

REDES NEURONALES ARTIFICIALES APLICADAS A LA QUÍMICA.

ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS APPLIED TO CHEMISTRY.

Jessica Hernández Cortés, Gabriela Mendoza Sarmiento, José Antonio Guevara-García.

Laboratorio de Investigación en Bioinorgánica y Biotecnología (LIByB), Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología. Universidad Autónoma de Tlaxcala. Carr. A Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala. México.

*Email: jaguevarag@garzas.uatx.mx.

Recibido: 26-marzo-2025

Aceptado: 15-mayo-2025

RESUMEN

Una de las tendencias de la producción científica en los últimos años en las ciencias físico matemáticas y de las ingenierías es la Inteligencia Artificial Aplicada, y una orientación que comienza a ser predominante es el desarrollo de las técnicas relacionadas con las Redes Neuronales Artificiales (ANN, por sus siglas en inglés). Particularmente, se han utilizado en estudios químicos para el análisis de datos. Algunas áreas son la identificación de patrones, el modelado de relaciones entre la estructura y la actividad biológica, clasificación de clases de compuestos, identificación de dianas farmacológicas, y la predicción de propiedades fisicoquímicas. En general, el objetivo es crear modelos de relaciones entrada-salida complejas basados en el aprendizaje de ejemplos y, posterior a la etapa de entrenamiento, generar predicciones. En la actualidad, la evolución de las ciencias de la computación ha permitido el desarrollo de métodos computacionales utilizados para comprender y simular el comportamiento de sistemas complejos, mientras que la evolución de la teoría ANN ha resultado en un aumento en el número de aplicaciones exitosas. Las metodologías ANN han demostrado su poder y robustez en la creación de modelos útiles para ayudar a los químicos en proyectos de investigación en la academia y la industria.

Palabras Clave: computación, inteligencia artificial, redes neuronales, Química.

ABSTRACT

One of the trends in scientific production in recent years in the physical, mathematical, and engineering sciences is Applied Artificial Intelligence, and one direction that is beginning to predominate is the development of techniques related to Artificial Neural Networks (ANNs). They have been particularly used in chemical studies for data analysis. Some areas include pattern identification, modeling relationships between structure and biological activity, classification of compound classes, identification of pharmacological targets, and the prediction of physicochemical properties. In general, the objective is to create models of complex input-output relationships based on learning examples and, after the training stage, generate predictions. Currently, the evolution of computer science has enabled the development of computational methods used to understand and simulate the behavior of complex systems, while the evolution of ANN theory has

resulted in an increase in the number of successful applications. ANN methodologies have demonstrated their power and robustness in creating useful models to assist chemists in research projects in academia and industry.

Keywords: computing, artificial intelligence, neural networks, chemistry.

1. INTRODUCCIÓN

Como modelo computacional de inspiración biológica, las ANN imitan el procesamiento neurológico del cerebro humano. El cerebro humano promedio contiene alrededor de 100 mil millones de neuronas y cada neurona establece de 1000-10,000 conexiones con otras. Al igual que el cerebro, las ANN se componen de numerosas unidades de procesamiento, es decir, neuronas artificiales. Las conexiones entre todas las unidades varían en fuerza, que se define por coeficientes o pesos. Las ANN simulan el comportamiento de aprendizaje y generalización del cerebro humano a través del modelado de datos y el reconocimiento de patrones, por lo que pueden procesar problemas multidimensionales complejos (Walczak, 2018).

Una diferencia significativa entre un modelo ANN y un modelo estadístico es que la ANN puede generalizar la relación entre variables independientes y dependientes sin una función matemática específica. Por lo tanto, una ANN funciona bien para resolver problemas no lineales de sistemas multivariados y multirespuesta. Este tipo de problemas son comunes en el campo de la Química, por lo que la aplicación de las ANN en Química tiene como objetivo el análisis de relaciones cuantitativas acción-reacción, complejas y no-lineales, de lo que se derivan las hipótesis para abordar temáticas como, por ejemplo, estructura-actividad en desarrollo de fármacos, composición-propiedades en nuevos materiales, y absorbancia-contaminación en ciencias de la atmósfera (Krogh, 2008).

2. REFERENTES TEÓRICO-CONCEPTUALES

Las ANN son sistemas computacionales desarrollados en base a células individuales que realizan cálculos computacionales en forma similar a cómo funciona el cerebro humano (Figura 1). Las ANN pueden aprender patrones y también usar la información para brindar soluciones a problemas con características no lineales y alto nivel de complejidad. En una ANN típica, cada célula o nodo se organiza en la red siguiendo un orden particular.

La información se pasa desde el lado de entrada al lado de salida. Los nodos de una capa no están conectados a los de la misma capa, sino que solo están conectados a los nodos de la siguiente capa. Así, las entradas recibidas de la capa anterior y el peso correspondiente determinan la salida de un nodo en una capa. En la mayoría de los modelos de redes neuronales, la primera variable de entrada se recibe en la primera capa de entrada, y cada variable de entrada contiene todas las cantidades que pueden influir directa o indirectamente en la salida. De esta forma, la ANN se divide en tres partes principales: capa de entrada, capa(s) ocultas, capa de salida (Figura 2).

