

**Sección:** Hot Science

# Algoritmos Vs Virus

## Algorithms Vs Viruses

Lucio Nájera-Maldonado<sup>1,2</sup>

Cristian G. Delgado-Corona<sup>1,2</sup>

Francisca Villanueva-Flores<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, Instituto Politécnico Nacional, Carpio y Plan de Ayala S/N, Colonia Santo Tomás, 11340, Ciudad de México, México.

<sup>2</sup>Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Instituto Politécnico Nacional, Boulevard de la Tecnología, 1036 Z-1, P 2/2, 62790, Xochitepec, Morelos, México.

\*Autor para la correspondencia: fvillanuevaf@ipn.mx

### RESUMEN

¿Y si te dijera que, cuando aparece un virus nuevo, los primeros en reaccionar no son solo médicos y científicas, sino también algoritmos? Hoy las computadoras pueden leer el “ADN” de un virus como si fuera un código secreto y, en días, sugerir ideas para nuevas vacunas que antes tardaban años. Este texto cuenta con ejemplos reales (COVID-19 y malaria) de cómo la inteligencia artificial se está convirtiendo en aliada contra las infecciones y cómo podría cambiar la forma en que nos protegemos en el futuro.

*Palabras clave:* Inteligencia artificial, vacunas, virus, algoritmos, medicina personalizada.

### SUMMARY

What if I told you that when a new virus appears, the first to react aren't just doctors and scientists, but algorithms too? Today, computers can read a virus's “DNA” as if it were a secret code and, in just a few days, suggest ideas for new vaccines that used to take years. This article, using real-world examples (COVID-19 and malaria), explains how artificial intelligence is becoming an ally in combating infections and could change how we protect ourselves in the future.

*Keywords:* Artificial intelligence, vaccines, viruses, algorithms, personalized medicine.

## Introducción

Imagina la escena: en la pantalla del laboratorio aparece un mensaje sencillo, casi aburrido:

“Nuevo virus detectado. Secuencia genética disponible.”

Hace no tanto, oír “Nuevo virus detectado”, incluso una vez obtenida su secuencia genética, anunciaba años de trabajo por delante: cultivar el virus, manipularlo con el máximo cuidado, probar versiones atenuadas, equivocarse, ajustar, volver a empezar. Mucho ensayo y error antes de siquiera intuir qué tipo de vacuna podría funcionar (Figura 1).

Hoy el primer movimiento es distinto. Cuando ya se dispone de la secuencia genética del nuevo virus, se carga en una computadora y, en lugar de una sola persona frente a una libreta, entran en juego programas capaces de revisar millones de combinaciones en poco tiempo. Analizan el genoma, es decir, el conjunto de instrucciones del virus, lo comparan con bases de datos de otros virus, señalan

qué regiones podrían ser buenos blancos para una vacuna y sugieren cómo presentarlas al sistema inmunitario, las defensas del cuerpo, para que las reconozca mejor.

No es magia ni una “IA que lo hace todo sola”: siguen siendo imprescindibles los laboratorios, los ensayos clínicos, las pruebas en personas voluntarias que acreditan la seguridad y la eficacia, los controles de seguridad y toda la cadena regulatoria. Pero esta alianza entre la vacunología y la inteligencia artificial ya está cambiando las reglas y los tiempos del juego. Iniciativas como la llamada “misión de los 100 días” de CEPI, siglas en inglés para una coalición internacional que impulsa vacunas frente a nuevas enfermedades, se apoya en estas herramientas con una meta muy concreta: que, cuando se detecte el próximo patógeno con potencial pandémico, un microbio capaz de causar brotes a gran escala, podamos tener un candidato vacunal, un primer diseño de vacuna listo para probar, preparado para entrar en ensayos clínicos en unos pocos meses y no en varios años (Figura 2) [1].



**Figura 1.** Caricatura de un algoritmo (izquierda) enfrentándose a un virus (derecha), que ilustra cómo la inteligencia artificial puede ayudarnos a detectar y combatir las infecciones. Imagen elaborada con ChatGPT 5.1.



