

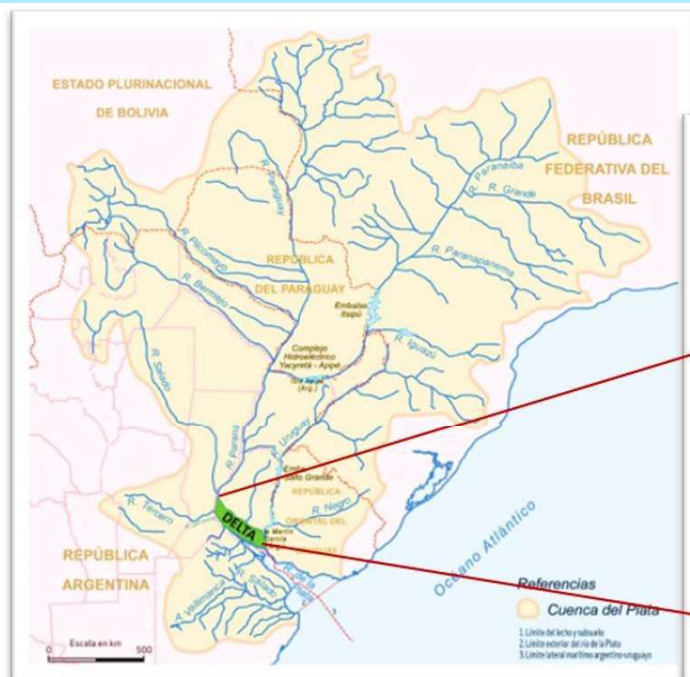
INDUSTRIA & QUÍMICA

ISSN 0368-0819

Agosto 2022 – N° 372

REVISTA DE LA ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA

Delta del Paraná



Cuenca del Plata



Editorial

La AQA ha continuado con sus actividades de los años previos, sin bajar el entusiasmo y adaptándose a los cambios impuestos por el empleo de los nuevos mecanismos de comunicación basados en las plataformas virtuales, tanto en la difusión de sus actividades como en la organización de cursos de capacitación y de posgrado en la que se contó con estudiantes de distintos lugares del país, de la región y aún de Europa. De esta tendencia no escaparon sus publicaciones clásicas (Anales de la AQA e I&Q) y la realización de reuniones como las "Jornadas Internacionales de Enseñanza de la Química Universitaria, Superior, Secundaria y Técnica" que se desarrollarán entre el 2 y el 4 de noviembre de 2022.

En esta línea, Industria y Química continúa invitando a especialistas del país en distintos campos de las Ciencias y Tecnologías Químicas.

En esta edición, se incluyeron tópicos aplicables al campo de la Química Ambiental, Química Medicinal y Farmacoquímica, y, por primera vez, un artículo de difusión en Inteligencia Artificial.

Son de público conocimiento los riesgos que van asociados a la pérdida de bosques y humedales, tanto en nuestro país como en distintas regiones del mundo, sea como consecuencia de los contaminantes de origen antropogénico o por cambios climáticos observados con registros en temperaturas superiores a las medias, incendios forestales provocados por el hombre (que pueden remontarse a viejas tradiciones precolombinas, o bien, intencionales), por negligencia o de origen natural por sequías prolongadas, así como una respuesta desfasada de las distintas autoridades a cargo de la prevención de estos hechos.

Por este motivo, el tema de Humedales reviste una importancia relevante. por sus funciones en los ecosistemas. Tal como se describe en este número, la extensión de humedales naturales viene disminuyendo en todo el mundo a un ritmo acelerado, debido al impacto de las actividades humanas. Sus funciones más importantes son la de depuración del agua debido a remoción de contaminantes, que comprende diversos procesos biológicos y físicoquímicos, que se traducen en bienes y servicios ecosistémicos muy valiosos.

En las últimas décadas ha crecido el impacto de las Nanociencias y las Nanotecnologías en nuestra actividad diaria, profesional e industrial. La nanotecnología y, en general, las nanociencias, presentan la posibilidad de modificar estructuras desde el nivel atómico y molecular para el diseño de materiales con propiedades específicas para sus aplicaciones en el campo de la electrónica, biomedicina, vehículos farmacéuticos y materiales nanoestructu-

ISSN: 2591-6718



COMISION DIRECTIVA DE LA
ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA

Presidente

Dr. Carlos Oscar Cañellas

Vicepresidente

Dr. Alberto Luis Capparelli

Secretaria

Dra. Alicia B. Pomilio

Tesorero

Dr. Arturo Vitale

Protesorero

Tco. Qco. Claudio Salvador

Director de Biblioteca

Dr. Máximo Barón

Vicedirectora de Biblioteca

Dra. Stella Maris Battista

Vocales Titulares

Dr. Ángel Alonso

Dr. Máximo Barón

Dra. Stella Maris Battista

Dr. Eduardo Alberto Castro

Dr. Jorge Oscar Ciprian Ollivier

Dr. Pablo Román Duchowicz

Dra. Sandra Hernández

Dr. Alberto Jorge Lazarowski

Dra. Alicia Beatriz Pomilio

Dra. Marisa Gabriela Repetto

Lic. Enrique G. Rodger

Técnico Químico Claudio Salvador

Dr. Arturo Alberto Vitale

Vocales Suplentes

Dr. Luis Bruno Blanch

Dra. Alicia Jubert

Dr. Gustavo Ruiz

rados para su empleo en el ámbito tecnológico-industrial, tal como se resumen en una de las contribuciones que se incorporan a este número. En contribuciones incluidas en este número se describe la importancia de desarrollar nuevos materiales y formulaciones que, respetando cuestiones éticas y de bioseguridad, puedan cumplir con los objetivos planteados. También algunos aspectos de los desarrollos de las Nanociencias orientados a problemas en Química Medicinal. En efecto, la Radioterapia es una de las técnicas más efectivas y difundidas para el tratamiento del cáncer. En esta dirección es de interés controlar el crecimiento y/o eliminación por aplicaciones radioterapéuticas. Sin embargo, muchos de estos tratamientos pueden generar complicaciones secundarias, por lo que resulta de interés minimizar estos efectos indeseables y desarrollar posibles herramientas que pueden aplicarse con este fin. Finalmente se describen los principios básicos del modelado aplicando las herramientas QSAR para el estudio del efecto contaminante de agentes químicos o sus mezclas en el medio ambiente, como toxicidad acuosa, persistencia en suelos, etc. En esta dirección se analizan propiedades de agroquímicos: actividad entre otras aplicaciones. La capacidad predictiva de las técnicas QSAR se ha incrementado notablemente, por lo que es importante su inclusión en cursos avanzados de Química y Tecnología Química, por su impacto en la síntesis, desarrollo, y manufactura de nuevas sustancias, y el número de sus aplicaciones en áreas como la predicción de la solubilidad acuosa de un compuesto químico, junto con su permeabilidad en membranas biológicas, que es en sí mismo un desafío en la industria farmacéutica.