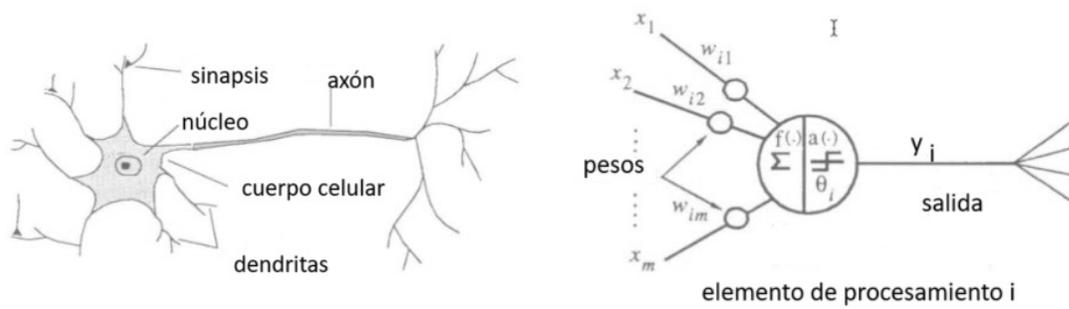


Figura 1. Izquierda: Representación esquemática de la estructura de la neurona biológica. Las dendritas ramificadas reciben la señal. El cuerpo celular procesa la señal y la transmite al siguiente objetivo a través del axón, la extensión alargada. Derecha: Representación de la neurona artificial. Las señales de entrada, x_i , con un peso w_{ij} , se procesan en el perceptrón. La señal de salida, y_i , se transmite a las neuronas conectadas en la siguiente capa. Fuente: elaboración propia

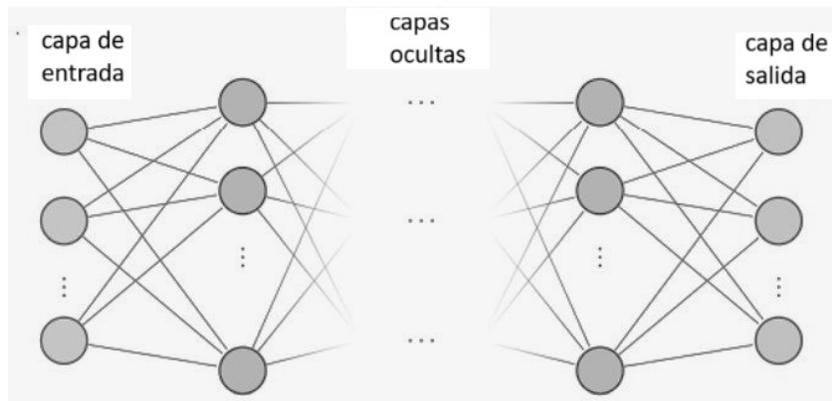


Figura 2. Partes de una Red Neuronal Artificial. Fuente: elaboración propia

Como resultado de esto, la capa de entrada es transparente porque proporciona toda la información necesaria que necesita la red. La capa de salida que consta de valores predichos por la red se denomina salida del modelo. La red utiliza un procedimiento de prueba y error para determinar las capas ocultas generales y el número de nodos que contiene cada capa oculta. Los nodos dentro de cada capa vecina de la red están completamente unidos por enlaces conectados. Se asigna un peso sináptico a cada enlace de conexión, que representa la fuerza relativa de la conexión de dos nodos en ambos extremos para predecir la relación entre la entrada y la salida. Estos tipos de ANN de tres capas de retroalimentación se han aplicado a una variedad de problemas, como la clasificación de patrones, la recuperación y el almacenamiento de datos, la resolución de problemas de optimización restringidos y la agrupación de patrones similares (Walczak, 2018).

3. UTILIDAD

Problemas que pueden ser atendidos con una ANN:

- Las variables de respuesta tienen diversas variables independientes relacionadas, lineales o no lineales.

- Las variables de respuesta se pueden convertir a funciones objetivo con valores discretos, valores continuos, o combinación de ambos.
- Se tienen disponibles ejemplos de entrenamiento, que pueden presentar desviaciones o valores perdidos.
- Los tiempos de entrenamiento largos son aceptables.
- Es necesaria una evaluación rápida o casi instantánea de la función objetivo aprendida.
- La capacidad humana para comprender la función objetivo aprendida por la máquina no es relevante ni necesaria.

