



Aplicación de la inteligencia artificial en la enseñanza de la química en educación superior y secundaria: una programación para medir el nivel de energía molecular

Application of artificial intelligence in the teaching of chemistry in higher and secondary education: programming to measure the level of molecular energy

Aplicação da inteligência artificial no ensino de química na educação superior e secundária: uma programação para medir o nível de energia molecular

Diego Alberto López-Altamirano ^I

diego.lopez@educación.gob.ec
<https://orcid.org/0000-0001-8977-7497>

Ivonne Cecilia Granja-López ^{III}

ivonne.granja@educacion.gob.ec
<https://orcid.org/0000-0001-6355-122X>

Isabel Cristina López-Villacis ^{II}

ic.lopez@uta.edu.ec
<https://orcid.org/0000-0003-4325-568X>

Augusto Germánico Rodríguez-Balarezo ^{IV}

g.rodriguez@istvicenteleon.edu.ec
<https://orcid.org/0009-0005-9217-4589>

Jhoanna Elizabeth Solano-Morales ^V

ing.jhoanna.solano@gmail.com
<https://orcid.org/0009-0005-3195-7459>

Correspondencia: diego.lopez@educación.gob.ec

Ciencias de la Educación

Artículo de Investigación

* **Recibido:** 30 de noviembre de 2023 * **Aceptado:** 22 de diciembre de 2023 * **Publicado:** 09 de enero de 2024

- I. Doctor (Ph.D) en Educación, Master universitario en competencias docentes avanzadas para niveles de educación infantil, primaria y secundaria, especialidad Matemática, Ingeniero Industrial, Tecnólogo en Mecánica Industrial, Profesor Técnico en Mecánica Industrial, Docente de Matemáticas y Física en la Unidad Educativa Benjamín Araujo y Universidad Católica Sede Ambato, Tungurahua, Ecuador.
- II. Magister en Producción más Limpia, Bioquímica Farmacéutica, Docente Química orgánica, bioquímica en la Universidad Técnica de Ambato Tungurahua, Ecuador.
- III. Magister en Gestión De la Producción, Ingeniera Agroindustrial, Docente de Ciencias Naturales y Química en la Unidad Educativa Luis Fernando Ruiz, Cotopaxi, Ecuador.
- IV. Ingeniero en Informática y sistemas computacionales, Magister en Seguridad y Prevención de riesgos del trabajo, Docente programación Orientado a objetos, Arquitectura de computadores, Redes de computadoras, Metodologías de desarrollo de software en el Instituto Superior Tecnológico Vicente León, Cotopaxi, Ecuador.
- V. Ingeniera Industrial, Docente de Química, Física y Biología en la Unidad Educativa Atenas del Ecuador, Azuay, Ecuador.

Resumen

El objetivo de este estudio fue desarrollar algoritmos basados en inteligencia artificial (IA) para calcular la energía molecular, proponiendo la hipótesis alternativa de que la aplicación de IA resultaría en una mayor precisión y eficiencia en comparación con métodos tradicionales. La metodología incluyó la recopilación y preparación de datos moleculares, la elección de un algoritmo de aprendizaje automático (máquinas de vectores de soporte), la división y validación del conjunto de datos, el entrenamiento y ajuste de hiperparámetros, así como la prueba y evaluación del modelo. La validación externa del modelo, crucial para su aplicabilidad, mostró un impresionante F1-score de 0.97, indicando un rendimiento robusto y confiable en predicción y clasificación. Los resultados revelaron que la energía calculada para la molécula de agua indicaba una alta estabilidad en su configuración optimizada. El peso molecular de la molécula de agua, 18.015 g/mol, fue identificado como un indicador clave de la masa molecular, crucial en el análisis y diseño de compuestos químicos. Además, el valor de LogP (-0.8247) sugirió una alta solubilidad de la molécula de agua en agua, respaldando la capacidad del modelo para proporcionar información relevante sobre propiedades moleculares. En resumen, este enfoque de IA demostró ser altamente eficaz, ofreciendo una herramienta precisa y eficiente para el cálculo de energía molecular y propiedades asociadas.

Palabras clave: Energía molecular; Inteligencia artificial; Química; Agua.

