

# EL SANTO GRIAL DE LA QUÍMICA Y LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL: Un balance entre rigor y sustentabilidad

CARLOS NARANJO CASTAÑEDA  
CARLOS COELLO COELLO  
EUSEBIO JUARISTI

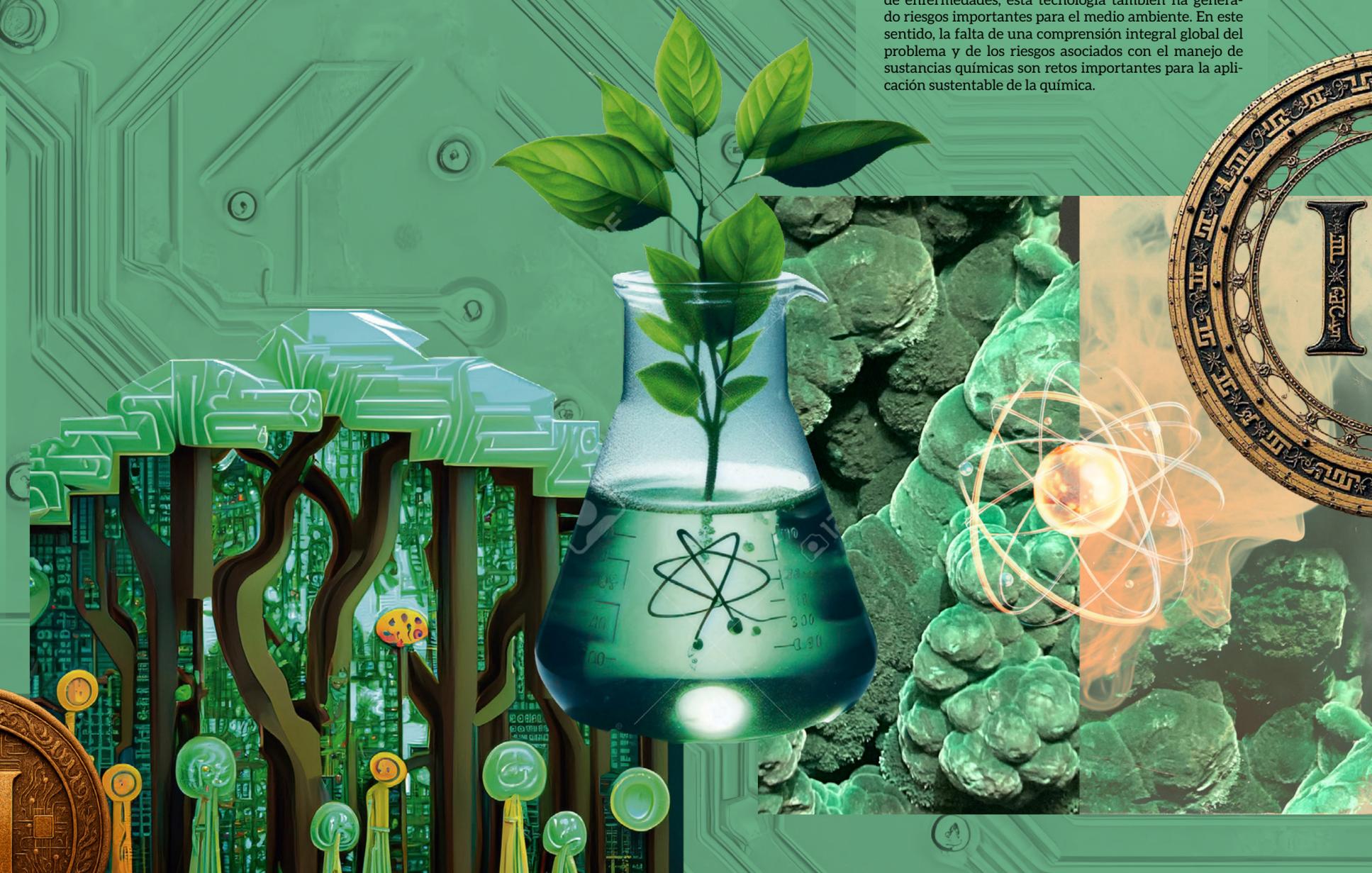
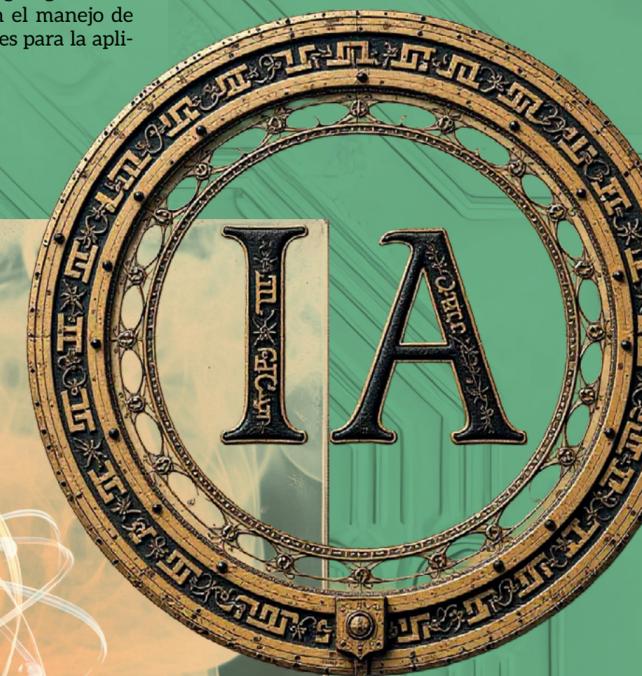
La química, ciencia que busca entender y manipular la materia a nivel molecular, ha sido durante mucho tiempo fundamental para resolver algunos de los desafíos más apremiantes de la humanidad. Sin embargo, en la búsqueda de rigor y eficiencia, la química a menudo se ha enfrentado a un dilema: ¿cómo lograr la sustentabilidad sin comprometer el rigor científico necesario en el desarrollo de nuevos procesos químicos?