**Figura 2.** El reto de los 100 días. Ilustración del objetivo impulsado por CEPI: que, desde que se detecta un nuevo virus hasta que se tiene lista una vacuna candidata, transcurran como máximo 100 días. El cronómetro simboliza esa carrera contra el tiempo, en la que la información genética del virus (las letras A, C, T, G) se traduce rápidamente en diseños de vacuna para frenar futuros brotes antes de que se conviertan en grandes epidemias. Imagen elaborada con ChatGPT 5.1.

No es una promesa de invencibilidad frente a los virus, pero sí un cambio profundo en la velocidad y la forma en que podemos responder [2].

## De la vacuna “artesanal” a la vacuna “digital”

Durante buena parte de la historia, una vacuna consistía en presentar al sistema inmunitario una versión atenuada o inactivada del virus o de la bacteria que causa la enfermedad. Esto implicaba trabajar directamente con el microorganismo: cultivarlo, debilitarlo o inactivarlo, y purificarlo mediante procesos de laboratorio muy manuales que requerían tiempo, control y mucha paciencia. Con el tiempo aparecieron enfoques más precisos: primero, las vacunas que ya no usan el microorganismo completo, sino solo una parte concreta que el sistema inmune pueda reconocer; y, más re-

cientemente, las vacunas de ARN mensajero (ARNm), que incorporan un pequeño mensaje químico que nuestras células leen como una receta para fabricar temporalmente la proteína que queremos enseñar a las defensas. Este cambio, de trabajar con el virus “en persona” a trabajar sobre todo con información (secuencias, estructuras, datos de respuesta inmune), convirtió gran parte del diseño de vacunas en un problema de manejo de datos, y abrió la puerta para que herramientas capaces de analizar grandes volúmenes de información, como la inteligencia artificial, puedan ayudar identificando patrones y realizando predicciones [3].

La IA no sustituye a las vacunas, ni a los laboratorios, ni a las agencias reguladoras: siguen siendo indispensables los experimentos, los ensayos clínicos y los controles de seguridad. Lo que hace es acelerar y afinar el camino que va desde la secuencia de un virus hasta un candidato vacunal viable, ordenando grandes



**Figura 3.** ¿Cómo funciona la IA en el diseño de una vacuna? Secuencia (de izquierda a derecha y de arriba abajo) del “taller” de diseño asistido por IA: (1) lectura del genoma para identificar regiones codificantes y posibles epítomos; (2) evaluación de “llave-cerradura” para priorizar fragmentos con mejor encaje en moléculas MHC; (3) predicción de la estructura 3D de proteínas; (4) generación de variantes con propiedades mejoradas (p. ej., estabilidad o inmunogenicidad); (5) organización multivalente en nanopartículas que imitan al virus; (6) optimización de vacunas de ARNm y su formulación lipídica; y (7) simulación *in silico* para priorizar candidatos antes de su validación en el laboratorio. Imagen elaborada con ChatGPT 5.1.

volúmenes de datos biológicos (ADN, estructuras de proteínas, y evidencia previa de estudios preclínicos y clínicos) para responder con mayor rapidez a preguntas clásicas: qué parte del patógeno conviene enseñar, cómo presentarla para que el sistema inmune la recuerde y cómo lograr que funcione de forma segura en personas distintas. Recientemente desarrollamos una versión más técnica de estas ideas en un artículo en *NPJ Vaccines*, en el que científicos del Instituto Politécnico Nacional y de la Universidad Católica de Murcia revisamos modelos de IA para predecir epítomos, pequeños fragmentos del virus (como “pedacitos” de sus proteínas) que el sistema inmunitario puede reconocer como una huella, y proponemos una

guía práctica para integrar estas herramientas en los laboratorios de vacunas [4].

### ¿Cómo trabaja realmente la IA en el diseño de una vacuna?

Para que no suene a “caja negra”, pensemos en el proceso como un taller. Como se ilustra en la Figura 3, la IA no es la jefa del laboratorio; es la asistente súper organizada que ayuda al resto del equipo a trabajar mejor

1. *Leer el genoma:* Al secuenciar el genoma de un virus o una bacteria, obtenemos un texto de letras (A, T, C y G) que la IA “lee” para localizar proteínas clave y, en-

tre ellas, pequeños fragmentos llamados epítomos, los trozos que nuestras defensas pueden reconocer. Es como un resaltador inteligente que marca las zonas con mayor probabilidad de activar una buena respuesta inmune, ya que estos modelos, a partir de miles de epítomos conocidos, han aprendido qué regiones suelen ser reconocidas por anticuerpos o células T. Se han usado con éxito en diseños vacunales previos y aplican esos patrones a patógenos nuevos [5].

