Research Club Scientia Vol. 4, No 4
Frecuencia: Octubre–Diciembre 2026
ISSN: 3103 - 1315
DOI: https://doi.org/10.65415/36m30v36

Inteligencia artificial aplicada al descubrimiento y diseño de nuevos materiales: revisión de algoritmos, bases de datos y reducción del tiempo de desarrollo

Artificial intelligence applied to the discovery and design of new materials: a review of algorithms, databases and development-time reduction

Intelligenza artificiale applicata alla scoperta e alla progettazione di nuovi materiali: rassegna degli algoritmi, delle banche dati e della riduzione dei tempi di sviluppo

Sheyla Lilibeth Elizondo Coello[I]
selizondoc@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0003-1878-6902
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Bianca Victoria Criollo Suarez[I]
bcriollos@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0007-9060-8798
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Ivis Alexandra Arreaga Cadmen[I]
iarreagac5@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0009-1331-052X
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Escarleth Alexandra López Torres[I]
elopezt4@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0009-0002-6873-8063
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Jorge Tomas Holguín Anzules[I]
jholguina7@unemi.edu.ec
ORCID: https://orcid.org/0000-0003-4454-4184
Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

Correspondencia: selizondoc@unemi.edu.ec

.

Inteligencia artificial aplicada al descubrimiento y diseño de nuevos materiales: revisión de algoritmos, bases de datos reducción del tiempo de desarrollo

Artículo de Investigación

Aceptado: 27/Noviembre/2026 **Publicado:** 28/Noviembre/2026

I. Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Carrera Ingeniería Industrial, Universidad Estatal de Milagro, Ecuador

.

Resumen

La inteligencia artificial (IA) se ha incorporado a la ciencia de materiales para predecir propiedades y orientar la búsqueda de nuevas composiciones antes de su síntesis. El objetivo de esta revisión bibliográfica fue analizar cómo la IA contribuye a reducir el tiempo y los recursos necesarios para desarrollar nuevos materiales. Se realizó una búsqueda en Google Académico (2013–2025) y se seleccionaron 22 documentos con DOI verificable. Los modelos de ensambles de árboles predicen propiedades mecánicas a partir de la composición con conjuntos de datos moderados, mientras que las redes neuronales de grafos alcanzan errores cercanos a la exactitud de los cálculos de primeros principios. El aprendizaje activo permitió obtener aleaciones mejoradas con pocas decenas de experimentos, y los modelos generativos y los laboratorios autónomos amplían el espacio explorado. Persisten limitaciones por datos escasos, predicción de estabilidad y validación experimental. La IA acelera el cribado, pero no sustituye la verificación en laboratorio.

Palabras clave: inteligencia artificial; aprendizaje automático; diseño de materiales; predicción de propiedades; aleaciones.

Abstract

Artificial intelligence (AI) has been incorporated into materials science to predict properties and guide the search for new compositions before synthesis. This literature review aimed to analyze how AI helps reduce the time and resources required to develop new materials. A search was carried out in Google Scholar (2013–2025) and 22 documents with a verifiable DOI were selected. Tree-ensemble models predict mechanical properties from composition using moderate datasets, while graph neural networks reach errors close to the accuracy of first-principles calculations. Active learning yielded improved alloys with only a few dozen experiments, and generative models and autonomous laboratories expand the explored space. Limitations remain regarding scarce data, stability prediction and experimental validation. AI accelerates screening but does not replace laboratory verification.

Keywords: artificial intelligence; machine learning; materials design; property prediction; alloys.

