CIENCIAS EXACTAS - #12

REVISTA

DE LAS JORNADAS DE JÓVENES INVESTIGADORES

LA EDUCACIÓN Y LA CIENCIA TRANSFORMAN REALIDADES



Asociación de Universidades
GRUPO MONTEVIDEO

UNT
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN

Revista de las Jornadas de Jóvenes Investigadores
Eje Ciencias Exactas, Volúmen 12.

© 2025, Asociación de Universidades del Grupo Montevideo.

ISSN 3121-2182

Tucumán, Argentina. Noviembre de 2025.

Asociación de Universidades
GRUPO MONTEVIDEO

UNT
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN

Contenido

Comparación de sistemas one-pot para la producción simultánea de galacto-oligosacáridos y péptidos bioactivos a partir de suero de leche 5
Ignacio Plaza

Desarrollo e integración de un modelo predictivo para la calidad del agua en Esval.....20
Carla Silva Saavedra

Programação genética para a aprendizagem de índices na classificação de áreas com cana-de-açúcar.....41
Kwan Sung Jang

Ecosistemas en ruptura: fragmentación y cambios en la cobertura del suelo en el Planalto Serrano Catarinense.....53
Enzo Gonçalves Luciano

Oxidación de agua mediada por un complejo de Cu^{II}.....73
Maximiliano Arancibia

Destilador solar activo apoyado por membrana de óxido de grafeno.....87
Gustavo Varela

Estudio estructural, morfológico y eléctrico de la familia de $Na_2Zn_2TeO_6$ dopada en un amplio rango de temperaturas.....96
Rocío Celeste Salgado

La inteligencia artificial y la toma de decisiones judiciales: límites tecnológicos, éticos y jurídicos.....116
Alejandra López

Evaluación de la capacidad antifúngica de aceites esenciales de anís (*Pimpinella anisum*).....135
Carlos Sebastián Salcedo

Inflación y déficit fiscal: una aplicación de redes bayesianas.....142
Daniela Agostina Gonzalez

Nivel de aplicación de inteligencia artificial en estudiantes de la carrera de Medicina. Año 2025.....153
Alex Cristaldo

Evaluación de la actividad antiprotozoaria y la toxicidad del sesquiterpeno α-Humuleno.....163
Keyla Melgarejo

Desarrollo de sistema de monitoreo de gases indicadores de la calidad del aire interior con aplicación de IOT, en el Centro Multidisciplinario de Investigaciones Tecnológica……182
Augusto Iván León Piris

Atividade citotóxica seletiva do óleo essencial rico em sesquiterpenos de *Euphorbia leucocephala* (Euphorbiaceae).....202
Izabela F. Francisco

Morfogénesis computacional aplicada a la arquitectura: pruebas de diseño biomimético para un pabellón en la Plaza João Francisco de la ciudad de Goiás.....220
João Ribeiro

Síntesis enantioselectiva de potenciales bioherbicidas.....238
Juan Vega

Evaluación del impacto de técnicas de ataque adversario en Modelos de Clasificación de Señales EEG.....246
Beatriz Conceição da Costa

30. Productos naturales bioactivos y sus aplicaciones

Comparación de sistemas one-pot para la producción simultánea de galacto-oligosacáridos y péptidos bioactivos a partir de suero de leche

Autor: Ignacio Plaza González; ignacio.plazag@postgrado.uv.cl
Orientador/a: Dr. Andrés Córdova; andres.cordova@pucv.cl
Universidad de Valparaíso / Facultad de Farmacia

Resumen

El suero de leche es un subproducto con alto potencial bioactivo, cuya gestión inadecuada genera un gran impacto ambiental. Sin embargo, mediante bioconversión enzimática sus proteínas pueden hidrolizarse en péptidos, mientras que su contenido de lactosa transformado en prebióticos (galacto-oligosacáridos). Este estudio evaluó el efecto de 2 proteasas comerciales (Protamex y Alcalase) en un sistema one-pot para la producción simultánea de péptidos bioactivos y galacto-oligosacáridos en suero de leche concentrado. Estos últimos producidos mediante β-galactosidasa de *Aspergillus oryzae*. Se determinó GH% con el ensayo OPA y la actividad antioxidante mediante ABTS. Se observó una cinética típica de hidrólisis, alcanzando un GH% máximo cercano al 9% a los 120 minutos con Protamex, mientras que con Alcalse se obtuvo 14% en las mismas condiciones de reacción. La actividad antioxidante, alcanzó valores cercanos a 2 ET mg/ml para Protamex, mientras que los estudios paralelos con Alcalase bajo las mismas condiciones, mostraron una capacidad antioxidante mayor a 120.000 ET mg/ml. Los resultados sugieren que la especificidad de corte de la proteasa es determinante en la generación de péptidos bioactivos en términos de capacidad antioxidante.

Palabras clave: suero de leche, hidrólisis enzimática, péptidos bioactivos

Introducción

El suero de leche es un subproducto derivado de la producción de queso. Representa el 90% del volumen total de la leche y retiene el 50% de los nutrientes. El contenido seco del suero es mayoritariamente lactosa y proteínas (Tabla 1) (E. Zandona et al., 2021)

Tabla 1: Composición del suero de leche.

Componente	% v/v
Lactosa	70%
Proteínas	14%
Minerales	9%
Lípidos	4%
Ácido láctico	3%

Se estima que la producción anual de suero es de 180 millones de toneladas, con una proyección de 240 millones para el 2030. Actualmente, la mitad del suero se procesa y el resto se descarta, lo que convierte su gestión en un desafío relevante para la industria láctea. (D. Buchanan et al., 2023; (L. B. Olvera-Rosales et al., 2025). El suero presenta DBO entre 45–60 g/L y DQO entre 50–102 g/L; su vertido sin tratamiento puede alterar propiedades fisicoquímicas de suelo y cuerpos de agua, disminuyendo el oxígeno disuelto y afectando seriamente los ecosistemas (R. Chourasia et al., 2022).

La valorización industrial se ha enfocado principalmente en su fracción proteica, debido a su alto valor nutricional y funcional. De hecho, en 2019, el mercado global de productos derivados del suero alcanzó los 7.800 millones USD (R. Chourasia et al., 2022). Para la obtención de concentrados y polvos, se emplean métodos fisicoquímicos, como filtración por membranas y secado por atomización, para generar productos con distintos contenidos proteicos. (JSS Yadav et al., 2015).

Aunque la lactosa tiene un mercado relevante (farmacéutico y alimentario), su baja solubilidad, bajo rendimiento, bajo precio e intolerancia por parte de la población, han impulsado su bioprocesamiento enzimático hacia compuestos de mayor valor, como los galacto-oligosacáridos (GOS) (R. Mehra et al., 2021).

Los GOS son cadenas cortas de carbohidratos que contienen de dos a cinco unidades de galactosa con un residuo de glucosa terminal y no son degradados por las enzimas en el intestino humano, lo que incrementa su bioactividad. Se obtienen principalmente por transgalactosilación de lactosa catalizada por β-galactosidasa (β-gal). Durante este proceso, la lactosa se une al sitio activo de la lactasa, se libera glucosa y se forma un intermedio galactosil-enzima. Ese residuo galactosilo puede transferirse a otra lactosa, originando un trisacárido (GOS-3) que, a su vez, actúa como aceptor para formar GOS-4, GOS-5, etc. Así, la lactosa cumple un doble rol (donador/aceptor). El agua compite como aceptor y favorece la hidrólisis por sobre la transgalactosilación (Vera et al., 2016; N. Deshmukh et al., 2024).

La actividad de la β-gal condiciona el potencial de transgalactosilación de la lactosa y factores como la temperatura, pH y concentración de sustrato (lactosa) influyen en el rendimiento de los GOS. Las β-gal pueden ser producidas por una variedad de microorganismos, como *Aspergillus oryzae, Kluyveromyces lactis* y *Bacillus circulans*, que son los más utilizados y han demostrado un potencial para producir mezclas de GOS, que son utilizados como prebióticos para aumentar la actividad beneficiosa del microbiota intestinal (*Bifidobacterium* y *Lactobacillus*) (F. Duan et al., 2021). Además, sirven como sustrato para la producción de ácidos grasos de cadena corta (SCFAs), particularmente el butirato, que participa en el mantenimiento de la barrera mucosa intestinal y modula el sistema inmune en infante y adultos. Una disbiosis del intestino es provocada por la reducción de la diversidad microbiana, lo que se asocia a condiciones crónicas de inflamación y desorden metabólicos, como obesidad y diabetes tipo II. Estos compuestos contribuyen la prevención de estas enfermedades. (A. Córdova et al., 2023; V. Gallo et al., 2024)

Los GOS se diferencian de otros prebióticos, como inulina y fructo-oligosacaridos (FOS) debido a que los GOS toleran altas temperaturas y bajos pHs, lo que permite su incorporación a diferentes matrices alimentarias. Además, presentan similitudes estructurales con los oligosacáridos de la leche humana (HMOs), lo que respalda su uso en

alimentos funcionales y fórmulas infantiles (Vera et al., 2016; N. Deshmukh et al., 2024). De hecho, se espera que el mercado global de prebióticos sea de 10,55 mil millones para el 2025 y en específico, el mercado de GOS podría ascender a más de 16 mil millones para el 2026 (F. Duan et al., 2024; N. Deshmukh et al., 2024)

Otro componente con alto valor son las proteínas de la leche. Se agrupan en caseínas (80%) y proteínas del suero (20%), siendo estas últimas de gran interés por su alto valor biológico y su capacidad de generar péptidos bioactivos tras hidrólisis enzimática (E. Zandona et al., 2021; Ganju, S., & Gogate, P.R., 2017). El mercado global de las proteínas del suero (Tabla 2) alcanzó los 5,44 mil millones en 2021 y se proyecta un crecimiento anual del 10.78% al 2030 (AT. Pillai et al., 2024)

Tabla 2: Concentración de proteínas del suero.

Fracción proteica del suero	Concentración respecto al total proteico de suero
β-lactoglobulina	50%
α-lactoalbúmina	23%
Inmunoglobulinas	8%
Albumina de suero	5%
Lactoferrina	1%

La β-lactoglobulina (β-LG) es la proteína mayoritaria del suero, pesa 18,4 kDa, tiene un pI de 5,1 y una secuencia de 162 aa.(A.F. Pires et al., 2021; Ganju, S., & Gogate, P.R., 2017). Es abundante en productos como el WPI, mejorando emulsificación, viscosidad y gelificación. Puede unir a compuestos hidrofóbicos (vitaminas liposolubles, lípidos), dada su similitud con la proteína transportadora de retinol (JSS Yadav et al., 2015) La α-lactoalbúmina (α-LA) pesa14 kDa, tiene un pI de 4,2–4,6 (Kamau et al., 2021). Se le asocian funciones fisiológicas como biodisponibilidad de triptófano, estado de ánimo, cognición y sueño, además de efectos sobre oxidación lipídica, masa magra, absorción mineral e incluso propiedades inmunomoduladoras, antimicrobianas y antitumorales (JSS

Yadav et al., 2015). En menor proporción, el suero contiene inmunoglobulinas, albúmina sérica y lactoferrina, todas vinculadas a funciones inmunológicas y de defensa, reforzando el rol de estas proteínas como compuestos bioactivos (L. B. Olvera-Rosales et al., 2025).

A partir de estas proteínas es posible producir péptidos bioactivos. Estos son fragmentos cortos de 2 a 20 aminoácidos con propiedades fisiológicas específicas. Para la obtención de péptidos, se puede emplear hidrolisis química o fermentación, sin embargo, la hidrolisis enzimática del suero es la forma más común de obtener péptidos bioactivos. Principalmente por la acción de proteasas de origen microbiano (A. Luparelli et al., 2025).

La proteasa mejor documentada es la Alcalasa, una endoproteasa bacteriana aislada desde *Bacillus Subtilis/B. licheniformis.* Esta proteasa presenta un amplio rango de sustratos y gran especificidad. Su pH óptimo esta entre 8-10 y su temperatura entre 50-60°C. Protamex es un preparado comercial mixto de endoproteasas con exoproteasas, lo que permite una actividad neutra, moderando el amargor de los hidrolizados. Trabaja a pH 6,5-8 y entre 50-60°C y se obtiene desde *Bacillus* sp. (A. Brandelli et al., 2015; JM Irazoqui et al., 2024; M. Saubenova et al., 2024: ,M. Czelej et al., 2025).

La síntesis de péptidos ha demostrado una mejora en la digestión de proteínas y una reducción de la alergenicidad debido a que la fragmentación facilita la absorción y transporte de los péptidos al torrente sanguíneo (G. Di Filippo et al., 2024). En particular, los péptidos del suero muestran actividades biológicas que se relacionan directamente con su composición y secuencia, lo que explica su alta bioactividad para prevención o manejo de diversas condiciones, como hipertensión, estrés oxidativo y diabetes. (L. B. Olvera-Rosales et al., 2025).

Los métodos tradicionales para la obtención de compuestos bioactivos suelen requerir múltiples etapas para purificar los productos, resultando en baja eficiencia, perfiles peptídicos variables y altos costos (B.A. Farhan et al., 2023). En cambio, la biocatálisis enzimática resulta particularmente atractiva, ya que las enzimas son

biodegradables, altamente selectivas y pueden operar en conjunto si comparten condiciones operativas (E. Ricca et al., 2011).

Los sistemas multienzimáticos integran varias enzimas que actúan de forma coordinada sobre un mismo sustrato/producto, mejorando eficiencia de conversión, tiempos y costos, y reduciendo etapas intermedias y residuos. También pueden organizarse en complejos funcionales con sinergias catalíticas done la hidrólisis combinada o secuencial con endo y exoproteasas permite aumentar la eficiencia de la hidrólisis de las proteínas, lo que conlleva a una menor alergenicidad, mejora el sabor amargo y las propiedades funcionales de los péptidos (B.A. Farhan et al., 2023; L. Pang et al., 2024).

Una estrategia prometedora para los sistemas multienzimáticos es el uso de reactores one-pot donde múltiples reacciones enzimáticas ocurren en un solo reactor y no requieren necesariamente de filtraciones entre procesos (B.A. Farhan et al., 2023). Esta configuración se ha explorado para la síntesis directa de ingredientes funcionales (péptidos bioactivos, oligosacáridos y metabolitos) (E. Ricca et al., 2011; B.C. Ghosh et al., 2017). Los complejos multienzimáticos ofrecen eficiencia y control, aunque pueden ser difíciles de ajustar y sensibles a pH, temperatura y concentración de sustrato (B.A. Farhan et al., 2023).

Por lo anterior, estudiar la compatibilidad enzimática y caracterizar la actividad bajo condiciones compartidas es clave para diseñar sistemas one-pot aplicados a matrices complejas como el suero de leche y, con ello, obtener ingredientes naturales con funcionalidades diferenciadas.

Objetivos

Evaluar los perfiles de bioactividad de los productos obtenidos a través de un sistema one-pot con diferentes proteasas comerciales.

Materiales y Métodos

Preparación del sustrato

Se preparó un formulado de suero que contenía 3,5% m/m de proteínas de suero y 38,5% m/m de lactosa comercial, disuelto en tampón fosfato y ajustado a pH 6,5 mediante ácido

cítrico. Todas las reacciones enzimáticas se realizaron a 60 °C bajo agitación controlada.

Para la hidrólisis proteica se empleó Protamex (1,5 AU/g), a una dosis equivalente de 0,07 unidades de actividad enzimática por gramo de proteína. La conversión de lactosa a GOS se llevó a cabo con β-galactosidasa (2,5 AU/g), aplicada a una dosis de 100 unidades de actividad enzimática por gramo de lactosa.

En el tratamiento 1 (T1) se utilizó únicamente Protamex, mientras que en el tratamiento 2 (T2) se aplicó Protamex seguido, 30 segundos después, de β-galactosidasa. Ambos tratamientos se desarrollaron durante 120 minutos, con toma de muestras a los 0, 10, 60 y 120 minutos. Estas muestras fueron utilizadas en los ensayos de ABTS y OPA.

Para la inactivación enzimática, las alícuotas recolectadas se trataron con tricloroacético (TCA) al 10% v/v en una proporción 1:1, seguidas de centrifugación a 10.000 rpm durante 10 minutos, recuperando el sobrenadante para los análisis posteriores (A. Córdova et al., 2023)

Grado de hidrolisis

El Grado de Hidrolisis (GH%) se evaluó mediante ensayo OPA (340 nm; curva de L-serina) y aplicando la Ecuación 1

$$DH = \frac{h}{h_{tot}} \times 100\% \quad \text{Ecuación 1.}$$

Donde: h es el número de enlaces peptídicos hidrolizados y h_{tot} es la suma de los enlaces peptídicos de la proteína.

Para calcular h_{tot} se utilizó un factor de conversión de nitrógeno (Ecuación 2), que, en el caso de las proteínas del suero, es 6,38 (g proteína/g Nitrógeno) (JL Maubois & D. Lorient, 2016)

$$h_{tot} = \frac{1}{6{,}38}\left[\frac{gn}{gproteina}\right] \times \frac{1}{14}\left[\frac{mol_N}{g_N}\right] \times 1000\left[\frac{mmol}{mol}\right] = 11{,}196\left[\frac{mmol}{gproteina}\right]$$

Ecuación 2.

Los datos recolectados de cada tratamiento fueron utilizados para graficar la concentración de α-NH liberados en función del tiempo de reacción y para estimar los parámetros a y b en la Ecuación 3.

$$P(t) = \left(\frac{1}{b}\right) \ln ln\,(abt + 1) \quad \text{Ecuación 3.}$$

Donde: P es la concentración de α-NH liberados, t es el tiempo de reacción y a y b son parámetros cinéticos. La constante cinética a, correspondiente a

la velocidad inicial de reacción, se representará gráficamente en función de la concentración de proteasa. La pendiente de este gráfico corresponde a la actividad específica de cada proteasa (S. Valdivia et al., 2025)

Actividad Antioxidante

Para determinar la capacidad antioxidante de los hidrolizados, se generó el radical ABTS con persulfato de potasio (1:1, agua desionizada) y se incubó 16 horas en oscuridad a temperatura ambiente. Para el ensayo, se diluyo la solución stock del radical ABTS, hasta obtener una absorbancia de 0,7 a 734nm. Las muestras mezclaron con la solución stock a distintas concentraciones y se incubó por 7minutos en oscuridad para medir absorbancia a 734 nm (el control negativo fue solución stock ABTS diluida y sin muestra). (M. Czelej et al., 2025)

Análisis estadístico

Todos los resultados fueron expresados como la media ± desviación estándar (SD) de tres replicas. El efecto sobre las propiedades bioactivas se evaluó mediante pruebas ANOVA de dos factores ($\alpha = 0,05$) y los cálculos se realizaron con Excel de Microsoft 365®.

Resultados y discusión

Durante la hidrólisis proteica se liberan grupos α-amino, los cuales pueden ser cuantificados mediante el ensayo con ortoftaldialdehído (OPA). Este reactivo reacciona específicamente con los grupos α-amino libres ($–NH_2$) presentes en péptidos y aminoácidos, en presencia de ditiotreitol (DTT), formando un complejo coloreado y fluorescente. Dicho complejo puede detectarse espectrofotométricamente a 340 nm, donde la intensidad de la señal es directamente proporcional a la concentración de aminoácidos libres. A partir de estos datos se calcula GH%, que expresa la fracción de enlaces peptídicos que han sido escindidos (L. B. Olvera-Rosales et al., 2025).

En los tratamientos evaluados con Protamex (T1 y T2), se observó una curva de hidrólisis típica (Figura 1). Durante los primeros minutos la reacción presentó una fase exponencial, seguida por una disminución en la pendiente que condujo a una fase casi estacionaria. El

GH% máximo se alcanzó a los 120 minutos en ambos tratamientos, con un valor cercano al 9%. No obstante, resulta necesario extender las mediciones a tiempos mayores, incluso hasta 200 minutos, para evaluar si se mantiene la tendencia estacionaria o si se observa un incremento adicional.

Comparando T1 y T2, no se observan diferencias significativas en ninguno de los tiempos evaluados, indicando que, no existe un efecto sinérgico entre β-galactosidasa y Protamex.

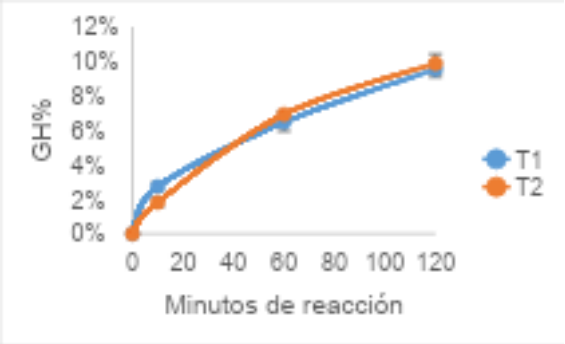


Figura 1: Grado de hidrolisis de Protamex en T1 y T2, utilizando formulado de suero de leche como sustrato

Resultados concordantes han sido reportados previamente por el mismo grupo de investigación, donde la combinación de Alcalase y β-gal tampoco evidenció diferencias respecto al uso exclusivo de Alcalase, alcanzando en ese caso un GH% máximo cercano al 14% bajo las mismas condiciones de reacción.

Las diferencias observadas en los valores de GH% se asocian directamente al tipo de proteasa utilizada. Alcalase es una endoproteasa reconocida por su alta especificidad, amplio espectro de sustratos y elevada actividad catalítica (A. Brandelli et al., 2015; JM Irazoqui et al., 2024). Esta enzima presenta preferencia por enlaces situados después de residuos hidrofóbicos o aromáticos, abundantes en proteínas lácteas, lo que favorece una hidrólisis más extensa y la generación de péptidos pequeños con numerosos grupos α-NH libres. En contraste, Protamex corresponde a una mezcla de endoproteasas y exoproteasas con actividad menos específica y cinética más lenta. Su patrón de corte más variable tiende a producir fragmentos de mayor tamaño, con menor liberación de grupos α-amino, lo que se traduce en un GH% inferior bajo las mismas condiciones experimentales (Saubenova et al., 2024; M. Czelej et al., 2025).

En cuanto a la actividad antioxidante, el ensayo con ABTS permite cuantificar la

capacidad de distintas moléculas para neutralizar radicales libres, los cuales están asociados al estrés oxidativo y a la generación de diversos efectos adversos en el organismo (M. Czelej et al., 2025). En este estudio, los tratamientos T1 y T2 no mostraron diferencias significativas en la capacidad antioxidante (Figura 2), alcanzando valores máximos de 2,1 y 2,4 ET mg/ml, respectivamente.

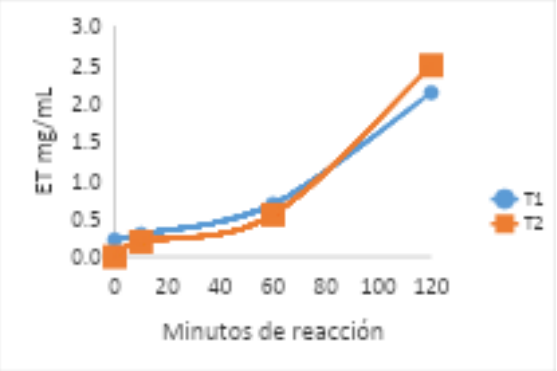


Figura 2: Capacidad antioxidante de los productos obtenidos en T1 y T2.

Estos resultados son consistentes con lo observado en el GH%, donde tampoco se registraron diferencias entre ambos tratamientos. El hecho de que la combinación de Protamex y β-galactosidasa no generara un incremento en la bioactividad antioxidante sugiere que, bajo las condiciones evaluadas, la β-galactosidasa no influye en el perfil peptídico derivado de la hidrólisis proteica.

Es importante destacar que, siendo Protamex un preparado enzimático comercial compuesto por endo- y exoproteasas, su acción es menos específica que la de Alcalase. En consecuencia, los péptidos generados tienden a ser de mayor tamaño o bien carecer de las secuencias necesarias para presentar una actividad antioxidante relevante. Esto explica que los valores obtenidos con Protamex sean muy inferiores a los registrados para Alcalase, la cual alcanzó más de 120.000 ET mg/ml bajo las mismas condiciones de reacción.

La bioactividad de los péptidos no depende únicamente del grado de hidrólisis, sino también de la naturaleza de las secuencias liberadas. Dado que Alcalase corta preferentemente en regiones próximas a estos residuos, es capaz de generar péptidos con un mayor potencial bioactivo. Protamex, en cambio, debido a su menor especificidad, probablemente liberó un perfil peptídico distinto, caracterizado por fragmentos demasiado grandes o pequeños para ejercer efectos antioxidantes significativos (A. Brandelli et al., 2015; JM Irazoqui et al., 2024; M.

Saubenova et al., 2024; M. Czelej et al., 2025).

Conclusiones

El suero de leche es un subproducto de la industria láctea con alto valor bioactivo, cuyo manejo inadecuado puede generar un impacto negativo en los ecosistemas. Los péptidos derivados de la hidrólisis de sus proteínas han demostrado diversas propiedades bioactivas de interés.

En esta investigación no se observaron diferencias significativas en GH% ni en la capacidad antioxidante entre los tratamientos T1 y T2. Ambos presentaron una cinética típica de hidrólisis, caracterizada por una fase inicial de tipo exponencial seguida por una etapa casi estacionaria, alcanzando un GH% máximo cercano al 9% a los 120 minutos de reacción.

El GH% alcanzado con Protamex fue considerablemente menor al reportado en estudios paralelos con Alcalase, donde se registraron valores cercanos al 14% bajo las mismas condiciones experimentales. Esta diferencia se asocia a la naturaleza de las enzimas: Protamex, al ser una mezcla de endo- y exoproteasas, podría generar péptidos con un perfil heterogéneo y de menor potencial antioxidante; mientras que Alcalase, gracias a su mayor especificidad de corte, podría producir fragmentos peptídicos que se traducen en una bioactividad antioxidante superior.

En este sentido, se recomienda ampliar la evaluación a tiempos de reacción superiores a 120 minutos y caracterizar en detalle el perfil peptídico mediante técnicas de HPLC-MS/MS, con el fin de correlacionar la secuencia de los péptidos generados con la bioactividad observada.

Bibliografía

1. Brandelli, Adriano & Daroit, Daniel & Corrêa, Ana. (2015). Whey as a source of peptides with remarkable biological activities. Food Research International. 73. 10.1016/j.foodres.2015.01.016.
2. Buchanan, Dominic & Martindale, Wayne & Romeih, Ehab & Hebishy, Essam. (2023). R E V I E W Recent advances in whey processing and valorisation: Technological and environmental perspectives. International Journal of Dairy Technology. 76. 10.1111/1471-0307.12935.

3. Córdova, Andrés & Astudillo, Carolina & Henríquez, Paola & Manriquez, Natalia & Nuñez, Helena & Guerrero, Cecilia & Álvarez, Dafne & Aburto Gajardo, Carla & Carrasco, Vinka & Oñate, Sebastian & Lehuedé, Luciana. (2023). Ultrasound-assisted enzymatic synthesis of galacto-oligosaccharides using native whey with two commercial β-galactosidases: Aspergillus oryzae and Kluyveromyces var lactis. Food Chemistry. 426. 136526. 10.1016/j.foodchem.2023.136526.
4. Czelej, M.; Garbacz, K.; Czernecki, T.; Rachwał, K.; Wawrzykowski, J.; Wa´sko, A. Whey Protein Enzymatic Breakdown: Synthesis, Analysis, and
5. Discovery of NewBiologically Active Peptides in Papain-Derived Hydrolysates. Molecules 2025, 30, 1451. https://doi.org/10.3390/molecules30071451
6. Di Filippo G, Melchior S, Plazzotta S, Calligaris S, Innocente N. Effect of enzymatic hydrolysis with Alcalase or Protamex on technological and antioxidant properties of whey protein hydrolysates. Food Res Int. 2024 Jul;188:114499. doi: 10.1016/j.foodres.2024.114499. Epub 2024 May 9. PMID: 38823844.
7. Farhan, Bahzad & Zhihe, Li & Ali, Shehbaz & ali shah, Tawaf & Zhiyu, Li & Zhang, Andong & Javed, Sadia & Asad, Muhammad. (2023). Multiple strategies for the development of multienzyme complex for one-pot reactions. Environmental Science and Pollution Research. 30. 1-28. 10.1007/s11356-023-27098-8.
8. Ganju, S., & Gogate, P.R. (2017). A review on approaches for efficient recovery of whey proteins from dairy industry effluents. *Journal of Food Engineering, 215*, 84-96.
9. Irazoqui JM, Santiago GM, Mainez ME, Amadio AF, Eberhardt MF. Enzymes for production of whey protein hydrolysates and other value-added products. Appl Microbiol Biotechnol. 2024 May 31;108(1):354. doi: 10.1007/s00253-024-13117-2.

PMID: 38819482; PMCID: PMC11142983.

10. L. B. Olvera-Rosales, A. E. Cruz-Guerrero, J. M. García-Garibay, L. C. Gómez Ruíz, E. Contreras-López, F. Guzmán-Rodríguez & L. G. González-Olivares (2022): Bioactive peptides of whey: obtaining, activity, mechanism of action, and further applications, Critical Reviews in Food Science and Nutrition, DOI: 10.1080/10408398.2022.2079113
11. Luparelli, A., Trisciuzzi, D., Schirinzi, W. M., Caputo, L., Smiriglia, L., Quintieri, L., Nicolotti, O., & Monaci, L. (2025). Whey Proteins and Bioactive Peptides: Advances in Production, Selection and Bioactivity Profiling. *Biomedicines*, *13*(6), 1311. https://doi.org/10.3390/biomedicines13061311
12. Maubois JL, Lorient D. Dairy proteins and soy proteins in infant foods nitrogen-to-protein conversion factors. Dairy Sci Technol. 2016;96(1):15-25. doi: 10.1007/s13594-015-0271-0. Epub 2015 Dec 2. PMID: 26767093; PMCID: PMC4701760.
13. Pang, Lidong & Zhang, Wei & Chen, Chen & Li, Runze & Huang, Zhen & Liu, Shiyu & Zhao, Kuangyu & Zhao, Feng & Yang, Xinyan & Jiang, Yujun. (2024). Effect of enzymatic hydrolysis and ultrasound pretreatment on allergenicity, functional properties and
14. bioactivity of whey protein isolates. LWT. 210. 116891. 10.1016/j.lwt.2024.116891
15. Ricca, E., Brucher, B., & Schrittwieser, J. H. (2011). Multi-enzymatic cascade reactions: Overview and perspectives. *Advanced Synthesis & Catalysis, 353*(12-13), 2239–2262. https://doi.org/10.1002/adsc.201100256
16. Saubenova, M.; Oleinikova, Y.; Rapoport, A.; Maksimovich, S.; Yermekbay, Z.; Khamedova, E. Bioactive Peptides Derived from WheyProteins for Health and Functional Beverages. Fermentation 2024, 10, 359. https://doi.org/10.3390/fermentation10070359
17. Silvana Valdivia, María J. Camus, Tamara Solis, Suleivys Nuñez, Pedro Valencia, Equivalent dose

methodology for activity-based comparisons of protease performance during byproduct protein hydrolysis, Food Chemistry: X, Volume 28, 2025, 102596, ISSN 2590-1575, https://doi.org/10.1016/j.fochx.2025.102596.

18. Yadav Jay Shankar Singh, Yan Song, Pilli Sridhar, Kumar Lalit, Tyagi RD, Surampalli RY, Cheese whey: A potential resource to transform into bioprotein, functional/nutritional proteins and bioactive peptides, BiotechnologyAdvances (2015), doi: 10.1016/j.biotechadv.2015.07.00
19. Zandona, E., Blažić, M., & Režek Jambrak, A. (2021). Whey Utilization: Sustainable Uses and Environmental Approach. *Food technology and biotechnology*, *59*(2), 147–161. https://doi.org/10.17113/ftb.59.02.21.6968
20. Vera, Carlos & Córdova, Andrés & Aburto Gajardo, Carla & Guerrero, Cecilia & Suarez, Sebastian & Illanes, Andrés. (2016). Synthesis and purification of galacto-oligosaccharides: state of the art. World Journal of Microbiology and Biotechnology. 32. 10.1007/s11274-016-2159-4.
21. Deshmukh, Nishigandha & Rao, Priyanka & Sharma, Heena & M H, Sathish Kumar & Naik, Laxmana & Kumar, C.. (2024). Waste to nutrition: The evolution of whey, a byproduct to galactooligosaccharides production. Food Chemistry Advances. 4. 100642. 10.1016/j.focha.2024.100642
22. Duan, F.; Zhao, R.; Yang, J.; Xiao, M.; Lu, L. Integrated Utilization of Dairy Whey in Probiotic-Galactosidase Production and Enzymatic Synthesis of Galacto-Oligosaccharides. Catalysts 2021, 11, 658. https://doi.org/10.3390/catal11060658
23. Gallo, V.; Arienzo, A.; Tomassetti, F.; Antonini, G. Milk Bioactive Compounds and Gut Microbiota Modulation: The Role of WheyProteins and Milk Oligosaccharides. Foods 2024, 13, 907. https://doi.org/10.3390/foods13060907
24. Pillai AT, Morya S, Kasankala LM. Emerging Trends in Bioavailability and Pharma-Nutraceutical Potential of Whey Bioactives. J Nutr Metab. 2024 Apr 10;2024:8455666. doi: 10.1155/2024/8455666. PMID: 38633607; PMCID: PMC11023716.

Agradecimientos

Programa de Magíster en Bioactividad de Productos Naturales y de Síntesis de la Universidad de Valparaíso, Chile.

Grupo de Biorefinerías Agroalimentarias, Escuela de Alimentos, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

Laboratorio de biocatálisis y procesamiento de alimentos de la Universidad Técnica Federico Santa Maria.

Dirección de Relaciones Institucionales de la Vicerrectoría de Vinculación con el Medio de la Universidad de Valparaíso.

Financiamientos

Fondecyt regular N°1241840: Advanced integrated bioseparation systems for total whey exploitation under biorefinery concept. (2024-2028).

Fondecyt regular N°1231328: Novel operational strategy designed to increase the protein extraction from food byproducts: Sequential batches for the enzymatic hydrolysis of salmon-frame proteins (2023-2026).

29.- Matemática Aplicada

Desarrollo e integración de un modelo predictivo para la calidad del agua en Esval

Autora: Silva Saavedra, Carla; carlasilvasaavedra@gmail.com
Orientadora: Bertín, Karine; karine.bertin@uv.cl
Universidad de Valparaíso / Facultad de Ingeniería

Resumen

Este trabajo forma parte de un proceso continuo de investigación desarrollado en colaboración con Esval, empresa sanitaria encargada de la producción y distribución de agua potable en la Región de Valparaíso, Chile. La iniciativa comenzó durante mi práctica básica y profesional, y actualmente se encuentra en desarrollo como proyecto de tesis. Su objetivo es desarrollar una metodología predictiva que permita anticipar la concentración de contaminantes en el agua potable producida por las distintas plantas que opera la empresa en la región. Para ello, se elaboró un enfoque basado en el análisis de series temporales y la incorporación de variables externas como caudal, temperatura del aire, precipitaciones y nieve acumulada, seleccionadas por su influencia potencial sobre los niveles de contaminantes. La metodología considera una fase de limpieza, integración y estructuración de datos históricos, seguida de un análisis exploratorio y de correlación que permite identificar relaciones significativas entre variables climáticas y parámetros de calidad del agua. Posteriormente, se aplicaron modelos de proyección sobre una planta piloto, evaluando su comportamiento frente a diversos contaminantes observados en diferentes etapas del proceso. A partir de esta validación inicial, se proyecta extender el análisis a todas las plantas de Esval, adaptándolo a los contaminantes y condiciones operativas específicas de cada una. Como fase final, se contempla su implementación en Power BI para una visualización dinámica y actualización automatizada que facilite la toma de decisiones preventivas y operativas por parte del equipo técnico.

Palabras clave: CalidadAgua, ModelosPredictivos, SeriesTemporales

Introducción

La disponibilidad y calidad del agua potable constituye un desafío prioritario para la gestión de los recursos hídricos, especialmente en regiones con creciente presión climática y ambiental como la Región de Valparaíso, Chile. En este contexto, Esval, empresa sanitaria que opera en toda la región y se encarga de la producción y distribución de agua potable, enfrenta la necesidad de anticipar escenarios de riesgo asociados a la presencia de contaminantes en las fuentes de abastecimiento y en las etapas de tratamiento.

En los últimos años, factores como la variabilidad climática, la disminución de caudales, las sequías prolongadas y los eventos extremos de precipitación han intensificado la incertidumbre sobre la evolución de los parámetros de calidad del agua. Entre los contaminantes de mayor interés se encuentran: sólidos disueltos totales (SDT), nitratos (NO_3) y turbiedad, cuyo comportamiento depende tanto de condiciones hidrológicas como de variables climáticas que inciden de forma directa o indirecta en su dinámica.

Ante este escenario, se requiere de herramientas predictivas robustas que anticipen la evolución de los contaminantes y respalden la gestión operativa. En este sentido, los modelos de aprendizaje automático, como Random Forest, destacan por capturar relaciones no lineales y adaptarse a dinámicas ambientales complejas.

Este informe se enmarca en un proceso de investigación desarrollado en colaboración con Esval y tiene como objetivo principal desarrollar una metodología de proyección de caudal y contaminantes en la planta San Juan, ubicada en la comuna de San Antonio, incorporando tanto el análisis de correlaciones como la evaluación de la importancia relativa de variables climáticas e hidrológicas. A partir de este caso piloto, se busca generar una base metodológica que pueda ser extendida posteriormente a otras plantas de la empresa.

El documento se organiza en tres secciones principales: “Materiales y métodos”, donde se describen el modelo y los datos utilizados; “Resultados y discusión”, que presentan los análisis de correlación, la importancia de variables y las proyecciones; y “Conclusiones”, donde se sintetizan los hallazgos y sus implicancias para la gestión del recurso hídrico.

Cabe señalar que todos los análisis y resultados fueron implementados en Python, utilizando librerías especializadas

en manejo de datos, aprendizaje automático y visualización.

Objetivos

A continuación, se presenta el objetivo general de este trabajo, el cual establece el propósito central del proyecto, junto con una serie de objetivos específicos que detallan las etapas y alcances necesarios para su desarrollo.

Objetivo general: Desarrollar una metodología predictiva para anticipar la concentración de contaminantes en el agua potable de la planta San Juan de Esval, considerando variables externas de carácter climático e hidrológico, con el fin de aportar una herramienta de apoyo a la gestión preventiva y operativa.

Objetivos específicos:

- Procesar, limpiar y estructurar los datos históricos de contaminantes y variables externas de la planta San Juan.
- Analizar la correlación entre el caudal y variables climáticas (temperatura, precipitaciones y nieve acumulada) para identificar relaciones significativas.
- Desarrollar modelos predictivos del caudal como etapa previa a la proyección de contaminantes.
- Implementar y evaluar modelos predictivos para los contaminantes sólidos disueltos totales (SDT), nitratos (NO_3) y turbiedad, comparando sus resultados y confiabilidad.
- Generar una discusión sobre las proyecciones obtenidas y su utilidad práctica en la operación de la planta San Juan.
- Identificar posibles líneas de extensión del trabajo hacia otras plantas de Esval y hacia la integración en plataformas de visualización dinámica.

Materiales y métodos

El desarrollo de este estudio consideró dos componentes principales: el modelo predictivo y la información utilizada como insumo. Para la proyección tanto de caudal como de contaminantes, se empleó el modelo Random Forest, técnica de aprendizaje automático basada en la construcción de múltiples árboles de decisión y su combinación en un ensamble. Este enfoque permite capturar relaciones complejas entre variables y generar resultados robustos, lo que lo hace adecuado para el análisis de datos ambientales.

En paralelo, se llevó a cabo un proceso de recopilación y preparación de la información. Para ello, se utilizaron datos históricos de calidad del agua

correspondientes a la planta San Juan, específicamente para los contaminantes sólidos disueltos totales (SDT), nitratos (NO_3) y turbiedad, junto con variables externas de carácter climático(temperatura, precipitaciones y nieve acumulada) e hidrológico (caudal). Los datos fueron obtenidos a partir de registros internos de Esval y de plataformas oficiales de información climática, y posteriormente procesados mediante etapas de limpieza, integración y estructuración, con el fin de asegurar su consistencia y utilidad en el análisis.

De esta forma se construyó una base de datos integrada y consistente, utilizada para entrenar y validar el modelo Random Forest. Esto permitió que las proyecciones obtenidas reflejaran de manera adecuada el comportamiento observado en la planta y entregaran un insumo práctico para la gestión preventiva y operativa.

En primer lugar se presenta el modelo Random Forest, introducido por Breiman (2001) constituye una técnica de aprendizaje automático basada en ensambles de árboles de decisión. Su propósito es mejorar la capacidad predictiva y la estabilidad de los árboles individuales, combinando múltiples predictores simples en un modelo robusto y flexible.

Para comprender su funcionamiento, resulta necesario revisar primero algunos conceptos fundamentales:

Árboles de decisión: Los árboles de decisión se construyen mediante un proceso de partición recursiva, que divide el espacio de predictores en regiones cada vez más homogéneas. Según la naturaleza de la variable respuesta, se distinguen dos casos:

- Árboles de clasificación: Se utilizan cuando la respuesta es categórica. La predicción en cada nodo terminal corresponde a la clase más frecuente entre las observaciones que lo componen. Para definir las divisiones se evalúa la impureza de cada nodo, buscando la partición que más la reduzca.
- Árboles de regresión: Se aplican cuando la respuesta es continua. En este caso, la predicción en cada nodo terminal suele ser el promedio de la variable respuesta.

La forma general de un árbol de regresión puede expresarse como:

$$\hat{f}(x) = \sum_{m=1}^{M} c_m 1\{x \in R_m\},$$

donde R_m son las regiones en que se divide el espacio de predictores y c_m el valor asignado en cada región.

Las regiones se determinan de manera iterativa, en cada paso se busca la división que reduzca lo más posible la impureza o la suma de cuadrados dentro de los nodos.

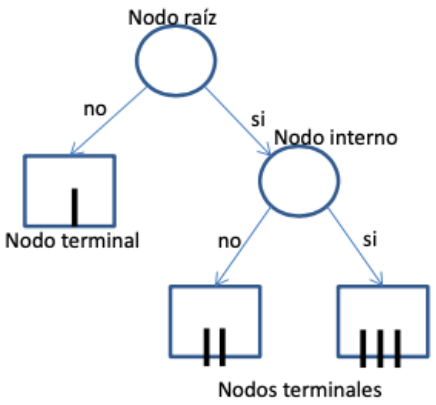
Impureza: La impureza es una medida que refleja cuán heterogéneo es un nodo dentro de un árbol de decisión.

- Si un nodo contiene observaciones muy diversas (de distintas clases o con valores muy dispersos), decimos que tiene alta impureza.
- Si un nodo contiene observaciones muy similares (una sola clase en clasificación, o valores muy próximos en regresión), su impureza es baja.

El árbol aprende buscando en cada división la reducción más grande posible de impureza, de modo que los nodos terminales sean lo más homogéneos posible.

Además, este criterio de reducción de impureza se utiliza en Random Forest para calcular la importancia de las variables: se cuantifica qué tanto contribuye cada predictor, en promedio, a disminuir la impureza a lo largo de todos los árboles del bosque. Por eso, los resultados de impureza permiten identificar qué variables tienen mayor peso en la predicción del modelo, y suelen expresarse en porcentaje de importancia relativa.

Elementos del árbol: Para visualizar estos conceptos, a continuación se presenta una ilustración de un árbol de decisión.



En la figura 1 se pueden identificar sus componentes principales:

- Nodo raíz: se ubica en la parte superior y contiene todas las observaciones iniciales. A partir de él se genera la primera división.
- Nodos internos: representan particiones intermedias, donde las observaciones se dividen en función de alguna variable predictora. Cada nodo interno puede dar origen a uno o más nodos hijos.
- Nodos hijos: son los nodos resultantes de una división, y pueden ser a su vez internos o terminales.
- Nodos terminales o hojas: son los nodos finales, que ya no se dividen más. En ellos se asigna la

predicción (una clase en clasificación o un valor promedio en regresión).

- Ramas: corresponden a las conexiones entre nodos, y representan las condiciones lógicas de la división (por ejemplo, "sí/no").
- Niveles de profundidad: indican la jerarquía del árbol, desde el nodo raíz hasta los nodos terminales.

De esta manera, un árbol puede interpretarse como un conjunto de decisiones secuenciales: partiendo de un nodo raíz, cada observación sigue un camino definido por las ramas hasta llegar a un nodo terminal, donde se obtiene su predicción.

División de un nodo: Un aspecto clave del funcionamiento de los árboles de decisión es la forma en que se realizan las divisiones. A partir de un nodo padre (por ejemplo, el nodo raíz), se selecciona la variable predictora y el punto de corte que generan la mejor separación de los datos.

La idea es que, si un nodo A se divide en dos nodos hijos A_I (rama izquierda) y A_D (rama derecha), entonces la pureza de los nodos hijos debe ser mayor que la del nodo original. En otras palabras, la división se elige de modo que la impureza total después de dividir sea menor que antes.

Este proceso se repite de forma recursiva en cada nodo interno, hasta alcanzar un criterio de parada, como un número mínimo de observaciones en los nodos, una profundidad máxima del árbol o la imposibilidad de reducir más la impureza.

Bagging (Bootstrap Aggregating): Un solo árbol suele ser inestable, ya que pequeñas variaciones en los datos pueden producir estructuras muy distintas. Para reducir esta varianza, Breiman (1996) propuso el bagging, que consiste en entrenar múltiples árboles sobre muestras bootstrap del conjunto de datos.

Una muestra bootstrap se obtiene seleccionando observaciones al azar con reemplazo del conjunto original, hasta formar una nueva muestra del mismo tamaño. Esto implica que algunas observaciones pueden repetirse y otras pueden quedar fuera.

La predicción final se obtiene promediando (en regresión) o votando (en clasificación) los resultados de todos los árboles:

$$\hat{f}_{bag}(x) = \frac{1}{|B|}\sum_{b=1}^{B} \hat{f}^{(b)}(x),$$

donde $|B|$ es el número total de árboles en el ensamble y $\hat{f}^{(b)}(x)$ la predicción del árbol b.