2. *La prueba de la “llave y la cerradura”:* Nuestro sistema inmune “coloca” esos fragmentos en unas moléculas llamadas presentadoras de antígenos (MHC), como bandejas que exhiben señales en la superficie de las células; si el epítomo encaja bien en esa “bandeja”, se activan células defensoras llamadas células T y atacan. La IA puede predecir qué epítomos encajan mejor con distintos tipos de MHC, para priorizar fragmentos que funcionen en personas con diferentes antecedentes genéticos y de distintas regiones del mundo.
3. *Ver la forma sin tener que cristalizarla:* En biología, la forma 3D de una proteína es clave para saber si una “pieza” del sistema inmune, como un anticuerpo (una proteína defensiva que se pega al patógeno) o un receptor (un “sensor” en la superficie de las células), podrá reconocerla. Hoy, herramientas de IA como AlphaFold predicen esa estructura a partir de la secuencia, ofreciendo maquetas bastante precisas que ahorran años de trabajo y guían el diseño de vacunas. Esto ya se ha usado, por ejemplo, para vacunas contra la malaria, eligiendo la conformación de las proteínas que mejor despierta una respuesta inmune útil ante una infección real.
4. *No solo escoger: proponer nuevas versio-*

nes. Aquí, la IA usa modelos generativos para proponer variantes modificadas de proteínas: sustituye algunos aminoácidos para hacerlas más estables, más fáciles de producir o más visibles para el sistema inmune, sin perder su función. Es como un editor que reescribe el texto para que se entienda mejor y luego esas versiones se comprueban en el laboratorio, como cualquier otro candidato vacunal.

5. *Organizar el montaje: nanopartículas y multivalencia.* El sistema inmune no solo responde a lo que le mostramos, sino también a cómo se lo presentamos. La IA ayuda a diseñar nanopartículas (estructuras diminutas, miles de veces más pequeñas que un grano de polvo) que imitan al virus y presentan antígenos en su superficie. Al hacerlo con multivalencia (es decir, con muchas copias del mismo antígeno a la vez), los anticuerpos los detectan mejor y pueden generar respuestas más amplias, incluso frente a diversas variantes.
6. *Afinar el mensaje en las vacunas de ARNm:* La “magia” está en el ARNm: debe ser fácil de leer para la célula, estable y bien protegido. La IA ayuda a optimizar la secuencia (elige los mejores codones y mejora su estabilidad) y a diseñar su encapsulado en nanopartículas lipídicas para que llegue a las células correctas. Esta combinación de IA y biología permitió acelerar el paso de las vacunas de ARNm del ordenador a los ensayos en humanos durante la pandemia de COVID-19.
7. *Simular antes de gastar tubos y reactivos:* Antes de pasar al laboratorio “mojado” (donde se trabaja con muestras reales, líquidos y experimentos), las plataformas de IA pueden priorizar los candidatos más prometedores: estiman cuáles tienen mayor probabilidad de inducir una buena respuesta inmune y cuáles podrían pre-

sentar señales tempranas de problemas, para que el equipo pruebe primero a los que tienen mejor perfil y reduzca ensayos innecesarios.

No sustituyen los experimentos ni los ensayos clínicos, pero sí ayudan a priorizar qué vale la pena probar primero, ahorrando tiempo, reactivos y esfuerzo humano.

## Lo que ya es una realidad y lo que falta por resolver

La IA ya se usa en vacunas reales: apoyó el análisis rápido del genoma del SARS-CoV-2, ayudó a priorizar antígenos como la proteína Spike y a optimizar diseños de ARNm, contribuyendo a que vacunas como las de Moderna y Pfizer-BioNTech avanzaran a ensayos clínicos y obtuvieran autorización en un plazo sin precedentes. También se aplica a patógenos complejos, como la malaria, y a virus respiratorios (gripe, VRS), mediante herramientas de predicción y modelado estructural (p. ej., AlphaFold), que permiten estudiar antígenos en 3D y guiar su diseño. Iniciativas como la misión de los 100 días de CEPI buscan ir más allá y preparar candidatos vacunales con antelación para familias de virus con potencial pandémico.

