**IBM amplía las capacidades de descubrimiento de materiales impulsados por la IA y firma nuevas colaboraciones en la industria**

* *IBM RoboRXN, un laboratorio automatizado de inteligencia artificial basado en la nube, diseñado para permitir una nueva era de descubrimiento molecular de vía rápida, ahora admite conjuntos de datos propietarios y química sostenible.*

IBM anunció nuevas mejoras en RoboRXN, un laboratorio automatizado de inteligencia artificial basado en la nube, que está diseñado para permitir el descubrimiento y la creación remota de nuevas moléculas y materiales. Lanzado en 2018, RXN for Chemistry -la IA detrás de RoboRXN- ha sido utilizado por más de 29.000 usuarios y acumula más de cinco millones de predicciones de reacción en un esfuerzo por agilizar el proceso científico del descubrimiento y la creación de nuevos materiales.

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

Para hacer frente a estos desafíos, IBM ofrecerá ahora dos nuevas capacidades en RoboRXN:

* **Seguridad y personalización:** las nuevas capacidades en la nube permiten a los usuarios entrenar directamente a RXN con conjuntos de datos confidenciales para una experimentación y personalización más segura de los modelos de predicción utilizando conocimientos propietarios.
* **Procesos químicos más ecológicos:** los nuevos modelos de IA ahora pueden ayudar a los químicos en la predicción e identificación rápida de enzimas más amigables con el medio ambiente. Las enzimas son biomoléculas altamente complejas necesarias para convertir materiales en papel, cosméticos, productos farmacéuticos y sabores.

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

**Acelerar el descubrimiento de materiales**

Puede tomar casi 10 años y más de USD 10-100 millones para identificar y producir un nuevo material. Esto se debe a que la química sintética todavía se basa en los métodos de prueba y error, y se ha avanzado poco en la modernización del arte de la fabricación de materiales. “En la actualidad, para crear nuevo material, los investigadores deben viajar a través de un espacio químico aparentemente interminable repleto de más compuestos potenciales que átomos en el universo”, dijo el Dr. Alessandro Curioni, IBM Fellow y Director de IBM Research Europa. “Para ayudar a resolver muchos de los desafíos que requieren de nuevos materiales -desde el hambre hasta el cambio climático y las enfermedades infecciosas- los investigadores necesitan ser capaces de idear, sintetizar y probar eficazmente los materiales potenciales. Aplicar la IA a esta tremenda tarea a través de tecnologías como RoboRXN tiene el potencial de ayudar a casi todas las industrias a acelerar su efectividad, sostenibilidad y el impacto de los nuevos materiales que crean”.

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

**Descubrir procesos químicos más sostenibles**

RoboRXN ahora ofrece soluciones químicas sostenibles que utilizan el aprendizaje automático para identificar y clasificar procesos enzimáticos eficaces y sostenibles. 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 por compuestos naturales derivados de plantas y vegetales.

Una limitación principal para la aplicación de soluciones de química sostenible es que el conocimiento de dominio específico necesario para adaptar las enzimas existentes a las nuevas transformaciones químicas no está estructurado. Esto ha hecho que sea difícil y requiera mucho tiempo el descubrimiento de nuevas enzimas potenciales a través de métodos tradicionales de experimentación. El descubrimiento de enzimas para la síntesis orgánica podría permitir rutas simplificadas, más económicas y sostenibles para desarrollar productos más respetuosos con el medio ambiente. Los casos de uso industrial abarcan desde la industria de alimentos y bebidas hasta los sectores farmacéuticos, cosméticas y más. En la producción de papel, por ejemplo, la pulpa se puede tratar con xilanasa, una enzima natural, en lugar de la lejía, que es cara y contaminante.

