

Convergencia de la inteligencia artificial y la nanotecnología

Convergence between artificial intelligence and nanotechnology

César Alberto Torres Solís,* Mario Alan Quiroz Juárez*,†

ABSTRACT: Nanotechnology and artificial intelligence are two scientific fields that individually have promoted a scientific and technological revolution across the globe. While nanotechnology enables the manipulation of matter at nanometric scales to develop applications and technologies with unique properties, artificial intelligence emerges as a set of effective techniques to potentiate computer systems that perform tasks of classification, optimization, prediction, and pattern recognition, which are typically attributed to humans. The intersection between both fields constitutes a multidisciplinary and modern research area that promises to boost a new generation of technologies and address critical challenges that contribute to the advancement of science. This work presents a general review of the efforts reported in the literature where the self-learning attributes of some artificial intelligence algorithms are exploited in the context of nanotechnology. Additionally, future trends and perspectives where these fields converge are discussed.

KEYWORDS: artificial intelligence, nanotechnology, neural networks, nanomaterials, nanophotonic.

RESUMEN: La nanotecnología y la inteligencia artificial son dos campos científicos que individualmente han promovido una revolución científica y tecnológica en todo el mundo. Mientras la nanotecnología habilita la manipulación de materia a escalas nanométricas para desarrollar aplicaciones y tecnologías con propiedades únicas, la inteligencia artificial reúne un conjunto de técnicas efectivas para potencializar sistemas informáticos que desempeñen tareas de clasificación, optimización, predicción y reconocimiento de patrones, las cuales son típicamente atribuidas a los seres humanos. La intersección entre ambos campos constituye un área de investigación multidisciplinaria y moderna que promete impulsar una nueva generación de tecnologías y atender retos clave que contribuyan al avance de la ciencia. En este artículo se presenta una revisión general de los esfuerzos reportados en la literatura donde se explotan los atributos de autoaprendizaje de algunos algoritmos de inteligencia artificial en el contexto de nanotecnología. Adicionalmente, se discuten tendencias y perspectivas futuras donde convergen estos campos de investigación científica.

PALABRAS CLAVE: inteligencia artificial, nanotecnología, redes neuronales, nanomateriales, nanofotónica.

Recibido: 4 de noviembre, 2022. Aceptado: 22 de febrero, 2023. Publicado: 10 de marzo, 2023.

* Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Juriquilla, Qro.

† Autor de correspondencia: majq@fata.unam.mx



Introducción

La nanotecnología ha emergido como un campo científico multidisciplinario donde se busca estudiar, diseñar, sintetizar, controlar y manipular materia a escalas nanométricas, específicamente aquella que se encuentra en el rango de 1 a 100 nm. En estas escalas, la materia adquiere propiedades y funciones únicas que incentivan el desarrollo de tecnologías y aplicaciones novedosas. En 1959, el físico y ganador del Premio Nobel Richard Feynman anticipó las potenciales oportunidades que ofrecía la manipulación de materia a nivel atómico. Aun cuando la era de oro de la nanotecnología empezó en la década de los ochenta del siglo pasado con el descubrimiento de los fullerenos y el desarrollo de los nanotubos de carbón —por mencionar algunos ejemplos destacados— fue hasta el siglo XXI cuando se registró un crecimiento exponencial de aplicaciones industriales. Después de este hecho, en poco menos de medio siglo, la nanotecnología se ha convertido en la base de notables aplicaciones que impactan la vida diaria. En el sector salud, por ejemplo, la nanotecnología ha revolucionado los dispositivos médicos de diagnóstico incluyendo biosensores, sistemas de administración de medicamentos y sondas de imagen (Hulla *et al.*, 2015). Es interesante señalar que, para finales del año 2022, se estima que el valor del mercado mundial de los nanomateriales superará los 90,500 millones de dólares (Yan *et al.*, 2020). Por supuesto, a raíz de la constante exposición humana a nanopartículas han surgido disciplinas científicas, como la nanotoxicología, que exploran los efectos adversos que estas nanopartículas podrían causar en la salud (Singh *et al.*, 2020).

En paralelo, la inteligencia artificial (IA) ha experimentado un desarrollo sin precedentes durante los últimos años, habilitando avances tecnológicos a un ritmo acelerado en múltiples contextos. El análisis de imágenes para diagnóstico médico (Lalmuanawma *et al.*, 2020; Razzak *et al.*, 2018; Shen *et al.*, 2017), la modelación de sistemas (Brunton *et al.*, 2022 y 2016; Chen *et al.*, 2008) y la superresolución en imágenes (Wetzstein *et al.*, 2020; Yang *et al.*, 2019), reconocimiento de patrones para clasificación (Quiroz-Juárez *et al.*, 2021) son algunas aplicaciones distinguidas donde los algoritmos de inteligencia artificial ofrecen desempeños sobresalientes. La IA se puede definir como una disciplina de las ciencias computacionales que reúne un conjunto de técnicas que buscan crear sistemas que realizan tareas que normalmente son atribuidas a los seres humanos, con el fin de desempeñar tareas en las que algoritmos clásicos ofrecen resultados parcialmente satisfactorios o son costosos de implementar (Jackson, 2019). Esta disciplina combina el conocimiento de diferentes campos como biología evolutiva, ciencias de la computación, matemáticas y neurociencias. Desde sus inicios, los algoritmos de IA han demostrado una alta capacidad para reconocer patrones y extraer información relevante, sumergida en enormes cantidades de datos, lo cual sería imposible de lograr a través de una inspección visual estándar (Goodfellow *et al.*, 2016; Murdoch *et al.*, 2013). Es interesante mencionar como un aspecto inherente a la mayoría de los algoritmos de IA, la ca-