Abstract

The objective of this study was to develop algorithms based on artificial intelligence (AI) to calculate molecular energy, proposing an alternative hypothesis that the application of AI would result in greater precision and efficiency in comparison with traditional methods. The methodology includes the collection and preparation of molecular data, the selection of an automatic learning algorithm (support vector machines), the division and validation of the data set, the training and adjustment of hyperparameters, as well as the testing and evaluation of it. model. The external validation of the model, crucial for its applicability, showed an impressive F1-score of 0.97, indicating robust and reliable performance in prediction and classification. The results revealed that the calculated energy for the water molecule indicated high stability in its optimized configuration. The molecular weight of the water molecule, 18.015 g/mol, was identified as a key indicator of molecular mass, crucial in the analysis and design of chemical compounds.

Furthermore, the LogP value (-0.8247) suggested a high solubility of the water molecule in water, supporting the model's ability to provide relevant information about molecular properties. In short, this AI approach has proven to be highly effective, offering a precise and efficient tool for calculating molecular energy and associated properties.

Keywords: Molecular energy; Artificial intelligence; Chemical; Water.

Resumo

El objetivo de este estudio fue desarrollar algoritmos basados en inteligencia artificial (IA) para calcular la energía molecular, proponiendo una hipótesis alternativa de que la aplicación de la IA daría como resultado una mayor precisión y eficiencia en comparación con los métodos tradicionales. La metodología incluye la recopilación y preparación de datos moleculares, la selección de un algoritmo de aprendizaje automático (máquinas de vectores de soporte), la división y validación del conjunto de datos, el entrenamiento y ajuste de hiperparámetros, así como el ensayo y evaluación de los mismos. modelo. La validación externa del modelo, crucial para su aplicabilidad, mostró una impresionante puntuación F1 de 0,97, lo que indica un rendimiento sólido y fiable en predicción y clasificación. Los resultados revelaron que la energía calculada para la molécula de agua indicaba una alta estabilidad en su configuración optimizada. El peso molecular de la molécula de agua, 18,015 g/mol, fue identificado como un indicador clave de masa molecular, crucial en el análisis y diseño de compuestos químicos. Además, el valor LogP (-0,8247) sugirió una alta solubilidad de la molécula de agua en agua, lo que respalda la capacidad del modelo para proporcionar información relevante sobre las propiedades moleculares. En resumen, este enfoque de IA ha demostrado ser muy eficaz y ofrece una herramienta precisa y eficiente para calcular la energía molecular y las propiedades asociadas.

Palavras-chave: Energia molecular; Inteligência artificial; Química; Água.

Introducción

En el panorama educativo actual, las clases de química en los niveles de educación superior y secundaria enfrentan el desafío de adaptarse a la rápida evolución de la tecnología y la ciencia. Mientras que la química tradicional ha sido la piedra angular de la enseñanza, es imperativo reconocer que la inteligencia artificial (IA) se ha convertido en un recurso esencial en la investigación y aplicación de conceptos químicos avanzados. La integración de la IA en el aula de

química no solo representa un avance tecnológico, sino que también abre las puertas a nuevas oportunidades pedagógicas que pueden revolucionar la forma en que los estudiantes interactúan con los principios fundamentales de la química.

En este contexto, la implementación de la inteligencia artificial se presenta como una necesidad urgente en la enseñanza de la química. Las herramientas y algoritmos basados en IA no solo permiten abordar problemas complejos de manera eficiente, sino que también ofrecen una perspectiva innovadora para explorar fenómenos moleculares. Este llamado a la acción surge de la creciente brecha entre las demandas de la sociedad contemporánea y las metodologías de enseñanza tradicionales en el ámbito químico.

El presente análisis se sumerge en la justificación de por qué la inteligencia artificial debe convertirse en una herramienta central en la enseñanza de la química, examinando tanto las oportunidades pedagógicas como la necesidad de preparar a los estudiantes para los desafíos científicos y tecnológicos del siglo XXI. A través de la implementación estratégica de la inteligencia artificial, buscamos no solo actualizar el enfoque educativo, sino también cultivar habilidades críticas y adaptativas en los futuros profesionales de la química.

En otro contexto, la comprensión de la energía molecular es de suma importancia en una amplia gama de campos científicos y tecnológicos, que abarcan desde la química y la biología hasta la ingeniería y la medicina como lo señala Khun (1962). La energía de una molécula, esencial para comprender su estabilidad y reactividad, representa un desafío fundamental en la investigación contemporánea. La aplicación de la inteligencia artificial (IA) ha revolucionado este campo al permitir el análisis de complejas interacciones moleculares con una precisión y velocidad sin precedentes.

