Investigadores de la Universidad de Oviedo desarrollan una inteligencia artificial químicamente explicable

**Un equipo de la institución académica diseña una novedosa arquitectura basada en redes neuronales artificiales que permite predecir con alta precisión y coherencia física propiedades químicas locales**

**Esta innovación promete revolucionar el conocimiento de la química al proporcionar predicciones cuantitativas precisas y, lo que es más importante, arrojar, por primera vez, interpretaciones químicas comprensibles**

**El estudio, liderado por el Grupo de Química Teórica y Computacional de la Universidad de Oviedo en colaboración con la Universidad de Luxemburgo, ha sido publicado en la revista ‘Nature Communications’, de máximo impacto en su área del conocimiento**

**Oviedo/Uviéu, 27 de mayo de 2024**. El Grupo de Química Teórica y Computacional de la Universidad de Oviedo (QTCOVI), en colaboración con la Universidad de Luxemburgo, ha desarrollado una innovadora arquitectura de *machine learning* que mejora significativamente la precisión e interpretabilidad de las predicciones químicas. Este avance, resultado de la sinergia entre la inteligencia artificial y la llamada topología químico- cuántica, allana el camino hacia una inteligencia artificial químicamente explicable. De este modo, los investigadores eliminan el cuello de botella que hasta ahora ha impedido el estudio riguroso de sistemas químicos complejos y de gran tamaño. El hallazgo ha sido publicado en la revista *Nature Communications*, de máximo impacto en su área del conocimiento.

El equipo de investigadores de la universidad asturiana, en un avance significativo para la química computacional, ha diseñado una novedosa arquitectura basada en redes neuronales artificiales que permite predecir con alta precisión y coherencia física propiedades químicas locales. Esta innovación promete revolucionar el conocimiento de la química al proporcionar predicciones cuantitativas precisas y, lo que es más importante, arrojar, por primera vez, interpretaciones químicas comprensibles.

Los investigadores apuntan que, tradicionalmente, la descripción rigurosa de la química ha estado limitada a estudios de pequeñas moléculas debido a su alto coste computacional. Esta situación cambió con la llegada de modelos de inteligencia artificial que permiten predecir una multitud de descriptores y propiedades químicas sin necesidad de realizar los cálculos de mecánica cuántica requeridos por los algoritmos convencionales. Así, en los últimos años, ha proliferado el desarrollo de modelos de inteligencia artificial capaces de simular computacionalmente moléculas complejas y de gran tamaño en fracciones de segundo.

Los modelos de inteligencia artificial comunes presentan, sin embargo, dos grandes inconvenientes. En primer lugar, no ofrecen indicadores de incertidumbre, lo que puede llevar a predicciones erráticas cuando se aplican en partes del espacio químico muy diferentes a las utilizadas durante su entrenamiento. En segundo lugar, carecen de interpretabilidad, por lo que proporcionan resultados muy precisos sin revelar la lógica subyacente. Por esta razón, se dice que se comportan como auténticas cajas negras.

**Topología químico-cuántica**

Para abordar este problema, los investigadores propusieron aprovechar el rigor de las teorías físicas modernas, en particular, la topología químico-cuántica, en la cual el grupo tiene varias décadas de experiencia. “La topología químico-cuántica proporciona un marco teórico riguroso para el estudio de la química en el espacio real. Esta teoría se basa en el análisis topológico de diversos campos escalares, como la densidad electrónica”, asegura Ángel Martín Pendás, catedrático del Departamento de Química Física y Analítica de la Universidad de Oviedo. Así, la topología químico-cuántica establece un marco ideal para el desarrollo de herramientas teóricas de alta calidad para el estudio de la química, como la teoría cuántica de átomos en moléculas o el esquema de partición energética de átomos cuánticos interactuantes.

De esta manera, el grupo de la Universidad de Oviedo se propuso combinar inteligencias artificiales de última generación con técnicas físicamente rigurosas como la teoría cuántica de átomos en moléculas o el esquema de partición energética de átomos cuánticos interactuantes. “Pensamos que, si desarrollamos arquitecturas de inteligencia artificial que aprendan directamente propiedades de topología químico-cuántica locales en el espacio real, podríamos obtener modelos interpretables y transferibles”, sostiene Miguel Gallegos, estudiante de doctorado del grupo de investigación.

