

Diseño experimental de una ontología de inteligencia artificial aplicada a materiales superconductores

Gabriel J. C-Osorio¹, Julián A. Gómez R.¹, David E. Zapata N.¹, Sara Natalia Herrera Penagos¹

¹Institución Universitaria Pascual Bravo, Facultad de Ingeniería, Grupo GIEN, Semillero R3, Medellín, Colombia.

INTRODUCCIÓN

El sector energético enfrenta el reto urgente de incrementar su eficiencia y sostenibilidad. Los materiales superconductores ofrecen una solución transformadora al permitir la conducción de electricidad sin pérdidas. Sin embargo, optimizar sus propiedades críticas es un proceso lento y costoso, limitado por el proceso de prueba y error inherente al desarrollo de materiales. La Inteligencia Artificial (IA) surge como una herramienta estratégica para acelerar este proceso mediante modelos predictivos capaces de identificar patrones ocultos y anticipar el comportamiento de los materiales. Este proyecto, en etapa de desarrollo, expone el diseño experimental de la primer ontología en un proceso de 8 pasos en la que la IA es aplicada al diseño de superconductores, como marco para comparar arquitecturas y validar su factibilidad en la optimización de propiedades críticas

En respuesta a estas limitaciones, el presente trabajo propone el diseño experimental de una ontología que integre conocimiento físico, químico y computacional, constituyéndose en la primera aproximación estructurada para organizar, relacionar y comparar arquitecturas de IA aplicadas al diseño de materiales superconductores. Esta iniciativa busca sentar las bases para un marco unificado de descubrimiento acelerado de materiales, contribuyendo directamente al cumplimiento del Objetivo de Desarrollo Sostenible 7 (Energía asequible y no contaminante) y al fortalecimiento de la transición hacia una matriz energética limpia y eficiente.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El desarrollo de materiales superconductores enfrenta un desafío crítico que limita el avance hacia el ODS 7 de energía asequible y no contaminante; la optimización de sus propiedades es un proceso lento y costoso, restringido por el espacio composicional que supera las capacidades de la experimentación y la teoría tradicionales. Esta limitación toma relevancia cuando 675 millones de personas carecen de acceso a electricidad y el mundo necesita duplicar la tasa de mejora de la eficiencia energética para 2030. Aunque la Inteligencia Artificial (IA) ofrece nuevas oportunidades para acelerar el descubrimiento de superconductores que puedan reducir las pérdidas energéticas hasta en un 40%, existen barreras como: (i) La falta de arquitecturas estandarizadas (ii) La escasez de datos robustos y (iii) La ausencia de comparativas sistemáticas. Lo que dificulta su aplicación práctica en la transición hacia energías renovables y sostenibles esencial para alcanzar las metas energéticas globales de 2030. Esta situación genera una brecha entre el potencial teórico de los superconductores y su aplicación real en la transición energética global, dificultando la generación de soluciones industriales sostenibles y de alto impacto.

OBJETIVOS GENERAL Y ESPECÍFICOS

Diseñar una ontología de inteligencia artificial aplicada al análisis de materiales superconductores como soporte para la organización, clasificación y representación del conocimiento.