Otro aspecto de relevancia creciente en el campo de las ciencias básicas y la tecnología es la incorporación creciente de las herramientas y principios de la nueva Inteligencia Artificial. Como expresan sus autores en esta contribución, brevemente, el término inteligencia artificial se aplica cuando una máquina imita las funciones cognitivas que los humanos consideran como propias de sus mentes, en especial percibir, razonar, resolver problemas, tomar decisiones y aprender. Hoy en día, la inteligencia artificial es sin duda una disciplina próspera con muchas aplicaciones prácticas y temas de investigación activos. Como ejemplos, ya se ha avanzado en el desarrollo de robots para el estudio de lechos de cursos de agua que permiten determinar, discriminar y clasificar distintos tipos de contaminantes (plásticos, vidrios, cubiertas, metales, etc.) en una etapa previa para el tratamiento y recuperación de los cursos de agua.

El número se completa con aspectos históricos del desarrollo de la industria del alcohol en Argentina, mostrando el impulso de los pioneros del siglo XIX y los problemas que debieron afrontarse para sobrevivir en condiciones que hacían prácticamente inoperables el emprendimiento.

Dr. Alberto L. Capparelli

ISSN: 2591-6718



COMISION DIRECTIVA DE LA
ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA

Órgano de Fiscalización:

Titulares

Dr. Víctor Szewczuk

Dr. Mario Félix.

Suplentes

Dr. Andrew Mercader.

Índice

Editorial

Pág. 1

Actividades de la Asociación Química Argentina

Noticias Institucionales

Pág. 5

Educación

La Nueva Inteligencia Artificial

Pág. 9

Predicción de Propiedades de Sustancias Químicas

Pág. 23

La Fábrica de Alcohol Devoto Rocha

Pág. 33

Artículos Técnicos

Herramientas y Conocimientos

de la Nanociencia y Nanotecnología

Pág. 43

A Brillar mi Amor. Detectores de Radiación

Pág. 51

Humedales en Acción

Pág. 59

Desarrollo de la Química

de Productos Naturales en Argentina

Pág. 69

ISSN: 2591- 6718



Revista Anales de la Asociación Química Argentina

Director

Dr. Alberto Jorge Lazarowski.

Vicedirectora

Dra. Marisa Gabriela Repetto.

Comité Asesor de la Dirección

Dr. Alan Talevi

Dr. Pablo R. Duchowicz.

Comité Editorial

Dra. Alicia Fernández Cirelli

Dra. Alicia Beatriz Pomilio

Dr. Ángel Alonso

Dr. Alberto Luis Capparelli

Dr. Eduardo Alberto Castro

Dra. Norma B. D'Accorso

Dr. Arturo Alberto Vitale

Comité Académico Asesor

Dra. Aída Ben Altabef

Dr. Ernesto Calvo

Dr. José Luis Crudo

Dr. Carlos O. Della Védova

Dra. Rosa Erra-Balsells

Dra. Marta Litter

Dra. Alicia Penissi

Dr. Gustavo Romanelli

Dr. Rolando Spanevello

Dr. Roberto J. J. Williams

Consejo Internacional de Asesores Científicos

Dr. Sylvio Canuto (Brasil)

Dr. Juan M. Díez Tascón (España)

Dr. José Elguero (España)

Dr. Ivan Gutman (Serbia)

Dr. Arsenio Muñoz de la Peña (España)

Dr. Francisco Tomás Vert (España)

La Nueva Inteligencia Artificial

Conceptos Básicos y Aplicaciones

Claudia Pons^{1,2,4} Gabriela Pérez^{1,3} Gabriel Baum¹

RESUMEN

En este artículo se explican los conceptos teóricos y las nociones intuitivas que conforman a la nueva Inteligencia Artificial, en especial al Aprendizaje de Máquina basado en Redes Neuronales Artificiales. Se recorren sus orígenes y fundamentos. Se describen sus principales aplicaciones y herramientas técnicas. Finalmente se comparten reflexiones acerca de las tendencias tecnológicas en el área y se presentan experiencias de aplicaciones desarrolladas en grupos de investigación de la Universidad Nacional de La Plata.

¿QUÉ ES LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL?

La inteligencia artificial (IA) [1] es un área controvertida y apasionante de las ciencias de la computación. Coloquialmente, el término inteligencia artificial se aplica cuando una máquina imita las funciones cognitivas que los humanos consideran como propias de sus mentes, en espe-

cial percibir, razonar, resolver problemas, tomar decisiones y aprender. Al menos desde la época de la antigua Grecia, los humanos han soñado con crear objetos artificiales inteligentes, donde las míticas Galatea y Pandora son algunos ejemplos de vida artificial. En pos del mismo deseo, en el folclore medieval se menciona al Golem, una personificación de un ser animado fabricado a partir de materia inanimada [2].

Coincidentemente, cuando se concibieron por primera vez las computadoras programables [3], de inmediato la gente se preguntó si tales máquinas podrían volverse inteligentes. Pregunta sobre la cual posteriormente también reflexiona el pionero de la informática, Alan Turing en su artículo "Computing machinery and intelligence" [4].

Hoy en día, la inteligencia artificial es sin duda una disciplina próspera con muchas aplicaciones prácticas y temas de investigación activos, tal como se describe en las siguientes secciones.

LA PARADOJA DE MORAVEC

Desde sus orígenes, las computadoras han sido capaces de realizar tareas muy complejas. Por ejemplo, ya en la década del 60, Clementina, la primera supercomputadora científica en Argentina, era capaz de resolver cálculos astronómicos, trazar modelos matemáticos de cuencas fluviales y resolver problemas estadísticos. Pero no todo lo que hace una computadora, por difícil o "inteligente" que parezca se considera inteligencia artificial. En los primeros días de la inteligencia artificial, el campo abordó y resolvió rápidamente problemas que son intelectualmente difíciles

1 Facultad de Informática,
Universidad Nacional de La Plata,
Buenos Aires, Argentina

2 Comisión de Investigaciones
Científicas CIC, Buenos Aires,
Argentina

3 UNAJ, Universidad Nacional
Arturo Jauretche, Florencio Varela,
Buenos Aires, Argentina

4 UAI, Universidad Abierta
Interamericana, Ciudad de Buenos
Aires

[claudia.pons, gabriela.perez,
gbaum] @lifa.info.unlp.edu.ar

para los seres humanos, pero relativamente sencillos para las computadoras, problemas que pueden describirse mediante reglas matemáticas formales. Por ejemplo, el sistema de ajedrez Deep Blue de IBM derrotó al campeón mundial Garry Kasparov en 1997. El ajedrez puede ser completamente descrito por una lista muy breve de reglas formales, fácilmente proporcionadas con anticipación por el programador. Irónicamente, las tareas abstractas y formales que se encuentran entre las tareas mentales más difíciles para un ser humano se encuentran entre las más fáciles para una computadora. El verdadero desafío a la inteligencia artificial resultó ser resolver las tareas que son fáciles de realizar para las personas, pero difíciles de describir formalmente: problemas que se resuelven intuitivamente, sin recurrir a un razonamiento explícito, sino que se siente un razonamiento automático, como reconocer palabras habladas o caras u objetos en imágenes. La inteligencia artificial enfrenta lo que a priori parece un contrasentido, tal como afirma la paradoja de Moravec, "Es relativamente fácil conseguir que las computadoras muestren capacidades similares a las de un humano adulto en una prueba de inteligencia y muy difícil lograr que adquieran las habilidades perceptivas y motoras de un niño de un año". Apenas recientemente las máquinas han comenzado a igualar algunas de las habili-

dades de los seres humanos promedio para realizar tareas sencillas como reconocer objetos o el habla.