rencia de una comprensión razonable de los mecanismos internos que llevan a la toma de decisiones para hacer una predicción en particular. En modelos simples, como árboles de decisión, es posible realizar un seguimiento para comprender el engranaje que da lugar a las decisiones. Desafortunadamente, la cantidad de problemas que se pueden resolver con este tipo de modelos es limitada. En modelos complejos como redes neuronales, donde a menudo exhiben altos rendimientos para una gran variedad de problemas, suelen tratarse como algoritmos de caja negra, principalmente por la alta complejidad que presenta la interpretación de la sinapsis o conexiones formadas durante el entrenamiento y la alta dimensionalidad de las características que el modelo identifica como importantes para tomar decisiones. Sin embargo, recientemente se han reportado numerosos esfuerzos para explicar y/o interpretar el funcionamiento de estos algoritmos (Arrieta *et al.*, 2020).

La combinación de la IA y la nanotecnología surge como una propuesta novedosa que promete resolver algunos de los retos clave presentes en nanomateriales, nanofotónica y desarrollo de nanodispositivos. En la literatura se han reportado diferentes esfuerzos que implementan técnicas de IA en investigación básica y aplicada en torno a nanociencias, por ejemplo, para la síntesis de nanomateriales acelerando el proceso de optimización de parámetros, diseño de nanodispositivos, y estudio de propiedades térmicas y dinámicas de nanofluidos (Gadzhimagomedova *et al.*, 2022). En este artículo se bosqueja un contexto general donde la inteligencia artificial y la nanotecnología convergen para potencializar aplicaciones y desarrollo tecnológico. Se ha demostrado que el puente entre la inteligencia artificial y diferentes campos del conocimiento puede conducir a la generación de aplicaciones de alto impacto para la sociedad.

Este artículo está organizado de la siguiente manera: en la primera sección se presenta una breve discusión acerca de una de las técnicas más sobresalientes de la inteligencia artificial: las redes neuronales artificiales y su esquema de aprendizaje; en la siguiente sección se describen algunos de los esfuerzos que explotan los atributos de los algoritmos de IA para abordar desafíos dentro del campo de la nanotecnología, y, por último, se presentan las conclusiones.

Aprendizaje automático

Aunque en pocas ocasiones lo reconocemos de forma consciente, nuestro cerebro posee enormes capacidades para resolver problemas de clasificación, segmentación y reconocimiento de patrones. Por ejemplo, podemos identificar rostros con alta precisión dentro de entornos ruidosos donde participan otros objetos o personas, de hecho, somos capaces de hacer este reconocimiento observando perfiles del rostro a los que no se había tenido acceso antes o en entornos con baja iluminación (Krogh, 2008). Otra notable capacidad del cerebro humano es la habilidad para reconstruir objetos en el espacio a

partir de proyecciones bidimensionales como imágenes. Estos ejemplos permiten evidenciar uno de los aspectos más fascinantes del cerebro humano, la capacidad de aprender, es decir, la capacidad de generalizar conocimiento a partir de un conjunto de experiencias. Esta función cognitiva inspiró el desarrollo del aprendizaje automático, aprendizaje de maquina o también conocido como *machine learning*.

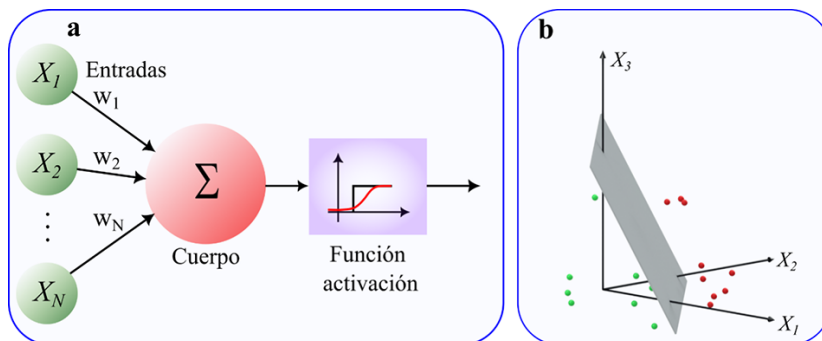
El aprendizaje automático es una rama de la inteligencia artificial que a través de algoritmos se encarga de crear sistemas informáticos capaces de aprender a partir de una colección de datos. Esto permite remplazar la programación explícita de las partes —que, acopladas, ayudan a resolver un problema— por la utilización de algoritmos capaces de encontrar la solución de forma autónoma. No obstante, la calidad y el tamaño del conjunto de datos son aspectos significativos e influyen en el rendimiento de los algoritmos. El aprendizaje automático integra una vasta lista de técnicas, entre las cuales podemos mencionar: árboles de decisión, máquinas de soporte vectorial, clasificadores bayesianos, regresiones no lineales, reglas de asociación y redes neuronales. No obstante, las redes neuronales artificiales son probablemente los modelos computacionales más populares dentro del aprendizaje automático.