**Expandir aplicaciones industriales**

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

* [**Atinary Technologies** e IBM lanzaron una colaboración](https://www.linkedin.com/pulse/atinary-technologies-launched-collaboration-ibm-research-europe-/?trackingId=aE81vHE2Toi1litGy8ssBQ%3D%3D) para integrar sus dos plataformas en la nube, Atinary Self-driving Platform (AtinaryTM SDLabs) e IBM RoboRXN, para acelerar y revolucionar la optimización de reacciones químicas.
* [**Arctoris** e IBM lanzaron una investigación](https://www.prnewswire.com/news-releases/ibm-research-and-arctoris-accelerate-closed-loop-drug-discovery-with-ai-and-cloud-301373353.html) para combinar RXN for Chemistry con Ulysses, 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** está colaborando con IBM para ofrecer tecnología de IBM RoboRXN como una solución a sus clientes.
* **Syngenta** está implementando la tecnología RXN en sus flujos de trabajo para descubrimiento de materiales.
* [**Thieme Chemistry** e IBM unieron fuerzas](https://www.thieme.com/for-media/147-2021/1751-new-partnership-between-ibm-research-europe-and-thieme-chemistry) para mejorar la planificación de síntesis mediante la incorporación de conjuntos de datos de las publicaciones digitales sobre química orgánica de expertos de Thieme -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", dijo el Dr. Teodoro Laino, Distinguished Scientist en IBM Research Europa. La nube es la infraestructura perfecta para fomentar y estimular la cooperación entre diferentes proveedores de tecnología e impulsar la transición a soluciones digitales en las operaciones diarias de I&D. RoboRXN desempeña un [rol estratégico como precursor de este nuevo proceso](https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/60c749fbee301c10e1c79b75) de integración y desarrollo en la investigación y la industria química”.

[RXN for Chemistry](https://www.ibm.com/blogs/research/2018/08/neural-networks-organic-chemistry/), el motor central de RoboRXN, se basa en un método de traducción de aprendizaje automático neuronal de última generación que predice el resultado más probable de una reacción química. Lo hace traduciendo de un lenguaje (reactivos y reactantes) a otro lenguaje (productos) usando secuencias de caracteres *llamados Simplified Molecular Input Line Entry System (*[*SMILES*](https://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html)*)* para describir las entidades químicas.

Las rutas sintéticas optimizadas se utilizan luego como entrada [para RoboRXN, una plataforma automatizada para la síntesis de moléculas](https://www.ibm.com/blogs/research/2020/08/roborxn-automating-chemical-synthesis/). El sistema de IA también está equipado con una [arquitectura retrosintética](https://www.ibm.com/blogs/research/2019/10/ibm-brings-ai-retrosynthetic-analysis-to-the-cloud/) en la que, en lugar de predecir el resultado de una posible reacción química, funciona a la inversa para determinar primero los productos químicos necesarios para crear una molécula objetivo determinada.

Esta plataforma de IA basada en la nube fue diseñada y lanzada originalmente en 2018 y puesta 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%](https://www.nature.com/articles/s41467-020-17266-6) en las predicciones de reacciones químicas, y actualmente está siendo utilizado por más de 29.000 usuarios y acumula más de 5 millones de predicciones de reacciones. Actualmente, se está probando en los flujos de trabajo de algunas de las principales compañías farmacéuticas, biotecnológicas y agrícolas, ayudándolas a acelerar las predicciones de reacciones químicas, retrosíntesis, procedimientos experimentales, así como también para automatizar la compilación y ejecución de síntesis químicas.

***Sobre IBM Research***

*Por más de siete décadas, IBM Research ha definido el futuro de la tecnología de la información con más de 3.000 investigadores en 16 ubicaciones en los cinco continentes. Los científicos de IBM Research alcanzaron seis Premios Nobel, 10 National Medals of Technology de EE.UU., seis Premios Turing, 19 miembros en la Academia Nacional de Ciencias de EE.UU., y 20 en el Salón de la Fama de los Inventores Nacionales de EE.UU. Para más información, por favor visite* [*www.research.ibm.com*](http://www.research.ibm.com)