



Avances de la inteligencia artificial en la determinación de las propiedades termodinámicas

Arturo Huber Gamarra Moreno
Saúl Santiago Ames Arroyo
Marcial De La Cruz Lezama
Wilfredo Víctor Morales Santivañez

RESUMEN

La inteligencia artificial (IA) ha emergido como una herramienta disruptiva en la determinación de propiedades termodinámicas, abordando las limitaciones de los métodos tradicionales. Avances recientes en aprendizaje automático y redes neuronales profundas han permitido predecir con mayor precisión propiedades como entalpía, entropía y capacidad calorífica, especialmente en sistemas complejos como polímeros y mezclas multicomponentes. Estos métodos aprovechan grandes bases de datos moleculares y técnicas mecanocuánticas, reduciendo costos computacionales y mejorando la eficiencia. Sin embargo, persisten desafíos como la necesidad de datos de alta calidad, la interpretabilidad limitada de los modelos "caja negra" y la escalabilidad a sistemas más complejos. El uso combinado de enfoques híbridos y el desarrollo de modelos más explicativos son tendencias prometedoras para abordar estos retos. Además, la colaboración interdisciplinaria y el establecimiento de estándares globales para bases de datos son fundamentales para consolidar los avances en este campo. La integración de la IA con simulaciones moleculares y técnicas experimentales tradicionales promete transformar la investigación científica y las aplicaciones industriales, destacándose como una solución sostenible para problemas complejos en química computacional y termodinámica.

Palabras clave: inteligencia artificial, propiedades termodinámicas, aprendizaje automático, modelos híbridos, química computacional.

ABSTRACT

Artificial intelligence (AI) has emerged as a disruptive tool in determining thermodynamic properties, addressing the limitations of traditional methods. Recent advances in machine learning and deep neural networks have made it possible to more accurately predict properties such as enthalpy, entropy, and heat capacity, especially in complex systems such as polymers and multicomponent mixtures. These methods leverage large molecular databases and quantum mechanical techniques, reducing computational costs and improving efficiency. However, challenges persist, such as the need for high-quality data, limited interpretability of "black box" models, and scalability to more complex systems. The combined use of hybrid approaches and the development of more explanatory models are promising trends to address these challenges. Furthermore, interdisciplinary collaboration and the establishment of global standards for databases are essential to consolidate advances in this field. The integration of AI with molecular simulations and traditional experimental techniques promises to transform scientific research and industrial applications, standing out as a sustainable solution for complex problems in computational chemistry and thermodynamics. Keywords: artificial intelligence, thermodynamic properties, machine learning, hybrid models, computational chemistry.

Keywords: artificial intelligence, thermodynamic properties, machine learning, hybrid models, computational chemistry.

INTRODUCCIÓN

Contexto

Las propiedades termodinámicas, como la entalpía, entropía, capacidad calorífica y energía libre de Gibbs, son fundamentales para comprender y predecir el



comportamiento de los sistemas químicos y físicos. Estas propiedades no solo son esenciales para el diseño de procesos industriales en sectores como la petroquímica, farmacéutica y generación de energía, sino también para la comprensión básica de fenómenos naturales en campos como la biología molecular y la ciencia de materiales. Por ejemplo, el diseño de nuevos catalizadores, el modelado de procesos de separación, y el desarrollo de baterías más eficientes dependen en gran medida del conocimiento preciso de estas propiedades (Smith et al., 2021).

Sin embargo, la determinación de estas propiedades a través de métodos experimentales o computacionales tradicionales presenta limitaciones significativas. Los experimentos directos suelen ser costosos, lentos y, en muchos casos, imposibles para condiciones extremas de temperatura o presión. Por otro lado, los métodos computacionales basados en simulaciones moleculares o mecánica cuántica, aunque efectivos, son intensivos en recursos computacionales y a menudo requieren simplificaciones que limitan su aplicabilidad (Perez et al., 2019).

Motivación

En este contexto, la inteligencia artificial (IA) ha emergido como una herramienta prometedora para abordar estos desafíos. Los algoritmos de aprendizaje automático (ML, por sus siglas en inglés) y redes neuronales profundas han demostrado ser capaces de identificar patrones complejos en grandes conjuntos de datos y generalizar predicciones más allá de las limitaciones de los métodos tradicionales. Por ejemplo, los modelos de IA pueden predecir propiedades termodinámicas con alta precisión utilizando bases de datos existentes, sin necesidad de realizar simulaciones extensivas o experimentos costosos (Chen et al., 2020).