Riassunto

L’intelligenza artificiale (IA) è stata integrata nella scienza dei materiali per prevedere le proprietà e orientare la ricerca di nuove composizioni prima della sintesi. L’obiettivo di questa revisione bibliografica è stato analizzare come l’IA contribuisca a ridurre i tempi e le risorse necessari per sviluppare nuovi materiali. È stata condotta una ricerca su Google Scholar (2013–2025) e sono stati selezionati 22 documenti con DOI verificabile. I modelli di insieme di alberi decisionali prevedono le proprietà meccaniche a partire dalla composizione utilizzando insiemi di dati di dimensioni moderate, mentre le reti neurali su grafi raggiungono errori comparabili a quelli dei

calcoli da principi primi. L'apprendimento attivo ha consentito di ottenere leghe con proprietà migliorate con poche decine di esperimenti. I modelli generativi e i laboratori autonomi ampliano lo spazio esplorato. Permangono limiti legati alla scarsità dei dati, alla previsione della stabilità e alla validazione sperimentale. L'IA accelera la selezione preliminare, che richiede comunque una verifica in laboratorio.

Parole chiave: intelligenza artificiale; apprendimento automatico; progettazione dei materiali; previsione delle proprietà; leghe.

1. Introducción

El desarrollo de materiales se ha apoyado históricamente en la intuición del investigador y en la prueba y error, una estrategia que se vuelve impracticable cuando aumenta la complejidad química del sistema. Solo en una familia de aleaciones NiTi el espacio de búsqueda supera las 800,000 composiciones (Xue et al., 2016), y en las aleaciones de alta entropía alcanza millones (Rao et al., 2022), por lo que ensayar cada candidato resulta lento y costoso.

Dos avances han modificado este panorama. El primero es la disponibilidad de bases de datos abiertas generadas mediante cálculos de alto rendimiento con la teoría del funcional de la densidad (DFT), como el Materials Project, concebido bajo el enfoque del genoma de materiales para acelerar la innovación (Jain et al., 2013). El segundo es el aprendizaje automático, que permite construir modelos sustitutos capaces de estimar propiedades en fracciones de segundo a partir de la composición o la estructura cristalina (Butler et al., 2018; Schmidt et al., 2019). Su uso se ha extendido al aprendizaje profundo (Choudhary et al., 2022) y al diseño de vidrios metálicos, superaleaciones y aleaciones de alta entropía o con memoria de forma (Hart et al., 2021).

En los últimos años se reportaron hitos de gran escala: el proyecto GNoME identificó 2.2 millones de estructuras cristalinas estables respecto de los datos previos (Merchant et al., 2023), un laboratorio autónomo sintetizó compuestos inorgánicos con mínima intervención humana (Szymanski et al., 2023) y un modelo generativo propuso materiales nuevos a partir de propiedades deseadas (Zeni et al., 2025). Sin embargo, también surgieron cuestionamientos sobre la capacidad de los modelos para predecir estabilidad (Bartel et al., 2020) y sobre la interpretación automática de los productos sintetizados (Leeman et al., 2024).

Para la Ingeniería Industrial, menos ensayos y ciclos más cortos significan menores costos y una transferencia más rápida a la manufactura. Por ello, esta revisión se orienta por la pregunta: ¿cómo contribuye la inteligencia artificial a reducir el tiempo y los recursos necesarios para desarrollar nuevos materiales? El objetivo general es analizar la contribución de la IA al descubrimiento y diseño de nuevos materiales a partir de la literatura científica reciente. Los objetivos específicos son: (a) identificar los algoritmos más utilizados, como los bosques aleatorios y las redes

neuronales; (b) describir el papel de las bases de datos como el Materials Project; (c) comparar los resultados reportados en la predicción de propiedades mecánicas y el diseño de aleaciones; y (d) reconocer las limitaciones de los modelos y los vacíos de investigación.

El artículo presenta la metodología de búsqueda, los resultados organizados por algoritmos, bases de datos y estudios de diseño, la discusión con vacíos y perspectivas futuras, y las conclusiones.

2. Metodología

Se desarrolló una revisión bibliográfica de tipo narrativo con un procedimiento sistematizado de búsqueda y selección, de acuerdo con la guía de investigación de la asignatura. Google Académico se empleó como motor principal de búsqueda, y los metadatos de cada documento (autores, año, revista, volumen, páginas y DOI) se verificaron en Crossref y en los portales de las editoriales. El periodo cubierto fue 2013–2025 y las ecuaciones de búsqueda se formularon en inglés, idioma predominante del área (Tabla 1).