4. DESARROLLO

4.1. Química Ambiental

Bilali et al. (2020), desarrollaron modelos ANN para predecir los parámetros de Sólido Disuelto Total (TDS en mg/L), Dureza Total (TH), sulfato (SO_4^{2-}) mg/L y cloruro (Cl^-) mg/L usando conductividad eléctrica (CE), pH y temperatura como variables de entrada en aguas contaminadas. Los resultados mostraron que los modelos ANN son altamente precisos para predecir los TDS, TH, sulfatos y cloruros con coeficientes de determinación de 0.962, 0.993, 0.986 y 0.957 para los parámetros TH, TDS, sulfatos y cloruros respectivamente. Además, los resultados durante la calibración revelaron una buena precisión para predecir estos parámetros. Por lo tanto, estos modelos pueden mejorar el monitoreo de la calidad del agua en áreas rurales para evaluar la idoneidad química del agua para beber con bajos costos y en poco tiempo.

La degradación troposférica de ozono de compuestos orgánicos es muy importante en la química ambiental. Fatemi (2006), demostró que la vida útil de los productos químicos orgánicos en la atmósfera se puede calcular a partir del conocimiento de la constante de velocidad de su reacción con radicales libres como OH^- y NO_3^- u O_3 . En su trabajo, calculó la constante de velocidad para la degradación troposférica de 137 compuestos orgánicos por reacción con ozono. El proceso de modelado de la degradación de una sustancia en la atmósfera se predice mediante las relaciones de actividad-estructura basándose en una variedad de descriptores teóricos, que se examinan y seleccionan mediante un procedimiento de selección de subconjuntos de variables de algoritmos genéticos. Estos descriptores que pueden usarse como entradas para redes neuronales artificiales generadas son; Brecha HOMO-LUMO, número de enlaces dobles, número de enlaces simples, carga neta máxima en el átomo de C, orden de enlace mínimo (> 0.1) del átomo de C y repulsión e-e mínima del átomo de H.

Otro gran problema en la contaminación de aguas naturales son las descargas procedentes de la industria minera (Pool, Kruse, & Vis, 2013), ya que son muy difíciles de tratar y de predecir por métodos tradicionales. Ajayi, Lopez y Ayo-Bali (2021), utilizaron datos de los años 2011-2019 para desarrollar un modelo de predicción para la descarga de una compañía minera y, posteriormente, utilizar el modelo para predecir el flujo y la química del agua en la Ciudad de Hewett Fork, Ohio, Estados Unidos. El modelo de red neuronal que utilizaron fue el método de grupo de manejo de datos (GMDH) y la red neuronal de regresión generalizada (GRNN). A pesar de la gran variación de los datos de descarga debido a parámetros como el factor de evapo-transpiración, el modelo GRNN que desarrollaron estos autores demostró ser muy adecuado para la predicción, con un valor r superior a 0.90, y su facilidad para predecir la descarga al especificar un conjunto de datos, después de entrenar y calibrar la red. El resultado del modelo de química del agua utilizando GMDH, muestra que las variables de entrada tienen una buena capacidad para predecir la concentración/carga química en la corriente del río. Este estudio demostró que el modelado de redes neuronales

artificiales (ANN) puede ayudar a modelar con éxito y predecir el flujo y la evolución química de los ríos en Ohio y otras partes del mundo.

En el ámbito contrario, es decir, la recuperación de metales valiosos a partir de los residuos urbanos, la llamada minería urbana, Pérez-Juárez et al. (2023) informaron sobre la aplicación de UV-Vis-ANN para la cuantificación de cobalto a partir de baterías de ion-Li, que es un área notable de beneficios económicos y ambientales. Estos autores utilizaron un modelo neuronal bien configurado, logrando la obtención de concentración con tasas de rendimiento más altas que los modelos densos como las redes convolucionales. Utilizando el algoritmo de propagación hacia atrás redujeron el error cuadrático medio (MSE) entre las salidas reales de una red neuronal feed-forward multicapa y las salidas preferidas. La red Back Propagation tiene una gran ventaja de simplicidad de implementación y cálculo en comparación con otras técnicas matemáticamente complicadas.

Una variable importante que se relaciona directamente con la calidad del agua es la Demanda Química de Oxígeno (DQO). Sin embargo, tradicionalmente la determinación de DQO requiere de un procesamiento en laboratorio analítico que consume tiempo y recursos. Afortunadamente, la aplicación de ANN en la determinación de DQO empieza tener un desarrollo importante (Käser et al., 2023). Saleh y Kayi (2021), desarrollaron una ANN, mediante el uso del algoritmo de propagación inversa estándar, para predecir el valor de DQO en aguas residuales antes y después de su tratamiento. En esta aproximación, se hizo uso de los índices de calidad de las aguas residuales sin tratar y tratadas, tales como iones cloruro, Cl^- , iones de nitrato, NO_3^- , iones de fosfato, PO_4^{3-} , iones de sulfato, SO_4^{2-} , amoníaco, NH_3 , para predecir el DQO. Después de entrenar adecuadamente la red neuronal, los mejores resultados de predicción antes del tratamiento de aguas residuales lograron una r de 0.98235, mientras que después del tratamiento de aguas residuales, la r fue de 0.99999.

