

# Coloquio Sinergias

## Sesión 2. Estructura Electrónica e Inteligencia Artificial Aplicada a Problemas Actuales de Tecnología Química en México

**Dra. Elena Álvarez-Buylla Roces**

Directora general del Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías

Ciudad de México, 11 de abril de 2024.

Buena tarde. Vine con mucho entusiasmo para aprender cosas nuevas. He estado leyendo los avances de este y de otros proyectos que respondieron a esta ambiciosa convocatoria que llamamos sinergias para lograr esta articulación tan valiosa, tan potente del más alto nivel nacional e internacional de nuestro país, para avanzar la frontera del conocimiento.

La ciencia básica que queremos promover, y por ello estos proyectos que demuestran que, cuando se une fuerza, se unen capacidades, no es la ciencia que revisa, que repite, sino la que se arriesga a lo realmente

desconocido, novedoso, ya sea metodológicamente en términos de modelación, en términos de paradigmas conceptuales. Justamente este tipo de esfuerzos concertados de muchas capacidades de personalidades de mucha experiencia y de instituciones que se arriesgan a avanzar realmente esta frontera del conocimiento.

Por eso es por lo que este coloquio fue ideado para compartir con el pueblo de México lo que se está haciendo en esta ambiciosa iniciativa. Pretenden demostrar que cuando la ciencia, el avance de la ciencia en el país se apoya como debe ser a largo plazo, con recursos suficientes.

El apoyo a la ciencia tiene que ser de largo aliento, ambicioso y convincente en términos de que como país somos capaces de generar nuevos conocimientos, de

hacer ciencia en términos estrictos y de fincar el desarrollo tecnológico, el nuevo conocimiento en ciencia honesta que se guía por estos principios del conocimiento novedoso, para poder aportar en el concierto de las nuevas tecnologías que además sean pertinentes y prioritarias a nuestro país de manera soberana.

Al ver los reportes han avanzado, han hecho contribuciones y se avizoran algunas muy importantes. Tenemos la suerte de tener la primera Ley General del país, en materia de Humanidades, Ciencias, Tecnologías e Innovación en donde queda claro que el Estado no se puede desentender del apoyo a la ciencia, como ocurrió en 2017 y 2018 donde no se destinaron apoyos para hacer ciencia básica.

No hubo un solo peso para ciencia básica pensando que el país estaba en condiciones de restricción de recursos, no teníamos posibilidad de apoyar los experimentos, aunque también para hacer teorías se necesitan recursos, pero no es que no hubiera dinero, sino había un desprecio por el trabajo científico, porque se habían transferido más de 50,000 mdp a instancias privadas, sin que esto implicara un mayor aporte a la innovación internacional del país, por el contrario, hubo una disminución.

En esta sesión se hablará de la estructura electrónica, inteligencia artificial que está tan de moda, pero a veces no sabemos cómo se aterriza y se expondrá cómo se aplica a problemas actuales de tecnología química en México. Porque es una falacia que haya un divorcio entre

la ciencia aplicada, el desarrollo tecnológico y la ciencia básica.

Toda aplicación robusta, toda tecnología robusta y más aún, virtuosa que se aplica en favor del bienestar de la humanidad y no de guerras, de temas que no quisiéramos que fueran los temas de aplicación de la ciencia, se fundamenta y se finca en ciencia básica; ciencia de frontera honesta, de pensamiento original que se arriesga a avanzar y que no es nada más repetir porque podríamos nada más estar copiando, importando tecnologías, dependiendo y generando un gran pasivo formando a brillantes nuevas, nuevos investigadores que se van del país y tenemos muchos talentos mexicanos fuera de nuestro país.

Las y los jóvenes quisieran encontrar proyectos como estos y poder aportar en favor de la humanidad y del país en concreto. Este proyecto que encabeza y que coordina con otros líderes, el doctor José Luis Vázquez Mateos, nos invita a reflexionar sobre estas técnicas de Inteligencia artificial, el aprendizaje automático, las redes neuronales, el aprendizaje profundo, “deep learning”, que le llaman en inglés, en combinación con el cómputo de alto desempeño, en ámbitos que se están convirtiendo en partes fundamentales de un número creciente y muy amplio de aplicaciones, que van desde la predicción de los hábitos de los consumidores para fines corporativos, hasta el reconocimiento de voz e imágenes que pueden ser útiles en seguridad, la predicción del tráfico en tiempo real o el diseño de nuevos compuestos químicos, que es el tema de este proyecto, en particular.

