

Predicción del destino ambiental y la toxicidad de compuestos químicos

El destino ambiental de muchas moléculas químicas que se producen a gran escala como precursores o como aditivos para productos especiales (plásticos, fibras, materiales de construcción, medicamentos etc.) se desconoce, sin existir datos que certifiquen si estas moléculas persisten en los ecosistemas o si son biodegradables. Un caso de interés son los productos farmacéuticos que por su amplio uso en la población o la mala disposición de sus desechos pueden ser depositados en el ambiente en forma continua. Por tanto, la evaluación de su destino ambiental es crucial al tomar decisiones sobre la fabricación, manipulación, uso y liberación de estas sustancias, al igual que la evaluación de su toxicidad en humanos y otros organismos superiores. Debido a que a menudo estos datos son difíciles de obtener, se plantea la posibilidad de desarrollar sistemas de aprendizaje automático (*machine learning*) para predecir estas características a partir de los datos experimentales de biodegradabilidad y toxicidad de moléculas conocidas (incluidas las moléculas xenobióticas).

En el trabajo recientemente publicado por García-Marín y colaboradores en la revista *Biology Methods and Protocols* se desarrolló un sistema de predicción de “riesgo” el cual realiza la predicción de biodegradabilidad de compuestos cuyos datos no hayan sido obtenidos experimentalmente. La plataforma computacional denominada BiodegPred (<https://sysbiol.cnb.csic.es/BiodegPred/>), y disponible a través de una sencilla interfaz web, proporciona un pronóstico informado de la posibilidad de que una molécula determinada pueda eventualmente ser catabolizada en la biosfera, así como de su eventual toxicidad. Si bien la plataforma BiodegPred no brinda mucha información sobre cinéticas de degradación específicas o vías de biodegradación particulares, esta herramienta computacional demostró predecir el comportamiento de una gran cantidad de nuevas moléculas (por ejemplo, compuestos antivirales) para las cuales no existían datos de biodegradación disponibles.

En este trabajo participó el Dr. Max Chavarría, investigador de la Escuela de Química y el Centro de Investigaciones en Productos Naturales (CIPRONA) de la Universidad de Costa Rica, así como del Centro Nacional de Innovaciones Biotecnológicas (CENIBiot).

La versión completa del artículo se encuentra en:

<https://academic.oup.com/biomethods/advance-article/doi/10.1093/biomethods/bpaa025/5981135?searchresult=1>