Otro ámbito de la contaminación es la atmosférica. Hoy en día, con el aumento de la población mundial y el cambio climático, el crecimiento urbano se ha incrementado. Uno de los efectos más destructivos de la vida urbana es el aumento de los contaminantes del aire en esas áreas. Los modelos mecanicistas clásicos observan diferentes inconvenientes, y todos ellos implican el conocimiento de la composición química de la materia contaminante del aire y las reacciones en que intervienen. Pero la forma de trabajo de una ANN, elimina la necesidad de conocer los detalles de los fenómenos gobernantes para desarrollar los modelos de predicción. Miranbaygi, Moghimi y Ahmadi (2022), trabajaron en una red con una capa de entrada formada por variables meteorológicas, NO_2 , SO_2 , CO , O_3 , PM_{10} y $\text{PM}_{2.5}$, y tiempos de muestreo previos de cada variable de salida. Los modelos resultantes tuvieron la capacidad de predecir la concentración de contaminantes del aire en las 24 horas posteriores. Los resultados mostraron que las concentraciones de NO_2 , SO_2 , CO , O_3 , PM_{10} y $\text{PM}_{2.5}$ alcanzan una precisión (R^2) de 0.91, 0.95, 0.94, 0.97, 0.94 y 0.93, respectivamente.

4.2. Química Analítica

Mirshahvalad et al. (2020), desarrollaron un modelo de red neuronal para la predicción precisa del punto de inflamación de los compuestos químicos, utilizando la cantidad de átomos de hidrógeno y carbono, la temperatura crítica, el punto de ebullición normal, el factor acéntrico y la entalpía de formación como entradas del modelo. Usando una estrategia robusta para asignar de manera eficiente los parámetros de la red neuronal y evaluar el rendimiento auténtico de las redes neuronales, se lograron errores relativos absolutos promedio de menos del 1% y coeficientes de correlación de 0.9984. Estos resultados se encuentran entre los más precisos jamás informados hasta la fecha.

Yang et al. (2002) al emplearon una red neuronal de regresión general (GRNN) para predecir el número de cetano y la gravedad específica del diésel en función de su composición química. Korres et al. (2002) determinaron la lubricidad del combustible utilizando una red neuronal con función de base radial (RBF) que tenía como variables de entrada la conductividad, la gravedad específica, la viscosidad, el contenido de azufre y el punto de destilación del 90 %. Basu et al. (2003), predijeron el número de cetano de las muestras de diésel utilizando una ANN con un algoritmo de retropropagación y utilizando datos espectroscópicos como entrada. Wu et al. (2006), construyeron un modelo ANN para predecir el punto de obstrucción del filtro frío del biodiésel. Pasadakis et al. (2006), realizaron un perfil de predicción de la destilación y las propiedades en frío de los combustibles diésel utilizando espectroscopia de infrarrojo medio y redes neuronales.

de Oliveira et al. (2017), utilizaron ANN para predecir, no simultáneamente, el punto de inflamación, el índice de cetano y el contenido de azufre (S1800) de mezclas diésel (7 % v/v de biodiésel) utilizando curvas de destilación (ASTM D86), gravedad específica a 20 °C (ASTM D405), índice de cetano (ASTM D4737), punto de inflamación (ASTM D93) y contenido de azufre (ASTM D4294). Los bajos valores de error obtenidos en comparación con otros modelos basados en quimiometría descritos en la literatura y los altos coeficientes de correlación entre los valores de referencia y predichos mostraron que las ANN son muy eficientes para determinar el punto de inflamación, el índice de cetano/número de cetano y el contenido de azufre (S1800). El modelo construido utilizó muestras de diesel de diferentes composiciones (50, 500 y 1800 mg kg⁻¹), revelando así el potencial de predicción. Además, el método propuesto tiene ventajas como el bajo costo y la fácil implementación, ya que aplica los resultados de la prueba de rutina para evaluar el control de calidad del diésel.

Rezende-de-Souza et al. (2022), desarrollaron un método analítico alternativo, rápido, fácil de realizar y amigable con el medio ambiente para la determinación de la frescura en el pescado, basado en Nitrógeno Básico Volátil Total (TVB-N) y datos colorimétricos CIELab y RGB asociados a la quimiometría y la Técnica de Redes Neuronales Artificiales (RNA). A través de la evaluación de las figuras de mérito, fue posible verificar resultados promisorios para el uso de la alternativa desarrollada en futuras predicciones de frescura en pescado, demostrando su idoneidad para un control de calidad más robusto. En vista de lo anterior, el modelado de datos colorimétricos por modelos ANN está en línea con los requerimientos de la industria alimentaria 4.0, ya que es un método rápido y porque es una alternativa sostenible no solo ambientalmente, sino también económicamente, ya que incentiva la aplicación de herramientas verdes y de bajo costo.

En el caso del vino, Kumar et al. (2020), desarrollaron redes neuronales, dentro del enfoque de aprendizaje profundo, para evaluar su rendimiento sobre el conjunto de datos de vino, provenientes de Portugal. El conjunto de datos que constó de muestras de vino blanco y tinto. Estos autores entrenaron diferentes modelos de redes neuronales, con distintas configuraciones de capas ocultas y activaciones, para determinar componentes no deseados en un vino, por ejemplo, acidez.

