

## Informe Final del proyecto de investigación registrado ante Consejo Divisional de la DCNI

Fecha de presentación del informe	20/12/2024
Sesión de Consejo de aprobación	CUA- DCNI-217-21
Clave del proyecto asignada por Consejo Divisional	92 S217-21 No. estructura 47501018

1. **Título del proyecto:** Aplicaciones del Aprendizaje Automático en las Ciencias Naturales. Un enfoque interdisciplinario.

2. **Periodo para evaluar: 3 años.** Noviembre 2021-noviembre 2024.

3. **Responsable y participantes del proyecto:**

Dr. Roberto Bernal Jaquez (responsable), DCNI-UAM C

Dr. Gerardo Pérez Hernández, DCNI-UAM C

Dr. Antonio López Jaimes, DCNI-UAM C

Dr. Diego Antonio González Moreno, DCNI-UAM C

Dr. Luis Ángel Alarcón Ramos. DCNI-UAM C

Dr. Gilberto Sánchez González (Instituto Nacional de Salud Pública, INSP)

4. **Resumen de avances en el año a evaluar**

De acuerdo a la planeación aprobada por el consejo Divisional para estos 3 años, se cumplió ampliamente con las metas del proyecto:

### En investigación:

El proyecto planteaba la publicación de 4 artículos.

- Se publicaron 5 artículos + 4 que están todavía en arbitraje.

### En formación de recursos Humanos:

Se tenía contemplado en el proyecto: graduar al menos un estudiante de posgrado del PCNI a nivel maestría. En el proyecto:

- Se doctoró 1 alumno
- 1 está por doctorarse en 2025. El alumno presentó su examen pre-doctoral en 2024 y publicó su artículo de investigación.
- 1 alumno de maestría presentó su ICR
- 3 alumnos de maestría se incorporaron al proyecto en 2023. Terminaran y presentarán su ICR en 2025.
- 4 alumnos presentaron su trabajo de PT quedamos cortos en 1 (se planearon 5 pero uno aún está en proceso)

### Servicio Social:

Se tenía contemplado en el proyecto: 3 estudiantes hicieran Servicio social.

En el proyecto:

- 1 alumno terminó y presentó su reporte de servicio social
- 4 alumnos lo terminaron su servicio social pero no han

#### **Difusión:**

No se tenía contemplado en el proyecto acudir a congresos.

En el proyecto:

- Se asistió a 5 en congresos y reuniones
- Se presentaron 10 trabajos en congresos y reuniones
- Se dieron 5 charlas

Así mismo, es importante destacar que se viene trabajando en esta línea de investigación con el Dr. Felipe Aparicio y además, seguirá la colaboración con el Dr. Gerardo Pérez en la predicción de propiedades antimicrobianas de péptidos usando Aprendizaje automático.

#### **5. Grado de avance (GA):**

Objetivos	GA (%)	Productos	GA (%)
Objetivo 1. Clasificación y predicción de las propiedades fisicoquímicas de moléculas a partir de un subconjunto de datos de la base GDB-17 usando técnicas de Aprendizaje Automático supervisado (redes neuronales) así como heurísticas de optimización.	100%	ICR: "Aplicaciones del Aprendizaje de Máquina en a fisicoquímica teórica".	100%
		Proyecto Terminal: Redes Neuronales y Gráficas aplicados a la predicción de las propiedades moleculares (también aparece en objetivo 5)	100%
		Trabajos presentado en RMFQ Edicion 2022, 2023, 2024	100%
Objetivo 2. Clasificación de las moléculas de interés biológico usando métodos de aprendizaje no-supervisados y supervisados.	100%	1. Un artículo de investigación sometido para su publicación en una revista indexada. "Improving Molecular Similarity Metrics: A Comprehensive Evaluation Including the Mahalanobis Criterion"	100%
		2. Participación en 1 seminario dirigido a investigadores estudiantes, MexSiam 2024. RMFQT	100%
		3. Dirección de estudiante de maestría (a graduar en 2025). Ya logró usando Aprendizaje automático la predicción de péptidos antimicrobianos	80%