Este procedimiento logra que el modelo resultante sea más estable y confiable, ya que reduce la variabilidad asociada a cada árbol individual y combina la información

de múltiples muestras para obtener una estimación más representativa del fenómeno.

Una vez presentados los conceptos fundamentales (árboles de clasificación y regresión, impureza, elementos del árbol y bagging) se puede comprender de mejor manera el funcionamiento del modelo Random Forest.

Este método añade un nivel adicional de aleatoriedad al esquema de bagging: en cada división de un nodo, en lugar de considerar todas las variables predictoras, se selecciona un subconjunto aleatorio de tamaño m. Esta estrategia disminuye la correlación entre los árboles del ensamble y mejora la capacidad de generalización del modelo (Breiman, 2001).

En el marco de este estudio, el modelo se representa formalmente como:

$$y_t = f(x_t) + e_t, \qquad t = 1, ..., T,$$

donde:

- y_t corresponde a la variable de interés (ya sea caudal o un contaminante: sólidos disueltos totales (SDT), nitratos NO_3 o turbiedad).
- $x_t = (z_{1,t}, ..., z_{k,t})$ es el vector de covariables, que incluye tanto variables climáticas (temperatura, precipitaciones, nieve acumulada) como hidrológicas (caudal).
- Un aspecto central es que también pueden incorporarse rezagos de la propia serie como predictores autorregresivos, por ejemplo $z_{1,t} = y_{t-1}$, $z_{2,t} = y_{t-2}$, etc.
  Esta característica permite que Random Forest capture dependencias temporales directas en las series analizadas.
- e_t es un término de error aleatorio.

El estimador $\hat{f}$, obtenido a partir del promedio de múltiples árboles generados bajo este esquema aleatorizado, permite proyectar el comportamiento futuro de las series.

Además de su capacidad predictiva, Random Forest ofrece la posibilidad de calcular medidas de importancia de variables, que cuantifican qué predictores contribuyen en mayor medida a la reducción de impureza o a la mejora de precisión del modelo. Esto resulta particularmente útil en aplicaciones como la presente, donde interesa identificar cuáles factores externos y autorregresivos influyen con mayor peso en la dinámica del caudal y de los contaminantes.

En segundo lugar, para el desarrollo de los modelos fue necesario integrar información proveniente de distintas fuentes, considerando tanto parámetros

de calidad de agua como variables externas de tipo climático e hidrológico. Todos los datos se trabajaron en frecuencia mensual, lo que permitió mantener consistencia en las comparaciones y en la construcción de las series.

- Contaminantes: los datos de sólidos disueltos totales (SDT), nitratos (NO_3) y turbiedad corresponden a registros oficiales entregados por Esval, asociados a la planta de producción de agua potable San Juan. Estas series se encuentran disponibles desde enero de 2021 hasta mayo de 2025.
- Caudal: la serie histórica de caudal en San Juan se obtuvo desde la plataforma MAPS2 del Ministerio de Obras Públicas (MOP, s.f.).
  En este caso se contó con información desde enero de 2000 hasta mayo de 2025.
- Variables climáticas: los datos de temperatura del aire y precipitaciones se descargaron desde la plataforma ARCLIM del Ministerio del Medio Ambiente (MMA, s.f.), seleccionando como referencia la comuna de San Antonio por su cercanía con la planta. Los datos de nieve acumulada se obtuvieron también desde ARCLIM (MMA, s.f.), en este caso para la comuna de San José de Maipo, dado que corresponde a la zona cordillerana donde se origina gran parte de los aportes al río Maipo. Estas series se encuentran disponibles desde enero de 2000 hasta diciembre de 2055, incluyendo tanto observaciones históricas como proyecciones climáticas.

La integración de estas fuentes de datos constituye la base sobre la cual se aplicó el modelo Random Forest, asegurando que las proyecciones de contaminantes consideraran no solo la dinámica propia de las series, sino también la influencia de variables hidrológicas y climáticas relevantes para la zona de estudio.

Resultados y discusión

En este apartado se presentan los resultados obtenidos a partir del análisis de correlación y de las proyecciones generadas con el modelo predictivo Random Forest. El objetivo es evaluar las relaciones existentes entre las variables externas (caudal, temperatura, precipitaciones y nieve acumulada) y los contaminantes de interés (sólidos disueltos totales, nitratos y turbiedad), para posteriormente analizar la capacidad del modelo de anticipar la evolución de

dichas variables en distintos horizontes temporales.

La discusión se organiza en tres partes principales.

- En primer lugar, se muestran los mapas de calor de correlación de Pearson, los cuales permiten identificar las relaciones lineales entre contaminantes y variables externas, aportando criterios para la selección de predictores en los modelos.
- En segundo lugar, se presentan los resultados de la importancia de variables obtenida a partir del modelo Random Forest, expresada como porcentaje de reducción de impureza. Estas tablas permiten evaluar qué predictores, tanto climáticos como hidrológicos y autorregresivos, aportan en mayor medida a la capacidad predictiva del modelo.
- Finalmente, se muestran las proyecciones a 1 y 30 años para el caudal y los tres contaminantes, evaluando su comportamiento futuro y las implicancias prácticas para la gestión del recurso hídrico.

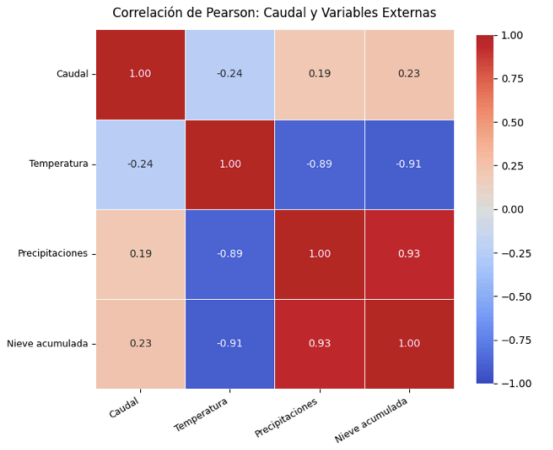
Comenzando con el primer punto, y con el fin de identificar las relaciones entre variables climáticas, hidrológicas y contaminantes, se calcularon los coeficientes de correlación de Pearson. Estos resultados se presentan en forma de mapas de calor, que permiten visualizar la magnitud y el signo de las asociaciones. Los valores cercanos a 1 indican correlaciones positivas fuertes, mientras que los valores cercanos a -1 corresponden a correlaciones negativas fuertes. Por su parte, los valores próximos a 0 reflejan una ausencia de relación lineal significativa.

En particular, se presentan los mapas de calor correspondientes a:

- Caudal en relación con las variables externas.
- Sólidos disueltos totales (SDT) en relación con las variables externas.
- Nitratos (NO_3) en relación con las variables externas.
- Turbiedad en relación con las variables externas.

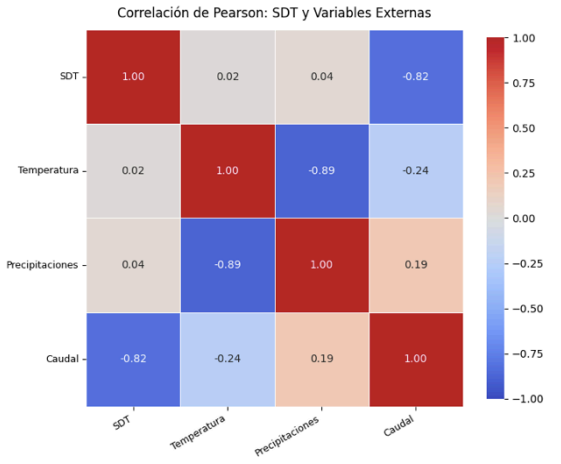
De esta forma, se busca comparar las correlaciones de cada contaminante y del caudal con las variables climáticas (temperatura, precipitaciones y nieve acumulada), destacando aquellas asociaciones que resultan más relevantes para la posterior construcción y análisis de los modelos predictivos.

- Caudal y variables externas:



En la figura 2, el caudal muestra una correlación negativa moderada con la temperatura (–0.24), lo que sugiere que aumentos de temperatura tienden a asociarse con caudales más bajos, posiblemente por mayor evaporación. En cambio, presenta correlaciones positivas débiles con precipitaciones (0.19) y nieve acumulada (0.23). Esto significa que, cuando aumentan las precipitaciones o la acumulación de nieve, también tienden a aumentar los caudales, reflejando el efecto de estos aportes hidrológicos sobre la cantidad de agua, aunque de manera no muy marcada en la serie mensual.

- SDT y variables externas:



Como se muestra en la figura 3, los sólidos disueltos totales (SDT) presentan una correlación negativa fuerte con el caudal (–0.82), lo cual indica un claro efecto de dilución: en periodos de mayor caudal, la concentración de sólidos disminuye. La correlación con las otras variables externas es baja, lo que sugiere que, en este caso, el caudal es el factor determinante en la variación de SDT.

- NO_3 y variables externas:

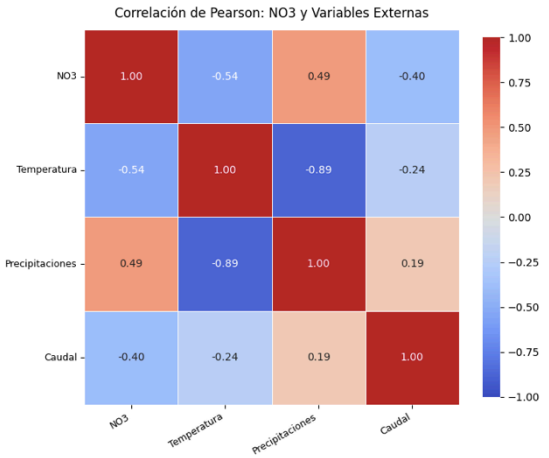
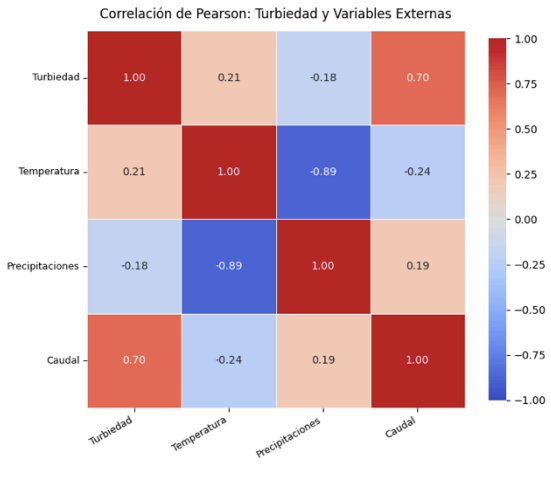


Figura SEQ Figura * ARABIC 4. Mapa de calor: nitratos.

Según la figura 4, los niveles de nitratos muestran una correlación negativa moderada con la temperatura (–0.54), lo que sugiere que en periodos con temperaturas más altas tienden a disminuir las concentraciones de NO_3, posiblemente por procesos de dilución. Se observa una correlación positiva con las precipitaciones (0.49), lo cual es relevante, ya que las lluvias podrían arrastrar compuestos nitrogenados hacia las fuentes de agua. Además, existe una correlación negativa con el caudal (–0.40), lo que indicaría un efecto de dilución: a mayor caudal, menor concentración de nitratos.

- Turbiedad y variables externas:



Tal como se observa en la figura 5, la turbiedad muestra una correlación positiva fuerte con el caudal (0.70), lo que implica que en épocas de mayor caudal se incrementa la cantidad de sólidos finos y partículas arrastradas por el agua. Esto es coherente con la dinámica hidrológica de arrastre de sedimentos. Las correlaciones con temperatura (0.21) y precipitaciones (0.18) son débiles, aunque sugieren que estos factores también pueden influir, indirectamente, en el aumento de la turbidez.

En resumen, los análisis de correlación de Pearson muestran que el caudal es la variable más influyente en los contaminantes, aunque con efectos distintos en cada caso. En SDT presenta una correlación negativa fuerte (–0.82), reflejando el efecto de dilución; en NO_3 la relación negativa es moderada (–0.40); y en turbiedad la correlación positiva (0.70) evidencia el arrastre de sedimentos con altos caudales. En cuanto a las variables climáticas, la temperatura se relaciona negativamente con el caudal y, en consecuencia, con los nitratos; mientras que precipitaciones y nieve acumulada influyen sobre la variabilidad del caudal y de los nitratos, aunque tienen un impacto menor en SDT y turbiedad. En conjunto, la dinámica de los contaminantes está determinada principalmente por la disponibilidad hídrica y, en segundo término, por las condiciones climáticas.

En segundo lugar, se comienza con la aplicación del modelo Random Forest, destacando que el proceso de proyección se desarrolló en dos etapas: primero para el caudal y posteriormente para los contaminantes. En la primera etapa, la proyección de caudal se realizó utilizando como variables explicativas sus rezagos autorregresivos (t-1, t-2, t-3), junto con variables externas de carácter climático: temperatura, precipitaciones y nieve acumulada, consideradas en los tiempos (t, t-1, t-2, t-3). Aquí, t representa el valor del mes actual, mientras que t-1, t-2 y t-3 corresponden a los valores de uno, dos y tres meses anteriores, respectivamente. La selección de estas variables se fundamenta en que se dispone tanto de datos históricos como de proyecciones para dichos predictores, lo que permite extender el horizonte temporal de análisis.

En la segunda etapa, se procedió a la proyección de los contaminantes sólidos totales disueltos, nitratos y turbiedad, considerando como variables explicativas los rezagos autorregresivos de cada contaminante en los tiempos t-1, t-2, t-3 y, adicionalmente, las variables externas: caudal, temperatura, precipitaciones y nieve acumulada, todas en los tiempos t, t-1, t-2, t-3. Cabe señalar que, en este caso, los valores de caudal utilizados como insumo corresponden a los valores históricos ajustados por el modelo y a las proyecciones obtenidas en la primera etapa, de modo de mantener consistencia en la predicción encadenada.

Este enfoque asegura que las proyecciones de los contaminantes consideren no solo la dinámica propia de cada serie, sino también la influencia de factores hidrológicos y climáticos, permitiendo capturar dependencias temporales y externas en un mismo marco predictivo.

Una vez definidas las variables utilizadas en cada modelo, se procedió a evaluar su importancia relativa dentro del Random Forest. Para ello, se utilizó el criterio de reducción acumulada de impureza en todos los árboles del bosque, expresada en porcentaje de aporte de cada predictor. Esta medida permite identificar cuáles variables, tanto climáticas como hidrológicas y autorregresivas, contribuyen en mayor medida a la capacidad predictiva del modelo.

En las tablas siguientes se presentan los resultados obtenidos, diferenciando los casos de caudal y de los tres contaminantes analizados. Con el fin de simplificar la interpretación, se muestran únicamente las seis variables más relevantes, junto con su importancia relativa (%), entendida como el porcentaje de reducción de impureza que cada predictor aporta al modelo.

- Caudal y variables externas:

Tabla 1. Importancia relativa de las variables explicativas en la proyección de caudal.

Variable	Importancia relativa (%)
Caudal (t-1)	80.92
Precipitación (t)	3.25
Caudal (t-2)	2.56
Temperatura (t-1)	1.66
Precipitación (t-3)	1.61
Nieve acum. (t-3)	1.59

Según la tabla 1, los resultados de importancia relativa muestran que el caudal rezagado en un mes (t–1) concentra la mayor influencia en la proyección, con un aporte cercano al 81%, lo que evidencia una fuerte dependencia temporal de la serie. En comparación, las variables climáticas presentan una contribución mucho menor, destacando la precipitación en el mismo mes (3.25%) y, en menor medida, la temperatura y la nieve acumulada en rezagos de uno y tres meses. Esto indica que, si bien las condiciones climáticas tienen cierto efecto sobre el comportamiento del caudal, la memoria autorregresiva del propio caudal es el principal factor explicativo en el modelo.

- SDT y variables externas:

Tabla 2. Importancia relativa de las variables explicativas en la proyección de SDT.

Variable	Importancia relativa (%)
SDT (t-1)	55.24
Caudal (t-1)	17.98
Caudal (t-2)	10.81
Caudal (t)	4.82
SDT (t-2)	3.19
Nieve acum. (t-3)	1.50

Como se observa en la tabla 2, los resultados indican que la concentración de SDT en el mes anterior (SDT (t-1)) es el predictor más influyente, con un aporte superior al 55%, lo que revela una marcada dependencia autorregresiva de esta serie. En segundo lugar destacan los rezagos del caudal (t–1 y t–2), que en conjunto superan el 28% de la importancia, confirmando la estrecha relación entre la disponibilidad hídrica y la concentración de sólidos disueltos. El caudal en el mismo mes y el SDT con dos meses de rezago aportan de manera más acotada, mientras que la nieve acumulada (t–3) muestra un efecto muy bajo. En síntesis, la dinámica de los SDT está dominada por su propio comportamiento pasado y modulada por las variaciones en el caudal, mientras que las variables climáticas tienen un rol secundario.

- NO_3 y variables externas:

Tabla 3. Importancia relativa de las variables explicativas en la proyección de nitratos.

Variable	Importancia relativa (%)
NO_3 (t-1)	80.83
Temperatura (t)	2.93
Caudal (t-1)	2.92
Precipitación (t)	2.34
NO_3 (t-2)	2.09
Caudal (t)	1.89

En la tabla 3 se muestra el caso de nitratos (NO_3), donde la variable dominante es el rezago de un mes (NO_3 (t–1)), que concentra más del 80% de la importancia relativa, evidenciando una fuerte dependencia temporal de la serie. Las variables externas aportan en menor medida: la temperatura (2.93%), el caudal rezagado en un mes (2.92%) y la precipitación en el mismo mes (2.34%) presentan influencias comparables, aunque claramente secundarias frente al efecto autoregresivo. Los rezagos adicionales de NO_3 y el caudal en el mismo mes aportan de forma muy baja. En síntesis, la dinámica de los nitratos está fuertemente condicionada por su propio historial inmediato, mientras que los factores climáticos e hidrológicos actúan como moduladores secundarios.

- Turbiedad y variables externas:

Tabla 4. Importancia relativa de las variables explicativas en la proyección de turbiedad.

Variable	Importancia relativa (%)
Caudal (t-1)	48.21
Caudal (t)	15.35
Caudal (t-2)	12.42
Turbiedad (t-1)	10.27
Precipitación (t-1)	1.84
Caudal (t-3)	1.71

En el caso de la turbiedad, el predictor más influyente es el caudal rezagado en un mes (t–1), que explica cerca del 48 % de la importancia relativa. A este se suman el caudal en el mismo mes (15.35%) y el caudal con dos meses de rezago (12.42%), lo que confirma que la dinámica de la turbidez depende fuertemente de la variabilidad hidrológica. El rezago de turbiedad (t–1) también aporta de manera significativa (10.27%), reflejando cierta persistencia autorregresiva en la serie. En contraste, las variables climáticas, como la precipitación (t–1), tienen un efecto muy reducido (1.84%). En síntesis, la turbiedad está principalmente controlada por el comportamiento del caudal, complementado por su propia memoria temporal, mientras que los factores climáticos juegan un rol secundario.

En conjunto, los resultados de importancia de variables muestran que el componente autoregresivo domina en todas las series: el caudal y cada contaminante dependen fuertemente de sus propios rezagos inmediatos. El caudal aparece además como el principal modulador externo, especialmente en SDT y turbiedad, mientras que las variables climáticas aportan de forma secundaria y más acotada.

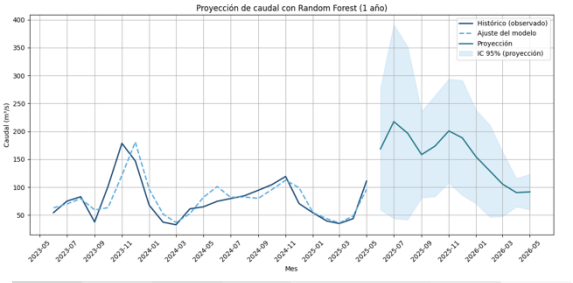
Por último, se presentan las proyecciones a 1 y 30 años, comenzando con el caudal y luego con los tres contaminantes (sólidos totales disueltos, nitratos y turbiedad), considerando como insumo la proyección de caudal. El caudal es una variable clave, pues influye en la dilución y concentración de contaminantes y se encuentra vinculado a las condiciones climáticas de la cuenca.

Se trabajó con dos horizontes temporales:

- Corto plazo (1 año): corresponde a una predicción, orientada a evaluar la capacidad del modelo para reproducir fluctuaciones recientes y estacionales.
- Largo plazo (30 años): corresponde a una proyección, enfocada en identificar tendencias futuras y aportar insumos para la gestión y planificación.

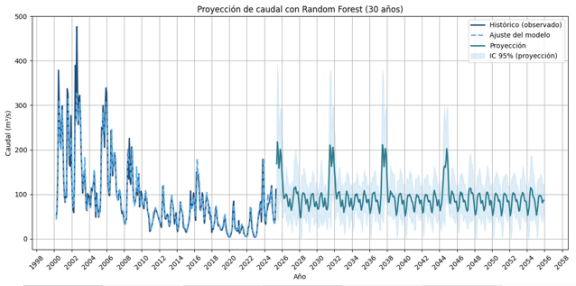
Cabe destacar que las variables externas utilizadas en cada caso ya fueron detalladas previamente y que, en todos los modelos, se aplicó el modelo Random Forest configurado con 600 árboles de decisión. Asimismo, todas las proyecciones se presentan junto con su intervalo de confianza del 95%, de modo que en esta sección el énfasis se centra en analizar el comportamiento esperado de cada serie y discutir sus implicancias para la gestión del recurso hídrico.

<u>Predicción de caudal a 1 año:</u>



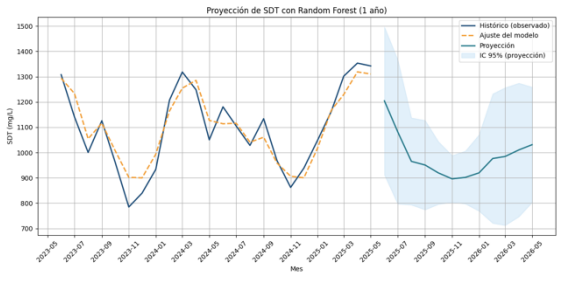
La figura 6 muestra que el modelo Random Forest logra reproducir adecuadamente la dinámica estacional observada en los datos históricos, manteniendo la alternancia entre periodos de mayor y menor caudal. Se proyectan oscilaciones moderadas, con un rango de incertidumbre acotado, lo que sugiere un buen ajuste en el corto plazo y permite confiar en la capacidad del modelo para anticipar variaciones de carácter mensual en la planta San Juan.

Proyección de caudal a 30 años:



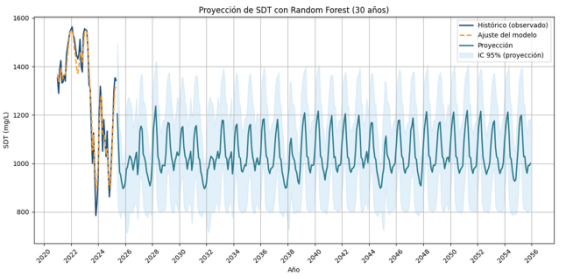
Se observa en la figura 7 una marcada tendencia a la estabilización de los caudales en torno a valores más bajos que los observados en las décadas anteriores. Se mantienen oscilaciones estacionales, pero con menor magnitud que en el pasado. El intervalo de confianza (95%) es relativamente estrecho, lo que indica estabilidad en la predicción, aunque no descarta la posibilidad de eventos extremos en años específicos. En conjunto, los resultados sugieren un escenario de disminución sostenida del caudal disponible, coherente con procesos de cambio climático y reducción de aportes hídricos en la cuenca.

Predicción de SDT a 1 año:



De acuerdo con la figura 8, el modelo Random Forest logra ajustarse adecuadamente a la dinámica reciente de la serie, reproduciendo la variabilidad mensual observada. En el horizonte proyectado se aprecia una tendencia al alza moderada, aunque dentro de un rango de incertidumbre del 95 %, lo que indica que los niveles de sólidos disueltos podrían fluctuar, pero sin desviaciones extremas respecto de los valores históricos. Esto sugiere que el modelo es capaz de anticipar variaciones de corto plazo con un grado de confiabilidad razonable.

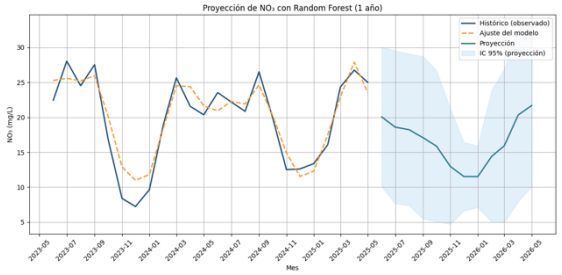
Proyección de SDT a 30 años:



La figura 9 ilustra una tendencia a la estabilización en torno a valores cercanos a 1000–1200 mg/L, después de la variabilidad observada en los primeros años de la serie. Se observan oscilaciones periódicas que sugieren un componente estacional, aunque con un rango acotado en comparación con el pasado. El intervalo de confianza (95%) es más amplio que en el caso del caudal, lo que refleja mayor incertidumbre en la predicción de SDT, posiblemente por la influencia de factores no completamente capturados por las variables externas. Aun así, los resultados sugieren que a largo

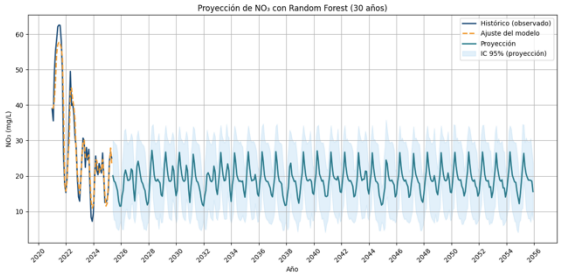
plazo los SDT tenderían a mantenerse en niveles relativamente estables, sin mostrar un aumento sostenido.

Predicción de NO_3 a 1 año:



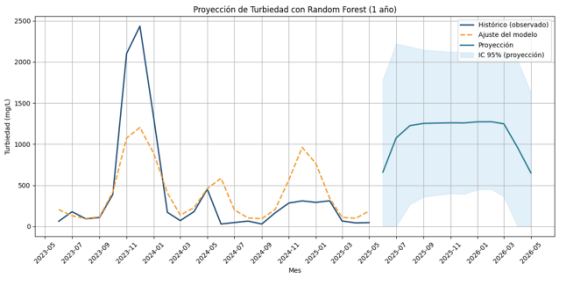
En la figura 10 se muestra que el modelo consigue reproducir las fluctuaciones estacionales recientes, manteniendo la coherencia con los patrones históricos. En el horizonte proyectado se aprecia una disminución inicial de las concentraciones, seguida de una recuperación hacia finales del periodo, siempre dentro del intervalo de confianza del 95%. Estos resultados sugieren que el modelo es capaz de anticipar con razonable precisión las variaciones de corto plazo, ofreciendo una base útil para la gestión preventiva de la calidad del agua.

Proyección de NO_3 a 30 años:



La figura 11 permite identificar una tendencia hacia la estabilización en torno a valores entre 15 y 25 mg/L, después de la alta variabilidad observada en los primeros años históricos. Se mantiene un patrón estacional marcado, con oscilaciones regulares que reflejan la influencia de factores climáticos recurrentes (precipitaciones, caudal). El intervalo de confianza (95%) indica incertidumbre en escenarios de largo plazo, aunque las concentraciones proyectadas se mantienen por debajo de los máximos históricos registrados, lo cual sugiere un menor riesgo de excedencias extremas bajo las condiciones actuales y proyectadas.

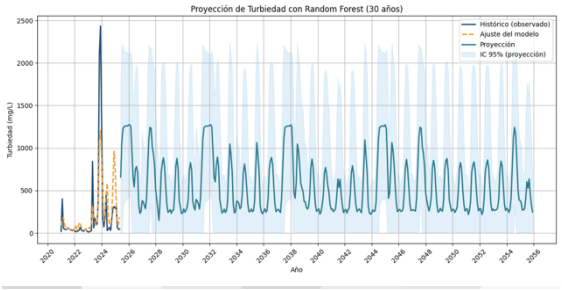
Predicción de turbiedad a 1 año:



La figura 12 evidencia que el modelo Random Forest reproduce de manera coherente las condiciones recientes, pero anticipa un comportamiento más estable en el corto plazo, con valores que se mantienen en rangos elevados. El intervalo de confianza al 95 % muestra cierta amplitud, lo que refleja la

incertidumbre asociada a este contaminante, altamente sensible a variaciones hidrológicas. En conjunto, los resultados sugieren que la turbidez podría mantenerse en un nivel crítico, lo que refuerza la necesidad de un seguimiento constante y de estrategias de gestión preventiva en la planta San Juan.

Proyección de turbiedad a 30 años:



La figura 13 muestra una variabilidad sostenida de turbiedad, con incrementos recurrentes que evidencian su estrecha relación con el caudal. No se aprecia una tendencia definida de alza o disminución en los valores medios, aunque el intervalo de confianza al 95 % se amplía hacia el largo plazo, reflejando mayor incertidumbre. En conjunto, los resultados sugieren que la turbidez se mantendrá como un factor crítico a considerar en la gestión de la planta.

En conjunto, las proyecciones realizadas con el modelo Random Forest muestran que el caudal constituye la base de la dinámica observada, influyendo de manera decisiva en los contaminantes. En el corto plazo (1 año), el modelo logra reproducir adecuadamente la variabilidad estacional, mientras que en el largo plazo (30 años) se observa una tendencia hacia escenarios más inciertos, aunque con señales consistentes: sólidos totales disueltos y nitratos tienden a estabilizarse en torno a valores medios, mientras que la turbiedad mantiene una variabilidad marcada asociada al caudal. Estos resultados refuerzan la relevancia de considerar tanto la disponibilidad hídrica como las condiciones climáticas en la gestión preventiva y en la planificación de largo plazo para la planta San Juan.

Conclusiones

El presente estudio permitió desarrollar y aplicar una metodología predictiva basada en el modelo Random Forest para proyectar el caudal y tres contaminantes relevantes en la planta San Juan de Esval: sólidos disueltos totales (SDT), nitratos (NO_3) y turbiedad. A partir de un proceso de recopilación, limpieza e integración de datos climáticos e hidrológicos, se construyó una base sólida que sirvió de insumo para el entrenamiento y validación del modelo.

Los análisis de correlación de Pearson mostraron que el caudal constituye la variable externa más influyente, con relaciones diferenciales en cada

contaminante: efecto de dilución en SDT y NO_3, e incremento directo en turbiedad. Estos resultados justificaron su inclusión como predictor central, complementado por variables climáticas como temperatura, precipitaciones y nieve acumulada.

El análisis de importancia de variables dentro del Random Forest confirmó que los rezagos autorregresivos explican gran parte de la dinámica de cada serie, especialmente en NO_3 y caudal, mientras que las variables externas, aunque con menor peso, cumplen un rol modulador y permiten mejorar la capacidad de generalización del modelo.

En cuanto a las proyecciones, los resultados a corto plazo (1 año) evidencian una adecuada reproducción de la variabilidad estacional, lo que valida el modelo como herramienta confiable para la gestión operativa. En el largo plazo (30 años), se observan escenarios con mayor incertidumbre: una tendencia decreciente en el caudal, estabilidad relativa en SDT y NO_3, y persistencia de alta variabilidad en la turbidez, siempre reportados con un intervalo de confianza del 95%.

Cabe destacar que las proyecciones obtenidas se construyeron a partir de los escenarios de temperatura, precipitaciones y nieve acumulada entregados por ARCLIM (MMA, s.f.), lo que permitió incorporar señales climáticas futuras en el análisis. Asimismo, para garantizar la consistencia entre etapas, se utilizaron tanto los datos históricos de caudal ajustados por el modelo como los datos históricos ajustados de los tres contaminantes (SDT, NO_3 y turbiedad), junto con los valores proyectados de caudal generados en la primera fase, los cuales sirvieron como insumo para la predicción de contaminantes. De este modo, las proyecciones finales consideran la dinámica hidrológica y de contaminantes observada en el pasado y su prolongación hacia escenarios climáticos futuros.

En conjunto, estos hallazgos refuerzan que el Random Forest, aplicado con 600 árboles de decisión, constituye una metodología sólida para anticipar la evolución de contaminantes en el agua potable, al integrar dependencias temporales y condiciones externas. Este enfoque no solo entrega información útil para la operación de la planta San Juan, sino que además ofrece una base metodológica replicable en otras instalaciones de Esval, contribuyendo a la planificación estratégica y a la gestión preventiva del recurso hídrico en la región.

Como línea futura, se plantea extender la aplicación de este modelo a todas las plantas de Esval en la Región de Valparaíso, adaptándolo a las particularidades de cada sistema de

producción. Asimismo, se propone avanzar en su implementación en Power BI, de modo de contar con una plataforma dinámica y automatizada que facilite la visualización de resultados y respalde la toma de decisiones operativas y estratégicas.

Bibliografía

- Bishop, C. M. (2006). *Pattern recognition and machine learning*. New York: Springer.
- Breiman, L., Friedman, J. H., Olshen, R. A., & Stone, C. J. (1984). *Classification and regression trees*. Boca Raton, FL: Chapman & Hall/CRC.
- Breiman, L. (1996). Bagging predictors. *Machine Learning, 24*(2), 123-140.
- Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine Learning, 45*(1), 5-32.
- Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). *The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction* (2nd ed.). New York: Springer.
- Hill, J., Linero, A., & Murray, J. (2020). Bayesian additive regression trees: A review and look forward. *Annual Review of Statistics and Its Application, 7,* 251 -278.
- James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2023). *An introduction to statistical learning with applications in Python*. New York: Springer.
- Lejarza, M. (s.f.). *Árboles de decisión*. Universidad de Valencia. Recuperado de https://www.uv.es/mlejarza/actuariales/tam/arbolesdecision.pdf
- Ministerio del Medio Ambiente. (s.f.). *Amenazas climáticas – Explorador de Clima ARCLIM*. Recuperado de https://arclim.mma.gob.cl/amenazas/
- Ministerio de Obras Públicas. (s.f.). *MAPS2 – Sistema de Información Hidrometeorológica*. Recuperado de https://mapas2.mop.gob.cl

Agradecimientos

Quiero agradecer a Esval, por facilitar los datos y confiar en el desarrollo de este estudio, así como a la Universidad de Valparaíso y a mis profesores, en especial a mi tutora Karine, por su orientación y apoyo durante todo el proceso.

De manera especial, agradezco a mis compañeras de universidad, quienes han sido una fuente constante de apoyo, motivación y compañía en cada etapa de mi formación. Su colaboración y amistad

han enriquecido este camino académico y personal.

Finalmente, extiendo mi más profundo agradecimiento a mi familia y a mi pareja, por su paciencia, cariño y respaldo incondicional, que me dieron la fuerza necesaria para avanzar y concretar este trabajo.

33.- Geotecnologías y Ciencias de la Atmósfera

Programação genética para a aprendizagem de índices na classificação de áreas com cana-de-açúcar

Autor: Jang, Kwan Sung; donju@usp.br
Co-autor(es): Luciano, Ana Claudia dos Santos; analuciano@usp.br
Orientador/a: Silva, Marcelo Andrade da; silva.marcelo@usp.br
Universidade de São Paulo / Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”

Resumo

Este trabalho tem como objetivo desenvolver uma abordagem utilizando programação genética para criar novos índices a partir de dados espectrais e otimizar a classificação de áreas com cana-de-açúcar em imagens de satélite. A metodologia envolveu o uso de dados do satélite LANDSAT8 e informações do MapBiomas, com 500 pontos aleatórios na região de Ribeirão Preto, referentes ao período de janeiro de 2021 a março de 2022. Os dados foram processados no QGIS e analisados no RStudio. Foi ajustado um modelo de Florestas Aleatórias com validação cruzada k-fold. Em seguida, aplicou-se o pacote gaselect para seleção de variáveis baseada em algoritmos genéticos, com populações de 100, 500 e 1000 indivíduos. Os resultados indicaram que os modelos treinados com variáveis selecionadas via programação genética obtiveram acurácia média de 86,4%, superando o NDVI (83%) e reduzindo o número de variáveis utilizadas. A programação genética mostrou-se eficaz ao identificar bandas temporais associadas a períodos com menor cobertura de nuvens, otimizando a predição de áreas com cana. A técnica destaca-se como promissora para melhorar modelos preditivos no sensoriamento remoto agrícola.

Palabras clave: programação genética, sensoriamento remoto, cana-de-açúcar

Introdução

A cultura da cana-de-açúcar ocupa uma posição estratégica no agronegócio brasileiro, abrangendo cerca de 2,4% das terras agricultáveis do país. Na região Centro-Sul — principal produtora nacional — o destaque recai sobre o Sudeste, especialmente o estado de São Paulo. De acordo com dados da Companhia Nacional de Abastecimento [CONAB], na safra 2022/23, apenas o território paulista destinou mais de 4,1 milhões de hectares aos canaviais, alcançando uma produtividade média de 75,43 t/ha e uma produção aproximada de 312 milhões de toneladas.

Diante dessa relevância econômica, o setor tem absorvido crescentes investimentos em tecnologia, com destaque para a região Sudeste, que apresenta os maiores volumes médios de recursos aplicados por hectare e por tonelada colhida. Neste contexto, o uso de tecnologias como o sensoriamento remoto tem se intensificado, inclusive por instituições financeiras que buscam mitigar riscos em operações de crédito rural. (Hokama & Miranda, 2019)

Nos últimos anos, a comunidade científica tem explorado diversas aplicações do sensoriamento remoto associado a algoritmos de aprendizado de máquina. A inteligência artificial, especialmente por meio de algoritmos como Random Forest, tem sido aplicada na previsão de produtividade de lavouras a partir de imagens de satélite (Luciano, 2021).

Outro avanço significativo é a introdução da programação genética (PG) no contexto do sensoriamento remoto. Esta técnica tem sido aplicada, por exemplo, na criação automática de índices de vegetação para estimar erosão do solo (Puente et al., 2019), na classificação de áreas queimadas com desempenho superior a métodos tradicionais (Cabral et al., 2018), e na aprendizagem de características temporais para classificação de culturas agrícolas, contribuindo para maior precisão espacial e monitoramento agrícola mais eficiente (Lu et al., 2022).

Objetivos

Este estudo tem como objetivo principal desenvolver uma abordagem baseada em programação genética para a construção de novas covariáveis derivadas de dados espectrais, com aplicação em métodos de aprendizado de máquina voltados à classificação de áreas cultivadas com cana-de-açúcar em imagens de satélite.

Os objetivos específicos envolvem:

(1) a geração de covariáveis que possibilitem a distinção eficiente entre

áreas com e sem cana-de-açúcar a partir de informações espectrais;

(2) a aplicação de diferentes algoritmos de aprendizado de máquina na tarefa de classificação dessas áreas;

(3) a avaliação da qualidade das previsões por meio de métricas estatísticas apropriadas; e

(4) a comparação dos resultados obtidos com referências disponíveis na literatura especializada.

Materiais e métodos

A seguir, são apresentados: (1) uma descrição do conjunto de dados utilizado para ilustrar o método explorado; (2) as características e funcionalidades dos softwares que serão utilizados; (3) uma breve descrição de aprendizado de máquina aplicado em problemas agrícolas; e, por fim, (4) as principais características de programação genética.

1. Descrição dos dados

Um conjunto de dados foi formado através do cruzamento de imagens de satélite LANDSAT e o Mapa de Uso e Ocupação do Solo da plataforma MapBiomas. A obtenção das observações, que compõem o banco de dados, foi feita escolhendo-se 500 pontos aleatórios com um algoritmo do próprio QGIS. Para cada um desses pontos, obteve-se a informação de uso e cobertura do solo, sendo utilizados os dados de 2022. Além disso, por meio do satélite LANDSAT 8, para a mesma região, para cada observação, conseguiu-se extrair os níveis de cinza de 6 bandas, de janeiro de 2021 a março de 2022, totalizando 15 meses.

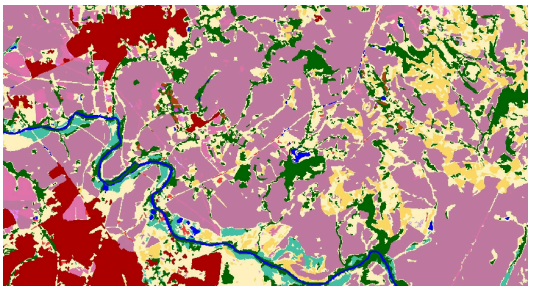


Figura 1. Área de estudo extraída do Mapa de Uso e Ocupação do MapBiomas

A justificativa para o período de estudo ultrapassar um ano está relacionada com a própria característica do ciclo da cana-de-açúcar nos canaviais paulistas, que excede um ano gregoriano. Esse processo teve o apoio da Profa. Dra. Ana Cláudia dos Santos Luciano, do Departamento de Engenharia de Biossistemas (LEB) da ESALQ/USP.

2. Softwares

Os softwares fundamentais para que o projeto atinja os objetivos propostos são: o QGIS e o RStudio. A seguir, uma breve explicação sobre esses programas.

O QGIS (Quantum GIS - QGIS Development Team, 2002) é um sistema de informação geográfica (SIG) de código aberto e gratuito que possui uma interface de usuário intuitiva. Através de seus painéis, barras de ferramentas e menus que proporcionam uma gama de funcionalidades, o usuário consegue

visualizar, analisar, manipular dados geoespaciais, podendo criar mapas personalizados.

O QGIS é compatível com uma ampla variedade de formatos de dados geográficos, incluindo shapefiles, arquivos georreferenciados (GeoTIFF), arquivos KML/KMZ (Google Earth), arquivos GPX (GPS), entre outros. Isso mostra a grande versatilidade desse software, que, através de plugins e extensões, permite, inclusive dentro de seu ambiente, a manipulação de scripts em R.

Antes da explicação do RStudio (RStudio Team, 2011), cabe aqui um pequeno parêntese para falar sobre o software R (R Core Team, 1993), a principal linguagem utilizada dentro de seu ambiente.

O R é uma linguagem de programação estatística utilizada para análise de dados, modelagem estatística, visualização e criação de gráficos. Ele fornece uma ampla gama de recursos estatísticos e ferramentas para manipulação e processamento de dados.

Além disso, uma das grandes vantagens do R é a ativa comunidade de usuários, que disponibiliza uma extensa coleção de pacotes e bibliotecas, potencializando e agilizando os trabalhos. Os pacotes do R chamados tidyverse (Wickham et al., 2019), desenvolvido para facilitar a manipulação dos dados, e ggplot2 (Wickham, 2016), desenvolvido para a construção de gráficos, serão explorados neste projeto.

O RStudio é um ambiente de desenvolvimento integrado (IDE) que fornece uma interface gráfica projetada especificamente para trabalhar com a linguagem R. Ele oferece recursos avançados de depuração, edição de código, gerenciamento de projetos e visualização de resultados.

3. Aprendizado de máquina

Recentemente, a OpenAI (OpenAI, 2021), uma organização sem fins lucrativos dedicada à pesquisa da inteligência artificial (IA), disponibilizou ao público o ChatGPT, um modelo de linguagem que tem causado uma série de impactos na sociedade.

Dentro desse contexto, a IA vem sendo cada vez mais utilizada para a solução de diversos desafios e problemas nos mais variados setores da economia e em pesquisas científico-tecnológicas, bem como na gestão pública, gerando inúmeros benefícios sociais (Cerri e Carvalho, 2017).

Uma das áreas de grande destaque da IA é o Aprendizado de Máquina (AM), que se dedica a criar programas de computador capazes de aprender a executar tarefas por meio de experiência própria (Faceli et al., 2011). Os programas devem ser alimentados com dados que representam experiências passadas. Em cima dessas informações, os algoritmos

são treinados e, por fim, aprendem, imitando o processo de aprendizado dos seres humanos.

O setor agropecuário apresenta muitos desafios que podem ser solucionados pelo uso de algoritmos de AM. Através de árvores de decisão (Quinlan, 1993) foram geradas regras de classificação de bovinos para auxiliar os pecuaristas em relação ao melhor tempo de abate (Garner et al., 1995).

Outro exemplo da aplicação do AM é o uso de redes neurais (Haykin, 1999) para prever a produção de frutas. Esses algoritmos, que foram baseados no funcionamento dos neurônios biológicos, são alimentados com dados de colheitas das frutas (Satizábal et al., 2012).

Além desses que já foram mencionados, um dos algoritmos mais difundidos é a programação genética, que foi amplamente abordada na fase final do projeto de pesquisa.

4. Programação genética

A programação genética (PG) (Koza, 1992) é uma técnica de programação evolutiva que usa princípios inspirados na teoria da evolução biológica para encontrar soluções para problemas complexos. Nessa abordagem, um conjunto de programas candidatos, representados por árvores sintáticas, é gerado aleatoriamente e evoluído por meio de operadores genéticos, como reprodução, crossover e mutação.

A seleção envolve a escolha dos programas mais aptos de uma população para se reproduzirem. Os programas selecionados são então combinados por meio de operadores genéticos, como cruzamento e recombinação, para gerar uma nova geração de programas. A mutação ocorre aleatoriamente, introduzindo pequenas alterações nos programas para aumentar a diversidade e explorar novas soluções.

Durante a evolução, os programas são avaliados com base em uma função de aptidão (fitness function), que mede o quão bem cada programa resolve o problema em questão. Os programas mais aptos têm maior probabilidade de serem selecionados para reprodução, permitindo que suas características sejam transmitidas para as gerações futuras.

Resultados e discussão

Com o objetivo de atingir-se um dos principais objetivos propostos — seleção de covariáveis que otimizem a predição de áreas de cana — primeiramente fez-se um estudo de simulação com o algoritmo genético. Após um estudo com populações e critérios diferentes, aplicou-se a programação genética para seleção das melhores covariáveis, orientada por acurácia e área sob a curva (AUC). Os resultados de acurácia, sensibilidade e especificidade obtidos pelo

modelo com as variáveis selecionadas foram analisados comparativamente.

1. Estudo de simulação usando o pacote gaselect

O estudo de simulação foi realizado sobre uma matriz de dados aleatórios gerados por comandos no RStudio.