Otra industria de base sensorial es la del té. Un ejemplo de la aplicación de las ANN en este caso es el de Cimpoiú et al. (2011), quienes utilizaron un perceptrón multicapa con el algoritmo de retropropagación para modelar la actividad antioxidante de algunas clases de té, como el té negro, el negro expreso y el verde. Los autores obtuvieron una correlación del 99,9% entre la actividad antioxidante experimental y prevista. También se realizó una clasificación de muestras utilizando una técnica ANN con una capa de base radial seguida de una capa competitiva con una coincidencia perfecta entre las clases real y predicha.

Finalmente, con respecto a la Química Analítica mencionamos la industria de los quesos. La producción de queso ocupa una parte pequeña pero creciente de la industria láctea actual. La producción industrial de queso crema implica la programación compleja de varios fermentadores por lotes y varias unidades posteriores. Sin embargo, la variación significativa del tiempo final de los diferentes lotes de fermentación hace que la programación posterior sea un desafío y, por lo tanto, disminuye el rendimiento del proceso. Li et al. (2021), abordaron este desafío mediante el uso de una red neuronal de memoria a largo y corto plazo (LSTM), en combinación con un modelo mecánico describiendo los cambios en las concentraciones de biomasa, lactosa y ácido láctico. El enfoque de modelado mecánico/de red LSTM demostró una diferencia de tiempo final de 3 min sobre tiempos de lote de 6 a 7 h en comparación con el experimento de laboratorio, con una precisión general (R^2) de más de 0.99.

4.3. Bioquímica

Cancilla, Torrecilla y Matute (2014), analizan varias de las casi innumerables aplicaciones en las que se están explotando las redes neuronales artificiales en el campo bioquímico. En bioquímica, se deben tratar numerosos procesos no lineales, y, por lo tanto, las ANN pueden verse como excelentes candidatas para obtener algoritmos matemáticos correctos de procedimientos bioquímicos que son difíciles de estudiar a través de métodos estadísticos clásicos. Un tema de primordial importancia es el estudio del cáncer, y es también donde la aplicación de las metodologías ANN más se desarrollan, sobre todo en el diagnóstico correcto y temprano (Wu et al., 2011) y el pronóstico (Saritas, Ozkan & Sert, 2010). El establecimiento de tratamientos adecuados para enfermedades (Andriulli et al., 2003; Wells & Niederer, 1998), y el análisis de la tasa de supervivencia en varios dominios médicos como la oncología o la medicina cardiovascular (Lisboa, 2002). También se han hecho desarrollos en enfermedades que tienen un gran impacto mundial, como la diabetes (Karan et al., 2012), y la malaria (Webster et al., 2009).

Un campo importante en el que se están explotando las ANN es la biotecnología y, en particular, los procesos de fermentación de microorganismos. Existen numerosas aplicaciones en las que las ANN se utilizan principalmente para optimizar este tipo de procesos con el fin de maximizar la producción y buscar el método más rentable para producir un determinado compuesto (Kana et al., 2012; Zafar et al., 2012). Las ANN se están aplicando para determinar las condiciones de los medios (concentración de sustratos, temperatura, pH, etc.) donde crecen los microorganismos, de forma que se optimice la cantidad de biomasa obtenida y/o el rendimiento de las moléculas deseadas sintetizadas durante la fermentación (Desai et al., 2008; Giordano et al., 2010; Silva et al., 2012). Se prevé que las ANN, bajo un adecuado entrenamiento, permitirán predecir si determinados procesos de fermentación serán rentables o no a mayor escala de producción. Además, se determinará una estimación precisa de los mejores medios de producción posibles.

Mención aparte del desarrollo en la Bioquímica, se considera el diseño racional de medicamentos. Vale la pena mencionar los esfuerzos en un área en particular. Las enfermedades desatendidas son un grupo de enfermedades parasitarias tropicales que afectan principalmente a los países pobres de África, Asia y América del Sur (Scotti et al., 2015), en donde la investigación de redes neuronales, estudia nuevos fármacos contra la enfermedad de Chagas, la enfermedad del sueño, la malaria, la tuberculosis y la leishmaniasis. Estas enfermedades tropicales desatendidas continúan creando altos niveles de morbilidad y mortalidad en una fracción considerable de la población mundial, y a pesar de ello, los modelos comerciales de desarrollo farmacéutico comercial no los consideran prioritarios. Sin embargo, los métodos computacionales están comenzando a hacer avances significativos en el descubrimiento de medicamentos para enfermedades tropicales desatendidas debido a la creciente disponibilidad de grandes bases de datos que se pueden usar para entrenar

modelos de aprendizaje automático, el aumento de la precisión de estos métodos, la menor barrera de entrada para los investigadores y la disponibilidad generalizada de información pública (Winkler, 2021).

