

Avance y Perspectiva

Revista de divulgación del CINVESTAV

La inteligencia artificial y sus aplicaciones

Karina Galache · Friday, May 15th, 2020

Categorías: [Zona Abierta](#), [Ingeniería y Computación](#)

La inteligencia artificial ayudó, en 2016, a recrear el experimento para obtener un condensado de Bose Einstein en sólo una hora. Esto fue realizado por vez primera en 2001 y condujo a, E. Cornell, W. Ketterle y C. Wieman a demostrar experimentalmente una predicción teórica hecha por Bose y Einstein al inicio de la mecánica cuántica, por lo que les fue conferido el premio Nobel de Física.

En el condensado se deben usar partículas con el atributo cuántico de poseer espín entero. Los isótopos de hidrógeno y los fotones tienen espín entero. Pero es más conveniente usar isótopos de Cesio que poseen un electrón de valencia y cuyo espín es un número semientero. Estos isótopos forman estados ligados que se comportan como una partícula con espín entero y E. Cornell y colaboradores desarrollaron el protocolo experimental para poder atraparlos en trampas de vacío con varios campos magnéticos que interactúan con los electrones de valencia. Para obtener el condensado, la temperatura se reduce hasta casi un nano-Kelvin, que es una milmillonésima de Kelvin en esta escala. La temperatura ambiente de 25 grados centígrados es 298 Kelvin.

Los condensados son muy sensibles a perturbaciones externas como pequeños campos electromagnéticos o el campo de gravedad terrestre. Debido a esto se pueden usar en prospección minera y en dispositivos de navegación. En estos últimos, el campo gravitatorio desajusta la temperatura mínima del condensado. Sin embargo, gracias a la ayuda de un programa (Bot) de inteligencia artificial (IA) se puede corregir automáticamente y así indicar con precisión qué ocurrió en la desintonización debido al campo. Esto significa que, como afirma N. S. Hush de la Universidad Nacional de Australia: “puedes llevar el dispositivo en tu coche y solo se recalibrará sin necesidad de llevar contigo a todos lados un físico”.

Parece ser que un Bot de inteligencia artificial podrá realizar muchos experimentos y obtener un óptimo arreglo experimental cuando se le indique desde una terminal de computadora. De esta manera, ellos demostraron que un Bot de IA podrá realizar muchos experimentos y lograr por sí mismo un mejor arreglo experimental en un brevísimo tiempo. La forma tradicional requiere meses de ensayo para encontrar el arreglo de láseres y lentes ópticas. Pero esto fue posible sólo ejecutando un Bot desde una terminal de computadora, el cual encontró la configuración experimental bajo ciertos parámetros deseables.

Ha llegado el momento de usar Bots de IA colaboradores que nos ayuden a resolver problemas en

investigación. Este fenómeno, consecuencia de la robotización debido a la revolución en el campo de la inteligencia artificial ya está ocurriendo en casi todas las áreas del conocimiento. En algunas ramas de las matemáticas también se considera válido incluir en determinados pasos intermedios de las demostraciones de teoremas, un programa de IA que realice cálculos simbólicos [1].

Así, por ejemplo, recientemente Chu et al. [2-3] emplearon IA para resolver ecuaciones diferenciales muy complejas en espacios multidimensionales. Por otro lado, es conocida la existencia de la computadora Watson de IBM que usa IA y se emplea en hospitales de Estados Unidos para asistir en los diagnósticos médicos de pacientes [4]. Este enfoque de investigación asistido por computadora ha mostrado ser una herramienta muy valiosa que complementa la visión experimental de un fenómeno físico. Por ejemplo, a M. Karplus le fue otorgado el Nobel de Química en 2013 [5] por su invención de nuevos métodos computacionales que combinan la mecánica cuántica y la física clásica, y que permiten comprender la evolución de las reacciones químicas. El año pasado se otorgó el premio Nobel de Física a investigadores que mejoraron la eficiencia tecnológica existente de láseres. Es previsible que mejoras continuas en los algoritmos de IA conduzcan a desarrollar tecnologías con impacto social tales como las de los galardonados. En este caso, las aplicaciones del desarrollo logrado por los laureados en física el 2018 [6] han sido inmediatas en usos médicos.