Primeiramente, é criada a matriz X com 500 linhas e 90 colunas. Esse tamanho não foi escolhido arbitrariamente, tendo sido decidido com referência no banco de dados original do projeto. Os elementos dessa matriz são números aleatórios gerados a partir de uma distribuição normal (Gaussiana) com média 0 e desvio padrão variando de 1 a 5, aplicados ciclicamente aos valores gerados.

Em seguida, um vetor z é calculado a partir das somas das linhas de X para 8 colunas específicas, selecionadas pela função seq(1, 85, length = 8), que gera uma sequência de 8 números entre 1 e 85. Esse vetor z tem comprimento 500.

Após isso, o vetor z é transformado em probabilidades pr aplicando-se a função logística, resultando em valores entre 0 e 1.

Finalmente, é gerada a variável binária y, um vetor de comprimento 500, cujos valores (0 ou 1) são gerados a partir de uma distribuição binomial com probabilidades fornecidas pelo vetor pr.

Em resumo:

- X é uma matriz de dimensão 500 x 90 com números aleatórios;
- z é um vetor de somas das colunas de X;
- pr é um vetor de probabilidades derivadas de z;
- y é uma variável binária gerada com base nessas probabilidades.

Como já foi mencionado, o trabalho propõe-se a utilizar o algoritmo genético para selecionar subconjuntos de variáveis que maximizem a acurácia de um modelo Random Forest na predição de uma variável binária.

Para tanto, o controle do algoritmo genético foi definido com a função genAlgControl, especificando o tamanho da população como 100, 500 e 1000 — sendo essas variações responsáveis pela construção dos diferentes cenários do presente estudo.

A seguir, foi definida a função de avaliação evalFUN, que recebe como entrada as variáveis resposta y e preditoras X. Dentro dessa função, os dados são organizados em um data.frame, onde y é tratado como fator. O modelo de Random Forest é treinado utilizando as primeiras 350 observações, e as próximas 150 são usadas para teste. A acurácia do modelo é calculada como a proporção de predições corretas. Além disso, também se utilizou a área sob a curva (AUC) como métrica de desempenho.

Posteriormente, extraíram-se os 10 melhores subconjuntos de variáveis identificados pelo algoritmo genético. Em

seguida, foi ordenada a frequência de cada variável selecionada nesses subconjuntos, em ordem decrescente. Dessa forma, foi possível comparar as variáveis mais frequentes com as originalmente responsáveis pela geração de y, obtendo-se os percentuais de sucesso apresentados na *[Tabela 1]*.

Tabela 1. Percentual de sucesso do algoritmo genético.

População	Critério	Percentual
100	Acurácia	51,19%
100	AUC	38,10%
500	Acurácia	51,72%
500	AUC	53,57%
1000	Acurácia	44,44%
1000	AUC	58,51%

Analisando o estudo de simulação, percebe-se que os percentuais de sucesso não foram satisfatórios. Diante disso, foram levantadas possíveis causas para esse baixo desempenho. A principal hipótese reside na etapa de simulação das covariáveis, questionando-se a forma como foi feita a distribuição normal e a variabilidade considerada nos dados simulados. Por isso, considerou-se que esse tema deve ser aprofundado em trabalhos futuros.

2. O gaselect aplicado ao conjunto de dados

Todos os procedimentos feitos no estudo de simulação foram novamente realizados, agora sobre os dados reais. Vale destacar que essas variáveis correspondem a reflectâncias captadas por satélite, conforme descrito anteriormente. O algoritmo genético (GA) que faz a seleção de variáveis em dados de alta dimensionalidade, visando melhorar a performance de modelos preditivos, foi implementado através do pacote gaselect (Kepplinger, 2023).

Tabela 2. Ocorrência das variáveis seleccionadas sob a orientação da acurácia.

Variável	Frequência	Variável	Frequência
B_4_09_21	10	B_6_01_21	3
B_7_03_22	7	B_6_05_21	3
B_7_05_21	7	B_6_10_21	3
B_7_08_21	7	B_7_06_21	3
B_7_02_22	6	B_4_01_22	2
B_2_05_21	5	B_5_01_21	2
B_2_06_21	3	B_7_03_21	2
B_5_03_21	3	B_2_01_21	1
B_5_06_21	3	B_2_02_22	1
B_3_01_21	1	B_3_02_21	1
B_3_03_22	1	B_5_01_22	1
B_6_03_22	1		

Sob o critério de acurácia, o algoritmo genético selecionou 23 variáveis [ver *Tabela 2*]; sob o critério da AUC, foram escolhidas 25 variáveis [ver *Tabela 3*]. Considerando que o universo total é de 90 variáveis, essa seleção representa uma redução significativa.

Tabela 3. Ocorrência das variáveis seleccionadas sob a orientação da AUC.

Variável	Frequência	Variável	Frequência
B_4_09_21	10	B_3_09_21	3
B_4_01_22	8	B_5_11_21	3
B_4_03_21	7	B_7_05_21	3
B_6_03_22	7	B_2_01_21	2
B_2_06_21	5	B_3_01_22	2
B_6_05_21	5	B_4_02_21	2
B_7_01_22	5	B_5_01_21	2
B_2_07_21	3	B_5_03_21	2
B_2_09_21	3	B_7_01_21	2
B_7_06_21	2	B_7_11_21	2
B_3_01_21	1	B_3_02_21	1
B_3_03_22	1	B_3_05_21	1
B_7_03_22	1		

Analisando-se as covariáveis selecionadas, percebe-se uma estreita relação com os meses de menor ocorrência de nuvens, conforme mostrado na Tabela 1. Assim, conclui-se que o algoritmo interpretou os meses com menor cobertura de nuvens como sendo os mais apropriados e eficientes para a predição das áreas de cana. Ou seja, a programação genética foi capaz de selecionar as covariáveis mais relevantes para otimizar os modelos.

Com o objetivo de comparar o desempenho de diferentes conjuntos de dados, foram criadas quatro referências:

1. Referência 1: utiliza todas as 6 bandas dos 15 meses;
2. Referência 2: utiliza o NDVI (bandas B4 e B5) nos 15 meses;
3. Referência 3: utiliza as variáveis selecionadas pelo algoritmo genético com base na AUC;
4. Referência 4: utiliza as variáveis selecionadas com base na acurácia.

Para comparar essas referências, foi aplicada uma validação cruzada do tipo k-fold, com k = 4, usando o algoritmo Random Forest para classificação. Os dados foram divididos em 4 grupos iguais. Em cada iteração, três grupos foram usados para treino e um para teste, garantindo que todos os dados fossem utilizados tanto para treino quanto para teste, proporcionando uma avaliação mais robusta.

As performances foram avaliadas com base em matrizes de confusão, a partir das quais foram calculadas as métricas de acurácia, sensibilidade e especificidade para cada iteração.

Os resultados estão apresentados na *[Tabela 4]*.

Tabela 4. Resultados de acurácia, sensibilidade e especifcidade para diferentes referencias.

	Acurácia	Sensibilidade	Especificidade
Referência 1: 6 bandas por 15 meses			
1	0,816	0,7143	0,8986
2	0,928	0,9444	0,9155
3	0,832	0,7759	0,8806
4	0,896	0,8182	0,9383
MÉDIA	0,868	0,8132	0,90825
Referência 2: NDVI por 15 meses			
1	0,8	0,6964	0,8841
2	0,848	0,8519	0,8451
3	0,808	0,7241	0,8806
4	0,864	0,8636	0,8642
MÉDIA	0,83	0,784	0,8685
Referência 3: Algoritmo Genético AUC			
1	0,832	0,7321	0,913
2	0,912	0,9444	0,8873
3	0,824	0,7069	0,9254
4	0,888	0,7727	0,9506
MÉDIA	0,864	0,789025	0,919075
Referência 4: Algoritmo Genético AC			
1	0,832	0,75	0,8986
2	0,92	0,9444	0,9014
3	0,832	0,7586	0,8955
4	0,888	0,7727	0,9506
MÉDIA	0,868	0,806425	0,911525

De acordo com os resultados mostrados na *[Tabela 4]*, conclui-se que, de maneira geral, o algoritmo genético proporcionou uma grande otimização dos modelos, entregando resultados semelhantes ou até superiores ao uso do banco de dados completo ou de índices consagrados como o NDVI.

Observa-se que os modelos treinados com colunas selecionadas geneticamente apresentaram acurácias iguais ou muito próximas às obtidas com o uso de todas as 90 variáveis. Além disso, embora a sensibilidade tenha sido ligeiramente menor, as especificidades das Referências 3 (AUC) e 4 (acurácia) foram superiores às do controle (Referência 1).

Um ponto importante é que os modelos baseados nas colunas selecionadas geneticamente tiveram melhor desempenho que o NDVI em todas as métricas, especialmente em especificidade, reforçando a ideia de que houve efetiva otimização da predição proporcionada pela programação genética.

Conclusões

Os resultados apresentados demonstram a eficácia do uso de algoritmos genéticos na otimização de modelos de classificação. Ao comparar as diferentes abordagens, percebe-se que os modelos que utilizaram variáveis selecionadas geneticamente alcançaram acurácias equivalentes ou até superiores aos modelos que utilizaram todas as variáveis disponíveis, sugerindo que a seleção cuidadosa de variáveis pode levar a modelos mais eficientes e robustos.

Essa observação é particularmente relevante no contexto de grandes conjuntos de dados, onde a redundância e a irrelevância de certas variáveis podem degradar o desempenho do modelo.

Adicionalmente, a análise das métricas de sensibilidade e especificidade reforça a superioridade dos modelos otimizados geneticamente. Apesar da sensibilidade dos modelos com variáveis selecionadas estar ligeiramente abaixo da sensibilidade do modelo que utilizou todas as variáveis,

as especificidades foram significativamente maiores, o que indica uma menor taxa de falsos positivos. Esse aspecto é crucial em aplicações onde a precisão é mais valorizada que a sensibilidade, como em cenários de monitoramento ambiental, onde é preferível evitar alarmes falsos.

Finalmente, a comparação com o NDVI, um índice amplamente utilizado, destaca ainda mais a eficácia da abordagem genética. Os modelos otimizados geneticamente superaram o desempenho do NDVI em todas as métricas analisadas, especialmente na especificidade. Isso sugere que, embora o NDVI seja uma métrica poderosa, a utilização de algoritmos genéticos pode potencialmente gerar índices ainda mais eficazes para a classificação de dados complexos.

Estes resultados apontam para um futuro promissor na aplicação de técnicas de otimização evolutiva na modelagem preditiva, abrindo caminho para desenvolvimentos ainda mais sofisticados e eficientes na análise de grandes volumes de dados.

Bibliografia

Cabral, A., Silva, S., Silva, P., Vanneschi, L., & Vasconcelos, M. (2018). Burned area estimations derived from Landsat ETM+ and OLI data: Comparing genetic programming with maximum likelihood and classification and regression trees. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, 142*, 94–105.

Cerri, R., & Carvalho, A. C. P. de L. F. de. (2017). *Aprendizado de máquina: Breve introdução e aplicações*. Documento online. Acesso em 30 de maio de 2023.

Companhia Nacional de Abastecimento. *Info Agro – Safras*. (s.d.).

Faceli, K., Lorena, A., Gama, J., & Carvalho, A. (2011). *Inteligência artificial: Uma abordagem de aprendizado de máquina*. Rio de Janeiro: LTC.

Garner, S., Cunningham, S., Holmes, G., Nevill-Manning, C., & Witten, I. (1995). Applying a machine learning workbench: Experience with agricultural databases. In *Machine Learning in Practice Workshop* (pp. 14–21). Tahoe City.

Haykin, S. (1999). *Neural networks: A comprehensive foundation* (2ª ed.). Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall PTR.

Hokama, R. H., & Miranda, C. G. (2019). Mitigação de riscos em operações de crédito rural com o uso de sensoriamento remoto. In *Anais do XIX Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto, Santos*. São José dos Campos: INPE.

Kepplinger, D. (2023). *Genetic algorithm (GA) for variable selection from high-dimensional data*. Disponível em: https://github.com/dakep/gaselect

Koza, J. R. (1992). *Genetic programming: On the programming of computers by means of natural selection*. Cambridge, MA: MIT Press.

Lu, M., Bi, Y., Xue, B., Hu, Q., Zhang, M., Wei, Y., Yang, P., & Wu, W. (2022). Genetic programming for high-level feature learning in crop classification. *Remote Sensing, 14*(16).

Luciano, A. C. (2021). Empirical model for forecasting sugarcane yield on a local scale in Brazil using Landsat imagery and random forest algorithm. *Computers and Electronics in Agriculture, 184*, 106063.

OpenAI. (2021). *OpenAI GPT-3.5*. Acesso em 30 de maio de 2023.

Puente, C., Olague, G., Trabucchi, M., Arjona-Villicaña, P., & Soubervielle-Montalvo, C. (2019). Synthesis of vegetation indices using genetic programming for soil erosion estimation. *Remote Sensing, 11*(2), 156.

QGIS Development Team. (2002, julho). *QGIS Geographic Information System*. Disponível em: https://qgis.org. Acesso em: 25 de maio de 2023.

Quinlan, J. R. (1993). *C4.5: Programs for machine learning*. San Francisco: Morgan Kaufmann.

R Core Team. (1993). *R: A language and environment for statistical computing*. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing. Versão 4.2.2.

RStudio Team. (2011). *RStudio: Integrated Development Environment for R*. Boston, MA: RStudio PBC. Versão 2022.12.0+353.

Satizábal, H., Barreto-Sanz, M., Jiménez, D., Pérez-Urbe, A., & Cock, J. (2012). Enhancing decision-making processes of small farmers in tropical crops by means of machine learning models. In *Decision Support Systems IV – Information and Knowledge Management in*

Decision Processes (pp. 265–277). Paris: Springer.

Wickham, H. (2016). *ggplot2: Elegant graphics for data analysis*. New York: Springer-Verlag.

Wickham, H., Averick, M., Bryan, J., Chang, W., McGowan, L. D., François, R., Grolemund, G., Hayes, A., Henry, L., Hester, J., Kuhn, M., Pedersen, T. L., Miller, E., Bache, S. M., Müller, K., Ooms, J., Robinson, D., Seidel, D. P., Spinu, V., … Yutani, H. (2019). Welcome to the tidyverse. *Journal of Open Source Software, 4*(43), 1686.

Financiamento

Este trabalho foi financiado pelo Programa Unificado de Bolsas da Universidade de São Paulo (PUB-USP).

33 – Geotecnologías y Ciencias de la Atmósfera

Ecosistemas en ruptura: fragmentación y cambios en la cobertura del suelo en el Planalto Serrano Catarinense

Autor: Gonçalves Luciano, Enzo, gl.enzo@hotmail.com
Coautores: Díaz Isasa, Ismael, idiaz@fcien.edu.uy; Goetten Wagner, Julia, goettenj@hotmail.com
Tutor: Siminski, Alexandre; alexandre.siminski@ufsc.br
Universidade Federal de Santa Catarina / Centro de Ciências Agrárias - Curitibanos

Resumen

Los paisajes naturales del Planalto Serrano Catarinense, en Brasil, enfrentan crecientes presiones antrópicas, lo que conlleva pérdida de biodiversidad y servicios ecosistémicos. Comprender la fragmentación y los cambios en estos ambientes es clave para conservar bosques, campos y otras fitofisionomías. Este estudio analizó la transformación de la cobertura del suelo y sus características en el municipio de Painel, en Santa Catarina, entre 1985 y 2023, a partir de imágenes satelitales de la colección 9 de MapBiomas y secuencias Landsat y Sentinel, procesadas en QGIS 3.4 y Google Earth Engine. En 1985, el municipio tenía 25.495 ha de bosques y 46.478 ha de campos nativos, y en 2023, se redujeron a 20.084 ha (-21,2%) y 42.908 ha (-8,3%). Como resultado, el número de fragmentos forestales aumentó un 98,6% (de 2.448 a 4.863), de los cuales el 93% son menores a 5 ha. En los campos, el aumento fue del 19,9%, con 91,6% menores a 5 ha. La silvicultura fue el principal agente de conversión, con pérdidas del 21,1% en bosques y 6,2% en campos, seguida de la agropecuaria. También se observó una reducción en la distancia media entre fragmentos, asociada al aumento del número total. El NDVI mostró una tendencia general de descenso. Y a pesar de los cambios, Painel conserva el 85 % de su territorio con áreas naturales. Estos hallazgos reflejan la intensidad del proceso de fragmentación, especialmente en los bosques, afectando la conectividad ecológica del Bosque Atlántico y facilitando el avance del borde, invasiones biológicas y pérdida de biodiversidad. Aunque los campos hayan sufrido menos conversiones, siguen bajo amenaza. Por lo tanto, reconocer los impactos humanos es esencial para orientar acciones de conservación del patrimonio natural de forma efectiva.

Palabras clave: dinámica del paisaje, geoprocesamiento, Bosque Atlántico.

Introducción

La biodiversidad, en toda su complejidad y riqueza, se encuentra bajo una presión creciente en un mundo marcado por transformaciones ambientales constantes y aceleradas. Gran parte de estos cambios son originados o intensificados por acciones antrópicas, como el cambio climático y la fragmentación de los ambientes naturales, los cuales alteran los patrones ecológicos, los ciclos y la conectividad entre los ecosistemas (Holyoak & Heath, 2016; Liu et al., 2018; Costa, Galvão y Silva, 2019; Petzinger y Berreta, 2024).

Más allá de la descaracterización de un paisaje a gran escala, los efectos menos perceptibles, en una escala más amplia, impactan y desencadenan cambios significativos en la composición, estructura y continuidad de los ecosistemas (Liu et al., 2018; Zhao et al., 2021).

El efecto de borde ejemplifica una de estas consecuencias, ya que, como uno de los resultados de la fragmentación, reestructura los bosques al introducir nuevas condiciones ambientales, como mayor luminosidad, mayor incidencia del viento y cambios en los flujos de humedad. Estos factores afectan el nicho ecológico de especies vegetales adaptadas a los ambientes interiores sombreados y, en consecuencia, afectan a la fauna asociada a esos recursos (Bastos et al., 2023; Pfeifer et al., 2017; Emer et al., 2018; Liu et al., 2018; Pscheidt et al., 2018).

Sin embargo, también se destaca que estos efectos no se limitan a los bosques, que muchas veces constituyen el único foco de proyectos de restauración y conservación (Overbeck et al., 2007). Las formaciones campestres también son afectadas por procesos degradativos, donde el efecto de borde, la invasión biológica, que refleja la fragilidad de estos ambientes, y la pérdida de cobertura son realidades que enfrentan estas fitofisionomías. Por ello, se hace necesario prestar atención a las distintas expresiones de la biodiversidad local (Dick et al., 2011; Overbeck et al., 2015; Primieri et al., 2017; Külkamp, Heiden y Iganci, 2018; Hasenack et al., 2023; Zorek et al., 2024).

En el contexto del Bosque Atlántico, un hotspot de interés nacional e internacional, las características de este bioma son altamente diversas, abarcando campos y bosques con una gran cantidad de especies endémicas (Higuchi, 2013; Castuera-Oliveira, Oliveira-Filho y Eisenlohr, 2020; Petzinger y Berreta, 2024). A pesar de ello, alberga a una gran parte de la población brasileña, lo que impacta directamente en la continuidad de las áreas naturales. No obstante, algunas regiones, incluso con antecedentes de explotación de recursos naturales, aún conservan áreas boscosas y campestres

con características relevantes para la perpetuación de especies, interacciones ecológicas y ecosistemas (Külkamp, Heiden y Iganci, 2018; Petzinger y Berreta, 2024; Zorek et al., 2024).

El estado de Santa Catarina, y en particular el Planalto Serrano Catarinense (PSC), alberga una porción considerable de áreas de campos nativos en mosaico con el Bosque Ombrófilo Mixto (Bosque de Araucarias) (Klein, 1978). Uno de los municipios que conforman esta región es Painel, un territorio de creciente interés para la silvicultura, la ganadería y la recolección de *pinhão*, semillas de *Araucaria angustifolia* (Magnanti y Rover, 2025). Aunque se trata de un municipio con una población reducida, alrededor de 2.200 habitantes (IBGE, 2022), conserva áreas naturales de relevancia para la conservación, aunque poco estudiadas (Higuchi, 2013; Külkamp, Heiden y Iganci, 2018; Marchioro, Santos y Siminski, 2019).

Uno de los primeros pasos para comprender una región es el levantamiento de su historia local, lo que permite reconstruir el pasado, comprender el presente y, así, orientar un futuro basado en conocimientos científicos y saberes locales que promuevan la conciliación entre productividad y conservación de los recursos disponibles (Sühs, Giehl y Peroni, 2020; Sá, Nodari y Gerhardt, 2023; Magnanti y Rover, 2025).

En este sentido, las geotecnologías, especialmente la teledetección y los sistemas de información geográfica (SIG), se consolidan como herramientas fundamentales para el análisis de la estructura y el funcionamiento del paisaje. A través de ellas, es posible monitorear la cobertura vegetal a lo largo del tiempo, identificar patrones de avance o retroceso de actividades antrópicas o coberturas naturales, así como dimensionar los procesos de fragmentación y transformación del paisaje (Guedes y Silva, 2018; Mahapatra et al., 2025; MapBiomas, 2025). De este modo, ofrecen aportes técnicos clave para la gestión territorial, la formulación de políticas públicas y la garantía de la perpetuación de los ambientes naturales, no únicamente por la existencia de áreas conservadas, sino por su conectividad dentro de la matriz paisajística (Ponzoni y Shimabukuro, 2010; Costa, Galvão y Silva, 2019; Zorek et al., 2024).

Frente a este panorama, el presente estudio tiene como objetivo principal comprender la dinámica del paisaje en el municipio de Painel, en el estado de Santa Catarina, a partir de un análisis multitemporal de la cobertura del suelo y de la fragmentación de formaciones vegetales nativas (campos y bosques). La investigación se basa en tres hipótesis centrales: (1) hubo cambios relevantes en el paisaje entre los años 1985 y 2023; (2)

las actividades antrópicas generaron impactos sobre las áreas naturales, tanto boscosas como campestres; y (3) la fragmentación de la vegetación aumentó con el tiempo, provocando pérdida de calidad y conectividad entre los remanentes.

Materiales y métodos

El presente estudio se llevó a cabo en el municipio de Painel, situado en el estado brasileño de Santa Catarina (Figura 1), en las coordenadas 27º 55' 44" S y 50º 06' 18" O. El área total del municipio abarca 738,3 km² (73.833 ha), con una altitud aproximada de 1.144 metros sobre el nivel del mar y clima templado del tipo Cfb, según la clasificación de Köppen, caracterizado por veranos suaves (Alvares et al., 2013). La temperatura media anual ronda los 15 °C, mientras que la precipitación promedio es de 1.500 mm por año.

En lo que respecta a la vegetación, la fisonomía predominante en la región es de tipo campestre, compuesta principalmente por especies de las familias Asteraceae y Poaceae. Además, en fragmentos boscosos o macizos forestales, se encuentran áreas de Bosque Ombrófilo Mixto (BOM), con una presencia destacada de la especie arbórea amenazada

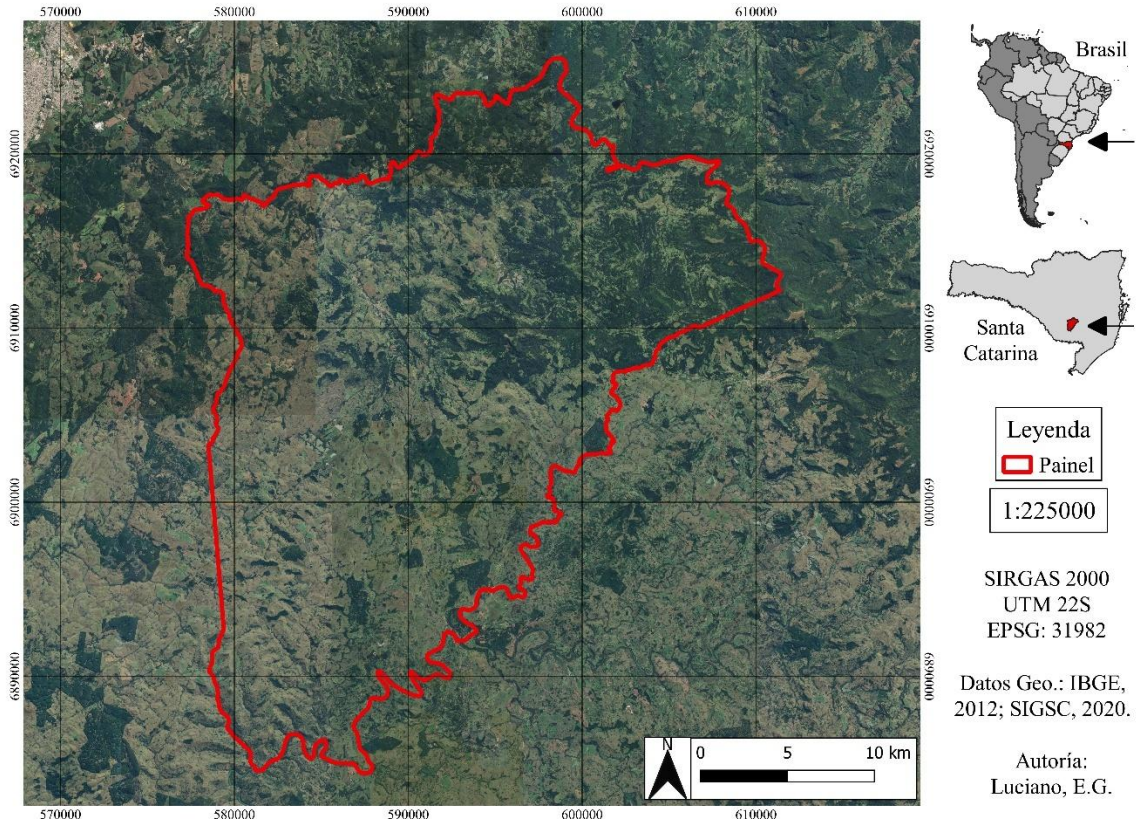


Figura 1. Área de estudio utilizada para las evaluaciones espacio-temporales correspondientes al municipio de Painel, en el estado de Santa Catarina, Brasil.

Araucaria angustifolia (Bertol.) Kuntze, en asociación, sobre todo, con angiospermas de las familias Myrtaceae y Lauraceae (Klein, 1978; Santos, 2014).

Con base en la delimitación geográfica del municipio de Painel, se obtuvieron datos sobre la transformación del uso y la cobertura del suelo, tanto en áreas naturales como antrópicas, a partir de dos fuentes principales: la plataforma MapBiomas, colección 9.0 (MapBiomas, 2025) e imágenes satelitales, adquiridas para los años 1985, 1995, 2005, 2015 y 2023.

Las imágenes de MapBiomas, procesadas con base en la serie de datos Landsat, emplean una metodología de clasificación de cobertura con resolución espacial de 30 metros, mediante un análisis píxel a píxel que permite diferenciar rangos de reflectancia correspondientes a distintos usos del suelo (bosques, campos, agricultura, áreas urbanas, etc.). El resultado son mosaicos temáticos que posibilitan la comprensión de la composición y las tendencias del paisaje a lo largo del tiempo (Souza et al., 2020). Los datos derivados de estas imágenes facilitaron la identificación de procesos de fragmentación en formaciones campestres y bosques nativos, así como el análisis de cambios en la cobertura del suelo.

Paralelamente, se utilizaron imágenes sin procesamiento previo de la serie Landsat (1985, 1995, 2005 y 2015, con resolución de 30 m) y Sentinel (2023, con resolución de 10 m), con el objetivo de estimar métricas a partir de las bandas espectrales de los distintos sensores empleados (Landsat 5 y 8, y Sentinel-2). Así, bajo un criterio máximo del 10% de cobertura nubosa, fue posible cuantificar el Índice de Vegetación de Diferencia Normalizada (NDVI).

Para el análisis de los cambios en el uso y cobertura del suelo, se compararon las clases de uso correspondientes a los años 1985 y 2023 proporcionadas por MapBiomas, con el fin de identificar variaciones en área y porcentaje total dentro de la composición del paisaje. Estos cambios fueron interpretados como aumentos, disminuciones o estabilidad en las categorías. Cabe destacar que, las clases utilizadas se derivan de la clasificación original de MapBiomas, con adaptaciones descritas en el Cuadro 1, de acuerdo con los objetivos del presente estudio.

En cuanto a los análisis de fragmentación, se consideró el número total de polígonos correspondientes a las áreas de bosque y campos nativos (obtenidos de las imágenes de MapBiomas), el área individual y total de los fragmentos (en hectáreas) y la distancia mínima entre ellos (en metros). Se destaca que, la distancia entre fragmentos se evaluó considerando la forma detallada del

Cuadro 1. Clasificación original y adaptada de la cobertura del suelo.

Adaptado	Original (MapBiomas, 2025)
Agricultura y ganadería	Mosaico de agricultura y pastizales
	Pastizal
	Soja
	Otros cultivos temporales
Bosque nativo	Formación forestal
Campo nativo	Formación campestre
Silvicultura	Silvicultura
Urbano	Área urbanizada
Otros	Otras áreas no vegetadas
	Río, lago e océano

área y un mínimo de 30 metros, basado en la resolución de píxel (30 × 30 m) de las imágenes Landsat procesadas por MapBiomas.

En cuanto a los análisis de fragmentación, se consideró el número total de polígonos correspondientes a las áreas de bosque y campos nativos (obtenidos de las imágenes de MapBiomas), el área individual y total de los fragmentos (en hectáreas) y la distancia mínima entre ellos (en metros). Se destaca que, la distancia entre fragmentos se evaluó considerando la forma detallada del área y un mínimo de 30 metros, basado en la resolución de píxel (30 × 30 m) de las imágenes Landsat procesadas por MapBiomas.

Y con base en el Índice de Vegetación de Diferencia Normalizada (NDVI – *Normalized Difference Vegetation Index*), se evaluó la calidad de la vegetación nativa. Este índice estima la densidad de biomasa y la actividad fotosintética mediante la relación entre las bandas espectrales del infrarrojo cercano (NIR) y del rojo (RED) (Guedes & Silva, 2018), según la siguiente ecuación: NDVI = (NIR - RED) / (NIR + RED). Resultados cercanos a +1 indican mayor concentración de clorofila y, por lo tanto, vegetación más densa y vigorosa, mientras que valores próximos a 0 indican suelo expuesto y valores cercanos a -1 otras coberturas no vegetadas. Se destaca que, aunque el NDVI es ampliamente utilizado en cultivos agrícolas, su aplicación en vegetación nativa puede presentar variaciones significativas debido a la heterogeneidad estructural de las fitofisionomías, como campos y bosques, lo que exige una interpretación cautelosa de los resultados. Además, se subrayan limitaciones del método respecto a las posibles interferencias atmosféricas (Ponzoni & Shimabukuro, 2010), incluso con un límite del 10% de nubosidad.

Por último, el procesamiento y análisis de los datos se realizaron con el apoyo de diversas herramientas y softwares. El programa QGIS 3.16.13 fue utilizado para

la delimitación del área de estudio, el análisis geográfico y la elaboración de mapas temáticos. Microsoft Excel se empleó para la organización de los datos. Por su parte, los análisis estadísticos descriptivos y porcentajes se llevaron a cabo en el R (versión 4.3.3) y RStudio (R Core Team, 2021). Adicionalmente, se utilizó la plataforma computacional Google Earth Engine (Gorelick et al., 2017) para el procesamiento espacial de las imágenes Landsat y Sentinel, la generación de métricas a nivel de paisaje (como distancias y áreas) y el cálculo del valor medio anual de NDVI para los años evaluados.

Resultados y discussión

El análisis de la cobertura del suelo en el municipio de Painel entre 1985 y 2023 evidenció transformaciones en la configuración y proporciones en el paisaje, marcadas por el avance de actividades antrópicas sobre áreas naturales de bosque y campo. Las Figuras 2 y 3, elaboradas a partir de la base de datos de MapBiomas, ilustran la expansión de usos silvícolas y agropecuarios a lo largo del período evaluado. Se estima que aproximadamente 10.317 ha fueron convertidas a nuevos usos, lo que representa un cambio del 14% con respecto a la cobertura original. Además,

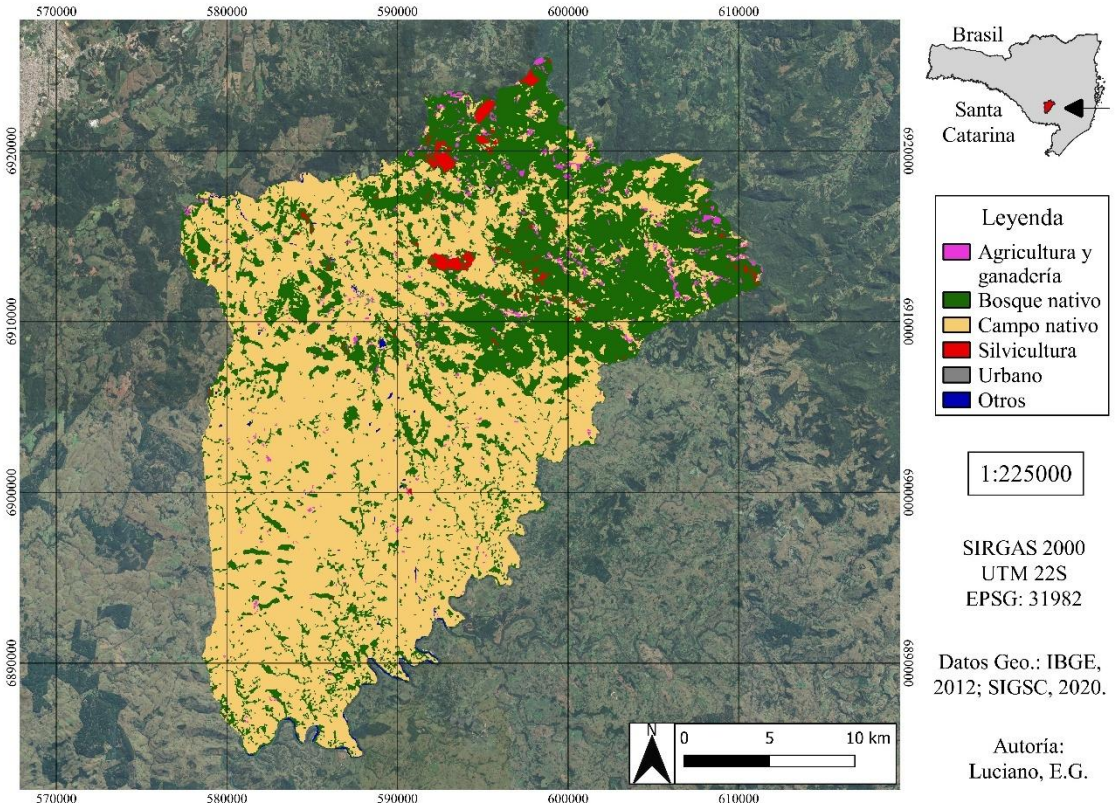


Figura 2. Uso y cobertura del suelo en 1985 para el municipio de Painel, en Santa Catarina, Brasil.

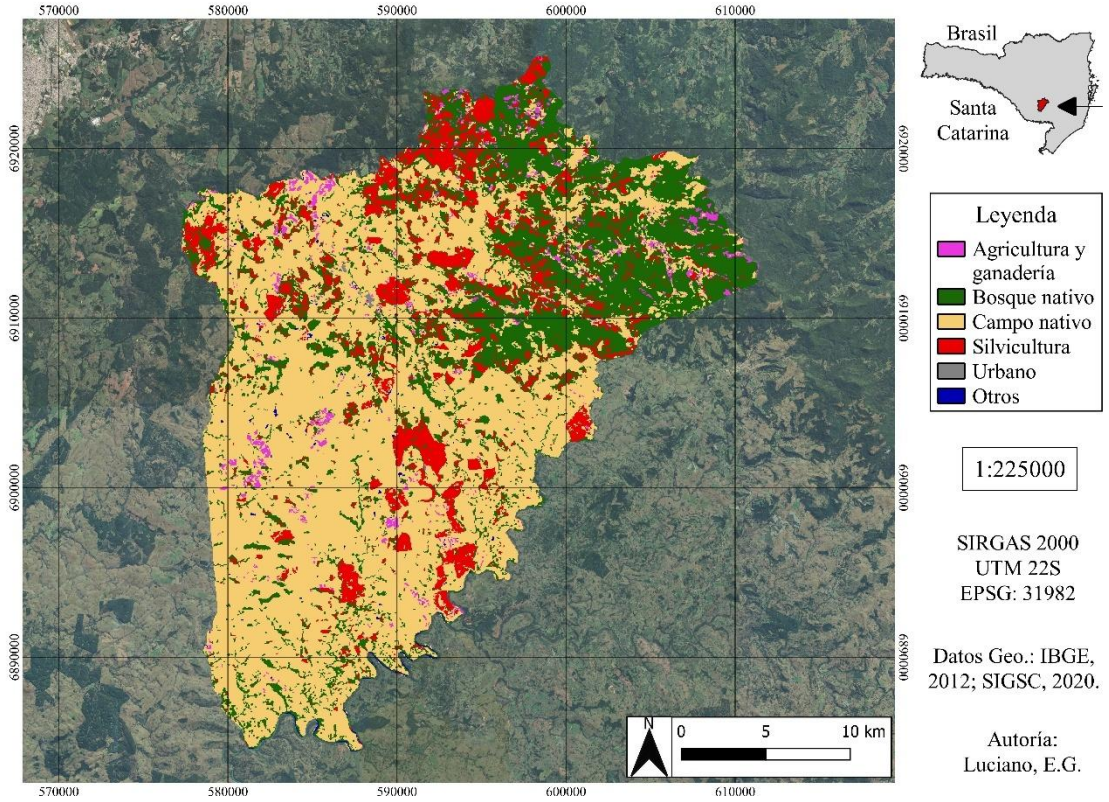


Figura 3. Uso y cobertura del suelo en 2023 para el municipio de Painel, en Santa Catarina, Brasil.

en 1985, los bosques y campos nativos ocupaban 25.480 ha (34,4%) y 46.450 ha (62,7%), respectivamente, extensiones que en 2023 se redujeron en un 21,5% y 8,3% del total.

Al analizar con mayor detalle la dinámica del paisaje entre 1985 y 2023, la Figura 4 muestra las transformaciones ocurridas mediante un diagrama de Sankey y los porcentajes de representación de las categorías en los años comparados. Este tipo de diagrama es una herramienta visual que representa los cambios en la cobertura del suelo, conectando las clases originales con las actuales a través de flujos proporcionales entre las distintas categorías observadas. Se destacan las transformaciones de las áreas naturales en silvicultura, que registró un aumento del 1.255,6% en el área total, y en agricultura y ganadería, con un incremento del 68,7%.

Al enfocarse en esos principales impulsores de transformación del paisaje, la silvicultura, actividad recurrente en la región y estado para el cultivo de *Pinus taeda* L. con fines madereros (IBÁ, 2024), fue responsable por la conversión de 5.362 ha de bosque nativo, lo que representa una pérdida aproximada del 21,0% de la cobertura forestal del municipio y corresponde al 95,8% de los cambios ocurridos en la categoría. En cuanto al

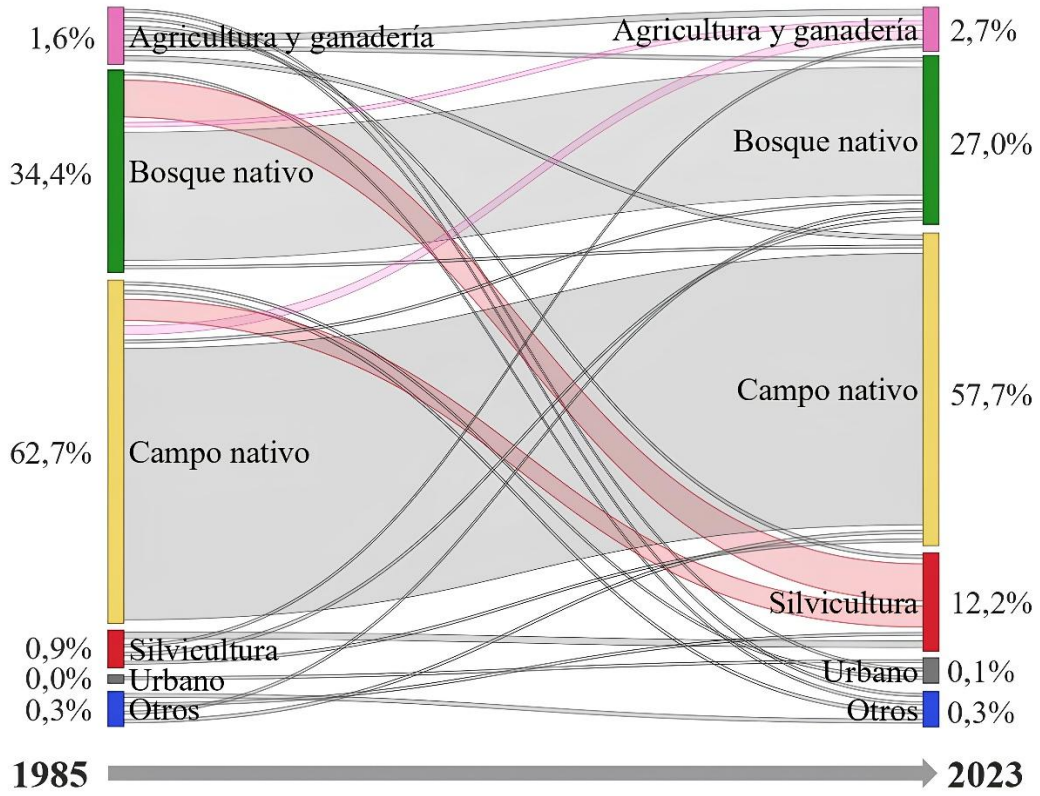


Figura 4. Transformación del paisaje del municipio brasileño de Painel, en Santa Catarina, entre los años 1985 y 2023.

En cuanto al impacto sobre los campos nativos, la reducción alcanzó aproximadamente un 6,2%, equivalente a 2.868 ha. En comparación, las actividades agropecuarias (cultivos y pastizales) resultaron en una disminución de alrededor del 0,9% en bosques y del 2,0% en campos nativos.

Debido a su papel determinante en la conversión de las áreas, estos usos antrópicos deben ser cuidadosamente evaluados en función de sus características y de los posibles efectos aditivos asociados a la transformación del paisaje.

En lo que respecta a la silvicultura, la especie más utilizada en la región es *Pinus taeda* (IBÁ, 2024), una conífera exótica con potencial invasor (CONSEMA, 2025). Estos individuos pueden colonizar áreas próximas a las plantaciones, presentando mayores tasas de éxito especialmente en ambientes abiertos o ecológicamente vulnerables, como etapas iniciales de regeneración o zonas sometidas a disturbios (Bechara et al., 2013; Zenni & Simberloff, 2013; Bognola et al., 2018; Ricardo, Siminski, & Reis, 2018). En este contexto, el efecto de borde puede actuar como un amplificador de la susceptibilidad

a la invasión por *P. taeda*, debido a la abertura del entorno, al aumento de la incidencia solar y a la alteración de condiciones propias de un ambiente anteriormente interior de bosque. Es decir, al afectar el equilibrio local, este se vuelve más susceptible a la invasión biológica (Bognola et al., 2018; Reis et al., 2021; Zhang et al., 2021).

En este contexto, cabe destacar que la matriz del paisaje analizado es predominantemente campestre, caracterizada por una fitofisionomía natural abierta, compuesta por gramíneas y arbustos de pequeño porte (Klein, 1978). Estos ambientes, por sus propias características ecológicas, se encuentran particularmente amenazados por la invasión biológica de *P. taeda*, que encuentra en áreas abiertas condiciones favorables para su dispersión y establecimiento, generando impactos a largo plazo sobre la diversidad, la estructura vegetal y el suelo (Abreu & Durigan, 2011; Bechara et al., 2013; Cassol eat., 2019). A esto se suman otras amenazas asociadas a la introducción de especies de gramíneas y/o forrajeras empleadas en pasturas y actividades agrícolas, que también pueden comprometer la permanencia de esta formación vegetal (CONSEMA, 2025).

Por lo tanto, más allá de la conversión directa de la cobertura, es fundamental considerar las prácticas de uso del suelo desarrolladas en el territorio, con el fin de evaluar con mayor precisión los impactos reales sobre la biodiversidad tanto de los ambientes forestales como campestres (Ziller & Galvão, 2002; Falleiros, Zenni, & Ziller, 2011; Overbeck et al., 2015).

Al centrarse en los ecosistemas naturales, tanto las formaciones campestres como los bosques nativos mostraron una reducción en el total acumulado y en el tamaño medio de las áreas individuales a lo largo del período evaluado (Figura 5A y 5B), siendo el impacto más marcado en las zonas boscosas. En relación con el número de fragmentos forestales (Figura 5C), se registró un aumento porcentual acumulado del 98,6% entre 1985 y 2023, prácticamente el doble en comparación con el año inicial. Paralelamente, los campos presentaron un incremento porcentual menor, con un aumento del 19,3% en el número total de fragmentos. Es importante destacar que los bosques nativos experimentaron un salto considerable del 63,5% en el número de fragmentos durante el período de 2015 a 2023 (8 años), en contraste con los intervalos anteriores, en los que los aumentos no superaron el 12%.

