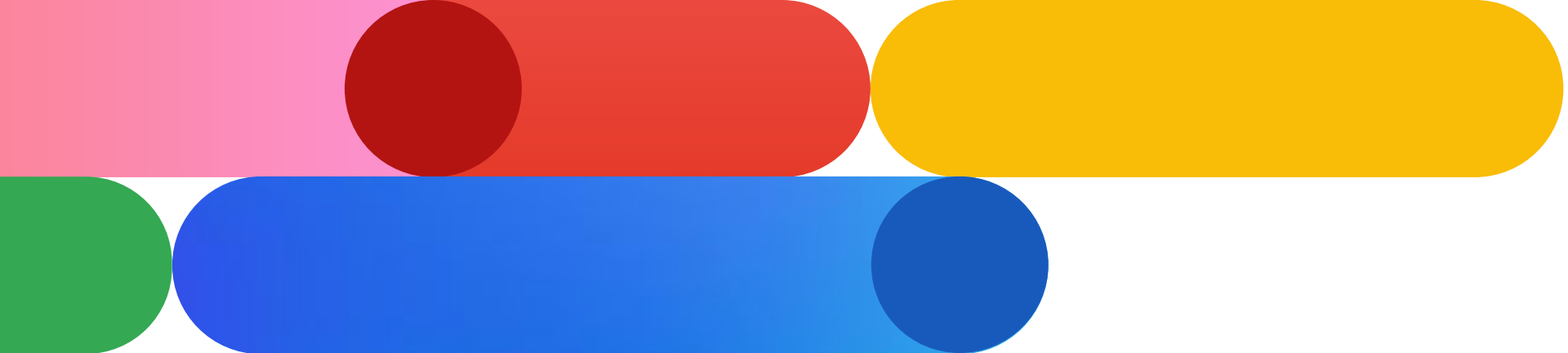


Google Cloud
Summit

Madrid

22 Mayo
2025





De años a días: Acelerando la innovación con IA





**José Miguel
Seoane**

Technology Advisor,
Repsol Technology Lab



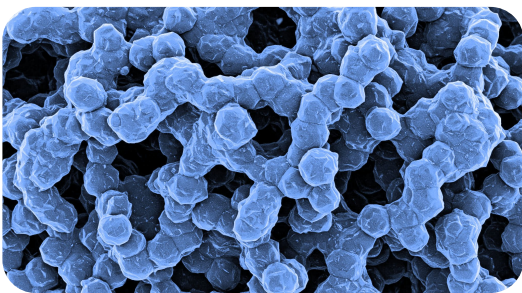
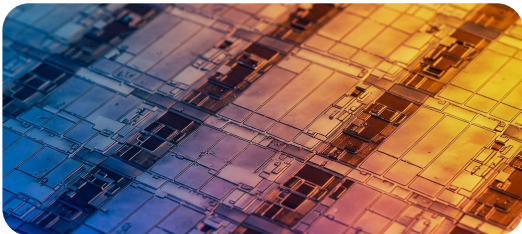
**Javier
García-Lasheras**

SVP Deep Tech,
Sngular

El gran porqué

La urgencia y el desafío del
descubrimiento de materiales





La evolución de la humanidad contada en materiales

- Edad de Piedra
- Edad de los Metales
- Era del Silicio
- Era de los Polímeros

Desafíos actuales

- Crisis climática
- Energías limpias
- Recursos escasos
- Enfermedades complejas

¿El próximo gran material? Aún no lo conocemos...

Impulsamos la transición energética

El objetivo de **Repsol Techlab** es **producir hidrógeno verde** de forma masiva y económica.

La clave

Transformar agua de mar en energía limpia a través de nuevos catalizadores eficientes, duraderos y asequibles.