Objetivo 3. Predicción de series de tiempo usando Aprendizaje Automático para la determinación de los factores de riesgo e incidencia de los casos de Dengue en el estado de Morelos	100%	<p>Proyecto terminal: “Modelos de aprendizaje automático para la predicción de casos de personas infectadas por el virus de dengue en el municipio de Cuernavaca Morelos”.</p> <p>Publicaciones:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 2022. Model-Based Monitoring of Dengue Spreading, Alexander Schaum, Roberto Bernal-Jaquez and G. Sánchez-González. Revista JCR: IEEE Access, VOLUME 10, 126892, 2022DOI: <a href="https://doi.org/10.1109/ACCESS.2022.3224472">10.1109/ACCESS.2022.3224472</a></li> <li>2. 2022. Data-assimilation and state estimation for contact-based spreading processes using the ensemble kalman filter: Application to COVID-19, A. Schaum, R. Bernal-Jaquez, L. Alarcon Ramos Revista JCR: Chaos, Solitons and Fractals 157 (2022) 111887, <a href="https://doi.org/10.1016/j.chaos.2022.111887">https://doi.org/10.1016/j.chaos.2022.111887</a></li> <li>3. 2022. Modeling the spreading of dengue using a mixed population model, A. Schaum, R. Bernal Jaquez, C. Torres–Sosa, G. Sánchez-González. Revista JCR: IFAC PapersOnLine 55-20 (2022) 582–587 <a href="https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2022.09.158">https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2022.09.158</a></li> </ol>	<p>100%</p> <p>100%</p> <p>100%</p>
Objetivo 4. Ensayo de diversos modelos y técnicas de Aprendizaje automático en problemas de clasificación y predicción, así como de técnicas heurísticas de optimización	100%	<p>Asesoría de Servicio Social</p> <p>Proyecto terminal: Modelo de Regresión Logística vs K-means</p>	<p>100%</p> <p>100%</p>

		<p>Artículo de Investigación 2024. "Neuron configuration enhances the synchronization dynamics in ring networks with heterogeneous firing patterns" Investigación complementaria para elaborar el artículo</p> <p>Improving Molecular Similarity Metrics: A Comprehensive Evaluation Including the Mahalanobis Criterion". Sometido para su publicación en "Journal of chemical information and modeling"</p>	100%
		Trabajos presentado en RMFQ Edicion 2022, 2023, 2024	100%
		Trabajo presentado en Congreso Internacional de Redes Complejas	100%
		Publicación: 2023. Communities Detection in Multiplex Networks Using optimization: Study Case—Employment in Mexico during the COVID-19 Pandemic	100%
Objetivo 5. Estudio de modelos de Aprendizaje Automático que recurren a gráficas para solución de problemas (Geometric deep learning).	100%	<p>Proyecto Terminal: Redes Neuronales y Gráficas aplicados a la predicción de las propiedades moleculares</p> <p>Trabajos presentado en RMFQ Edicion 2022, 2023, 2024</p>	100%

## 6. Formación de recursos humanos:

Alumna/o	Título del trabajo	Nivel	Tipo de trabajo	Asesores	Estado
Servando Daniel López Reyes.	"Modelos de aprendizaje automático para la predicción de casos de personas infectadas por el virus de dengue en el	Licenciatura	Proyecto Terinal	Dr. Roberto Bernal Jaquez	Finalizada

	municipio de Cuernavaca Morelos”.				
Guillermo Augusto Hernández Neri.	Modelo de Regresión Logística vs K-means	Licenciatura	Proyecto Terminal	Dr. Roberto Bernal Jaquez	Finalizada
Diego Ramírez Ramírez	Redes Neuronales y Gráficas aplicados a la predicción de las propiedades moleculares	Licenciatura	Proyecto Terminal	Dr. Roberto Bernal Jaquez	Finalizada
José Ángel Gutiérrez Cuevas	Redes Neuronales y Gráficas aplicados a la predicción de las propiedades moleculares	Licenciatura	Proyecto Terminal	Dr. Roberto Bernal Jaquez	Finalizada
Luis Ángel Alarcón Ramos	“Análisis y control de la dinámica de propagación de información en redes complejas: un modelo Markoviano en tiempo discreto”	Doctorado	Tesis Doctoral	Dr. Roberto Bernal Jaquez, Director,  Dr. Alex Schaum, Codirector.	Finalizada
León Francisco Alday Toledo.	“Aplicaciones del Aprendizaje de Máquina en a fisicoquímica teórica”.	Maestría	ICR	Dr. Roberto Bernal Jaquez	Finalizada
Agustín Farrera Megchum	Estudio de los efectos del acoplamiento y la topología de la red sobre la sincronización en osciladores neurales	Doctorado	Tesis Doctoral	Roberto Bernal Jaquez	En proceso A terminar en 2025
Roberto Carlos Romero Huerta	Uso del Aprendizaje automático en la solución de problemas físicos descritos por ecuaciones diferenciales parciales	Maestría	ICR	Roberto Bernal Jaquez	En proceso A terminar en 2025
Luis Guillermo Cruz Estrada	Determinación y predicción de péptidos con actividad antimicrobiana usando redes neuronales.	Maestría	ICR	Roberto Bernal Jaquez	En proceso A terminar en 2025
Emiliano Montoya González	Optimización en computación cuántica: estudio y realización del algoritmo QAOA	Maestría	ICR	Roberto Bernal Jaquez	En proceso A terminar en 2025