La marcada variación porcentual en las áreas forestales entre 2015 y 2023 puede reflejar una intensificación reciente de la presión sobre estos ambientes, vinculada a factores comerciales, entre ellos la expansión de plantaciones forestales, así

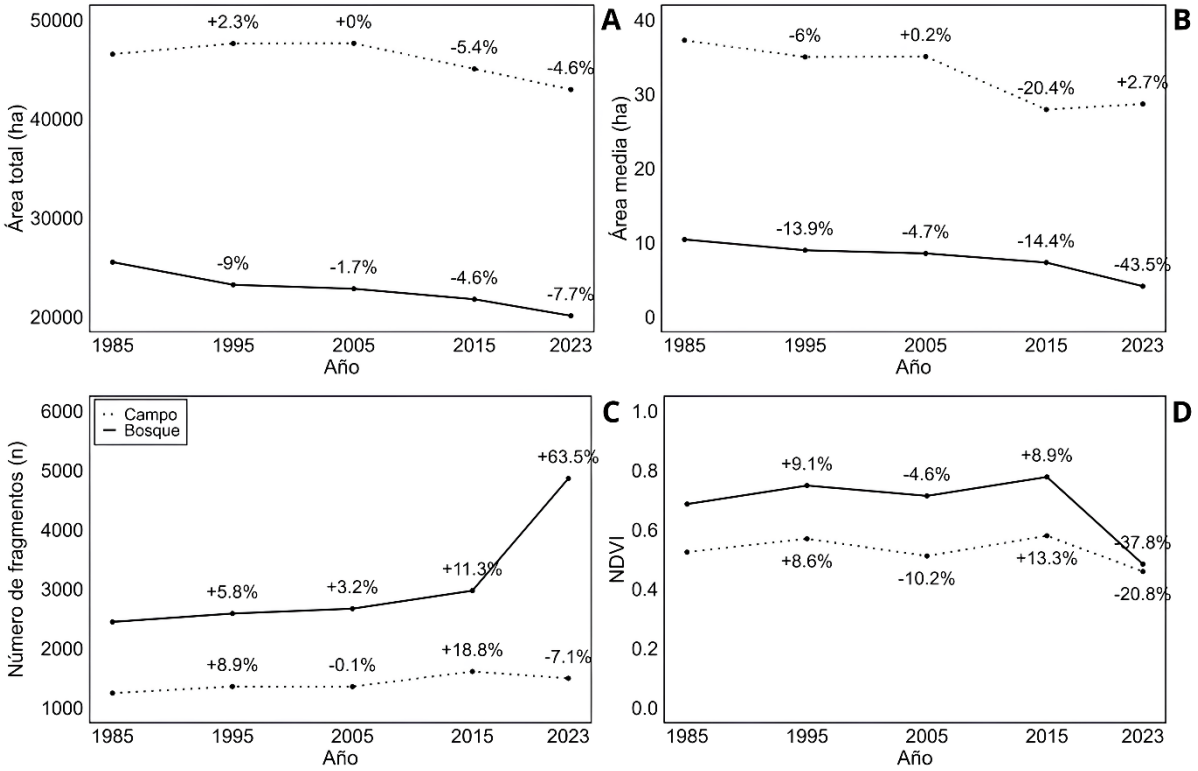


Figura 5. Métricas del paisaje y diferencias porcentuales entre cada período para (A) el área total de campos y bosques nativos, (B) el área media de los fragmentos naturales, (C) el número de fragmentos y (D) el valor promedio del Índice de Vegetación de Diferencia Normalizada (NDVI), en el municipio de Painel, Santa Catarina, Brasil.

como al uso del suelo con fines agrícolas y de desarrollo inmobiliario (Vasconcellos, 2002; Sevegnani et al., 2012; Ramachandra, Bharath, & Bharath, 2020; Mahapatra et al., 2025). Cabe señalar que, durante el siglo XX, la explotación del Bosque Ombrófilo Mixto alcanzó niveles elevados, llevando a varias especies nativas a categorías de amenaza de extinción (Carvalho, 2010; Sá, Nodari, & Gerhardt, 2023). Por ello, orientar el uso de estos ecosistemas resulta esencial para desacelerar su degradación y promover alternativas sostenibles (Lauterjung et al., 2019; Marque, Reis, & Denardin, 2019; Magnanti & Rover, 2025). Considerando este panorama, es fundamental incorporar a las comunidades locales en los procesos de planificación, ya que el Bosque de Araucarias (BOM) es fruto de milenios de interacción entre poblaciones humanas nativas y la biodiversidad regional (Reis, Ladio, & Peroni, 2014). Ignorar esta dimensión histórica puede generar dificultades futuras para la continuidad de iniciativas de conservación (Dusi, 2007; Reis, Ladio, & Peroni, 2014; Grava & Florit, 2020).

Al mismo tiempo, al considerar la menor tasa de fragmentación y pérdida de área, los campos nativos pueden presentar limitaciones edáficas que desincentivan el avance de actividades agrícolas y silviculturales, aunque siguen siendo utilizadas para la ganadería (Simioni, Hoff, & Silva, 2016; Hasenack et al., 2023). En este contexto, el ganado actúa como factor de presión, pero también contribuye al mantenimiento de esta fitofisionomía al favorecer la permanencia de especies gramíneas nativas, siempre que se mantenga la vegetación original (Andrade et al., 2016; Sühs, Giehl & Peroni, 2020). Por otro lado, aunque los campos nativos representen la principal cobertura del paisaje, su extensión continua puede ocultar los efectos directos de la fragmentación, evidenciando, en cambio, signos de perforación del continuo campestre, en lugar de áreas fragmentadas, lo que intensifica el efecto de borde y disminución total (Overbeck et al., 2007; Mahapatra et al., 2025).

Adicionalmente, la Tabla 1 facilita la comprensión de la dinámica del paisaje en Painel, evidenciando una disminución en el número de fragmentos grandes en favor de clases menores, registrando la mayor concentración en fragmentos inferiores a 5 ha, especialmente en bosques, similar a lo encontrado por Petzinger y Berreta (2024). Esto se relaciona tanto con la fitofisonomía local, que presenta naturalmente bosques dispersos entre campos (Klein, 1978), como con la tendencia ya observada de conversión de áreas y la consecuente fragmentación del hábitat.

De la misma manera, la distancia media entre fragmentos disminuyó entre 1985 y 2023, de 200 m a 177 m en formaciones campestres, y de 150 m a 115 m en forestales. Contrariamente a lo esperado, esta reducción no responde a la expansión de los bosques o campos, sino al aumento en el número de fragmentos, que reduce la distancia promedio y convierte el paisaje en un mosaico de pequeñas áreas.

Finalmente, en relación con el Índice de Vegetación por Diferencia Normalizada (NDVI) mostrado en la Figura 5D, se observó en el último período una disminución en el valor medio de las formaciones, alcanzando mínimos del 37% respecto a 2015 en los bosques y del 20% en los campos. Esta variación puede estar relacionada con el aumento de la fragmentación, especialmente en las áreas forestales, reflejando efectos de borde y pérdida de calidad de la vegetación y biomasa por estrés ambiental (Harper et al., 2005; Sevegnani et al., 2012; Liu et al., 2018; Pscheidt et al., 2018; Costa, Galvão, & Silva, 2019). No obstante, las diferencias entre las resoluciones satelitales de Landsat (30 m) y Sentinel (10 m) podrían haber revelado características antes no detectadas. Por ello, se requieren estudios adicionales que respalden los resultados

Tabla 1. Número de fragmentos campestres y forestales por categoría de área en 1985 y 2023 en el municipio brasileño de Painel, Santa Catarina.

Número de fragmentos				
Categoría de fragmentación	Bosque		Campo	
	1985	2023	1985	2023
Menor a 5 ha	2133	4530	1144	1373
Entre 5 y 25 ha	238	275	85	98
Entre 25 y 50 ha	49	43	6	11
Entre 50 y 100 ha	16	8	9	9
Entre 100 y 250 ha	8	4	3	4
Entre 250 y 500 ha	2	0	1	2
Entre 500 y 1000 ha	1	0	0	0
Mayor a 1000 ha	1	3	1	1
Total	2448	4863	1249	1498

del NDVI, aunque este ya demuestra sensibilidad a los cambios en los paisajes naturales.

Aun así, como era esperado, se evidencia la diferencia en biomasa y actividad fotosintética entre formaciones campestres y forestales, lo que refuerza la importancia de ambas fitofisionomías para la biodiversidad y los servicios ecosistémicos (Vibrans et al., 2013; Overbeck et al., 2015; Primieri et al., 2017). En consecuencia, las acciones de conservación y las políticas públicas deben considerar las particularidades de estos ambientes, garantizando también la representatividad de las formaciones no forestales (Overbeck et al., 2007; Higuchi et al., 2013; Vibrans et al., 2013; Overbeck et al., 2015).

A partir de los hallazgos, reflexionar sobre el impacto en la flora y la fauna resulta fundamental, ya que los efectos tienden a intensificarse de forma conjunta.

El efecto de borde, evidenciado a lo largo de las diferentes fases del estudio, puede conducir a una simplificación de la biodiversidad local debido a la limitación de interacciones con individuos que requieren características propias del interior del bosque o de la heterogeneidad de los campos (Liu et al., 2018; Pscheidt et al., 2018; Yan et al., 2022; Bastos et al., 2023). Además, la conectividad de las áreas se compromete cada vez más, dificultando el flujo genético, alimenticio y de locomoción. Estos factores, sumados, afectan especialmente a especies arbóreas clímax, plantas especialistas y fauna que se alimenta de estos recursos forestales o

depende directamente de dicha cadena alimentaria y territorio (Bregman et al., 2014; Zanin, Palomares, & Brito, 2014; Pfeifer et al., 2017; Pscheidt et al., 2018; Yan et al., 2022; Bastos et al., 2023).

Pscheidt et al. (2018) también evidencian que el efecto de borde puede extenderse hasta más de 50 metros hacia el interior del bosque, afectando la diversidad a lo largo de este gradiente. Yan et al. (2022) encuentran que la fragmentación y la densidad de los campos se relacionan directamente con la riqueza de especies y el éxito de plantas generalistas, pudiendo incluso generar respuestas en el ámbito de la microbiología (Zhao et al., 2021). Todos estos factores evidencian la complejidad asociada al estudio del paisaje y sus transformaciones, pero también la relevancia de este proceso.

Y a pesar del crecimiento antrópico, las áreas naturales continúan representando la mayor parte de la cobertura de Painel, con un valor aproximado del 85%, lo que resalta su potencial para la conservación de la biodiversidad y el uso múltiple sostenible de los recursos naturales. Cabe mencionar que la región fue identificada por Marchioro, Santos y Siminski (2019) y Külkamp, Heiden y Iganci (2018) como parte de una zona de interés para la conservación frente a los cambios climáticos y pérdida de biodiversidad, con especial atención a *Araucaria angustifolia* y especies endémicas de los campos nativos de altitud. Además, es el territorio de los Sistemas Agroforestales Tradicionales del Pinhão (SAT Pinhão), caracterizados por poblaciones que utilizan los recursos naturales mientras mantienen el bosque como parte del paisaje (Rodrigues, 2024; Magnanti & Rover, 2025), constituyendo así una estrategia productiva y sostenible, impulsada y mantenida por las propias comunidades locales (Dechoum et al., 2018; Tagliari et al., 2022).

Por lo tanto, la caracterización de la región de Painel contribuye a la comprensión de las dinámicas entre paisajes naturales y antrópicos, evidenciando la necesidad de poner énfasis en la pérdida de biodiversidad y en los impactos derivados de la conversión y fragmentación de los ecosistemas. En este sentido, se hace evidente la necesidad de adoptar estrategias que concilien la conservación y el uso sostenible de los recursos naturales, planificando así acciones efectivas frente a los cambios climáticos, invasiones biológicas y otras presiones originadas o impulsadas por actividades humanas. Además, estudios adicionales pueden potenciar el entendimiento de las dinámicas de estos paisajes, resaltando la importancia de las herramientas satelitales en estos procesos.

Conclusiones

El paisaje de Painel, en Santa Catarina, Brasil, ha experimentado transformaciones

entre 1985 y 2023, impulsadas por la expansión de usos antrópicos sobre áreas naturales. Durante este período, las formaciones forestales fueron las más afectadas, principalmente por la intensificación de la silvicultura, mientras que las formaciones campestres también sufrieron una reducción, aunque en menor proporción. Ambas fitofisionomías presentaron una marcada fragmentación, con disminución del área media de los fragmentos, mayor concentración en unidades inferiores a 5 ha y reducción en la distancia entre manchas naturales, como reflejo del aumento de la fragmentación. Paralelamente, el Índice de Vegetación por Diferencia Normalizada (NDVI) mostró una disminución en los valores medios para ambas formaciones entre 2015 y 2023, lo que indica una pérdida en la calidad de la vegetación.

A pesar de este panorama, aproximadamente el 85% del territorio de Painel aún está compuesto por formaciones naturales, lo que refuerza el potencial para investigaciones orientadas a comprender la dinámica del paisaje y planificar acciones enfocadas en la conservación y el uso sostenible de los recursos en un contexto global de transformación ambiental constante.

Agradecimiento

A la Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação de Santa Catarina (FAPESC) por la beca de posgrado. A la Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), al campus Curitibanos de la misma y al Programa de Pós-graduação em Ecossistemas Agrícolas e Naturais (PPGEAN) por la oportunidad de participar en el presente evento. Y al Núcleo de Estudos em SocioAgroBiodiversidade (NESBIO - UFSC), al Núcleo de Estudos em Dendrometria, Inventário e Manejo Florestal (NEDIM - UFSC) y al Laboratorio de Desarrollo Sustentable y Gestión Ambiental del Territorio (LDSGAT - Universidad de la República) por el apoyo creativo, técnico y práctico para el desarrollo del proyecto.

Referencias bibliográficas

Abreu, R. C. R., & Durigan, G. (2011). Changes in the plant community of a Brazilian grassland savannah after 22 years of invasion by *Pinus elliottii* Engelm. *Plant Ecology & Diversity*, *4*(2-3), 269-278.

Alvares, C. A., Stape, J. L., Sentelhas, P. C., Gonçalves, J. L. de M., & Sparovek, G. (2013). Köppen's climate classification map for Brazil. *Meteorologische Zeitschrift*, *22*(6), 711-728.

Andrade, B. O., Bonilha, C. L., Ferreira, P. M. A., Boldrini, I. I., & Overbeck, G. E. (2016). Highland grasslands at the southern tip of the Atlantic Forest biome: Management options and conservation

challenges. *Oecologia Australis*, *20*(2), 37-61.

Bastos, J. R., Capellesso, E. S., Vibrans, A. C., & Marques, M. C. M. (2023). Human impacts, habitat quantity and quality affect the dimensions of diversity and carbon stocks in subtropical forests: a landscape-based approach. *Journal for Nature Conservation, 73*, 1-8.

Bechara, F. C., Reis, A., Bourscheid, K., Vieira, N. K., & Trentin, B. E. (2013). Reproductive biology and early establishment of *Pinus elliottii* var. *elliottii* in Brazilian sandy coastal plain vegetation: Implications for biological invasion. *Scientia Agricola*, *70*(2), 88-92.

Bognola, I. A., Lavoranti, O. J., Higa, A. R., Coutinho, R. T., Bobko, A., & Ribas Júnior, U. (2018). Dispersão de sementes, regeneração e rebrota de *Pinus taeda* no Planalto Norte do Estado de Santa Catarina, Brasil. *Pesquisa Florestal Brasileira*, *38*, 1-10.

Bregman, T. P., Sekercioğlu, Ç. H., & Tobias, J. A. (2014). Global patterns and predictors of bird species responses to forest fragmentation: Implications for ecosystem function and conservation. *Biological Conservation, 169*(1), 372-383.

Carvalho, M. M. X. de. (2010). *Uma grande empresa em meio à floresta: A história da devastação da floresta com araucária e a Southern Brazil Lumber and Colonization (1870-1970)* (Tese de doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina). Programa de Pós-Graduação em História, Centro de Filosofia e Ciências Humanas, UFSC.

Cassol, P. C., Fachini, L., Mafra, Á. L., Brand, M. A., Simonete, M. A., & Coimbra, J. L. M. (2019). Alterações no carbono orgânico do solo de campo natural submetido ao plantio de *Pinus taeda* em três idades. *Ciência Florestal*, *29*(2), 545-558.

Castuera-Oliveira, L., Oliveira-Filho, A. T., & Eisenlohr, P. V. (2020). Emerging hotspots of tree richness in Brazil. *Acta Botanica Brasilica, 34*(1), 117-134.

Conselho Estadual do Meio Ambiente de Santa Catarina – CONSEMA. (2025). *Resolução CONSEMA nº 271, de 30 de maio de 2025: Reconhece a Lista Oficial de Espécies da Flora Exóticas Invasoras no Estado de Santa Catarina e dá outras providências*. Diário Oficial de Santa Catarina, Edición 22535, Materia nº 1089261. Publicado el 17 de junio de 2025.

Costa, A., Galvão, A., & Silva, L. G. (2019). Mata Atlântica brasileira: Análise do efeito de borda em fragmentos florestais remanescentes de um hotspot para conservação da biodiversidade. *Geomae*, *10*(1), 112-123.

Dechoum, M. S., Giehl, E. L. H., Sühs, R. B., Silveira, T. C. L., & Ziller, S. R. (2018). Citizen engagement in the management of non-native invasive pines: Does it make a

difference? *Biological Invasions*, *21*(1), 175-188.

Dick, D. P., Leite, S. B., Dalmolin, R. S. D., Almeida, H. C., & Knicker, H. (2011). *Pinus* afforestation in South Brazilian highlands: Soil chemical attributes and organic matter composition. *Scientia Agricola*, *68*(2).

Dusi, L. (2007). *Conflitos de uso do solo na gestão ambiental de bacias hidrográficas – BH Urubici* (Tese de doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, UFSC.

Emer, C., Galetti, M., Pizo, M. A., Guimarães, P. R., Moraes, S., Piratelli, A., & Jordano, P. (2018). Seed-dispersal interactions in fragmented landscapes – a metanetwork approach. *Ecology Letters, 21*(4), 484-493.

Falleiros, R. M., Zenni, R. D., & Ziller, S. R. (2011). Invasão e manejo de *Pinus taeda* em campos de altitude do Parque Estadual do Pico Paraná, Paraná, Brasil. *Floresta*, *41*(1).

Gorelick, N., Hancher, M., Dixon, M., Ilyushchenko, S., Thau, D., & Moore, R. (2017). Google Earth Engine: planetary-scale geospatial analysis for everyone. *Remote Sensing of Environment, 202*.

Grava, D. S., & Florit, L. F. (2020). Povos e comunidades tradicionais em Santa Catarina: sistematização de dados e reflexão sobre conflitos ambientais territoriais. *Redes. Revista do Desenvolvimento Regional*, *25*, 1738-1763.

Guedes, J. C. F., & Silva, S. M. P. (2018). Sensoriamento remoto no estudo da vegetação: princípios físicos, sensores e métodos. *Acta Geográfica, 12*(29).

Harper, K. A., Macdonald, S. E., Burton, P. J., Chen, J., Brosofske, K. D., Saunders, S. C., ... Esseen, P.-A. (2005). Edge influence on forest structure and composition in fragmented landscapes. *Conservation Biology, 19*(3), 768-782.

Klein, R. M. (1978). *Mapa fitogeográfico do Estado de Santa Catarina*. Itajaí: Herbário Barbosa Rodrigues.

Hasenack, H., Hofmann, G. S., Weber, E. J., & Sarmento, E. C. (2023). Climate and soil conditions across the South Brazilian grasslands. In G. E. Overbeck, V. D. P. Pillar, S. C. Müller, & G. A. Bencke (Eds.), *South Brazilian grasslands* (pp. 119-144).

Higuchi, P., Silva, A. C., Almeida, J. A., Bortoluzzi, R. L. C., Mantovani, A., Ferreira, T. de S., ... Silva, K. M. da. (2013). Florística e estrutura do componente arbóreo e análise ambiental de um fragmento de Floresta Ombrófila Mista Alto-Montana no município de Painel, SC. *Ciência Florestal*, *23*(1), 153-164.

Holyoak, M., & Heath, S. K. (2016). The integration of climate change, spatial dynamics, and habitat fragmentation: A conceptual overview. *Integrative Zoology*, *11*(1), 40-59.

Indústria Brasileira de Árvores - IBÁ. (2024). *Relatório anual*. São Paulo, SP: IBÁ. Recuperado de https://www.iba.org/

Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística - IBGE. (2022). *Cidades e estados: Painel*. https://www.ibge.gov.br/cidades-e-estados/sc/painel.html

Külkamp, J., Heiden, G., & Iganci, J. R. V. (2018). Endemic plants from the Southern Brazilian Highland Grasslands. *Rodriguésia, 69*(2), 429-440.

Lauterjung, M. B., Montagna, T., Bernardi, A. P., Silva, J. Z., Costa, N. C. F., Steiner, F., ... Reis, M. S. (2019). Temporal changes in population genetics of six threatened Brazilian plant species in a fragmented landscape. *Forest Ecology and Management*, *435*, 144-150.

Liu, J., Coomes, D. A., Hu, G., Liu, J., Yu, J., Luo, Y., & Yu, M. (2018). Larger fragments have more late-successional species of woody plants than smaller fragments after 50 years of secondary succession. *Journal of Ecology, 107*(2), 582-594.

Magnanti, N. J., & Rover, O. (2025). Conservação pelo uso sustentável do pinheiro brasileiro (Araucaria angustifolia): extrativismo de pinhão no planalto serrano catarinense. *Biodiversidade Brasileira, 15*(2), 101-112.

Mahapatra, S., Majhi, B. K., Sarkar, M. S., Datta, D., Mishra, A. P., & Rathnayake, U. (2025). Understanding forest fragmentation dynamics and identifying drivers for forest cover loss using random forest models to develop effective forest management strategies in North-East India. *Results in Engineering, 26*.

MapBiomas. (2025). *Projeto MapBiomas – Coleção 9.0 da Série Anual de Mapas de Cobertura e Uso da Terra do Brasil*. Recuperado de https://brasil.mapbiomas.org/

Marchioro, C. A., Santos, K. L., & Siminski, A. (2019). Present and future of the critically endangered *Araucaria angustifolia* due to climate change and habitat loss. *Forestry: An International Journal of Forest Research, 93*(3), 401-410.

Marques, A. C., Reis, M. S., & Denardin, V. F. (2019). As paisagens da erva-mate: uso das florestas e conservação socioambiental. *Ambiente & Sociedade*, *22*, e02822.

Overbeck, G. E., Müller, S. C., Fidelis, A., Pfadenhauer, J., Pillar, V. D., Blanco, C. C., ... Forneck, E. D. (2007). Brazil's neglected biome: The South Brazilian Campos. *Perspectives in Plant Ecology, Evolution and Systematics*, *9*(2), 101-116.

Overbeck, G. E., Vélez-Martin, E., Scarano, F. R., Lewinsohn, T. M., Fonseca, C. R., Meyer, S. T., ... Durigan, G. (2015). Conservation in Brazil needs to include non-forest ecosystems. *Diversity and Distributions*, *21*(12), 1455-1460.

Petzinger, J. G. G., & Berreta, M. S. R. (2024). Fragmentação de habitat em remanescentes de Mata Atlântica no sul do Brasil: Análise espacial baseada em métricas da paisagem. *Revista Ciência Geográfica*, *28*(2), 417-431.

Pfeifer, M., Lefebvre, V., Peres, C. A., Banks-Leite, C., Wearn, O. R., Marsh, C. J., Butchart, S. H. M., Arroyo-Rodríguez, V., Barlow, J., & Cerezo, A. (2017). Creation of forest edges has a global impact on forest vertebrates. *Nature, 551*(7679), 187-191.

Ponzoni, F. J., & Shimabukuro, Y. E. (2010). *Sensoriamento remoto no estudo da vegetação*. São José dos Campos/SP: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais.

Primieri, S., Muniz, A. W., & Lisboa, H. M. (2017). Dinâmica do carbono no solo em ecossistemas nativos e plantações florestais em Santa Catarina. *Floresta e Ambiente, 24*, 1-9.

Pscheidt, F., Higuchi, P., Silva, A. C., Rech, T. D., Salami, B., Ferreira, T. S., Bonazza, M., & Bento, M. A. (2018). Efeito de borda como fonte da heterogeneidade do componente arbóreo em uma floresta com araucária no sul do Brasil. *Ciência Florestal, 28*(2), 601-612.

R Core Team. (2021). *R: A language and environment for statistical computing* (Versión 4.3) [Software]. R Foundation for Statistical Computing.

Ramachandra, T. V., Bharath, S., & Bharath, A. H. (2020). Insights of forest dynamics for the regional ecological fragility assessment. *Journal of the Indian Society of Remote Sensing, 48*(8), 1169-1189.

Reis, A. R. N., Biondi, D., Viezzer, J., Freiman, F. P., & Fogaça, L. (2021). Vulnerabilidade à invasão biológica por *Hovenia dulcis* Thunb. em áreas verdes de Curitiba, Paraná, Brasil. *Ciência Florestal*, *31*(4), 1768-1788.

Reis, M. S., Ladio, A., & Peroni, N. (2014). Landscapes with Araucaria in South America: Evidence for a cultural dimension. *Ecology and Society*, *19*(2).

Ricardo, B. H., Siminski, A., & Reis, M. S. (2022). Invasive alien species in protected areas: The dynamics of *Pinus taeda* at Rio Canoas State Park, Brazil. *Canadian Journal of Forest Research*, *52*(3), 328-334.

Rodrigues, N. C. (2024). *Caracterização do sistema tradicional de produção de pinhão no Planalto Serrano Catarinense* [Tesis de maestría, Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Curitibanos]. Universidade Federal de Santa Catarina.

Sá, D. N., Nodari, E. S., & Gerhardt, M. (2023). Colonização e transformação de paisagens na floresta com araucárias no século XX. *Estudos Históricos (Rio de Janeiro)*, *36*(80), 518-541.

Santos, E. D. (2014). *Florística, fitossociologia e relações entre as variáveis ambientais e a vegetação dos campos da região de Lages, SC, Brasil* [Tesis de maestría, Universidade Federal de Santa Catarina]. Universidade Federal de Santa Catarina.

Sevegnani, L., Silva, T. C., Gasper, A. L. de, Meyer, L., & Verdi, M. (2012). Flora arbórea e o impacto humano nos fragmentos florestais na bacia do rio Pelotas, Santa Catarina, Brasil. *Revista de Estudos Ambientais, 14*(1), 60-73.

Simioni, F. J., Hoff, D. N., & Silva, C. (2016). Diversificação e atividades não agrícolas como alternativas de renda na agricultura familiar: Um estudo de caso no município de Painel/SC. *Revista Brasileira de Gestão e Desenvolvimento Regional*, *12*(2).

Souza, C. M., Jr., Shimbo, J. Z., Rosa, M. R., Parente, L. L., Alencar, A. A., Rudorff, B. F. T., ... Azevedo, T. (2020). Reconstructing three decades of land use and land cover changes in Brazilian biomes with Landsat archive and Earth Engine. *Remote Sensing, 12*(17).

Sühs, R. B., Giehl, E. L. H., & Peroni, N. (2020). Preventing traditional management can cause grassland loss within 30 years in southern Brazil. *Scientific Reports*, *10*(1).

Tagliari, M. M., Bogoni, J. A., Blanco, G. D., Cruz, A. P., & Peroni, N. (2023). Disrupting a socio-ecological system: Could traditional ecological knowledge be the key to preserving the Araucaria forest in Brazil under climate change? *Climatic Change, 176*(2), 1-20.

Vasconcellos, J. M. (2002). Zonas de amortecimento: Programa de ação com o entorno ou áreas de intervenção. In *Anais do Congresso Brasileiro de Unidades de Conservação* (2000, pp. 101-103).

Vibrans, A. C., Sevegnani, L., de Gasper, A. L., & Lingner, D. V. (2013). *Inventário florístico florestal de Santa Catarina: Floresta Ombrófila Mista* (Vol. 2, 440 p.). Blumenau: Edifurb.

Yan, Y., Jarvie, S., Liu, Q., & Zhang, Q. (2022). Effects of fragmentation on grassland plant diversity depend on the habitat specialization of species. *Biological Conservation, 275*, 109797.

Zanin, M., Palomares, F., & Brito, D. (2014). What we (don't) know about the effects of habitat loss and fragmentation on felids. *Oryx*, *49*(1), 96-106.

Zhang, Z., Li, J., Li, Y., Liu, W., Chen, Y., Zhang, Y., & Li, Y. (2021). Spatially discontinuous relationships between salt marsh invasion and mangrove forest fragmentation. *Forest Ecology and Management*, *499*, 119611.

Zhao, X., Song, Y., Xu, T., ... & Li, Z. (2021). Edge effects and spatial degradation process in highly fragmented grassland - Impact on soil microbial community. *Ecological Indicators, 132*, 108307.

Zenni, R. D., & Simberloff, D. (2013). Number of source populations as a potential driver of pine invasions in Brazil. *Biological Invasions, 15*(7), 1623-1639.

Ziller, S. R., & Galvão, F. (2002). A degradação da estepe gramíneo-lenhosa no Paraná por contaminação biológica de *Pinus elliottii* e *P. taeda*. *Revista Floresta*, *32*(1), 41-47.

Zorek, B. E., Biswas, S., Brum, F. T., Leimgruber, P., & Carlucci, M. B. (2024). How much Araucaria Mixed Forest remains? Novel perspectives on conservation status based on satellite imagery and policy review. *Biological Conservation*, *296*, 110723.

32.- Química de los materiales

Oxidación de agua mediada por un complejo de Cu^{II}

Autor: Arancibia, Maximiliano, *maximiliano.arancibia@usach.cl*
Orientador/a: Lemus, Luis, *luis.lemus@usach.cl*; Vera, Cristian, *cristian.veraoy@usach.cl*
Universidad Santiago de Chile / Facultad de Química y Biología

Resumen

El presente trabajo de investigación estudia las propiedades redox del complejo de Cu^{II} $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ en disoluciones de acetonitrilo con contenidos variables de agua, con el objetivo de comprender los factores que favorecen su reducción a Cu^{I}, $[Cu(dmp)_2]^{+}$, en ausencia de agentes reductores externos. Este fenómeno, descrito como "auto-reducción", ha sido reportado previamente en sistemas similares, aunque el mecanismo no ha sido estudiado a la fecha. Las evidencias de nuestro grupo y de otros grupos de investigación sugieren que el agua residual en los solventes podría actuar como agente reductor, lo que implica la oxidación del agua.

Los complejos polipiridínicos de Cu^{II} no poseen el potencial redox requerido para oxidar al agua. Sin embargo, estudios recientes han demostrado que en mezclas de solventes orgánicos con bajo porcentaje de agua, las moléculas de agua forman pequeños *clusters*, donde la red incompleta de enlaces puente de hidrógeno las vuelve más susceptibles a ser oxidadas.

La hipótesis de esta unidad propone que la acción sinérgica entre la geometría impuesta por los ligandos del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ (que favorece la distorsión estructural hacia un entorno más compatible con Cu^{I}), y la reactividad química del agua cuando se encuentra en forma de *clusters* dentro de mezclas con acetonitrilo, favorecen la reducción del complejo y la oxidación del agua, lo cual puede ser estudiado mediante técnicas electroquímicas.

Se prepararon los complejos $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ y $[Cu(dmp)_2]^{2+}$, y se realizaron estudios electroquímicos mediante voltametría cíclica (VC) y de onda lineal (VL) para evaluar tanto la reversibilidad del sistema Cu^{II}/Cu^{I}, así como también el comportamiento del agua en estas condiciones. Los resultados muestran una clara dependencia de los potenciales redox del complejo y del potencial de oxidación del agua respecto al contenido en la mezcla solvente.

Palabras clave: auto-reducción, Cu^{II}, clusters.

Introducción

La química de coordinación del cobre ha sido un campo de gran interés científico, debido a la dependencia que existe entre el estado de oxidación del metal, el número de coordinación, y la geometría de sus complejos (Rorabacher, 2004). En complejos de Cu^{II} el metal posee configuración electrónica d^9, y prefiere formar compuestos pentacoordinados con geometrías de pirámide base cuadrada (pbc) o bipirámide trigonal (bpt), mientras que los complejos de Cu^{I} con una configuración d^{10} prefieren entornos tetracoordinados con geometría tetraédrica (T_d), (Figura 1) (Leandri et al., 2018; Terentev et al., 1974).

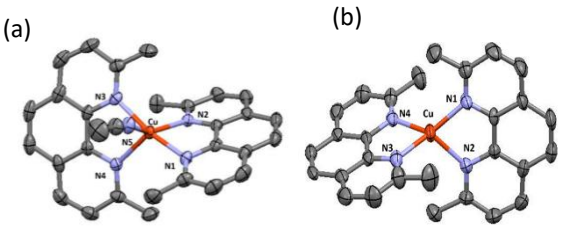


Figura 1. Ejemplos de las estructuras de complejos de Cu^{II} y Cu^{I} derivados de dmp (2,9-dimetil-1,10-fenantrolina). a) $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ con geometría bipirámide trigonal distorsionada, b) $[Cu(dmp)_2]^{+}$ con geometría tetraédrica.

En los procesos redox Cu^{II}/Cu^{I}, el entorno coordinativo del cobre experimenta un importante cambio geométrico/conformacional. Por tal razón, las propiedades de los ligandos en sistemas moleculares, o bien, de los grupos coordinantes en sistemas más complejos como enzimas de cobre, determinan las propiedades electrónicas del metal y afectan los procesos de transferencia de carga.

El cobre es el tercer metal de transición más abundante en organismos vivos, y juega un rol crucial en muchos procesos biológicos. En metaloenzimas con sitios activos de cobre, el entorno coordinativo del metal está restringido a cambios estructurales por la estructura proteica, lo cual modula los procesos catalíticos que involucran reacciones redox. Esta rigidez impuesta a los cambios conformacionales entorno al cobre, reduce la energía asociada al cambio de geometría y número de coordinación del metal, permitiendo procesos de transferencia de carga rápidos y eficientes. Ejemplos de metaloenzimas de cobre que participan en procesos redox son la familia de monooxigenasas de cobre, las cuales pueden activar dioxígeno para hidroxilar enlaces C–H en polisacáridos, provocando su transformación a moléculas pequeñas de interés energético (Koo et al., 2022)..

La relación entre la eficiencia catalítica de metaloenzimas y la rigidez estructural entorno al metal del sitio activo ha sido estudiado por décadas, desde que Vallee y Williams acuñaron el término “estado entático” para describir esta propiedad (Vallee & Williamst, 1967.).

De acuerdo con este concepto, en metaloenzimas de cobre el metal se encuentra en una geometría intermedia a las preferidas por los estados de Cu^{II} y Cu^{I}, equivalente a la del estado de transición de una reacción redox (estado energizado), lo que facilita la transferencia de electrones debido a que se alcanza una distorsión estructural de mínima energía (Figura 2) (Dicke et al., 2018). Si bien este principio se usó para explicar el alto desempeño catalítico de metaloenzimas, existe un debate por su uso en compuestos de coordinación, existiendo varios estudios que demuestran la relación entre una mínima distorsión de la geometría con una alta velocidad de trasferencia de carga (Hagen, 2019). Hoffmann y colaboradores han extendido el principio del estado entático al comportamiento fotoquímico de complejos de cobre.

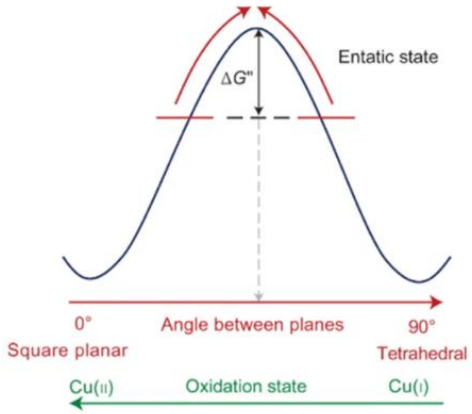


Figura 2. Ilustración del principio de estado entático. La menor energía de reorganización ligada a la transferencia electrónica ocurre cuando se tiene una geometría intermedia para Cu^{II} y Cu^{I}.

Estudios previos realizados en nuestro grupo de investigación relacionan las propiedades redox de complejos de Cu^{I} con la distorsión geométrica que imponen sus ligandos. Ligandos tetracoordinantes derivados de bases de Schiff con espaciadores alifáticos de longitud variable (N^N–$(CH_2)_n$–N^N, donde n= 3-6) permitieron demostrar que en complejos donde el CuI tiene una geometría más aplanada (similar a la de Cu^{II}), su oxidación es más favorable. De esta forma se estableció una relación lineal entre el potencial de oxidación del complejo y la distorsión geométrica en función del aumento gradual del largo de cadena (Figura 3) (Llanos et al., 2020).

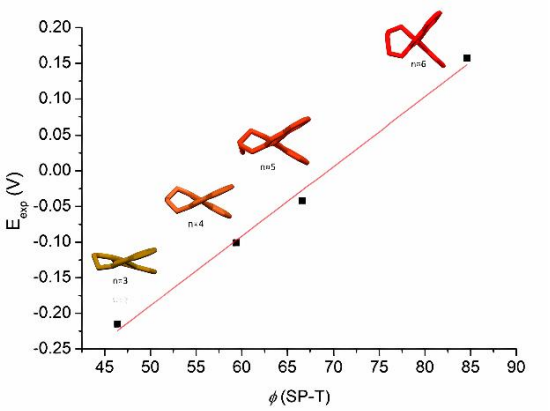


Figura 3. Potencial de oxidación Cu^{I}/Cu^{II} vs parámetro de medición de la forma φ(SP→T). La capacidad reductora es una función lineal de la distorsión geométrica mediante la adición de grupos metileno (n) en el espaciador del ligando. (SP: cuadrado planar; T: tetraédrico).

En los años 80 se utilizó el término “auto-reducción” para referirse a la reducción espontánea de complejos de Cu^{II} en

solución. Por ejemplo, soluciones de complejos del tipo $[Cu^{II}(R_2\text{-bpy})_2]^{2+}$ (bpy= 2,2'-bipiridina y R = sustituyentes en posiciones 3 y 3'), se reducen parcialmente a las especies $[Cu^{I}(R_2\text{-bpy})_2]^{+}$, y la velocidad de la reacción se incrementa en cuanto aumenta el tamaño del sustituyente R. Al contrario, el complejo sin sustituyentes R, $[Cu(bpy)_2]^{2+}$, no se "auto-reduce" y se necesita utilizar un reductor externo para que ocurra la reacción (Kitagawa et al., 1984).

Investigaciones realizadas por Itoh y colaboradores, mostraron que el complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ (Figura 1a) en disoluciones de nitrometano o carbonato de propileno experimenta la reducción espontánea a $[Cu(dmp)_2]^{+}$, evidenciado por el cambio de coloración de verde a rojo. Los autores no lograron determinar el mecanismo de "auto-reducción", pero concluyeron que la reacción dependía de la cantidad de agua residual en el solvente (Doine et al., 1989; Itoh et al., 2005; Itoh et al., 2007).

En su conjunto, estas investigaciones coinciden en que ligandos con sustituyentes que dificultan estéricamente las geometrías preferidas por Cu^{II}, y que favorecen la geometría tetraédrica, facilitarán la reducción de los complejos en solución. Sin embargo, el término "auto-reducción" parece incorrecto ya que no considera a la especie que se oxida, el reductor. En este sentido, la dependencia de esta reacción con la cantidad de agua presente en el solvente apunta al rol del agua como la especie reductora, lo que además implicaría la generación de productos de oxidación del agua como parte de la reacción.

Los estudios sobre oxidación del agua son de gran interés ya que tienen potenciales aplicaciones en áreas como energía limpia y en tecnología. Algunos de los productos de la oxidación del agua son el O_2 cuando la trasferencia de carga ocurre vía 4 electrones (Ec. 1), por otro lado, el peróxido de hidrógeno via 2 electrones (Ec. 2), pero también se pueden formar especies radicalarias como ·OH (Ec. 3), los cuales son altamente reactivas. (Mavrikis et al., 2021; Rüttinger & Dismukes,1997).

$$2H_2O \rightarrow O_2 + 4H^+ + 4e^- \quad E^\circ = +1{,}23 \text{ V vs RHE} \qquad (1)$$

$$2H_2O \rightleftharpoons H_2O_2 + 2H^+ + 2e^- \quad E^\circ = +1{,}76 \text{ V vs RHE} \qquad (2)$$

$$H_2O \rightleftharpoons \cdot OH + H^+ + e^- \quad E^\circ = +2{,}73 \text{ V vs RHE} \qquad (3)$$

Girault y colaboradores, demostraron mediante voltamperometría cíclica que se producen cambios significativos en los potenciales de oxidación del agua en soluciones con mezcla de agua con acetonitrilo (ACN). Para este estudio, utilizaron electrodos de FTO (del inglés fluorinated tin oxide) modificados con nanopartículas de IrO_2 dispersas en una matriz polimérica, variando la cantidad de agua desde un 10% hasta un 90% en acetonitrilo. Los autores observaron una disminución importante en el potencial de

oxidación de agua cuando esta se encuentran en porcentajes menores al 30%, y concluyeron que, bajo este porcentaje, las moléculas de agua se encuentran agrupadas en pequeños *clusters* rodeados por moléculas de ACN, lo cual modifica la reactividad de las moléculas de agua volviéndolas más susceptibles a ser oxidadas (Girault et al., 2016).

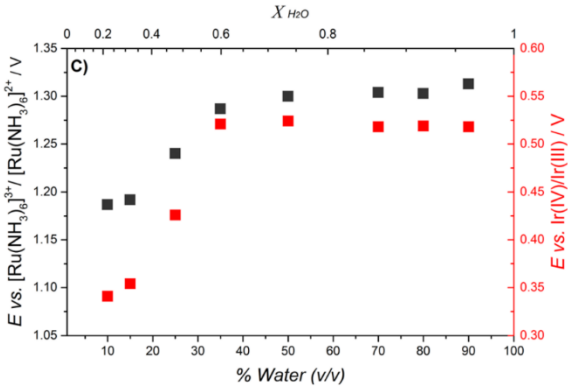


Figura 4. Potenciales de oxidación de agua en mezcla de H_2O/ACN representadas con dos diferentes escalas de potencial, cuadros negros frente a par redox $[Ru(NH_3)_6]3+/[Ru(NH_3)_6]^{2+}$; cuadrados negros frente a Ir(IV)/Ir(III)[].

En mezclas agua-acetonitrilo, las moléculas de agua se reordenan en pequeños *clusters* de forma pseudo-esférica, lo que implica la ruptura de la red de interacciones de puentes de hidrógeno de algunas moléculas de H_2O. La molécula de agua comúnmente establece cuatro puentes de hidrógeno con moléculas vecinas, dos por cada hidrógeno y 2 por cada par electrónico desapareado del oxígeno, por lo que la formación de *clusters* permite que en la superficie del aglomerado existan moléculas de agua con una menor cantidad de interacciones no covalentes, lo cual indicaría que aquellas moléculas de agua (las que no poseen estabilización mediante interacciones intermoleculares) pueden ser más reactivas,(Jamroz et al., 1993;Stehle & Braeuer, 2019).

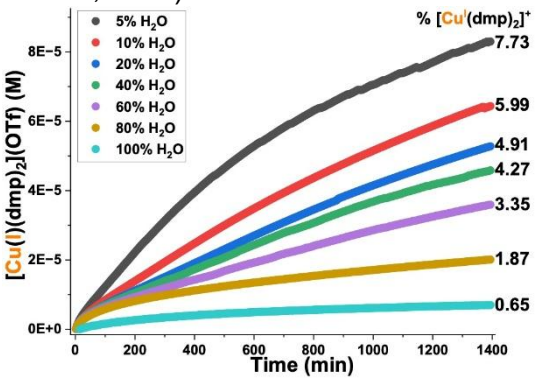


Figura 5. Formación de complejo $[Cu(dmp)_2]^+$ en mezclas H_2O/CH_3CN con diferentes % H2O a partir de $[Cu(dmp)_2(CH_3CN]^{2+}$ 1 mM a 30°C, monitoreado mediante espectroscopía UV-vis.

En nuestro grupo de investigación estamos estudiando al complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ en mezclas H_2O/CH_3CN a temperatura fija, observando que la reducción del complejo aumenta considerablemente a medida que se disminuye el porcentaje de agua en la solución, siendo el máximo de actividad de reducción en disoluciones con un 5 % de H_2O, Figura 5.

Esta Unidad de Investigación busca conocer mejor el comportamiento redox del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ en disoluciones de CH_3CN con contenido variable de agua, así como también evaluar si la formación de *clusters* de agua en acetonitrilo (en ausencia de complejo) modifica los potenciales de oxidación del agua, lo cual puede ser estudiado mediante métodos electroquímicos.

Objetivos

Objetivo General:

La acción sinérgica entre complejos de Cu^{II} cuya estructura tienda a una geometría tetraédrica más favorable para Cu^{I}, y la presencia de *clusters* de agua en mezclas agua-acetonitrilo, conduciría a la reducción del complejo y a la oxidación de una molécula de agua, lo cual puede ser evaluado mediante técnicas electroquímicas

Objetivos Específicos:

1) Determinar el potencial de oxidación del agua y del complejo en mezclas agua – acetonitrilo de contenido variable, median técnicas electroquímicas.

2) Relacionar las variaciones en los potenciales de reducción del complejo de Cu^{II} en función del contenido de agua, con las propiedades redox del agua en las mezclas de solvente.

3) Comparar el comportamiento electroquímico de Cu^{II} y Cu^{I} en acetonitrilo

Materiales y Métodos

Síntesis de complejos de Cu^{II}/ Cu^{I}

$[Cu(dmp)_2(CH_3CN)_2](ClO_4)_2$: Se disolvieron 123 mg de dmp (0,588 mol) en acetonitrilo con agitación constate. Luego, se añadió 139 mg de $Cu(ClO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (0,294 mol), y se mantuvo en agitación constate por 3 h. Posteriormente, se concentró la disolución obtenida en evaporador rotatorio, para luego llevar a cristalización mediante lenta difusión de éter dietílico. El complejo se obtuvo como cristales de color verde oscuro, con un rendimiento del 80%.

$[Cu(dmp)_2](ClO_4)$: El procedimiento anterior fue utilizado para el complejo de Cu^{I}, usando como precursor 96 g de $[Cu(CH_3CN)_4](ClO_4)$ (0,294 mmol) y 122 mg de dmp (0,588 mmol), en acetonitrilo purgado con N_2, obteniéndose un producto cristalino de color rojo con un 80% de rendimiento.

Los complejos fueron caracterizados mediante espectroscopía Uv-vis para Cu^{II}/ Cu^{I}, (Figura 6), en base a los productos cristalinos obtenidos se realizó el estudio

electroquímico posterior.