En 1943, McCulloch y Pitts propusieron un modelo simplificado de una neurona biológica (McCulloch *et al.*, 1943). La descripción matemática consistía en un interruptor (activado/desactivado) controlado por la suma de las entradas de neuronas vecinas multiplicadas por un factor de ponderación, también llamado peso sináptico (Jackson, 2019). El valor del peso para cada entrada reflejaba la fuerza sináptica entre neuronas, y el signo (positivo o negativo) imitaba la acción de excitación o inhibición propia de una neurona biológica (Krogh, 2008). Este modelo marcó el camino para la creación de redes neuronales artificiales, después de que se mostrara que el acoplamiento de varias neuronas permitía desarrollar operaciones sofisticadas de clasificación (Mitchell *et al.*, 1990; Rosenblatt, 1958) y reconocimiento de patrones (Bishop, 2006).

A este respecto, las redes neuronales artificiales constituyen un grupo interconectado de neuronas artificiales dispuestas en capas (entrada, ocultas y salida), que transmiten señales a sus neuronas adyacentes. A pesar de que las neuronas artificiales son una versión extremadamente simplificada de las neuronas biológicas, estas poseen cuatro partes principales que se correlacionan directamente con su contraparte biológica: entrada, cuerpo o soma (donde se lleva a cabo el procesamiento de la información), función de activación y salida (figura 1a). Como se mencionó anteriormente, las características o entradas son ponderadas por los pesos sinápticos cuya función principal es incrementar o inhibir el estado de activación de la neurona. Aquí, el término “características” hace referencia a los rasgos que hacen descriptivo un objeto dado y, en conjunto, determinan las coordenadas de un vector definido dentro del llamado espacio de características. Finalmente, la salida de cada neurona es controlada por una función de activación, o limitadora, imponiendo una

transformación sobre la salida antes de transmitir la información a las neuronas vecinas (figura 1a). Típicamente, las neuronas artificiales se nombran a partir de la función de activación incluyendo, por ejemplo, neurona RELU (unidad lineal rectificada), neurona ADALINE (unidad adaptiva lineal), neurona sigmoide (unidad con función logística). En este punto vale la pena mencionar que las redes neuronales pueden tener varias capas ocultas y un número arbitrario de neuronas en cada una de ellas. Cuando el número de capas ocultas excede de dos, la red neuronal se denomina profunda (Nielsen, 2015). Esto se relaciona directamente con aprendizaje profundo o *deep learning*, un subconjunto del aprendizaje de máquina que automatiza la obtención de las características y concentra modelos que disponen de una gran cantidad de parámetros ajustables.

FIGURA 1. (a) Modelo de una neurona artificial constituido por entradas o características X_1, X_2, \dots, X_N , pesos sinápticos w_1, w_2, \dots, w_N , cuerpo o soma, función de activación y salida o axón. (b) Representación de un problema de clasificación binaria para clases linealmente separables en el espacio de características de tres dimensiones.



Fuente: Elaboración de los autores.

La tarea de aprendizaje en un sistema informático se convierte en un proceso iterativo que busca minimizar una cierta medida de costo aplicando cambios en los pesos sinápticos. En general, existen tres paradigmas de aprendizaje: aprendizaje por refuerzo, aprendizaje no supervisado y, aprendizaje supervisado. El aprendizaje por refuerzo hace uso de un esquema de recompensas y penalizaciones, donde el agente (modelo a entrenar) parte de un estado inicial dado y ejecuta una acción que conduce a una interacción con el entorno. En la siguiente iteración, el agente recibe retroalimentación del ambiente en términos de una recompensa (en caso de acierto) o penalización (en caso de desacierto) según sea el caso. Por su parte, el aprendizaje no supervisado es un método que habilita la agrupación de conjuntos de datos en función de similitudes y patrones en común, sin la necesidad de poseer información *a priori* de etiquetas o estructuras. Por último, el aprendizaje supervisado busca ajustar los parámetros del modelo para que sea capaz de repro-

ducir una salida lo más parecida posible a la deseada o conocida. Este objetivo se logra ingresando ejemplos etiquetados y minimizando el error producido entre la salida estimada por el modelo y la salida “correcta”.