En un mundo donde la tecnología avanza a pasos agigantados, la Inteligencia Artificial (IA) se ha convertido en una herramienta fundamental para el progreso científico, que además puede, en principio, contribuir a forjar un futuro sustentable. ¿Estamos cerca de encontrar el "Santo Grial" de la química, en su búsqueda del bienestar y de la supervivencia de la humanidad? En este artículo, exploraremos cómo la IA está coadyuvando a mejorar el avance de la química, incluyendo el desarrollo de fármacos más eficientes y la optimización de los procesos de producción industrial.

Durante mucho tiempo, la química tradicional ha recurrido a métodos de prueba y error, lo que ha resultado en tiempos prolongados de la investigación requerida para alcanzar resultados exitosos y reproducibles. Sin embargo, a pesar de los notables logros alcanzados por la química, la síntesis racional de moléculas con propiedades específicas sigue presentando un desafío significativo.

La dificultad inherente para la comprensión de la relación entre la estructura de las moléculas y sus propiedades y la ausencia de un marco teórico que permita anticipar la viabilidad de un proyecto de síntesis química, así como el rendimiento de la formación del producto final son algunos de los principales obstáculos que los científicos enfrentan para la preparación de nuevos compuestos químicos.

Por otro lado, la contaminación ambiental generada por la actividad humana representa una amenaza muy grande para la supervivencia de la humanidad, lo que significa un impacto negativo, que en algunos casos supera los beneficios que aportan los bienes y productos obtenidos mediante la química. Por ejemplo, aunque las medicinas producidas en las empresas farmacéuticas han sido fundamentales para controlar un gran número de enfermedades, esta tecnología también ha generado riesgos importantes para el medio ambiente. En este sentido, la falta de una comprensión integral global del problema y de los riesgos asociados con el manejo de sustancias químicas son retos importantes para la aplicación sustentable de la química.



Es aquí donde la IA emerge como una herramienta clave para maximizar la eficiencia de los procesos químicos y minimizar los impactos ambientales negativos. Sin embargo, su implementación requiere una gran capacidad computacional que depende de fuentes de energía no renovables, lo que puede contrarrestar los beneficios de sustentabilidad que busca proporcionar.

**Pasando de la IA roja a la IA verde**

El aprovechamiento de la IA para el desarrollo y producción sustentable de fármacos constituye un desafío complejo, similar a la búsqueda del Santo Grial por el Rey Arturo y sus caballeros, donde la innovación tecnológica y la conciencia ambiental deben ir de la mano.