Tabla 1

Estrategia de búsqueda y criterios de selección

Elemento	**Descripción**
Fuente de búsqueda	Google Académico (principal); verificación por DOI en Crossref y editoriales
Periodo	2013–2025
Ecuación 1	("machine learning" OR "artificial intelligence") AND ("materials discovery" OR "materials design")
Ecuación 2	("random forest" OR "gradient boosting") AND ("material properties" OR "elastic moduli" OR "fatigue strength")
Ecuación 3	("graph neural network" OR "convolutional neural network") AND crystal AND "property prediction"
Ecuación 4	("active learning" OR "adaptive design") AND (alloy OR "high-entropy alloy")
Ecuación 5	("Materials Project" OR OQMD) AND "machine learning"
Ecuación 6	("autonomous laboratory" OR "generative model") AND "inorganic materials"
Criterios de inclusión	Artículos revisados por pares con DOI; IA en materiales inorgánicos/aleaciones; datos cuantitativos o marco metodológico; inglés o español

Elemento	Descripción
Criterios de exclusión	Preprints sin revisión, resúmenes de congresos, tesis, sin texto completo y estudios solo de moléculas orgánicas o fármacos
Corpus Final	22 documentos: 15 estudios primarios y 7 revisiones, perspectivas o infraestructuras de datos

Nota. Elaboración propia a partir del protocolo de búsqueda de la revisión.

La selección tuvo tres etapas: revisión de títulos y resúmenes, lectura del texto completo y extracción de la información en una matriz bibliográfica elaborada en Excel con las variables: autor y año, material o sistema, técnica de IA, base de datos, propiedad objetivo, resultado cuantitativo y limitación declarada. El corpus final quedó conformado por 22 documentos, de los cuales 15 son estudios primarios y 7 corresponden a revisiones, perspectivas críticas o infraestructuras de datos.

3. Resultados

Algoritmos y formas de representar los materiales

Los estudios revisados se agrupan en dos grandes enfoques según la información de entrada. El primero describe cada material mediante descriptores calculados a partir de la composición química y emplea algoritmos de ensambles de árboles. Ward et al. (2016) propusieron un marco de propósito general con 145 atributos derivados de las propiedades de los elementos, entrenado con datos de la base OQMD, que se aplicó a la predicción de la banda prohibida y de la capacidad de formación de vidrio, y que permitió sugerir nuevas aleaciones vítreas. De forma similar, de Jong et al. (2016) utilizaron gradient boosting con descriptores construidos mediante medias de Hölder para predecir los módulos volumétrico y de corte de 1,940 compuestos, y emplearon el modelo para identificar candidatos superduros. En aceros, Agrawal et al. (2014) aplicaron técnicas de minería de datos a la base NIMS y obtuvieron modelos de resistencia a la fatiga con coeficientes de determinación superiores a 0.97 a partir de la composición y de los parámetros de procesamiento.

El segundo enfoque utiliza directamente la estructura cristalina mediante redes neuronales de grafos, en las que los átomos son nodos y los enlaces son aristas. La red CGCNN de Xie y Grossman (2018) aprendió ocho propiedades de cristales del Materials Project con una exactitud comparable a la de la DFT respecto de datos experimentales. Posteriormente, el modelo MEGNet, entrenado con cerca de 60,000 cristales, alcanzó errores absolutos medios de 0.028 eV/átomo en la energía de formación y de 0.33 eV en la banda prohibida, y transfirió lo aprendido sobre los elementos a propiedades con menos datos, como los módulos elásticos (Chen et al., 2019). Para comparar ambos enfoques, Dunn et al. (2020) crearon Matbench, un conjunto de 13 tareas con

entre 312 y más de 132,000 muestras; su algoritmo automatizado obtuvo el mejor desempeño en 8 de las 13 tareas, mientras que las redes de grafos destacaron en las tareas de mayor tamaño basadas en estructura.

