



02

DEEP LEARNING: UNA HERRAMIENTA QUE REVOLUCIONA LA QUÍMICA Y LA SOCIEDAD

Gonzalo Casillas Moreno

Moyses Alejandro Rodríguez Ortega

Diego Alberto Lomelí Rosales

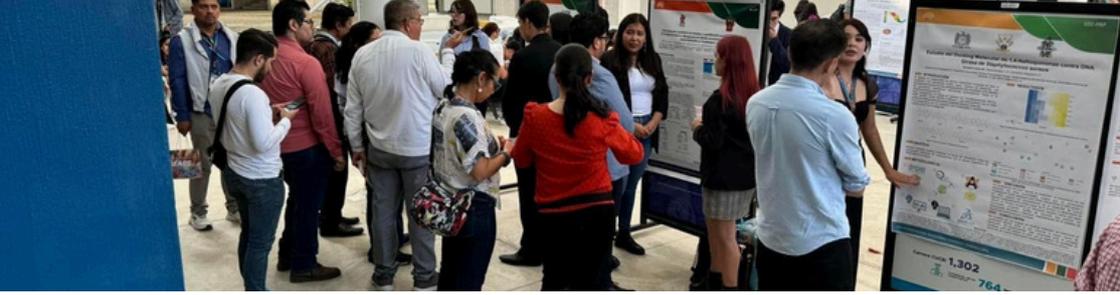
RESUMEN

El *deep learning*, inspirado en las redes neuronales humanas, ha trascendido la ciencia ficción para convertirse en un motor de innovación en nuestra vida cotidiana y en la investigación científica. Esta tecnología no solo impulsa aplicaciones como el reconocimiento facial o las recomendaciones en redes sociales, sino que también redefine cómo abordamos desafíos globales, desde la salud hasta la sostenibilidad.

En el ámbito científico, su impacto es revolucionario. Los laboratorios, antes limitados por análisis lentos y demandantes, ahora pueden llegar a usar *deep learning* para acelerar el análisis de datos experimentales, por ejemplo, prediciendo brotes de enfermedades u optimizar modelos climáticos. Actualmente, en la Química es una herramienta que ayuda al diseño de moléculas con propiedades específicas, sugiriendo rutas sintéticas eficientes a partir del análisis de datos, entre otras funciones. Es de destacar que el *deep learning* no reemplaza al científico: es un aliado que potencia la creatividad humana.

Su valor radica en la sinergia entre algoritmos y curiosidad humana, un binomio que está reescribiendo el futuro de la Química y, con ella, el progreso de la sociedad.

PALABRAS CLAVE: *Deep Learning*, Química, Sociedad.



¿Te puedes imaginar una tecnología que sea capaz de generar redes neuronales como el cerebro humano? ¡Ahora es una realidad! Esto es posible gracias al aprendizaje profundo, mejor conocido como “deep learning”, la cuál es una tecnología que utiliza redes neuronales artificiales con múltiples capas para aprender y representar datos complejos, como imágenes, textos, sonidos y secuencias (1).

Estas redes neuronales están diseñadas para imitar la forma en la que el cerebro humano procesa la información.

Como usuarios de algunas tecnologías, hemos empleado estas redes neuronales de manera inconsciente; por ejemplo, el deep learning se encuentra desde las tareas que consideramos sencillas,

como el desbloquear nuestro iphone o smartphone, donde se debe desarrollar la capacidad de reconocer patrones como detalles faciales, dactilares o frecuencias en el tono de voz específicas para cada uno de sus usuarios.

Algunas otras aplicaciones son las recomendaciones de música en Spotify, los videos recomendados o anuncios en redes sociales como: Youtube, Instagram o Tik tok, así como las búsquedas que realizamos en algunos navegadores como Google o Safari.

Ahora bien, también se debe visualizar y entender el impacto que se tiene en la ciencia, pues esta es parte primordial para el desarrollo de la sociedad. Para ello debemos reflexionar sobre uno de sus pilares; el análisis e interpretación de los resultados

obtenidos en los experimentos, lo cual puede llegar a ser un proceso lento, requiriendo herramientas sofisticadas y una inversión considerable de tiempo.