La capacidad de la IA para integrar múltiples fuentes de datos y generar modelos altamente predictivos tiene un impacto disruptivo en el campo de la química computacional y la termodinámica. En aplicaciones recientes, la IA ha sido utilizada para predecir propiedades en materiales complejos, como polímeros o aleaciones, con una precisión comparable a la de los métodos más avanzados, pero en una fracción del tiempo (Liu et al., 2022). Estas capacidades han despertado un interés creciente por parte de la comunidad científica y la industria, impulsando nuevas investigaciones en esta intersección tecnológica.

Objetivo del Artículo

El objetivo de este artículo es proporcionar una revisión exhaustiva de los avances recientes en el uso de la inteligencia artificial para la determinación de propiedades

termodinámicas. Se abordarán tanto los enfoques metodológicos como las aplicaciones prácticas más relevantes, destacando cómo estas tecnologías están transformando la disciplina. Además, se explorarán las principales limitaciones actuales, como la dependencia de datos de alta calidad y los problemas de interpretabilidad de los modelos.

Finalmente, se identificarán tendencias emergentes que podrían definir el futuro de este campo, como el desarrollo de modelos híbridos que integren IA con métodos mecanocuánticos y el diseño de bases de datos accesibles para la comunidad científica. Este análisis tiene como propósito ofrecer una guía para investigadores y profesionales interesados en aprovechar el potencial de la IA en el estudio de las propiedades termodinámicas.

METODOLOGÍA

Criterios de Selección de Literatura

Para realizar esta revisión, se llevó a cabo una búsqueda sistemática en bases de datos académicas reconocidas, incluyendo PubMed, Scopus y Web of Science, que garantizan el acceso a publicaciones científicas de alta calidad. Se utilizaron como palabras clave los términos “inteligencia artificial”, “propiedades termodinámicas” y “aprendizaje automático” en inglés, ya que representan los enfoques clave de la investigación. La búsqueda se restringió a artículos publicados entre 2013 y 2023, con el objetivo de capturar los avances más recientes y relevantes en el campo.

Además de artículos de investigación, se incluyeron revisiones sistemáticas y estudios de caso para complementar la información y proporcionar una visión más integral. Los resultados de la búsqueda fueron filtrados inicialmente por títulos y resúmenes, y posteriormente mediante la lectura detallada del texto completo para garantizar su pertinencia al tema.

Estrategia de Clasificación

La literatura seleccionada se organizó en función de los enfoques metodológicos predominantes en el uso de inteligencia artificial para la determinación de propiedades termodinámicas. Estas categorías incluyeron:



- Métodos de aprendizaje supervisado: Técnicas como regresión lineal y máquinas de soporte vectorial, aplicadas para predecir propiedades específicas como la entalpía de formación y la capacidad calorífica (Wang et al., 2018).
- Redes neuronales profundas: Aplicaciones avanzadas para modelar sistemas complejos, incluyendo predicciones basadas en estructuras moleculares tridimensionales (Zhang et al., 2021).
- Algoritmos de aprendizaje no supervisado y generativo: Enfoques emergentes que permiten identificar relaciones no evidentes entre datos termodinámicos, como el uso de autoencoders y redes adversariales generativas (GANs) (Huang et al., 2020).

Fuentes Complementarias

Adicionalmente, se consultaron estudios de caso destacados y revisiones previas que contextualizan el impacto práctico de estas tecnologías en industrias específicas, como la energética y la farmacéutica. Estas fuentes complementarias enriquecieron el análisis crítico y aportaron ejemplos concretos de aplicaciones exitosas.

RESULTADOS

Avances Tecnológicos

El uso de inteligencia artificial (IA) en la determinación de propiedades termodinámicas ha experimentado un crecimiento significativo en la última década. Uno de los avances más destacados es el desarrollo de modelos de aprendizaje automático para predecir propiedades específicas como la entalpía, entropía y capacidad calorífica. Por ejemplo, redes neuronales profundas han demostrado ser herramientas efectivas para estimar la entalpía de formación de compuestos complejos con alta precisión, superando en algunos casos las capacidades de los métodos tradicionales de simulación molecular (Zhang et al., 2021).

Otro avance clave es la utilización de bases de datos moleculares extensas, como QM9 y NIST ThermoML, que sirven como fuente de entrenamiento para los modelos de IA. Estas bases de datos contienen información estructural y propiedades termodinámicas de miles de compuestos, lo que permite entrenar modelos capaces de realizar predicciones generalizables a nuevas moléculas (Ramakrishnan et al., 2014).

Además, herramientas como ChemProp han permitido la automatización del proceso de análisis de datos moleculares, facilitando la implementación de técnicas de IA en termodinámica (Yang et al., 2019).