El punto es que la vida cotidiana de una persona requiere una inmensa cantidad de conocimiento sobre el mundo. Gran parte de este conocimiento es subjetivo e intuitivo, y por lo tanto difícil de articular de manera formal. Las computadoras necesitan capturar este conocimiento para comportarse de manera inteligente. Uno de los desafíos clave en la inteligencia artificial moderna es encontrar la forma para lograr que una computadora asimile este conocimiento intuitivo. En este sentido, históricamente han coexistido dos grandes paradigmas en inteligencia artificial: la IA simbólica y la IA no simbólica.

Inteligencia artificial simbólica vs. inteligencia artificial no simbólica

La IA simbólica está inspirada en la lógica matemática. Se basa en la manipulación de representaciones lingüísticas compositivas abstractas, cuyos elementos representan objetos y relaciones. Ejemplos de esta IA son los sistemas basados en agentes lógicos [1] implementados con lenguajes declarativos tales como Prolog. Varios proyectos de inteligencia artificial han buscado codificar el conocimiento sobre el mundo mediante lenguajes formales. Un programa puede razonar automáticamente sobre

este conocimiento utilizando reglas de inferencia lógica. Esto se conoce como el enfoque basado en conocimiento para la inteligencia artificial. Estos proyectos no han logrado gran éxito.

Por otra parte, la IA no-simbólica se centra en la construcción de modelos matemáticos predictivos a partir de grandes conjuntos de datos de muestra (llamados datos de entrenamiento). Las dificultades a las que se enfrentan los sistemas que dependen del conocimiento codificado sugieren que los sistemas de IA necesitan la capacidad de adquirir su propio conocimiento, extrayendo patrones a partir de datos sin procesar. Esta capacidad se conoce como aprendizaje automático (en inglés, Machine learning) [5]. La introducción del aprendizaje automático permitió a las computadoras abordar problemas relacionados con el conocimiento del mundo real y tomar decisiones que parecen subjetivas.

En la siguiente sección se describe en detalle esta forma de aprendizaje artificial.

Aprendizaje Automático y Aprendizaje Profundo

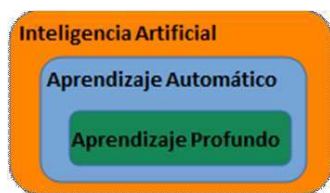
El aprendizaje automático es el estudio científico de algoritmos y modelos estadísticos que los sistemas informáticos utilizan para realizar de manera efectiva una tarea específica utilizando patrones e inferencias en lugar de instrucciones explícitas. El aprendizaje automático tiene como

objetivo desarrollar técnicas que permitan que las computadoras aprendan. Se trata de generalizar comportamientos a partir de información suministrada en forma de ejemplos. Es, por lo tanto, un proceso de inducción del conocimiento. Técnicamente, dado un conjunto de entrenamiento $T = \{(x_i, y_i) \mid i = 1 \dots N\}$ debe buscarse una buena aproximación a la función expresada por el conjunto de entrenamiento, sea $F: X \rightarrow Y$, donde X es el conjunto de entradas (problemas) e Y es el conjunto de salidas (soluciones). Por ejemplo, si el problema consiste en diagnosticar COVID-19 a partir del sonido de la tos, x_i será una digitalización de la tos, mientras que y_i será el diagnóstico positivo o negativo.

Existen diferentes técnicas para representar y construir la función F . Las más usadas son los Árboles de Decisión, las Máquinas de Vector de Soporte, y fundamentalmente las Redes Neuronales Artificiales (en inglés, Artificial Neural Networks, ANNs) [6] las cuales están inspiradas en el funcionamiento del sistema nervioso y el aprendizaje en los organismos vivos. En particular, el aprendizaje profundo (en inglés, Deep Learning) es un enfoque del aprendizaje automático biológicamente inspirado

que implica la formación de redes neuronales artificiales con muchas capas que se entrenan iterativamente usando grandes conjuntos de datos [7].

La figura 1 ilustra la relación entre



estas áreas de la inteligencia artificial, donde se destaca que el

Figura 1. Diagrama de Venn que muestra que el aprendizaje profundo es un tipo de aprendizaje automático, que se utiliza para muchos, pero no todos los enfoques a la inteligencia artificial.

aprendizaje profundo es una forma de aprendizaje automático, el cual, a su vez, es una forma de inteligencia artificial.

Las redes neuronales artificiales son un modelo computacional basado en un gran conjunto de unidades neuronales simples (neuronas artificiales), de forma análoga a las neuronas en los cerebros biológicos. Cada unidad neuronal está conectada con muchas otras y los enlaces entre ellas pueden incrementar o inhibir el estado de activación de las neuronas adyacentes. Se basan en ideas bastante antiguas presentadas por [8].

Las figuras 2 y 3 permiten observar las semejanzas entre una neurona biológica y una neurona artificial, también llamada perceptrón simple.

Tanto la neurona biológica como la artificial se describen a partir de los siguientes elementos:

-Las entradas x_i representan las señales que provienen de otras neuronas y son capturadas por las dendritas.

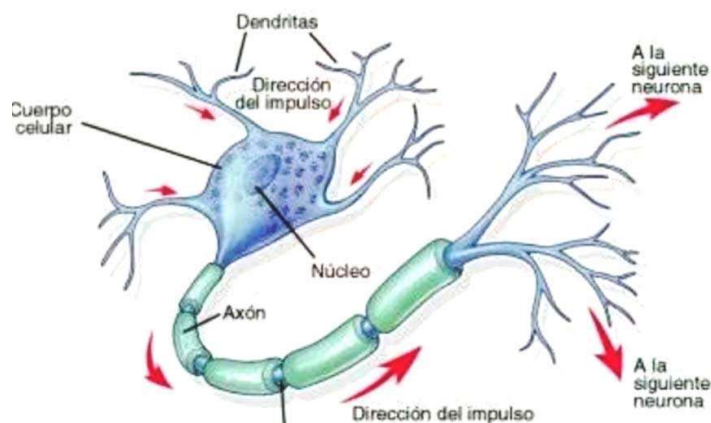
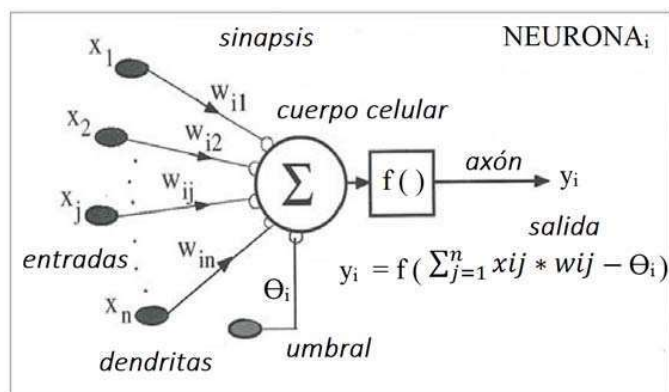


Figura 2. Neurona biológica



-Los pesos w_i representan la intensidad de la sinapsis que conecta dos neuronas; tanto x_i como w_i son valores reales.