## 7. Lista de publicaciones:

4. 2022. Model-Based Monitoring of Dengue Spreading, Alexander Schaum, Roberto Bernal-Jaquez and G. Sánchez-González. Revista JCR: IEEE Access, VOLUME 10, 126892, 2022DOI: [10.1109/ACCESS.2022.3224472](https://doi.org/10.1109/ACCESS.2022.3224472)
5. 2022. Data-assimilation and state estimation for contact-based spreading processes using the ensemble kalman filter: Application to COVID-19, A. Schaum, R. Bernal-Jaquez, L. Alarcon Ramos  
Revista JCR: Chaos, Solitons and Fractals 157 (2022) 111887,  
<https://doi.org/10.1016/j.chaos.2022.111887>
6. 2022. Modeling the spreading of dengue using a mixed population model, A. Schaum, R. Bernal Jaquez, C. Torres–Sosa, G. Sánchez-González.  
Revista JCR: IFAC PapersOnLine 55-20 (2022) 582–587  
<https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2022.09.158>
7. 2023. Communities Detection in Multiplex Networks Using optimization: Study Case—Employment in Mexico during the COVID-19 Pandemic, Edwin Montes-Orozco, Roman Anselmo Mora-Gutiérrez, Sergio Gerardo De-Los-Cobos-Silva, Roberto Bernal-Jaquez, Eric Alfredo Rincón-García , Miguel Angel Gutiérrez-Andrade and Pedro Lara-Velázquez.  
Revista JCR: Complexity Volume 2023, Article ID 9011738  
<https://doi.org/10.1155/2023/9011738>
8. 2024. “Neuron configuration enhances the synchronization dynamics in ring networks with heterogeneous firing patterns”, Agustin Farrera-Megchun, Pablo Padilla-Longoria, Gerardo J. Escalera Santos, Jesús Espinal-Enríquez, Roberto Bernal-Jaquez.  
Revista JCR: Chaos, Solitons and Fractals 187 (2024) 115461  
<https://doi.org/10.1016/j.chaos.2024.115461>.

## En refereo:

- "Subthreshold periodic perturbations cause multistability and complex resonances in a neuron". Sometido para su publicación en la revista "*Nonlinear Dynamics*".
- Pacemaker position and network topology affect the synchronization patterns in coupled Huber-Braun neurons. Sometido para su publicación en la revista "*Cognitive Neurodynamics*".
- "Improving Molecular Similarity Metrics: A Comprehensive Evaluation Including the Mahalanobis Criterion". Sometido para su publicación en "*Journal of chemical information and modeling*".
- Prediction of dengue outbreaks in Morelos using SVR with climatic variables predicted using neural networks. Sometido para su publicación en *Foundations*.