Metodología medidas electroquímicas

Las medidas electroquímicas se realizaron en un potenciostato CH Instrument 604E, utilizando una celda de tres compartimientos, un electrodo de trabajo de carbón vítreo (GC), un electrodo de referencia $Ag/AgCl_{sat}$, y un contraelectrodo de alambre de Pt. Perclorato de litio (LiClO4) 0,1 M fue usado como electrolito soporte en las diferentes mezclas de solventes. Todas las medidas fueron realizadas previa desoxigenación utilizando N_2 ultrapuro. La concentración de los complejos usada en todos los experimentos es 1 mM.

Para el estudio electroquímico se midieron los blancos (electrolito en la mezcla de solventes) mediante voltamperometría cíclica (VC) a una velocidad de barrido de 100 mV/s, en diferentes ventanas de potencial para poder determinar la ventana óptima de trabajo. Además, se midió voltamperometría de onda lineal (VL) a 5 mV/s en la ventana determinada (-0,4–1,6V), y se repitió este procedimiento para todos los porcentajes de H_2O/CH_3CN. Posteriormente se realizó el estudio del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ mediante voltamperometrías cíclicas (VC) a diferentes velocidades de barrido y voltamperometría de onda lineal (VL) en la ventana determinada, para todos los porcentajes de agua.

Resultados y Discusión

Síntesis de complejos de Cu^{II}/ Cu^{I}

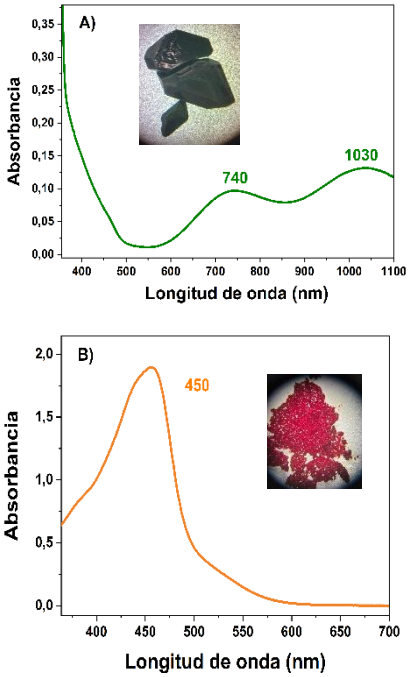


Figura 6. Espectros de absorción para los complejos sintetizados,

A) $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)](ClO_4)_2$ (verde),

B) $[Cu(dmp)_2]ClO_4$ (color naranja), medido en CH_3CN.

Como se ha mencionado, las geometrías y los números de coordinación de los complejos de cobre son determinados por el estado de oxidación del metal. Este hecho, haría pensar que los complejos de Cu^{II} y de Cu^{I}, $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ y $[Cu(dmp)_2]^{+}$ respectivamente, poseen potenciales redox muy diferentes, ya que el cambio de estado de oxidación involucra la descoordinación o coordinación del ligando CH_3CN, y el reordenamiento de los ligandos para adoptar la geometría específica. Sin embargo, y como se observa en la Figura 7, ambos complejos

tienen perfiles voltamétricos casi idénticos, y en ambos complejos el valor de ΔE de pico (E_a-E_c) es 68 mV, lo que indica una alta reversibilidad electroquímica de este par redox.

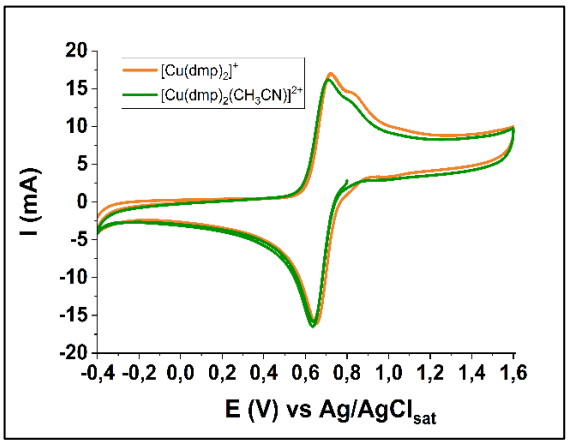


Figura 7. VC del complejo de Cu^{I} y Cu^{II} en acetonitrilo, a una velocidad de barrido de 0,1 V/s.

Este comportamiento reversible se confirma al registrar los voltamogramas del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ a diferentes velocidades de barrido (Figura 8), en una disolución de acetonitrilo conteniendo un 5% de agua, donde los valores de ΔE de pico son cercanos a 70 mV, y las relaciones de corriente de pico (I_a/I_c) son muy cercanas a 1.

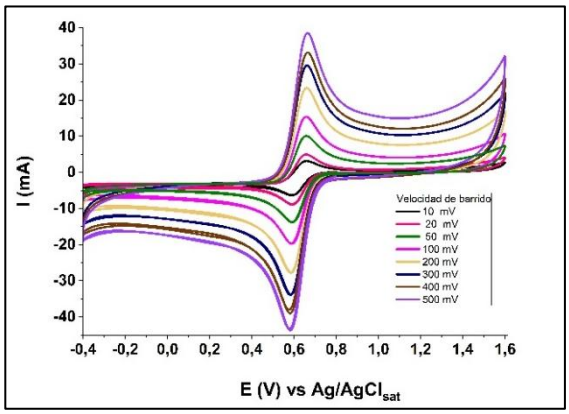


Figura 8. VC a diferentes velocidades de barrido a $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ con 5% H_2O en mezcla H_2O:CH_3CN.

Asimismo, el estudio a diferentes velocidades de barrido fue realizado al complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ en disoluciones H_2O:CH_3CN, con contenido variable de agua (0,02% – 20% H2O), observándose el mismo comportamiento reversible en la mayoría de ellos.

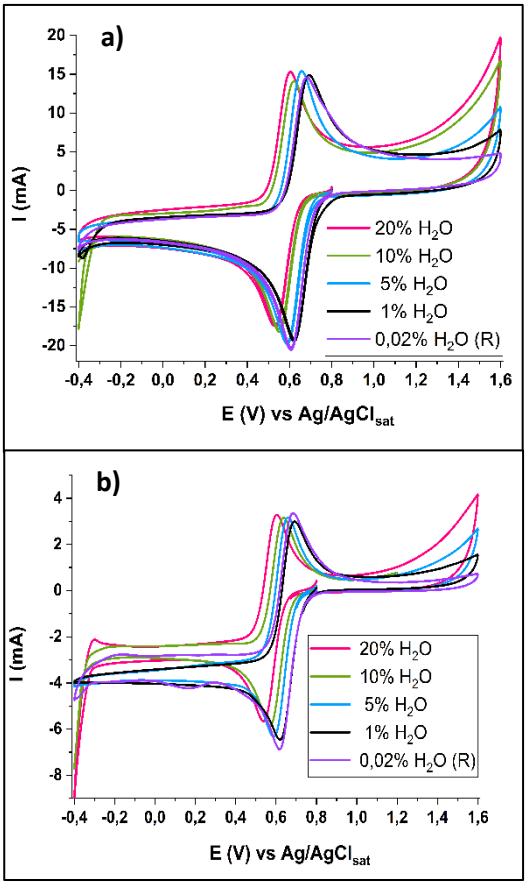


Figura 9. VC para el complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)](ClO_4)_2$, en mezclas H_2O/CH_3CN. a) Velocidad de barrido 100 mV/s. b) Velocidad de barrido 10 mV/s, R = agua residual del solvente.

La Figura 9 muestra el efecto del contenido de agua en la mezcla H_2O:CH_3CN sobre los potenciales de pico anódico y catódico del complejo de Cu^{II}, medidos a 100 mV y

10mV. Como se observa, existe una notoria disminución de los potenciales de pico a medida que aumenta el porcentaje de H_2O. Por otro lado, a ambas velocidades de barrido se aprecia el aumento de corriente a potenciales mayores a 1 V, también en función del porcentaje de agua

Esta tendencia podría ser atribuida, en principio, al cambio de potencial de unión líquida asociado a la variación del contenido de H_2O en la mezcla. Sin embargo, en base a la naturaleza de los complejos de cobre, y según lo reportado (Llanos et al., 2020), la disminución del potencial del par redox del complejo en función del aumento en el porcentaje de agua no estaría asociado a un aumento en la reactividad del complejo de Cu^{II}. Este comportamiento también podría ser explicado en base a la sustitución del CH_3CN como quinta coordinación del Cu^{II} (Figura 1a) por una molécula de H2O ($[Cu(dmp)_2\mathbf{(CH_3CN)}]^{2+}$ ↔ $[Cu(dmp)_2\mathbf{(H_2O)}]^{2+}$). Sin embargo, los resultados previos de "auto-reducción" de $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ seguidos por espectroscopía UV-vis y mostrados en la Figura 5, mostraron que la mayor actividad ocurre a un 5% de agua, lo que descarta que la disminución del potencial en función del porcentaje de H_2O estaría relacionado sólo con un cambio en el ligando que ocupa la quinta coordinación. Es importante destacar que desde el estudio previo de la reducción térmica ("auto-reducción") de $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ en mezclas H_2O:CH_3CN, seguido espectrofotométricamente mediante la formación de $[Cu(dmp)_2]^{+}$ (Figura 5), se concluyó que la reacción de reducción sigue una cinética lenta.

Por esa razón, y con el objeto de relacionar los resultados previos con el comportamiento electroquímico del complejo de Cu^{II}, se utilizó la técnica voltamperometría lineal (VL) a baja velocidades de barrido, 5 mV/s, midiendo un barrido en sentido anódico en la ventana de potencial 0,4 V – 1,6 V.

Primero, se registraron los voltamogramas lineales a la mezcla de solvente con contenido variable de agua (0 – 20%), en ausencia de complejo (blancos). Estas medidas permiten evaluar si el contenido de agua en la mezcla modifica su potencial de oxidación, tal como fue informado por Girault y colaboradores (Figura 4), donde la disminución del potencial de oxidación a medida que se disminuye el contenido de agua fue atribuido a la naturaleza reactiva de los *clusters* de agua.

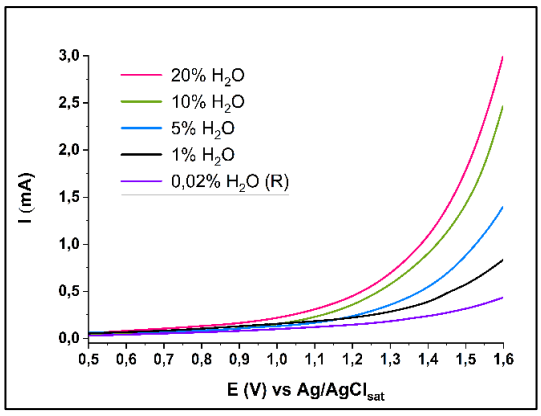


Figura 10. VL a velocidad de barrido de 5

mV/s para el proceso oxidación de H_2O, en distintos porcentajes de H_2O en mezcla de H_2O:CH_3CN. R = agua residual del solvente.

En la Figura 10, se observa el incremento de la corriente anódica asociada a la oxidación del agua a medida que aumenta su concentración en la mezcla, lo cual es esperable dada la directa relación entre esta variable y la concentración de agua.

El potencial de oxidación del agua en cada mezcla fue determinado mediante el método de las derivadas. Los valores obtenidos por este método se presentan gráficamente en la

Figura 12, donde se observa que, contrario a lo informado por Girault, en nuestro caso el potencial de oxidación del agua disminuye a medida que aumenta su contenido en la mezcla.

Para interpretar la discrepancia de nuestros resultados con los publicados por Girault, se debe considerar las diferencias en las condiciones experimentales en que se realizaron los estudios electroquímicos, siendo la más importante la naturaleza de la superficie electródica, ya que en el caso de Girault utilizaron electrodos de FTO modificados con nanopartículas de IrO2, mientras que en nuestro estudio usamos un electrodo de carbón vítreo para comparar los resultados con el comportamiento electroquímico del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$.

Posteriormente, se registraron los perfiles de VL a 5 mV/s en presencia del complejo y diferentes porcentajes de agua (Figura 10, Tabla 1), observándose variaciones en los potenciales de pie de onda para la oxidación del H_2O, tendencia similar a la observada en ausencia del complejo de Cu^{II} (Figura 11).

Además, y como se muestra en la Figura 12, los potenciales de oxidación del agua disminuyen cuando el contenido de agua es bajo (>10%) en las mezclas que contienen el complejo de Cu^{II}, en comparación a los mismos porcentajes de agua en ausencia de complejo.

Respecto a los potenciales de la cupla Cu^{II}/Cu^{I}, estos disminuyen a medida que aumenta el porcentaje de H_2O, en concordancia con lo observado mediante VC (Figura 9).

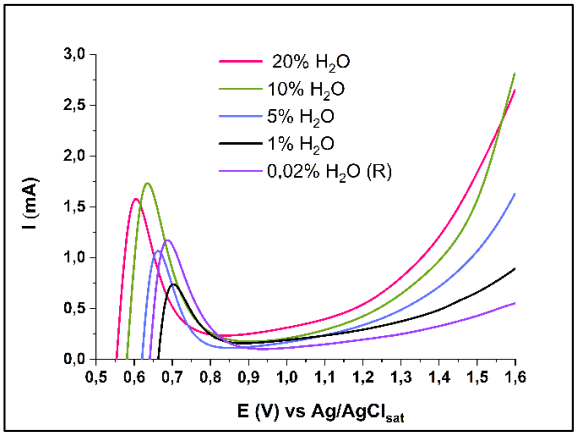


Figura 11. VL a velocidad de barrido de 5 mV/s del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ a distintos porcentajes de H_2O en mezcla de H_2O:CH_3CN.

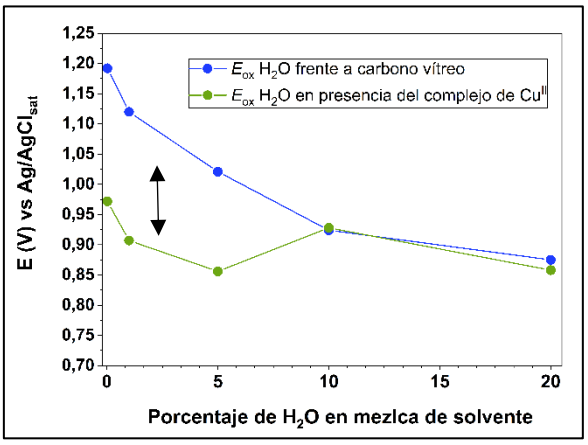


Figura 12. Potenciales de pie de onda para el proceso oxidación de H_2O, frente a carbono vítreo (azul) y en presencia del complejo de Cu^{II} (verde) en distintos porcentajes de H_2O en mezcla de H_2O:CH_3CN.

Finalmente, se escogió la mezcla de 1% de H_2O para registrar los voltamogramas del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ en una ventana de potencial mayor, -0,4 – 2,2 V, con el objetivo de favorecer la oxidación del agua en la superficie del electrodo y evaluar si los productos de la oxidación formados tienen algún impacto en el comportamiento redox del complejo.

En la Figura 13 se muestra el primer ciclo (VC verde) en sentido catódico con el perfil del proceso Cu^{II}/Cu^{I}, y luego en sentido anódico los perfiles de los procesos Cu^{I}/Cu^{II} y de la oxidación del H_2O. En el segundo ciclo en sentido catódico luego de pasar por el potencial anódico máximo de ventana, se observan dos procesos de reducción y una disminución en la corriente del pico de reducción del primer ciclo. Este nuevo pico que aparece a un mayor potencial de oxidación respecto al pico inicial (75 mV aprox.), aumenta en corriente en el tercer barrido catódico, así como también se aprecia un ligero cambio en el pico de oxidación cercano a los 90 mV, lo cual indica que ambos picos podrían estar relacionados.

Si la presencia de este nuevo proceso redox está asociado a la formación de una nueva especie fenantrolínica de cobre cuando el potencial aplicado alcanza los 2,2 V, una explicación probable es que los productos de oxidación del agua puedan reaccionar con el metal o con los ligandos de forma irreversible. Por ejemplo, la formación de H_2O_2 como producto de oxidación electroquímica del agua podría inducir reacciones con los complejos de Cu^{I} y Cu^{II}, lo que generaría especies altamente reactivas como el radical hidroxilo, el cual tiene la capacidad de reaccionar con los ligandos fenantrolínicos, modificando la estructura de los complejos, ó podría estar dando indicios de una especie intermediara de reacción.

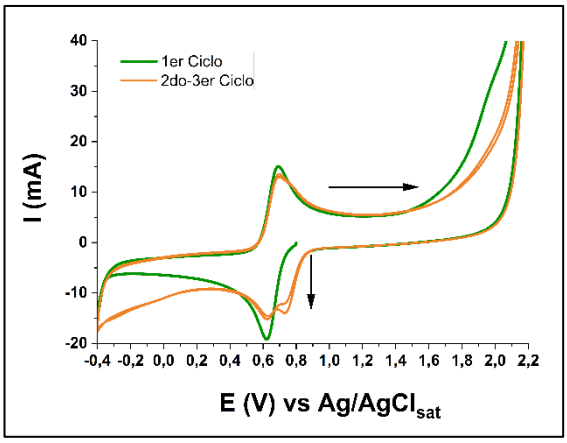


Figura 13. VC del complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ con un 1% de H_2O.

Primer ciclo en verde, y segundo y tercer ciclos en naranja, a una velocidad de barrido de 0,1 V/s.

Esta es una posibilidad que debe ser estudiada a mayor profundidad, por ejemplo, electrolizando a 2,2 V al complejo en mezclas H_2O:CH_3CN durante tiempo largos para obtener cantidades suficientes de la nueva especie formada, lo que podría permitir aislarla para su caracterización.

Así también, se debe investigar a mayor profundidad otros resultados obtenidos en esta unidad, como, por ejemplo, la relación inversa entre el contenido de agua en la mezcla y su potencial de oxidación. Estos resultados que contradicen a lo publicado por Girault y colaboradores, y que también están en contradicción con la mayor reactividad redox esperada para *clusters* de agua en mezclas agua:solvente, deben ser revisados en términos de las condiciones experimentales usadas, naturaleza del electrodo de trabajo, entre otras variables.

Conclusiones

En esta Unidad de Investigación se prepararon dos complejos de cobre, $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]^{2+}$ y $[Cu(dmp)_2]^{+}$, los cuales corresponden a la forma oxidada y reducida, respectivamente, presentando diferencias estructurales importantes, como número de coordinación y geometría entorno al metal.

Los estudios electroquímicos realizados en esta unidad evidencian que ambos complejos presentan un comportamiento altamente reversible, con valores de separación de los picos anódicos y catódicos $\Delta E \approx 70$ mV. Este comportamiento reversible se mantiene para todas las mezclas de H_2O:CH_3CN evaluadas (0,02% – 20%), lo que sugiere que la reacción redox Cu^{II}/Cu^{I} en solución presenta el mismo comportamiento redox sin importar desde que precursor se realice la medida.

Además, se observó que los potenciales del par redox del complejo disminuyen a medida que aumenta el porcentaje de agua. Una posible causa de este comportamiento es el potencial de unión líquida en el electrodo de referencia usado ($Ag/AgCl_{sat}$ separado de la solución con un alambre de platino, *lugin*). Este comportamiento debe ser estudiado en mayor profundidad, así como el hecho de que el potencial de oxidación del agua es menor en presencia del complejo en mezclas con contenido de agua menor al 10%. Así también, los resultados de VL sobre los potenciales de oxidación del agua frente a carbono vítreo muestran una tendencia que se contrasta con lo reportado por Girault y su equipo. Considerando las diferencias en la naturaleza del electrodo de trabajo utilizado, sería interesante evaluar a futuro distintos tipos de electrodos para indicar si

el fenómeno descrito por Girault es replicable, lo cual sería de utilidad para la detección de clusters de agua y conocer su reactividad.

Por otro lado, los experimentos realizados para el complejo $[Cu(dmp)_2(CH_3CN)]_{2+}$ hasta 2,2 V sugieren la formación de una nueva especie de cobre, debido al alto sobrepotencial aplicado. Esta especie que se detecta como nuevos picos a mayor potencial redox en VC, puede tener su origen en la reacción del complejo con los productos de oxidación del agua (H_2O_2 o ·OH), y podría ser estudiada a futuro mediante otras técnicas, tanto electroquímicas, espectroscópicas o ambas acopladas (espectro-electroquímica, por ejemplo).

Referencias Bibliográficas

Rorabacher DB. Electron Transfer by Copper Centers. *Chem Rev*. 2004;104(2):651-697. doi:10.1021/cr020630e.

Terentev P, Rukhadze EG, Onuchina AG, et al. *Propeties of Pseudotetrahedral Copper(II)*. Vol 15. Springer-Verlag; 1974.

Leandri V, Daniel Q, Chen H, Sun L, Gardner JM, Kloo L. Electronic and Structural Effects of Inner Sphere Coordination of Chloride to a Homoleptic Copper(II) Diimine Complex. *Inorg Chem*. 2018;57(8):4556-4562. doi:10.1021/acs.inorgchem.8b00225.

Koo CW, Tucci FJ, He Y, Rosenzweig AC. Recovery of Particulate Methane Monooxygenase Structure and Activity in a Lipid Bilayer.

Vallee BL, Williamst rjp. *metalloenzymes: the entatic nature of their active sites*.

Dicke B, Hoffmann A, Stanek J, et al. Transferring the entatic-state principle to copper photochemistry. *Nat Chem*. 2018;10(3):355-362. doi:10.1038/nchem.2916.

Hagen WR. Hypothesis: entatic versus ecstatic states in metalloproteins. *Metallomics*. 2019;11(11):1768-1778. doi:10.1039/c9mt00208a.

Llanos L, Vera C, Vega A, Aravena D, Lemus L. Reactivity of $Cu^{I}N_4$Flattened Complexes: Interplay between Coordination Geometry and Ligand Flexibility. *Inorg Chem*. 2020;59(20):15061-15073. doi:10.1021/acs.inorgchem.0c02037.

Kitagawa S, Munakata M, Higashie A. *Autoreduction of Copper(I) Complexes of 6,6'-Dialkyl-2,2'-Bipyridine and Characterization of Their Copper(I) Complexes*. Vol 84.; 1984.

Itoh S, Kishikawa N, Suzuki T, Takagi HD. Syntheses, structural analyses and redox kinetics of four-coordinate [CuL2]2+ and five-coordinate $[CuL2(solvent)]^{2+}$ complexes (L = 6,6′-dimethyl-2,2′-bipyridine or2,9- dimethyl-l,10-phenanthroline): Completely gated reduction reaction of $[Cu(dmp)_2]^{2+}$ in nitromethane. *Dalton Transactions*. 2005;(6):1066-1078. doi:10.1039/b415057k.

Itoh S, Noda K, Yamane R, Kishikawa N, Takagi HD. First investigation at elevated pressures to confirm the exact nature of the gated electron-transfer systems: Volume profiles of the gated reduction reaction and nongated reverse oxidation reaction involving a $[Cu(dmp)_2(solvent)]^{2+}/[Cu(dmp)_2]^{+}$ couple (dmp = 2,9-Dimethyl-1,10-phenanthroline). *Inorg Chem*. 2007;46(4):1419-1425. doi:10.1021/ic061591i.

Doine H, Yano Y, Swaddle TW. *Kinetics of the Bis(2,9-Dimethyl-1,LO-Phenanthroline) Copper(I/II) Self-Exchange Reaction in Solution*. Vol 28.; 1989.

Mavrikis S, Perry SC, Leung PK, Wang L, Ponce De León C. Recent Advances in Electrochemical Water Oxidation to Produce Hydrogen Peroxide: A Mechanistic Perspective. *ACS Sustain Chem Eng*. 2021;9(1):76-91. doi:10.1021/acssuschemeng.0c07263.

Rüttinger W, Dismukes GC. *Synthetic Water-Oxidation Catalysts for Artificial Photosynthetic Water Oxidation*.

Hidalgo-Acosta JC, Scanlon MD, Méndez MA, Peljo P, Opallo M, Girault HH. Enhanced Reactivity of Water Clusters towards Oxidation in Water/Acetonitrile Mixtures. *ChemElectroChem*. 2016;3(12):2003-2007. doi:10.1002/celc.201600190.

Stehle S, Braeuer AS. Hydrogen Bond Networks in Binary Mixtures of Water and Organic Solvents. *Journal of Physical Chemistry B*. 2019;123(20):4425-4433. doi:10.1021/acs.jpcb.9b02829.

Jamroz D, Stangret J, Lindgren' J. *An Infrared Spectroscopic Study of the Preferential Solvation in Water-Acetonitrile Mixtures*. Vol 115.; 1993.

27.- Ciencia, tecnología e innovación

Destilador solar activo apoyado por membrana de óxido de grafeno

Autor: Varela, Gustavo, gustavo.varela@usach.cl
Co-autor(es): Sepulveda, Brahyan; Tosso, Sofía; Valdés, Hugo, hvaldes@ucm.cl
Orientador/a: Saavedra, Aldo, aldo.saavedra@usach.cl
Universidad Católica del Maule/ Facultad de Ciencias de la Ingeniería
Universidad de Santiago de Chile/ Facultad de Ingeniería

Resumen

En este trabajo se presenta el desarrollo de un destilador solar impreso en 3D, diseñado para desalinizar salmuera, simulando el agua de mar, utilizando membranas de óxido de grafeno (GOM), para mejorar el rendimiento. La investigación se estructuró en cuatro etapas: diseño CAD, simulación fluidodinámica en ANSYS Fluent, fabricación aditiva y pruebas experimentales. Se compararon dos configuraciones geométricas del canal interno, una rectilínea y otra con curvaturas, evaluando su comportamiento mediante el modelo de turbulencia k–ω. Los resultados mostraron diferencias menores en la distribución del flujo, aunque se evidenció una mejora en zonas de transición con el diseño curvado. Posteriormente, se construyó un prototipo funcional y se realizaron ensayos bajo irradiación solar natural (≈748 W/m²). Se obtuvo una producción de destilado de 33% superior al operar con membrana de óxido de grafeno versus una destilación con el mismo módulo, pero sin membrana de óxido de grafeno, lo que demuestra su efecto positivo sobre la eficiencia del proceso. El trabajo concluye que es necesario optimizar la geometría del módulo para mejorar la hidrodinámica interna y aumentar la tasa de evaporación. Además, se destaca el potencial de la impresión 3D para acelerar la innovación en tecnologías de desalinización sostenibles, reduciendo tiempos y costos de desarrollo.

Palabras claves: desalinización solar, procesos de membrana, impresión 3D.

Introducción

La desalinización solar es una solución prometedora para las ciudades afectadas por la sequía, donde el acceso a fuentes de agua dulce es limitado. Este proceso utiliza energía solar para evaporar el agua de mar y posteriormente condensar el vapor, separando así las sales y otros contaminantes (Arunkumar et al. (2022); Sharon & Reddy (2015); Kalogirou (2005)). Las tecnologías de desalinización solar, como los destiladores solares y los sistemas de membranas impulsados por energía solar, ofrecen una alternativa sostenible y ecológica a los métodos tradicionales, que suelen ser intensivos en energía y costosos (Ahmed et al. (2019); Gude et al. (2011)). La implementación de estas tecnologías en áreas urbanas con escasez hídrica puede proporcionar un suministro constante de agua potable, aliviando la presión sobre las reservas de agua dulce y contribuyendo a la resiliencia hídrica de las comunidades (Esmaeilion et al. (2021); Gorjian & Ghobadian (2015)). Además, al aprovechar una fuente de energía abundante y renovable como el sol, la desalinización solar reduce la dependencia de combustibles fósiles, disminuye las emisiones de gases de efecto invernadero y promueve la transición hacia una economía verde y sostenible (Ayaz et al. (2020); Chamsa-ard et al. (2020)).

La desalinización solar con membranas es una tecnología innovadora y sostenible que utiliza la energía solar para desalinizar agua de mar, haciendo uso de membranas semipermeables (Shalaby et al. (2022); Ma et al. (2021)). Este proceso combina la energía limpia y abundante del sol con la eficiencia de las membranas en la separación de sal y otros contaminantes del agua. La radiación solar se emplea para calentar el agua, generando vapor que atraviesa las membranas, mientras que las sales y otras impurezas quedan retenidas. Este método no solo es energéticamente eficiente, sino que también reduce la huella de carbono, ofreciendo una solución viable para obtener agua potable en regiones con escasez de recursos hídricos y alta disponibilidad de luz solar (Lotfy et al. (2022); Ali et al. (2018)).

Objetivos

El objetivo de esta investigación es desarrollar un módulo de desalinización solar impreso en 3D, diseñado para la incorporación de GOM y utilizando energía solar como fuente térmica de energía.

Materiales y Métodos

El presente trabajo fue desarrollado en cuatro etapas metodológicas sucesivas: Diseño (E1), Simulación (E2), Fabricación (E3) y Experimentación (E4), tal como se expone en la figura 1.

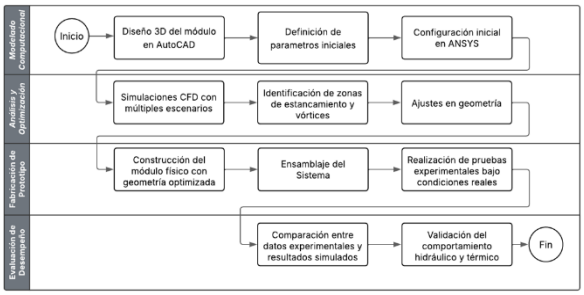


Figura 1. Secuencia metodológica aplicada en el desarrollo del sistema de desalinización.

En la etapa E1, se desarrolló el diseño tridimensional del módulo de desalinización utilizando el software AutoCAD, determinando tanto las dimensiones externas como la disposición de los componentes internos necesarios para su funcionamiento.

El modelo incluye una geometría rectangular de 12,5 cm × 12,5 cm × 6,0 cm, con conexiones hidráulicas ubicadas en extremos opuestos para permitir la entrada y salida del fluido. Durante esta fase se establecieron las condiciones geométricas iniciales que orientarían las simulaciones numéricas y el diseño del sistema de evaporación-condensación. Asimismo, se definieron aspectos estructurales para su futura fabricación mediante impresión 3D. La figura 2 presenta el modelo resultante del diseño.

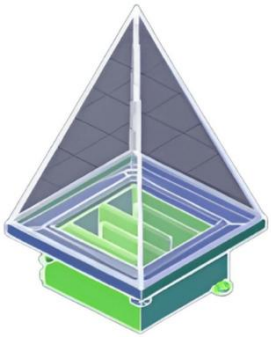


Figura 2. Representación esquemática del módulo solar de desalinización y sus componentes funcionales.

Durante la etapa E2, se procedió a definir el dominio del fluido para el módulo y a establecer las condiciones de contorno correspondientes en el software ANSYS Fluent (v2022). La Figura 3 y 4 presentan dos configuraciones del dominio de fluido consideradas, diseño geométrico inicial con trayectorias rectilíneas, y diseño modificado con curvaturas, orientadas a mejorar la dinámica del flujo, reducir zonas muertas y mejorar la distribución del campo de velocidades.



Figura 3. Dominios bidimensionales mallados del canal de flujo: diseño inicial rectilíneo.



Figura 4. Dominios bidimensionales mallados del canal de flujo: diseño mejorado con curvaturas.

Ambos dominios fueron discretizados mediante una malla 2D conformada por elementos cuadriláteros distribuidos de forma uniforme a lo largo del canal de flujo. Las métricas de calidad obtenidas fueron: element quality = 0,97, aspect ratio = 1,0, skewness = 0,01 y orthogonal quality = 0,99, valores que se encuentran dentro de los rangos recomendados para garantizar la estabilidad numérica y la precisión en la resolución del modelo de turbulencia k–ω a una velocidad de entrada de 0,02 m/s.

En la etapa E3, se fabricó físicamente el módulo mediante impresión 3D con una impresora Artillery Sidewinder X1 SW-X1, utilizando filamento PETG negro de 1,75 mm. Se incorporó una base de foam (espuma rígida de poliuretano) para aislamiento térmico. El sistema fue ensamblado incluyendo conexiones hidráulicas, la membrana de óxido de grafeno (GOM) y el captador de agua destilada

Finalmente, en la etapa E4, se realizaron ensayos experimentales bajo exposición solar directa. Se circuló una solución de NaCl a 35000 ppm a través del módulo durante 4 horas. Se cuantificó la cantidad de agua recolectada en configuraciones con y sin membrana GOM, comparando los volúmenes obtenidos y evaluando el impacto del material sobre el rendimiento del sistema.

Resultados y Discusión

A partir del diseño geométrico original, se realizaron simulaciones con una velocidad de entrada de 0,02 m/s, con el objetivo de caracterizar el patrón de flujo interno. Se analizaron regiones donde podrían generarse zonas muertas o acumulación de sal, especialmente en sectores con cambios bruscos de dirección del canal. Los resultados de esta simulación se presentan en la figura 5 y 6, donde se observa en la primera, la distribución de líneas de corriente, destacando trayectorias que tienden hacia la parte superior del canal. En la siguiente, el campo escalar de velocidad evidencia intensidades elevadas al ingreso del flujo y en las zonas de inflexión geométrica, lo que sugiere la necesidad de realizar ajustes

estructurales para mejorar la eficiencia hidráulica del sistema.

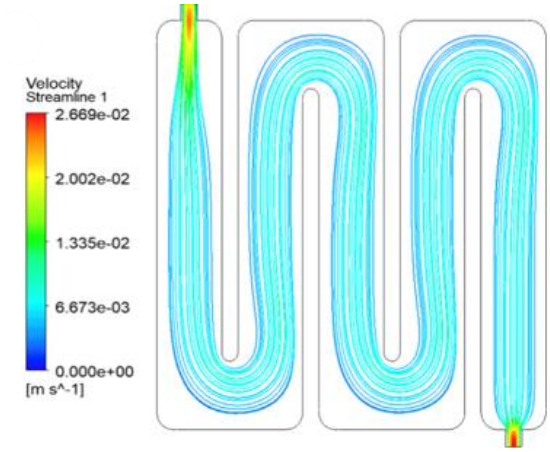


Figura 5. Resultados de simulación del diseño original del módulo: distribución de líneas de corriente

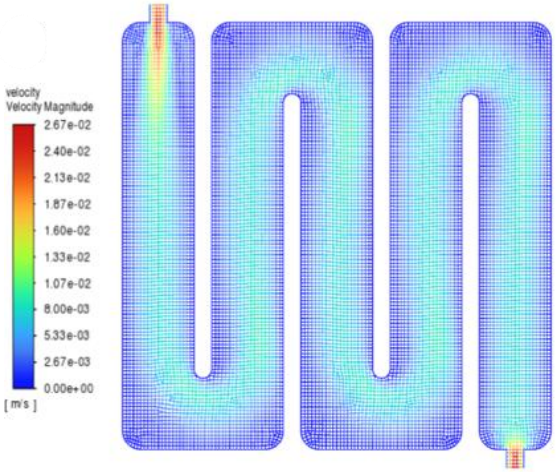


Figura 6. Resultados de simulación del diseño original del módulo: campo escalar de velocidad sobre el dominio mallado.

La figura 7 y 8 muestran las velocidades obtenidas para la geometría modificada, también representados mediante líneas de corriente y campo escalar de velocidad, respectivamente. Si bien se observa una leve mejora en la distribución del flujo, especialmente en las zonas de curvatura, los resultados globales no presentan diferencias sustanciales respecto al diseño base. En consecuencia, se propone avanzar hacia una optimización geométrica adaptativa, basada en las trayectorias reales del fluido observadas en las simulaciones, ajustando la morfología interna del canal para minimizar zonas muertas y prevenir la acumulación de sal durante periodos prolongados de operación.

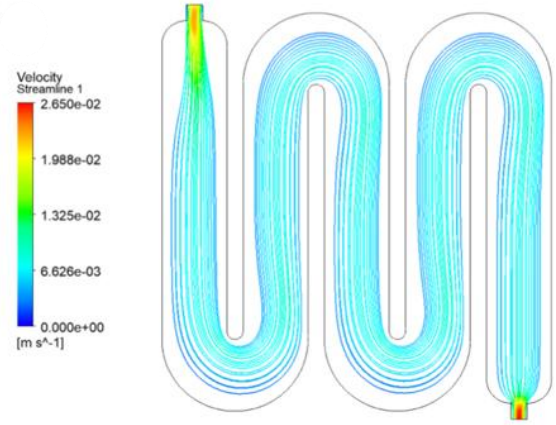


Figura 7. Resultados de simulación del diseño modificado con curvaturas internas: distribución de líneas de corriente.

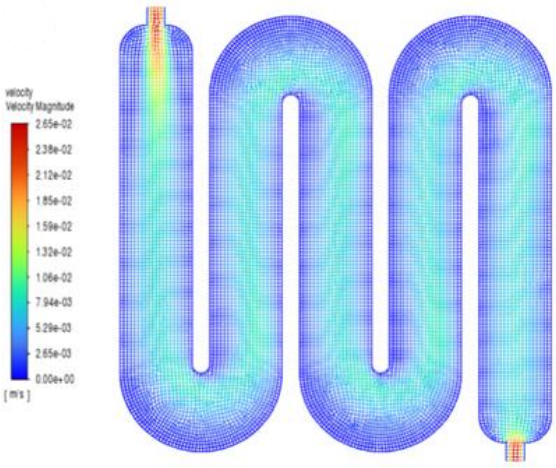


Figura 8. Resultados de simulación del diseño modificado con curvaturas internas: campo escalar de velocidad sobre el dominio mallado.

Se llevaron a cabo pruebas experimentales preliminares para verificar el comportamiento fluidodinámico observado en las simulaciones, cuyo esquema se muestra en la figura 9. El sistema fue operado durante 4 h con una solución salina expuesta a radiación solar natural, alcanzando una irradiancia de ≈748 W/m². En estas condiciones se obtuvo un flux de 0,12 L/h·m². Se estima que este rendimiento puede mejorarse incorporando curvaturas en las zonas de cambio de dirección y reduciendo la altura del canal al mínimo posible.

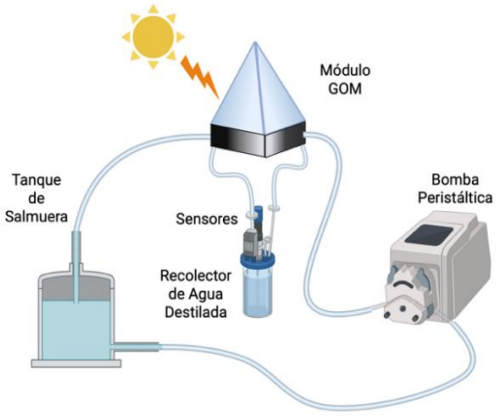


Figura 9. Esquema del prototipo experimental construido para la evaluación de producción de agua purificada bajo irradiación solar.

Posteriormente, se repitió el experimento utilizando una membrana de óxido de grafeno sobre la salmuera, bajo condiciones similares de irradiancia (≈748 W/m²), obteniéndose un flux correspondiente a 0,16 L/h·m². Estos resultados evidencian el efecto beneficioso del grafeno en el proceso, atribuido a su alta capacidad de absorción térmica y transferencia de calor hacia la solución salina. Además, se observó que el “foam” permitió el ascenso capilar de la solución hasta la membrana de óxido de grafeno.

Conclusiones

La desalinización solar propuesta fue posible utilizando un módulo de membrana elaborado en una impresora 3D. El diseño debe ajustarse para evitar la generación de vórtices y la circulación del fluido en todo el alto del canal. Estos cambios repercutirán en una mayor evaporación de agua, ya que mejoraría la hidrodinámica del proceso. Lo logrado en el experimento está muy por debajo de las cantidades de agua extraída en otros procesos de desalinización, por lo que nos proyectamos realizando los cambios sugeridos por las simulaciones, y experimentar a diferentes condiciones de operación. Cabe destacar que pese a obtener una baja evaporación, se evidenció un efecto positivo en el proceso al utilizar una membrana de óxido de grafeno

Referencias Bibliográficas

Ahmed, F. E., Hashaikeh, R., & Hilal, N. (2019). Solar powered desalination – Technology, energy and future outlook. *Desalination, 453*, 54–76. doi:10.1016/j.desal.2018.12.002

Ali, A., Tufa, R. A., Macedonio, F., Curcio, E., & Drioli, E. (2018). Membrane technology in renewable-energy-driven desalination. *Renewable and Sustainable Energy Reviews, 81*, 1–21. doi:10.1016/j.rser.2017.07.047

Arunkumar, T., Sathyamurthy, R., Denkenberger, D., & Lee, S. J. (2022). Solar distillation meets the real world: A review of solar stills purifying real wastewater and seawater. *Environmental Science and Pollution Research, 29*(16), 22860–22884. doi:10.1007/s11356-022-18720-2

Ayaz, A., Ahmad, F., Saher, S., & Noman, M. (2020). Solar thermal opportunities and challenges in Pakistan. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 899*(1), 012008. doi:10.1088/1757-899X/899/1/012008

Chamsa-ard, W., Fawcett, D., Fung, C. C., & Poinern, G. (2020). Solar thermal energy stills for desalination: A review of designs, operational parameters and material advances. *Journal of Energy and Power Technology, 2*(4). doi:10.21926/jept.2004018

Esmaeilion, F., Ahmadi, A., Hoseinzadeh, S., Aliehyaei, M., Makkeh, S. A., & Astiaso Garcia, D. (2021). Renewable energy desalination; a sustainable approach for water scarcity in arid lands. *International Journal of Sustainable Engineering, 14*(6), 1916–1942. doi:10.1080/19397038.2021.1948143

Gorjian, S., & Ghobadian, B. (2015). Solar desalination: A sustainable solution to water crisis in Iran. *Renewable and Sustainable Energy Reviews, 49*, 1323. doi:10.1016/j.rser.2015.04.009

Gude, V. G., Nirmalakhandan, N., & Deng, S. (2011). Desalination using solar energy: Towards sustainability. *Energy, 36*(1), 78–85. doi:10.1016/j.energy.2010.11.008

Kalogirou, S. A. (2005). Seawater desalination using renewable energy sources. *Progress in Energy and Combustion Science, 31*(3), 242–281. doi:10.1016/j.pecs.2005.03.001

Khan, S. B., Irfan, S., Lam, S. S., Sun, X., & Chen, S. (2022). 3D printed nanofiltration membrane technology for waste water

distillation. *Journal of Water Process Engineering, 49*, 102958. doi:10.1016/j.jwpe.2022.102958

Lee, J. Y., Tan, W. S., An, J., Chua, C. K., Tang, C. Y., Fane, A. G., & Chong, T. H. (2016). The potential to enhance membrane module design with 3D printing technology. *Journal of Membrane Science, 499*, 480–490. doi:10.1016/j.memsci.2015.11.008

Lotfy, H. R., Staš, J., & Roubík, H. (2022). Renewable energy powered membrane desalination — Review of recent development. *Environmental Science and Pollution Research, 29*(31), 46552–46568. doi:10.1007/s11356-022-20480-y

Ma, Q., Xu, Z., & Wang, R. (2021). Distributed solar desalination by membrane distillation: Current status and future perspectives. *Water Research, 198*, 117154. doi:10.1016/j.watres.2021.117154

Shalaby, S. M., Kabeel, A. E., Abosheiasha, H. F., Elfakharany, M. K., El-Bialy, E., Shama, A., & Vidic, R. D. (2022). Membrane distillation driven by solar energy: A review. *Journal of Cleaner Production, 366*, 132949. doi:10.1016/j.jclepro.2022.132949

Sharon, H., & Reddy, K. S. (2015). A review of solar energy driven desalination technologies. *Renewable and Sustainable Energy Reviews, 41*, 1080–1118. doi:10.1016/j.rser.2014.09.002

Siddiqui, F. R., Elminshawy, N. A. S., & Addas, M. F. (2016). Design and performance improvement of a solar desalination system by using solar air heater: Experimental and theoretical approach. *Desalination, 399*, 78–87. doi:10.1016/j.desal.2016.08.015

Soo, A., Ali, S. M., & Shon, H. K. (2021). 3D printing for membrane desalination: Challenges and future prospects. *Desalination, 520*, 115366. doi:10.1016/j.desal.2021.115366

Tijing, L. D., Dizon, J. R. C., Ibrahim, I., Nisay, A. R. N., Shon, H. K., & Advincula, R. C. (2020). 3D printing for membrane separation, desalination and water treatment. *Applied Materials Today, 18*, 100486. doi:10.1016/j.apmt.2019.100486

26.- Ciencias e ingeniería de materiales

Estudio estructural, morfológico y eléctrico de la familia de $Na_2Zn_2TeO_6$ dopada en un amplio rango de temperaturas.

Autor: Salgado, Rocío Celeste; E. mail: rocio.salgado1997@gmail.com
Co-autores: Frechero, Marisa A., frechero@uns.edu.ar; Terny, Cintia S., soledad.terny@uns.edu.ar
Universidad Nacional del Sur- Departamento de Química

Resumen

Actualmente, los conductores sólidos de sodio se estudian intensamente para desarrollar dispositivos de almacenamiento de energía electroquímica que impulsen el desarrollo de baterías de iones de sodio. El $Na_2Zn_2TeO_6$ (NZTO) se ha consolidado como un conductor de iones de sodio bidimensional con excelente rendimiento a baja temperatura. En este trabajo, se sintetizaron cuatro cerámicos de tipo NZTO dopados mediante reacción en estado sólido. Los cationes metálicos incorporados fueron: Ba^{2+}, Nb^{5+}, Mo^{6+} y W^{6+}. Sus estructuras se caracterizaron mediante difracción de rayos X (DRX) en función de la temperatura, y se aplicó el refinamiento de Rietveld y Le- Bail. También, la estabilidad térmica fue estudiada por la técnica de calorimetría diferencial de barrido (DSC, por sus siglas en inglés) entre − 40 °C a 400 °C. La microscopia electrónica de barrido (MEB), espectroscopía de rayos X de dispersión de energía (EDS) y medición de densidad complementan la información sobre características estructurales. La conductividad eléctrica, estudiada por espectroscopia de impedancia (IS) y polarización DC (corriente directa), confirmó que es posible minimizar la conductividad electrónica inherente y demostrar que el mejor desempeño del material, como un conductor de sodio puro, es logrado a baja temperatura. Además, esta técnica confirmó que la presencia de una transición reversible de orden/desorden de iones sodio/vacancias en la estructura tiene un efecto importante sobre la conductividad total. Adicionalmente, se analizó cómo minimizar la pérdida de sodio durante el proceso de sinterización para disminuir la formación de una fase secundaria no conductora.