Bases de datos como insumo de la IA

La calidad de los modelos depende de las bases de datos que los alimentan. El Materials Project ofrece propiedades calculadas de forma abierta para decenas de miles de compuestos inorgánicos (Jain et al., 2013) y fue la fuente de entrenamiento de CGCNN, MEGNet y de los objetivos sintetizados por el laboratorio autónomo A-Lab (Chen et al., 2019; Szymanski et al., 2023; Xie y Grossman, 2018). No obstante, la disponibilidad es desigual entre propiedades: el propio Materials Project contaba con cerca de 69,000 energías de formación calculadas, pero solo con alrededor de 6,000 constantes elásticas (Chen et al., 2019). Para enfrentar este problema, Zhang y Ling (2018) demostraron que incorporar una estimación aproximada de la propiedad como variable de entrada mejora la capacidad predictiva con conjuntos pequeños en tres casos de estudio.

Diseño de aleaciones y predicción de propiedades mecánicas

El aporte más directo a la reducción de ensayos proviene del aprendizaje activo, en el que un modelo sustituto estima la propiedad y su incertidumbre para seleccionar el siguiente experimento más informativo (Lookman et al., 2019). Xue et al. (2016) aplicaron esta estrategia a aleaciones NiTi con memoria de forma: a partir de 22 aleaciones iniciales, sintetizaron 36 composiciones en nueve ciclos de retroalimentación dentro de un espacio de aproximadamente 800,000 posibilidades; 14 de ellas superaron al mejor dato inicial y la mejor alcanzó una histéresis térmica de 1.84 K. En aleaciones de alta entropía del sistema Al-Co-Cr-Cu-Fe-Ni, Wen et al. (2019) obtuvieron aleaciones con una dureza 10 % mayor que el mejor valor del conjunto de entrenamiento con solo siete experimentos, y observaron que los modelos que combinan composición y descriptores físicos superan a los que usan solo la composición.

Rao et al. (2022) integraron aprendizaje automático, DFT, cálculos termodinámicos y experimentos en un bucle cerrado para buscar aleaciones Invar de alta entropía; tras fabricar 17 aleaciones entre millones de composiciones posibles, identificaron dos con coeficientes de expansión térmica cercanos a 2×10^{-6} K^{-1} a 300 K. En vidrios metálicos, Ren et al. (2018) combinaron un modelo de aprendizaje automático con experimentos de alto rendimiento para descubrir un nuevo sistema Co-V-Zr, y usaron las discrepancias para reentrenar y mejorar el modelo. La Tabla 2 resume los estudios primarios analizados.

Tabla 2

Comparación de estudios primarios sobre IA aplicada al descubrimiento y diseño de materiales

Estudio	Material o sistema	Técnica de IA	Propiedad objetivo	Resultado reportado
Agrawal et al. (2014)	Aceros (base NIMS)	Selección de variables y regresión	Resistencia a la fatiga	$R^2 > 0.97$ con composición y procesamiento
Ward et al. (2016)	Inorgánicos y vidrios metálicos	Ensambles de árboles (145 atributos	Banda prohibida y formación de vidrio	Marco reutilizable que sugirió nuevas aleaciones vítreas
de Jong et al. (2016)	1,940 compuestos inorgánicos	Gradient boosting (medias de Hölder)	Módulos volumétrico (K) y de corte (G)	Cribado de superduros sin DFT individual
Xie y Grossman (2018)	Cristales (Materials Project)	Red de grafos (CGCNN)	Ocho propiedades (energía de formación, etc.)	Exactitud similar a DFT frente a datos experimentales
Chen et al. (2019)	≈60,000 cristales (Materials Project)	Red MEGNet y transferencia	Energía de formación, banda prohibida y módulos	MAE de 0.028 eV/átomo (energía) y 0.33 eV (banda)
Xue et al. (2016)	Aleaciones NiTi con memoria	Diseño adaptativo con incertidumbre	Histéresis térmica (ΔT)	36 síntesis en 9 ciclos (de ≈800,000); 14 superaron inicio; ΔT mínima de 1.84 K
Wen et al. (2019)	Aleaciones alta entropía Al-Co-Cr-Cu-Fe-Ni	Aprendizaje activo (modelo sustituto)	Dureza	Dureza +10 % sobre mejor dato inicial en 7 ensayos