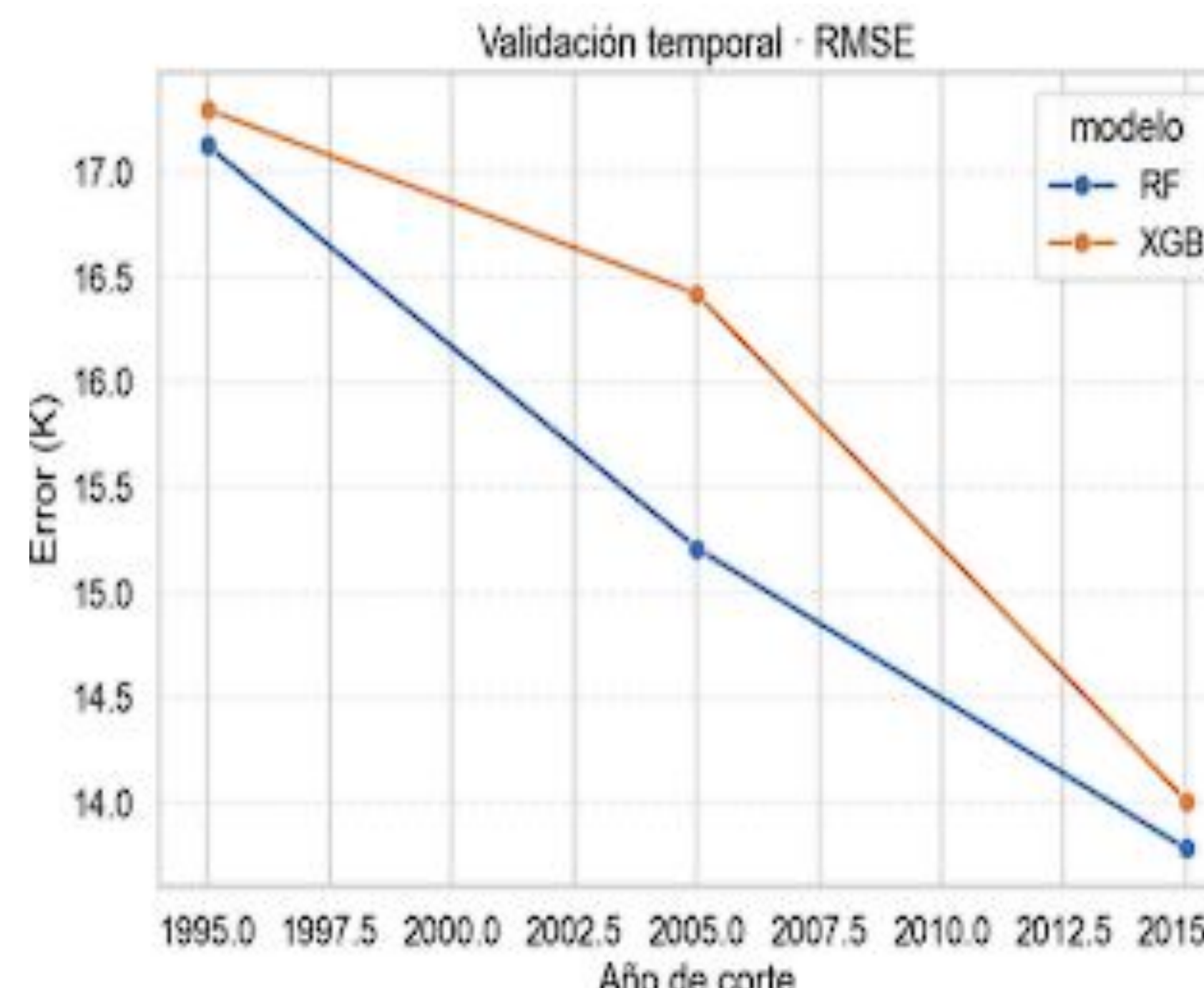
Estructurar la base conceptual de la ontología mediante la integración de las propiedades físicas y químicas de los materiales superconductores con las clases, relaciones y atributos definidos en el modelo.

Implementar la ontología en un entorno experimental de inteligencia artificial para validar su aplicabilidad en la organización y análisis de datos científicos.

Comparar la eficacia de la ontología propuesta frente a enfoques tradicionales de representación del conocimiento, considerando su capacidad de sistematización y análisis.