Palabras clave: electrolito, sodio, dopado.

Introducción

Actualmente, la acumulación electroquímica de energía es posible en muchas aplicaciones como el uso de medios de transporte eléctricos, la asistencia domiciliaria y la utilización de innumerables dispositivos portátiles [1,2]. Además, existen centros de suministro a gran escala para pequeñas ciudades e industrias [3,4]. Dichas aplicaciones dan lugar a nuevos desafíos tecnológicos: condiciones de utilización muy variadas, costos de fabricación, la posibilidad de tener dispositivos que puedan reutilizarse en el contexto de la economía circular, la implementación de materiales con bajo impacto ambiental en el contexto de la química verde, pero fundamentalmente, la posibilidad de desarrollar dispositivos a escala global para una humanidad cada vez más exigente y dependiente de la energía [5–7]. Los materiales conductores de iones de sodio que se conocen desde hace décadas volvieron a cobrar relevancia para satisfacer dicha demanda tecnológica. Puede que no necesariamente reemplacen a los protagonistas actuales, los materiales de litio, pero pueden cubrir otras demandas que la tecnología del litio no puede por diversas razones [8–11].

Los conductores iónicos de sodio sólido conocidos como $Na_2Zn_2TeO_6$ (NZTO) son uno de los materiales más atractivos debido a los valores de conductividad iónica alcanzados, superiores a 10^{-4} $S.cm^{-1}$ a temperatura ambiente y la buena estabilidad electroquímica [5–11]. Si bien el costo del óxido de telurio podría ser una desventaja, este material requiere una temperatura más baja para su síntesis en comparación con otros óxidos conductores de sodio conocidos [12–19]. Una de las desventajas tecnológicas del NZTO es la tendencia a la volatilización que presentan algunos de sus componentes debido a la implementación de una temperatura de síntesis elevada. Por lo tanto, es necesario agregar un exceso de reactivo de sodio durante la producción para garantizar el balance final de sodio y minimizar la formación no deseada de fases secundarias [2]. Además, en la literatura es posible encontrar muchos estudios sobre cómo determinar el contenido adecuado de exceso de sodio y el procedimiento para disminuir las fases secundarias aplicando un “polvo de sacrificio” durante la sinterización; sin embargo, dicho polvo no se puede reutilizar y provoca un impacto directo en el costo del material [2,20,21]. También se sabe que en el NZTO los iones sodio se encuentran entre capas en su estructura, y en tres posiciones distintas, que están parcialmente ocupadas permitiendo su migración, sin embargo, no son completamente libres de moverse al mismo tiempo [22].

Objetivos

En el presente trabajo se estudia el efecto de la incorporación de un conjunto de cationes de óxidos metálicos con diferente carga y tamaño para comprender cómo se modifica la conductividad eléctrica del NZTO debido a los cambios inducidos en su estructura.

Aún no se ha determinado cuál es la mejor modificación estructural para aumentar la conductividad del ion sodio en el NZTO. Sin embargo, se han realizado numerosos trabajos sobre NZTO dopado y materiales híbridos que lo contienen [3,10,13,20,23-27].

El objetivo de este trabajo es la incorporación de los iones Ba^{2+}, Nb^{5+}, Mo^{6+} y W^{6+} a la estructura del NZTO para explorar cómo se ve afectada la movilidad del catión sodio a través de la medida de la conductividad ionica de los materiales sintetizados. Además, se analizará cómo minimizar la pérdida de sodio durante el proceso de sinterización y cómo evitar la formación de una fase secundaria no conductora cuando se utiliza la reacción tradicional en estado sólido como proceso de síntesis.

Materiales y Métodos

Las muestras de NZTO y sus dopados se prepararon mediante un método convencional de reacción en estado sólido, utilizando como reactivos de partida Na_2CO_3, ZnO, $BaCO_3$, Nb_2O_5, WO_3, MoO_3 y TeO_2 de grado analítico, con un exceso del 3 % de Na_2CO_3 para compensar la volatilización de sodio a altas temperaturas [2] y disminuir la formación de fases secundarias, al menos aquellas detectables por difracción de rayos X (DRX). Para alcanzar este objetivo, se estableció una velocidad de calentamiento eficiente, como se muestra a continuación en la sección de resultados.

Los reactivos de partida se mezclaron manualmente en un mortero de ágata y, seguidamente, la mezcla en polvo se trató a 400 °C para eliminar el gas mediante la descomposición del carbonato. A continuación, el sólido resultante se enfrió a temperatura ambiente y se molió manualmente en el mortero de ágata. Se realizó un segundo tratamiento térmico a 850 °C durante 12 h en atmósfera normal para asegurar la oxidación completa de Te^{4+}. Después de dicho proceso de oxidación, el material sólido obtenido se enfrió a temperatura ambiente y se volvió a moler en el mortero de ágata. El polvo resultante se prensó en pellets cilíndricos (7 mm de diámetro y 2 mm de espesor aproximadamente) y se sinterizó a 800 °C durante 12 h en atmósfera normal aplicando una velocidad de calentamiento de 5 $^{\circ}C.min^{-1}$. Cada pellet fue cubierto con una capa de su polvo para minimizar la pérdida de Na por volatilización. El

esquema de síntesis completo se presenta en la *Fig. 1.*

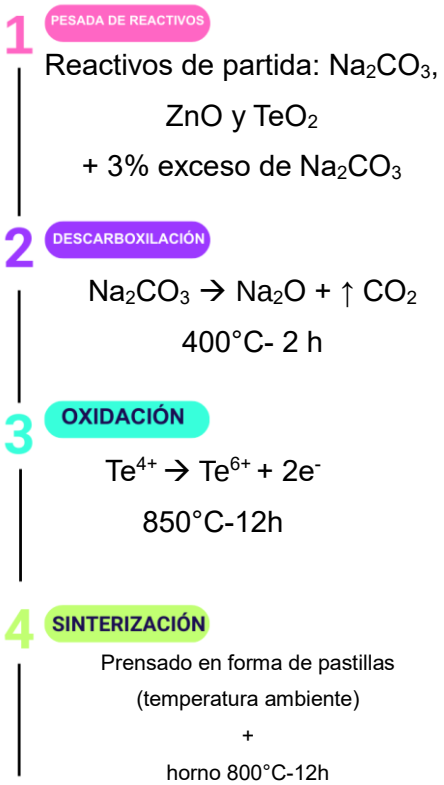


Figura 1. Esquema de síntesis que resume el proceso principal que tiene lugar en cada paso.

La difracción de rayos X (DRX) se realizó en un difractómetro Panalytical Empyrean III con radiación Cu Kα filtrada con Ni (λ = 1,54 Å) a temperatura ambiente en el rango 2θ: 10°– 80°. El análisis de Le Bail y el refinamiento de Rietveld se realizaron con el software FullProf Suite [28,29]. La calorimetría diferencial de barrido (DSC) se registró durante el ciclo de calentamiento-enfriamiento en un instrumento Q20-0836 con una velocidad de 5°C.min^{-1}. Las mediciones de densidad relativa fueron obtenidas por el método de Arquímedes utilizando alcohol isopropílico como medio secundario y fueron realizadas por triplicado. El microscopio electrónico de barrido (SEM, por sus siglas en inglés) LEO EVO 40 XVP con detector de electrones secundarios se utilizó para estudiar la morfología y la composición química elemental en cada micro-área de la muestra mediante el sistema de microanálisis por energía dispersiva (EDS) previamente vaporizado con grafito.

La espectroscopía de impedancia (IS) se realizó en un impedancimetro LCR Agilent 4284A/ 4285A en el rango de frecuencia de 30 MHz a 20 Hz, en función de la temperatura. Se aplicó una corriente de 50 mV a una muestra en forma de disco (7 mm de diámetro y ≈ 2 mm de espesor), además, cada cara de la muestra se recubrió uniformemente con una fina capa de pintura de plata micronizada para asegurar un buen contacto eléctrico. Se utilizó un potenciostato/galvanostato Iviumstat para determinar la respuesta de polarización de corriente continua aplicando un campo eléctrico de 1,0 V.

Resultados y Discusión

Para asegurar la finalización del proceso de oxidación del telurio, durante la segunda etapa del método de síntesis, se evaluaron tres velocidades de calentamiento 5, 10 y 20 °C.min^{-1} y se determinó la rampa más apropiada. La *figura 2* muestra los patrones de difracción de rayos X de cada procedimiento de síntesis de NZTO aplicado. De estos resultados se infiere que 5 °C.min^{-1} es la

velocidad de calentamiento más apropiada, ya que permite obtener el patrón de difracción con los picos más agudos que corresponden al grupo espacial $P6_322$ de NZTO. Además, no se detectaron fases secundarias.

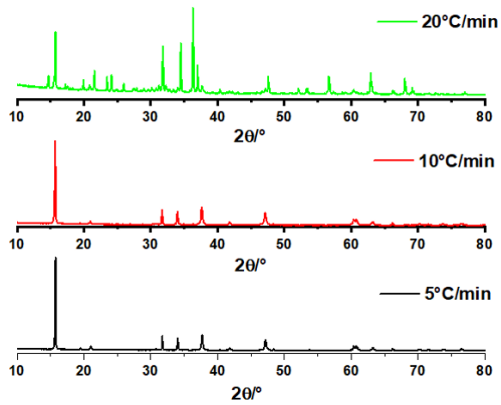


Figura 2. Patrón de difracción NZTO aplicando tres rampas de calentamiento.

Una vez elegida la velocidad de 5 $^{\circ}C.min^{-1}$ para el método de síntesis, todas las muestras dopadas se sintetizaron de la misma manera. La *figura 3* muestra cada patrón de difracción, revelando que todas las muestras tienen principalmente la misma estructura cristalina que el NZTO puro, independientemente del catión dopante utilizado. Esto demuestra que la distribucion de átomos pesados no sigue un arreglo tipo c/2. Los átomos de Zn y Te se alternan a lo largo del eje c en función del diferente contenido de Zn y Te, por lo tanto, algunas columnas sólo tienen átomos de Zn, tal como se describió en otras investigaciones [3].

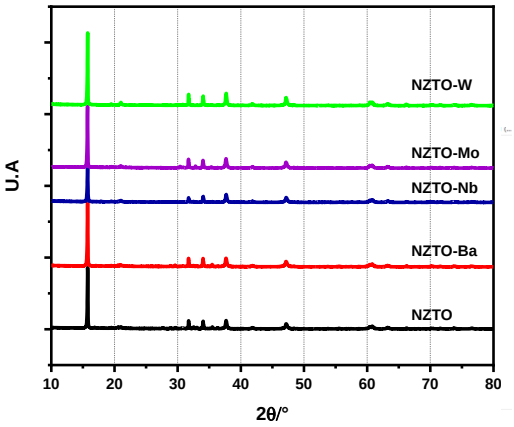
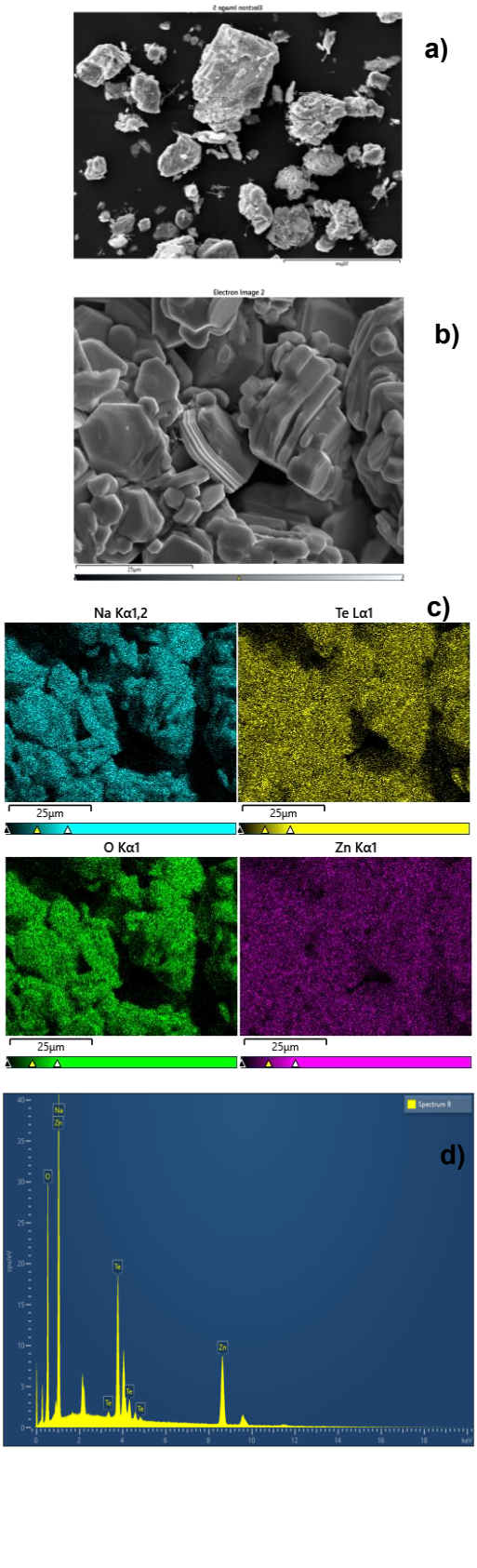


Figura 3. Patrones de difracción de NZTO puro y sus dopados.

La *figura 4* muestra la imagen SEM de NZTO, su mapeo elemental y el EDS promedio en tres puntos de la muestra, luego del proceso de sinterización. Este resultado evidencia un exceso de sodio y oxígeno en el contenido relativo de componentes en comparación con la fórmula nominal (Na≈3,9; Zn≈1,9; Te≈1). En primer lugar, a partir de estos datos se confirma la relación atómica entre el Zn y el Te, pero también se evidencia un exceso de sodio debido a la incertidumbre propia de esta técnica al analizar elementos ligeros, y también se puede asumir que el exceso de óxido de sodio (que es suficiente para compensar la porción volatilizada al aplicar la velocidad de calentamiento elegida) permanece en una pequeña proporción y es responsable de la reactividad del material con la atmósfera normal, dada la formación de Na_2CO_3 en la superficie. Esto justifica las formaciones de agujas observadas en las imágenes de SEM y la presencia de la señal C en el

espectro, además del exceso de oxígeno. Esta es la primera evidencia de la inestabilidad del material en la atmósfera normal [30,31]



% masa				
	Na	**Zn**	**Te**	**O**
Max.	18.68	27.1	26.15	34.59
Min.	16.57	22.86	23.48	30.17
Promedio	17.62	24.4	24.91	33.06
Desv. std.	1.06	2.35	1.35	2.50

Figura 4. Imagen SEM de NZTO: a) en polvo y b) interior de una pastilla fracturada; c) mapeo de elementos; d) tabla de EDS promediado y su espectro, sobre tres puntos de la superficie de la muestra, luego del proceso de sinterización.

Dado que el método de síntesis elegido es eficaz para obtener la fase deseada, se utiliza el mismo método para producir todas las muestras dopadas, donde se incorpora una pequeña proporción de iones de metales de transición de acuerdo con las fórmulas enumeradas en la *Tabla 1.*

Tabla 1. Abreviatura utilizada para referirse al NZTO puro y sus correspondientes dopados.

Dopado	Abreviatura
$Na_2Zn_2TeO_6$	NZTO
(0.05 BaO) + $Na_2Zn_2TeO_6$	Ba-NZTO
(0.05 Nb_2O_5) + $Na_2Zn_2TeO_6$	Nb-NZTO
(0.05 MoO_3) + $Na_2Zn_2TeO_6$	Mo-NZTO
(0.05 WO_3) + $Na_2Zn_2TeO_6$	W-NZTO

Para evaluar la estabilidad térmica de los materiales, se realizó un DSC en un amplio rango de temperaturas: de -40 °C a 400 °C. La *figura 5a* muestra el registro del ciclo durante el barrido de calentamiento y enfriamiento. En primer lugar, se evidencia un comportamiento higroscópico, como se muestra en el recuadro de la *figura 5a*, que se elimina al almacenar la muestra en un lugar libre de humedad. Tras secar todas las muestras, se realizó un nuevo escaneo. Estas curvas revelan dos picos endotérmicos durante el calentamiento,

reversibles durante el enfriamiento (aunque con una ligera histéresis), independientemente del metal de transición incorporado. Este resultado no se había reportado previamente en la literatura del NZTO, pero podría justificar muchas de las desviaciones observadas en diversas propiedades como, por ejemplo, la desviación lineal de la conductividad eléctrica según la ecuación de Arrhenius [1,3,31–33].

Una de las ventajas argumentadas para la aplicación de los materiales de la familia NZTO como posibles conductores iónicos en estado sólido es su estabilidad térmica y electroquímica [31,33]. A partir de los resultados térmicos presentados aquí, durante el primer barrido DSC se observa que todas las muestras expuestas a la atmósfera regular muestran un comportamiento aparentemente higroscópico, como se muestra en la *Fig. 5a.* Por lo tanto, todas las muestras se mantuvieron en un horno a 70 °C durante 24 h y, como resultado, no se observó el evento endotérmico durante el barrido de calentamiento, como se muestra en la *Fig. 5b.*

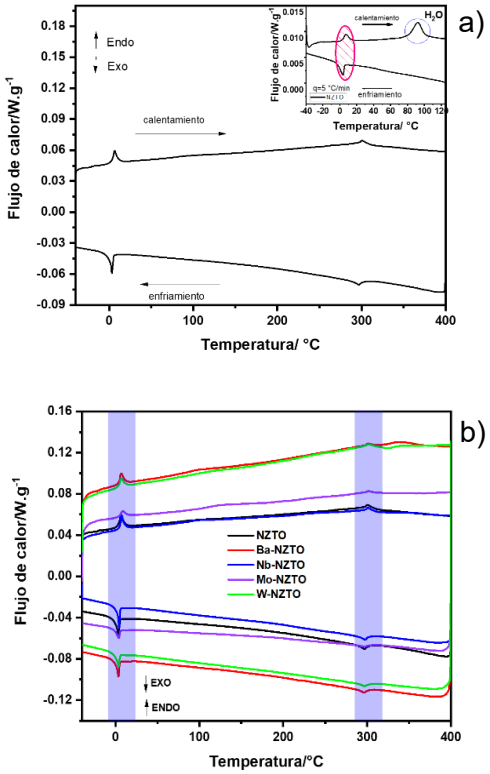


Figura 5. a) Registro del ciclo DSC de NZTO (calentamiento-enfriamiento); recuadro: evidencia del comportamiento higroscópico; b) Registro DSC de NZTO y sus dopado (calentamiento-enfriamiento) tras el secado de todas las muestras a 70 ◦C durante 24 h.

Para comprender el origen de los eventos térmicos observados a T≈ 0 °C y T≈ 300 °C, que son independientes del catión del metal de transición incorporado, se realizó la difracción de rayos X (DRX) en función de la temperatura. Los resultados de la técnica de DRX se muestran en la *Fig. 6a*. Los patrones de difracción revelan que no hay un cambio estructural, es decir, la estructura cristalina se conserva, como se muestra a partir de los valores de los parámetros de celda graficados en la *Fig. 6b*.

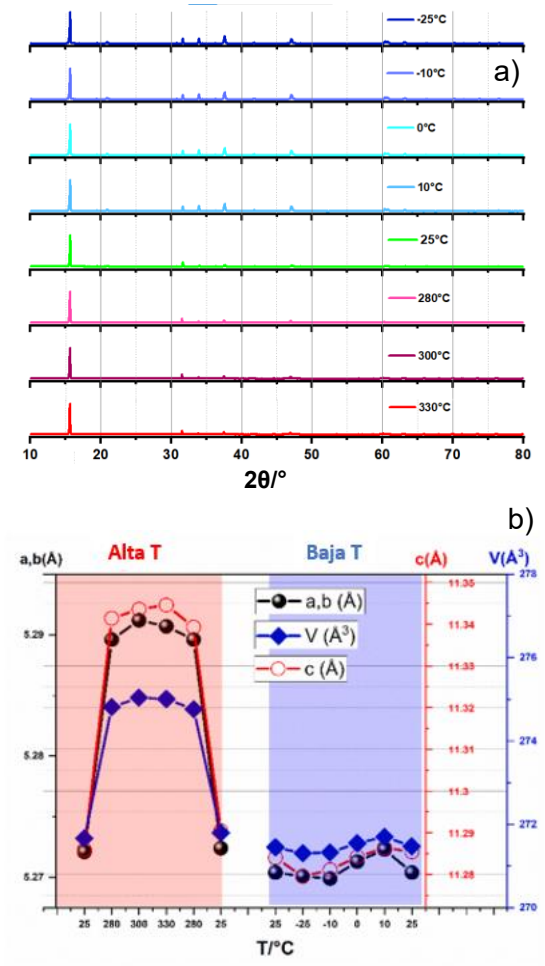


Figura 6. NZTO a) Patrón DRX de − 25 ◦C a 330 ◦C; b) parámetros de celda en función de la temperatura.

La *figura 6b* muestra que los parámetros de celda observados aumentan a 300 °C: a y b aumentan en 0,36 %, mientras que c aumenta un 0,52 %, lo que resulta en una variación del volumen total del 1,24 % con respecto al valor de los parámetros a temperatura ambiente. Mientras que, en el evento de baja temperatura, la contracción del volumen es casi insignificante en comparación con el valor del volumen a temperatura ambiente. Por lo tanto, no hay evidencia de un cambio estructural, y dichos cambios son reversibles.

Además, cada patrón de DRX se analizó mediante el método de Le Bail para buscar la presencia de diferentes estructuras cristalinas. Se encontró que todos los picos están indexados al grupo espacial $P6_322$ (N°182). A partir de los resultados se observa que, dependiendo del catión metálico incorporado, las fases secundarias se hacen evidentes, aunque en pequeña proporción. Sin embargo, el análisis estructural confirma que la estructura cristalina principal se mantiene conservando el grupo espacial y que tiene lugar una mínima variación en los parámetros de red a temperatura ambiente, como lo evidencian los valores listados en la *Tabla 2.*

Tabla 2. Parámetros de celda del patrón de difracción a temperatura ambiente y su variación de volumen en cada NZTO dopado.

	NZTO	Ba-NZTO	Nb-NZTO	Mo-NZTO	W-NZTO
a(Å)	5.2736	5.2803	5.2728	5.2736	5.2735
b(Å)	5.2736	5.2803	5.2728	5.2736	5.2735
c(Å)	11.2882	11.2987	11.2880	11.2868	11.2876
α	90	90	90	90	90
β	90	90	90	90	90
γ	120	120	120	120	120
V	271.88	272.82	271.79	271.84	271.85
ΔV		+0.34%	-0.03%	-0.01%	-0.01%

Ahora bien, si se calcula el volumen de las celdas y se comparan con el del NZTO sin dopar, se observa que la incorporación de bario provoca un aumento en los valores de los parámetros a, b y c, lo que aumenta la distancia entre los iones de telurio y los planos donde se ubican los iones sodio. Por otro lado, al incorporar niobio, molibdeno o wolframio, las variaciones en los parámetros de celda son

opuestas y se observa una disminución del valor a, mostrando una contracción de los planos de sodio en comparación con el NZTO puro.

El NZTO se comporta como un buen conductor de iones de sodio a baja temperatura [34] porque estos iones se encuentran en los huecos entre capas y están desordenados sobre prismas trigonales que comparten caras, lo que permite obtener un material de alta conductividad iónica [3]. Por lo tanto, si fuera posible liberar más iones, la conductividad iónica mejoraría. En este material, los iones sodio se encuentran en tres posiciones distintas, y se conoce de bibliografías previas que los iones en la posición #1 y #2 contribuyen en mayor proporción a la conductividad iónica que el ion en la posición #3 [31]. Las *figuras 7a y 7b* muestran el mapa iso-superficial diferencial de valencia de enlaces en 3D del NZTO calculadas por la suma de valencia de enlaces (BVS, por sus siglas en inglés). Esas imágenes ilustran las tres posiciones de sodio y la fracción de ocupación de cada sitio; cuanto más oscuro es el sitio, mayor es la fracción de ocupación. La *figura 7* también muestra que la posición #1 y #2 tienen una fracción de ocupación mayor que la posición #3. La incorporación de un ion metálico diferente en este trabajo busca liberar más iones sodio de sus posiciones y, por lo tanto, aumentar la conductividad iónica del material. En términos generales, la movilidad de iones dentro del grano y en el borde de grano en un material cerámico (policristalino) debe mejorarse para aumentar la respuesta eléctrica, por este motivo, se han analizado todos los cambios inducidos por el catión metálico incorporado para comprender todas las modificaciones producidas.

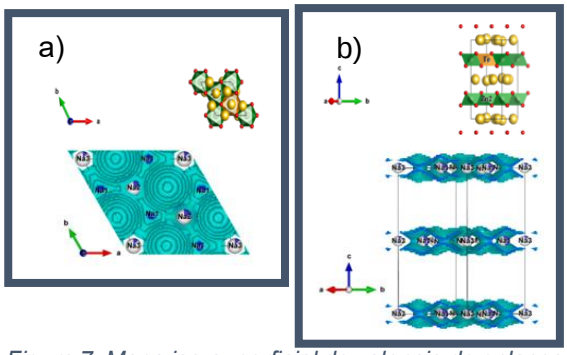


Figura 7. Mapa iso-superficial de valencia de enlaces en 3D del NZTO calculado mediante la suma de valencias de enlaces (BVS) a) plano x-y; b) volumen x-y-z.

La *Fig. 8* muestra las características morfológicas y la densificación de cada muestra estudiada mediante microscopía electrónica. Puede observarse la estructura de panal y la formación laminar previstas, tal como se anticipa a partir de los resultados de DRX presentados anteriormente. Estas imágenes revelan la densificación del material inducida por la incorporación de cada catión metálico y justifican los valores de densidad experimentales reportados en la *Fig. 9.* Sin embargo, también se observó que la estructura de panal está más distorsionada cuando el catión metálico incorporado tiene una carga superior a +2.

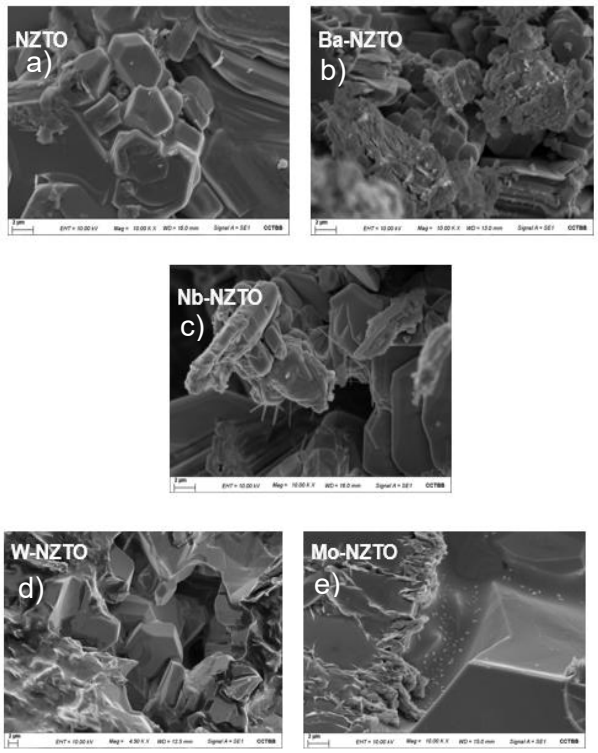


Figura 8. Imágenes SEM de: a) NZTO; b) Ba-NZTO; c) Nb-NZTO; d) W-NZTO; e) Mo-NZTO. La densificación del material es diferente dependiendo del catión metálico incorporado y la estructura de panal está más distorsionada en Mo-NZTO que en W-NZTO.

La *figura 9* muestra la densidad obtenida experimentalmente a partir del método de Arquimedes, la masa molar y el radio iónico de cada catión metálico utilizado en el dopado del NZTO [35]. Esta figura revela que la variación de la densidad se debe principalmente a las características del catión metálico (radio y carga). La densidad del Ba-NZTO aumenta debido a su elevada masa molar, mientras que la del Mo-NZTO aumenta debido a su estructura de panal menos compacta.

Sin embargo, el W-NZTO presenta una estructura de panal bien formada, pero sus granos están menos conectados, de forma similar a lo observado en el Nb-NZTO, como también revelan los datos de la *Fig. 8*. Por lo tanto, se asume que el borde de grano se ve afectado por el tipo de catión metálico incorporado debido a la formación de fases secundarias incluso en una proporción muy baja.

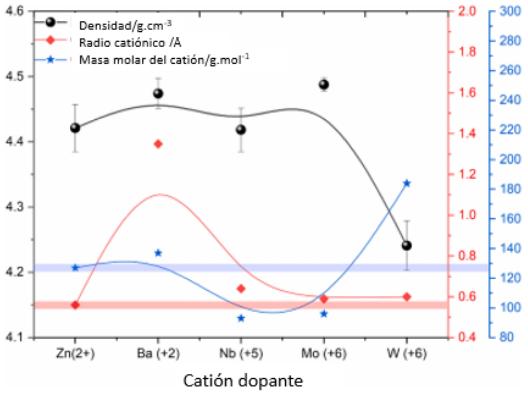


Figura 9. Valores experimentales de densidad, masa molar y radio iónico de los cationes dopantes.

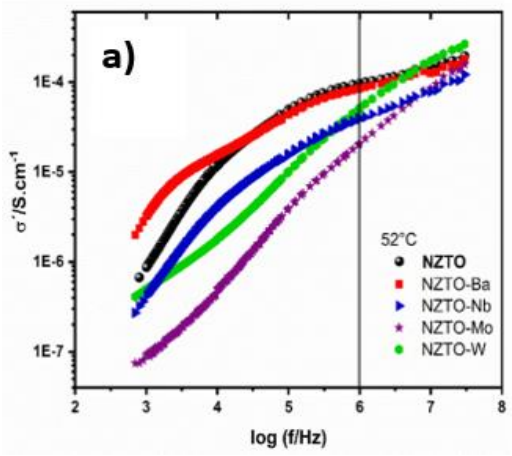
Para analizar el efecto completo de los cationes metálicos incorporados al NZTO, se estudia la respuesta eléctrica por espectroscopia de impedancia. La parte real de la conductividad en función de la frecuencia medida a 52 °C se grafica en la *Fig. 10* para todas las muestras estudiadas. Es sabido que a alta frecuencia la respuesta se debe principalmente al bulk y, en el rango medio de frecuencia al borde de grano. La comparación entre los espectros de conductividad (*Fig. 10a*) revela que el catión metálico incorporado afecta tanto al bulk como al borde de grano de diversas maneras. Considerando que el análisis del diagrama de Nyquist no es confiable debido a la pequeña resolución del primer arco (la respuesta del bulk) a medida que aumenta la temperatura, como

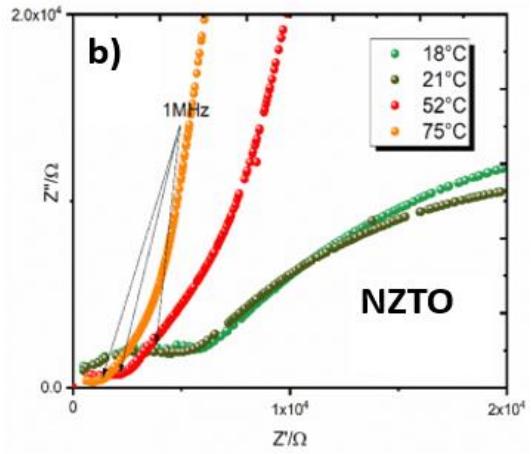
muestra la *Fig. 10b*, es poco recomendable usar el método del circuito equivalente para determinar las conductividades.

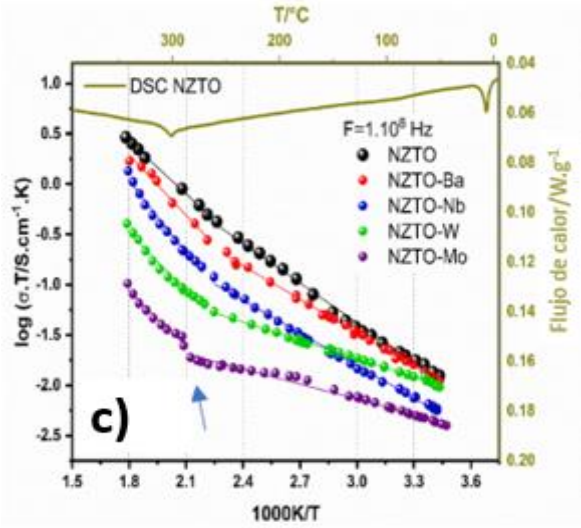
Por lo tanto, la conductividad a una frecuencia fija en función de T se representa gráficamente en la *figura 10c*, de acuerdo con la ecuación de Arrhenius (1):

$$\sigma_\omega.T = \sigma_0.e^{-E_a/k.T} \qquad \textit{(Ecuación 1)}$$

Donde σ_ω es la parte real de la conductividad a ω = 1 MHz, E_a es la energía de activación de la conductividad eléctrica, k es la constante de Boltzman y T la temperatura. La parte real de la conductividad a 1 MHz en función de la temperatura muestra un comportamiento lineal, pero se observan dos pendientes diferentes: una entre 15 °C y 200 °C, y la otra comienza cerca de los 200 °C hasta alcanzar temperaturas superiores. Sin embargo, el comportamiento observado a altas temperaturas no es realmente lineal.







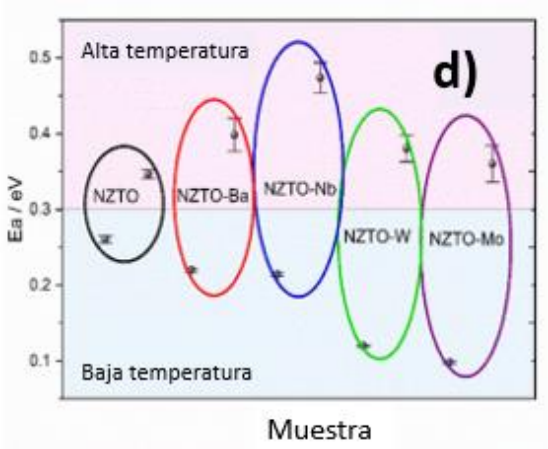


Figura 10. Parte real de la conductividad en función de la frecuencia a 52 °C, b) análisis del diagrama de Nyquist del NZTO en el rango de baja temperatura, c) conductividad a 1 MHz en función de la T^{-1}, d) Energía de activación calculada a partir de la ecuación Arrhenius para cada muestra en el rango de altas y bajas temperaturas.

En muchos compuestos de la familia NZTO, la no linealidad del comportamiento eléctrico suele analizarse deficientemente. Para explicar su origen, es necesario considerar una conductividad mixta y cambios en la movilidad de los iones sodio [1,3,32,34,36]. Anteriormente se explicó que cuando el metal catiónico incorporado alcanza un desorden máximo con respecto a la posición del Zn, se produce como consecuencia el aumento de la movilidad del sodio. En la literatura, también se afirma que la conductividad del NZTO es principalmente iónica debido a la alta movilidad de los iones sodio a través del plano ab (2D) dentro del grano. Sin embargo, un material policristalino presenta una respuesta promedio debido a todas las orientaciones diferentes de los granos; por lo tanto, el comportamiento del borde de grano tiene un papel relevante en el comportamiento eléctrico del material. En consecuencia, cuando se mide la conductividad eléctrica del NZTO policristalino, esta se resuelve deficientemente en el espectro de impedancia o el diagrama de Nyquist debido a la baja impedancia del grano. Esta cuestión técnica explica que lo que se informa en muchos trabajos es la conductividad total (grano y borde de grano) y, debido a sus magnitudes relativas, la conductividad total está gobernada principalmente por la respuesta del borde de grano, como revela la *Fig. 10b*. En esta figura se muestra el diagrama de Nyquist para cuatro temperaturas: 18 °C, 21 °C, 52 °C y 75 °C; para analizar el comportamiento se asume que el primer arco corresponde a la respuesta del grano − que no está completamente resuelta para temperaturas más altas, pero se puede inferir. Por lo tanto, para evitar la gran incertidumbre que puede introducir el método del circuito equivalente, se analiza la conductividad a alta frecuencia. Incluso a 1 MHz y a alta temperatura, la conductividad medida es la respuesta eléctrica completa y debido a eso, la pendiente en el diagrama de Arrhenius (*Fig. 10c*) muestra una energía de activación más alta que a baja temperatura. Para explicar esto, es necesario asumir que podrían estar presentes iones de sodio desde posiciones distintas, vacantes de oxígeno e incluso considerar algún transporte electrónico [3,31] y que se producen distintos procesos de transporte de carga. Por lo tanto, dado que existen numerosos mecanismos de transporte simultáneamente, no se obtiene un comportamiento lineal preciso en el diagrama de Arrhenius a alta temperatura. Por este motivo, es adecuado asumir que la conductividad a baja temperatura y alta frecuencia (en este trabajo entre 16 °C y 150 °C) es corresponde principalmente a la conductividad del grano, ya que los granos tienen una orientación favorable respecto al campo eléctrico externo aplicado, dada

su anisotropía. Considerando que el primer arco está correctamente resuelto, se obtiene un valor de capacidad cercano a cientos de pF, similar a lo reportado previamente [31]. Por otro lado, a temperaturas superiores a 150 °C, la conductividad medida se debe al transporte total, como se explicó anteriormente. Es importante recordar que todas las muestras se midieron evitando la interacción con la humedad ambiental y, por lo tanto, la conductividad no se ve afectada por la contribución de los protones.

Para evaluar la contribución potencial de la conductividad electrónica (σ_{elec}) a la conductividad total (σ_{total}), se realizaron mediciones de polarización de DC (V_{DC} = 1,0 V) a temperatura ambiente hasta alcanzar el estado estable.

La *figura 11* muestra los resultados y la σ_{elec} determinada (a partir de la corriente en función del tiempo a un voltaje V fijo con electrodos de bloqueo) es tres órdenes de magnitud menor que la σ_{total} medido por impedancia, tanto para el NZTO puro como para sus dopado. Por lo tanto, considerando un número de transporte entre 0.94 y 0.90 (calculado como $(\sigma_{total} - \sigma_{elec})/\sigma_{total}$, [37–40]), estos resultados evidencian que los materiales estudiados son esencialmente conductores iónicos. Además, se observa que la σ_{elec} parece disminuir al añadir carbonato de bario al NZTO. Además, la adición de óxidos de metales de transición como Nb_2O_5, WO_3 o MO_3 en el presente trabajo disminuye la σ_{elec}, pero también la σ_{total}, debido a las segundas fases indeseables obtenidas incluso en una proporción muy baja, lo que sugiere que la sustitución parcial del Zn^{2+} o el Te^{6+} en la estructura no es energéticamente favorable con estos iones de metales de transición [22].

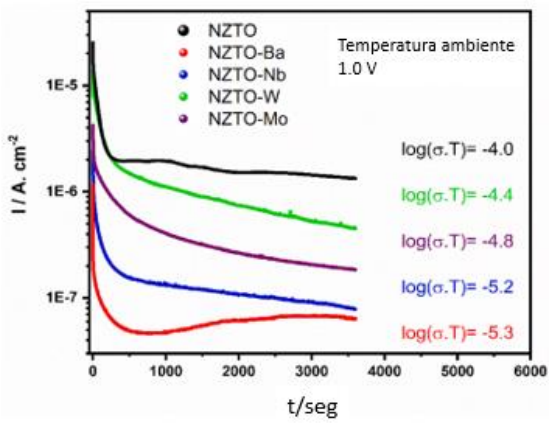


Figura 11. Polarización de DC (VDC = 1,0 V) a temperatura ambiente durante 3600 s. De arriba abajo: NZTO, W-NZTO, Mo-NZTO, Nb-NZTO, Ba-NZTO.

Por otro lado, de este análisis surge que las características dopantes modifican el tipo de ajuste de los poliedros que construyen el entorno de iones sodio en la estructura [3]. El ion bario con carga +2 y mayor radio iónico no puede generar la liberación de más iones sodio de la estructura a pesar de la expansión en la celda observada, además de la hipótesis propuesta en la literatura [31,34], se añade el efecto bloqueante más fuerte mostrado en el espectro de conductividad de la *figura 10a*. Además, en la zona de bajas temperaturas, cuando se incorporan óxidos

con carga catiónica superior a +2, se observa una disminución de la energía de activación de la conductividad, mientras que se produce un aumento en la zona de altas temperaturas (como se muestra en las *figuras 10c y d*).

Por otra parte, considerando que la conductividad de DC en muestras de NZTO con iones de metales de transición es mayor que en Ba-NZTO, pero menor que en NZTO puro, se asume que el dopaje con iones metálicos con carga y tamaño similares a los de Te^{+6} es posible y permite la disminución de la energía de activación dentro del grano. Además, la σ_{elec} disminuye, lo que genera un aumento de E_a para el transporte total debido a los cambios en el borde de grano. Esta hipótesis está respaldada por los resultados del refinamiento de Rietveld que evidencia que la estructura del NZTO se ajusta bastante bien cuando Mo^{6+} o W^{6+} reemplazan al Te^{6+}. Sin embargo, el ion Nb^{5+} no coincide bien en la posición del Zn ni en la posición del Te, por lo tanto, es posible que Nb esté distribuido entre ambos sitios y que puedan estar presentes más vacantes de sodio en Nb-NZTO. Una conclusión similar se obtiene de las distancias entre capas (plano 002) obtenidas del refinamiento donde se encontró que dichas son casi constantes ≈ 5,64 Å excepto para Ba-NZTO que es 5,62 Å [3,41]; esta distancia entre capas tan grande juega un papel fundamental en el mecanismo de conductividad iónica como se discutió previamente porque proporciona un gran camino de migración para los iones de sodio [42].

Conclusiones

Aunque la familia de materiales NZTO estudiada en el presente trabajo alcanza valores elevados de conductividad total: 0,3 a 10 $mS.cm^{-1}$ a 280 °C, se observó una disminución de la conductividad total del NZTO puro. El tratamiento térmico de sinterización estándar aplicado no alcanza una buena densificación y, por otro lado, la energía de activación de la conductividad aumenta a alta temperatura, donde se observa un gran efecto de dispersión en el espectro de conductividad a frecuencias intermedias, lo que refuerza el efecto de distorsión causado por los cambios en el borde de grano cuando el NZTO se dopa con Nb_2O_5, WO_3 o MO_3. Sin embargo, el dopaje con BaO convierte al NZTO en un conductor iónico aún más puro, aunque no aumenta considerablemente su conductividad.

Además, el análisis térmico en un rango de temperatura tan amplio (de -40 °C a 400 °C) no se ha reportado previamente en la literatura, y refuerza la hipótesis previamente propuesta sobre la presencia de una transición reversible de orden/desorden de iones/ vacancias de sodio en la estructura, la cual tiene un efecto importante en la conductividad total.

A pesar de la extensa literatura sobre conductores iónicos de sodio, es necesario explorar diferentes métodos de síntesis para mejorar el mecanismo de dopaje y aumentar la alta conductividad iónica ya obtenida a baja temperatura en muchos de ellos.

Referencias Bibliográficas

[1] M. Dubey, A., Kumar, S., Murugavel, G. V., Prakash, D. A., Jose, C. R., Mariappan, R. (2020). Structural and ion transport properties of sodium ion conducting Na_2MTeO_6 (M = Mg, Ni and Mg, Zn) solid electrolytes. *Ceramics International,* *46*(1), 663–671. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.09.018.

[2] Itaya, A., Yamamoto, K., Inada, R., & Sakurai, Y. (2021). Effect of excess Na contents in precursor on the property of $Na_2Zn_2TeO_6$ ceramic solid electrolyte. *Materials Letters,* *284*, 128941. https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.128941

[3] Evstigneeva, M. A., Nalbandyan, V. B., Petrenko, A. A., Medvedev, B. S., & Kataev, A. A. (2011). A new family of fast sodium ion conductors: $Na_2M_2TeO_6$ (M = Ni, Co, Zn, Mg). *Chemistry of Materials,* *23*(5), 1174–1181. https://doi.org/10.1021/cm102629g

[4] Song, S., Duong, H. M., Korsunsky, A. M., Hu, N., & Lu, L. (2016). A Na^+ superionic conductor for room-temperature sodium batteries. *Scientific Reports,* *6*, 32330. https://doi.org/10.1038/srep32330.

[5] Zhao, C., Liu, L., Qi, X., Lu, Y., Wu, F., Zhao, J., Yu, Y., Hu, Y.-S., & Chen, L. (2018). Solid-state sodium batteries. *Advanced Energy Materials,* *8*(20), 1703012. https://doi.org/10.1002/aenm.201703012

[6] Tarascon, J. M., & Armand, M. (2001). Issues and challenges facing rechargeable lithium batteries. *Nature,* *414*, 359–367. https://doi.org/10.1038/35104644

[7] Chu, S., Cui, Y., & Liu, N. (2017). The path towards sustainable energy. *Nature Materials,* *16*, 16–22. https://doi.org/10.1038/nmat4834

[8] Abraham, K. M. (1982). Intercalation positive electrodes for rechargeable sodium cells. *Solid State Ionics,* *7*(3), 199–212. https://doi.org/10.1016/0167-2738(82)90051-0

[9] Eftekhari, A., & Kim, D.-W. (2018). Sodium-ion batteries: New opportunities beyond energy storage by lithium. *Journal of Power Sources,* *395*, 336–348. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.05.089.