Research Club Scientia Vol. 4, No 4, Octubre - Diciembre, pp. 1832-1844, ISSN: 3103 – 1315

Estudio	Material o sistema	Técnica de IA	Propiedad objetivo	Resultado reportado
Ren et al. (2018)	Vidrios metálicos Co-V-Zr	ML iterado + alto rendimiento	Formación de vidrio metálico	Nuevo sistema vítreo; reentrenamiento mejoró exactitud
Rao et al. (2022)	Aleaciones Invar de alta entropía	Aprendizaje activo + DFT/termodinámica	Coeficiente de expansión térmica	17 aleaciones fabricadas; 2 con ≈2 × 10^{-6} K^{-1} a 300 K
Merchant et al. (2023)	Cristales inorgánicos (GNoME	Redes de grafos + aprendizaje activo	Estabilidad termodinámica	2.2M estructuras estables; 736 sintetizadas aparte
Szymanski et al. (2023	Óxidos y fosfatos inorgánicos	Laboratorio autónomo (A-Lab)	Síntesis de compuestos objetivo	41 de 58 objetivos obtenidos en 17 días
Zeni et al. (2025)	Materiales inorgánicos	Modelo de difusión (MatterGen)	Estabilidad y propiedades objetivo	Más del doble de estables/nuevos; síntesis con <20 % desvío

Nota. Elaboración propia con base en los estudios citados. MAE = error absoluto medio; DFT = teoría del funcional de la densidad.

Descubrimiento a gran escala, modelos generativos y laboratorios autónomos

En la escala de millones de candidatos, GNoME combinó redes de grafos con aprendizaje activo y encontró 2.2 millones de estructuras por debajo de la envolvente convexa conocida, de las cuales 736 ya habían sido obtenidas experimentalmente por otros grupos de forma independiente (Merchant et al., 2023). La tasa de acierto superó el 80 % con información estructural, frente a cerca de 1 % en trabajos previos, lo que mejora en un orden de magnitud la eficiencia del descubrimiento (Merchant et al., 2023).

Los modelos generativos invierten el problema: en lugar de evaluar candidatos, proponen estructuras que cumplan propiedades deseadas. MatterGen, un modelo de difusión, generó más del doble de materiales estables, únicos y nuevos que los modelos anteriores, con estructuras más de diez veces más cercanas al mínimo local de energía; uno de los materiales propuestos fue sintetizado y su propiedad medida quedó a menos de 20 % del valor objetivo (Zeni et al., 2025). El laboratorio autónomo A-Lab, que integra cálculos de estabilidad, recetas de la literatura,

aprendizaje automático y robótica, obtuvo 41 de 58 compuestos objetivo en 17 días de operación continua (Szymanski et al., 2023). Este resultado fue cuestionado por Leeman et al. (2024), quienes reanalizaron los productos, señalaron errores en la identificación de fases y en el tratamiento del desorden químico, y concluyeron que no se había demostrado la obtención de materiales nuevos. La Tabla 3 sintetiza los requerimientos, ventajas y limitaciones de cada familia de algoritmos.

Tabla 3

Familias de algoritmos: requerimientos de datos, ventajas y limitaciones

Familia de algoritmos	**Datos requeridos**	**Ventajas**	**Limitaciones**	**Estudios de referencia**
Ensambles de árboles (Random Forest, gradient boosting)	Cientos a miles de registros de composición	<Funcionan con datos moderados; ordenan importancia de variables	Dependen de descriptores; no distinguen polimorfos	Ward et al. (2016); de Jong et al. (2016); Agrawal et al. (2014)
Redes neuronales de grafos (CGCNN, MEGNet, GNoME)	Decenas de miles de estructuras DFT	Usan estructura cristalina; errores cercanos a DFT	Exigen grandes bases; menor desempeño con pocos datos	Xie y Grossman (2018); Chen et al. (2019); Merchant et al. (2023)
Aprendizaje activo y diseño adaptativo	Decenas de datos experimentales iniciales	Reducen ensayos al elegir el experimento más informativo	Dependen de incertidumbre y espacio de búsqueda	Xue et al. (2016); Wen et al. (2019); Rao et al. (2022)
Modelos generativos	Grandes conjuntos de estructuras estables	Proponen estructuras nuevas desde propiedades (diseño inverso	Validación experimental aún escasa	Zeni et al. (2025)