Estos métodos que permiten identificar patrones en el conjunto de datos siempre dependen de la calidad y de los datos de los cuales se alimentan y de la inteligencia humana, es decir, todas estas herramientas de Inteligencia artificial no son autónomas de la inteligencia humana y de los datos que alimentan para el cómputo con algoritmos que pueden ser más o menos complejos.

En la actualidad, la combinación de las técnicas de inteligencia artificial con el poder predictivo de la mecánica cuántica ha conseguido abrir nuevas vías para resolver problemas fundamentales en las ciencias químicas.

Este proyecto tiene como objetivo combinar estas técnicas de inteligencia artificial con el cómputo de alto

desempeño y la mecánica cuántica para abordar problemas de interés nacional como la desulfuración del petróleo mexicano, es decir ¿cómo logramos hidrocarburos que tengan menores impactos contaminantes, teniendo una mínima cantidad de azufre?; la toxicología de los residuos de pesticidas, porque no quisiéramos tener pesticidas, ni herbicidas tóxicos, pero es importante entender la toxicología de estos residuos porque el mundo ha sido objeto de esta afectación en los ámbitos de la producción agrícola a gran escala.

También permite entender la formación de polimorfos de interés farmacéutico, es decir, de moléculas que eventualmente puedan utilizarse para tratar algunas enfermedades. La estructura y las propiedades de las sustancias amorfas para desarrollar dispositivos de

almacenamiento y de sistemas magnéticos para el diseño de sensores químicos, los ámbitos de aplicación de esta combinación de química cuántica, química teórica y algorítmica de Inteligencia artificial, con ellos se espera establecer protocolos que permitan predecir la estructura y propiedades de una amplia gama de sustancias como catalizadores, cristales moleculares, pesticidas, carbono, silicio amorfo y sistemas magnéticos, así como reportar hallazgos de este proyecto en al menos 18 artículos publicados en revistas internacionales indizadas.

Esta convocatoria, que debe de ampliarse al futuro y profundizarse, ha sido todo un éxito; el grupo que conforma este proyecto está integrado por 15 titulares investigadoras, investigadores que pertenecen a cinco instituciones de educación superior. Las expertas y

expertos en el desarrollo de la teoría de la densidad en cálculos de estructura electrónica, utilizando técnicas de cómputo de alto desempeño y expertos en Inteligencia artificial de manera que la sinergia inter y transdisciplinaria del grupo, ha garantizado ya el éxito que han tenido en producir resultados.

Este grupo va a contribuir a que podamos desde el Conahcyt generar una red de cómputo de alto rendimiento que estaban desperdigadas y que va a estar al servicio de las comunidades de HCTI y de otras necesidades de desarrollo tecnológico y generar modelos y simulaciones. Estos equipos de cómputo de alto rendimiento, ahora organizados en red por el Conahcyt, buscan explorar distintas explicaciones a los fenómenos naturales y sociales que envuelven a la humanidad y que rebasan los límites de conocimiento

actual en búsqueda de teorías disruptivas, tecnologías que brindan respuestas que nos ayuden a resolver los retos que estamos enfrentando como humanidad.

Un contexto fundamental para entender la ciencia de frontera que se hace desde México, a partir de la aprobación de la Ley General de HCTI, es que no deje sin apoyo a las comunidades para desarrollar su trabajo en favor de nuestro país, de nuestra soberanía y del bienestar de todas y de todos y que al ser conocimiento de frontera impacta, no solamente dentro de México, sino a nivel internacional.

Hemos sumado esfuerzos para poder apoyar, a pesar de la pandemia, de las guerras, de todo lo que puede impactar las finanzas de un país; hemos priorizado recursos para poder seguir desarrollando estos

proyectos y que realmente tengan la capacidad las comunidades de tener una incidencia reflexiva, crítica, rigurosa, honesta, novedosa, ética en el avance del conocimiento en nuestro país.

Esta convocatoria de ciencia frontera de 2019 pretendió ser un avance arriesgado, ambicioso para aportar recursos de largo aliento que los que generalmente se reciben por grupos individuales e implican a un número muy grande de investigadores, pero están articulados coordinados en propuestas. Estoy segura de que presenciaremos una presentación que nos entusiasmará.

De antemano, los felicito y agradezco por haberse arriesgado a plantear una sinergia de esta naturaleza y les dejo con el proyecto “Estructura Electrónica e

Inteligencia Artificial Aplicada a Problemas Actuales de  
Tecnología Química en México”.

Muchas gracias.