La forma tradicional de descubrir
«materiales milagrosos» es
increíblemente lenta y costosa

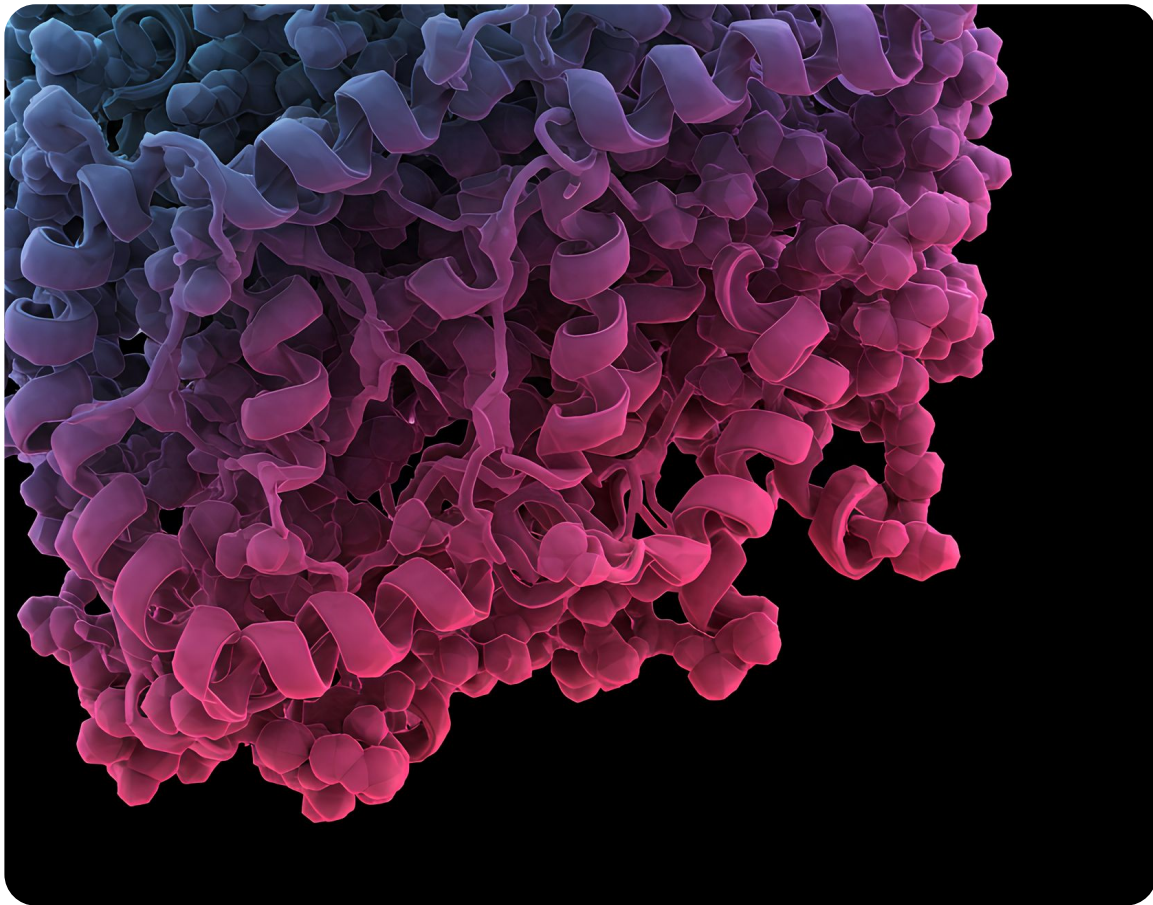
$10^{10} - 10^{60}$

posibles combinaciones estables de elementos

¿Cómo podemos navegar este océano de
posibilidades para encontrar o, mejor aún, diseñar los
materiales que necesitamos con urgencia?