Figura 3. Neurona artificial

- Θ es el umbral que la neurona debe sobrepasar para activarse; este proceso ocurre biológicamente en el cuerpo de la neurona.

En la neurona artificial, el comportamiento de la neurona biológica es emulado de la siguiente forma:

-Las señales de entrada ponderadas por los pesos de arco correspondiente son acumuladas en el nodo sumatorio.

$$suma_j = \sum_{i=1}^n x_i * w_i = X * W$$

-Este resultado es modificado por la función de activación, obteniendo la salida $y_i = f(suma_j)$.

Las redes neuronales artificiales se componen de numerosas neuronas simples conectadas entre sí. Tienen una capa de entrada (input layer), una o más capas intermedias, llamadas

capas ocultas (hidden layers) y una capa final con varios perceptrones llamada la capa de salida (output layer). Se habla de

aprendizaje profundo cuando la red neuronal está compuesta por múltiples capas ocultas. La figura 4 muestra un ejemplo de cada una.

¿Cómo aprenden las redes neuronales artificiales?

Las redes neuronales artificiales son estructuras de datos. Se crean e inician con valores aleatorios y luego se someten a un proceso de entrenamiento. El algoritmo de entrenamiento más utilizado se denomina retro-propagación del error (en inglés, back-propagation) a grandes ras-

gos, consiste de los siguientes pasos:

1- Inicializar los pesos w_{ij} y los umbrales iniciales de cada neurona. Hay varias posibilidades de inicialización, siendo las más comunes las que asignan valores aleatorios pequeños.

2- Para cada par (x_i, y_i) del conjunto de los datos de entrenamiento:

a) Obtener la predicción de la red para ese par. Esto se consigue propagando la entrada hacia adelante (feed forward).

b) Evaluar la función de error: comprobando qué tan lejos está la predicción del valor verdadero conocido.

c) Propagación hacia atrás con descenso de gradiente: calcular derivadas parciales de la función de error para encontrar el conjunto de pesos que minimizan la función de error.

d) Actualizar pesos w_{ij} y umbrales.

e) Calcular el error actual y volver al paso 2 si no es satisfactorio.

Este algoritmo se ilustra en la

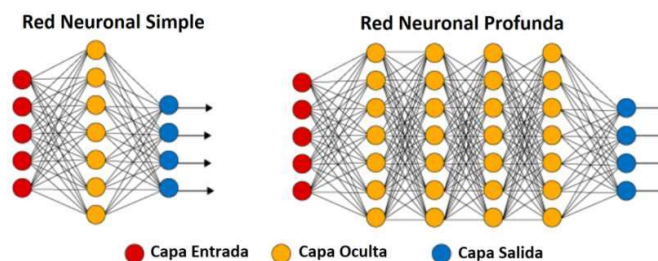


Figura 4. Redes neuronales simples vs. profundas

figura 5.

Generalmente, como función de costo se usa el error cuadrático medio. Es decir, que dado un par (x_k, d_k) correspondiente a la entrada k de los datos de entrenamiento se calcula la suma de los errores parciales resultantes de la diferencia entre la salida deseada d_k y la salida

¿A PARTIR DE QUÉ DATOS SE ENTRENA UN MODELO DE APRENDIZAJE AUTOMÁTICO?

El rendimiento de estos algoritmos de aprendizaje automático depende en gran medida de la representación del problema, que incluye cuáles datos serán relevantes para el aprendizaje y cómo se representan. Los datos a

COVID-19, el sistema de IA no examina directamente al paciente. En cambio, se le provee al sistema varias piezas de información relevante, como la temperatura y un audio de su tos. Cada pieza de información incluida en la representación del paciente se conoce como una característica. La inteligencia artificial aprende cómo cada una de estas características del paciente se correlaciona con los diferentes diagnósticos. Sin embargo, si a la IA se le diera el número de documento y la edad del paciente, tal vez no podría hacer predicciones útiles, ya que esos datos tienen una correlación baja o nula con cualquier diagnóstico de COVID. Esta dependencia de las representaciones es un fenómeno general que aparece a lo largo de la informática e incluso de la vida cotidiana. La elección de la representación tiene un enorme efecto en el rendimiento de los algoritmos de aprendizaje automático y por este motivo existe una línea de investigación especialmente dedicada a este

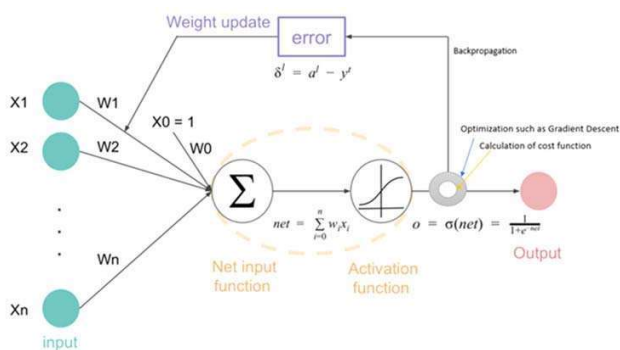


Figura 5. Algoritmo de aprendizaje por back-propagation

menudo existen en varias formas, como

que da la red, como se muestra en la figura 6.

$$E(w_{ij}, \theta_j, w'_{kj}, \theta'_k) = \frac{1}{2} \sum_p \sum_k \left[d_k^p - f \left(\sum_j w'_{kj} y_j^p - \theta'_k \right) \right]^2$$

Figura 6. Función de error

Sobre esta función de costo global se aplica algún procedimiento de optimización para minimizarla. Generalmente se aplica el método descenso por gradiente, calculando las derivadas parciales respecto a cada una de las variables w_{ij} de la función de costo, como se muestra en la figura 7.

$$\begin{aligned} \delta w'_{kj} &= -\epsilon \frac{\partial E}{\partial w'_{kj}} \\ \delta w'_{ji} &= -\epsilon \frac{\partial E}{\partial w'_{ji}} \\ \delta w'_{kj} &= \epsilon \sum_p \Delta_k^p y_j^p \quad \text{con} \quad \Delta_k^p = [d_k^p - f(v_k^p)] \frac{\partial f(v_k^p)}{\partial v_k^p} \\ \delta w_{ij} &= \epsilon \sum_p \Delta_j^p x_i^p \quad \text{con} \quad \Delta_j^p = \left(\sum_k \Delta_k^p w'_{kj} \right) \frac{\partial f(v_j^p)}{\partial v_j^p} \end{aligned}$$

Figura 7. Cálculo de gradientes

imágenes, texto, videos, audios, secuencias y series de tiempo. Por ejemplo, para diagnosticar

problema denominada Ingeniería de características (o en inglés, Feature Engineering) [9].