Es aquí donde entra en juego el deep learning, el cual permite acelerar el análisis de todos estos datos, además de generar la predicción de un posible resultado basado en lo que aprendió de los datos del experimento.

Con esto se logran desarrollos científicos cada vez más rápidos, por ejemplo, predecir el clima a partir de cambios en los patrones de presión y temperatura en el ambiente (2) o predecir infecciones de SARS-CoV-2 en un cierto grupo de

personas que sufren de algún padecimiento (3).

Estos avances no solo se perciben en el estudio de fenómenos que podemos observar a simple vista, ya que, en el ámbito de la Química, cuyo objetivo de estudio parte de lo atómico y molecular hasta llegar a predecir comportamientos y propiedades de la materia que permitan llegar a sintetizar compuestos que tengan una aplicación que impacte a la sociedad, se han visto revolucionados por el deep learning.

Pero ¿cómo se ha beneficiado la Química con todo esto?, y más aún, ¿cómo se beneficia la sociedad con estos avances?

Para responder tales preguntas, se deben analizar los campos de la química en el que se destaca la aplicación del deep learning, tales como el estudio del comportamiento de las moléculas, diseño molecular y la optimización procesos de síntesis, Figura 1 (4).



Imagen 1. Gonzalo Casillas Moreno en la presentación de su póster.

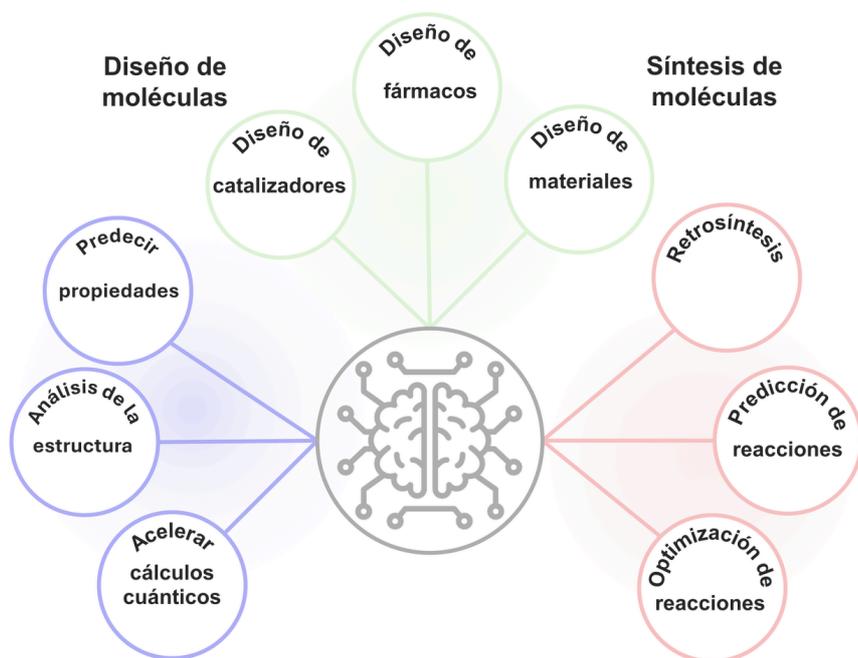


Figura 1. Esquema conceptual de las áreas en Química destacadas por la participación de deep learning (adaptado de referencia 4).

Un ejemplo que permite relacionar estas áreas de la química y la aplicación del deep learning es el diseño y síntesis de una molécula ideal que posea una mejor actividad farmacológica (analgésico, antiinflamatorio, antibiótico, etc.) en comparación con un medicamento ya existente.

Para esto, se comienza con el análisis de miles de datos de fármacos conocidos –comparando sus estructuras químicas y su efectividad biológica– para identificar características que permita aumentar la efectividad del medicamento.



Imagen 2. Moyses Alejandro Rodriguez Ortega en presentación de su póster.

Pero esto no es todo, ya que después de tener la estructura que mejorará dicho efecto farmacológico, es necesario llevarla de la computadora a la realidad, para ello se necesita plantear rutas de síntesis con el fin de llevarlas a cabo en un laboratorio, donde la química orgánica se beneficia del *deep learning*, permitiendo diseñar metodologías para la obtención de nuevos compuestos, además de sugerir que sustancias mezclar y en qué condiciones (4).

