

## [Anuncios](#)

# IBM amplía las capacidades de descubrimiento de materiales a través de la inteligencia artificial y firma nuevas colaboraciones en la industria

**IBM RoboRXN, el laboratorio automatizado de inteligencia artificial en la nube diseñado para permitir una nueva era de descubrimiento molecular de vía rápida, ahora soporta conjuntos de datos patentados y química ecológica.**



**Zurich, Suiza, 30 de noviembre, 2021.** IBM (NYSE: [IBM](#)) ha anunciado las nuevas mejoras de RoboRXN, el laboratorio automatizado de inteligencia artificial en la nube, diseñado para descubrir y crear, de manera remota, nuevas moléculas y materiales. Presentado en 2018, RXN for Chemistry, la inteligencia artificial detrás de RoboRXN, ha sido utilizado por más de 29.000 usuarios y cuenta con más de cinco millones de predicciones de reacciones en un esfuerzo por agilizar el proceso científico en torno al descubrimiento y la creación de nuevos materiales.

Si bien RoboRXN aprovecha las capacidades pioneras de la inteligencia artificial y de la nube para mejorar el descubrimiento de materiales, es esencial que este proceso sea seguro para las organizaciones que trabajan con datos patentados. Además, existe una creciente necesidad de mejorar la sostenibilidad en todos los procesos de fabricación, incluidas las reacciones químicas que convierten las materias primas en productos terminados.

Para lograr estos objetivos, RoboRXN de IBM tendrá dos nuevas funciones:

*“ La nube es la infraestructura perfecta para fomentar y estimular la cooperación entre diferentes proveedores de tecnología, así como la transición a soluciones digitales en las operaciones diarias de I + D. RoboRXN juega un papel estratégico como precursor de este nuevo proceso de integración y desarrollo en la industria y la investigación*

- **Seguridad y personalización:** las nuevas funciones de la nube permiten al usuario entrenar a RXN directamente con conjuntos de datos confidenciales para una experimentación y personalización más segura de los modelos de predicción utilizando conocimientos patentados.
- **Procesos químicos más ecológicos:** los nuevos modelos de IA ahora pueden ayudar a los químicos a predecir e identificar rápidamente enzimas más respetuosas con el medio ambiente. Las enzimas son biomoléculas altamente complejas necesarias para convertir materiales en productos como papel, cosméticos, productos farmacéuticos y aromas.

*química*

”

IBM también anuncia nuevas colaboraciones con Atinary, Arctoris, Chemspeed Technologies AG, Syngenta y Thieme Chemistry para continuar el impacto de RoboRXN en la aceleración de la síntesis y prueba de nuevos materiales en diversas industrias.

### **Acelerando el descubrimiento de nuevos materiales**

Se necesitan casi 10 años y entre 10 y 100 millones de dólares para identificar y producir un nuevo material. Esto sucede porque la química sintética se sigue basando en métodos de prueba y error, y ha habido poco avance en la modernización del arte de hacer materiales.

“Para crear un nuevo material hoy, los investigadores deben viajar a través de un espacio químico, aparentemente interminable, lleno de más compuestos potenciales que átomos hay en el universo”, sostiene el Dr. Alessandro Curioni, IBM Fellow y director de IBM Research Europe. “Para ayudar a resolver muchos de los desafíos que requieren de nuevos materiales (como el hambre, el cambio climático o las enfermedades infecciosas), los investigadores deben poder idear, sintetizar y probar potenciales materiales de manera efectiva. La aplicación de la IA a esta tremenda tarea, a través de tecnologías como RoboRXN, tiene el potencial de ayudar a casi todas las industrias a acelerar la eficacia, la sostenibilidad y el impacto de los nuevos materiales que se crean”.

IBM RoboRXN está diseñado para actuar como un navegador para que los químicos descubran y fabriquen materiales de una manera más rentable, en comparación con los procesos tradicionales, al automatizar la mayoría del trabajo preliminar inicial en la síntesis de materiales. Los usuarios también pueden sintetizar materiales de forma remota a través de la nube.

### **Descubriendo procesos químicos más ecológicos**

RoboRXN ofrece ahora soluciones químicas sostenibles que utilizan el machine learning para identificar y clasificar procesos enzimáticos efectivos y sostenibles, lo que se traduce en una síntesis química más ecológica. Por ejemplo, los químicos pueden usar esta nueva arquitectura de IA para aprovechar los enormes volúmenes de enzimas potencialmente conocidas para reemplazar los catalizadores químicos tradicionales y los solventes tóxicos con compuestos naturales derivados de plantas y vegetales.

La principal limitación para la aplicación de soluciones químicas sostenibles es que el conocimiento de dominio específico requerido para adaptar las enzimas existentes a las nuevas transformaciones químicas no está estructurado. Esto ha hecho que sea difícil y que requiera mucho tiempo descubrir nuevas enzimas potenciales a través de métodos de experimentación tradicionales.