4.4. Química Teórica y Computacional

Uno de los enfoques más exitosos para la predicción de propiedades químicas a partir de información estructural molecular es el modelado cuantitativo de relaciones estructura-actividad/propiedades (QSAR/QSPR). En estos estudios, se define una correlación entre la estructura química y la propiedad elegida. Así, por ejemplo, Pompe y Veber (2001), predicen la degradación troposférica de 116 productos químicos heterogéneos con ozono utilizando el enfoque QSAR. Sin embargo, los métodos estadísticos se encuentran limitados para desarrollar un modelo QSAR apropiado cuando existe un fenómeno no lineal dentro de los datos investigados; por lo tanto, es necesario introducir técnicas de modelado no lineal, como las ANN, para construir un modelo QSAR preciso y confiable. Por lo tanto, ANN se ha convertido en una importante herramienta de modelado para construir modelos QSAR y QSPR (Marengo et al., 2004; Yan et al., 2000; Fatemi & Goudarzi, 2005).

Otro aspecto que cubre la Química teórica es el modelaje de procesos y estructuras, con el objetivo de desarrollar nuevos materiales de alta tecnología. Para este fin es necesario contar con conjuntos de datos de cálculos de estructuras electrónicas de alta calidad. Kulichenko et al. (2021), utilizaron la estrategia de aprendizaje activo, en el que se recopilan automáticamente nuevos datos para configuraciones atómicas con los niveles más altos de teoría cuántica posibles. Estos autores, se enfocaron en el desarrollo y la aplicación de potenciales interatómicos basados en redes neuronales, como modelos de energía sustitutos de métodos ab initio, reemplazando los campos de fuerza clásicos convencionales y permitiendo simulaciones de dinámica molecular a gran escala.

Otro tipo de aplicación es la predicción de actividad biológica a partir del análisis de la superficie de potencial electrostático de una molécula. En este aspecto, las ANN funcionan de manera semejante al análisis topográfico de terrenos (Bajorath, 2012). Iqbal, Vogt, y Bajorath (2020), trabajaron con representaciones gráficas que integran similitudes compuestas y relaciones de actividad. Al representar gráficamente compuestos activos en un espacio químico biológicamente relevante, estos autores pudieron determinar relaciones estructura-actividad (SAR) e identificar compuestos clave y activos.

Actualmente, el campo de la química computacional se encuentra en un boom de desarrollo de la representación de superficies de energía potencial (PES) utilizando ANN, debido al poder de predicción y la economía en tiempo de máquina que se logran con estos métodos. Algunos de estos trabajos han tenido éxito al obtener información sobre interacciones complejas en sistemas moleculares estables y metaestables (Noé et al., 2020). Al mismo tiempo, es posible extraer una cantidad considerable de información de los PES, incluidas las fuerzas atómicas que impulsan la dinámica de los sistemas moleculares, las reacciones y las transiciones estructurales, y las vibraciones atómicas (Behler y Csányi, 2021). En un trabajo reciente, Vazquez-Salazar et al. (2021), encontraron que la exploración del espacio químico puede mejorarse agregando información adecuada del espacio configuracional representado por el PES.

5. CONCLUSIONES

Las Ciencias Químicas son especialmente aptas para abordar problemas, utilizando las Redes Neuronales Artificiales, de los cuales, la mayor parte del tiempo, no existen soluciones exactas, por

sus intrincados comportamientos no-lineales, o se desconoce los principios fundamentales, pero de los cuales se tiene una gran cantidad de información observacional. De esta manera, es previsible que el desarrollo futuro de la Química, y de los Químicos, esté ligado con el desarrollo de nuevos métodos ANN más versátiles y poderosos, a fin de abordar campos en los cuales todavía no se han aplicado estos métodos, o bien, hasta ahora no se cuenta con recursos. Estos puntos constituyen áreas de oportunidad para proyectos de investigación en el escenario nacional, donde abundan los problemas graves y prioritarios, como la contaminación o la producción de alimentos suficientes.

CONFLICTO DE INTERESES

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.

