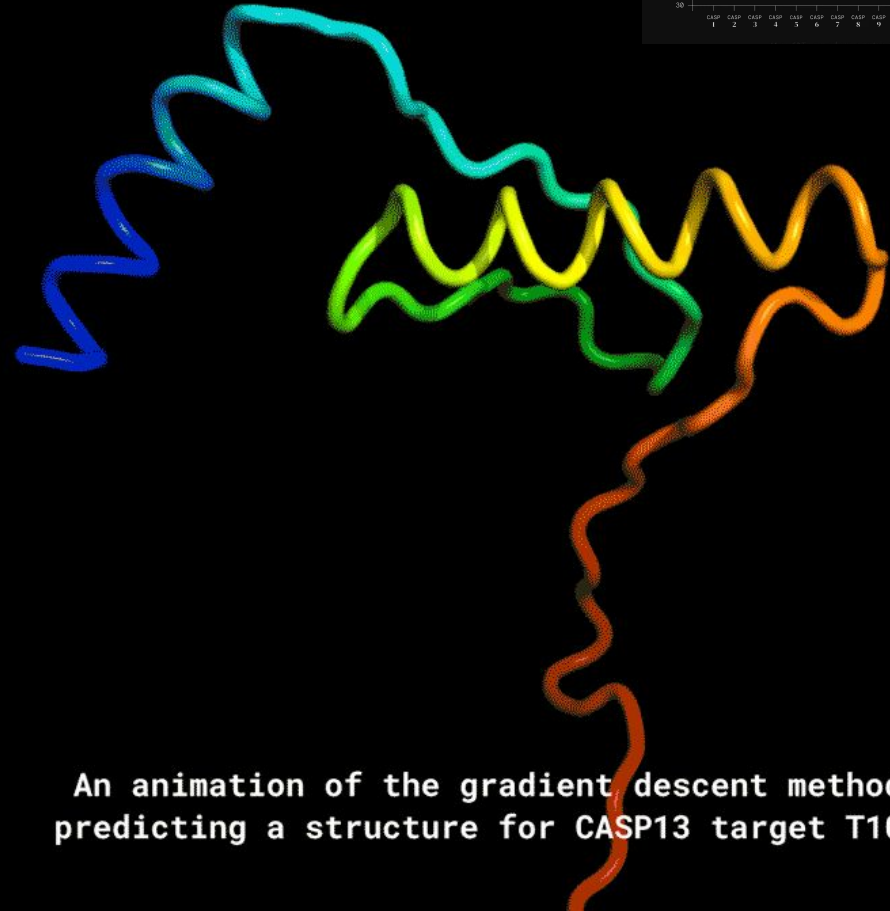
# AlphaFold



MSA: Multiple Sequence Alignment



Distograma

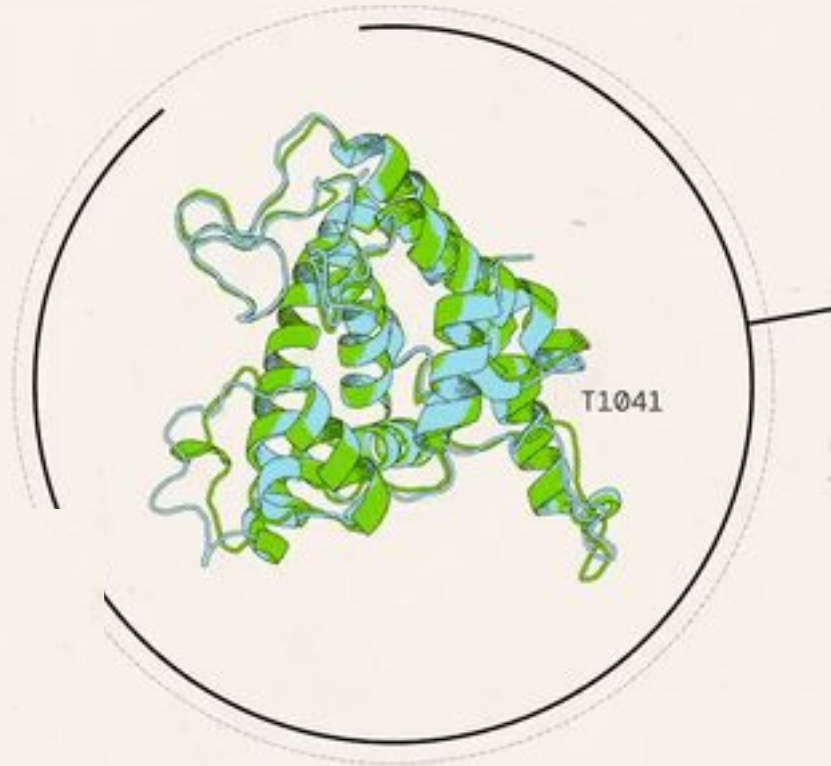


An animation of the gradient descent method predicting a structure for CASP13 target T1008


# Test de distancia global

Métrica de  
Evaluación  
AF (2018): CNN  
AF2 (2020):  
Mecanismos  
de atención  
aplicando  
Transformers

Global Distance Test



**90.5%**  
Match

 PREDICTION

# CACHE CHALLENGE

## Main funder:



Innovation, Science and  
Economic Development Canada

## CACHE governing board members:



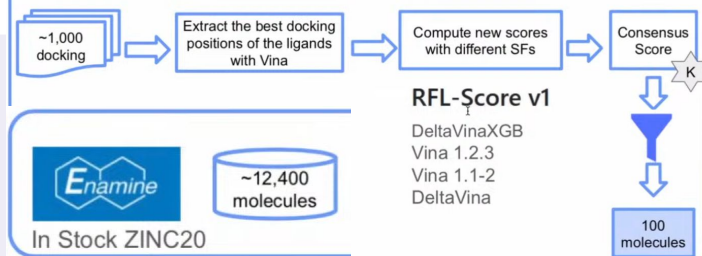
Boehringer  
Ingelheim

## Sponsors:



National Institute of  
Allergy and  
Infectious Diseases

## Hit Identification - Stage 4 Consensus Score



1. **Karina dos Santos Machado, Adriano Velasque Werhli** (Universidade Federal do Rio Grande – FURG, Rio Grande, Brazil), **Frederico Schmitt Kremer** (OmixLab, Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão, Brazil)
2. **David Koes, Ian Dunn** (University of Pittsburgh, Pittsburgh, U.S.)
3. **Dmitri Kireev** (University of Missouri, Columbia, U.S.)
4. **Rocco Moretti, Thomas Scott** (Vanderbilt University, Nashville, U.S.), **Jens Meiler** (Vanderbilt University, U.S. & Leipzig University, Germany)
5. **Yurii Moroz, Olga Tarkhanova, Mykola Protopopov** (Chemspace, Kyiv, Ukraine)

Research is still unfolding on disease-resistant crops.

discovering new antibiotics.

plastic-eating enzymes.

malaria vaccines.

preventing osteoporosis.



**¡Muchas gracias!**