El descubrimiento de enzimas para la síntesis orgánica podría permitir rutas simplificadas, más económicas y sostenibles para producir productos más respetuosos con el medio ambiente. Los casos de uso industrial abarcan desde la industria de alimentos y bebidas hasta la industria farmacéutica o la cosmética. En la producción de papel, por ejemplo, la pulpa se puede tratar con xilanasas, una enzima natural, en lugar de blanqueador, que es caro y contaminante.

## **Ampliando las aplicaciones industriales**

Cada uno de los colaboradores en la industria están probando RoboRXN de formas únicas y personalizadas, todo con el objetivo de revolucionar la práctica de la química orgánica y acelerar el descubrimiento de materiales. IBM está consultando y colaborando activamente con cada empresa, ayudándoles a integrar varias características técnicas de RoboRXN en sus flujos de trabajo:

- [Atinary Technologies e IBM han colaborado](#) integrando sus dos plataformas en la nube, Atinary Self-Driving Platform (Atinary™ SDLabs) e IBM RoboRXN, para acelerar y revolucionar la optimización de reacciones químicas.
- [Arctoris e IBM tienen un acuerdo de colaboración](#) para combinar RXN for Chemistry con Ulysses, la plataforma automatizada de biología y bioquímica de Arctoris, cerrando así el ciclo de diseño-fabricación-prueba-análisis en el descubrimiento de fármacos.
- **Chemspeed Technologies AG** tiene un acuerdo IBM para ofrecer la tecnología IBM RoboRXN como una solución para sus clientes.
- **Syngenta** está implementando la tecnología RXN en su flujo de trabajo de investigación de materiales.
- [Thieme Chemistry e IBM han unido fuerzas](#) para mejorar la planificación de la síntesis mediante la incorporación de conjuntos de datos de síntesis de las fuentes de publicaciones digitales curadas por humanos expertos de Thieme sobre química orgánica (Science of Synthesis and Synfacts) en RXN for Chemistry.

“El futuro de los materiales y la química está en la nube, con el desarrollo y la adopción de tecnologías digitales para acelerar el descubrimiento”, comenta el Dr. Teodoro Laino, científico de IBM Research Europe en Zurich. “La nube es la infraestructura perfecta para fomentar y estimular la cooperación entre diferentes proveedores de tecnología, así como la transición a soluciones digitales en las operaciones diarias de I + D. RoboRXN juega un papel estratégico como precursor de este nuevo proceso de integración y desarrollo en la industria y la investigación químicas”.

## **Sobre RXN for Chemistry**

[RXN for Chemistry](#), el motor central de RoboRXN, está impulsado por un método de traducción de machine learning neuronal de última generación que predice el resultado más probable de una reacción química. Lo hace traduciendo de un idioma (reactivos y reactante) a otro idioma (productos) utilizando secuencias de caracteres llamadas Sistema de Entrada de Línea de Entrada Molecular Simplificada ([SMILES](#)) para describir entidades químicas.

Las rutas sintéticas optimizadas se utilizan luego como entrada para [RoboRXN, una plataforma automatizada para la síntesis de moléculas](#). El sistema de IA también está equipado con una [arquitectura retrosintética](#) en la que, en lugar de predecir el resultado de una posible reacción química (predicciones directas), funciona a la inversa para determinar primero los productos químicos necesarios para crear una molécula objetivo determinada.

Esta plataforma de inteligencia artificial basada en la nube se diseñó y lanzó originalmente en 2018 y se puso a disposición de forma gratuita en IBM Cloud. Desde su lanzamiento, RoboRXN ha superado a todos los modelos basados en datos, logrando una precisión de más del 90 por ciento en las predicciones de reacciones químicas futuras, y actualmente lo utilizan más de 29.000 usuarios y ha acumulado más de 5 millones de predicciones de reacciones. En la actualidad, se está probando en los flujos de trabajo de algunas de las principales empresas farmacéuticas, biotecnológicas y agrícolas, ayudándoles a acelerar las predicciones de reacciones químicas, vías de retrosíntesis, procedimientos experimentales y automatizando la compilación y ejecución de síntesis químicas.

## **Sobre IBM Research**

Durante más de siete décadas, IBM Research ha definido el futuro de la tecnología de la información con más de 3.000 investigadores en 16 centros repartidos en 5 continentes.

Los científicos de IBM Research han logrado seis premios Nobel, diez medallas nacionales de tecnología de EEUU, cinco medallas nacionales de ciencia de EE. UU., seis premios Turing, 19 miembros de la Academia Nacional de Ciencias y 20 son miembros del Salón de la Fama de Inventores Nacionales de EEUU.

Para obtener más información, [www.research.ibm.com/](http://www.research.ibm.com/).

For further information: Miguel Giménez De Castro. Dpto. Comunicación IBM España, Portugal, Grecia e Israel.  
Miguel.gimenezdc@ibm.com

---