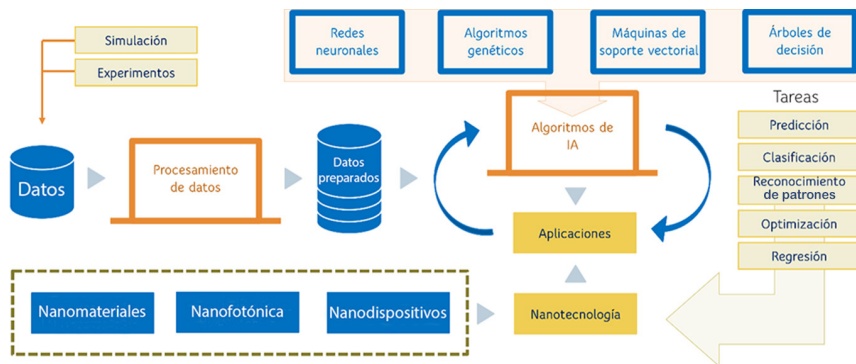
Específicamente, las redes neuronales artificiales que aprenden de manera supervisada se someten a dos fases, la fase de entrenamiento y la fase de prueba. Durante la fase de entrenamiento se desarrolla un proceso iterativo donde se presentan ejemplos con etiquetas conocidas y se optimizan los pesos sinápticos a partir de una regla de adaptación; mientras que en la etapa de prueba se introduce un conjunto de datos fuera del entrenamiento para evaluar el desempeño de la red neuronal y verificar la capacidad de generalización sobre las clases predichas. El porcentaje de reconocimiento para cuantificar el rendimiento de la red neuronal, denominado *accuracy*, se calcula como la razón de verdaderos positivos más los verdaderos negativos con respecto a la suma de los verdaderos positivos, verdaderos negativos, falsos positivos y falsos negativos.

Típicamente, la capa de salida de redes diseñadas para clasificación contiene neuronas con funciones de activación *softmax*; una función exponencial normalizada que habilita la representación de una distribución categórica, en otras palabras, permite representar la salida de la neurona como una distribución de probabilidad sobre las clases a ser predichas, por lo tanto, la suma de las salidas es igual a 1 (Bishop, 2006; Goodfellow *et al.*, 2016). En casos de clasificación binaria cuyos datos son linealmente separables, los pesos sinápticos definen la ecuación del hiperplano permitiendo separar ambas clases dentro del espacio de características. En dos dimensiones el hiperplano es una línea mientras que en tres dimensiones es un plano como se muestra en la figura 1b.

Inteligencia artificial (IA) y nanotecnología

Existen varias motivaciones para integrar algoritmos de IA en nanotecnología (figura 2). Primero, la interpretación correcta de resultados experimentales en escalas nanométricas frecuentemente es asistida por simulaciones numéricas debido a que el desarrollo de aproximaciones analíticas es complejo. En este sentido, los algoritmos de aprendizaje automático han demostrado altos desempeños para realizar estimaciones paramétricas de modelos predefinidos a partir de datos (Sacha *et al.*, 2013). En segundo lugar, las técnicas de *machine learning* son capaces de reconstruir la función de transferencia de un sistema, es decir, la relación de los datos de salida con respecto a los datos de entrada. Esto permite elucidar el mapeo que existe entre variables físicas controlables (temperatura, presión, volumen) y propiedades funcionales de un nanomaterial, por ejemplo. En última instancia, los algoritmos de IA pueden guiar el diseño de dispositivos novedosos estimando las condiciones experimentales para alcanzar resultados específicos (So *et al.*, 2020). La figura 2 muestra un diagrama de flujo, el cual refleja la integración de algoritmos de inteligencia artificial en el contexto de nanotecnología.

FIGURA 2. Flujo de trabajo representando la implementación de algoritmos de IA en el contexto de nanotecnología.



Nota: El proceso inicia con la adquisición, procesamiento y preparación del conjunto de datos. La selección del modelo de aprendizaje automático (redes neuronales, algoritmos genéticos, máquinas de soporte vectorial, árboles de decisión, etc.) depende directamente de la aplicación y el tipo de tarea que se resolverá (predicción, clasificación, reconocimiento de patrones, optimización o regresión).

Fuente: Elaboración de los autores.

Modelado y simulación de nanoestructuras

Las simulaciones numéricas representan una herramienta útil para evaluar nuevos conceptos y acelerar procesos de diseño. En nanotecnología, la dinámica molecular es una técnica ampliamente usada para modelar y simular nanomateriales (Asproulis *et al.*, 2009). Desafortunadamente, el tiempo de cálculo y los recursos computacionales para desarrollar simulaciones de “grano fino” son altamente demandantes y, con frecuencia, están limitadas por el tamaño de la molécula que se pretende simular (Rapaport *et al.*, 2004). Asproulis *et al.*, (2009) mostraron que las redes neuronales artificiales con arquitecturas multicapa pueden reducir la demanda computacional de simulaciones de dinámica molecular. Los autores entrenaron una red neuronal para predecir las trayectorias de 560 moléculas alrededor de un cilindro hueco que se encontraban sometidas a diferentes esfuerzos cortantes. Después del entrenamiento, la red neuronal es capaz de predecir las coordenadas de las moléculas usando la información del esfuerzo y el paso de tiempo.