La ingeniería de características es el proceso de transformar los datos de entrada en datos que el algoritmo puede entender y aprovechar, jugando un papel clave en el análisis de grandes volúmenes de datos.

¿CÓMO SE PROCESAN LOS DATOS EN LA RED?

Es difícil para una computadora comprender el significado de los datos de entrada sensorial sin procesar, como la imagen en la figura 8, representada como una colección de valores de píxeles. La asignación de funciones de un conjunto de píxeles a una identidad de objeto es muy complicada. Aprender o evaluar este mapeo parece insuperable si se aborda directamente. El aprendizaje profundo resuelve esta dificultad dividiendo el mapeo complicado en una serie de mapeos simples anidados, cada uno descrito por una capa diferente del modelo (ver figura 8). La entrada ingresa en la capa visible, llamada así porque contiene las variables observables. Luego, una serie de capas ocultas extrae características cada vez más abstractas de la imagen. Estas capas se denominan ocultas porque sus valores se calculan internamente; en cambio, el modelo debe determinar qué conceptos son útiles para explicar las relaciones en los datos observados. Dados los píxeles, la primera capa puede identificar fácilmente los bordes, comparando el brillo de

los píxeles vecinos. Dada la descripción de los bordes de la primera capa oculta, la segunda capa oculta puede buscar fácilmente esquinas y contornos extendidos, que son reconocibles como colecciones de bordes. A partir de la descripción de la imagen de la segunda capa

El aprendizaje profundo es un enfoque viable para construir sistemas de IA que puedan operar en entornos complicados del mundo real. Ya que logra un gran poder y flexibilidad al representar el mundo como una jerarquía anidada de conceptos, con cada concepto definido en

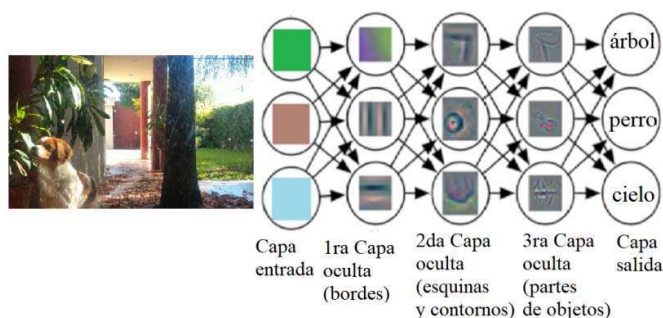


Figura 8. Ilustración de un modelo de aprendizaje profundo.

oculta en términos de esquinas y contornos, la tercera capa oculta puede detectar partes enteras de objetos específicos, encontrando colecciones de contornos y esquinas. Finalmente, esta descripción de la imagen en términos de las partes del objeto que contiene se puede utilizar para reconocer los objetos presentes en la imagen. Este tipo de redes profundas se denominan Redes Neuronales Convolucionales (en inglés, Convolutional Neural Networks, CNNs) [6]. En ellas las neuronas artificiales corresponden a campos receptivos de una manera muy similar a las neuronas en la corteza visual primaria de un cerebro biológico y por eso son muy efectivas para tareas de visión artificial, como el reconocimiento y clasificación de imágenes.

relación con conceptos más simples y representaciones más abstractas calculadas en términos de otras menos abstractas.

¿LOS SISTEMAS APRENDEN DESDE CERO?

Otro aspecto vital en la captura del conocimiento es la posibilidad de almacenarlo y reusarlo, de forma tal que cada nuevo sistema de inteligencia artificial no deba comenzar a aprender desde cero. La técnica que aborda esta problemática se denomina Transferencia de conocimiento (en inglés, Transfer Learning) [10] y consiste básicamente en construir modelos entrenados a gran escala, con el propósito de ser reusados. Estos modelos se denominan modelos pre-entrenados [11]. Algunos ejemplos son las redes AlexNet, BERT y GPT

que han logrado recientemente un gran éxito y se han convertido en un hito en el campo de la inteligencia artificial. Estos modelos poseen decenas de millones de parámetros y han sido entrenados con datos masivos. De esa forma capturan eficazmente el conocimiento y sus parámetros pueden ser ajustados (fine tuning) para resolver problemas similares.

HERRAMIENTAS PARA EL DESARROLLO DE SISTEMAS DE APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

El lenguaje Python es el más utilizado para temas de aprendizaje automático. Esto se debe a que es un lenguaje sencillo, con una licencia de código abierto, y con una curva de aprendizaje corta. Pero también a su ecosistema compuesto por librerías, frameworks, herramientas, y una enorme comunidad que lo respalda y trabaja para mejorarlo. Debido a que los modelos de AI tienen una alta demanda de potencia de procesamiento, las herramientas para su desarrollo deben contar con hardware especializado que aporte mayor eficiencia para satisfacer tales demandas. Además de las CPUs que proveen pocas decenas de núcleos, se utilizan las GPUs (Graphics Processing Units) con miles de núcleos, que no son procesadores de propósito general sino procesadores especiali-

zados para realizar solo ciertas operaciones, como procesamiento de imágenes y operaciones de coma flotante, pero capaces de trabajar con estos modelos. El rendimiento que se obtiene al trabajar con GPUs es muy considerable respecto a CPUs. El requerimiento de hardware especializado sigue vigente. Google en 2016 anunció una arquitectura nueva llamada TPU (Tensor Processing Unit) que prometía un rendimiento aún mayor al de las GPUs. Las TPUs permiten trabajar con matrices, permitiendo realizar operaciones vectoriales de forma más eficiente.

Existen poderosas librerías de Código abierto que pueden usarse y extenderse. Cada una tiene un propósito principal. Algunas son para visualización de datos, otras para cálculo numérico y análisis de datos. Otras en cambio integran todo lo necesario para trabajar con ML. En este apartado mencionamos algunas de ellas

- TensorFlow (TF) [12]:

desarrollada por Google. Es una plataforma de código abierto que permite la creación de modelos de aprendizaje automático. Su uso requiere cierta habilidad por parte del programador. Provee una herramienta adicional, TensorBoard, que permite visualizar los elementos utilizados.