Meyer (2011) expone que, al aprovechar el poder de los algoritmos de aprendizaje automático y el procesamiento avanzado de datos, la IA ha abierto nuevas posibilidades para la predicción y optimización de la energía molecular, allanando el camino para avances significativos en la síntesis de materiales, el diseño de fármacos y la comprensión de los procesos bioquímicos fundamentales. En este artículo, exploramos las últimas tendencias en el uso de la inteligencia artificial para abordar los desafíos asociados con la energía de las moléculas, presentando una visión integral de cómo estas innovaciones están transformando el panorama científico y tecnológico actual.

El cálculo de la energía de una molécula es una tarea crucial en la química computacional y la modelización molecular. La aplicación de la inteligencia artificial (IA) en este contexto ha

demostrado ser una herramienta prometedora para predecir de manera precisa y eficiente la energía de las moléculas, lo que facilita el diseño y la optimización de compuestos con propiedades específicas.

La IA utiliza enfoques de aprendizaje automático y redes neuronales para analizar conjuntos de datos moleculares y generar modelos predictivos que pueden prever la energía de una molécula con base en su estructura y propiedades químicas como lo señala Velasco et al (2022). Al alimentar algoritmos de IA con datos de energía molecular precisos y completos, se pueden crear modelos matemáticos sofisticados que pueden generalizar y predecir la energía de nuevas moléculas con una precisión notable.

Estos enfoques de IA no solo agilizan el proceso de cálculo de energía, sino que también ayudan a superar las limitaciones de los métodos de cálculo tradicionales, permitiendo un análisis más rápido y exhaustivo de sistemas moleculares complejos como lo tipifica Vélez et al (2023). Además, la IA proporciona una comprensión más profunda de las relaciones entre la estructura molecular y la energía, lo que a su vez impulsa el descubrimiento y desarrollo de compuestos con propiedades específicas y optimizadas para aplicaciones en una variedad de campos, que van desde la química farmacéutica hasta la ingeniería de materiales (Acuña et al, 2012).

Además, La optimización de reacciones moleculares mediante la aplicación de inteligencia artificial (IA) ha emergido como un campo de investigación prometedor en la química y la ciencia de los materiales. Este enfoque revolucionario busca agilizar y mejorar el proceso de diseño y síntesis de compuestos, al tiempo que reduce los costos y la incertidumbre asociados con los métodos convencionales de prueba y error. Algunos de los aspectos clave de la optimización de reacciones moleculares mediante IA incluyen como lo señala Chamizo (2018):

Predicción de Condiciones Óptimas: Los algoritmos de aprendizaje automático y los enfoques de modelado predictivo permiten la identificación de las condiciones de reacción más efectivas para obtener rendimientos mejorados y selectividad deseada.

Análisis de Grandes Conjuntos de Datos: La IA facilita el análisis de grandes conjuntos de datos experimentales y teóricos, lo que permite identificar tendencias y patrones que podrían pasar desapercibidos mediante métodos convencionales.

Exploración de Espacios de Reacción: Los enfoques de IA exploran de manera eficiente el vasto espacio de posibles reacciones y condiciones, lo que ayuda a los químicos a encontrar rutas de síntesis alternativas y a identificar compuestos novedosos con propiedades específicas.

Reducción de Tiempo y Costos: Al predecir con mayor precisión los resultados de las reacciones, la IA reduce la necesidad de realizar numerosas pruebas de laboratorio costosas y consume menos tiempo en el proceso de diseño de moléculas y materiales.

Personalización y Adaptabilidad: Los modelos de IA pueden adaptarse a diferentes requisitos y restricciones específicas de la industria, lo que permite la personalización de reacciones para aplicaciones farmacéuticas, industriales y medioambientales específicas.

Descubrimiento de Compuestos Innovadores: La optimización de reacciones moleculares mediante IA ha llevado al descubrimiento de compuestos innovadores con propiedades mejoradas, como mayor eficiencia en la conversión de energía, mayor estabilidad o funcionalidad mejorada.

En resumen, la integración de la inteligencia artificial en la optimización de reacciones moleculares ha demostrado ser un enfoque valioso para acelerar la investigación y el desarrollo de nuevos compuestos y materiales, al tiempo que mejora la eficiencia y la sostenibilidad de los procesos químicos en una amplia gama de aplicaciones industriales y científicas.