Una estrategia que ha ganado fuerza es el entrenamiento de redes neuronales con datos de simulación numérica para resolver diferentes tareas. Sacha *et al.* (2009), por ejemplo, entrenaron una red neuronal multicapa con simulaciones numéricas para estimar la distancia entre punta-muestra, y la constante dieléctrica de un experimento de microscopía de fuerza electrostática, donde la punta escaneaba un nanotubo de carbón colocado en una muestra dieléctrica semi infinita. La misma metodología se probó en un sistema en el que se desconocían los parámetros geométricos de la sonda, tales como la longitud, el ángulo medio y el radio del vértice. Los resultados mostraron que

la red neuronal es capaz de estimar la constante dieléctrica de la muestra sin poseer información *a priori* de la punta. Por su parte, la determinación de las propiedades elásticas de películas delgadas también se ha realizado a través de redes neuronales entrenadas con datos de simulaciones numéricas basadas en el método de elemento finito. Una vez que el algoritmo se ha entrenado, la red se usa para estimar el módulo de Young, la densidad, la relación de Poisson y el espesor de la película (Xu *et al.*, 2004). Incluso se han diseñado redes neuronales para modelar las curvas de carga-desplazamiento de pruebas de nanoindentación. El algoritmo fue entrenado con respuestas de indentación para diferentes parámetros geométricos y materiales, las cuales fueron simuladas por modelos de elemento finito (Muliana *et al.*, 2002).

En nanofotónica, convencionalmente, el modelado consiste en predecir las propiedades ópticas de estructuras fotónicas resolviendo las ecuaciones de Maxwell que gobiernan la propagación de la luz en ambientes fotónicos complejos a través de métodos numéricos (So *et al.*, 2020). Con la integración de algoritmos de IA se ha logrado estimar soluciones removiendo el alto costo computacional, por caso, para aproximar la sección transversal de dispersión en nanopartículas núcleo-coraza (Peurifoy *et al.*, 2018). Incluso se ha demostrado la posibilidad de realizar predicciones de las propiedades ópticas de un escenario específico a partir del conocimiento generalizado de otro problema físico que se encuentra relacionado. Este tipo de estrategia se conoce como transferencia de conocimiento, y consiste en aprovechar un modelo de aprendizaje automático previamente entrenado para resolver una tarea diferente pero que se puede enmarcar dentro del mismo contexto (Qu *et al.*, 2019).

Diseño de nanodispositivos

Los algoritmos de IA no solo se han implementado para asistir simulaciones, también han permitido explorar las relaciones no lineales en procesos de deposición de óxido conductores transparentes, cuyas películas se emplean como electrodos de dispositivos optoelectrónicos (diodos, *displays*, celdas solares). Particularmente, se ha reportado el análisis de los efectos del proceso de deposición sobre las propiedades eléctricas y la tasa de deposición de películas delgadas de $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZnO}$ usando redes neuronales que aprenden de manera supervisada retro propagando el error (Kim *et al.*, 2009). Las redes neuronales artificiales también han tenido aplicaciones importantes en el modelado y predicción de las características de amplificación de pulso (como la ganancia del amplificador saturado) y la eficiencia en la mezcla de ondas en amplificadores ópticos de semiconductor de puntos cuánticos (Ababneh *et al.*, 2006). Una notable característica de modelos basados en redes neuronales es la reducción del tiempo de cálculo en comparación con simulaciones numéricas estándar.

En el contexto de las comunicaciones, típicamente, el diseño de nanoan-

tenas se basa en la tecnología de radiofrecuencia. No obstante, en los últimos años se han explotado las características que ofrecen los algoritmos genéticos para mejorar la estructura de estos dispositivos. Los algoritmos genéticos son un subconjunto de la IA inspirados en la evolución biológica en donde, a partir de un criterio, se determina cuáles individuos son aptos para sobrevivir y cuáles son propensos a desaparecer. Por ejemplo, Feichtner *et al.* (2012) mostraron, utilizando un algoritmo genético, poder hallar una nueva geometría de antenas que superan el rendimiento de las antenas de separación convencional, simplemente optimizando la intensidad de campo cercano. Los algoritmos genéticos han encontrado grandes aplicaciones en el campo de la nano óptica (Forestiere *et al.*, 2010; Ginzburg *et al.*, 2011). Una extensión natural a estos campos de acción es utilizar algoritmos de IA para modelar, diseñar y construir prototipos de nanocómputo (Arlat *et al.*, 2012; Uusitalo *et al.*, 2011).

Caracterización de nanoestructuras

Los microscopios con sonda de barrido son instrumentos que permiten obtener imágenes estructurales no invasivas de materia en escala nanométrica. Particularmente, en técnicas de microscopía con sonda de barrido multimodal se adquieren múltiples canales de información en cada píxel. Se ha mostrado que a partir de las respuestas espectroscópicas medidas a nivel píxel se pueden entrenar redes neuronales que caractericen comportamientos locales de nanoestructuras. Nikiforov *et al.* (2009) usaron una red neuronal en combinación con el método de componentes principales para identificar las bacterias *Micrococcus lysodeikticus* y *Pseudomonas fluorescens* usando la diferencia en sus respuestas electromecánicas en un solo píxel. Cabe señalar que, a pesar de los avances en las técnicas de microscopía con sonda de barrido, la optimización de la sonda y los parámetros para hacer imagen dependen directamente de la habilidad y experiencia del operador. Para robustecer el proceso de medición, Woolley *et al.* (2011) desarrollaron un protocolo de aprendizaje automático para controlar y optimizar la estructura de una sonda usada para barrer imágenes de resolución atómica. Cabe señalar que uno de los principales problemas en la caracterización de materiales se encuentra en el hecho de entender las complejas interacciones entre la sonda y la muestra, debido a que dependen de muchos parámetros. Estos son los tipos de problemas en los que los métodos de IA pueden ser extremadamente útiles.