REFERENCIAS

- Ajayi, T., Lopez, D. L., & Ayo-Bali, A. E. (2021). Using artificial neural network to model water discharge and chemistry in a river impacted by acid mine drainage. *Am. J. Water Resour*, 9, 63-79.
- Andriulli, A., Grossi, E., Buscema, M. A. S. S. I. M. O., Festa, V., Intraligi, N. M., Dominici, P., ... & NUD LOOK Study Group. (2003). Contribution of artificial neural networks to the classification and treatment of patients with uninvestigated dyspepsia. *Digestive and liver disease*, 35(4), 222-231.
- Bajorath, J. (2012). Modeling of activity landscapes for drug discovery. *Expert opinion on drug discovery*, 7(6), 463-473.
- Basu, B., Kapur, G. S., Sarpal, A. S., & Meusinger, R. (2003). A neural network approach to the prediction of cetane number of diesel fuels using nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy. *Energy & fuels*, 17(6), 1570-1575.
- Behler, J., & Csányi, G. (2021). Machine learning potentials for extended systems: a perspective. *The European Physical Journal B*, 94, 1-11.
- Bilali, A. E., Taleb, A., Mazigh, N., & Mokhliss, M. (2020). Prediction of chemical water quality used for drinking purposes based on artificial neural networks. *Moroccan Journal of Chemistry*, 8(3), 8-3.
- Cancilla, J., S Torrecilla, J., & Matute, G. (2014). Current applications of artificial neural networks in biochemistry with emphasis on cancer research. *Current Biochemical Engineering*, 1(1), 25-34.
- Cimpoiú, C., Cristea, V. M., Hosu, A., Sandru, M., & Seserman, L. (2011). Antioxidant activity prediction and classification of some teas using artificial neural networks. *Food chemistry*, 127(3), 1323-1328.
- de Oliveira, F. M., de Carvalho, L. S., Teixeira, L. S., Fontes, C. H., Lima, K. M., Câmara, A. B., ... & Sales, R. V. (2017). Predicting cetane index, flash point, and content sulfur of diesel–biodiesel blend using an artificial neural network model. *Energy & Fuels*, 31(4), 3913-3920.
- Desai, K. M., Survase, S. A., Saudagar, P. S., Lele, S. S., & Singhal, R. S. (2008). Comparison of artificial neural network (ANN) and response surface methodology (RSM) in fermentation media optimization: case study of fermentative production of scleroglucan. *Biochemical Engineering Journal*, 41(3), 266-273.
- Fatemi, M. H. (2006). Prediction of ozone tropospheric degradation rate constant of organic compounds by using artificial neural networks. *Analytica Chimica Acta*, 556(2), 355-363.
- Fatemi, M. H., & Goudarzi, N. (2005). Quantitative structure property relationship study of the electrophoretic mobilities of some benzoic acids derivatives in different carrier electrolyte compositions. *Electrophoresis*, 26(15), 2968-2973.
- Giordano, P. C., Martínez, H. D., Iglesias, A. A., Beccaria, A. J., & Goicoechea, H. C. (2010). Application of response surface methodology and artificial neural networks for optimization of recombinant *Oryza sativa*

non-symbiotic hemoglobin 1 production by Escherichia coli in medium containing byproduct glycerol. *Bioresource technology*, 101(19), 7537-7544.

Iqbal, J., Vogt, M., & Bajorath, J. (2020). Activity landscape image analysis using convolutional neural networks. *Journal of Cheminformatics*, 12(1), 1-15.

Kana, E. G., Oloke, J. K., Lateef, A., & Adesiyun, M. O. (2012). Modeling and optimization of biogas production on saw dust and other co-substrates using artificial neural network and genetic algorithm. *Renewable energy*, 46, 276-281.

Karan, O., Bayraktar, C., Gümüşkaya, H., & Karlık, B. (2012). Diagnosing diabetes using neural networks on small mobile devices. *Expert Systems with Applications*, 39(1), 54-60.

Käser, S., Vazquez-Salazar, L. I., Meuwly, M., & Töpfer, K. (2023). Neural network potentials for chemistry: concepts, applications and prospects. *Digital Discovery*, 2(1), 28-58.

Korres, D. M., Anastopoulos, G., Lois, E., Alexandridis, A., Sarimveis, H., & Bafas, G. (2002). A neural network approach to the prediction of diesel fuel lubricity. *Fuel*, 81(10), 1243-1250.

Krogh, A. (2008). What are artificial neural networks?. *Nature biotechnology*, 26(2), 195-197.

Kulichenko, M., Smith, J. S., Nebgen, B., Li, Y. W., Fedik, N., Boldyrev, A. I., ... & Tretiak, S. (2021). The rise of neural networks for materials and chemical dynamics. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(26), 6227-6243.

Kumar, S., Kraeva, Y., Kraleva, R., & Zymbler, M. (2020). A deep neural network approach to predict the wine taste preferences. In *Intelligent Computing in Engineering: Select Proceedings of RICE 2019* (pp. 1165-1173). Springer Singapore.

Li, B., Lin, Y., Yu, W., Wilson, D. I., & Young, B. R. (2021). Application of mechanistic modelling and machine learning for cream cheese fermentation pH prediction. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 96(1), 125-133.

Lisboa, P. J. (2002). A review of evidence of health benefit from artificial neural networks in medical intervention. *Neural networks*, 15(1), 11-39.

Marengo, E., Gianotti, V., Angioi, S., & Gennaro, M. C. (2004). Optimization by experimental design and artificial neural networks of the ion-interaction reversed-phase liquid chromatographic separation of twenty cosmetic preservatives. *Journal of Chromatography A*, 1029(1-2), 57-65.

Miranbaygi, A., Moghimi, M., & Ahmadi, M. H. E. (2022). Prediction of chemical composition concentration in an urban area by Artificial Neural Networks. *Afinidad*, 79(597), 485-493.

Mirshahvalad, H. R., Ghasemiasl, R., Raufi, N., & Malekzadeh Dirin, M. (2020). A neural networks model for accurate prediction of the flash point of chemical compounds. *Iranian journal of chemistry and chemical engineering*, 39(4), 297-304.