En particular, es esencial tomar en cuenta el impacto ambiental que la implementación misma de la IA puede ocasionar. Por ejemplo, el entrenamiento de modelos de IA puede generar hasta 270,000 kg de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), debido a la gran cantidad de datos y procesamiento computacional requerido para aprender patrones y hacer predicciones. Esto se traduce en un alto consumo de energía en centros de datos y servidores, que en gran medida dependen de fuentes de energía no renovables. A medida que la complejidad de los modelos teóricos aumenta, se incrementa también la energía requerida para su funcionamiento y, por lo tanto, la cantidad de CO<sub>2</sub> producida. Esto se manifiesta en la llamada *huella de carbono*, que mide la cantidad total de gases de efecto invernadero (GEI) emitidos directa o indirectamente como consecuencia de las actividades humanas, incluyendo el CO<sub>2</sub> y el metano (CH<sub>4</sub>), entre otros.



En un futuro cercano, tan próximo como el año 2030, se prevé que la IA consumirá más del 30% de la energía utilizada para todas las actividades humanas a nivel mundial. Pero, ¿por qué la IA requiere tanta energía? La respuesta se encuentra en la complejidad de los procesos computacionales involucrados. Específicamente, la aplicación de la IA involucra procesar enormes cantidades de datos y realizar cálculos intensivos, lo que demanda una gran cantidad de energía para alimentar los centros de datos y servidores. Además, se realiza un enorme consumo de agua para poder enfriar los servidores durante el entrenamiento y uso de los modelos de IA actuales (p.ej., cuando se usa IA Generativa).

En este contexto, existen dos enfoques opuestos en el desarrollo de la inteligencia artificial: la IA Roja y la IA Verde. Podemos pensar en la IA Roja como un caballero del rey Arturo que se lanza a la batalla sin tomar en cuenta el costo de su cruzada, priorizando la precisión de su tarea a cualquier precio y sin considerar el impacto ambiental del gran costo energético involucrado. Al igual que al lograr el triunfo militar con un terrible costo en vidas humanas, el desarrollo de un nuevo fármaco mediante IA puede tener beneficios significativos en las áreas de la salud y las ciencias exactas, pero la *huella de carbono* en el proceso será considerable por lo que debe ser mitigada.

