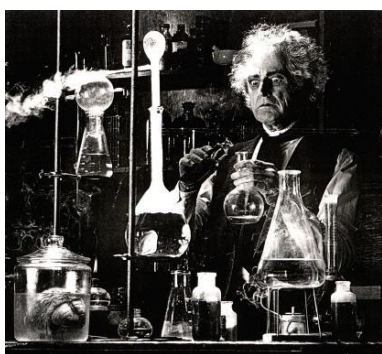


<https://info.nodo50.org/Quimioinformatica-La-materia-del.html>



Quimioinformática. La materia del conocimiento libre

- Noticias - Noticias Destacadas -



Fecha de publicación en línea: Domingo 26 de julio de 2009

Copyright © Nodo50 - Todos derechos reservados

La quimioinformática es un novedoso cruce entre la química y las ciencias de la computación (informática, en lo que sigue) que, poco a poco, se está dando a conocer más allá de los círculos ultraspecializados. En Llamada perdida (2002), Michael Connelly se atrevió a sustituir temporalmente al carismático Harry Bosch, protagonista de sus anteriores novelas, por el hacker y químico Henry Pierce. Más recientemente, Wired, la revista techie por antonomasia, ha publicado un texto sobre el Chemical Abstracts Service, un portal de pago que da acceso a diversas bases de datos donde se puede buscar información sobre compuestos que puedan tener algún interés farmacológico.

<https://info.nodo50.org/local/cache-vignettes/L275xH252/arton1982-99247-bfac8.jpg>

Quimioinformática: química e informática

Muy sintéticamente: la química es la ciencia que estudia la composición, estructura y propiedades de la materia, y la informática es la disciplina (¿ciencia?) cuyo campo es el almacenamiento, procesamiento y comunicación de la información a través de computadores. Evidentemente del simple cruce de una ciencia con la informática no sale automáticamente una nueva disciplina: hay quimioinformática, hay bioinformática pero nadie emplea el término "matemáticoinformática" o "físicoinformática" pese a que las técnicas de computación avanzada se empezaron a usar de manera intensiva mucho antes en matemáticas o física que en química o biología.

Los científicos relacionados con la química y las ciencias de la vida han trabajado tradicionalmente en lo que en argot se denomina *in vitro* (en el laboratorio). Pero en los últimos tiempos –y, sobre todo, a raíz del mediático Proyecto Genoma– cada vez tienen más peso las herramientas *in silico*, es decir, la realización de pesados cálculos matemáticos o simulaciones que necesitan de enormes recursos computacionales. Debido a la poca experiencia de este tipo de científicos –sobre todo los químicos, no tanto los biólogos– en el mundo de la informática se produjo un fenómeno curioso que no tiene correspondencia en otras disciplinas, como la física, que también recurren en abundancia a la informática: hasta hace muy poco, la práctica totalidad del software utilizado en química era propietario y de pago, y la presencia del software libre casi nula (en realidad, no es tanto que los laboratorios físicos y matemáticos hayan sido pioneros en la difusión del software libre, cuanto que la penetración de Microsoft y Apple en la computación científica ha sido mínima). Poco a poco esta tendencia se ha ido invirtiendo, pero lo cierto es que queda mucho camino que recorrer. No es casual, en este sentido, que en el artículo de Wired mencionado más arriba se hablara de un servicio de pago.

En el principio fue la bioinformática

Genoma Humano fue un proyecto académico, público e internacional, que acabó compitiendo con una iniciativa similar privada dirigida por el disidente Craig Venter, quien diseñó un ingenioso método, conocido como *shotgun*, que desarrolló con éxito Celera Genomics. El reto consistía en secuenciar el genoma humano (es decir, algo así como "leerlo") para identificar los genes presentes en él. Este proyecto dio un impulso definitivo al diseño e implementación de bases de datos de contenido biológico, a la computación distribuida entre centros muy lejanos físicamente y, en general, al uso intensivo de la computación en el campo de las ciencias de la vida. En definitiva, supuso la puesta de largo del nuevo campo de la bioinformática.

De hecho, hay autores que consideran la quimioinformática como una mera rama de la bioinformática. Para otros, en cambio, el término hace referencia a las diferentes técnicas computacionales que se utilizan *in silico* en el descubrimiento de nuevos fármacos. Finalmente hay científicos que entienden la quimioinformática como un campo más amplio, que cubre todos los aspectos computacionales relacionados con la química. En cualquier caso, lo cierto

es que existe un campo específico de la informática especialmente interesante para la industria farmacéutica y los centros e institutos de investigación, con una comunidad bien definida y en expansión, y con afán de profundizar no sólo en los aspectos técnicos de su campo, sino también en los políticos.

Debates y desarrollos

En el seno de la (pequeña) comunidad quimioinformática se están produciendo una serie de debates de cierto calado. En primer lugar, evidentemente, se discute en torno al uso y desarrollo de software libre. Pero algunos científicos, como el brillante Egon Willighagen, profundizan además en los principios del conocimiento libre. Así, Willighagen contrapone el intraducible concepto de chemblaics al de cheminformatics (quimioinformática). “Chemblaics” no es sólo una quimioinformática que usa software libre, sino que defiende además que los resultados de las investigaciones deberían estar siempre disponibles para su estudio y verificación. Precisamente es una constante en la comunidad el debate sobre si lo importante es el uso de software libre o más bien que los resultados de las investigaciones sean libres (no es casual que todos los contenidos del recién creado Journal of Cheminformatics sean de libre acceso).

Otro aspecto muy interesante en torno a la quimioinformática es la ingente cantidad de información que se está generando y que, como apunta Joerg Kurt Wegner, no se está procesando y estudiando de manera adecuada debido a que las distintas comunidades científicas actúan a veces como compartimentos estancos, un fenómeno que se ve agravado por el uso de patentes y copyrights restrictivos (ya ocurrió algo análogo en el contexto del Proyecto Genoma Humano). Rich Apodaca, en cambio, reflexiona en torno a los procesos y criterios que rigen la publicación de las investigaciones y resultados de la ciencia en general y la química en particular (mucho menos transparentes y razonables de lo que se piensa). Así, propone como alternativa agilizar la difusión del conocimiento a través de la “micropublicación” y otros cauces novedosos de comunicación de los resultados científicos. Por último, hay que hablar de la enorme influencia de las redes sociales en esta rama de la ciencia, no sólo son constantes las alusiones a la Web 2.0, sino que empieza a reclamar que la presentación de resultados sea un proceso tan sencillo como incrustar un vídeo de Youtube o la creación de un Last.fm para la comunidad.

Lecturas recomendadas

[Chem-bla-ics](#)

[Journal of Cheminformatics](#)

[Do drug - Innovation while information ignorance is increasing?](#)

[Cheminformatics and Micropublication in Chemistry](#)

[Why Are Chemical Structures Like YouTube Videos?](#)

[Automated bioinformatics discovery through social networking?](#)