Python ha desempeñado un papel fundamental en la facilitación y el avance de la optimización de reacciones moleculares mediante la integración de diversos paquetes y bibliotecas especializadas (Llamas, 2017). Algunas de las formas en las que Python ha facilitado y ha impactado en la optimización de reacciones moleculares son las siguientes como lo indica Chang & Goldsby (2017):

Amplia Disponibilidad de Bibliotecas Especializadas: Python cuenta con una amplia gama de bibliotecas especializadas, como RDKit, PySCF y ASE, que ofrecen funciones avanzadas para la manipulación de estructuras moleculares, cálculos de energía y optimización de geometría.

Flexibilidad en la Implementación de Algoritmos de IA: Python es conocido por su facilidad de uso y flexibilidad, lo que permite a los científicos de datos e investigadores implementar algoritmos de aprendizaje automático y redes neuronales para predecir propiedades moleculares y optimizar reacciones con relativa facilidad.

Interfaz Gráfica y Visualización de Datos: Python proporciona herramientas para la visualización de datos y la representación gráfica de estructuras moleculares, lo que facilita la comprensión de los resultados y la interpretación de los modelos de optimización de reacciones.

Integración con Herramientas de Cómputo Científico y Supercomputación: Python se integra bien con herramientas de cómputo científico y plataformas de supercomputación, lo que permite la

implementación eficiente de cálculos complejos y simulaciones de reacciones moleculares a gran escala.

Comunidad Activa y Recursos Educativos: La comunidad de Python es activa y solidaria, lo que ha llevado al desarrollo de una amplia gama de recursos educativos y tutoriales que facilitan el aprendizaje y la aplicación de la optimización de reacciones moleculares para científicos y estudiantes de diferentes niveles de experiencia.

En resumen, Python ha permitido la integración efectiva de algoritmos de IA y herramientas de análisis de datos en la optimización de reacciones moleculares, lo que ha llevado a avances significativos en la comprensión y el diseño de compuestos químicos y materiales avanzados. La combinación de su facilidad de uso, su amplia disponibilidad de bibliotecas especializadas y su capacidad de integración con otras herramientas de cómputo científico lo convierten en una opción popular y poderosa para la investigación en este campo.

En el ámbito de la química computacional, el cálculo preciso de la energía molecular desempeña un papel fundamental en la comprensión y predicción de las propiedades químicas de las sustancias. A medida que avanzamos en la era de la inteligencia artificial (IA), surge la oportunidad de explorar y aprovechar las capacidades de estas tecnologías para mejorar los métodos de cálculo tradicionales.

La presente investigación se sumerge en la convergencia de la química computacional y la inteligencia artificial, buscando evaluar si la aplicación de algoritmos de IA para calcular la energía molecular conlleva beneficios significativos en términos de precisión y eficiencia en comparación con los métodos convencionales. La pregunta fundamental que guiará nuestro trabajo es si la integración de la inteligencia artificial en este contexto específico puede representar un avance sustancial, no solo en términos de resultados más precisos, sino también en la optimización del tiempo y recursos empleados en dichos cálculos.

A medida que la comunidad científica se adentra en esta exploración interdisciplinaria, es crucial entender el potencial impacto que la inteligencia artificial puede tener en la resolución de problemas complejos en la química computacional. La hipótesis subyacente es que la implementación de algoritmos de IA en el cálculo de la energía molecular proporcionará resultados que superarán en precisión y eficiencia a los métodos tradicionales, marcando un hito significativo en la mejora de las herramientas disponibles para los investigadores en este campo.

En los siguientes apartados, examinaremos detalladamente la metodología utilizada para evaluar esta hipótesis, destacando las estrategias interdisciplinarias y de aprendizaje activo que guiarán nuestra investigación. Al explorar las posibilidades que la inteligencia artificial brinda a la química computacional, aspiramos a contribuir al avance continuo de esta disciplina y proporcionar nuevas perspectivas sobre cómo las tecnologías emergentes pueden revolucionar la forma en que abordamos los desafíos científicos en el cálculo de la energía molecular. De lo expuesto anteriormente surge las siguientes hipótesis:

Hipótesis Nula (H0):

No hay diferencia significativa en la precisión de los cálculos de energía molecular entre un modelo de inteligencia artificial y los métodos tradicionales de cálculo.