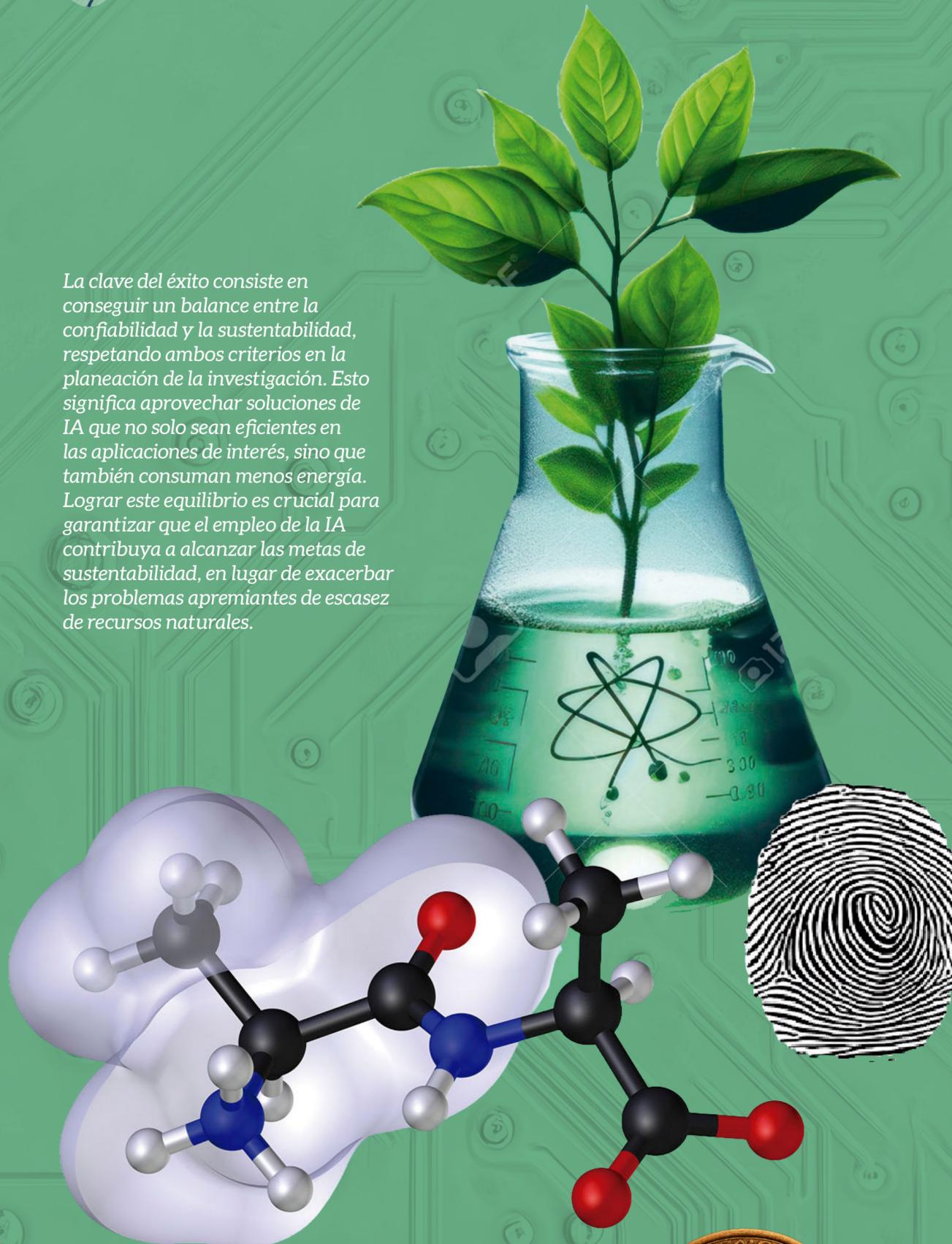


Por el contrario, la IA Verde representa un enfoque más razonado y consciente que busca la eficiencia, pero manteniendo la armonía con la naturaleza. La IA Verde se caracteriza por una baja *huella de carbono*, así como por generar datos de mayor calidad, utilizando modelos teóricos, que involucran menor complejidad computacional. Al desarrollar soluciones innovadoras sin aumentar el costo computacional, la IA Verde puede tener un impacto positivo tanto en la precisión de las predicciones obtenidas como en la protección del medio ambiente.

La clave del éxito consiste en conseguir un balance entre la confiabilidad y la sustentabilidad, respetando ambos criterios en la planeación de la investigación. Esto significa aprovechar soluciones de IA que no solo sean eficientes en las aplicaciones de interés, sino que también consuman menos energía. Lograr este equilibrio es crucial para garantizar que el empleo de la IA contribuya a alcanzar las metas de sustentabilidad, en lugar de exacerbar los problemas apremiantes de escasez de recursos naturales.

En efecto, la creciente necesidad de modelos computacionales más robustos y eficientes ha conducido a un aumento en el consumo de energía. Esto se debe en gran medida al uso de procesadores especializados como las Unidades de Procesamiento Gráfico (GPU) y las Unidades de Procesamiento Tensorial (TPU), que son fundamentales para la ejecución eficiente de los algoritmos de IA. Por ejemplo, las GPU son los procesadores de alto desempeño que manejan gráficos y cálculos en videojuegos y otras aplicaciones, mientras que las TPU están diseñadas para procesar grandes cantidades de datos y realizar cálculos matemáticos de gran precisión. Estos procesadores consumen grandes cantidades de energía para realizar cálculos matemáticos complejos y procesar grandes cantidades de datos, lo que puede tener un impacto ambiental significativo, especialmente cuando se aplican a tareas como la interpretación de datos científicos.

*La clave del éxito consiste en conseguir un balance entre la confiabilidad y la sustentabilidad, respetando ambos criterios en la planeación de la investigación. Esto significa aprovechar soluciones de IA que no solo sean eficientes en las aplicaciones de interés, sino que también consuman menos energía. Lograr este equilibrio es crucial para garantizar que el empleo de la IA contribuya a alcanzar las metas de sustentabilidad, en lugar de exacerbar los problemas apremiantes de escasez de recursos naturales.*



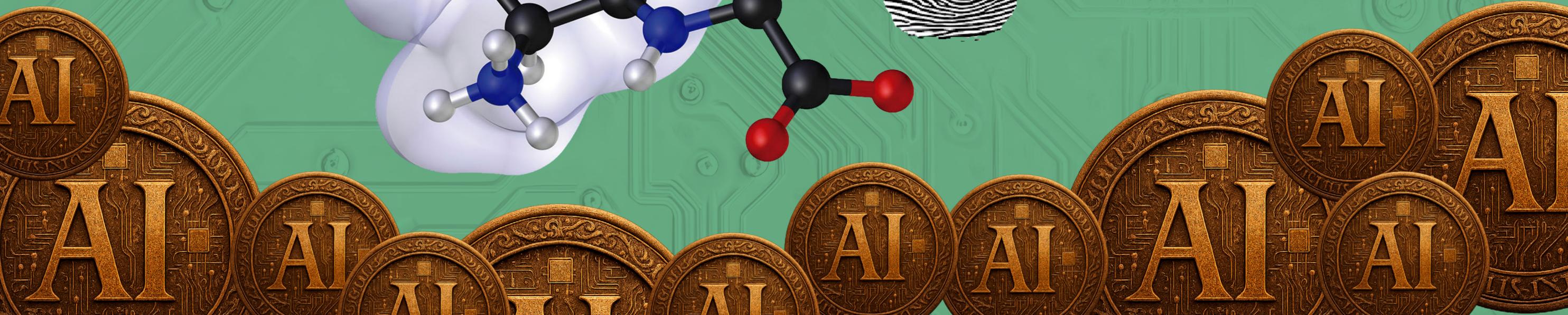
#### Para descifrar el lenguaje de las moléculas