La caracterización de las propiedades estructurales de nanomateriales también se ha resuelto a través del procesamiento de imágenes obtenidas por microscopía electrónica de barrido, una técnica que permite obtener imágenes de alta resolución de la superficie de una muestra, explotando las interacciones electrón-materia. Algunos esfuerzos reportan la implementación de redes neuronales para cuantificar propiedades estructurales tales como alineación y curvatura de nanotubos de carbón usando la información del análisis en fre-

cuencia de las imágenes obtenidas por microscopía electrónica en combinación con procedimientos estereológicos (Al-Khedher *et al.*, 2007). Otros esfuerzos reportan la implementación de redes neuronales y algoritmos genéticos para predecir la resistencia a la flexión y el porcentaje de absorción de agua de concretos que contienen nanopartículas ZnO₂ (Nazari *et al.*, 2012) y Cr₂O₃ (Nazari *et al.*, 2010). Para realizar estas predicciones, los modelos se entrenaron con datos experimentales incluyendo información del contenido de cemento, nanopartículas y agua, el tipo de agregado, la cantidad de superplastificante, el tipo de medio de curado y la edad del curado, para diferentes proporciones de mezcla.

Por su parte, en el campo de la nanofotónica se han introducido algoritmos de aprendizaje profundo para obtener mapeos no lineales entre la topología, la composición de estructuras nanofónicas arbitrarias y sus propiedades funcionales asociadas. Notablemente, bajo este esquema, el modelo “aprende” las ecuaciones de Maxwell y cómo resolverlas (So *et al.*, 2020). En esta misma dirección, existe un gran interés por parte de la comunidad científica en la aplicación de IA para realizar diseño inverso de dispositivos nanofotónicos, es decir, dada una respuesta óptica estimar la configuración del sistema físico (Liu *et al.*, 2018a y b).

En el sector de aplicaciones médicas, la nanotecnología se ha beneficiado de los algoritmos de IA para desarrollar herramientas que habilitan el análisis y modelado de nanopartículas en el contexto de la farmacología y nanomedicina (Ho *et al.*, 2019; Wilson *et al.*, 2020). Debido a la constante exposición humana a nanopartículas han surgido disciplinas, como la nanotoxicología, que pretenden estudiar los posibles efectos adversos. Sorpresivamente, algunos estudios utilizan modelos de aprendizaje automático como máquinas de soporte vectorial y regresiones basadas en los k-vecinos más cercanos para predecir perfiles de actividad biológica de nuevos nanomateriales y priorizar el diseño y fabricación de nanomateriales encaminados a productos más seguros (Fourches *et al.*, 2010; Singh *et al.*, 2020).

Conclusiones

Se han discutido algunos de los esfuerzos donde convergen la nanotecnología y la IA. La lista de aplicaciones de algoritmos de IA en nanotecnología es realmente vasta y diversa para discutirla en detalle; como se ha mencionado en las subsecciones previas, incluyen desde la asistencia en la caracterización de nuevos materiales acelerando el proceso de optimización de parámetros, pasando por la estimación de modelos entrada-salida para realizar predicciones de estados futuros, hasta el desarrollo de nuevos dispositivos. No obstante, a pesar de que la combinación de ambos campos de investigación ha permitido potencializar algunas aplicaciones se prevé que estos habiliten la solución de problemas complejos que requieren múltiples niveles de descripción e interacción. Es de hacer notar que las técnicas de aprendizaje automático más re-

currentes en las aplicaciones de IA en nanotecnología son las redes neuronales artificiales y los algoritmos genéticos, lo cual, probablemente, se deba a la simplicidad de los modelos y a su alta capacidad de generalización. A este respecto, es importante señalar: estas características habilitan la implementación de estos algoritmos en dispositivos electrónicos portátiles, incluidos teléfonos móviles y tabletas, facilitando el despliegue de tecnologías.

