Lo scienziato nella macchina: come l'IA sta riscrivendo la ricerca scientifica, dal ripiegamento delle proteine ai laboratori autonomi

Francesco Barbato · Full Stack · Cybersecurity · AI

Pubblicato il 26 maggio 2026 · 12 min di lettura

SOMMARIO

Nel 2024 due Nobel sono andati a lavori nati dal machine learning. Uno sguardo tecnico a come l'IA sta cambiando il metodo scientifico: dove funziona (AlphaFold, GNoME, laboratori autonomi), dove fallisce (citazioni allucinate nella letteratura) e cosa ancora non sa fare.

Parole chiave: IA · Machine learning · Ricerca scientifica · Deep learning · AlphaFold · Scoperta di farmaci · Scienza dei materiali · Integrità della ricerca

A ottobre 2024 la Reale Accademia Svedese delle Scienze ha fatto una cosa che non aveva mai fatto: nello stesso anno ha assegnato Nobel in due discipline diverse a lavori nati dal machine learning. Il Nobel per la Fisica è andato a John Hopfield e Geoffrey Hinton per le basi delle reti neurali artificiali. Quello per la Chimica a Demis Hassabis e John Jumper per AlphaFold, e a David Baker per la progettazione computazionale di proteine.

Non è stato un gesto simbolico. È stato il riconoscimento che la metodologia delle scienze naturali (ipotesi, esperimento, osservazione, raffinamento) viene riscritta strutturalmente da sistemi capaci di esplorare spazi di ipotesi di ordini di grandezza più velocemente degli esseri umani. Questo articolo guarda a come succede davvero, dove funziona, dove fallisce e cosa probabilmente ci aspetta nei prossimi anni.

1 Il problema delle proteine, e perché si è sbloccato

Per circa cinquant'anni, prevedere la struttura tridimensionale di una proteina a partire dalla sequenza di amminoacidi è stato uno dei problemi aperti più costosi della biologia. Gli approcci sperimentali, cristallografia a raggi X e crio-microscopia elettronica, potevano richiedere mesi o anni per proteina e servivano campioni fisici che non sempre cristallizzavano.

Nel 2020 AlphaFold 2 di DeepMind ha cambiato le cose. Per la maggior parte dei bersagli prevedeva strutture con un'accuratezza paragonabile a quella degli esperimenti, e nel 2021 il codice è stato rila-

sciato insieme a un database consultabile che oggi contiene strutture previste per circa 200 milioni di proteine. Secondo il Comitato Nobel, in quattro anni è stato usato da più di due milioni di persone in 190 paesi, e l'articolo principale ha raccolto decine di migliaia di citazioni.

> **PERCHÉ CONTA DAL PUNTO DI VISTA TECNICO**
>
> AlphaFold 2 combinava un'attenzione di tipo transformer sugli allineamenti di sequenze multipli (MSA) con un «modulo di struttura» geometrico che prevedeva end to end le coordinate 3D della proteina. Poiché l'intera pipeline era differenziabile, la rete poteva imparare la geometria delle proteine come i classificatori di immagini imparano com'è fatto un gatto.

A maggio 2024 DeepMind e Isomorphic Labs hanno presentato AlphaFold 3, che prevede la struttura di proteine, DNA, RNA, ligandi e le loro interazioni, con l'obiettivo dichiarato di accelerare la scoperta di farmaci; codice e pesi per uso accademico sono seguiti a novembre 2024. Il salto da 2 a 3 non è banale: prevedere come una piccola molecola di tipo farmaco si lega alla tasca di legame di una proteina è un problema diverso e più difficile che prevedere la forma della sola proteina, perché richiede di modellare il paesaggio conformazionale congiunto di due specie che interagiscono.

2 Dal ripiegamento alla progettazione: il problema inverso

Prevedere la struttura dalla sequenza è una direzione. L'altra, progettare una sequenza che si ripiega in una struttura voluta con una funzione voluta, è ciò su cui lavora da decenni il gruppo di David Baker all'Università di Washington, sviluppando molti degli algoritmi e degli strumenti usati dalla comunità.

La conseguenza pratica è che oggi i ricercatori possono specificare qualcosa come «una proteina che si lega a questa spike virale con affinità molto alta ed è stabile oltre i 60 °C», e i sistemi di IA propongono sequenze candidate da validare sperimentalmente. Enzimi su misura, immunogeni per vaccini e leganti per bersagli finora «non farmacologicamente aggredibili» escono sempre più spesso da modelli della classe di RFdiffusion (Watson et al., *Nature* 620, 1089–1100, 2023) e dai loro successori.