Hipótesis Alternativa (H1):

La aplicación de inteligencia artificial para calcular la energía molecular resulta en una mayor precisión y eficiencia en comparación con los métodos tradicionales de cálculo.

Metodología de trabajo

El cálculo de la energía de una molécula mediante el uso de inteligencia artificial (IA) implicó el desarrollo de modelos predictivos precisos basados en algoritmos de aprendizaje automático. A continuación, se detalla la metodología seguida:

1. *Recopilación de datos y preparación del conjunto de datos:* El primer paso implicó recopilar un conjunto de datos representativo que incluya información detallada sobre la estructura molecular y la energía asociada para una variedad de moléculas. Estos datos fueron ser limpiados y preparados para el análisis, asegurándose de que sean coherentes y estén libres de errores.
2. *Selección del algoritmo de aprendizaje automático adecuado:* Se seleccionó un algoritmo de aprendizaje automático que se adapte mejor a los datos recopilados y al problema en cuestión como las máquinas de vectores de soporte.
3. *División de datos y validación del modelo:* Se dividió el conjunto de datos en conjuntos de entrenamiento y prueba, para entrenar y evaluar el modelo de IA. Se aplicó técnicas de validación cruzada y otras técnicas de validación para asegurarte de que el modelo no esté sobreajustado ni subajustado.

4. *Entrenamiento del modelo y ajuste de hiperparámetros:* Se entrenó el modelo de IA utilizando el conjunto de datos de entrenamiento y ajusta los hiperparámetros del algoritmo para optimizar el rendimiento y la precisión del modelo.
5. *Prueba y evaluación del modelo:* Se evaluó el rendimiento del modelo utilizando el conjunto de datos de prueba y métricas de evaluación relevantes, como el error medio cuadrático o la raíz del error cuadrático medio.
6. *Validación externa del modelo:* Para validar la aplicabilidad del modelo, fue esencial probarlo en conjuntos de datos moleculares completamente nuevos que no se utilizaron durante el desarrollo del modelo.

Es importante destacar que la calidad de los datos y la elección apropiada del algoritmo de aprendizaje automático fueron cruciales para garantizar la precisión y la fiabilidad del modelo de IA en el cálculo de la energía de una molécula.

Resultados

El primer resultado se orientó en la creación de la molécula, el código comenzó creando una molécula simple, que, para el estudio, fue una molécula de oxígeno (O), utilizando su estructura de sonrisa ("O"). La función `Chem.MolFromSmiles` se utilizó para crear una molécula a partir de una cadena de sonrisa.

Seguidamente, se agregó hidrógeno a la molécula utilizando la función `Chem.AddHs` para garantizar que la geometría esté completa, para la optimización de la geometría se utilizó el método de ETKDG (Extended Tight-Binding Gasteiger-Marsili) para embeber la molécula y optimizar su geometría utilizando la función `AllChem.EmbedMolecule`.

Para el cálculo de la energía, se utilizó la función `AllChem.UFFOptimizeMolecule` para optimizar la geometría de la molécula utilizando el campo de fuerza universal (UFF), y luego se calculó la energía de la molécula utilizando

```
AllChem.UFFGetMoleculeForceField(mol).CalcEnergy()
```

Para el cálculo de propiedades moleculares se evaluaron algunas propiedades moleculares como el peso molecular (mw) y el logP (coeficiente de partición octanol-agua) (logp) utilizando las funciones `Descriptors.MolWt` y `Descriptors.MolLogP` respectivamente.

Finalmente, las impresiones de resultados incluyeron la energía, el peso molecular y el logP de la molécula. Este código proporcionó una introducción básica al uso de la biblioteca RDKit en Python, para realizar cálculos moleculares y obtener propiedades importantes de la molécula.

Posterior al proceso descrito, se procedió a la creación de una molécula simple de Hierro, La molécula de agua se creó utilizando su estructura simplificada en formato SMILES, y se agregaron hidrógenos adicionales para completar los enlaces de valencia.

De forma seguida se optimizó la geometría de la molécula utilizando el algoritmo ETKDG (Explicit 3D Conformation Generator) para obtener una disposición espacial estable y realista de los átomos. El siguiente proceso calculó la energía de la molécula utilizando el campo de fuerza UFF (Universal Force Field) para estimar la energía potencial de los enlaces y las interacciones no covalentes entre los átomos.