- Keras [13]: es una biblioteca diseñada con el objetivo de

simplificar la creación y el manejo de los modelos de IA. Está construida sobre el framework TensorFlow2. Permite minimizar las acciones requeridas por el usuario al crear y entrenar estos modelos, y permite hacerlo usando GPUs o TPUs. Además tiene otras facilidades como exportar los modelos a JavaScript para ejecutarlos directamente en el navegador, o a TF Lite para ejecutarlos en Android. Es la herramienta elegida por los principiantes, debido a que su uso resulta intuitivo.

- PyTorch [14]: es una librería optimizada para el uso de tensores, los cuales comparten muchas similitudes con las matrices de NumPy. PyTorch permite realizar operaciones matemáticas aceleradas en hardware dedicado, lo que lo hace conveniente para diseñar arquitecturas de redes neuronales y entrenarlas en máquinas o en recursos de computación en paralelo. Utiliza tanto GPUs como CPUs.

- Caffe [15]: está desarrollado por el grupo de investigación de Berkeley. Es una de las primeras herramientas para IA y para redes de reconocimiento de imágenes. Está escrita en C++ y permite el uso de GPUs. Facebook la utilizó y trabajó junto a Caffe y la siguiente versión, Caffe2. Para usarla, no es necesario saber programar de forma avanzada, ya que provee bloques implemen-

tados y permite crear arquitecturas de forma declarativa.

Por otro lado, para facilitar la creación y manipulación de los modelos de AI se trabaja en entornos que disponibilizan y coordinan las herramientas necesarias. Los entornos más usados son:

- Anaconda [16]: es un entorno de trabajo que contiene las librerías más usadas y además permite instalar fácilmente paquetes y otras librerías necesarias para poder trabajar con los modelos descritos. En su página web, indica que fue construida por científicos de datos, para científicos de datos. Dentro de este entorno de trabajo, se ofrecen herramientas como Jupyter notebooks, Spider, Numpy, ScikitLearn, Pandas, Pytorch, TensorFlow, entre otras. Además, permite crear entornos de trabajo para poder trabajar en varios proyectos que requieren diferentes configuraciones, o diferentes librerías específicas sin generar problemas de incompatibilidad.

- Jupyter notebooks [17]: es un entorno de desarrollo interactivo basado en la web que presenta una estructura de cuaderno de trabajo, que permite combinar celdas de texto con código.

- Google Colab [18]: también conocido como "Colaboratory", es un servicio en la nube, que permite programar y ejecutar programas escritos en Python. Es una estructura muy parecida a los

cuadernos de Jupyter. Estos cuadernos ejecutan el código en los servidores de la nube de Google, lo que permite utilizar la potencia de ese hardware. No requiere configuración previa ya que tiene disponibles las librerías más utilizadas. En caso de necesitar altas prestaciones de cómputo, permite acceder de forma gratuita a GPUs o TPUs y poder utilizarlas de forma remota. Además permite compartir el contenido fácilmente. Por todo esto, es una de las herramientas más utilizadas.

Algunas de las librerías que son muy utilizadas para cálculo numérico, análisis de datos y visualización de datos son:

- Theano: desarrollada por la Universidad de Montreal. Es una librería para el cálculo numérico que se puede ejecutar en CPU o GPU. Permite definir, optimizar y evaluar expresiones matemáticas que involucren arreglos multidimensionales utilizando optimizaciones en el código para utilizar de mejor forma el hardware disponible.

- Numpy: es una librería que agrega un mejor soporte para vectores y matrices, y funciones útiles para procesar datos, así como estructuras de datos eficientes.

- Pandas: es una librería Python de código abierto escrita como extensión de NumPy para manipulación y análisis de datos. Proporciona estructuras de datos y herramientas de análisis de

datos optimizadas y fáciles de usar.

- Scikit-learn: es una librería Python formada por una gran cantidad de algoritmos de ML para clasificación, regresión, clustering, etc. Proporciona funcionalidades básicas que facilitan las tareas de preprocesado de los datos, creación y entrenamiento de los modelos.

- Matplotlib: es uno de los programas históricos dentro del ecosistema Python, creado inicialmente para simular el comportamiento gráfico de Matlab. Es ampliamente usado ya que genera gráficos de gran calidad.

Existen otros recursos propietarios o semi propietarios, tales como:

- Azure de Microsoft: Ofrece un servicio pago para ejecutar aplicaciones de ML. Azure ML Studio permite a los usuarios crear y entrenar modelos, que luego pueden ser convertidos en API que puedan ser consumidos por otros servicios. Ofrece una amplia variedad de algoritmos.

- Amazon: con su propuesta de ML en AWS (Amazon Web Services): ofrece modelos previamente entrenados que proporcionan servicios de inteligencia listos para ser usados en aplicaciones y flujos de trabajo. Estos servicios de inteligencia artificial se integran con facilidad a las aplicaciones del usuario.

- Watson de IBM: ofrece incorporar productos de inteligencia

artificial ya desarrollados en las aplicaciones para hacer predicciones más precisas, automatizar decisiones o herramientas para crear modelos desde cero.

APLICACIONES ACTUALES DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL

La inteligencia artificial no es patrimonio del futuro o de la ciencia ficción, sino que está inmersa ya en nuestra vida cotidiana. Luego de un largo invierno, el punto de quiebre se produjo entre 2011 y 2015 cuando los sistemas de software lograron igualar o exceder el desempeño de los humanos para determinadas tareas. En 2011, Watson, un software de IBM, ¡ganó el concurso de preguntas y respuestas 'Jeopardy!', logrando contestar preguntas de forma similar a como lo haría una persona. En 2014 una computadora logró superar con éxito la prueba de Turing, haciendo creer a un interrogador que era una persona quien respondía a sus preguntas. Otro hito en este sentido fue la victoria de AlphaGo de Alphabet sobre los mejores jugadores de Go, un juego de mesa más complejo que el ajedrez.

Los avances de los últimos años no se deben tanto a nuevos desarrollos teóricos o conceptuales, sino a la mayor cantidad de datos disponibles y al creciente poder computacional que permite una mayor velocidad a los algoritmos existentes. Aun

así, hoy en día los principales obstáculos son de recursos (capacidad de procesamiento y capital humano), pero se estima que estos irían disminuyendo con el correr del tiempo y el crecimiento del aprendizaje no supervisado (donde no es necesario proveer los datos de entrenamiento) y la posibilidad de re usar conocimiento a través de la transferencia [10].

La inteligencia artificial ha pasado a una etapa de expansión de las aplicaciones prácticas. Algunas de las más conocidas son: sistemas de traducción, sistemas de voz-texto, robots industriales, vehículos autónomos, asistentes virtuales (ej., Alexa, Cortana,

Siri), sistemas de trazabilidad, detección de fraudes, análisis de crédito y riesgos, sistemas de operaciones bursátiles, diagnósticos y prevención de enfermedades, depósitos automatizados, optimización de supplychain, publicidad, análisis de tendencias de consumo, electro-domésticos inteligentes e inter-conectados, reconocimiento de rostros, arte digital (ver figura 9), entre otras.