[10] Jamesh, M. I., & Prakash, A. S. (2018). Advancement of technology towards developing Na-ion batteries. *Journal of Power Sources, 378*, 268–300. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.12.053

[11] Vignarooban, K., Kushagra, R., Elango, A., Badami, P., Mellander, B.-E., Xu, X., Tucker, T. G., Nam, C., & Kannan, A. M. (2016). Current trends and future challenges of electrolytes for sodium-ion batteries. International Journal of Hydrogen Energy, 41(1), 2829–2846.https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.12.090

[12] Wang, S., Fu, J., Liu, Y., Saravanan, R. S., Luo, J., Deng, S., Sham, T.-K., Sun, X., & Mo, Y. (2023). Design principles for sodium superionic conductors. *Nature Communications, 14*, 7615. https://doi.org/10.1038/s41467-023-43436-3

[13] Joy, A., Kumari, K., Parween, F., Sultana, M. S., & Nayak, G. C. (2024). A comprehensive review on strategies for enhancing the performance of polyanionic-based sodium-ion battery cathodes. *ACS Omega, 9*, 22509–22531. https://doi.org/10.1021/acsomega.4c02709

[14] Kimpa, M., Mayzan, M. Z. H., Yabagi, J. A., Nmaya, M. M., Isah, K. U., & Agam, M. A. (2018). Review on material synthesis and characterization of sodium (Na) super-ionic conductor (NASICON). *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 140*(1), 012156.https://doi.org/10.1088/1755-1315/140/1/012156

[15] Xu, Y., Zong, Y., & Hippalgaonkar, K. (2020). Machine learning-assisted cross-domain prediction of ionic conductivity in sodium and lithium-based superionic conductors using facile descriptors. *Journal of Physics Communications, 4*(5), 055015.https://doi.org/10.1088/2399-6528/ab92d8

[16] Cheng, M., Qu, T., Zi, J., Yao, Y., Liang, F., Ma, W., Yang, B., Dai, Y., & Lei, Y. (2020). A hybrid solid electrolyte for solid-state sodium ion batteries with good cycle performance. *Nanotechnology, 31*(42), 425401. https://doi.org/10.1088/1361-6528/aba059

[17] Terny, S., Lopez, C., Narda, G., & Frechero, M. A. (2022). On the way to understand the keys for the stabilization of the conductive phase in doped-NASICON-type materials. *Ceramics International, 48*(22), 31755–31762. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.07.102

[18] Kumar, S., & Balaya, P. (2016). Improved ionic conductivity in NASICON-type Sr^{2+} doped $LiZr_2(PO_4)_3$. *Solid State Ionics, 296*, 1–6. https://doi.org/10.1016/j.ssi.2016.08.012

[19] Liu, Y., Rong, X., Xie, F., Lu, Y., Zhao, J., Chen, L., & Hu, Y.-S. (2023). Unlocking the multielectron transfer reaction in NASICON-type cathode materials. *Materials Futures, 2*(3), 035002.https://doi.org/10.1088/2752-5724/acc7bb

[20] Wu, J.-F., Wang, Q., & Guo, X. (2018). Sodium-ion conduction in $Na_2Zn_2TeO_6$ solid electrolytes. *Journal of Power Sources, 402*, 513–518. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.09.048

[21] Li, X., Bianchini, F., Wind, J., Pettersen, C., Wragg, D. S., Vajeeston, P., & Fjellvåg, H. (2020). Insights into crystal structure and diffusion of biphasic $Na_2Zn_2TeO_6$. *ACS Applied Materials & Interfaces, 12*(25), 28188–28198. https://doi.org/10.1021/acsami.0c05863

[22] Ri, K.-C., Ri, T.-I., Kim, K.-M., Choe, S.-H., & Yu, C.-J. (2022). Influence of low content metal intermixing on electrochemical stability and sodium ion transport in $Na_2(Mg_{2-x}Zn_x)TeO_6$ (x = 0.125, 1.875) for solid state sodium-ion batteries. *Solid State Ionics, 385,* 116006.https://doi.org/10.1016/j.ssi.2022.116006

[23] Deng, Z., Gu, J., Li, Y., Li, S., Peng, J., Li, X., Luo, J., Huang, Y., Fang, C., Li, Q., Han, J., Huang, Y., & Zhao, Y. (2019). Ca-doped $Na_2Zn_2TeO_6$ layered sodium conductor for all-solid-state sodium-ion batteries. *Electrochimica Acta, 298,* 121–126. https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.12.092

[24] Li, Y., Deng, Z., Peng, J., Chen, E., Yu, Y., Li, X., Luo, J., Huang, Y., Zhu, J., Fang, C., Li, Q., Han, J., & Huang, Y. (2018). A P2-type layered superionic conductor Ga-doped $Na_2Zn_2TeO_6$ for all-solid-state sodium-ion batteries. *Chemistry – A European Journal, 24,* 1057–1061. https://doi.org/10.1002/chem.201705466

[25] Maurya, D. K., Murugadoss, V., Guo, Z., & Angaiah, S. (2021). Designing $Na_2Zn_2TeO_6$-embedded 3D-nanofibrous poly(vinylidene fluoride)-co-hexafluoropropylene-based nanohybrid electrolyte via electrospinning for durable sodium-ion capacitors. *ACS Applied Energy Materials, 4,* 8475–8487. https://doi.org/10.1021/acsaem.1c01682

[26] Radjendirane, A. C., Maurya, D. K., Rajendra, S. P., AlSalhi, M. S., Guo, Z., & Angaiah, S. (2024). Ameliorating ionic conductivity and dielectric behavior of synergistically coupled all solid state PAN-$Na_2Mg_2TeO_6$-$NaPF_6$ nanohybrid membrane electrolyte. *Journal of Physical Chemistry C, 128*(16), 6950–6961. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c00821

[27] Maurya, D. K., Dhanusuraman, R., Guo, J. Z., & Angaiah, S. (2023). Na ion conducting filler embedded 3D electrospun nanofibrous hybrid solid polymer membrane electrolyte for high performance Na ion capacitor. *Advanced Composites and Hybrid Materials, 6,* 45. https://doi.org/10.1007/s42114-022-00604-1

[28] Rodríguez-Carvajal, J. (1993). Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction. *Physica B: Condensed Matter, 192*(1–2), 55–69. https://doi.org/10.1016/0921-4526(93)90108-I

[29] Contreras, C. A., Macías, J. I., & Ramos, E. (2010). A new preparation method of sodium aluminum hydroxy carbonate and potassium aluminum hydroxy carbonate from basic aluminum sulfate. *MRS Online Proceedings Library, 1275,* 313. https://doi.org/10.1557/PROC-1275-S3-13

[30] Martínez-de la Cruz, L., & Pfeiffer, H. (2010). Toward understanding the effect of water sorption on lithium zirconate (Li_2ZrO_3) during its carbonation process at low temperatures. *Journal of Physical Chemistry C, 114,* 9453–9458. https://doi.org/10.1021/jp1020966

[31] Bera, A. K., & Yusuf, S. M. (2020). Temperature-dependent Na-ion conduction and its pathways in the crystal structure of the layered battery material $Na_2Ni_2TeO_6$. *Journal of Physical Chemistry C, 124,* 4421–4429. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b11191

[32] Sau, K., & Kumar, P. P. (2015). Ion transport in $Na_2M_2TeO_6$: Insights from molecular dynamics simulation. *Journal of Physical Chemistry C, 119,* 1651–1658. https://doi.org/10.1021/jp5094349

[33] Deng, Z., Gu, J., Li, Y., Li, S., Peng, J., Li, X., Luo, J., Huang, Y., Fang, C., Li, Q., Han, J., Huang, Y., & Zhao, Y. (2019). Ca-doped $Na_2Zn_2TeO_6$ layered sodium conductor for all-solid-state sodium-ion batteries. *Electrochimica Acta, 298,* 121–126. https://doi.org/10.1016/j.electacta.2

018.12.092

[34] Sarkar, D., Bhattacharya, A., Meyer, J., Kirchberger, A. M., Mishra, V., Nilges, T., & Michaelis, V. K. (2023). Unraveling sodium-ion dynamics in honeycomb-layered $Na_2Mg_xZn_{2-x}TeO_6$ solid electrolytes with solid-state NMR. *Journal of the American Chemical Society, 145,* 19727–19745. https://doi.org/10.1021/jacs.3c04928

[35] Shannon, R. D. (1976). Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides. *Acta Crystallographica Section A, 32*(5), 751–767. https://doi.org/10.1107/S0567739476001551

[36] Karna, S. K., Zhao, Y., Sankar, R., Avdeev, M., Tseng, P. C., Wang, C. W., Shu, G. J., Matan, K., Guo, G. Y., & Chou, F. C. (2017). Sodium layer chiral distribution and spin structure of $Na_2Ni_2TeO_6$ with a Ni honeycomb lattice. *Physical Review B, 95,* 104408. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.104408

[37] Ahr, N. M. (n.d.). *Hebb-Wagner polarization of oxides* [Doctoral dissertation, RWTH Aachen University].https://publications.rwth-aachen.de/record/856332/files/856332.pdf

[38] Gunes, V., Botquelen, J.-Y., & Bohnke, O. (2013). Electronic conductivity measurements in solid electrolytes using an ion blocking microelectrode: Noise rejection based on a median filter. *International Journal of Computational Materials Science and Engineering, 2*(2), 1350009. https://doi.org/10.1142/S2047684113500097

[39] Wang, M. J., Wolfenstine, J. B., & Sakamoto, J. (2020). Mixed electronic and ionic conduction properties of lithium lanthanum titanate. *Advanced Functional Materials, 30,* 1909140. https://doi.org/10.1002/adfm.201909140

[40] Yang, X., Luo, Y., Li, J., Wang, H., Song, Y., Li, J., & Guo, Z. (2022). Tuning mixed electronic/ionic conductivity of 2D $CdPS_3$ nanosheets as an anode material by synergistic intercalation and vacancy engineering. *Advanced Functional Materials, 32,* 2112169. https://doi.org/10.1002/adfm.202112169

[41] Viciu, L., Huang, Q., Morosan, E., Zandbergen, H. W., Greenbaum, N. I., McQueen, T., & Cava, R. J. (2007). *Journal of Solid State Chemistry, 180,* 1060–1067.

https://doi.org/10.1016/j.jssc.2007.01.002

[42] Radjendirane, A. C., Maurya, D. K., Ren, J., Hou, H., Algadi, H., Xu, B. B., Guo, Z., & Angaiah, S. (2024). Overview of inorganic electrolytes for all-solid-state sodium batteries. *Langmuir, 40,* 16690–16712. https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.4c01845

Agradecimientos

A la Universidad Nacional del Sur y a CONICET por la beca recibida.

Financiamiento

Este trabajo fue posible gracias al apoyo financiero de la Universidad Nacional del Sur (PGI 24/Q112), PIP 2021-2023 GI 11220200100317CO y PICT 2021-I-A-00288, Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT). (ANPCyT).

27. INTELIGENCIA ARTIFICIAL, DERECHO Y FUNCIÓN JUDICIAL

La inteligencia artificial y la toma de decisiones judiciales: límites tecnológicos, éticos y jurídicos.

Alejandra López; alelopez2305@gmail.com

Orientador: Héctor Venegas; hector.benegas13@gmail.com

Facultad de Derecho y Ciencias Sociales – UNE

Resumen

El debate respecto al avance tecnológico de la inteligencia artificial (IA) y la posibilidad de que este pueda reemplazar funciones habitualmente humanas, como la toma de decisiones judiciales, ha adquirido relevancia en el contexto actual. Este trabajo investiga la posibilidad de que la IA reemplace la función que cumplen los jueces dentro del sistema judicial, considerando tanto sus capacidades técnicas actuales como las exigencias éticas y jurídicas inherentes al acto de juzgar. Se analizan las características fundamentales del razonamiento jurídico humano, como la interpretación normativa, la valoración de pruebas, la asignación de peso contextual, para determinar si éstas pueden ser replicadas por sistemas automatizados. Además, se estudia el uso de IA en los tribunales a nivel internacional con la finalidad de identificar sus experiencias, y los desafíos referentes a la transparencia, el debido proceso y la legitimidad internacional.

Finalmente, se indagan cuáles serían las condiciones mínimas que debería cumplir la IA, ya sea para un eventual reemplazo o colaboración con jueces humanos, garantizando valores centrales del sistema judicial, tales como la imparcialidad, la razonabilidad y la garantía de derechos humanos fundamentales.

Palabras clave: Inteligencia Artificial, Justicia, Jueces, Ética Jurídica, Sistemas Automatizados

Introducción

El avance de la inteligencia artificial ha generado un profundo impacto en diversos sectores, incluido el ámbito jurídico. En los últimos años se ha abierto un debate bastante controversial respecto a la posibilidad de que algoritmos y sistemas automatizados puedan reemplazar funciones tradicionalmente humanas en los procesos judiciales. Uno de los puntos más debatidos es si la Inteligencia Artificial puede o debe encargarse de emitir decisiones judiciales, una tarea que históricamente ha sido exclusiva del juez en un Estado de Derecho.

Esta investigación se propone analizar, desde el punto de vista científico, si realmente es posible que la IA sea capaz de desempeñar esas funciones, considerando tanto su desarrollo técnico actual como las exigencias éticas y jurídicas que implican el acto de juzgar. Lejos de partir de una conclusión predeterminada, el enfoque de esta investigación se centra en explorar las condiciones necesarias para que pueda darse un posible reemplazo o convivencia funcional entre los sistemas de Inteligencia Artificial y el rol del juez humano, sin menoscabar el debido proceso, la razonabilidad ni la legitimidad del sistema judicial.

Objetivos

General

Analizar los límites, posibilidades y condiciones necesarias para que la inteligencia artificial pueda intervenir en la función judicial, sin afectar principios jurídicos fundamentales

Específicos

1. Describir las características fundamentales de la función judicial humana.
2. Investigar el estado actual del desarrollo de sistemas de IA aplicados a decisiones judiciales.
3. Identificar los principios jurídicos y éticos que deben observarse en la toma de decisiones judiciales.
4. Evaluar si las capacidades de la IA pueden satisfacer esas exigencias.
5. Analizar experiencias internacionales relevantes de aplicación de IA en el poder judicial.

Metodología y materiales

Marco metodológico

Según Arias (2012, p.16), el marco metodológico es el *"conjunto de pasos, técnicas y procedimientos que se emplean para formular y resolver problemas"*. En este apartado se definen el tipo y diseño de investigación, así como las técnicas e instrumentos empleados, con el fin de garantizar la coherencia entre los objetivos propuestos y el proceso investigativo.

Enfoque de investigación

La investigación se basa en un enfoque cualitativo, el cual permite realizar un análisis sistemático de información de carácter subjetivo, obtenida a partir de ideas y opiniones sobre un determinado asunto. Este enfoque no se centra en datos estadísticos, sino en la interpretación lógica, fundamentada y coherente de las percepciones de los participantes.

Diseño de investigación

El diseño corresponde a una investigación no experimental, dado que no se manipulan variables, sino que se observa y analiza el fenómeno tal como ocurre en la realidad. Asimismo, combina un análisis descriptivo y comparativo, ya que se busca describir las percepciones de los jueces y, al mismo tiempo, contrastar el

marco normativo y doctrinario nacional con experiencias internacionales.

Etapas y técnicas de investigación

La investigación se desarrollará en dos etapas:

Etapa documental:

Se trabajará con fuentes escritas como libros de doctrina jurídica, artículos académicos, informes internacionales y normas legales de Paraguay. El objetivo es comprender cómo se está regulando y pensando el uso de la inteligencia artificial en la justicia, tanto a nivel nacional como internacional. Las técnicas empleadas serán el análisis de contenido (para examinar en profundidad lo que dicen los textos) y la comparación entre distintos sistemas legales, con el fin de identificar buenas prácticas que puedan servir de referencia para el caso paraguayo.

Etapa empírica:

Se realizarán entrevistas a jueces y fiscales paraguayos mediante una guía de preguntas abiertas, lo que permitirá obtener sus percepciones de manera libre y reflexiva.

El propósito es indagar cómo entienden ellos su rol: si consideran que se limitan a aplicar la ley tal cual está escrita, o si también entra en juego la interpretación y su mirada personal del derecho. Esta parte del trabajo permitirá contrastar lo que señalan los textos jurídicos con lo que sucede en la práctica judicial cotidiana.

Población

La idea es entrevistar a jueces y fiscales que trabajen en diferentes áreas del derecho (civil, penal, constitucional, etc.). No se busca una muestra grande, sino una variedad de voces que puedan aportar distintas experiencias y puntos de vista.

Instrumentos

Para las entrevistas se va a usar una guía de preguntas que servirá como base para la conversación, pero dejando espacio para que cada entrevistado pueda expresarse libremente. Las preguntas estarán centradas en el rol del juez, su forma de tomar decisiones, el lugar de la interpretación en su trabajo diario, y su opinión sobre el uso de inteligencia artificial en el ámbito judicial.

Muestra

La muestra estará compuesta por jueces del Poder Judicial paraguayo, seleccionados de manera intencional según su disponibilidad y la relevancia de su experiencia.

Si bien la investigación se centra en la función judicial, debido a la dificultad de acceso a jueces se incluyó también a

fiscales en la muestra, con el fin de no perder la dimensión práctica del análisis

El tamaño estimado de la muestra es de entre 5 y 10 participantes, número suficiente para obtener información rica y diversa en el marco de una investigación cualitativa. El tipo de muestreo es no probabilístico, dado que los participantes son escogidos en función de su conocimiento y de la pertinencia de sus aportes al objeto de estudio.

Marco teórico

Inteligencia Artificial ¿Qué es?

La inteligencia Artificial es definida por la Rae como: Disciplina científica que se ocupa de crear programas informáticos que ejecutan operaciones comparables a las que realiza la mente humana, como el aprendizaje o el razonamiento (Diccionario de la Lengua Española , 2024).

La Comisión Europea para la Eficacia de la Justicia (CEPEJ) ha dicho que la IA es "un conjunto de métodos, teorías y técnicas científicas cuyo objetivo es reproducir, mediante una máquina, las habilidades cognitivas de los seres humanos. Los desarrollos actuales buscan que las máquinas realicen tareas complejas previamente realizadas por humanos"

Podríamos decir que la IA es la capacidad de las máquinas para usar algoritmos, aprender de los datos y utilizar lo aprendido en la toma de decisiones tal y como lo haría un ser humano (Rouhiainen, 2018)

Sistemas expertos jurídicos (SEJ's)

Son sistemas informáticos capaces de emitir posibles soluciones a determinados casos judiciales, simulando la capacidad de razonamiento de un experto humano en el campo del derecho. Estos sistemas utilizan una base de datos que contiene leyes, normas y procedimientos legales, y aplican ese conocimiento para analizar y resolver problemas específicos, siendo capaces de explicar su razonamiento. En general lo que se busca es que sirvan como herramienta de apoyo para los operadores jurídicos, ya sea en tareas de asesoramiento y asistencia legal, como también en el ejercicio de la función judicial.

Cabe destacar que el sistema no funciona de manera completamente autónoma. Para que pueda ofrecer asesoramiento útil, es necesario que el usuario, que debe contar con formación jurídica, le proporcione la información necesaria. En este sentido, la carga cognitiva se distribuye entre el sistema y el operador humano. Esta distribución de roles refuerza el papel del SEJ como una herramienta de apoyo, no como un sustituto del jurista.

Tipos de sistemas expertos jurídicos

Existen tres tipos principales de Sistemas Expertos Jurídicos (SEJ's) orientados a las decisiones judiciales:

Modelo positivista explícito

Este modelo asume que el razonamiento jurídico funciona como un silogismo: se parte de una norma general (premisa mayor) y un hecho concreto (premisa menor), para llegar a una conclusión jurídica. Los SEJ's bajo esta lógica usan reglas fijas del derecho positivo para aplicar soluciones automáticas. Su principal crítica es que ignoran la interpretación y el contexto, elementos fundamentales en la labor judicial.

Modelo constructivista

Desarrollado por Enrique Cáceres Nieto, este modelo sostiene que el derecho no se reduce a textos legales, sino que se construye mentalmente mediante el uso combinado de normas, teorías jurídicas, y procesos interpretativos. Los SEJ constructivistas buscan replicar cómo los juristas procesan y combinan distintos saberes para tomar decisiones, reconociendo que el razonamiento jurídico es dinámico y siempre lógico.

Modelo de razonamiento legal basado en casos

Este modelo propuesto por Kevin Ashley, se basa en la idea de que los problemas jurídicos pueden resolverse por analogía con casos anteriores. Así como las personas, al enfrentarse a un problema nuevo, buscan situaciones similares en sus experiencias pasadas, estos sistemas informáticos almacenan una base de casos resueltos y la utilizan para encontrar soluciones a nuevos conflictos. (Bahena, 2013)

Machine Learning y Deep Learning

El "Machine Learning" es una categoría de IA, la misma se refiere al proceso introducir datos a un ordenador. Posteriormente la máquina lleva a cabo un análisis de los datos para aprender a realizar una tarea determinada. Para lograr este tipo de funcionamiento, no es necesario programar explícitamente todas las respuestas posibles, ni escribir millones de líneas de código. Por ello se habla de un "aprendizaje automático", ya que el sistema aprende a partir de datos y ejemplos .

El Deep Learning es un tipo de Machine Learning directamente inspirado en la arquitectura de las neuronas del cerebro humano. Una red neuronal artificial está compuesta por múltiples capas, a través de las cuales se procesan los datos. Esto es lo que permite que la máquina profundice en su aprendizaje, identificando conexiones y alterando los datos introducidos para conseguir los mejores resultados. (Data Scientist , s.f.)

Experiencias internacionales

La incorporación de la Inteligencia Artificial en el sistema judicial chino

En China, la Inteligencia Artificial (IA), ya juega un papel fundamental dentro del sistema judicial, especialmente en la toma

de decisiones en ciertos tipos de procesos. Un ejemplo destacado es el tribunal de Hangzhou, donde se utiliza un asistente judicial denominado “Xiao Zhi 3.0, que puede ser traducido como “pequeña sabiduría”.

Este sistema comenzó desempeñando funciones básicas, como informar a las partes sobre sus derechos y deberes procesales. Sin embargo, su uso a evolucionado; actualmente, participa en procedimientos civiles sencillos o vinculados a cuestiones económicas, donde realiza funciones más complejas, como registrar testimonios mediante el reconocimiento de voz, analizar documentos del caso y verificar información en tiempo real a través de su base de datos.

Un caso similar se observa en el tribunal de Suzhou, donde tecnologías análogas se aplican para resolver disputas derivadas de accidentes de tráfico. En este contexto, el asistente de IA no solo examina las pruebas presentadas, sino que también redacta borradores de sentencias, lo cual ha permitido reducir hasta un 80% la labor de los jueces.

De igual manera “Xiao Baogong”, un sistema inteligente de predicción de sentencias, es utilizado por los jueces y fiscales en el Derecho Penal. Esta herramienta es capaz de sugerir posibles penas basándose en el análisis de “big data”, incluyendo detalles del caso en curso y decisiones previas en casos similares.

En Beijing, se ha implementó “Xiaofa”, que es un robot asistente de información al público. El mismo sistema se ha implementado en cortes en Nanjing, Xi’an y Guangzhou.

Este sistema ha sido entrenado con más de 20.000 regulaciones siendo capaz no solo de repetir normas, sino de transformarlas a un lenguaje común, es decir no jurídico, que permite el entendimiento de la ciudadanía en general. Xiaofa incluso fue dotado con la capacidad de hablar con un tono de voz humorístico para reducir la tensión en los juzgado de familia.

Actualmente los ciudadanos chinos pueden presentar denuncias, seguir la evolución del caso e inclusive comunicarse con el juez; a través de sus teléfonos celulares. Las maquinas basadas en IA ofrecen, entre otras cosas, consultas jurídicas, registran casos y son capaces de generar documentos legales las 24h del día. Incluso pueden predecir la probabilidad de éxito o fracaso de un juicio.

Sin embargo, existe un cuestionamiento sobre la fiabilidad del sistema y la utilidad de sus predicciones, esto se debe a que los sistemas se basan principalmente en respuesta a preguntas de selección múltiple y no en una

comunicación directa e interactiva con los jueces.

Otro problema es que los sistemas de IA se desarrollan sobre un registro público incompleto. Se debe a la desigual digitalización de información en las regiones de China. Parece dudoso que un sistema de IA basado en datos fragmentarios pueda tomar una decisión imparcial. En gobierno chino fue sorprendido al darse cuente de que el sistema de IA eliminaba casos de la base datos, esto de hecho ocurrió con el caso de una mujer china que fue secuestrada en Xuzhou, de manera casi automática la opinión pública quedó indignada por la cantidad de casos similares y penas inadecuadas que encontraron en el sitio web de "China Judgments". (Zhabina, 2023)

Estados unidos y la implementación de IA en sus tribunales

Eric L., escapó de la Policía en un auto robado, en el estado de Wisconsin, EE. UU. Su sentencia: seis años de prisión. Para decidir cuánto tiempo tenía que ir a la cárcel, el juez recurrió a un software. Este determinó que el acusado tenía un alto riesgo de reincidencia. Eric L. apeló. Su argumento: el veredicto fue determinado por un algoritmo al que no se podía tener acceso, por lo tanto, el veredicto no era justo. La Corte Suprema de Wisconsin falló en contra de él. Sin embargo, el caso desencadenó una gran controversia.

El software Compas, o "Correctional Offender Management Profiling for Alternative Sanctions" es producido por una empresa privada, se llama Equivant. Las cortes de por lo menos diez estados de Estados Unidos utilizan este programa. Su propósito es ayudar a los tribunales a tomar decisiones informadas sobre la supervisión o sanciones, los resultado se basan en un cálculo del riesgo el cual evalúa los antecedentes penales, la edad, el nivel de educación y otros datos del infractor o criminal, es básicamente un cuestionario que se le da a las personas cuando son arrestadas. Aunque "COMPAS" ayude a predecir el riesgo de reincidencia, no es capaz de determinar la sentencia de manera automática. Los jueces aún toman la decisión final, utilizando la información que el software les proporciona como una herramienta más. Sin embargo, el uso de ese sistema ha generado mucha controversia debido a las preocupaciones sobre la transparencia, equidad y la posibilidad de que el COMPAS pueda perpetuar sesgos raciales o sociales, ya que los datos históricos utilizados para entrenar al algoritmo pueden reflejar las desigualdades existentes en el sistema de justicia penal estadounidense. (Klein, 2019) (Maybin, 2016)

Alemania y la inteligencia artificial, su uso en el derecho

Desde hace ya un tiempo en Alemania comenzaron a implementarse procesos totalmente automatizados, por ej.: la oficina de impuestos alemana ya emite evaluaciones fiscales sin participación humana.

Actualmente se puede evaluar si la objeción de una multa será exitosa o no, a través de un portal de internet denominado "Geblitzt. De". Esta plataforma ayuda a las personas a gestionar multas de tráfico, como infracciones por exceso de velocidad, no respetar distancias, uso del teléfono móvil al volante, entre otros. Su funcionamiento básico es el siguiente:

- El usuario envía el documento oficial de la multa recibida.
- Abogados asociados revisan el caso y evalúan si hay fundamentos para impugnar la multa.
- Si hay posibilidades, los abogados actúan en el procedimiento para defender al conductor.

Geblitzt.de proporciona a sus firmas asociadas un software propio que facilita la gestión administrativa de los casos, lo que les permite atender muchos más expedientes de manera eficiente. Esta plataforma no es una inteligencia artificial autónoma que decida casos, sino un sistema que apoya el trabajo humano mediando un software especializado y procesos automatizados para agilizar la revisión y gestión de multas. (Ebers, 2019) (Geblitzt.de, s.f.)

En Alemania, la Ley estipula que toda persona tiene derecho a ser escuchada por un juez humano, esto hace imposible que los juicios sean totalmente automatizados, por lo tanto se necesitan reglas claras para determinar hasta qué punto se puede recurrir a la inteligencia artificial para llegar a un veredicto.

Brasil y el uso de ia en sus tribunales

En América Latina, Brasil se posiciona como uno de los países pioneros en la incorporación de inteligencia artificial en su sistema judicial. Un ejemplo destacado de esta innovación es el sistema de IA denominado "Víctor", este es aplicado a los casos pendientes ante el Supremo Tribunal Federal de Brasil. Su principal tarea es la de identificar si un caso tiene "repercusión general", es decir, si trata un tema que es relevante para toda la sociedad brasileña. Actualmente, gracias a Víctor los funcionarios judiciales y los jueces son capaces de llevar a cabo su labor en menos tiempo y con mayor eficiencia y rendimiento. (Sistemas de Algoritmos Informaticos , 2024)

Igualmente, Brasil cuenta con E-proc y SAJ, que son herramientas utilizadas para digitalizar los procesos. El primero de ellos es un sistema de tramitación electrónica creado con el objetivo de automatizar las tareas repetitivas, propias de los procesos

de primera y segunda instancia, tales como la programación de vistas, emisión de oficios, traslados y notificaciones. Este sistema también es utilizado por otras instituciones relacionadas, tales como la policía, el Ministerio Público, bancos y otras entidades; con el fin de centralizar la información relevante en una sola plataforma. Por otro lado, SAJ digital se utiliza como base de datos de alta seguridad en la cual se almacenan todos los archivos del juzgado y de los tribunales, de forma que se pueda acceder a ellos a través de internet. (Giménez)

Paraguay ante el reto de la digitalización judicial

En Paraguay, la digitalización judicial se inició formalmente en 2016 con la Acordada N° 1107, implementando el Expediente Judicial Electrónico en juzgados civiles y comerciales. La pandemia de COVID-19 aceleró este proceso mediante la Acordada N° 1370/20, que estableció el Protocolo de Gestión Electrónica a Distancia.

Según datos de la Dirección de Tecnología de la Información y las Comunicaciones del Poder Judicial paraguayo, entre marzo y abril de 2020 se realizaron 77,036 actuaciones electrónicas. No obstante, si bien el país ha dado pasos importantes hacia la digitalización, el uso de inteligencia artificial aún no forma parte de las prácticas judiciales.

Sistema de gestión jurisdiccional (SGJ)

A través de este sistema las partes pueden consultar en línea casos judiciales en los juzgados que lo hayan implementado. Ofrece acceso a la información actualizada sobre el estado de los procesos, promoviendo la eficacia y transparencia de la administración de justicia.

Este sistema ofrece el acceso a fallos específicos ya sea por número, año, Sala que lo ha dictado, así como la búsqueda por palabra en el texto de la resolución, pudiendo hacer uso combinando todos o algunos de estos criterios. (Corte suprema de justicia , 2009)

Implementación de inteligencia artificial en el Paraguay

Desde el 2019 Paraguay ha considerado la implementación de un software de IA, éste se llama “Prometea” y fue creado por Argentina como parte del Laboratorio de Innovación e Inteligencia Artificial de la Facultad de Derecho de la Universidad de Buenos Aires y el Ministerio Público Fiscal de la Ciudad de Buenos Aires. Se utiliza para preparar de manera automática sentencias judiciales mediante el uso de un sistema de inteligencia artificial y aprendizaje automático supervisado y tiene como objetivo agilizar el análisis de casos complejos, mitigar la

delincuencia y optimizar los procesos burocráticos. Su mayor éxito reside en predecir la solución de un caso judicial en menos de 20 segundos, con una tasa de éxito del 96 %. Además, puede identificar casos urgentes con gran volumen de expedientes en tan solo 2 minutos, lo que a un humano normalmente le llevaría 96 días. (Juan G Corvalan, 2020)

Esta herramienta ya ha sido implementada en diversas organizaciones internacionales, tales como La Corte Interamericana de Derechos Humanos, el Ministerio de Justicia y Seguridad de Buenos Aires, la fiscalía general de lo Contencioso Administrativo y Tributario de la Ciudad de Buenos Aires y la Corte Constitucional de Colombia. (Corvalan, 2018)

Marco normativo paraguayo

Constitucional Nacional

Articulo 16 - de la defensa en juicio

La defensa en juicio de las personas y de sus derechos es inviolable. Toda persona tiene derecho a ser juzgada por tribunales y jueces competentes, independientes e imparciales.

Este artículo garantiza que toda persona sea juzgada por jueces competentes, independientes e imparciales. En relación con la IA, esto plantea interrogantes sobre cómo un sistema automatizado podría respetar la independencia y la imparcialidad requeridas en el juicio, y hasta qué punto la supervisión humana sería indispensable.

Articulo 17 - de los derechos procesales

En el proceso penal, o en cualquier otro del cual pudiera derivarse pena o sanción, toda persona tiene derecho a:

1. que sea presumida su inocencia;

2. que se le juzgue en juicio público, salvo los casos contemplados por el magistrado para salvaguardar otros derechos;

3. que no se le condene sin juicio previo fundado en una ley anterior al hecho del proceso, ni que se le juzgue por tribunales especiales;

4. que no se le juzgue más de una vez por el mismo hecho. No se pueden reabrir procesos fenecidos, salvo la revisión favorable de sentencias penales establecidas en los casos previstos por la ley procesal;

9. que no se le opongan pruebas obtenidas o actuaciones producidas en violación de las normas jurídicas;

10. el acceso, por sí o por intermedio de su defensor, a las actuaciones procesales, las cuales en ningún caso podrán ser secretas para ellos. El sumario no se prolongará más allá del plazo establecido por la ley, y a

11. la indemnización por el Estado en caso de condena por error judicial.

Los derechos procesales, como el acceso a pruebas, la defensa adecuada y la comunicación con el tribunal, podrían representar un desafío para la implementación de la IA, ya que cualquier sistema debería garantizar transparencia y supervisión humana.

Capítulo XII - de las garantias constitucionales

Articulo 133 - del habeas corpus

Esta garantía podrá ser interpuesta por el afectado, por sí o por interpósita persona, sin necesidad de poder por cualquier medio fehaciente, y ante cualquier Juez de Primera Instancia de la circunscripción judicial respectiva.

El hábeas corpus protege la libertad personal frente a detenciones ilegales o arbitrarias. Esto genera la interrogante de cómo un sistema de IA podría interactuar con decisiones que afectan derechos fundamentales, y la necesidad de mantener siempre un control humano sobre la resolución de estos casos

Articulo 134 - del amparo

Toda persona que por un acto u omisión, manifiestamente ilegítimo, de una autoridad o de un particular, se considere lesionada gravemente, o en peligro inminente de serlo en derechos o garantías consagrados en esta Constitución o en la ley, y que debido a la urgencia del caso no pudiera remediarse por la vía ordinaria, podrá promover amparo ante el magistrado competente. El procedimiento será breve, sumario, gratuito, y de acción popular para los casos previstos en la ley.

El amparo permite la protección rápida de derechos vulnerados. Se plantea como un desafío que la IA pueda manejar la urgencia y complejidad de estos casos, ya que su aplicación podría requerir interpretación y valoración de circunstancias específicas que podrían escaparse a un algoritmo.

Articulo 135 - del habeas data

Toda persona puede acceder a la información y a los datos que sobre sí misma, o sobre sus bienes, obren en registros oficiales o privados de carácter público, así como conocer el uso que se haga de los mismos y de su finalidad. Podrá solicitar ante el magistrado competente la actualización, la rectificación o la destrucción de aquellos, si fuesen erróneos o afectaran ilegítimamente sus derechos.

El artículo garantiza el acceso, rectificación y control de datos personales. Esto es especialmente relevante frente al uso de IA, porque plantea preguntas sobre la privacidad, la protección de datos y la transparencia en los sistemas que procesan información sensible.

Articulo 136 - de la competencia y de la responsabilidad de los magistrados

Ningún magistrado judicial que tenga competencia podrá negarse a entender en las acciones o recursos previstos en los artículos anteriores; si lo hiciese injustificadamente, será enjuiciado y, en su caso, removido.

En las decisiones que dicte, el magistrado judicial deberá pronunciarse también sobre las responsabilidades en que hubieran incurrido las autoridades por obra del proceder ilegítimo y, de mediar circunstancias que prima facie evidencien la perpetración de delito, ordenará la detención o suspensión de los responsables, así como toda medida cautelar que sea procedente para la mayor efectividad de dichas responsabilidades. Asimismo, si tuviese competencia, instruirá el sumario, pertinente y dará intervención al Ministerio Público; si no la tuviese, pasará los antecedentes al magistrado competente para su prosecución.

Capítulo III - del poder judicial

Sección I - de las disposiciones generales

Articulo 256 - de la forma de los juicios

Los juicios podrán ser orales y públicos, en la forma y en la medida que la ley determine.

Toda sentencia judicial debe estar fundada en esta Constitución y en la ley. La crítica a los fallos es libre.

El proceso laboral será oral y estará basado en los principios de inmediatez, economía y concentración.

(Constitución Nacional, 1992)

La obligación de fundamentar las sentencias y garantizar la oralidad y publicidad de los juicios plantea interrogantes sobre cómo la IA podría contribuir al proceso sin reemplazar la responsabilidad de los jueces humanos en la motivación y exposición de sus decisiones.

Ley N.º 879 / Código De Organización Judicial

Título I - de la función y organización del poder judicial

Art. 1°.- El Poder Judicial ejerce la función jurisdiccional en los términos y garantías establecidos en el Capítulo IX de la Constitución Nacional.

Art. 2°.- El Poder Judicial será ejercido por:

la Corte Suprema de Justicia; el Tribunal de Cuentas; los Tribunales de Apelación; los Juzgados de Primera Instancia; la Justicia de Paz Letrada; los Juzgado de Instrucción en lo Penal; y los Jueces Arbitros y Arbitradores.

Estos artículos describen la estructura y función del Poder Judicial, indicando que la jurisdicción se ejerce por jueces y tribunales humanos. Esto genera la discusión sobre el rol de la IA como herramienta de apoyo, y no como sustituto de la autoridad judicial reconocida legalmente.

Título II - de la jurisdicción y de la competencia

Capítulo I - de la jurisdicción

Art. 9°.- Los Jueces y Tribunales aplicarán la Constitución, los Tratados Internacionales, los Códigos y otras leyes, los decretos, ordenanzas municipales y reglamentos, en el orden de prelación enunciado.

No podrán negarse a administrar justicia. En caso de insuficiencia, obscuridad o silencio de la ley, aplicarán las disposiciones de leyes análogas y los principios generales del derecho y tendrán en consideración los precedente judiciales.

La Ley extranjera competente será aplicada de oficio por los Jueces y Tribunales de la República, sin perjuicio del derecho de las partes de alegar y probar su existencia, contenido y vigencia.

En el presente artículo el deber de aplicar la Constitución, leyes y principios generales del derecho plantea interrogantes sobre la capacidad de la IA para interpretar normas complejas o resolver vacíos legales sin la supervisión de un juez.

Capítulo II - de los deberes y atribuciones de los jueces

Art. 196.- Los Jueces deben dar audiencia todos los días hábiles, las mismas serán públicas, salvo que por razones de moralidad o decoro fuere necesario o conveniente la reserva.

Los Jueces podrán habilitar días feriados y horas inhábiles cuando los asuntos de su competencia así lo requieran.

Art. 199.- Los Jueces y Tribunales dictarán sentencia y demás resoluciones dentro de los plazos fijados en la ley. Si no lo hicieren la Corte Suprema de Justicia los emplazará a hacerlo dentro de un plazo perentorio, bajo apercibimiento de ser suspendidos por quince días sin goce de sueldo. La reincidencia en el curso del mismo año será causal de enjuiciamiento.

La IA podría facilitar la organización de expedientes y el cumplimiento de plazos, pero se plantea la duda de hasta qué punto puede garantizar la transparencia y la supervisión necesarias en las audiencias públicas.

Capitulo V - superintendencia y potestad disciplinaria

Art. 236.- Los Tribunales y Juzgados podrán sancionar con apercibimiento,

multas o arrestos las faltas que los litigantes, sus abogados o procuradores u otras personas cometan contra su autoridad o decoro en las audiencias, en los escritos, en el diligenciamiento de sus mandatos u órdenes, o en cualquier otra circunstancia con motivo del ejercicio de sus funciones.

Las multas no podrán exceder de treinta jornales mínimo legal para actividades diversas no especificadas en la Capital de la República ni el arresto de veinte días. Este último podrá ser domiciliario.

Los Jueces de Paz podrán aplicar apercibimientos y multas hasta quince jornales mínimo legal para actividades no especificadas en la Capital de la República.

El importe de las multas será depositado en el Banco Central del Paraguay en una Cuenta especial abierta a la orden de la Corte Suprema de Justicia destinado a mejoras en la administración de la justicia.

(Ley Nº 879 / CODIGO DE ORGANIZACION JUDICIAL, 1981)

Los jueces son responsables por su conducta y decisiones. Esto genera la pregunta de cómo se asignaría responsabilidad si se utiliza IA como apoyo en la toma de decisiones, y la importancia de que siempre exista un juez humano a cargo.

Principio de inmediación en el derecho penal

Dentro del proceso penal existe lo que se denomina principio de inmediación, éste se refiere a la relación directa y personal entre el juez y las pruebas, así como con las partes involucradas en un proceso judicial. Implica que el juez debe presenciar personalmente la práctica de pruebas, como testimonios y presentación de documentos, y participar activamente en el debate procesal. Este principio, consagrado en diversos códigos procesales y reconocido por la jurisprudencia, busca asegurar que el juez forme su convicción a partir de la percepción directa de la información, sin intermediarios.

Resultados del cuestionario aplicado a jueces y fiscales en Paraguay y ajuste de la muestra

El diseño de la investigación contemplaba inicialmente la realización de entrevistas a jueces paraguayos, con el objetivo de conocer sus percepciones respecto a la digitalización judicial y el eventual uso de inteligencia artificial en la toma de decisiones. Sin embargo, debido a la dificultad de acceso y a la limitada respuesta por parte de algunos magistrados, fue necesario ampliar la muestra e incluir a fiscales del Ministerio Público. Esta decisión metodológica se justifica en la medida en que tanto jueces como fiscales cumplen funciones

esenciales y complementarias en el sistema de justicia. Mientras los jueces ejercen la potestad de decidir los conflictos conforme a la ley, los fiscales impulsan la acción penal pública y participan activamente en la interpretación y aplicación del derecho. La inclusión de fiscales permitió enriquecer la investigación con perspectivas diversas que reflejan de manera más completa la dinámica judicial paraguaya frente a los desafíos tecnológicos.

Para la recolección de datos se utilizó un cuestionario digital elaborado en Google Forms, lo que permitió llegar a participantes de diferentes fueros y con distintos niveles de experiencia, sin necesidad de coordinación presencial. El cuestionario contenía preguntas abiertas orientadas a explorar la concepción del rol judicial, la relación entre la ley escrita y la interpretación personal en la toma de decisiones, los aspectos más desafiantes del ejercicio de la función jurisdiccional, la experiencia previa con sistemas digitales de apoyo y las percepciones sobre los posibles beneficios, riesgos y condiciones necesarias para la implementación de inteligencia artificial en la justicia.

En total se obtuvieron doce respuestas, provenientes de jueces y fiscales con una trayectoria que varía entre seis y veinticuatro años en el ejercicio de sus funciones. Este grupo heterogéneo aportó información valiosa acerca de las tensiones entre legalidad e interpretación, de las dificultades prácticas que enfrentan los operadores de justicia al momento de resolver casos complejos y de la manera en que conciben la incorporación de nuevas tecnologías al ámbito judicial. Los resultados, expuestos en el apartado siguiente, ofrecen un panorama empírico que complementa el análisis teórico y normativo desarrollado previamente, sirviendo como punto de contraste entre lo que disponen las normas y la forma en que los actores judiciales perciben su aplicación en la práctica.

Resultados y discusión

La inteligencia artificial ha probado ser una herramienta poderosa en distintos países de Latinoamérica, Asia, Europa y América del Norte, pero su aplicación en la justicia sigue generando tensiones importantes entre la eficiencia y legitimidad. Los análisis de las distintas legislaciones a nivel mundial han demostrado que, en contextos como China, la IA ya juega un papel muy activo dentro del sistema judicial. Por ejemplo, se utiliza para crear borradores de sentencias o para sugerir sanciones en determinados casos. Aunque esto puede hacer el proceso mucho más rápido y eficiente, también ha generado una preocupación significativa en su población, esto se debe a que no siempre está claro cómo toma sus decisiones, en qué se fundamenta y, así

también hay un riesgo de que dicho sistema esté empleando datos incompletos o que reproduzca sesgos inexistentes. En Estados Unidos, se ha demostrado que dentro de los procesos penales es posible hacer de la IA como una herramienta que si bien no deciden directamente pueden influir de manera significativa en los fallos judiciales.

Sin embargo el uso del software "COMPAS", ha generado debates éticos importantes en cuanto a la responsabilidad y la opacidad de los algoritmos.

Por otro lado, tenemos a países como Alemania que han adoptado una postura mucho más cautelosa en cuanto al uso de estos sistemas, si bien se las utiliza como medio de apoyo a las funciones administrativas y como una forma de automatizar los procesos, ha optado por mantener y hacer un énfasis al principio fundamental de que toda persona tiene el derecho a ser juzgada por un ser humano. Un ejemplo de ello es Brasil, donde la herramienta "VICTOR", basada en inteligencia artificial, se utiliza para analizar y organizar información relevante en los procesos judiciales sin que esto signifique el reemplazo del juez, sino más bien apoyo a su función.

En lo que respecta a nuestro país, el debate respecto al uso de inteligencia artificial, en general, es aún muy incipiente por lo tanto encontramos un vacío judicial en lo referente al tema. Esto representa una oportunidad para nuestro país, ya que podremos ser capaces de reflexionar con antelación sobre cómo, cuándo y para qué utilizar estas tecnologías. Al hacer una revisión cautelosa del marco normativo, se revela que la función judicial está ligada no solo a la aplicación de normas, sino también a la interpretación, la motivación de las decisiones y el respeto a las garantías procesales. La normativa nacional, en todo momento subraya la importancia de que los jueces sean independientes, imparciales y responsables por sus decisiones.

Otro aspecto fundamental es el principio de inmediación, especialmente relevante en nuestro proceso penal, el cual exige una conexión directa entre el juez, las partes y las pruebas presentadas en el caso. Este contacto permite al juez captar matices que difícilmente una maquina podría interpretar. Además, desde el punto de vista ético, resulta evidente que la IA no cuenta con empatía, y no es capaz de captar el contexto emocional o social de cada caso concreto. Si bien puede ser útil como herramienta para apoyar tareas técnicas o administrativas, su uso no puede extenderse hasta el punto de sustituir el juicio humano, especialmente en casos donde están en juego la dignidad, la libertad o la vida de las personas.

En este marco, se aplicó un cuestionario a doce jueces y fiscales paraguayos con el objetivo de conocer sus percepciones sobre la digitalización y el eventual uso de la inteligencia artificial en la función judicial. Los participantes coincidieron en que la ley escrita constituye la base esencial de toda decisión, aunque reconocieron que la interpretación personal resulta inevitable en la práctica, especialmente en fueros sensibles como la niñez. Entre los principales desafíos identificados señalaron las contradicciones normativas, la necesidad de garantizar objetividad y la complejidad de los casos que involucran daños morales, psicológicos o a menores de edad.