La búsqueda de procesos químicos eficientes y sostenibles ha sido un desafío persistente para los científicos. Sin embargo, la IA ha abierto una nueva puerta para descubrir los secretos de la química, a fin de poder aprovecharlos en la conquista del Santo Grial, es decir, para mejorar la eficiencia química estando acompañada con sustentabilidad y protección del medio ambiente. La clave para alcanzar esta meta radica en la calidad de los datos proporcionados a la computadora durante su "entrenamiento" y la posterior conversión de propiedades moleculares en formatos numéricos, lo que permite a las máquinas analizar y procesar grandes cantidades de datos químicos de manera eficiente.

Aunque para los humanos puede ser muy difícil encontrar tendencias claras entre grandes conjuntos de datos, los algoritmos de IA sí que son capaces de identificar patrones y relaciones encubiertas para los humanos. Al procesar datos relacionados con propiedades químicas, los algoritmos de IA pueden desentrañar los enigmas de la química sustentable y alcanzar objetivos beneficiosos para la humanidad.

Te lo explicamos de la siguiente manera: las moléculas son como piezas de un rompecabezas, cada una con su propia forma y características únicas. Al igual que un rompecabezas, las moléculas tienen diferentes componentes y estructuras que reaccionan de manera específica para formar nuevas moléculas. ¿Cómo podemos entender y describir las moléculas de manera que los algoritmos de IA puedan leer y procesar esta información?

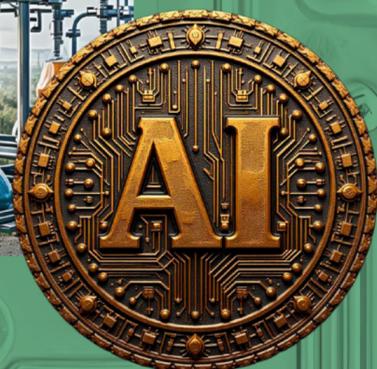
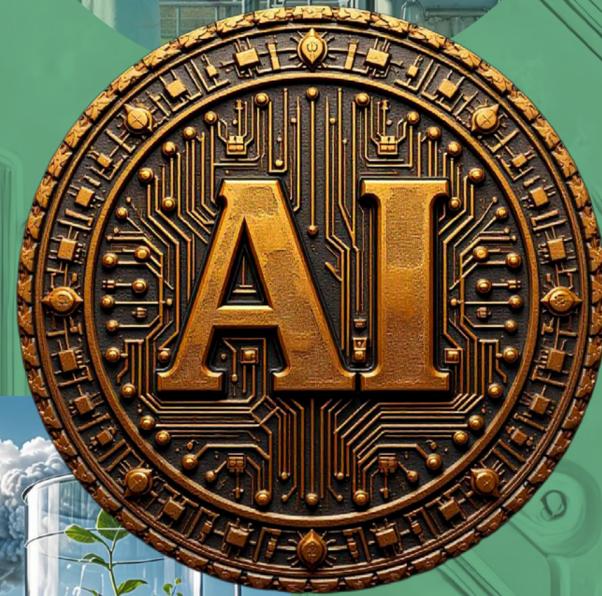
Las moléculas presentan propiedades específicas (como son la solubilidad, el punto de fusión y la reactividad, etc.) que son como sus "huellas digitales" características. Para identificar estas propiedades, los científicos utilizan técnicas especiales, como son la difracción de rayos-X, que es como una "radiografía" que muestra la estructura de las moléculas. También se utiliza la resonancia magnética nuclear (RMN), que provee información acerca de los diferentes átomos constituyentes y su "ambiente" en el entorno molecular, así como la espectroscopia de infrarrojo (IR), que es como un "escáner" que analiza la luz que emiten o absorben los diferentes tipos de segmentos presentes en las moléculas.