INTELIGENCIA ARTIFICIAL A NIVEL LOCAL

El desarrollo de la inteligencia artificial exige cooperación y coordinación entre diversos tipos de actores: conexión entre industria, gobierno y academia; coordinación público-privada para



Figura 9. Arte digital. La inteligencia artificial crea pinturas imitando el estilo de cualquier artista. La figura muestra una fotografía de un paisaje y su versión adaptada a los estilos de "The Wreck of a Transport Ship" de M. Turner, "The Starry Night" de Van Gogh y "The Scream" de Edvard Munch.

financiamiento y elaboración de políticas públicas, y equipos multidisciplinarios en la conformación de los grupos de estos tres sectores. En Argentina existe consenso respecto a la importancia que tendrá la inteligencia artificial en un futuro cercano como impulsor del crecimiento económico y el progreso social.

Desde la arista del gobierno, Argentina lleva adelante una estrategia nacional en materia de tecnologías de la información y las comunicaciones. Su objetivo es brindar mejores servicios a los ciudadanos, promover la inclusión digital e impulsar la actividad económica y la generación de nuevos empleos. Una de las principales líneas de acción de esta Agenda Digital es el Plan Nacional de Inteligencia Artificial, que prevé la creación de una red para impulsar las investigaciones y desarrollos en esta área.

En la dimensión empresarial, existen numerosas empresas que ofrecen productos de IA. También están radicados en el país grupos de trabajo de las principales plataformas de inteligencia artificial del mundo, por ejemplo Azure Machine Learning de Microsoft, Watson de IBM, Google Brain de Google.

Y paralelamente, en la academia existen numerosos grupos de investigadores trabajando en inteligencia artificial desde hace más de 40 años. Siendo pionera la Sociedad Argentina de Infor-

mática (SADIO) que organiza anualmente el Simposio Argentino de Inteligencia Artificial (ASAI). Allí se reúnen los principales investigadores argentinos a discutir sobre el tema.

También participan en congresos internacionales, en especial International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI) e International Conference on Machine Learning (ICML).

Por su parte, la Facultad de Informática de la Universidad Nacional de La Plata ofrece numerosos cursos de grado y posgrado sobre inteligencia artificial y en particular sobre aprendizaje automático y profundo. También se llevan adelante proyectos de investigación y tesis de grado y posgrado. La tabla 1 muestra los proyectos más recientes vinculados a inteligencia artificial, radicados en el LIFIA de la Facultad de Informática de la UNLP y sus colaboradores del Centro de Altos Estudios en Tecnología Informática, CAETI, de la Universidad Abierta Interamericana.

Actualmente la adopción de la inteligencia artificial es dispar. Algunos sectores, especialmente los vinculados a la tecnología, las telecomunicaciones, las finanzas y el transporte, han realizado inversiones significativas para acelerar su adopción. Otros, en cambio, han quedado más rezagados por los desafíos técnicos, comerciales y regulatorios. En el plano inter-nacional,

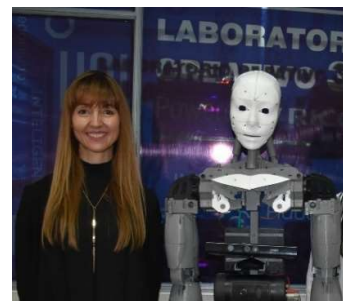


Figura 10. Dra. Pons con el Robot bípedo implementado en el CAETI.

EE. UU., Canadá y Japón han sido los primeros países en formular una estrategia oficial explícita para inteligencia artificial, en el año 2016. Poco después, en 2018 ya más de 13 países habían elaborado estrategias concretas o estaban trabajando en eso. Los ejes centrales de los planes son la generación de con-



Figura 11. Lic. Gonzalo Zabala entrenando drones inteligentes en el CAETI.

Tabla1. Proyectos de IA en el Lfia y el CAETI.

Título del proyecto	Responsables	Resumen
Inteligencia Artificial Neuro simbólica [19] [20] [21] [22]	Dra. Claudia Pons, Gabriela Perez, Gabriel Baum (Comisión de Investigaciones Científicas y UNLP y UAI)	Se contribuye a la evolución de la inteligencia artificial a través de la combinación de los conceptos y métodos de dos enfoques predominantes pero muy diferentes entre sí: la IA simbólica, inspirada en la lógica matemática por un lado y la IA no simbólica, que se centra en la construcción de modelos matemáticos predictivos a partir de grandes conjuntos de datos de muestra, por otro lado.
Bioinformática en oncogenómica funcional – Bioplat [23] [24]	Dr. Matías Butti, Genaro Camele (UNLP y UAI)	Se desarrolló una Plataforma denominada Bioplat que realiza la identificación y validación bioestadística de marcadores moleculares con potencial poder pronóstico/predictivo en cáncer. Se aplica machine learning (en particular Feature selection) sobre datos transcriptómicos y de seguimiento clínico.
Identificación de genes asociados a virulencia de Streptococcus pyogenes utilizando técnicas de Machine Learning sobre secuencias de genoma completo	Nicolás Ferella, Pablo Pizio, Claudia Pons (UNLP) Dra. Josefina Campos (Instituto Malbran)	El objetivo de este trabajo es hacer uso de las técnicas de Machine Learning para detectar posibles genes de virulencia de la bacteria Streptococcus pyogenes, aportando el uso de nuevas tecnologías y herramientas de análisis de datos.
Inteligencia Computacional: Framework para modelado automático de perfiles educativos [25]	Dra. María Daniela López De Luise (UNLP y UAI)	Se creó un software inteligente capaz de realizar minería de datos, en conjunto con un sistema inferencial que evalúa y diagnostica la secuencia correcta de estímulos que se adapte a la personalidad y preferencias del alumno, maximizando la experiencia de aprendizaje de contenidos con alto nivel de complejidad.
Transfer Learning en Machine Learning para la clasificación de productos en el Banco Alimentario de La Plata [26]	Agustin De Luca, Matías Irigoitia, Claudia Pons y Gabriela Pérez (UNLP)	Se aplicaron algoritmos de aprendizaje automático, utilizando redes convolucionales para detectar los objetos, clasificarlos para el Banco Alimentario de La Plata, usando modelos pre entrenados para maximizar la eficacia y reusar el conocimiento.
Robot bípedo: creación, arquitectura y modelo de control de estabilidad	Mg. Ing. Néstor Balich (UAI)	Se diseñó y desarrolló un robot bípedo mediante impresora 3D. Posee un modelo de control que le permite moverse en tiempo real articulando algoritmos de estabilidad y desplazamiento. Tiene integrados algoritmos de reconocimiento del habla y chatbots con tecnología Watson IBM (figura 10).
Laboratorio de Robótica y Tecnología Educativa	Lic. Gonzalo Zabala y Claudia Pons (UAI)	Investigación en robótica, Diseño y desarrollo de proyectos educativos con robótica, Desarrollo de material didáctico para robótica educativa, Organización de competencias de robótica (figura 11).
Detección y Clasificación de Zero-Day Malware a través de Data Mining y Machine Learning [27]	Augusto Recordon, Silvia Ruiz Diaz, Claudia Pons (UNLP)	Se implementó una solución capaz de automatizar la clasificación de nuevos tipos de malware, conocidos como zero-day malware, a través de Data Mining (para la obtención de los datos a utilizar) y de Machine Learning (para la clasificación de las amenazas).
Inteligencia Artificial y Computación Cuántica en Finanzas [28]	Juan Pablo Braña Alejandra, M. J. Litterio y Alejandro Fernandez (UNLP y UAI)	Se investigan las aplicaciones en el campo de las Finanzas y el Trading Algorítmico de la Computación Cuántica en conjunto con la Inteligencia Artificial utilizando los simuladores de la plataforma cloud de IBM-Q.