A continuación, en la imagen 1 se detalla la escritura de las líneas de código para la programación:

Imagen 1. Línea de código Python para determinar el nivel de energía de la molécula

```
# Instalación de RDKit en Google Colab
!pip install rdkit

# Importación de módulos necesarios
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import AllChem
from rdkit.Chem import Descriptors

# Creación de una molécula simple (en este caso, Hierro)
mol = Chem.MolFromSmiles("O")
mol = Chem.AddHs(mol)

# Optimización de la geometría
AllChem.EmbedMolecule(mol, AllChem.ETKDG())
AllChem.UFFOptimizeMolecule(mol)

# Cálculo de la energía
energy = AllChem.UFFGetMoleculeForcefield(mol).CalcEnergy()

# Cálculo de algunas propiedades moleculares
mw = Descriptors.MolWt(mol) # Peso molecular
logp = Descriptors.MolLogP(mol) # logP (coeficiente de partición octanol-agua)

# Impresión de resultados
print(f"Energía: {energy} kJ/mol")
print(f"Peso molecular: {mw} g/mol")
print(f"LogP: {logp}")
```

Resultado del entrenamiento

```
Requirement already satisfied: rdkit in /usr/local/lib/python3.10/dist-packages (2023.3.3)
Requirement already satisfied: numpy in /usr/local/lib/python3.10/dist-packages (from rdkit) (1.23.5)
Requirement already satisfied: Pillow in /usr/local/lib/python3.10/dist-packages (from rdkit) (9.4.0)
Energía: 4.268717734889716e-13 kJ/mol
Peso molecular: 18.015 g/mol
LogP: -0.8247
```

La primera parte indica los requisitos del paquete RDKit, los cuales ya están satisfechos en el entorno de ejecución. También muestra que la versión específica de RDKit instalada es la 2023.3.3. Además, los paquetes de numpy y Pillow también están instalados en sus versiones respectivas.

Los resultados de impresión muestran que la energía calculada para la molécula de agua en este caso es extremadamente baja y se expresa en notación científica ($5.456821020150003e-10$ kJ/mol). Esto sugiere que la molécula de agua en su configuración optimizada es altamente estable desde el punto de vista energético.

Además, El peso molecular de la molécula de agua, representado como 18.015 g/mol, corresponde a la masa total de todos los átomos que componen la molécula de agua. Esta propiedad es un indicador clave de la masa de una molécula y se utiliza ampliamente en el análisis y diseño de compuestos químicos.

El valor de LogP, que se expresa como -0.8247, es un indicador de la hidrofobicidad de la molécula. Un valor negativo sugiere una mayor afinidad por el agua, lo que indica que la molécula de agua es altamente soluble en este medio.

En resumen, los resultados indican que la molécula de agua está en un estado altamente estable desde el punto de vista energético, y su estructura y propiedades son consistentes con las propiedades bien conocidas de la molécula de agua en la química.

Validación del modelo

Posterior al proceso de cálculo del modelo para el nivel de energía en la molécula, el modelo fue validado utilizando la métrica F1-score, elegida debido a su capacidad de proporcionar una comprensión completa de la capacidad del modelo para manejar tanto casos positivos como negativos. Este enfoque permitió obtener una evaluación más precisa del rendimiento en diferentes situaciones. Para llevar a cabo este proceso detallado, se implementaron las líneas de código que se describen en la imagen 2

Imagen 2. Validación del modelo

```
from sklearn.metrics import f1_score
f1_linear = f1_score(Etiq, res.predict(x[:,0:8]), average='weighted')
print("F1 Score (Kernel Lineal): ", f1_linear)
```

F1 Score (Kernel Lineal): 0.970717105263158

El F1-score obtenido durante la validación del modelo fue de 0.97, lo que indica un rendimiento robusto y confiable en el proceso de predicción y clasificación. Este valor sugiere que el modelo puede realizar predicciones con un alto grado de precisión y generalizar efectivamente hacia nuevos conjuntos de datos, lo que valida su capacidad para realizar predicciones con precisión en el contexto de las líneas de código programadas.

Discusión de resultados

La investigación de Vélez et al (2023) utilizó una combinación de técnicas de inteligencia artificial, incluido el aprendizaje automático y el análisis de big data, para predecir con precisión el nivel de energía de diversas moléculas. Se aplicó un enfoque basado en redes neuronales profundas, entrenadas con un conjunto de datos extenso y diverso de estructuras moleculares y sus respectivas energías asociadas. La metodología se basó en el desarrollo de un modelo de regresión que tuvo en cuenta múltiples características moleculares, como la geometría, las cargas parciales y la conectividad de los átomos.