3 Scienza dei materiali: secoli di scoperte in un solo articolo

A novembre 2023 DeepMind ha pubblicato un risultato che per i materiali inorganici ha fatto ciò che AlphaFold ha fatto per le proteine. GNoME (Graph Networks for Materials Exploration) ha previsto 2,2 milioni di nuove strutture cristalline, che DeepMind ha paragonato a circa 800 anni di conoscenza, e circa 380.000 sono state valutate abbastanza stabili da essere candidate alla sintesi.

L'impalcatura vale la pena di essere capita. GNoME usa reti neurali su grafi in cui i nodi sono atomi e gli archi sono legami, una rappresentazione naturale per i solidi cristallini. Il gruppo ha usato l'apprendimento attivo: il modello propone cristalli candidati, questi vengono verificati con calcoli di Density Functional Theory (DFT) e i dati di alta qualità così ottenuti tornano nell'addestramento. Nel corso dei cicli la precisione delle sue previsioni di stabilità è salita da circa il 50% a circa l'80%.

Per dare un'idea, il numero di materiali stabili noti è cresciuto di quasi dieci volte, fino a circa 421.000. Tra i risultati ci sono 528 promettenti conduttori di ioni di litio, rilevanti per batterie migliori.

IL DIVARIO DELLA SINTESI

Un materiale stabile previsto non è un materiale sintetizzato, e anche dopo che i nuovi materiali sono stati prodotti di solito servono decenni perché l'industria li porti sul mercato. Il collo di bottiglia si è spostato da «cosa dovremmo provare?» a «riusciamo davvero a farlo?», ed è proprio lì che sta avvenendo la prossima ondata. Serve cautela anche sulle affermazioni stesse: scienziati dei materiali indipendenti hanno messo in dubbio quanti dei «nuovi» composti annunciati da questo filone di lavoro, compresi i risultati di sintesi del laboratorio autonomo, siano davvero nuovi e utili.

4 Laboratori autoguidati: chiudere il cerchio

Se l'IA può proporre ipotesi più in fretta di quanto gli esseri umani riescano a verificarle, il passo successivo ovvio è automatizzare anche la verifica. È la premessa dei laboratori autoguidati (self-driving laboratories, SDL), che negli ultimi anni sono passati dai prototipi verso un uso reale.

Gli SDL si classificano comunemente su cinque livelli di autonomia: Livello 1 (operazione assistita, come i robot per la gestione dei liquidi), Livello 2 (autonomia parziale, come la generazione di protocolli), Livello 3 (autonomia condizionata: almeno un ciclo completo del metodo scientifico svolto in autonomia), Livello 4 (alta autonomia: generazione ed esecuzione dei protocolli, analisi e aggiustamento delle ipotesi) e Livello 5 (autonomia piena, un ricercatore IA, non ancora raggiunto).

Tabella 1. Livelli di autonomia dei laboratori autoguidati, con sistemi d'esempio dalla letteratura. Dove si collochi un dato sistema è in parte questione di definizione.

Livello di autonomia	Capacità	Sistemi d'esempio
Livello 1	Compiti assistiti dalla macchina	Robot per liquidi, software di analisi dei dati
Livello 2	Generazione di protocolli	Aquarium
Livello 3	Un ciclo completo del metodo scientifico	iBioFab, Mobile Robot Chemist
Livello 4	Ricerca autonoma guidata da ipotesi	A-Lab, Adam, Eve, MicroCycle
Livello 5	Ricercatore IA completo	Non ancora raggiunto

Lo stato dell'arte sta nei livelli alti, in chimiche ben definite. L'A-Lab del Lawrence Berkeley National Laboratory combina dati di letteratura, machine learning e apprendimento attivo per pianificare e sintetizzare composti obiettivo, eseguire la diffrazione a raggi X e interpretarne i risultati. Alla North Carolina State University un laboratorio autoguidato ha dimostrato una tecnica che raccoglie dati con un'efficienza almeno dieci volte superiore agli approcci precedenti, accelerando la scoperta di materiali e abbassando costi e impatto ambientale.