Por otro lado, la espectrometría de masas (EM), es como una "balanza" que pesa las moléculas, así como los fragmentos que las conforman. Estos datos son fundamentales para que los científicos puedan conocer la estructura de las moléculas y entender cómo funcionan. En efecto, el proceso que se sigue para diseñar nuevas moléculas y proponer rutas de síntesis idóneas es similar al que se sigue para armar un rompecabezas, donde cada pieza es una molécula con propiedades únicas, que determinarán la manera en la que pueden ser modificadas para dar lugar a nuevas moléculas con sus propias propiedades. En este sentido, la IA representa dichas propiedades mediante formatos numéricos, que los algoritmos pueden identificar y clasificar conforme a patrones, lo que puede llevar a descubrir aplicaciones innovadoras.

#### La Química verde

La búsqueda del Santo Grial de la química verde ha llevado a los científicos a una situación favorable que hará posible reducir el impacto ambiental y mejorar la sustentabilidad en la investigación química. De esta manera, la investigación basada en observaciones experimentales combinada con los resultados de estudios teóricos que aprovechan tanto la IA como la inteligencia humana, seguramente hará posible que el desarrollo futuro de la química sea amigable con el medio ambiente y considerado con el bienestar de los seres vivos.



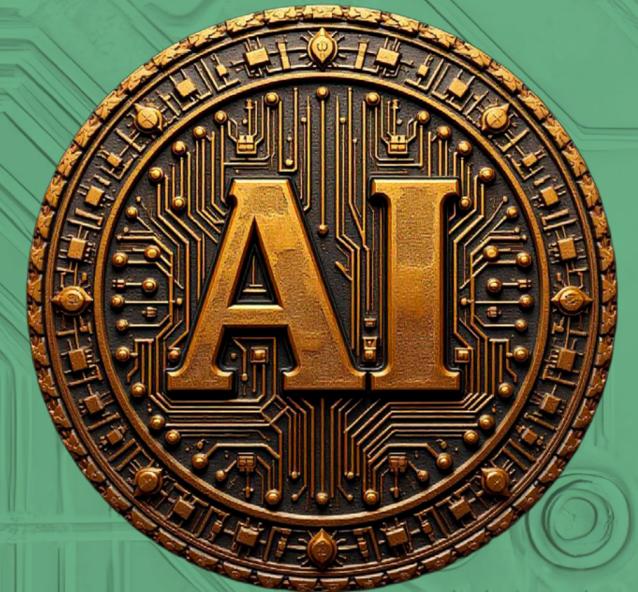
Así pues, la IA desempeña un papel crucial en la optimización de los procesos químicos buscando minimizar el impacto ambiental. Puede anticiparse que robots provistos con IA podrán predecir los resultados de reacciones inéditas y sugerir condiciones óptimas para minimizar la formación de residuos y para reducir la toxicidad de nuevas sustancias sintéticas. Además, la IA puede ayudar a seleccionar disolventes más seguros y sustentables para llevar a cabo las reacciones químicas de interés y diseñar vías para su preparación que sean eficientes y no den lugar a productos contaminantes.

En este contexto, los laboratorios autónomos, que son espacios equipados con robots y sistemas de IA capaces de realizar tareas de manera independiente y automatizada, han sentado las bases para realizar procesos químicos de manera acelerada y sustentable. En estos laboratorios, los robots controlados por IA pueden además examinar, clasificar y reensamblar equipos de laboratorio defectuosos, evitando la acumulación de residuos electrónicos, limitando la generación de sustancias tóxicas, y por supuesto, protegiendo al personal de laboratorio.

#### IA verde

La IA verde es un nuevo paradigma que busca reducir el impacto ambiental y la huella de carbono de las tecnologías de producción en las empresas químicas. Esto se logra mediante la optimización de algoritmos, la mejora de la eficiencia del hardware y la adopción de prácticas sustentables durante la gestión de datos.

La IA verde puede ayudar a reducir el consumo energético y mejorar la sustentabilidad en diferentes áreas, tales como las redes inteligentes que optimizan la distribución y consumo de energía eléctrica, optimizando la eficiencia energética en edificios e instalaciones. Así mismo, la actualización del hardware es fundamental para reducir el consumo energético de la IA, y se puede lograr mediante el uso de tecnologías eficientes como las GPU y las TPU de última generación. Por último, la paralelización de los equipos de cómputo entre varios cúmulos de procesamiento evita la transmisión de los datos redundantes a la nube digital, reduciendo así el consumo energético y las emisiones de gases de efecto invernadero.

