

Una competición global pone a prueba herramientas para analizar el movimiento de moléculas individuales

Dentro de las células vivas, las moléculas están en constante movimiento: uniéndose, difundiéndose, interactuando. Comprender estos procesos es esencial para entender en profundidad el comportamiento de las células. Una competición internacional en la que el ICFO ha participado activamente ha proporcionado una comparación sistemática de métodos analíticos para el análisis del movimiento de moléculas individuales, destacando tanto las fortalezas actuales como los desafíos urgentes en este campo en rápida expansión. Los resultados se han publicado recientemente en *Nature Communications*.

July 28, 2025

En el intrincado mundo dentro de las células vivas, el movimiento molecular revela pistas cruciales sobre cómo las células funcionan, se comunican y, a veces, fallan. Pero extraer

información significativa de estas trayectorias moleculares complejas es un desafío formidable, que ha impulsado una carrera global por el desarrollo y la mejora de herramientas analíticas.

Ahora, un equipo internacional de científicos liderado por el Dr. Gorka Muñoz de la Universidad de Innsbruck, el Prof. Dr. Giovanni Volpe de la Universidad de Gotemburgo y el Prof. Dr. Carlo Manzano de la Universidad de Vic, con la colaboración de los investigadores del ICFO **Gabriel Fernandez-Fernandez**, el **Dr. Borja Requena** y el **Prof. ICREA Maciej Lewenstein**, ha organizado una competencia para evaluar sistemáticamente estas herramientas. Sus hallazgos, recién publicados en Nature Communications, ofrecen una evaluación sin precedentes de las fortalezas y debilidades de los enfoques existentes.

Poniendo a prueba los métodos

La toma de imágenes de moléculas individuales se ha convertido en una técnica esencial en la biología celular y la biofísica modernas. Al rastrear moléculas individuales en células vivas, los investigadores pueden estudiar procesos fundamentales como las interacciones proteicas, los mecanismos de transporte y el amontonamiento molecular. Sin embargo, analizar los datos resultantes -ya sea en forma de trayectorias de partículas o videos en bruto- requiere métodos computacionales sofisticados. La mayoría de estos enfoques se basa en algoritmos de aprendizaje automático que se refinan continuamente para detectar patrones, clasificar tipos de movimiento y extraer parámetros significativos de datos experimentales ruidosos.

Para abordar la falta de parámetros de referencia objetivos, el equipo diseñó una competencia, el 2º AnDi Challenge, utilizando una biblioteca de software que simula datos experimentales realistas. Estas simulaciones incorporaron modelos de difusión e interacción ampliamente utilizados, bajo condiciones que imitan las de experimentos reales. Grupos de investigación de todo el mundo aplicaron sus mejores herramientas para analizar el mismo conjunto de datos. En base a sus resultados, los equipos participantes -y, por ende, los métodos que desarrollaron- fueron clasificados

Fortalezas y desafíos actuales

La competición reveló un progreso claro en algunas áreas, pero también destacó limitaciones significativas en otras. resume el Dr. Gorka Muñoz-Gil, investigador de la Universidad de Innsbruck y autor principal del artículo. Es importante tener una imagen cuantitativa de qué tan bien -o mal- funcionan los métodos actuales en una variedad de escenarios realistas. Mas allá de clasificar herramientas existentes, la competencia busca impulsar la innovación. Al identificar donde fallan los métodos, los investigadores esperan fomentar el desarrollo de nuevos enfoques que puedan descifrar con mayor precisión el ruidoso y heterogéneo mundo del movimiento molecular.

Guia para la comunidad

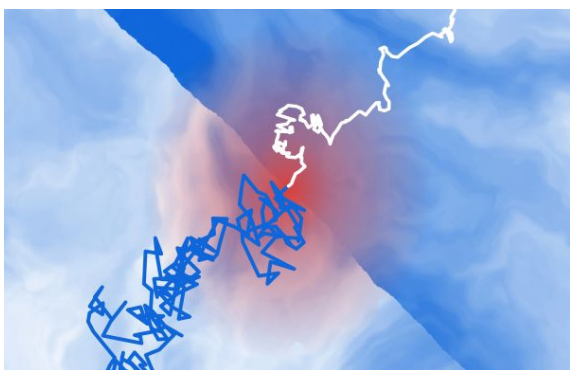
Los resultados ofrecen una guía práctica para los experimentadores que buscan las herramientas adecuadas para sus estudios. ¿Queremos ayudar a los investigadores a orientarse en el creciente panorama de métodos analíticos y elegir los que mejor se adaptan a sus datos? dice el Prof. Dr. Carlo Manzo, autor senior del artículo de la Universidad

de. Esta no es la primera vez que la comunidad acepta el desafío. La primera edición del nDi Challenge, centrada en la difusión anómala, proporcionó información crítica que dio forma al desarrollo del campo. La segunda edición amplía este esfuerzo, centrándose ahora en los cambios de movimiento y en condiciones experimentales relevantes biológicamente. Con los rápidos avances en tecnologías de imagen y adquisición de datos, la necesidad de métodos de análisis fiables nunca ha sido mayor. Iniciativas como esta competición proporcionan una hoja de ruta esencial para investigadores, desarrolladores de software y experimentadores por igual, ayudando a garantizar que las historias moleculares capturadas bajo el microscopio se interpreten con precisión y en su totalidad. El software de libre acceso sienta las bases para futuros proyectos e invita a la comunidad a contribuir con nuevas innovaciones

Referencia:

Munoz-Gil, G., Bachimanchi, H., Pineda, J. et al. Quantitative evaluation of methods to analyze motion changes in single-particle experiments. Nat Commun 16, 6749 (2025).

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-025-61949-x>



Trajectoria d'una partícula biològica que es desplaça a través de dues regions diferents de l'espai, cadascuna amb propietats físiques diferents que modifiquen la manera com es difon la partícula. Credit: Gorka Munoz-Gil, Universitat d'Innsbruck.