METODOLOGÍA

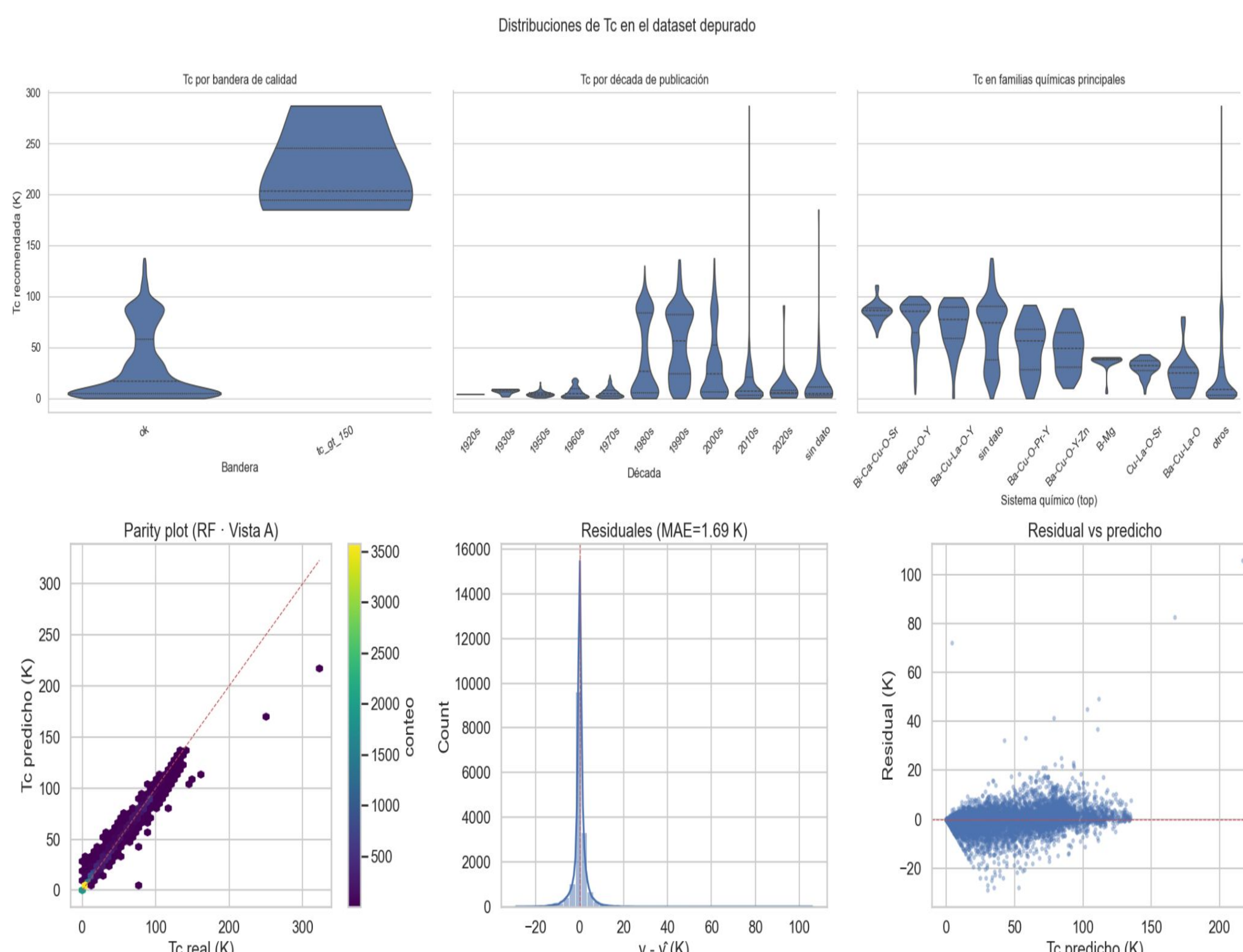
Línea de Tiempo del Proyecto



ECUACIONES DE BÚSQUEDA



RESULTADOS PRELIMINARES



DISCUSIONES

El desarrollo experimental permitió identificar la viabilidad del uso de algoritmos basados en árboles de decisión —especialmente XGBoost— para la predicción de la temperatura crítica (Tc) en materiales superconductores. Estos resultados evidencian que la Inteligencia Artificial puede capturar relaciones no lineales entre descriptores estructurales y propiedades físicas, superando los límites del enfoque tradicional de prueba y error. Sin embargo, el estudio también revela desafíos estructurales en la modelación de materiales superconductores: la escasez de bases de datos robustas y estandarizadas, la dispersión de fuentes de información y la falta de interoperabilidad semántica entre dominios físico-químicos y computacionales. Estas limitaciones justifican el diseño de una ontología especializada, concebida como un marco conceptual y computacional que permita unificar descriptores, facilitar la interoperabilidad de datos y habilitar comparaciones sistemáticas entre arquitecturas de IA.

La ontología propuesta representa así un primer paso hacia la construcción de un ecosistema de datos inteligente para el descubrimiento de nuevos materiales energéticamente eficientes. Al integrar información electrónica, estructural y magnética, se sientan las bases para generar modelos predictivos más explicativos, transparentes y reproducibles. En fases posteriores se busca validar esta ontología mediante su aplicación a datasets ampliados y su articulación con herramientas de *machine learning explainable* (XAI). En perspectiva, esta aproximación podría acelerar significativamente el diseño de materiales superconductores sostenibles, contribuyendo al logro del ODS 7: Energía asequible y no contaminante, y fortaleciendo la articulación entre la investigación científica, la inteligencia artificial y la transición energética global.

REFERENCIAS