I grandi modelli linguistici hanno iniziato a fare da «strato cognitivo» di questi sistemi. Boiko et al. hanno proposto Coscientist, un sistema guidato da un LLM in grado di progettare, pianificare e controllare operazioni robotiche per esperimenti chimici: legge la letteratura, propone vie di sintesi, istruisce una piattaforma robotica, interpreta i risultati spettroscopici e aggiorna il proprio piano.

5 Ricerca medica e IA clinica

Oltre la scala molecolare, l'IA è diventata uno strumento di prima linea nella ricerca clinica e nella diagnostica. Nel 2025 il Diagnostic Orchestrator di Microsoft (MAI-DxO) ha risolto casi medici complessi con un'accuratezza dell'85,5%, contro circa il 20% dei medici con cui è stato confrontato. Il numero va letto con attenzione: i casi venivano dalle conferenze clinico-patologiche del *New England Journal of Medicine*, che sono volutamente difficili, e i medici lavoravano senza accesso a colleghi o materiali di riferimento. Anche con queste cautele, una differenza di quella entità sui casi più difficili è significativa.

Anche la cornice sta cambiando. Peter Lee, presidente di Microsoft Research, prevede che nel 2026 l'IA non si limiterà a riassumere articoli, rispondere a domande e scrivere rapporti, ma parteciperà attivamente al processo di scoperta in fisica, chimica e biologia: generando ipotesi, usando strumenti che controllano gli esperimenti e collaborando con colleghi umani e IA. È una previsione, non un risultato.

6 Il lato oscuro: le allucinazioni entrano nella memoria permanente

Gli stessi sistemi che propongono strutture di proteine e vie di sintesi fabbricano anche citazioni con una sicurezza inquietante. Nel 2026 il problema non è più aneddotico.

A gennaio 2026 GPTZero ha analizzato i 4.841 articoli accettati a NeurIPS 2025, la principale conferenza di IA, trovando almeno 100 citazioni allucinate confermate in 51 articoli, circa l'1% del lavoro accettato, nonostante la revisione di più esperti per articolo.

Non riguarda solo le conferenze di IA. Un audit della scuola di infermieristica della Columbia University su 2,5 milioni di articoli biomedici ad accesso aperto ha trovato 4.046 citazioni fabbricate in 2.810 articoli pubblicati tra gennaio 2023 e febbraio 2026. E un sondaggio della casa editrice Frontiers di fine 2025 ha rilevato che più della metà dei revisori usa già strumenti di IA, spesso al di fuori delle linee guida delle riviste.

Il meccanismo di correzione non sta al passo: in quell'audit, il 98,4% degli articoli coinvolti non aveva ricevuto alcuna azione da parte dell'editore. Una volta che una citazione fabbricata è nella letteratura tende a restarci, e gli articoli successivi possono citare quello che la contiene, propagando l'errore.

> **L'EFFETTO COMPOSTO SULLA RIPRODUCIBILITÀ**
>
> Non è una crisi parallela a quella della riproducibilità già esistente: la accelera. Una marea crescente di contenuti generati dall'IA e inaffidabili permea ormai la letteratura accademica, e le citazioni fabbricate spezzano la catena delle prove: se un risultato poggia su uno studio che non esiste, non può essere replicato nemmeno in linea di principio.

7 La metodologia del prossimo decennio

Diverse tendenze tecniche stanno convergendo in quella che somiglia a una nuova metodologia scientifica.

La generazione di ipotesi come ricerca. Il modello classico, in cui un ricercatore formula un'ipotesi a partire da intuizione e letture, viene affiancato (non sostituito) da sistemi che enumerano e valutano esplicitamente ipotesi su vasti spazi combinatori. I 2,2 milioni di cristalli di GNoME sono una forma di questo; i 200 milioni di strutture previste da AlphaFold ne sono un'altra. Il ruolo umano passa da generatore a curatore.

Cicli di apprendimento attivo. I dati di addestramento di questi modelli sono sempre più generati dai modelli stessi, validati da simulazione o esperimento e reimmessi nell'addestramento. È un ciclo chiuso che migliora con l'uso, e fondamentalmente diverso dal paradigma dei dataset statici del primo decennio del deep learning.

Modelli di fondazione per la scienza. I modelli generali preaddestrati, analoghi ai modelli linguistici della classe GPT ma addestrati su dati scientifici (sequenze, strutture, spettri, equazioni), cominciano a sostituire le architetture specifiche per compito. Gran parte dei progressi avviene ora nel post-addestramento, dove i modelli vengono raffinati su dati specializzati, il che favorisce i modelli open source personalizzabili e addestrabili per applicazioni specifiche.