Noé, F., Tkatchenko, A., Müller, K. R., & Clementi, C. (2020). Machine learning for molecular simulation. *Annual review of physical chemistry*, 71, 361-390.

Pasadakis, N., Sourligas, S., & Foteinopoulos, C. (2006). Prediction of the distillation profile and cold properties of diesel fuels using mid-IR spectroscopy and neural networks. *Fuel*, 85(7-8), 1131-1137.

Pérez-Juárez I.I., González-Contreras B.M., M.A. Munive Rojas M.A., Guevara-García J.A., Bonilla-Huerta E. (2023) Artificial Neural Network for the Quantification of Cobalt Recovered from Li-ion Batteries. *2nd International Conference on Sustainable Chemical and Environmental Engineering*. Limassol, Cyprus, Greece.

Pompe, M., & Veber, M. (2001). Prediction of rate constants for the reaction of O₃ with different organic compounds. *Atmospheric Environment*, 35(22), 3781-3788.

Pool, J. R., Kruse, N. A., & Vis, M. L. (2013). Assessment of mine drainage remediated streams using diatom assemblages and biofilm enzyme activities. *Hydrobiologia*, 709, 101-116.

Rezende-de-Souza, J. H., de Moraes-Neto, V. F., Cassol, G. Z., dos Santos Camelo, M. C., & Savay-da-Silva, L. K. (2022). Use of colorimetric data and artificial neural networks for the determination of freshness in fish. *Food Chemistry Advances*, 1, 100129.

- Saleh, B. A., & Kayi, H. (2021, March). Prediction of chemical oxygen demand from the chemical composition of wastewater by artificial neural networks. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1818, No. 1, p. 012035). IOP Publishing.
- Saritas, I., Ozkan, I. A., & Sert, I. U. (2010). Prognosis of prostate cancer by artificial neural networks. *Expert Systems with Applications*, 37(9), 6646-6650.
- Scotti, L., Ishiki, H., JB Mendonca Junior, F., S da Silva, M., & T Scotti, M. (2015). Artificial neural network methods applied to drug discovery for neglected diseases. *Combinatorial chemistry & high throughput screening*, 18(8), 819-829.
- Silva, R., Ferreira, S., Bonifacio, M. J., Dias, J. M. L., Queiroz, J. A., & Passarinha, L. A. (2012). Optimization of fermentation conditions for the production of human soluble catechol-O-methyltransferase by *Escherichia coli* using artificial neural network. *Journal of biotechnology*, 160(3-4), 161-168.
- Vazquez-Salazar, L. I., Boittier, E. D., Unke, O. T., & Meuwly, M. (2021). Impact of the characteristics of quantum chemical databases on machine learning prediction of tautomerization energies. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 17(8), 4769-4785.
- Walczak, S. (2018). Artificial neural networks. In *Encyclopedia of Information Science and Technology*, Fourth Edition (pp. 120-131). IGI Global Scientific Publishing.
- Webster, G. T., De Villiers, K. A., Egan, T. J., Deed, S., Tilley, L., Tobin, M. J., ... & Wood, B. R. (2009). Discriminating the intraerythrocytic lifecycle stages of the malaria parasite using synchrotron FT-IR microspectroscopy and an artificial neural network. *Analytical Chemistry*, 81(7), 2516-2524.
- Wells, D. M., & Niederer, J. (1998). A medical expert system approach using artificial neural networks for standardized treatment planning. *International Journal of Radiation Oncology* Biology* Physics*, 41(1), 173-182.
- Winkler, D. A. (2021). Use of artificial intelligence and machine learning for discovery of drugs for neglected tropical diseases. *Frontiers in Chemistry*, 9, 614073.
- Wu, C., Zhang, J., Li, W., Wang, Y., & Cao, H. (2006). Artificial neural network model to predict cold filter plugging point of blended diesel fuels. *Fuel processing technology*, 87(7), 585-590.
- Wu, Y., Wu, Y., Wang, J., Yan, Z., Qu, L., Xiang, B., & Zhang, Y. (2011). An optimal tumor marker group-coupled artificial neural network for diagnosis of lung cancer. *Expert Systems with Applications*, 38(9), 11329-11334.
- Yan, A., Jiao, G., Hu, Z., & Fan, B. T. (2000). Use of artificial neural networks to predict the gas chromatographic retention index data of alkylbenzenes on carbowax-20M. *Computers & Chemistry*, 24(2), 171-179.
- Yang, H., Ring, Z., Briker, Y., McLean, N., Friesen, W., & Fairbridge, C. (2002). Neural network prediction of cetane number and density of diesel fuel from its chemical composition determined by LC and GC-MS. *Fuel*, 81(1), 65-74.
- Zafar, M., Kumar, S., Kumar, S., & Dhiman, A. K. (2012). Optimization of polyhydroxybutyrate (PHB) production by *Azohydromonas lata* MTCC 2311 by using genetic algorithm based on artificial neural network and response surface methodology. *Biocatalysis and Agricultural Biotechnology*, 1(1), 70-79.