GenAI

El cambio de reglas de juego





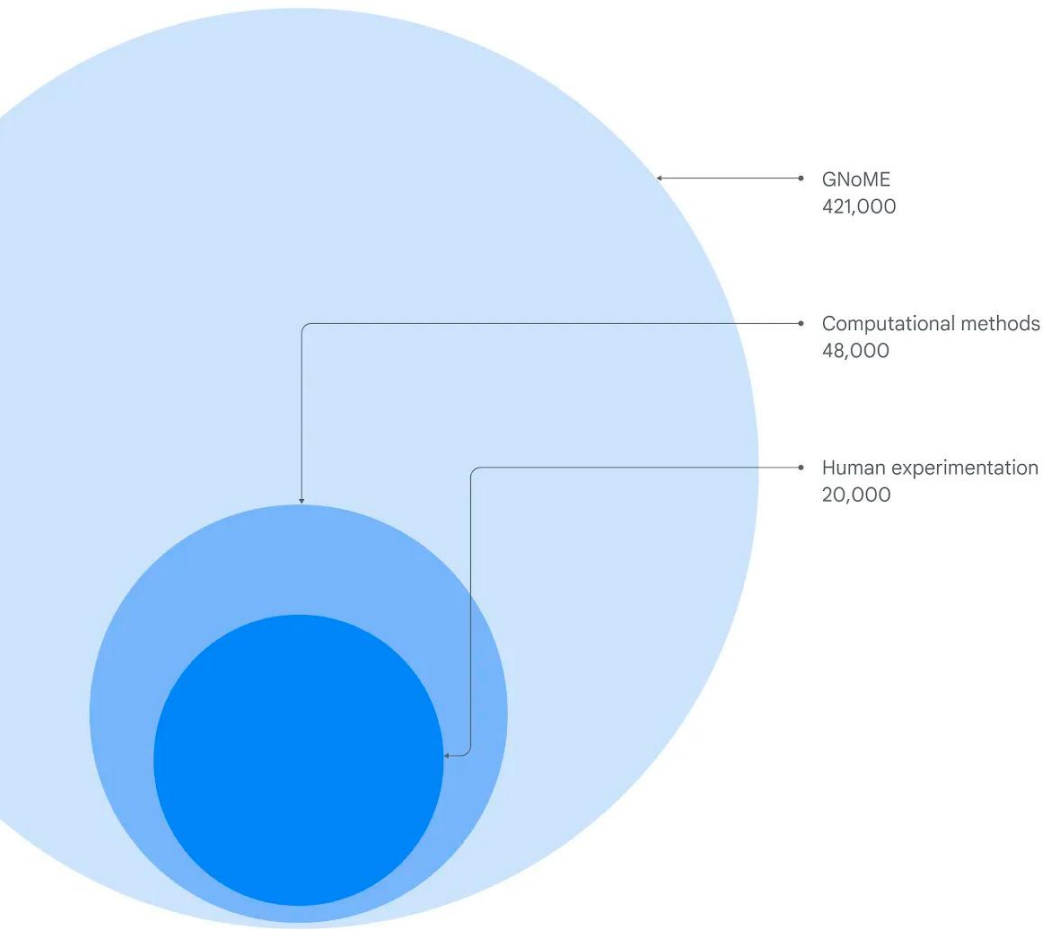
AlphaFold

Un antes y un después en la biología

Durante décadas, predecir el plegamiento de proteínas fue un reto monumental.

AlphaFold lo resolvió con IA avanzada y precisión extraordinaria. Este hito transformó el diseño de fármacos y la comprensión de enfermedades.

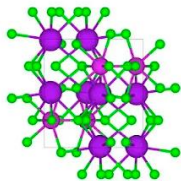
Hoy, esa misma revolución está comenzando en el mundo de los materiales.



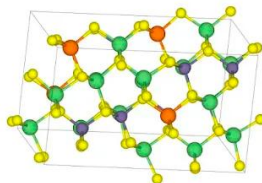
Deepmind GNoME

Un punto de inflexión en la ciencia de materiales

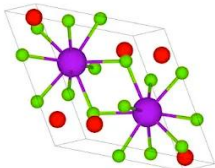
Los materiales estables conocidos pasaron de ~48.000 a +421.000 gracias a la IA.



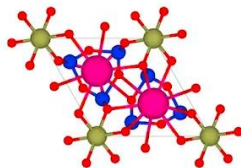
K_2BiCl_5



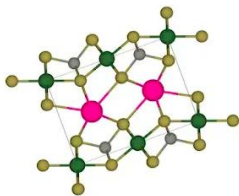
$\text{Li}_4\text{MgGe}_2\text{S}_7$



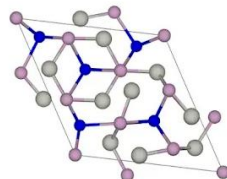
KV_3SE_3



$\text{Rb}_2\text{HfSi}_3\text{O}_9$



Mo_5GeB_2



$\text{Tm}_5\text{Pd}_9\text{P}_7$

Deepmind GNoME

Un punto de inflexión en la ciencia de materiales

- ~52.000 nuevos compuestos tipo grafeno, frente a solo ~1.000 conocidos. Un gran impulso a la electrónica y superconductividad.
- 528 conductores de ion-litio, 25 veces más opciones para baterías avanzadas.

¿Cómo hace esto la IA?