diciones (económicas y regulatorias) propicias para el desarrollo de investigación en inteligencia artificial, la captación de talento, y la formación de ecosistemas digitales nacionales.

CONCLUSIONES

En este artículo se han presentado de manera general los conceptos teóricos y las nociones intuitivas que conforman a la nueva Inteligencia Artificial, en especial al Aprendizaje de Máquina basado en Redes Neuronales Artificiales. Se mencionaron sus orígenes, su evolución y sus principales herramientas técnicas.

Finalmente se describieron algunas aplicaciones y desarrollos a nivel local.

Es de destacar que los conceptos teóricos fundamentales detrás de la nueva inteligencia artificial no son realmente nuevos, sino que datan de hace más de 50 años. Los avances recientes no se deben tanto a nuevos desarrollos teóricos, sino a la mayor cantidad de datos disponibles y al creciente poder computacional que permite una mayor velocidad a los algoritmos existentes.

Dada su naturaleza inductiva a partir de datos masivos (y generalmente no depurados), algunas aplicaciones de inteligencia artificial pueden plantear nuevas cuestiones éticas y legales, por ejemplo, relacionadas con la responsabilidad o la toma de decisiones potencialmente ses-

gadas. En este sentido, debe garantizarse que la inteligencia artificial se desarrolle y aplique dentro de un marco apropiado que promueva la innovación, pero al mismo tiempo proteja los valores y derechos fundamentales y que se oriente al bien común.

REFERENCIAS

- [1] S. Russell y P. Norvig, Artificial Intelligence. A Modern Approach. Copyright © 2021, Pearson Education. 4ta edición, 2021.
- [2] G. Meyrink, Der Golem, 1915.
- [3] A. Lovelace, «Sketch of the Analytical Engine con las notas de Ada Lovelace» 1842.
- [4] A. Turing, «Computing machinery and intelligence», Revista Mind, 1950.
- [5] E. Alpaydin, Machine Learning: The New AI. MIT Press, 2016.
- [6] I. Goodfellow, Y. Bengio y A. Courville, Deep Learning, Adaptive Computation and Machine Learning series, 2016.
- [7] Y. LeCun, Y. Bengio y G. Hinton, «Deep learning.» Nature, 2015, 521, 436-444.
- [8] M. Minsky y S. Papert, (Perceptrons: an introduction to computational geometry, 1969.
- [9] G. Dong y H. Liu, Feature Engineering for Machine Learning and Data Analytics. CRC Press, 2018.
- [10] S. Jialin y Q. Yang, «A Survey on Transfer Learning» IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2010, (22)10, 1345-1359,.
- [11] X. Han, Z. Zhang, N. Ding, Y. Gu, X. Liu, Y. Huo, et al., «Pre-Trained Models: Past, Present and Future» AI Open, 2021, 2, 225-250.
<https://doi.org/10.1016/j.aiopen.2021.08.002>.
- [12] «TensorFlow,» [En línea]. Available:
<https://www.tensorflow.org/>.
- [13] «Keras,» <https://keras.io/>.
- [14] «Pytorch,» <https://pytorch.org/>.
- [15] «Caffe,» <https://caffe.berkeleyvision.org/>.
- [16] «Anaconda,» <https://www.anaconda.com/>.
- [17] «Jupyter notebooks,» <https://jupyter.org/>.
- [18] «Google Colab,» <https://colab.research.google.com>
- [19] P. Negro y C. Pons, «Artificial Intelligence techniques based on the integration of symbolic logic and deep neural networks: A systematic review of the literature» Revista Iberoamericana de Inteligencia Artificial, 2022, 25 (69), 13-41.
- [20] I. Joakin y C. Pons., Aplicación de tecnologías de aprendizaje automático para predecir negocios y tomar decisiones empresariales. Tesis de Licenciatura en Informática de la Universidad Nacional de La Plata, 2021.
- [21] J. Suarez, C. Pons y G. Pérez, Estudio de métodos y técnicas de aprendizaje por transferencia en el contexto de aprendizaje automático, Tesis de Licenciatura en Informática. Universidad Nacional de La Plata., 2021.

[22] M. Maciel y C. Pons, «Architecture to support the Integration of Heterogeneous External Knowledge in a Rules Engine». Studies in Engineering and Exact Sciences (ISSN: 2764-0981), 2022.

[23] J. Rosa, M. Tajerian, Y. Zin, M. Brunner, N. Lopez y M. Butti, «Development, implementation and initial results of CDSS recommendations for patients at risk of hereditary breast cancer». MedInfo-2021.

18th. World Congress on Medical and Health Informatics., 2021.

[24] G. Camele,, S. Menazzi, H. Chanfreau y M. Butti, «Multimix: a cloud-based platform to infer cancer genomic and epigenomic events associated with gene expression modulation».

Bioinformatics, 2021; 678.

[25] D. López De Luise,, B. Saad y T. Ibaca, «Autistic Verbal Behavior Language Parameterization,». Handbook of Artificial Intelligence in Healthcare. Intelligent Systems Reference Library, vol 211, Springer.

[26] A. De Luca, M. Irigoitia, G. Pérez y C. Pons, «Uso de la Técnica de Transfer Learning en Machine Learning para la Clasificación de Productos en el Banco Alimentario de La Plata», Congreso Nacional de Ingeniería Informática / Sistemas de Información (CoNallSI). ISBN 978-950-42-0213-4, 2021.

[27] A. Recordon, S. Ruiz Diaz y C. Pons, «Detección y clasificación de Zero-Day Malware

través de Data Mining y Machine Learning». 50 JAIO. Jorna-das Argentinas de Informática. Sociedad Argentina de Informática, 2021.

[28] J. Braña, M. Llisterio y A. Fernandez, «Optimización de Carteras de Inversión: Un Benchmark con Modelos Clásico, de Computación Cuántica y de Hibridación AI /QC». XXIII Workshop de Investigadores en Ciencias de la Computación (WICC), 2021.