## 8. Lista de presentaciones en congresos:

<b>Autores</b>	<b>Título del trabajo</b>	<b>Nombre del congreso</b>	<b>Lugar y fecha de realización</b>	<b>Modalidad</b>
Elliot Ridout-Buhl, Emiliano Montoya, León Alday-Toledo, Roberto Bernal-Jaquez, Felipe Aparicio	"Análisis de la Base de Datos QM9 Usando Mol2Vec: Clusterizado y Correlación de Propiedades Electrónicas"	XXII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.	Universidad Autónoma de Chihuahua, 8 de Noviembre 2024.	Oral
Daniela Aguirre Guerrero, Ismael Robles Martínez, Roberto Bernal Jaquez, Alejandro Sánchez Zarate, Ricardo Marcelín Jiménez	Análisis y visualización de la evolución de tópicos a lo largo del tiempo: El caso de la investigación generada en la UAM.	Segundo Coloquio Internacional Multidisciplinario y Transdisciplinario de Visualización (MUTVI).	UAM-Azcapotzalco 27 de marzo del 2024.	Oral
Roberto Bernal Jaquez	Redes complejas y Machine learning en el descubrimiento de moléculas de interés farmacológico	Reunión Anual de la MexSiam 2024	Universidad Modelo, Mérida, Yucatán, 4 de diciembre 2024	Oral
Edwin Montes-Orozco, Roman Anselmo Mora-Gutiérrez, Roberto Bernal-Jaquez, Daniela Aguirre-Guerrero	Analysis of Violence Patterns in Mexico	The 12th International Conference on Complex Networks and Their Applications.	Menton, Francia. 28 de Noviembre 2023.	Oral en Plenaria, Presentado por: Roberto Bernal Jaquez
Emilio Zaldívar-Hanke, León Alday-Toledo, Felipe Aparicio, Roberto Bernal-Jaquez	Aplicación de Redes Neuronales Gráficas en el Cálculo de Propiedades Químicas	XXI Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica	UAEH, Pachuca, Hidalgo. 10 Noviembre del 2023.	Oral
León Alday-Toledo, Felipe Aparicio, Saúl	Exploración de los arquetipos de funciones de activación. El caso de la química computacional.	XXI Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica	UAEH, Pachuca, Hidalgo. 9 Noviembre del	Oral

Zapotecas-Martínez, José L. Mendoza Cortés, Roberto Bernal-Jaquez			2023.	
León Alday-Toledo, Roberto Bernal-Jaquez y Felipe Aparicio	Determinación de la Toxicidad en Moléculas usando Machine Learning no supervisado	XXI Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica	UAEH, Pachuca, Hidalgo. 9 Noviembre del 2023.	Oral
Roberto Bernal Jaquez	¿Cómo funciona el Chat-GPT? Una explicación para estudiantes.	Actividades del Instituto Carlos Graef	UAM-Iztapalapa. 30 de Septiembre de 2023.	Oral y en Internet
Bernal Jaquez, R., Alday-Toledo, L., Zapotecas-Martínez, S. & Mendoza, J.	"Composición atómica y AdaBelief: la estequiometría implica propiedades termodinámicas."	XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica	XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, UAEM, Cuernavaca, Morelos, 17/11/2022	Oral
Bernal Jaquez, R., Alday-Toledo, L., Zapotecas-Martínez, S.	"Dannte, una implementación accesible del Aprendizaje de Máquina."	XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica	XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, UAEM, Cuernavaca, Morelos, 17/11/2022	Oral
Aparicio, F., Alday-Toledo, L., Zapotecas-Martínez, S., Bernal Jaquez, R.	"Predicción de las propiedades electrónicas de pigmentos usando redes neuronales"	XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica	XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, UAEM, Cuernavaca, Morelos, 17/11/2022	Oral
Bernal Jaquez, R.	"Redes neuronales en Fisicoquímica teórica. Métodos y resultados"	VII Encuentro de Modelado Matemático en Física y Geometría	UAM Cuajimalpa, 01/12/2022	Oral

**9. Tabla comparativa entre lo establecido en el calendario de actividades y lo alcanzado hasta la entrega del informe anual (incluir únicamente cantidades).**

Producto entregable	Planeado para el periodo de evaluación	Reportado en el periodo
Formación de recursos humanos nivel licenciatura		



Servicio Social	3	1 (4 terminaron sin reporte aún)
Proyecto terminal	5	4 alumnos
Tesis de licenciatura	0	0
<b>Formación de recursos humanos posgrado</b>		
Especialización Maestría	1 Maestría	1 Maestría
Doctorado	0	1
<b>Publicaciones</b>		
Artículos	4	5 + 4 (sometidos)
Capítulos de libro	0	0
Memorias o Proceedings	0	0
<b>Difusión o Divulgación</b>		
Congresos	0	5
Conferencias	0	5
<b>Otros: Especificar y proveer detalle del producto</b>		
Por parte del Dr. Bernal Jaquez En Formación de Recursos Humanos se incorporaron al Proyecto y están por graduarse; • 3 estudiante de Maestria (incorporados en 2023 y por graduarse en 2025) • 1 estudiante de Doctorado (incorporados en 2022 y por graduarse en 2025) • Al menos 4 estudiante servicio social pero no han presentado su reporte (no se reportan en este informe)		

**10. Justificación en caso de existir desviaciones en el proyecto.**

Sólo hubo desviaciones en el Servicio Social. Los alumnos terminaron pero aún no presentan su reporte.

**11. Atención a observaciones al informe anual previo por parte del Consejo Divisional (cuando aplique).**