Familia de algoritmos	Datos requeridos	Ventajas	Limitaciones	Estudios de referencia
Laboratorios autónomos	Bases DFT, recetas de literatura y difracción	Cierran ciclo predicción–síntesis–caracterización con robótica	Interpretación automática cuestionada; alto costo	Szymanski et al. (2023); Leeman et al. (2024)

Nota. Elaboración propia a partir de la síntesis de los documentos revisados.

4. Discusión

Los resultados de esta revisión permiten responder a la pregunta planteada: la IA reduce el tiempo y los recursos de desarrollo principalmente porque sustituye ensayos y cálculos costosos por predicciones rápidas, y porque prioriza qué experimentos vale la pena realizar. El ahorro no proviene de eliminar el laboratorio, sino de reducir las pruebas necesarias, como en los casos donde bastaron siete experimentos (Wen et al., 2019) o 36 síntesis (Xue et al., 2016).

En primer lugar, se observó que la elección del algoritmo depende del volumen y del tipo de datos disponibles. Los ensambles de árboles resultan adecuados cuando se cuenta con cientos o pocos miles de registros y con descriptores de composición, situación habitual en propiedades mecánicas y en aceros industriales (Agrawal et al., 2014; de Jong et al., 2016; Ward et al., 2016). Las redes de grafos, en cambio, aprovechan mejor las bases de decenas de miles de estructuras (Chen et al., 2019; Xie y Grossman, 2018). Así lo confirma Matbench, donde ningún método dominó todas las tareas (Dunn et al., 2020). En segundo lugar, el aprendizaje activo aparece como el enfoque con mayor impacto directo sobre los recursos experimentales (Lookman et al., 2019; Rao et al., 2022).

Estos hallazgos coinciden con revisiones previas que señalan el potencial del aprendizaje automático para acelerar el descubrimiento (Butler et al., 2018; Hart et al., 2021; Schmidt et al., 2019). Sin embargo, la evidencia también muestra contradicciones. Bartel et al. (2020) evaluaron siete modelos con 85,014 composiciones del Materials Project y encontraron que, aunque las energías de formación se predicen con buena exactitud, los modelos basados solo en la composición predicen mal la estabilidad de los compuestos, de modo que un error bajo en una métrica no garantiza utilidad para descubrir materiales. De manera similar, el debate entre Szymanski et al. (2023) y Leeman et al. (2024) indica que la automatización de la síntesis todavía depende de una caracterización rigurosa para validar la novedad de los productos.

Aunque la evidencia muestra avances importantes, persisten vacíos en las propiedades mecánicas: los grandes conjuntos de datos provienen de cálculos DFT, mientras que la fatiga o la dureza

Research Club Scientia Vol. 4, No 4, Octubre - Diciembre, pp. 1832-1844, ISSN: 3103 – 1315

dependen de la microestructura y del procesamiento, que rara vez se registran de forma estandarizada (Agrawal et al., 2014; Chen et al., 2019).

Desde una perspectiva práctica, un laboratorio universitario o una empresa no necesita infraestructura de gran escala: con bases abiertas y modelos de ensambles o de aprendizaje activo puede reducir los ensayos destructivos en el diseño de aleaciones (Jain et al., 2013; Wen et al., 2019). En términos metodológicos, se recomienda que los futuros estudios evalúen los modelos con tareas de referencia comunes (Dunn et al., 2020), midan la estabilidad y no solo la energía de formación (Bartel et al., 2020) e incorporen estrategias para conjuntos pequeños, como la transferencia de aprendizaje o la estimación aproximada de propiedades (Chen et al., 2019; Zhang y Ling, 2018).