Con dicha tecnología, un tipo de cirugía ocular con la técnica convencional tiene un costo de un poco más de la mitad de un coche de los básicos. Sin embargo, usando la técnica del láser pulsado transescleral (el cual consiste en incrementar la potencia del láser en periodos pequeños) el costo bajó a tan solo una décima parte. Recientemente, el campo de la medicina de terapias de combinación de diferentes drogas para el tratamiento de cáncer y otras enfermedades complejas, es auxiliado por IA.

Debido al gran número y tipo de aberraciones genéticas que varía de paciente a paciente, el número posible de combinaciones potenciales de drogas crece exponencialmente, por lo que la IA en la actualidad ayuda a optimizar las terapias de combinación. Por ejemplo, una de las primeras aplicaciones de IA en la estrategia de selección de tratamiento para infecciones bacterianas condujo al desarrollo del sistema computarizado MYCIN [7]. Aun cuando nunca se usó, tenía el 69% de tasa de éxito al elegir farmacoterapias, lo que era mejor comparado con los profesionales expertos usando el mismo criterio de selección [8,9].

Otra aplicación importante de la IA se desarrolla en la ciencia de materiales. Tradicionalmente, se sintetizan compuestos con algunas características físicas deseables, tal como ser buen conductor de corriente eléctrica, o por el contrario, ser un buen aislante de la misma. Con posterioridad se prueban las propiedades del material resultante en el laboratorio y pasan por un proceso de prueba y error en el que progresivamente se mejoran. Incluso los experimentos fallidos sirven para alimentar y enseñarle a un método computacional de IA. Este es el caso del procedimiento que se ha desarrollado basado en funcionales de la densidad para predecir la estructura electrónica de materiales. Gracias a la IA estos métodos computacionales generan librerías de materiales hipotéticos que indican los que más convendría sintetizar guiados por sus propiedades predichas con ayuda de IA. De esta manera se han creado tres de las bases de datos más conocidas de nuevos materiales predichos.

La Iniciativa del Genoma de Materiales (IGM) [10,11] el cual se creó con un método que calcula la energía libre de mezclas de dos metales (aleaciones). Posteriormente, se complementó con un algoritmo de IA que determinó el estado fundamental de las nuevas aleaciones y que corresponde a

los más estables. Por otro lado, la base AFLOWLIB (Flujo Automático para descubrimiento de materiales) [12] se creó usando el sistema AFLOW que calcula propiedades físicas de estructuras cristalinas ya conocidas, y tiene la capacidad de predecir nuevas propiedades. Finalmente, la base de datos OQMD (Open Quantum Material Data base) [13] de materiales hipotéticos se concibió usando estructuras cristalinas conocidas en la naturaleza pero decorándolas con elementos de la Tabla Periódica, e incluye el importante grupo de Perovskitas que son estudiadas por sus propiedades superconductoras.

REFERENCIAS

- [1] Annals of Mathematics, <https://annals.math.princeton.edu/>
- [2] Neural Ordinary Differential Equations, <https://arxiv.org/abs/1806.07366>
- [3] J. Han et al, Solving high-dimensional partial differential equations using deep learning, PNAS 115, 8505, 2018.
- [4] IBM Watson Health
- [5] M. Karplus, <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2013/karplus/facts/>
- [6] A. Ashkin, G. Mourou, D. Strickland, <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2018/summary/>
- [7] <https://www.britannica.com/technology/MYCIN>
- [8] E.H. Shortliffe, B.A. Buchanan, A model of inexact reasoning in medicine, Math. Biosci. 23, 351, 1975.
- [9] I.F. Tsigelny, Artificial intelligence in drug combination therapy, Briefings in Bioinformatics, 20, 1434, 2019.
- [10] S. Curtarolo et al. Phys. Rev. Lett. 91, 135503, 2003.
- [11] S. Curtarolo et al. Comput. Mater. Sci. 58, 218, 2012
- [12] S. Curtarolo et al. Comput. Mater. Sci. 58, 227, 2012
- [13] S. Kirklin et al. Comput. Mater. Sci. 1, 15010, 2015

This entry was posted on Friday, May 15th, 2020 at 4:20 pm and is filed under [Zona Abierta, Ingeniería y Computación](#)

You can follow any responses to this entry through the [Comments \(RSS\)](#) feed. Both comments and pings are currently closed.