Referencias

- Ababneh, J. I. y Qasaimeh, O. (2006). Simple model for quantum-dot semiconductor optical amplifiers using artificial neural networks. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 53(7): 1543-1550. <https://doi.org/10.1109/TED.2006.875803>.
- Al-Khedher, M. A., Pezeshki, C., McHale, J. L. y Knorr, F. J. (2007). Quality classification via Raman identification and SEM analysis of carbon nanotube bundles using artificial neural networks. *Nanotechnology*, 18(35): 355703. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/18/35/355703>.
- Arlat, J., Kalbarczyk, Z. y Nanya, T. (2012). Nanocomputing: Small devices, large dependability challenges. *IEEE Security & Privacy*, 10(1): 69-72. <https://doi.org/10.1109/MSP.2012.17>.
- Arrieta, A. B., Díaz-Rodríguez, N., Del Ser, J., Bennetot, A., Tabik, S., Barbado, A., ... y Herrera, F. (2020). Explainable artificial intelligence (XAI): Concepts, taxonomies, opportunities and challenges toward responsible AI. *Information fusion*, 58: 82-115. <https://doi.org/10.1016/j.inffus.2019.12.012>.
- Asproulis, N. y Drikakis, D. (2009). Nanoscale materials modelling using neural networks. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 6(3): 514-518. <https://doi.org/10.1166/jctn.2009.1062>.
- Bishop, C. M. y Nasrabadi, N. M. (2006). *Pattern recognition and machine learning*, 4(4): 738. New York: springer.
- Brunton, S. L. y Kutz, J. N. (2022). *Data-driven science and engineering: Machine learning, dynamical systems and control*. Cambridge University Press.
- Brunton, S. L., Proctor, J. L. y Kutz, J. N. (2016). Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. *Proceedings of the national academy of sciences*, 113(15): 3932-3937. <https://doi.org/10.1073/pnas.1517384113>.
- Chen, S. H., Jakeman, A. J. y Norton, J. P. (2008). Artificial intelligence techniques: an introduction to their use for modelling environmental systems. *Mathematics and computers in simulation*, 78(2-3): 379-400. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2008.01.028>.
- Feichtner, T., Selig, O., Kiunke, M. y Hecht, B. (2012). Evolutionary optimization of optical antennas. *Physical review letters*, 109(12): 127701. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.127701>.
- Forestiere, C., Donelli, M., Walsh, G. F., Zeni, E., Miano, G. y Dal Negro, L. (2010). Particle-swarm optimization of broadband nanoplasmonic arrays. *Optics letters*, 35(2): 133-135. <https://doi.org/10.1364/OL.35.000133>.

- Fourches, D., Pu, D., Tassa, C., Weissleder, R., Shaw, S. Y., Mumper, R. J. y Tropsha, A. (2010). Quantitative nanostructure- activity relationship modeling. *ACS nano*, 4(10): 5703-5712. <https://doi.org/10.1021/nn1013484>.
- Gadzhimagomedova, Z. M., Pashkov, D. M., Kirsanova, D. Y., Soldatov, S. A., Butakova, M. A., Chernov, A. V. y Soldatov, A. V. (2022). Artificial intelligence for nanostructured materials. *Nanobiotechnology Reports*, 17(1): 1-9. <https://doi.org/10.1134/S2635167622010049>.
- Ginzburg, P., Berkovitch, N., Nevet, A., Shor, I. y Orenstein, M. (2011). Resonances on-demand for plasmonic nano-particles. *Nano letters*, 11(6): 2329-2333. <https://doi.org/10.1021/nl200612f>.
- Goodfellow, I., Bengio, Y. y Courville, A. (2016). *Deep learning*. MIT press.
- Ho, D., Wang, P., y Kee, T. (2019). Artificial intelligence in nanomedicine. *Nanoscale Horizons*, 4(2): 365-377. <https://doi.org/10.1039/C8NH00233A>.
- Hulla, J. E., Sahu, S. C. y Hayes, A. W. (2015). Nanotechnology: history and future. *Human & experimental toxicology*, 34(12): 1318-1321. <https://doi.org/10.1177/0960327115603588>.
- Jackson, P. C. (2019). *Introduction to artificial intelligence*, 3a ed. Nueva York: Courier Dover Publications.
- Kim, C. E., Shin, H. S., Moon, P., Kim, H. J. y Yun, I. (2009). Modeling of In₂O₃-10 wt% ZnO thin film properties for transparent conductive oxide using neural networks. *Current Applied Physics*, 9(6): 1407-1410. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2009.03.013>.
- Krogh, A. (2008). What are artificial neural networks? *Nature biotechnology*, 26(2): 195-197. <https://doi.org/10.1038/nbt1386>.
- Lalmuanawma, S., Hussain, J. y Chhakchhuak, L. (2020). Applications of machine learning and artificial intelligence for Covid-19 (SARS-CoV-2) pandemic: a review. *Chaos, Solitons & Fractals*, 139: 110059. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110059>.
- Liu, D., Tan, Y., Khoram, E. y Yu, Z. (2018a). Training deep neural networks for the inverse design of nanophotonic structures. *Acs Photonics*, 5(4): 1365-1369. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.7b01377>.
- Liu, Z., Zhu, D., Rodrigues, S. P., Lee, K. T. y Cai, W. (2018b). Generative model for the inverse design of metasurfaces. *Nano letters*, 18(10): 6570-6576. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b03171>.
- McCulloch, W. S. y Pitts, W. (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical biophysics*, 5(4): 115-133. <https://doi.org/10.1007/BF02478259>.
- Mitchell, T., Buchanan, B., DeJong, G., Dietterich, T., Rosenbloom, P. y Waibel, A. (1990). Machine learning. *Annual review of computer science*, 4(1): 417-433. <https://doi.org/10.1146/annurev.cs.04.060190.002221>.
- Muliana, A., Haj-Ali, R. M., Steward, R. y Saxena, A. (2002). Artificial neural network and finite element modeling of nanoindentation tests. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 33(7): 1939-1947. <https://doi.org/10.1007/s11661-002-0027-3>.