Esta revisión presenta limitaciones: la búsqueda se concentró en Google Académico y en documentos en inglés, el corpus fue reducido y los estudios usan métricas heterogéneas, lo que impide una comparación cuantitativa directa y orienta una lectura prudente de los hallazgos.

Vacíos de conocimiento y perspectivas futuras

Las líneas futuras identificadas son: (a) construir bases experimentales que vinculen composición, procesamiento, microestructura y propiedades mecánicas; (b) validar experimentalmente más materiales propuestos por modelos generativos, cuya evidencia aún se apoya en pocas síntesis (Zeni et al., 2025); (c) mejorar la caracterización automática en laboratorios autónomos (Leeman et al., 2024); y (d) cuantificar explícitamente el ahorro de tiempo, energía y costo frente a los métodos tradicionales, dato que casi ningún estudio reporta. En conjunto, la evidencia analizada permite sostener que la IA es más eficaz cuando opera en ciclos cerrados de predicción, experimento y reentrenamiento (Ren et al., 2018; Szymanski et al., 2023).

5. Conclusiones

La inteligencia artificial contribuye a reducir el tiempo y los recursos de desarrollo de materiales cuando se utiliza para decidir qué candidatos ensayar, y no como reemplazo del experimento. Los casos con mayor ahorro demostrado combinan un modelo sustituto con selección guiada por la incertidumbre y validación en laboratorio, lo que permite alcanzar propiedades objetivo con decenas de ensayos en espacios de cientos de miles o millones de composiciones.

La elección del algoritmo debe ajustarse a los datos: los ensambles de árboles son realistas para problemas industriales con información limitada, mientras que las redes de grafos y los modelos generativos requieren bases de gran escala centradas, por ahora, en propiedades calculadas.

Research Club Scientia Vol. 4, No 4, Octubre - Diciembre, pp. 1832-1844, ISSN: 3103 – 1315

Para la Ingeniería Industrial, el aporte de esta revisión es mostrar que la IA puede integrarse a la planificación de experimentos como una herramienta de reducción de costos, siempre que se acompañe de criterios de validación rigurosos.

Referencias

Agrawal, A., Deshpande, P. D., Cecen, A., Basavarsu, G. P., Choudhary, A. N., y Kalidindi, S. R. (2014). Exploration of data science techniques to predict fatigue strength of steel from composition and processing parameters. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 3*(1), 90–108. https://doi.org/10.1186/2193-9772-3-8

Bartel, C. J., Trewartha, A., Wang, Q., Dunn, A., Jain, A., y Ceder, G. (2020). A critical examination of compound stability predictions from machine-learned formation energies. *npj Computational Materials, 6*, Artículo 97. https://doi.org/10.1038/s41524-020-00362-y

Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., y Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature, 559*(7715), 547–555. https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

Chen, C., Ye, W., Zuo, Y., Zheng, C., y Ong, S. P. (2019). Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals. *Chemistry of Materials, 31*(9), 3564–3572. https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b01294

Choudhary, K., DeCost, B., Chen, C., Jain, A., Tavazza, F., Cohn, R., Park, C. W., Choudhary, A., Agrawal, A., Billinge, S. J. L., Holm, E., Ong, S. P., y Wolverton, C. (2022). Recent advances and applications of deep learning methods in materials science. *npj Computational Materials, 8*, Artículo 59. https://doi.org/10.1038/s41524-022-00734-6

de Jong, M., Chen, W., Notestine, R., Persson, K., Ceder, G., Jain, A., Asta, M., y Gamst, A. (2016). A statistical learning framework for materials science: Application to elastic moduli of k-nary inorganic polycrystalline compounds. *Scientific Reports, 6*, Artículo 34256. https://doi.org/10.1038/srep34256