**Extrapolación, transferibilidad e interpretabilidad**

La arquitectura desarrollada por el grupo, bautizada SchNet4AIM, emplea redes neuronales convolucionales para aprender de forma autónoma a describir los entornos químicos de cada átomo en una molécula. Seguidamente, una segunda red crea un espacio latente para conectar cada uno de estos descriptores al espacio de propiedades químicas. Esta estrategia permite reconstruir propiedades de las moléculas como una combinación de términos atómicos y de pareja, una aproximación que contrasta con lo que se suele hacer en este campo. “En la aplicación de la inteligencia artificial en la química, lo más frecuente es que los modelos aprendan directamente las propiedades moleculares, que resultan de la combinación de términos que carecen de sentido físico”, aseguran los investigadores.

Los resultados obtenidos demuestran que esta estrategia ofrece predicciones atómicas y de parejas extremadamente precisas y físicamente coherentes. Sin embargo, la verdadera novedad no reside en la precisión – "obtener modelos precisos que alcancen los límites de precisión de los algoritmos convencionales está a la orden del día"–, sino en la generalizabilidad y transferibilidad de los modelos. "Lo que nos sorprendió fue que SchNet4AIM es capaz de predecir fielmente moléculas mucho más complejas que las vistas durante el entrenamiento", subrayan. Esto es peculiar, ya que la mayoría de los modelos de inteligencia artificial química fallan cuando se utilizan fuera de su dominio de conocimiento, lo que se conoce como extrapolación. Esta interesante característica, siendo una manifestación de la transferibilidad y rigor de las teorías de topología químico-cuántica, abre la puerta a solventar uno de los mayores problemas en la inteligencia artificial química moderna. “Las inteligencias artificiales actuales ya han demostrado ser capaces de superar los límites de precisión en química, pero suelen tener un rango de aplicación algo limitado. Uno de los mayores retos ahora mismo se centra en conseguir modelos generales, de aplicación universal”, comentan ambos investigadores.

Además, esta localidad química aprovechada por los investigadores tiene una consecuencia inesperada: los modelos muestran una interpretabilidad intrínseca. "Nuestros modelos han demostrado ser capaces de identificar y, lo que es más importante aún, explicar la deslocalización electrónica que surge a lo largo de un proceso de unión supramolecular. Así, no solo revelan cuándo y dónde aparecen posibles puntos de unión entre ligando y receptor, sino que también indican qué interacciones de pareja dominan dichas uniones", explican. Esto constituye un paso fundamental hacia el desarrollo de inteligencias artificiales químicamente explicables, uno de los campos emergentes en la investigación en esta materia.

Globalmente, este avance señala una sinergia prometedora entre la topología químico- cuántica y la inteligencia artificial y anticipa la creación de herramientas computacionales con numerosas aplicaciones potenciales como el diseño de fármacos novedosos o materiales con propiedades sintonizables. Con todo, y pese a sus impresionantes capacidades, SchNet4AIM se enfrenta a desafíos, como entender cómo las propiedades moleculares son influenciadas por sus componentes locales en sistemas realmente complejos o cómo estas últimas dependen de las variables físicas del sistema. Así, los investigadores aseguran que aún queda mucho trabajo por hacer en esta línea de investigación.

**Referencia**

Gallegos, M., Vassilev-Galindo, V., Poltavsky, I. et al. Explainable chemical artificial intelligence from accurate machine learning of real-space chemical descriptors. Nat Commun 15, 4345 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41467-024-48567-9>

|  |  |
| --- | --- |
| **Más información:** | [www.uniovi.es](file:///C%3A%5CUsers%5CUsuario%5CAppData%5CLocal%5CC%3A%5CUsers%5CUsuario%5CAppData%5CLocal%5CMicrosoft%5CWindows%5CC%3A%5CUsers%5CLuis%5CAppData%5CLocal%5CMicrosoft%5CWindows%5CINetCache%5CContent.Outlook%5C7M53EHZX%5Cwww.uniovi.es)  |
| [UniversidadOviedo](https://www.facebook.com/UniversidadOviedo) |  | [uniovi\_info](https://twitter.com/uniovi_info) |  | [Universidad de Oviedo](https://es.linkedin.com/school/uniovi/) |  |
| [universidad\_de\_oviedo](https://www.instagram.com/universidad_de_oviedo) |  | [uniovi](https://www.tiktok.com/%40uniovi) |  | [uniovi](https://www.youtube.com/c/UniversidadOviedo/) |  |