- Murdoch, T. B. y Detsky, A. S. (2013). The inevitable application of big data to health care. *Jama*, 309(13): 1351-1352. <https://doi.org/10.1001/jama.2013.393>.
- Nazari, A. y Azimzadegan, T. (2012). Prediction the effects of ZnO₂ nanoparticles on splitting tensile strength and water absorption of high strength concrete. *Materials Research*, 15(3): 440-454. <https://doi.org/10.1590/S1516-14392012005000057>.
- Nazari, A. y Riahi, S. (2010). Computer-aided prediction of physical and mechanical properties of high strength cementitious composite containing Cr₂O₃ nanoparticles. *Nano*, 5(05): 301-318. <https://doi.org/10.1142/S1793292010002219>.
- Nielsen, M. A. (2015). *Neural networks and deep learning*, 25. San Francisco, CA, USA: Determination press.
- Nikiforov, M. P., Reukov, V. V., Thompson, G. L., Vertegel, A. A., Guo, S., Kalinin, S. V. y Jesse, S. (2009). Functional recognition imaging using artificial neural networks: applications to rapid cellular identification via broadband electromechanical response. *Nanotechnology*, 20(40): 405708. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/40/405708>.
- Peurifoy, J., Shen, Y., Jing, L., Yang, Y., Cano-Renteria, F., DeLacy, B. G., ... y Soljačić, M. (2018). Nanophotonic particle simulation and inverse design using artificial neural networks. *Science advances*, 4(6): eaar4206. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aar4206>.
- Qu, Y., Jing, L., Shen, Y., Qiu, M. y Soljagic, M. (2019). Migrating knowledge between physical scenarios based on artificial neural networks. *ACS Photonics*, 6(5): 1168-1174. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.8b01526>.
- Quiroz-Juárez, M. A., Torres-Gómez, A., Hoyo-Ulloa, I., León-Montiel, R. D. J. y U'Ren, A. B. (2021). Identification of high-risk COVID-19 patients using machine learning. *PLoS One*, 16(9): e0257234. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0257234>.
- Rapaport, D. C. y Rapaport, D. C. R. (2004). *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press.
- Razzak, M. I., Naz, S. y Zaib, A. (2018). Deep learning for medical image processing: overview, challenges and the future. *Classification in BioApps*, 323-350. https://doi.org/10.1007/978-3-319-65981-7_12.
- Rosenblatt, F. (1958). The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychological review*, 65(6): 386. <https://doi.org/10.1037/h0042519>.
- Sacha, G. M., Rodriguez, F. B. y Varona, P. (2009). An inverse problem solution for undetermined electrostatic force microscopy setups using neural networks. *Nanotechnology*, 20(8): 085702. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/8/085702>.
- Sacha, G. M. y Varona, P. (2013). Artificial intelligence in nanotechnology. *Nanotechnology*, 24(45): 452002. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/24/45/452002>.
- Shen, D., Wu, G. y Suk, H. I. (2017). Deep learning in medical image analysis. *Annual review of biomedical engineering*, 19: 221. <https://doi.org/10.1146/annurev-bioeng-071516-044442>.
- Singh, A. V., Ansari, M. H. D., Rosenkranz, D., Maharjan, R. S., Kriegel, F. L., Gandhi, K., ... y Luch, A. (2020). Artificial intelligence and machine learning in computational

- nanotoxicology: unlocking and empowering nanomedicine. *Advanced Healthcare Materials*, 9(17): 1901862. <https://doi.org/10.1002/adhm.201901862>.
- So, S., Badloe, T., Noh, J., Bravo-Abad, J. y Rho, J. (2020). Deep learning enabled inverse design in nanophotonics. *Nanophotonics*, 9(5): 1041-1057. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2019-0474>.
- Uusitalo, M. A., Peltonen, J. y Ryhänen, T. (2011). Machine learning: how it can help nanocomputing. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 8(8): 1347-1363. <https://doi.org/10.1166/jctn.2011.1821>.
- Wetzstein, G., Ozcan, A., Gigan, S., Fan, S., Englund, D., Soljačić, M., ... y Psaltis, D. (2020). Inference in artificial intelligence with deep optics and photonics. *Nature*, 588(7836): 39-47. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2973-6>.
- Wilson, B. y Km, G. (2020). Artificial intelligence and related technologies enabled nanomedicine for advanced cancer treatment. *Nanomedicine*, 15(05): 433-435. <https://doi.org/10.2217/nnm-2019-0366>.
- Woolley, R. A., Stirling, J., Radocea, A., Krasnogor, N. y Moriarty, P. (2011). Automated probe microscopy via evolutionary optimization at the atomic scale. *Applied Physics Letters*, 98(25), 253104. <https://doi.org/10.1063/1.3600662>.
- Xu, B., Shen, Z., Ni, X., Wang, J., Guan, J. y Lu, J. (2004). Determination of elastic properties of a film-substrate system by using the neural networks. *Applied physics letters*, 85(25): 6161-6163. <https://doi.org/10.1063/1.1841472>.
- Yan, X., Sedykh, A., Wang, W., Yan, B. y Zhu, H. (2020). Construction of a web-based nanomaterial database by big data curation and modeling friendly nanostructure annotations. *Nature communications*, 11(1): 1-10. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-16413-3>.
- Yang, W., Zhang, X., Tian, Y., Wang, W., Xue, J. H. y Liao, Q. (2019). Deep learning for single image super-resolution: a brief review. *IEEE Transactions on Multimedia*, 21(12): 3106-3121. <https://doi.org/10.1109/TMM.2019.2919431>.