Dunn, A., Wang, Q., Ganose, A., Dopp, D., y Jain, A. (2020). Benchmarking materials property prediction methods: The Matbench test set and Automatminer reference algorithm. *npj Computational Materials, 6*, Artículo 138. https://doi.org/10.1038/s41524-020-00406-3

Hart, G. L. W., Mueller, T., Toher, C., y Curtarolo, S. (2021). Machine learning for alloys. *Nature Reviews Materials, 6*(8), 730–755. https://doi.org/10.1038/s41578-021-00340-w

Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., y Persson, K. A. (2013). Commentary: The Materials Project: A

materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials, 1*(1), Artículo 011002. https://doi.org/10.1063/1.4812323

Leeman, J., Liu, Y., Stiles, J., Lee, S. B., Bhatt, P., Schoop, L. M., y Palgrave, R. G. (2024). Challenges in high-throughput inorganic materials prediction and autonomous synthesis. *PRX Energy, 3*(1), Artículo 011002. https://doi.org/10.1103/PRXEnergy.3.011002

Lookman, T., Balachandran, P. V., Xue, D., y Yuan, R. (2019). Active learning in materials science with emphasis on adaptive sampling using uncertainties for targeted design. *npj Computational Materials, 5*, Artículo 21. https://doi.org/10.1038/s41524-019-0153-8

Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., y Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature, 624*(7990), 80–85. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9

Rao, Z., Tung, P.-Y., Xie, R., Wei, Y., Zhang, H., Ferrari, A., Klaver, T. P. C., Körmann, F., Sukumar, P. T., Kwiatkowski da Silva, A., Chen, Y., Li, Z., Ponge, D., Neugebauer, J., Gutfleisch, O., Bauer, S., y Raabe, D. (2022). Machine learning–enabled high-entropy alloy discovery. *Science, 378*(6615), 78–85. https://doi.org/10.1126/science.abo4940

Ren, F., Ward, L., Williams, T., Laws, K. J., Wolverton, C., Hattrick-Simpers, J., y Mehta, A. (2018). Accelerated discovery of metallic glasses through iteration of machine learning and high-throughput experiments. *Science Advances, 4*(4), Artículo eaaq1566. https://doi.org/10.1126/sciadv.aaq1566

Schmidt, J., Marques, M. R. G., Botti, S., y Marques, M. A. L. (2019). Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. *npj Computational Materials, 5*, Artículo 83. https://doi.org/10.1038/s41524-019-0221-0

Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K., Zeng, Y., y Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature, 624*(7990), 86–91. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w

Ward, L., Agrawal, A., Choudhary, A., y Wolverton, C. (2016). A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. *npj Computational Materials, 2*, Artículo 16028. https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2016.28

Wen, C., Zhang, Y., Wang, C., Xue, D., Bai, Y., Antonov, S., Dai, L., Lookman, T., y Su, Y. (2019). Machine learning assisted design of high entropy alloys with desired property. *Acta Materialia, 170*, 109–117. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.03.010

Xie, T., y Grossman, J. C. (2018). Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. *Physical Review Letters, 120*(14), Artículo 145301. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.145301

Xue, D., Balachandran, P. V., Hogden, J., Theiler, J., Xue, D., y Lookman, T. (2016). Accelerated search for materials with targeted properties by adaptive design. *Nature Communications, 7*, Artículo 11241. https://doi.org/10.1038/ncomms11241

Zeni, C., Pinsler, R., Zügner, D., Fowler, A., Horton, M., Fu, X., Wang, Z., Shysheya, A., Crabbé, J., Ueda, S., Sordillo, R., Sun, L., Smith, J., Nguyen, B., Schulz, H., Lewis, S., Huang, C.-W., Lu, Z., Zhou, Y., . . . Xie, T. (2025). A generative model for inorganic materials design. *Nature, 639*(8055), 624–632. https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5

Zhang, Y., y Ling, C. (2018). A strategy to apply machine learning to small datasets in materials science. *npj Computational Materials, 4*, Artículo 25. https://doi.org/10.1038/s41524-018-0081-z