Aprende la interacción atómica

Captura las reglas que rigen la estructura y comportamiento de los materiales.



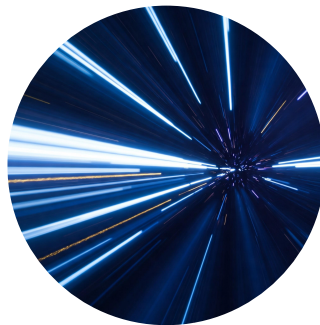
Se entrena con datos masivos

Utiliza simulaciones de mecánica cuántica (proceso lento) y datos experimentales reales.



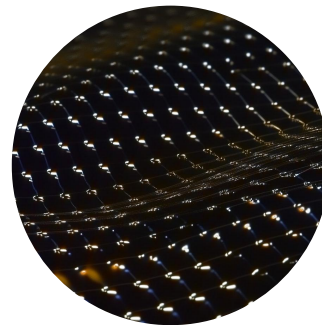
Construye un modelo interno

Una representación abstracta capaz de razonar sobre elementos del mundo real.



Predice con gran velocidad

Sustituye meses de cómputo por minutos, analizando multitud de materiales teóricos.

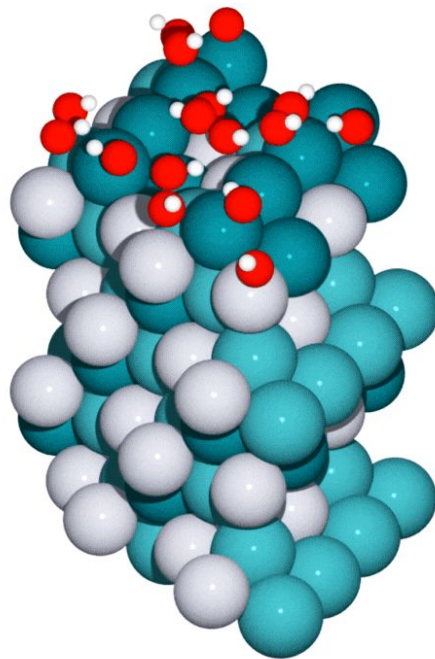


Propone nuevas opciones

Combinaciones de elementos y estructuras no contempladas y con las propiedades buscadas.

De semanas a minutos: simulación molecular acelerada por IA

- **Simulación Real (Proyecto Repsol-Singular):** Iones OH (clave para H_2) sobre material de DeepMind a alta temperatura.
- **Método Tradicional:** Semanas en clúster de supercomputación.
- **Con IA (MLIP) + Google Colab Enterprise (GPU):** < 1 Minuto, 0.01-0.02€
- **Impacto:** Validación ultrarrápida, refinamiento ágil de candidatos.





Un ejemplo

«Necesito un material que sea transparente, conductor de la electricidad, flexible y hecho de elementos que sean abundantes en la Tierra»





La infraestructura lo hace posible

Entrenar modelos de IA avanzados y ejecutar millones de inferencias requiere una enorme capacidad computacional.

Plataformas como **Google Cloud** son la base:

- Acceso bajo demanda a **CPU, GPU y TPU** de última generación
- **Escalabilidad** para proyectos científicos y empresas innovadoras
- **Democratización del cómputo** antes reservado a superordenadores nacionales

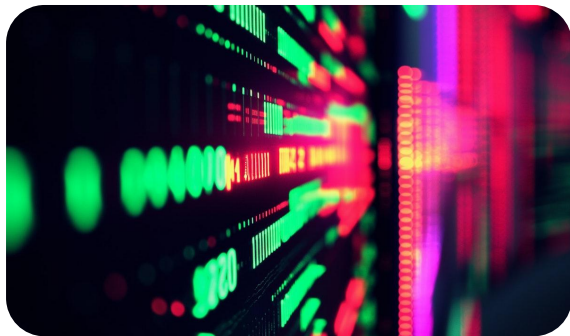
Experto humano + robótica

Un nuevo flujo de trabajo



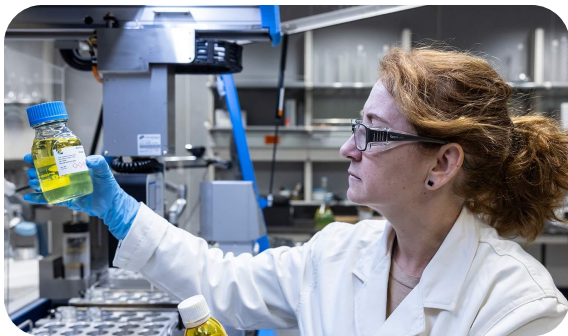
Self-Driving Labs: la triple alianza

Surge un nuevo círculo virtuoso de predicción, experimentación y aprendizaje continuo, para descubrir materiales de forma más inteligente y ágil.