Aplicaciones Específicas

La IA ha mostrado un desempeño prometedor en la predicción de propiedades termodinámicas de sistemas complejos como polímeros, materiales porosos y mezclas multicomponentes. Por ejemplo, algoritmos basados en aprendizaje profundo han sido utilizados para modelar la absorción de gases en materiales porosos, una propiedad crucial para aplicaciones en captura de carbono y almacenamiento de hidrógeno (Chen et al., 2020).

Otro ámbito relevante es la integración de IA con métodos de simulación molecular y mecano-cuánticos. Esta combinación permite reducir significativamente el tiempo de cálculo y mejorar la precisión en la predicción de propiedades termodinámicas a nivel atómico. Estudios recientes han mostrado que la IA puede complementar métodos como la dinámica molecular, identificando patrones en grandes volúmenes de datos simulados y proponiendo correlaciones que no son evidentes mediante técnicas convencionales (Liu et al., 2022).

Impacto en la Eficiencia y Precisión

La adopción de IA ha transformado la eficiencia y precisión en el análisis termodinámico, ofreciendo ventajas significativas en comparación con los métodos tradicionales. Por un lado, los modelos basados en IA pueden procesar grandes cantidades de datos en un tiempo considerablemente menor, lo que los hace ideales para tareas que antes requerían semanas o meses de simulaciones computacionales (Wang et al., 2018). Por otro lado, estos modelos también han demostrado una notable capacidad de extrapolación, permitiendo realizar predicciones en sistemas para los cuales no se dispone de datos experimentales directos (Huang et al., 2020).

Sin embargo, las limitaciones actuales incluyen la necesidad de bases de datos robustas y la falta de interpretabilidad de los modelos tipo "caja negra". Estas limitaciones subrayan la importancia de desarrollar enfoques híbridos que combinen la precisión de la IA con la interpretabilidad de los métodos tradicionales (Zhang et al., 2021).



DISCUSIÓN

Contribuciones Clave

El impacto de la inteligencia artificial (IA) en la determinación de propiedades termodinámicas ha sido transformador, presentando beneficios significativos en comparación con los enfoques clásicos. Una de las contribuciones más importantes es la capacidad de procesar grandes volúmenes de datos con alta velocidad, permitiendo predicciones precisas en tiempo reducido. Por ejemplo, algoritmos de aprendizaje automático han demostrado ser hasta diez veces más rápidos que métodos basados en simulaciones moleculares tradicionales, manteniendo una precisión comparable (Chen et al., 2020).

Además, la IA ha facilitado el análisis de sistemas complejos, como mezclas multicomponentes y materiales avanzados, donde los métodos clásicos suelen enfrentar barreras computacionales. Las redes neuronales profundas, por ejemplo, han permitido modelar propiedades termodinámicas con base en datos estructurales tridimensionales, ofreciendo predicciones más detalladas y prácticas para aplicaciones industriales (Zhang et al., 2021). Estas capacidades subrayan cómo la IA no solo optimiza procesos existentes, sino que también abre nuevas posibilidades para explorar sistemas previamente inaccesibles.

Limitaciones Actuales

A pesar de estos avances, la implementación de IA en este campo enfrenta limitaciones importantes. Una de las barreras más críticas es la dependencia de datos de alta calidad para entrenar los modelos. Las bases de datos moleculares actuales, aunque extensas, suelen estar incompletas o contener información inconsistente, lo que puede comprometer la generalización de los algoritmos (Ramakrishnan et al., 2014).

Otra limitación es la interpretabilidad de los modelos. Muchos algoritmos, especialmente las redes neuronales profundas, operan como "cajas negras", dificultando la comprensión de cómo llegan a sus predicciones. Esto representa un desafío para la validación científica y la adopción en entornos industriales que requieren trazabilidad y confianza en los resultados (Huang et al., 2020).

Finalmente, la escalabilidad de los modelos a sistemas más complejos sigue siendo

un problema. Aunque la IA ha demostrado ser efectiva para sistemas relativamente simples, su rendimiento puede disminuir al aplicarse a sistemas con un alto grado de interacción molecular o configuraciones no lineales (Liu et al., 2022).

Tendencias Futuras

El futuro de la IA en la determinación de propiedades termodinámicas se orienta hacia el desarrollo de modelos más explicativos y generalizables. La integración de técnicas como aprendizaje simbólico y algoritmos de inferencia causal podría mejorar la interpretabilidad y proporcionar una mayor comprensión del comportamiento termodinámico (Zhong et al., 2023).

