

## **Un investigador del CSIC en Aragón crea un programa informático que ahorra hasta un 70% del tiempo en el estudio de las reacciones químicas**

- El software desarrollado por Juan Vicente Alegre Requena, científico en el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea, aumenta la fiabilidad y simplifica protocolos de la química computacional y el *machine learning*
- El trabajo, publicado en la revista WIREs Computational Molecular Science, permite reducir los recursos invertidos en el laboratorio y eliminar el error humano al automatizar los procesos

Zaragoza, 13 de marzo de 2023.- Juan Vicente Alegre Requena, investigador del CSIC en el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), instituto mixto del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) y la Universidad de Zaragoza, ha desarrollado un programa informático para facilitar el estudio de las reacciones químicas a través del ordenador que evita los errores humanos y ahorra tiempo a los investigadores al automatizar los procesos, además de eliminar el gasto en material de laboratorio y la generación de residuos.

Su trabajo se centra en un programa de lenguaje de computación Python, al que ha denominado AQME (Automated Quantum Mechanical Environments), y acaba de ser publicado en la revista WIREs Computational Molecular Science, donde figura como autor de correspondencia. El programa simplifica y automatiza diversos protocolos de la química computacional y el machine learning, una disciplina de la inteligencia artificial, ahorrando hasta un 70% de tiempo en la manipulación de datos del día a día. Estos protocolos permiten predecir resultados por ordenador sin necesidad de ir al laboratorio, lo cual permite evitar experimentos innecesarios y el consecuente desperdicio de materiales y energía.

Después de lanzar los cálculos, el programa analizaría los resultados y los intentaría corregir automáticamente. "También permite generar bases de datos con propiedades químicas que pueden ser automáticamente acopladas a modelos de *machine learning*. Estos procesos de creación de ficheros y análisis de datos se suelen hacer manualmente y son tareas pesadas, largas y sujetas a errores de manipulación humana", subraya Alegre.

Los protocolos seguidos se pueden guardar de manera transparente y reproducible para que los sigan otros investigadores, lo cual va en línea con los estándares europeos actuales sobre ciencia abierta y reproducibilidad y facilita la transferencia de conocimiento. "Además, a nivel docente, esto

permite ver y seguir en cuestión de segundos todos los protocolos de los miembros del grupo, lo cual resulta especialmente útil para evitar errores de usuarios con poca experiencia en química computacional como estudiantes de grado o máster”, añade.

Alegre Requena hizo el doctorado en Química Orgánica en la Universidad de Zaragoza y en 2018 se unió como investigador posdoctoral al grupo de Robert Paton en la Universidad Estatal de Colorado (Estados Unidos), donde empezó a desarrollar AQME con la doctoranda Shree Sowndarya, hasta que en abril de 2022 continuó con este proyecto ya incorporado al CSIC. Para el trabajo se basó en su propia experiencia. “Me daba cuenta de que perdía mucho tiempo y cometía pequeños errores, pero cuando hablaba con compañeros me contaban los mismos problemas, así que pensé en crear algo que nos ayudara a ser más eficientes”, reconoce.

El software, que puede emplearse con Windows, Mac y Linux, ya cuenta con más de 2.100 instalaciones a nivel internacional en sus pocos meses de vida, puesto que está disponible en código abierto. Cuenta con un canal propio en YouTube (The Alegre Group) con vídeos y sencillos tutoriales para instalar el programa, en apenas dos minutos, y aprovechar al máximo sus ventajas: <https://aqme.readthedocs.io/>.

## **Acerca del CSIC**

La Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) es la mayor institución pública dedicada a la investigación en España y una de las primeras de Europa. Adscrita al Ministerio de Ciencia e Innovación, su objetivo fundamental es desarrollar y promover investigaciones en beneficio del progreso científico y tecnológico, para lo cual está abierta la colaboración con entidades españolas y extranjeras. El motor de la investigación lo forman sus 123 centros e instituciones, distribuidos por todas las comunidades autónomas, y sus más de 14.000 trabajadores, de los cuales cerca de 3.000 son investigadores en plantilla. El CSIC cuenta con el 6% del personal dedicado a la investigación y el desarrollo en España, que genera aproximadamente el 20% de la producción científica nacional. Es responsable del 45% de las patentes solicitadas por el sector público en España y desde 2004 ha creado más de medio centenar de empresas de base tecnológica.

La delegación de CSIC en Aragón ostenta la representación institucional del CSIC en la comunidad, siendo la delegada, María Jesús Lázaro Elorri, la interlocutora del CSIC con las instituciones públicas y privadas de Aragón. En Aragón, el CSIC cuenta con cinco institutos y personal del centro nacional IGME, Instituto Geológico y Minero de España. Los cinco institutos de nuestra comunidad son la Estación Experimental de Aula Dei, el Instituto Pirenaico de Ecología y el Instituto de Carboquímica –propios del CSIC– y el Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón y el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea –mixtos del CSIC y de la Universidad de Zaragoza-, que cuentan con más de 550 trabajadores. En Zaragoza, el Instituto Geológico y Minero de España tiene una sede.