1. Inteligencia Artificial

Explora, genera y evalúa millones de posibilidades a una velocidad extrema.



2. Experto humano

Define el problema, interpreta resultados, aplica criterio técnico y estratégico.



3. Automatización robótica

Ejecuta tareas de laboratorio repetitivas, rápidas y precisas, liberando tiempo creativo.



Validando el nuevo paradigma

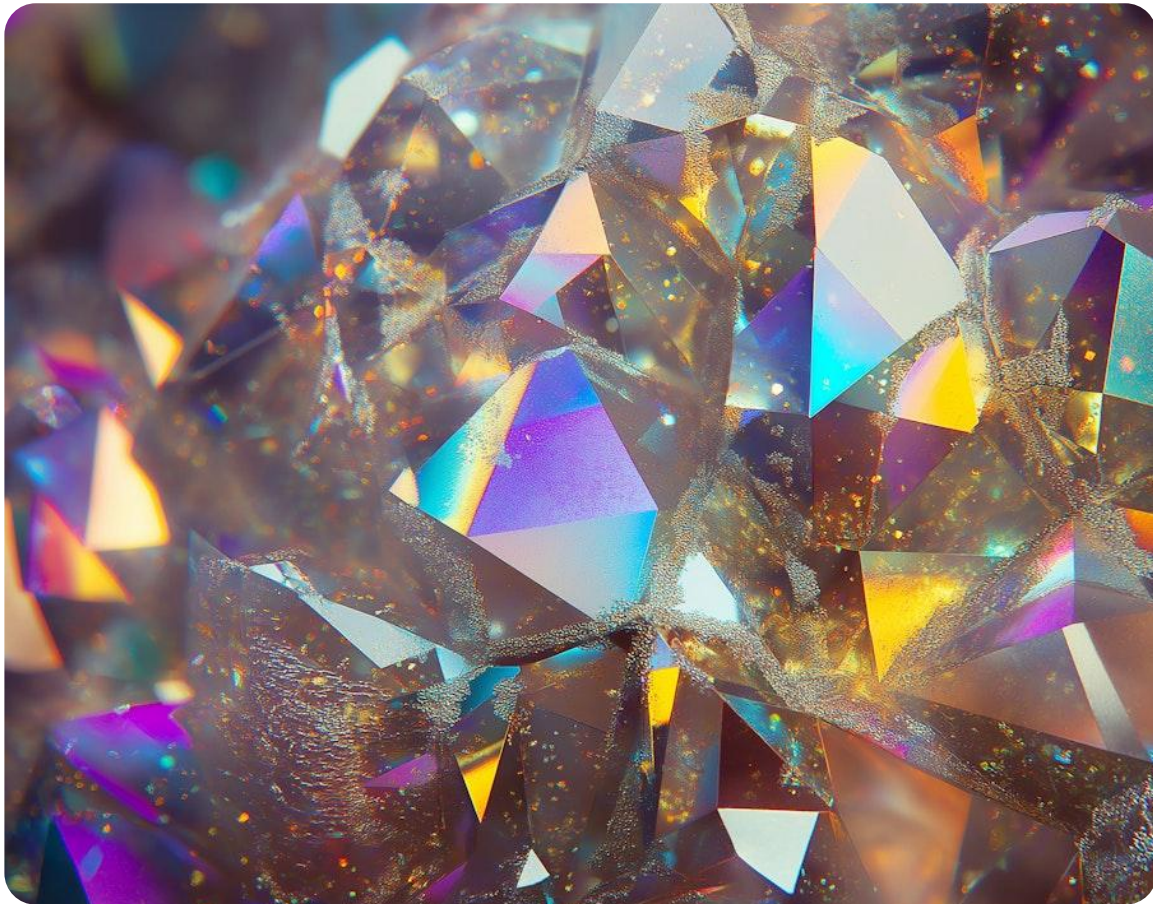
En el [Techlab de Repsol](#), con el apoyo de [Sngular](#) y la tecnología de [Google Cloud](#), hemos realizado un proyecto clave.