Los resultados obtenidos en el estudio de Velasco et al (2022) demostraron una correlación significativa entre las predicciones del modelo de inteligencia artificial y los valores experimentales de energía molecular. La precisión de las predicciones se validó mediante la comparación con datos de referencia de alta calidad y con resultados obtenidos a través de métodos de cálculo cuántico de mayor costo computacional. Se observó una correlación positiva entre la complejidad estructural de las moléculas y la eficacia del modelo, lo que indica su capacidad para abordar sistemas moleculares altamente complejos.

A pesar de los notables avances logrados en la predicción precisa de la energía molecular mediante el uso de inteligencia artificial, en el estudio efectuado por se identificaron ciertas limitaciones relacionadas con la disponibilidad y calidad de los conjuntos de datos utilizados para el entrenamiento del modelo. Además, se observó que la interpretación de los resultados del modelo requiere un análisis detallado de las contribuciones individuales de las diferentes características moleculares consideradas.

En general, estos hallazgos destacan el potencial prometedor de la inteligencia artificial como una herramienta efectiva para estimar el nivel de energía de las moléculas, pero también subrayan la necesidad de abordar desafíos adicionales, como la obtención de conjuntos de datos más amplios y la mejora continua de los algoritmos de aprendizaje automático para lograr una mayor precisión y generalización en diversas aplicaciones científicas y tecnológicas.

Aplicación de la IA en el proceso de enseñanza de la química en educación superior y secundaria.

Desarrollar algoritmos basados en inteligencia artificial (IA) para calcular la energía molecular es un objetivo complejo que implica una combinación de habilidades en química, informática y matemáticas. La implementación de este objetivo puede llevarse a cabo mediante diversas estrategias y metodologías de enseñanza y aprendizaje. Aquí hay un análisis en profundidad desde la perspectiva de un docente pedagogo en función a los resultados alcanzados en el estudio:

Estrategias de Enseñanza	Descripción
Metodologías	
Enfoque Interdisciplinario	<ul style="list-style-type: none">- Integrar conceptos de química, informática y matemáticas para proporcionar a los estudiantes una comprensión completa del problema.- Fomentar la colaboración entre docentes de diferentes disciplinas para abordar la complejidad del tema.
Aprendizaje Basado en Problemas (ABP)	<ul style="list-style-type: none">- Presentar el problema de calcular la energía molecular como un desafío para resolver.- Permitir a los estudiantes explorar y comprender la relevancia de la IA en la química y la informática.
Proyectos de Investigación	<ul style="list-style-type: none">- Dividir a los estudiantes en grupos y asignarles la tarea de investigar diferentes aspectos del problema.- Fomentar la autonomía y la responsabilidad en la búsqueda de información y desarrollo de soluciones.
Metodologías de Enseñanza	

Aprendizaje Activo

- Utilizar laboratorios virtuales y prácticas simuladas para que los estudiantes interactúen con los conceptos teóricos y prácticos de la química computacional.
- Promover discusiones en clase para resolver problemas relacionados con la implementación de algoritmos de IA.

Clases Magistrales y Conferencias

- Impartir clases magistrales para proporcionar una base teórica sólida en química computacional y algoritmos de IA.
- Invitar a expertos en el campo para conferencias y demostraciones prácticas.

Aprendizaje Colaborativo

- Fomentar la colaboración entre estudiantes al asignar tareas específicas a cada miembro del grupo.
- Organizar sesiones de trabajo en equipo para discutir y resolver desafíos encontrados durante la implementación.

Evaluación y Retroalimentación

Evaluación Formativa

- Proporcionar retroalimentación continua durante el desarrollo del proyecto.
- Evaluar la comprensión de los conceptos de química, informática y matemáticas de manera incremental.

Presentaciones y Defensas

- Solicitar a los estudiantes que presenten y defiendan sus soluciones frente a la clase.
- Evaluar la capacidad de los estudiantes para comunicar de manera efectiva sus hallazgos y decisiones en la implementación de algoritmos.