Pero la IA no es magia: si los datos de entrenamiento representan solo a unas pocas poblaciones, las predicciones pueden no funcionar bien en otros grupos, por lo que es esencial incluir diversidad geográfica y genética. La calidad de los datos también es crítica: experimentos ruidosos o mal anotados pueden generar modelos engañosos, por lo que siempre hace falta criterio científico y validación experimental. Y, sobre todo, las vacunas siguen sujetas a estándares muy estrictos de seguridad y transparencia: hay que entender por qué un modelo propone un epítipo, qué evidencia lo respalda y cómo responde ante nuevas variantes, porque aquí no solo están en

juego algoritmos, sino vidas [6].

## Conclusiones

La inteligencia artificial puede acelerar desde la lectura del genoma hasta la elección de candidatos vacunales, pero sigue siendo una herramienta: lo decisivo es la brújula humana que la guía. Eso implica usar datos diversos, compartir conocimiento y preguntarse siempre a quién beneficia y quién queda fuera, para que las nuevas vacunas sean no solo más rápidas y precisas, sino también más justas. Al final, no se trata de máquinas sustituyendo a personas, sino de algoritmos y de ciencia de bata blanca trabajando juntos para proteger mejor más vidas.

## Agradecimiento

Se agradece el financiamiento de los fondos SIP20250306, SIP20251096 y SIP20254781, otorgado por el Instituto Politécnico Nacional, así como el proyecto Ciencia Básica y de Frontera 2025 (CBF-2025-I-1532), otorgado por la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI), para la realización de este trabajo. LNM y CGDC recibieron una beca de la SECIHTI para sus estudios de posgrado, con los números 2046158 y 4005957, respectivamente. Se empleó inteligencia artificial (ChatGPT-5.1, OpenAI) como apoyo en la revisión gramatical y sintáctica del manuscrito; el contenido, la originalidad y el rigor científico son responsabilidad exclusiva de las personas autoras.

## Referencias

[1] Barnsley, G., et al. (2024). Impact of the 100 days mission for vaccines on COVID-19: A mathematical modelling study. *The Lancet Global Health*, 12(11), e1764–e1774. [https://doi.org/10.1016/S2214-109X\(24\)00286-9](https://doi.org/10.1016/S2214-109X(24)00286-9)

[2] Kumar, A., Dixit, S., Srinivasan, K., D., M., & Vincent, P. M. D. R. (2024). Personalized cancer vaccine design using AI-powered technologies. *Frontiers in Immunology*, 15, 1357217. <https://doi.org/10.3389/fimmu.2024.1357217>

[3] Lokras, A. G., Bobak, T. R., Baghel, S. S., Sebastiani, F., & Foged, C. (2024). Advances in the design and delivery of RNA vaccines for infectious diseases. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 213, 115419. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2024.115419>

[4] Villanueva-Flores, F., Sanchez-Villamil, J. I., & Garcia-Atutxa, I. (2025). AI-driven epitope prediction: A systematic review, comparative analysis, and practical guide for vaccine development. *NPJ Vaccines*, 10(1), 207. <https://doi.org/10.1038/s41541-025-01258-y>

[5] Reynisson, B., Alvarez, B., Paul, S., Peters, B., & Nielsen, M. (2020). NetMHCpan-4.1 and NetMHCIIpan-4.0: Improved predictions of MHC antigen presentation by concurrent motif deconvolution and integration of MS MHC eluted ligand data. *Nucleic Acids Research*, 48(W1), W449–W454. <https://doi.org/10.1093/nar/gkaa379>

[6] Kaczanowski, S. (2023). Detection of positive selection acting on protein surfaces at the whole-genome scale in the human malaria parasite *Plasmodium falciparum*. *Infection, Genetics and Evolution*, 107, 105397. <https://doi.org/10.1016/j.meegid.2022.105397>