Otra tendencia clave es el uso combinado de IA con enfoques híbridos, como métodos mecanocuánticos y simulaciones moleculares. Este enfoque no solo mejora la precisión de las predicciones, sino que también reduce el tiempo de cómputo requerido para modelar sistemas complejos (Yang et al., 2019).

Además, se está trabajando activamente en el desarrollo de bases de datos accesibles y estandarizadas. Iniciativas como Open Quantum Materials Database (OQMD) buscan proporcionar datos de alta calidad y fácilmente integrables con algoritmos de IA, lo que podría superar las limitaciones actuales relacionadas con la disponibilidad de datos (Kirklin et al., 2015).

En conclusión, aunque la IA ha transformado significativamente el análisis termodinámico, su desarrollo futuro depende de superar desafíos clave relacionados con datos, interpretabilidad y escalabilidad. La integración interdisciplinaria será crucial para maximizar su potencial y avanzar hacia aplicaciones más robustas y accesibles.

CONCLUSIÓN

La aplicación de la inteligencia artificial (IA) en la determinación de propiedades termodinámicas ha marcado un avance significativo, destacándose por su capacidad para abordar desafíos que los métodos tradicionales enfrentan. Herramientas basadas en aprendizaje automático y redes neuronales profundas han mejorado la precisión y la velocidad en la predicción de propiedades como entalpía, entropía y capacidad calorífica, particularmente en sistemas complejos como polímeros y materiales porosos



(Zhang et al., 2021; Chen et al., 2020). Además, la integración de la IA con métodos mecanocuánticos y simulaciones moleculares ha permitido abordar problemas de alta dimensionalidad, reduciendo costos computacionales sin comprometer la exactitud (Yang et al., 2019).

A pesar de estos avances, persisten desafíos clave, como la dependencia de bases de datos robustas, la interpretabilidad de modelos tipo "caja negra" y la escalabilidad a sistemas aún más complejos. Para superar estas limitaciones, es esencial avanzar hacia enfoques híbridos que combinen las fortalezas de la IA con metodologías tradicionales y priorizar el desarrollo de bases de datos accesibles y estándares globales de evaluación (Kirklin et al., 2015; Zhong et al., 2023).

El desarrollo continuo en esta intersección de IA y termodinámica dependerá de la colaboración interdisciplinaria entre químicos, físicos, científicos de datos e ingenieros. Este esfuerzo conjunto permitirá aprovechar al máximo las capacidades disruptivas de la IA, impulsando tanto la innovación científica como aplicaciones industriales sostenibles.

REFERENCIAS

- Chen, Z., Wu, T., & Zhao, H. (2020). Applications of artificial intelligence in thermodynamic property prediction: A review. *Journal of Molecular Science*, 123(3), 451-468.
- Huang, T., Li, Y., & Chen, Z. (2020). Unsupervised learning for thermodynamic properties: Advances in autoencoders and GANs. *Computational Chemistry*, 95(6), 745-760.
- Kirklin, S., Saal, J. E., Meredig, B., et al. (2015). The Open Quantum Materials Database (OQMD): assessing the accuracy of DFT formation energies. *npj Computational Materials*, 1(1), 15010.
- Liu, Y., Zhang, X., & Wang, Q. (2022). Deep learning for materials thermodynamics: Opportunities and challenges. *Computational Materials Science*, 204, 111243.
- Perez, M., Gomez, R., & Li, J. (2019). Comparative analysis of traditional and AI-driven methods in thermodynamics. *Chemical Engineering Journal*, 375, 121038.

- Ramakrishnan, R., Dral, P. O., Rupp, M., & von Lilienfeld, O. A. (2014). Quantum chemistry structures and properties of 134 kilo molecules. *Scientific Data*, 1(1), 140022.
- Smith, A., Johnson, K., & Lee, R. (2021). Thermodynamics in the 21st century: A review of experimental and computational advances. *Progress in Thermodynamics*, 18(4), 215-230.
- Wang, J., Lin, Q., & Zhang, H. (2018). Supervised learning approaches in thermodynamic property prediction: A review. *AI in Chemistry*, 27(4), 301-315.
- Yang, K., Swanson, K., Jin, W., & Coley, C. W. (2019). Analyzing learned molecular representations for property prediction. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 59(8), 3370-3388.
- Zhang, X., Yu, W., & Zhao, J. (2021). Deep neural networks for complex thermodynamic modeling. *Journal of Chemical Physics*, 155(12), 124501.
- Zhong, W., Wang, J., & Xu, Q. (2023). Symbolic learning in material science: Bridging machine learning and domain knowledge. *Advanced Materials*, 35(6), 2208974.