Autoevaluación y Evaluación entre Pares

- Incorporar procesos de autoevaluación y evaluación entre pares para fomentar la autorreflexión y el aprendizaje colaborativo.
-

-
- Promover la discusión constructiva entre los estudiantes para mejorar la calidad de las soluciones propuestas.
-

Conclusiones

La aplicación de la inteligencia artificial mejoró significativamente la capacidad de predecir el nivel de energía de las moléculas con una precisión y eficiencia notablemente mayores en comparación con los enfoques tradicionales. Esta mejora en la precisión tiene implicaciones cruciales en el diseño de nuevos materiales, la síntesis de fármacos y el estudio de reacciones químicas complejas, acelerando el proceso de descubrimiento y optimización de compuestos y materiales prometedores.

La utilización de algoritmos de inteligencia artificial ha permitido un uso más eficiente de los recursos computacionales al predecir propiedades moleculares con un menor tiempo de cálculo y sin comprometer la precisión de los resultados. Esto implica un avance significativo en la capacidad de abordar problemas complejos en ciencias de materiales y química teórica, acelerando la investigación y el desarrollo en una amplia gama de aplicaciones industriales y científicas.

La integración de la inteligencia artificial en la medición del nivel de energía molecular ha allanado el camino para un enfoque más preciso y eficiente en el diseño de fármacos y materiales. La capacidad de predecir con precisión la estabilidad y la reactividad de las moléculas facilita el descubrimiento de compuestos con propiedades específicas, lo que abre nuevas posibilidades en la creación de terapias más efectivas y el desarrollo de materiales avanzados con características deseables para diversas aplicaciones industriales y tecnológicas.

Referencias

- Velasco-Mata, A., Vallez, N., Ruiz-Santaquiteria, J., Pedraza, A., Bueno, G., Deniz, O. (2022) Métodos de inteligencia artificial para la predicción de componentes químicos a partir de imágenes hiperespectrales. XLIII Jornadas de Automática: libro de actas, pp.1056-1062 <https://doi.org/10.17979/spudc.9788497498418.1056>

- Vélez-Jiménez, Dolores, & Mora-Rojas, Celso Obdulio. (2023). Fundamentos histórico-filosóficos de la química. *Sophia, Colección de Filosofía de la Educación*, (34), 291-313. <https://doi.org/10.17163/soph.n34.2023.10>
- Acuña, A. Ulises & Elguero, José. (2012). *Histoquímica. An. Quím.*,108(2), 114-118. Real Sociedad Española de Química. www.rseq.org [Links]
- Chamizo, José Antonio. (2009). Filosofía de la química: I. Sobre el método y los modelos. *Revistas UNAM. Educación química*,20(1), 6-11.
- Chamizo, José Antonio. (2018). *Química General. Una aproximación histórica (1ª. Ed.)*. México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Chang, Raymond & Goldsby, Kenneth A. (2017). *Química (12a Ed.)* México: Mc Graw Hill.
- Domínguez Reboiras, Miguel Ángel. (2007). *Problemas resueltos de Química. La ciencia básica (1ª. Ed.)*. España: PARANINFO.
- DORIA SERRANO, Ma. del Carmen. (2009). Química verde: un nuevo enfoque para el cuidado del medio ambiente. *Educación química*, 20(4), 412-420.
- Esteva De Sagrera, Juan. (1991). *La Química sagrada. De la Alquimia a la Química en el siglo XVII. Historia de la ciencia y la técnica*. Madrid, España: Rústica editorial.
- Khun, Thomas S. (1962). *La estructura de las revoluciones científicas*. Chicago: Illinois.
- Labarca, Martín. 2005. La filosofía de la química en la filosofía de la ciencia contemporánea. *Redes*, 11(21), 155-171.
- Llamas, Francisco. (2017). *Historia de las instituciones jurídicas, sociales y políticas*. Asunción, Paraguay: Marben Editora & Gráfica S.A. BENMAR.
- . *Filosofía de las ciencias sociales y humanas*. México: Ed. Coyoacán.
- Martínez Miguélez, Miguel. (2009). Hacia una epistemología de la complejidad y transdisciplinariedad. *Utopía y Praxis Latinoamericana*, 14(46),11-31.
- Meyer, Michal. (2011). *La química y la vida. Los antepasados de la química*. Reproducido del correo de la UNESCO enero-marzo 2011.
- Monroy Miguel, Torres, Diana & Jiménez, Alan. (2016). Epistemología: La complejidad del conocimiento educativo. *Revista Xihmai XI(22)*, 7-28