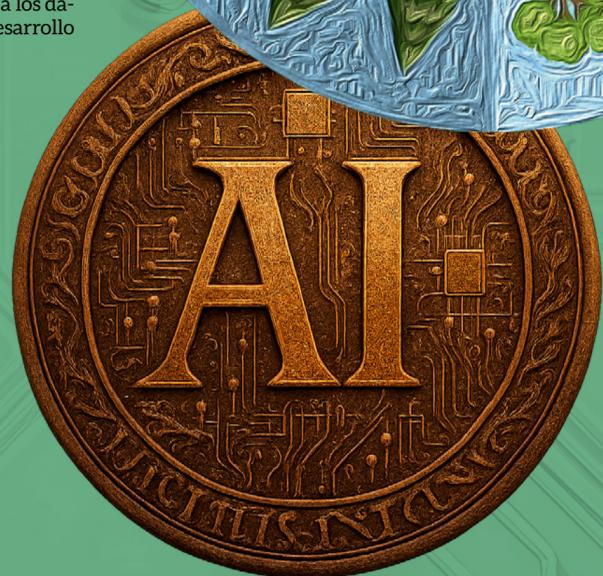
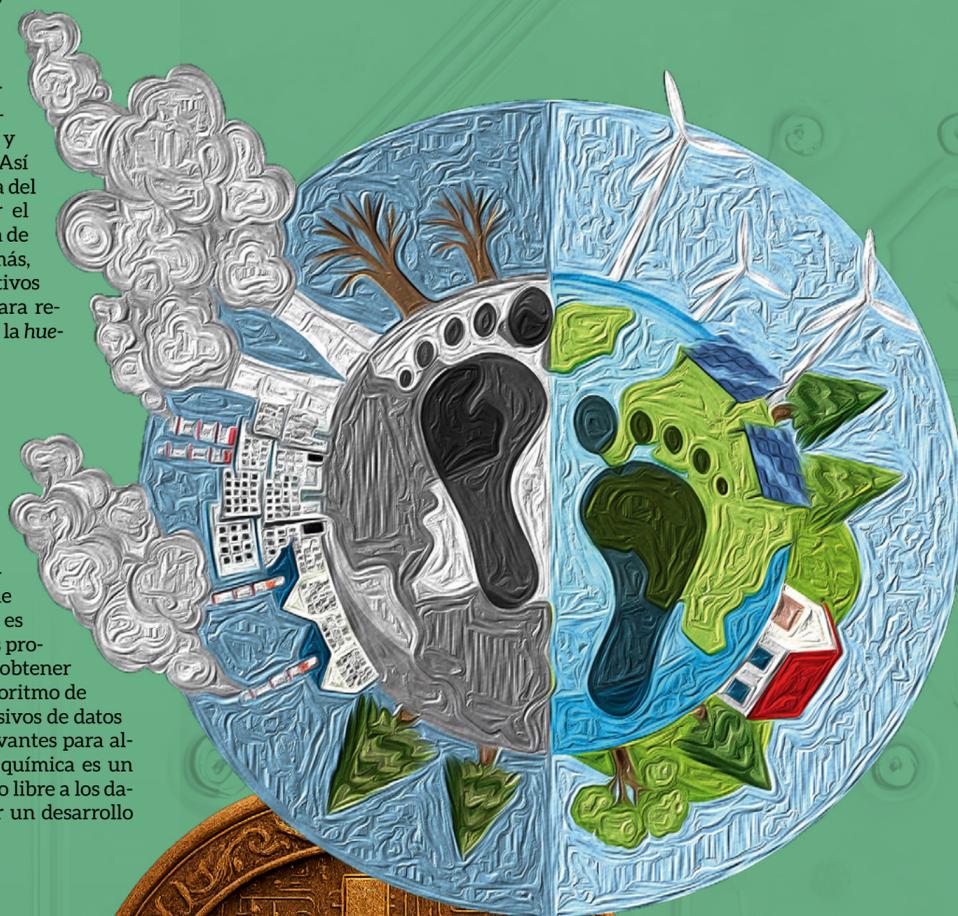


*La IA verde es un nuevo paradigma que busca reducir el impacto ambiental y la huella de carbono de las tecnologías de producción en las empresas químicas. Esto se logra mediante la optimización de algoritmos, la mejora de la eficiencia del hardware y la adopción de prácticas sustentables durante la gestión de datos.*

Cabe señalar que se han desarrollado otras estrategias para abordar los desafíos asociados con la protección ambiental. Una de ellas es la reducción de multidimensionalidad de los datos de entrada, que consiste en organizar los datos de manera secuencial con base en su relevancia para facilitar su análisis y reducir su complejidad. Esto permite ordenar de manera eficiente la información relevante, lo que a su vez reduce el tiempo y la energía necesaria para procesarla. Así mismo, se ha demostrado la conveniencia del uso de autocodificadores para eliminar el “ruido” de los datos y mejorar la eficiencia de las simulaciones correspondientes. Además, la optimización de experimentos reiterativos y su análisis también es fundamental para reducir el consumo de energía y minimizar la huella de carbono.