Así como este ejemplo, de manera general, el *deep learning* potencia el análisis de datos estructurales de compuestos,

ayudando a los científicos a la generación de nuevas estrategias de obtención de sustancias químicas con mejores propiedades en tiempos cortos o buscar aplicaciones potenciales en nuevos materiales con propiedades específicas, como la dureza, conductividad, flexibilidad, etc., permitiendo el desarrollo y la optimización de tecnologías como baterías, vehículos de transporte, computadoras, celulares, textiles, materiales de construcción, etc.

En este sentido, el más reciente evento documentado donde se visualiza un avance científico, es el Premio Nobel de Química 2024, otorgado a Demis Hassabis, David Baker y Jonh Jumper, quienes lograron predecir mediante *deep learning* la estructura de roteínas a partir de su secuencia de aminoácidos (5), es decir, a partir sus bloques de construcción, y observar cómo estos llegan a unirse y generar nuestras distintas células, tejidos y órganos; o una tarea que nos hubiera llevado años llevar a cabo en un laboratorio y que ahora puede ayudar a la aceleración de

la interpretación del comportamiento de estos sistemas proteicos, permitiendo la comprensión de sistemas biológicos complejos, como también el desarrollo de nuevos tratamientos ante distintos padecimientos.

Sin embargo, deep learning es una herramienta que nos permite predecir un resultado el cual posteriormente se podría corroborar en el laboratorio, es decir, llevar a cabo la experimentación adecuada para verificar lo predicho por esta tecnología. Por ello, el deep learning es una herramienta en nuestro kit científico, no un sustituto del análisis humano.



Imagen 3. Dr. Diego Alberto Lomeli Rosales.

CONCLUSIÓN

El deep learning ha revolucionado múltiples ámbitos de la sociedad y la ciencia, destacándose como una herramienta transformadora en campos como la química. Esta tecnología no solo optimiza la forma en que analizamos datos experimentales, sino que también abre puertas a descubrimientos antes impensables: desde el diseño de sustancias más eficientes hasta la creación de materiales innovadores. Sin embargo, su verdadero valor radica en complementar —no sustituir— la creatividad humana.

Los químicos y científicos utilizan estas herramientas para explorar fronteras desconocidas, guiando los algoritmos con preguntas bien formuladas y un conocimiento profundo de su campo. El deep learning es, en esencia, un acelerador del ingenio: potencia nuestra capacidad para innovar, pero siempre bajo el criterio ético y la curiosidad que definen a la ciencia.

Gonzalo Casillas Moreno ¹
Moyses Alejandro Rodríguez Ortega ²
Diego Alberto Lomelí Rosales ³

1 Estudiante de la Licenciatura en Química, CUCEI-UDG,
gonzalo.casillas5956@alumnos.udg.mx.

2 Estudiante de la Licenciatura en Química, CUCEI-UDG,
moyses.rodriguez9951@alumnos.udg.mx.

3 Departamento de Química, CUCEI-UDG,
diego.lomeli4077@academicos.udg.mx.

BIBLIOGRAFÍA

- 1 Lecun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning. Vol. 521, Nature. Nature Publishing Group; 2015. p. 436–44. Disponible en: <https://www.nature.com/articles/nature14539>
2. Mu B, Cui Y, Yuan S, Qin B. Incorporating heat budget dynamics in a Transformer-based deep learning model for skillful ENSO prediction. NPJ Clim Atmos Sci. 2024 Sep 6;7(1):208. Disponible en: <https://www.nature.com/articles/s41612-024-00741-y>
3. Xiao L, Zhang H, Duan J, Ma X, Usvyat LA, Kotanko P, et al. Predicting SARS-CoV-2 infection among hemodialysis patients using deep neural network methods. Sci Rep. 2024 Oct 9;14(1):23588. Disponible en: <https://www.nature.com/articles/s41598-024-74967-4>
4. Mater AC, Coote ML. Deep Learning in Chemistry. J Chem Inf Model. el 24 de junio de 2019;59(6):2545–59. Disponible en: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.9b00266>