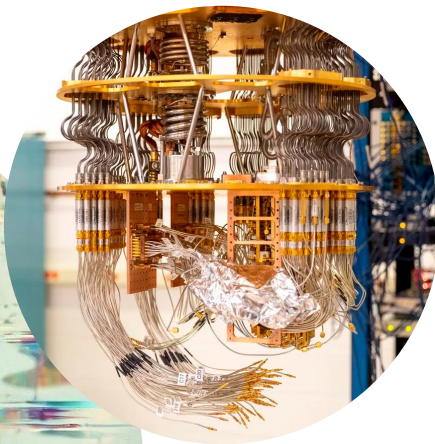
Hemos demostrado que es posible integrar la triple alianza que hemos mencionado antes.

El resultado, [ciclos de I+D drásticamente más cortos y un camino más rápido](#) hacia materiales revolucionarios.

Impacto, visión y el camino a seguir

Sin ciencia ficción.
Sólo ciencia... y tecnología





De la visión a la realidad

El descubrimiento de materiales impulsado por IA y orquestado en la nube ya es operativa hoy.

El rol de Singular

- Integrar **IA generativa**, **computación cuántica** y **automatización**
- **Optimizar cargas de trabajo** en Google Cloud
- Convertir tecnologías complejas en **soluciones de alto impacto**



Abriendo puertas invisibles

La combinación entre tecnología y conocimiento descubre patrones ocultos y materiales inesperados. Menos años de desarrollo, más impacto real.

De años a días

Hacemos la transición energética más rápida, más barata y más accesible globalmente

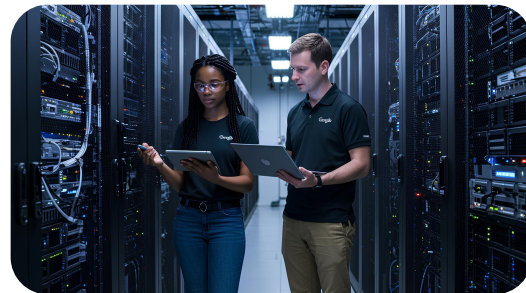
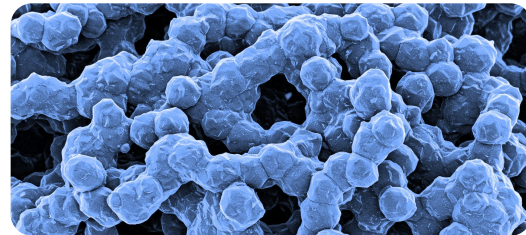
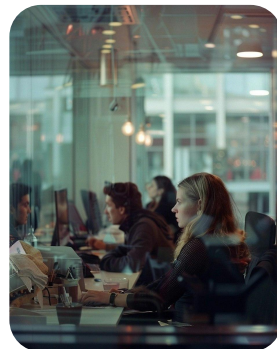
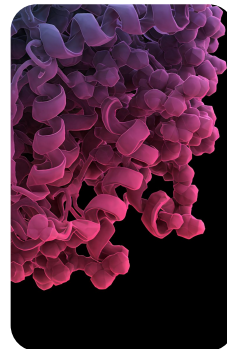
Y esto es solo el comienzo: captura de carbono, desalinización agua, tratamientos médicos personalizados, agricultura sostenible, nuevos tejidos...

La clave está en la colaboración y los ecosistemas

Ninguna entidad puede avanzar totalmente sola.

El futuro se construye con sinergias reales entre:

- La **industria** que conoce el problema (Repsol Techlab)
- La **integración tecnológica** que lo hace posible (Sngular)
- La **infraestructura** que lo habilita (Google)





En definitiva...

La Inteligencia Artificial Generativa no es solo una nueva herramienta. Es una nueva forma de hacer ciencia. Una nueva forma de inventar. Una nueva forma de generar valor.

Ya no se trata solo de tecnología. Se trata de una nueva manera de transformar el mundo y todos sus sectores.

Estamos entrando en una era donde imaginar, descubrir e innovar suceden al mismo tiempo

Thank you