#### Un objetivo ambicioso

El desarrollo de la química sustentable potenciado por IA es un objetivo ambicioso que requiere de métodos del estado del arte para el entrenamiento del robot (o algoritmo inteligente en general) durante el manejo de grandes cantidades de datos. Aunque existen ejemplos promisorios para la integración de técnicas dirigidas por IA en la química, es esencial confirmar la confiabilidad de los procedimientos de aprendizaje para lograr obtener reacciones razonables y fiables por el algoritmo de IA. La poca disponibilidad de bancos masivos de datos que sean de alta calidad y que sean relevantes para alcanzar los objetivos de la investigación química es un obstáculo importante, por lo que el acceso libre a los datos originales es esencial para garantizar un desarrollo generalizado y equitativo de la IA.



Cabe señalar que se han desarrollado otras estrategias para abordar los desafíos asociados con la protección ambiental. Una de ellas es la reducción de multidimensionalidad de los datos de entrada, que consiste en organizar los datos de manera secuencial con base en su relevancia para facilitar su análisis y reducir su complejidad. Esto permite ordenar de manera eficiente la información relevante, lo que a su vez reduce el tiempo y la energía necesaria para procesarla.

En este sentido, la colaboración internacional es fundamental para aprovechar los avances tecnológicos y gestionar los recursos de una manera global. Se puede argumentar justificadamente que es muy importante garantizar la participación de diferentes países con diversos grados de desarrollo y que los proveedores de IA deben ofrecer tecnologías que sean accesibles a nivel mundial. El objetivo es establecer un foro abierto para que los científicos, las industrias y los usuarios en general intercambien experiencias, ideas y recursos para llevar a cabo procesos químicos verdaderamente útiles y sustentables.

En resumen, la comunidad científica que trabaja en el campo de la química sustentable busca soluciones innovadoras que minimicen la huella de carbono originada en los procesos químicos, con una motivación inspirada en la búsqueda legendaria del Santo Grial por parte de los caballeros en la mesa del Rey Arturo. Al igual que los grandes líderes de antaño, los científicos persiguen un objetivo ambicioso: revolucionar la química apoyados en la IA para hacer posible la cimentación de un futuro más sustentable. La convergencia de una conciencia ambiental y la disponibilidad de técnicas de IA seguramente hará posible exitoso y sustentable de la química de manera que sus contribuciones sean cada vez más valiosas.



**CARLOS NARANJO CASTAÑEDA**  
Investigador del Departamento de Química en el Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (Cinvestav).

**CARLOS A. COELLO COELLO**  
investigador del Departamento de Computación (Cinvestav) especializado en algoritmos de optimización multiobjetivo. Ha recibido la Medalla Presidencial de Ciencias (2012) y el Premio de la Academia Mundial de Ciencias (TWAS) en 2016. Pertenece a El Colegio Nacional.

**EUSEBIO JUARISTI**  
Investigador del Departamento de Química en el Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (Cinvestav), pertenece a El Colegio Nacional.

#### LECTURAS RECOMENDADAS:

- Naidu, R., Biswas, B., Willett, I. R., Cribb, J., Singh, B. K., Nathanail, C. P., Coulon, F., Semple, K. T., Jones, K. C., Barclay, A., Aitken, "R. J. Chemical pollution: A growing peril and potential catastrophic risk to humanity", *Environ. Int.* **2021**, 156, 106616. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2021.106616>.
- Bolón-Canedo, V., Morán-Fernández, L., Cancela, B., Alonso-Betanzos, A. "A review of green artificial intelligence: Towards a more sustainable future", *Neurocomputing.* **2024**, 599, 128096. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2024.128096>.
- Naranjo-Castañeda, C., Coello-Coello, C. A., Juaristi, E. "Application of artificial intelligence and machine learning methods in drug discovery and development". (Review). *Arkivoc.* **2024**, 202412195. <https://doi.org/10.24820/ark.5550190.p012.195>