Ibridi simbolico-statistici. Le reti neurali pure faticano con la derivazione rigorosa e la correttezza dimostrabile. Ricercatori dell'Università della Pennsylvania hanno introdotto i «Mollifier Layers», una tecnica che integra funzioni matematiche classiche di smussamento nelle reti neurali per risolvere equazioni differenziali alle derivate parziali inverse con una stabilità molto maggiore, un problema di lunga data quando si calcolano derivate di ordine alto su dati reali rumorosi. Le applicazioni spaziano da genomica e scienza dei materiali a modelli climatici e biologia della cromatina.

8 Cosa l'IA non fa (ancora)

Il gradiente di entusiasmo su questo tema è ripido, quindi vale la pena elencare cosa è ancora fuori portata.

L'IA non formula quadri teorici davvero nuovi. Non ha derivato una nuova legge fisica, proposto un nuovo principio di simmetria né unificato due campi separati. Accelera il lavoro dentro i quadri esistenti. Il salto dalla meccanica galileiana alla relatività generale non è, per ora, il genere di salto che fa un transformer.

L'IA, da sola, non conduce esperimenti di laboratorio alla frontiera. I laboratori autoguidati funzionano in chimiche ben caratterizzate e in spazi di parametri ben definiti. L'esperimento davvero esplorativo, in cui non sai quali strumenti usare, quali variabili misurare o che aspetto abbia il fallimento, resta un'attività umana.

L'IA non comprende la causalità. Rileva le correlazioni in modo eccellente. Distinguere «X causa Y» da «X è correlato a Y perché entrambi sono causati da Z» richiede ancora ragionamento

interventistico, esperimenti controllati e giudizio umano su quali controfattuali valga la pena esplorare.

UNA NOTA SOBRIA

La spesa attuale e prevista in data center è il più grande progetto tecnologico della storia, e alcuni osservatori parlano di una bolla: i ricavi sono deludenti, i guadagni dai modelli linguistici sempre più grandi sembrano appiattirsi e ci sono limiti teorici all'efficienza con cui possono imparare concetti semplici, come ha sostenuto Stuart Russell di UC Berkeley. Il progresso dell'IA scientifica è reale, ma non è illimitato.

9 Conclusione: il nuovo ruolo dello scienziato

Il risultato principale degli ultimi cinque anni non è che l'IA sostituisce gli scienziati. È che l'IA cambia quali parti della scienza sono scarse. L'enumerazione di ipotesi, la sintesi della letteratura e il riconoscimento di schemi in grandi dataset non sono più il fattore limitante. Resta scarso il giudizio: decidere quale tra un milione di cristalli previsti sintetizzare davvero, quale citazione fabbricata intercettare prima che si propaghi, quale raccomandazione clinica dell'IA scavalcare, quale nuovo approccio sperimentale inventare perché nessun modello ci ha ancora pensato.

La decisione del Comitato Nobel del 2024 ha riconosciuto non solo strumenti specifici ma un cambiamento di metodo, con conseguenze per la ricerca medica, la biotecnologia e la scienza dei materiali. I prossimi dieci anni di scienza si misureranno in buona parte da quanto bene il settore integrerà questi strumenti preservando gli standard epistemici che rendevano la scienza degna di essere fatta.

Riferimenti principali: Jumper et al., Nature 596, 583–589 (2021); Tunyasuvunakool et al., Nature 596, 590–596 (2021); Abramson et al., Nature 630, 493–500 (2024); Merchant et al. (GNoME), Nature 624 (2023); Watson et al., Nature 620, 1089–1100 (2023); i comunicati stampa del Nobel 2024 (NobelPrize.org); lo Stanford HAI AI Index; e la cronaca di Nature, MIT Technology Review, Fortune e TechCrunch fino a maggio 2026. I dati sulle citazioni allucinate provengono dall'analisi di GPTZero su NeurIPS 2025 e dall'audit della Columbia University School of Nursing.

COME CITARE QUESTO ARTICOLO

Francesco Barbato (2026). Lo scienziato nella macchina: come l'IA sta riscrivendo la ricerca scientifica, dal ripiegamento delle proteine ai laboratori autonomi. localhost:3000.

Versione online: http://localhost:3000/it/blog/scienziato-nella-macchina-ia-ricerca-scientifica