En cuanto al uso de sistemas digitales, varios encuestados mencionaron haber interactuado con el Expediente Electrónico, bases de jurisprudencia en línea y plataformas de gestión, aunque otros afirmaron no tener contacto con estas herramientas. Respecto a la inteligencia artificial, la mayoría manifestó que podría servir como apoyo para agilizar trámites, acceder a jurisprudencia o elaborar resúmenes, pero advirtieron que no debe sustituir la labor humana, ya que la decisión judicial implica un componente ético y valorativo que la tecnología no puede suplir. Los riesgos señalados incluyeron la posibilidad de sesgos, errores en la calidad de los datos y la pérdida de legitimidad si las decisiones se delegan a un sistema automatizado. Como medidas necesarias, los participantes destacaron la capacitación de los operadores jurídicos, la transparencia en el manejo de datos y la creación de un marco normativo específico que regule el uso de la IA en la justicia.

Conclusiones

A lo largo de esta investigación quedó en evidencia que, si bien la inteligencia artificial tiene un gran potencial para mejorar ciertos aspectos del sistema judicial, como la organización de la información, la reducción de tiempos o la automatización de tareas repetitivas, en su estado actual aún no es capaz de reemplazar la función del juez humano.

En la práctica, los operadores jurídicos no aplican normas de forma automática, sino que realizan una labor de interpretación, ponderación y argumentación. Las decisiones judiciales incluyen elementos valorativos y contextuales que no pueden ser reducidos a simples reglas lógicas. Por tanto, si bien el razonamiento jurídico puede incluir silogismos, la selección de las premisas y las reglas de inferencia exige creatividad y juicio, lo cual limita la utilidad de modelos puramente deductivos.

El análisis comparativo revela que, incluso en naciones con un desarrollo tecnológico avanzado, la IA es empleada principalmente como un instrumento auxiliar. En aquellos intentos de dar un uso

mucho más ambicioso de la misma, podemos observar que de manera casi automática han surgido críticas contundentes relacionadas con la transparencia, los sesgos y la pérdida de la humanidad en la justicia.

Paraguay, por su parte, se encuentra en una etapa temprana de este debate, lo que constituye una oportunidad. La experiencia de otros países muestra que aún es posible anticiparse y diseñar marcos normativos y éticos sólidos antes de adoptar de manera amplia estas tecnologías. Los resultados obtenidos a partir del cuestionario aplicado a jueces y fiscales confirman esta perspectiva: si bien los operadores reconocen que la IA puede ser útil como apoyo en la búsqueda de jurisprudencia o en la agilización de trámites, advierten que nunca debe sustituir la responsabilidad ni la independencia del juez. Coinciden, además, en que su integración solo será legítima si se garantiza transparencia, formación continua de los operadores jurídicos y un control humano significativo.

Finalmente, esta investigación no pretende frenar el avance tecnológico, sino promover una adopción crítica y responsable de la inteligencia artificial. El desafío consiste en asegurar que estas herramientas no debiliten la confianza en la justicia, sino que la fortalezcan, siempre manteniendo al ser humano en el centro de las decisiones judiciales.

Bibliografía

Geblitzt.de. (s.f.). Obtenido de https://www.geblitzt.de/so-funktionierts/

Bahena, G. C. (2013). La inteligencia artificial y su aplicación.

Constitución Nacional. (1992). Asunción - Paraguay .

Corte suprema de justicia . (2009). Obtenido de https://www.pj.gov.py/notas/6663-se-implementaron-nuevos-sistemas-digitales-de-consulta-de-casos-y-de-jurisprudencia?utm_source=chatgpt.com

Corvalan, J. G. (2018).

Data Scientist . (s.f.). Obtenido de Inteligencia artificial : definición, historia, usos, peligros: https://www.scribbr.com/ai-detector/

Diccionario de la Lengua Española . (2024). Obtenido de https://dle.rae.es/inteligencia

Ebers, M. (2019). Inteligencia artificial en los tribunales: ¿cómo funciona? (K. Klein, Entrevistador)

Giménez, V. A. (s.f.). *El uso de Inteligencia Artificial en la Administración de Justicia: ¿Utopía o Distopía?*

Juan G Corvalan, E. M. (2020). *CERIDAP*. Obtenido de https://ceridap.eu/prometea-experience-using-ai-to-optimize-public-institutions/?lng=en

Klein, K. (22 de enero de 2019). Inteligencia artificial en los tribunales: ¿cómo funciona? *DW* .

Kurzweil, R. (1990). La era de las máquinas inteligentes. Estados Unidos : Prensa del MIT.

Ley Nº 879 / CODIGO DE ORGANIZACION JUDICIAL. (02 de diciembre de 1981). Obtenido de BACC : https://www.bacn.gov.py/leyes-paraguayas/2321/ley-n-879-codigo-de-organizacion-judicial

Maybin, S. (17 de octubre de 2016). ¿Cómo en Estados Unidos las matemáticas te pueden meter en prisión? *BBC News*.

Rouhiainen, L. (2018). inteligencia artificial 101 cosas que debes saber hoy sobre nuestro futuro . Editorial Planeta, S.A.

Ruiz Torres, L. (2023). Metodología de la investigación. Ciudad del Este, Paraguay: Descartes.

Sistemas de Algoritmos Informaticos . (29 de noviembre de 2024). Obtenido de Universidad de los Andes : https://sistemaspublicos.tech/victor/

trazegnies, F. d. (diciembre de 2013). *Revista ius et veRitas, N.* Obtenido de https://revistas.pucp.edu.pe/index.php/iusetveritas/article/view/11938/12506

Zhabina, A. (20 de enero de 2023). Cortes chinas ya resuelven casos con inteligencia artificial. *DW*.

30 - Productos naturales bioactivos y sus aplicaciones

Evaluación de la capacidad antifúngica de aceites esenciales de anís (*Pimpinella anisum*)

Autor: Salcedo, Carlos Sebastián, carlitosalcedo@outlook.es
Co-autor(es): Nieva, Amira Susana, asv.nieva@gmail.com; Rodríguez, María Rosa, mariarosa.r.mrr@gmail.com
Orientador/a: Comelli, Nieves Carolina, nccomelli@agrarias.unca.edu.ar
Universidad Nacional de Catamarca

Resumen

Los aceites esenciales obtenidos a partir de plantas aromáticas como el anis (*Pimpinella anisum*) representan una fuente importante de compuestos bioactivos. La caracterización de las propiedades antimicrobianas de estos fitoderivados puede ser de utilidad en el desarrollo de nuevas tecnologías en programas de manejo integrado de plagas y enfermedades. El objetivo del estudio fue evaluar las propiedades antifúngicas del aceite esencial de anís sobre hongos fitopatógenos de los géneros *Fusarium* y *Alternaria*, de amplio rango de hospedantes y extensa distribución en los sistemas agrícolas. La evaluación de la capacidad antifúngica de los aceites esenciales se realizó mediante ensayos de inhibición *in-vitro*, utilizando medios de cultivo suplementados con la emulsión de aceite esencial de anís al 75% en solución de Tween20 (0.02%). Se utilizó medio de cultivo agar papa dextrosado (APD) suplementado con la emulsión hasta alcanzar las siguientes concentraciones: 0 (control), 500, 1000 y 1500 ul/L. Se sembró micelio en activo crecimiento de las cepas seleccionadas y se cultivaron en los medios suplementados durante 7 días a 25 ºC. Luego del periodo de incubación se evaluó el área del crecimiento del micelio mediante el software *ImageJ* y se estimó la biomasa producida mediante método gravimétrico. Los resultados obtenidos indicaron la inhibición del crecimiento fúngico bajo el efecto de los extractos de anís. Se observaron además tasas diferenciales de biomasa por área. Los resultados indican que las emulsiones de aceite de anís podrían ser efectivas para el biocontrol de hongos fitopatógenos de amplio espectro y constituir una alternativa al uso de fungicidas sintéticos en sistemas agrícolas sustentables.

Palabras clave: control biológico, hongos fitopatógenos, biomasa fúngica

Introducción

El aumento en la demanda de alimentos inocuos y producidos de manera sostenible ha impulsado la búsqueda de alternativas a los productos fitosanitarios sintéticos tradicionales. En este contexto, los productos de origen natural como los aceites esenciales han emergido como una opción promisoria para el manejo integrado de enfermedades fúngicas en la agricultura, tanto en las etapas de campo, como en postcosecha y almacenamiento. El uso de aceites esenciales como agentes antifúngicos ha ganado interés debido a su origen natural y la menor probabilidad de generar resistencia en comparación con los fungicidas sintéticos (Patiño-López et al. 2022, Septiyanti et al. 2019).

Los aceites esenciales están constituidos por mezclas complejas de compuestos volátiles que actúan como metabolitos secundarios. Su actividad biológica se debe a la sinergia de sus componentes, principalmente terpenos, terpenoides y fenilpropanoides (Mani-López et al. 2021, Sadgrove et al. 2022). La capacidad de estos compuestos para inhibir el crecimiento de hongos patógenos ha sido ampliamente estudiada, siendo su mecanismo de acción multifactorial, desestabilizando la membrana celular, alterando el transporte de iones, inhibiendo la síntesis de enzimas vitales y causando daño al ADN, lo que conduce a la muerte celular del hongo (Nguyen et al. 2021). Este modo de acción amplio y no específico hace que sea menos probable que los hongos desarrollen resistencia en comparación con los fungicidas sintéticos, que generalmente se dirigen a una sola vía metabólica (Viera et al. 2018). Sin embargo, para lograr una aplicación efectiva, es crucial comprender la variabilidad interespecífica en la susceptibilidad de los hongos a estos compuestos naturales, ya que la respuesta de los microorganismos a los compuestos bioactivos depende de factores genéticos y fisiológicos específicos de cada cepa fúngica (Viera et al. 2018). Además, la formulación de los aceites esenciales puede influir significativamente en su eficacia antifúngica, lo que requiere optimización para asegurar una vida útil adecuada y una actividad biológica sostenida (Achimón et al. 2021, Combrinck et al. 2011). Es por ello que los estudios preliminares *in vitro* para evaluar la eficacia biocontroladora de aceites esenciales son fundamentales para determinar las concentraciones óptimas y la especificidad de acción, permitiendo así el desarrollo de agentes antifúngicos naturales más seguros y efectivos (Nazzaro et al. 2017). Los ensayos del crecimiento fúngico en placas de Petri y la medición del área de crecimiento, constituyen un método adecuado para

cuantificar el efecto de biocontroladores, utilizando medios sólidos (Kai et al. 2019).

Objetivos

El objetivo general del estudio fue evaluar la actividad antifúngica del aceite esencial de anís (*Pimpinella anisum*) sobre aislamientos de los géneros *Alternaria* y *Fusarium*.

Materiales y Métodos

Para evaluar la capacidad antifúngica de los aceites esenciales de anís se utilizaron cuatro aislamientos, dos correspondientes al género *Fusarium* y dos correspondientes al género *Alternaria*. Estos géneros presentan amplia distribución en cultivos de importancia agrícola y afectan diferentes órganos de cosecha, suelo y son productores de micotoxinas (Fraeyman et al. 2017, Schiro et al. 2018). Se utilizaron dos aislamientos de cada género, considerando la especificidad de las respuestas de los hongos y sus capacidades de crecimiento de acuerdo a la especie (Nieva et al. 2019). Los aislamientos fueron repicados en medio de cultivo agar papa dextrosado (APD, conteniendo 200 gr de infusión de papas, 20 gr de dextrosa y 15 gr de agar) a 25 ºC durante 7 días para obtener el inóculo inicial.

Se utilizó aceite esencial de anís como principio activo, obtenido y caracterizado previamente por Denett et al. (2023). El aceite fue emulsionado en una solución de Tween 80 (0.02%, Biopack). La concentración final de aceite esencial de la emulsión fue de 25%. Se preparó medio APD suplementado con la emulsión hasta alcanzar las concentraciones de 500, 1000 y 1500 ul de emulsión por cada Litro de APD. Se utilizó como control medio APD sin suplementación.

Para evaluar la capacidad de crecimiento de los hongos en los medios utilizados como tratamiento, se cortaron discos de micelio en activo crecimiento (desde la zona del borde del crecimiento en placa) de aproximadamente 5 mm de diámetro. Los discos fueron repicados en placas de Petri conteniendo los medios suplementados, con 4 réplicas por tratamiento. Las placas fueron cultivadas a 25 ºC en oscuridad durante 7 días. Luego de este periodo, se realizó la medición del crecimiento del micelio utilizando el software *ImageJ.* En los casos en los que se observó la presencia de crecimiento abundante sobre la superficie, se colectó el material para estimar la biomasa por método gravimétrico y calcular la producción de biomasa fúngica por área de crecimiento.

Se analizaron los resultados utilizando el test no paramétrico Wilcoxon, comparando los tratamientos suplementados con la emulsión con el tratamiento control (APD sin suplementación). Los análisis estadísticos y la visualización de datos se realizaron utilizando el paquete *ggplot* para el entorno R (Wickham et al. 2016).

Resultados y Discusión

Luego del periodo de incubación en condiciones controladas, se observaron crecimientos diferenciales de acuerdo a los aislamientos fúngicos utilizados y a las concentraciones de aceite esencial de *Pimpinella anisum*, utilizadas para suplementar el medio de cultivo basal (Figura 1).

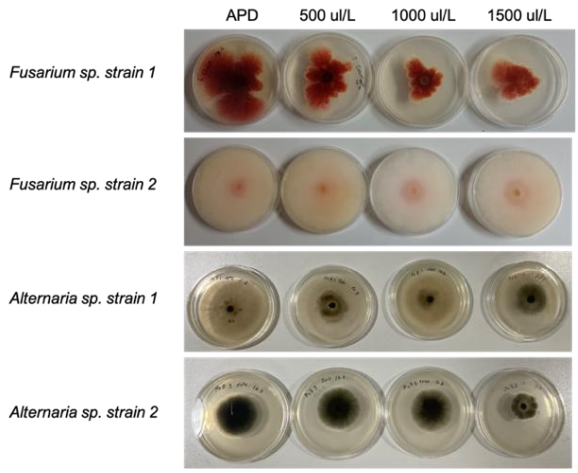


Figura 1. Apariencia de los aislamientos de los géneros *Fusarium* y *Alternaria*, luego de 7 días de crecimiento en medio de cultivo APD (Control) y medio APD suplementado con emulsión de aceite esencial de anís (AcE) en concentraciones de 500, 1000 y 1500 ul/L.

Estas diferencias no solo se manifestaron entre *Fusarium* y *Alternaria*, sino también entre aislamientos del mismo género (Figura 2), lo que confirma la naturaleza cepa-dependiente de la sensibilidad fúngica a compuestos bioactivos de origen natural (Grzanka et al. 2021).

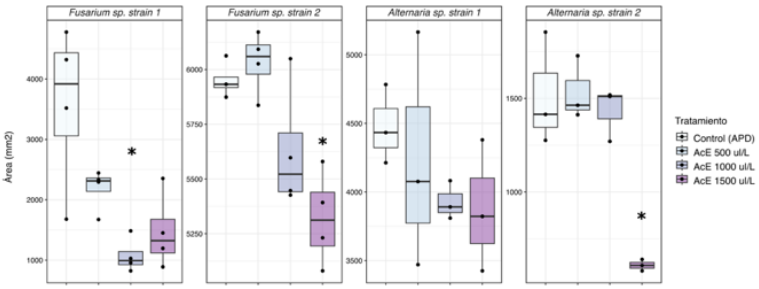


Figura 2. Áreas de crecimiento de micelio (mm^2) de los aislamientos de los géneros *Fusarium* y *Alternaria* creciendo en medio de cultivo APD (Control) y medio suplementado con emulsión de aceite esencial de anís (AcE) en concentraciones de 500, 1000 y 1500 ul/L. * indica diferencias significativas con respecto al tratamiento control (Test Wilcoxon $p<0.05$).

En el caso del género *Fusarium*, se observó que la concentración de 1000 ul/L de emulsión fue suficiente para inhibir el crecimiento del aislamiento 1 (*Fusarium sp. strain 1*) de manera significativa, mientras que se precisó una concentración de 1500 ul/L para inhibir el crecimiento del aislamiento 2 (*Fusarium sp. strain 2*).

En el caso de *Alternaria*, la emulsión de aceite esencial de anís a 1500 ul/L fue efectiva para disminuir el crecimiento del aislamiento 2 (*Alternaria sp. strain 2*). Sin embargo, no hubo inhibición de *Alternaria sp. strain 1*, por lo cual, la emulsión no fue efectiva en esta especie. Las diferencias en la respuesta de acuerdo a las especies de hongos ya fueron observadas en otros

sistemas experimentales (Perczak et al. 2019, Grzanka et al. 2021).

Es importante destacar que en ninguno de los casos se logró una inhibición total del crecimiento, lo que sugiere que el aceite esencial de anís, bajo las condiciones ensayadas, podría tener un efecto predominantemente fungistático. Este patrón de acción ha sido descrito previamente para aceites ricos en anetol, principal componente del aceite de anís, que interfiere con la integridad de la membrana y el transporte de iones, pero rara vez provoca la lisis completa de las células fúngicas (Sharifi et al. 2008; Achimón et al. 2021).

Otro aspecto relevante fue la observación de un crecimiento micelial superficial abundante en algunos tratamientos, acompañado de un posible cambio en la estrategia de desarrollo del hongo hacia un crecimiento vertical (Figura 3). Este efecto sólo fue observado en los aislamientos de *Fusarium* sp.

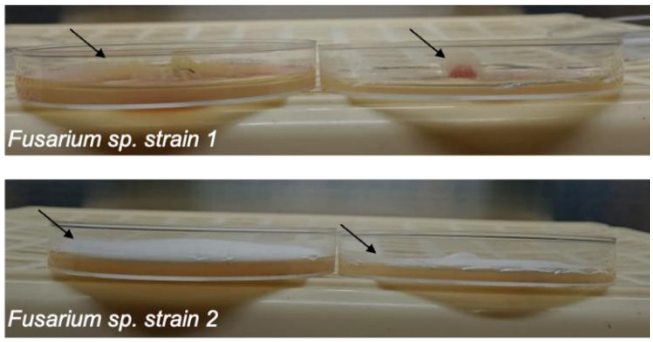


Figura 3. Apariencia del crecimiento en placas de Petri de los aislamientos del género *Fusarium.*

Por este motivo, se recolectó el micelio que creció de manera superficial, considerando que algunas estrategias de compensación involucran el crecimiento de micelio en forma vertical en lugar del crecimiento en área. Los resultados obtenidos a partir de la estimación gravimétrica de biomasa por área de crecimiento, demostraron que los aislamientos del género *Fusarium* no mostraron diferencias significativas en este parámetro (Figura 4). Este fenómeno, detectado en *Fusarium sp.*, podría representar un mecanismo compensatorio para evitar el contacto directo con el aceite esencial presente en la superficie del medio. Estrategias similares han sido reportadas en hongos fitopatógenos expuestos a compuestos antifúngicos, donde el micelio crece hacia zonas menos expuestas para preservar la viabilidad (Grzanka et al. 2021).

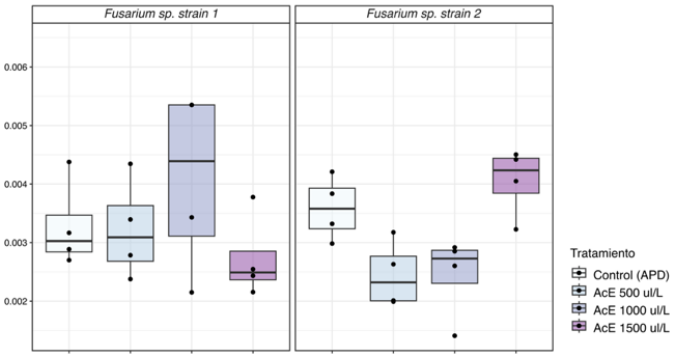


Figura 4 . Biomasa (mg) por área de crecimiento de micelio (mm^2) de los aislamientos de los géneros *Fusarium* y *Alternaria* creciendo en medio de cultivo APD (Control) y medio suplementado con emulsión de aceite esencial de anís (AcE) en concentraciones de 500, 1000 y 1500 ul/L.

La estimación gravimétrica de biomasa por área de crecimiento no reveló diferencias significativas, lo que refuerza la hipótesis de que los hongos, particularmente *Fusarium*, mantienen la producción de biomasa total mediante un cambio en la arquitectura del micelio, compensando la reducción de expansión radial con mayor densidad y altura del crecimiento. Esto implica que, aunque el aceite esencial afecta la velocidad de colonización superficial, no necesariamente reduce la capacidad global de acumulación de biomasa, lo que podría tener implicancias importantes para su uso en aplicaciones de biocontrol en superficies vegetales o en ambientes con alta humedad.

Conclusiones

Las emulsiones de aceites esenciales fueron efectivas para el control del crecimiento de 3 de los 4 hongos evaluados. Las concentraciones de emulsión de aceite esencial de anís fueron efectivas para reducir el crecimiento de estos hongos en concentraciones de 1000 y 1500 ul/L. La ausencia de diferencias significativas en el índice biomasa/area podria sugerir que los hongos evaluados tienen estrategias para evadir la superficie del medio de cultivo mediante el crecimiento vertical del micelio.

Los resultados indican que las emulsiones evaluadas podrían ser efectivas para el biocontrol de estos patógenos. Sin embargo, es necesaria la realización de nuevos ensayos para evaluar más especies y géneros de patógenos, como así también nuevas concentraciones y formulaciones de emulsiones con aceite esencial.

Referencias bibliográficas

Achimón, F., Brito, V. D., Pizzolitto, R. P., Sanchez, A. R., Gómez, E. A., & Zygadlo, J. A. (2021). Chemical composition and antifungal properties of commercial essential oils against the maize phytopathogenic fungus Fusarium verticillioides. *Revista argentina de microbiología*, *53*(4), 21-30.

Combrinck, S., Regnier, T., & Kamatou, G. P. (2011). In vitro activity of eighteen essential oils and some major components against common postharvest fungal pathogens of fruit. *Industrial Crops and Products*, *33*(2), 344-349.

Denett, G. O., Comelli, N. C., Rodriguez, M. R., Gómez, A. D. L. A., Sanchez Matías, M. D. H., & Sampietro, D. A. (2023). Chemical composition and insecticidal activity of essential oils from cultivated and native aromatic plants of Argentina against Carpophilus dimidiatus (Fabricius)(Nitidulidae) and Oryzaephilus mercator (L.)(Silvanidae). *Natural Product Research*, *37*(23), 4058-4062.

Fraeyman, S., Croubels, S., Devreese, M., & Antonissen, G. (2017). Emerging Fusarium and Alternaria mycotoxins:

Occurrence, toxicity and toxicokinetics. *Toxins*, *9*(7), 228.

Grzanka, M., Sobiech, Ł., Danielewicz, J., Horoszkiewicz-Janka, J., Skrzypczak, G., Sawinska, Z., ... & Świtek, S. (2021). Impact of essential oils on the development of pathogens of the Fusarium genus and germination parameters of selected crops. *Open Chemistry*, *19*(1), 884-893.

Kai, P. M., de MN Soares, F. A., da Costa, R. M., Félix, J. P., de Jesus, J. M. I., & da Cunha, M. G. (2019, May). Measurement by images of mycelial growth of fungal colonies on Petri dishes. In *2019 IEEE Canadian Conference of Electrical and Computer Engineering (CCECE)* (pp. 1-4). IEEE.

Mani-López, E., Cortés-Zavaleta, O., & López-Malo, A. (2021). A review of the methods used to determine the target site or the mechanism of action of essential oils and their components against fungi. *SN Applied Sciences*, *3*(1), 44.

Nazzaro, F., Fratianni, F., Coppola, R., & De Feo, V. (2017). Essential oils and antifungal activity. *Pharmaceuticals*, *10*(4), 86.

Nguyen, S., Truong, J. Q., & Bruning, J. B. (2021). Targeting unconventional pathways in pursuit of novel antifungals. *Frontiers in Molecular Biosciences*, *7*, 621366.

Nieva, A. S., Vilas, J. M., Gárriz, A., Maiale, S. J., Menéndez, A. B., Erban, A., ... & Ruiz, O. A. (2019). The fungal endophyte Fusarium solani provokes differential effects on the fitness of two Lotus species. *Plant Physiology and Biochemistry*, *144*, 100-10

Patiño López, H. (2023). Evalúa la actividad antimicrobiana (bactericida y antimicótica) de una formulación natural de anillos de anacardo (ACAC) frente a maíz experimentalmente contaminado con Pseudomonas sp., Clostridium sp., Escherichia sp., Fusarium sp., Rhizopus sp. y Aspergillus sp. en concentración... [Tesis de maestría, Universidad Nacional Mayor de San Marcos]. Repositorio institucional UNMSM-Tesis. https://hdl.handle.net/20.500.12672/19361 .

Perczak, A., Gwiazdowska, D., Marchwińska, K., Juś, K., Gwiazdowski, R., & Waśkiewicz, A. (2019). Antifungal activity of selected essential oils against Fusarium culmorum and F. graminearum and their secondary metabolites in wheat seeds. *Archives of microbiology*, *201*(8), 1085-1097.

Sadgrove, N. J., Padilla-González, G. F., & Phumthum, M. (2022). Fundamental chemistry of essential oils and volatile organic compounds, methods of analysis and authentication. *Plants*, *11*(6), 789.

Schiro, G., Verch, G., Grimm, V., & Müller, M. E. (2018). Alternaria and Fusarium fungi: Differences in distribution and spore deposition in a topographically heterogeneous wheat field. *Journal of Fungi*, *4*

Septiyanti, M., Mulyana, M. R., Putri, R., & Meliana, Y. (2019). Evaluation of nanoemulsion concentrate botanical fungicide from neem, citronella and eugenol oil using palm oil based surfactant. *American Journal of Physics and Applications*, *7*(1), 14.

Sharifi, R., Kiani, H., Farzaneh, M., & Ahmadzadeh, M. (2008). Chemical composition of essential oils of Iranian Pimpinella anisum L. and Foeniculum vulgare Miller and their antifungal activity against postharvest pathogens. *Journal of Essential Oil Bearing Plants*, *11*(5), 514-522.

Viera, W., Noboa, M., Bermeo, J., Báez, F., & Jackson, T. (2018). *Parámetros de calidad de cuatro tipos de formulaciones a base de Trichoderma asperellum y Purpuricillium lilacinum. Enfoque UTE 9: 145-153*.

Wickham, H., Chang, W., & Wickham, M. H. (2016). Package 'ggplot2'. *Create elegant data visualisations using the grammar of graphics. Version*, *2*(1), 1-189

Financiamiento

Este trabajo fue financiado por la Fundación Williams a través del "Programa de Fondos Complementarios para la Investigación con Impacto en el Territorio Argentino"; Proyectos de Investigación Plurianuales – CONICET PIP 11220210100903CO y Proyecto de Investigación y Desarrollo Interdisciplinario (PIDI) 2024 de la Universidad Nacional de Catamarca (UNCA).

29. Matemática Aplicada

Inflación y Déficit Fiscal: Una Aplicación de Redes Bayesianas

Autora: Gonzalez, Daniela Agostina[1]; daniela.gonzalez@unc.edu.ar
Orientadores: García-Arancibia, Rodrigo[2]; rgarcia@fce.unl.edu.ar
Descalzi, Ricardo Luis[1], ricardo.descalzi@unc.edu.ar
[1]Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Económicas.
[2]Universidad Nacional del Litoral, Instituto de Economía Aplicada Litoral.

Resumen

En este trabajo se investiga la dinámica de la inflación en Argentina (2006-2024) mediante el aprendizaje de estructuras de redes bayesianas para contrastar la teoría de inflación alta (*high inflation)* y fiscal de la inflación. Utilizando datos macroeconómicos mensuales (inflación, déficit primario, tipo de cambio, saldos reales, expectativas y sustitución de monedas), se comparan dos enfoques. Primero, un modelo estático que, si bien captura el rol del tipo de cambio como canal de transmisión, no demuestra una dependencia condicional contemporánea entre el déficit fiscal y la inflación. Segundo, un modelo dinámico aprendido con un nuevo algoritmo de selección de rezagos en dos etapas. Este modelo revela que el déficit primario actúa como la causa fundamental de la inflación con un rezago significativo de un año. Los resultados indican que el tipo de cambio en el primer rezago es el nodo central que transmite los desequilibrios al resto de la economía, evidenciando una fuerte inercia, la importancia del *pass-through* y un ciclo de retroalimentación donde la devaluación tiene consecuencias sobre el déficit.

Palabras clave: Teoría Fiscal, Inflación, Redes Bayesianas.

Introducción

Uno de los aspectos centrales en la política económica es el control de la inflación. Para ello, el entendimiento de sus causas es fundamental. En este trabajo, se emplean redes bayesianas para representar la teoría de inflación alta o *high-inflation* y para obtener un modelo de inferencia causal para Argentina, en el periodo (2006-2024).

En América Latina, los modelos económicos que explican la inflación alta y la hiperinflación, inspirados en los estudios seminales de Phillip Cagan, revelan una dinámica interconectada entre varios factores clave (Cagan, 1956). Estos modelos, demuestran cómo los desequilibrios fiscales persistentes y de gran magnitud, financiados mediante la emisión de dinero, sientan las bases para un aumento de precios (Kiguel, 1995).

El proceso se desencadena cuando el gobierno o la autoridad económica recurre a la monetización de sus grandes déficits fiscales, es decir, imprime dinero para cubrir con sus necesidades de financiamiento. Esta acción inyecta un exceso de liquidez en la economía y genera entre el público expectativas de una inflación elevada en el futuro. A medida que estas expectativas inflacionarias se consolidan, los agentes económicos anticipan que su moneda local perderá valor.

En consecuencia, se produce un efecto dominó que se transmite a los precios a través de un aumento en el tipo de cambio. Esto ocurre porque, ante la previsión de una mayor inflación, la confianza en la moneda nacional disminuye y, con ella, la demanda de saldos reales (el poder adquisitivo del dinero que la gente desea mantener). Los individuos y las empresas buscan proteger su patrimonio de la devaluación esperada, por lo que recurren a la compra de divisas más estables, como el dólar, como refugio de valor (Calvo, 1992).

Esta "fuga hacia el dólar" incrementa la demanda de la divisa extranjera y, por ende, provoca una devaluación o depreciación de la moneda local. La depreciación del tipo de cambio, a su vez, encarece los bienes y servicios importados y presiona al alza los precios internos, validando y retroalimentando las expectativas inflacionarias iniciales.

Este comportamiento es característico de las economías bimonetarias, donde el dólar y la moneda local coexisten. El fenómeno, conocido como "sustitución de monedas", es un aspecto central en estos modelos. La sustitución de monedas no solo implica el uso del dólar como reserva de valor, sino también, en muchos casos, como medio de cambio y unidad de cuenta para transacciones importantes. La literatura económica ha destacado la relevancia de este proceso, donde la disponibilidad de una moneda extranjera estable reduce la base imponible del "impuesto inflacionario" (el señoreaje), obligando al gobierno a generar

tasas de inflación aún mayores para recaudar los mismos ingresos. Esta dinámica puede conducir a una espiral inflacionaria difícil de controlar. Para una mayor profundización en la causa de monetización del déficit fiscal y teorías de inflación alta e hiperinflación revisar Gonzalez (2025).

Para modelar formalmente estas complejas interacciones y contrastarlas con la evidencia empírica, este trabajo recurre a las redes bayesianas. Las redes bayesianas son modelos gráficos probabilísticos que representan un conjunto de variables aleatorias y sus dependencias condicionales a través de un grafo acíclico dirigido (DAG). Su principal fortaleza reside en su capacidad para combinar conocimiento experto (en este caso, la teoría económica) con evidencia empírica (los datos). Este enfoque permite no solo visualizar las relaciones causales, sino también cuantificar las probabilidades e inferir estructuras causales mediante los datos, esto es, aprendizaje de estructuras.

En este contexto, el presente trabajo persigue un doble objetivo. Por un lado, formalizar la teoría inflación alta/fiscal de la inflación en un modelo de red bayesiana, sirviendo como un grafo de referencia. Por otro lado, aprender la estructura de estas relaciones a partir de datos macroeconómicos para Argentina, contrastando un modelo con variables contemporáneas y otro con variables rezagadas, que incorpora explícitamente los efectos temporales de las variables. De esta manera, se busca entender cuál es la estructura causal que mejor describe la dinámica inflacionaria bajo el enfoque de la teoría fiscal y de inflación alta.

El artículo se estructura de la siguiente manera. La sección de Materiales y Métodos detalla la fuente de los datos, el proceso de discretización y los fundamentos de las redes bayesianas. También, se presenta un nuevo algoritmo de dos etapas para el aprendizaje de estructuras con rezagos. Posteriormente, en la sección de Resultados y Discusión, se presenta primero el grafo teórico, seguido por las redes aprendidas a partir de los datos, tanto en su versión estática como dinámica, analizando sus diferencias e implicancias. Finalmente, la última sección concluye, mostrando su relevancia para el entendimiento del fenómeno inflacionario en Argentina.

Objetivos

El objetivo de este trabajo es entender la relación entre el déficit fiscal y la inflación mediante el uso de redes bayesianas. En particular, se proponen los siguientes objetivos específicos. 1) Representar un modelo simple de teoría fiscal de la inflación. 2) Aprender la estructura resultante de emplear variables relevantes del esquema teórico. 3) Emplear un algoritmo de aprendizaje de estructura con rezagos para el aprendizaje de una estructura que dé cuenta del efecto de

variables pasadas en la inflación.

Materiales y Métodos

Los Modelos Gráficos Probabilísticos constituyen una herramienta fundamental en el análisis de sistemas complejos, al integrar la teoría de grafos matemática con la teoría de la probabilidad para modelar dependencias e independencias entre un conjunto de variables aleatorias. Dentro de esta familia de modelos, las Redes Bayesianas ocupan un lugar central. Una red bayesiana se fundamenta en un Grafo Acíclico Dirigido (DAG, por sus siglas en inglés), formalmente definido como un par G = (V, E), donde V representa un conjunto de vértices (nodos) y E es un conjunto de aristas (arcos) dirigidas que los conectan. En el contexto de este trabajo, cada nodo corresponde a una variable aleatoria de interés (por ejemplo, inflación, tipo de cambio, etc.), mientras que las aristas simbolizan una relación de dependencia condicional, a menudo interpretada como una influencia causal directa (Pearl, 2009). La característica fundamental de un DAG es la ausencia de ciclos dirigidos, lo que garantiza que no es posible partir de un nodo y regresar a él siguiendo la dirección de las aristas. Esta propiedad es esencial para establecer un ordenamiento coherente entre las variables. De esta forma, resultan grafos útiles para representar teorías sobre causas de inflación, dado que la existencia de ciclos que empiecen y terminen en inflación no son de interés y la interpretación se centra en los nodos antecedentes a la inflación.

Una *red bayesiana* asocia este grafo G con una distribución de probabilidad conjunta sobre las variables. La topología del grafo impone un conjunto de supuestos de independencia condicional que permiten una factorización eficiente de dicha distribución. Concretamente, la probabilidad conjunta de un conjunto de variables $X = (X_1, \dots, X_n)$ se descompone en el producto de las probabilidades de cada variable condicionada únicamente a sus "padres" en el grafo, es decir, aquellos nodos desde los cuales parten aristas hacia ella:

$$P_G(X_1, \dots, X_n) = \prod_{(i=1)}^{n} P\,(X_i | pa_G(X_i)).$$

Donde $pa_G(X_i)$ es el conjunto de nodos padres de X_i en el grafo G. Esta factorización no solo reduce drásticamente la complejidad computacional del modelo, sino que también alinea la estructura del grafo con un modelo generador de los datos, facilitando la interpretación causal de las relaciones (Koller, 2009).

Para inferir la estructura de una red bayesiana a partir de datos observacionales, se recurre a algoritmos de aprendizaje. Uno de los más extendidos es el algoritmo heurístico de búsqueda local *Hill-Climbing* (Chickering, 1995). Este método opera en el espacio de todos los

posibles grafos y busca iterativamente la estructura que maximice una función de puntuación (score), como el Criterio de Información Bayesiano (BIC). El algoritmo parte de un grafo inicial (generalmente vacío) y en cada paso aplica la operación local (agregar, eliminar o invertir una arista) que genere la mayor ganancia en el score, hasta alcanzar un máximo local donde ninguna operación simple pueda mejorar el resultado.

A continuación, se enumeran los aspectos metodológicos del trabajo.

1. *Datos, Discretización y Representación del Conocimiento*

El primer paso metodológico consiste en la representación del conocimiento experto mediante la definición de un conjunto de variables macroeconómicas clave y la especificación de sus relaciones causales teóricas. Esta etapa inicial permite construir grafos a priori que formalizan los mecanismos de transmisión postulados por la literatura económica.

Para la validación empírica, se construyó una base de datos macroeconómicos de series temporales con frecuencia mensual. En particular los datos (y sus fuentes) son los siguientes: *INF* es la inflación, calculada con el IPC con Índice general de INDEC y entre 2007 y 2015 el promedio de IPC CIFRA-CTA en base a Direcciones Provinciales de Estadística, siguiendo a Forte (2024); DEF_prim es el superávit primario del Sector Público Nacional (Secretaría de Hacienda); TCNO es el tipo de cambio oficial, com. 3500 (Banco Central de la República Argentina); *P_esp* corresponde al promedio de expectativas de inflación (Universidad Torcuato Ditella); *M_P* son los saldos reales, el cociente entre M1 y el índice de precios (BCRA, INDEC). Por último, *CS1* corresponde a una medida de la sustitución de la moneda calculada como los depósitos en dólares sobre los depósitos totales (BCRA).

En este trabajo se emplean algoritmos de aprendizaje de redes bayesianas sobre variables categóricas, por lo que se procedió a discretizar las series temporales continuas. Se empleó el método basado en la teoría de la información de Hartemink (2001), que busca optimizar los intervalos preservando la máxima información mutua entre las variables. La variable objetivo, la inflación mensual, fue discretizada en cuatro estados o intervalos, cada uno con una interpretación económica clara:

Intervalo 1 [-0.39, 0.86]: Refleja un escenario de inflación muy baja o deflación.

Intervalo 2 (0.86, 1.3]: Corresponde a una inflación anualizada de entre 11% y 15%, superando el umbral del 10% que, según Barro (1995), comienza a tener efectos perceptibles en el crecimiento.

Intervalo 3 (1.3, 2.8]: Se alinea con el concepto de "inflación moderada" de

Dornbusch & Fischer (1993), con tasas anualizadas entre 15% y 30%.
Intervalo 4 (2.8, 25.47]: Engloba episodios de inflación alta y extremadamente alta, con tasas anuales superiores al 34%.

2. *Aprendizaje de Estructura sin Rezagos*

En esta fase se aborda el aprendizaje de la estructura de red bajo el supuesto de que las relaciones son contemporáneas. Según lo dictado por la teoría, se utilizarán las variables definidas previamente para aprender la estructura del grafo G directamente desde los datos. El algoritmo principal será Hill-Climbing. En este sentido, como novedad metodológica, se propone un sistema de votación de scores: en lugar de depender de un único criterio (como BIC), se evaluarán múltiples funciones de puntuación (por ejemplo, BDeu, K2). La estructura final será aquella que resulte más robusta a través de los distintos criterios.

3. *Aprendizaje de Estructura con Rezagos*

En el ámbito de la macroeconomía, la correcta especificación de la dinámica temporal es crucial. El trabajo pionero de Nerlove (1972) sobre la importancia de la selección de rezagos en modelos económicos subraya la necesidad de ir más allá de las especificaciones estáticas y desarrollar metodologías que puedan identificar las dependencias intertemporales de manera rigurosa.
Un aporte central metodológico es un procedimiento de dos etapas para el aprendizaje de redes bayesianas dinámicas, que extiende la implementación de Scutari & Denis (2021) para manejar de forma eficiente la selección de rezagos. El objetivo es evitar el problema de explosión combinatoria que surge al incluir indiscriminadamente múltiples rezagos para cada variable.

- Etapa 1: Selección Óptima de Rezagos en cada Nodo. En esta primera fase, se determina el rezago óptimo para cada variable de forma individual. Para cada variable X_i, se aprende una serie de redes bayesianas simples de a pares, considerando su valor contemporáneo ($X_{i,t}$) y uno de sus rezagos ($X_{i,t-l}$), donde *l* va desde 1 hasta un máximo $L_{max} = 12$. Se selecciona el rezago *l** que maximiza el score (BIC) para la red de ese par. Este proceso se repite para todas las variables de la red, resultando en un conjunto de datos reducido que solo contiene la versión contemporánea y el rezago óptimo de cada variable.
- Etapa 2: Aprendizaje de la Estructura Global con Restricciones Temporales. Utilizando el conjunto

de datos filtrado en la etapa anterior, se procede a aprender la estructura global de la red bayesiana mediante el algoritmo Hill-Climbing. Para garantizar la coherencia temporal y causal del modelo, se imponen restricciones estructurales. A saber, *Blacklists* (Listas Negras): Se prohíben arcos que violen la precedencia temporal, como aquellos que van desde una variable en el tiempo t a una en el tiempo t-l, o de un rezago menor a uno mayor.

Este enfoque en dos etapas permite una búsqueda de la estructura dinámica más efectiva y computacionalmente factible, concentrando el esfuerzo en las relaciones intertemporales más relevantes.

Resultados y Discusión

1. *Representación teórica en grafo*

El grafo que representa las visiones teóricas expresadas en la introducción se encuentra en la Figura 1. En principio, el déficit primario (*DEF_prim*) actúa como la causa principal inflacionaria. Por un lado, su financiamiento mediante la emisión de dinero (*M_P*) impacta directamente en la inflación (*INF*). Por otro lado, y de forma simultánea, el déficit alimenta las expectativas de inflación (*P_esp*), lo que lleva a los agentes a anticipar una pérdida de valor de la moneda local.

Estas expectativas son el eslabón clave que activa el mecanismo de transmisión a través del tipo de cambio (*TCNO*). La previsión de una mayor inflación provoca una devaluación de la moneda, la cual retroalimenta el ciclo de dos maneras: encarece los productos importados, presionando aún más sobre la inflación (*INF*), y acelera la sustitución de monedas (*CS1*), consolidando la preferencia por la divisa extranjera. De esta forma, el diagrama representa esta teoría fiscal, donde las expectativas y el tipo de cambio se refuerzan mutuamente para generar una inflación elevada y persistente.

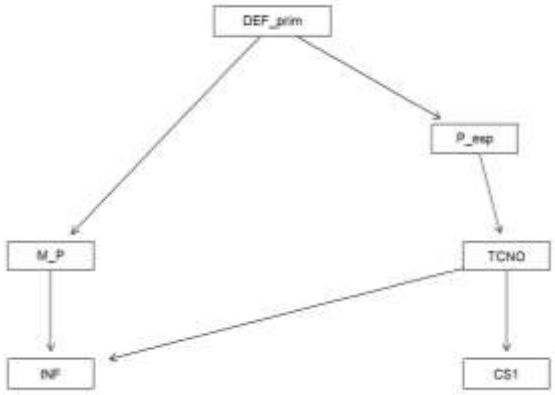


Figura 1: Representación en grafo de la teoría *high inflation/Fiscal*.

2. *Aprendizaje de la red sin rezagos*

En el aprendizaje por votación, ocho de los catorce *scores* disponibles dieron a conocer el siguiente grafo, para el caso estático, donde todos los efectos de las variables entre sí son contemporáneos

(Figura 2). En este caso, el aumento en los saldos reales tiene su impacto en el tipo de cambio, quien genera el típico efecto *pass-through* en inflación. Sin embargo, revela que no hay dependencia condicional contemporánea entre el déficit y la inflación.

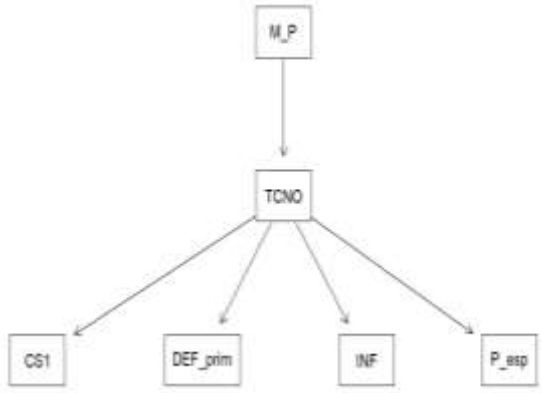


Figura 2: Red aprendida sin rezagos.

3. *Aprendizaje de la red con rezagos*

El empleo del algoritmo expresado en la tercera parte metodológica permite la inclusión de variables rezagadas al aprendizaje de estructuras. La Figura 3, introduce la dimensión temporal a través de variables rezagadas (un mes con "_L1" y doce meses con "_L12"), mostrando cómo los desequilibrios se transmiten a lo largo del tiempo. Este nos indica que la causa principal es el déficit primario de hace un año (*DEF_prim_L12*), indicando que las decisiones fiscales tienen consecuencias duraderas. Este déficit pasado influye en los saldos reales del mes anterior (*M_P_L1*), que a su vez son determinantes para los saldos reales actuales (*M_P*) y, de manera crucial, para el tipo de cambio con un rezago (*TCNO_L1*). Esta secuencia inicial establece que un desequilibrio fiscal histórico se traduce con el tiempo en una presión sobre la base monetaria y, consecuentemente, sobre el valor de la moneda.

El tipo de cambio del mes anterior (*TCNO_L1*) actúa como el nodo central desde el cual los efectos se ramifican a través de la economía. Su valor pasado influye directamente en la inflación (*INF_L1*), las expectativas (*P_esp_L1*) y la sustitución de monedas (*CS1_L1*) del primer rezago. A su vez, el grafo da indicios de inercia, donde el valor de cada una de estas variables en el mes anterior es el nodo ascendente de su valor actual (ej. *INF_L1* → *INF*). Finalmente, el arco que va del tipo de cambio actual (*TCNO*) al déficit primario actual (*DEF_prim*), sugiere que la devaluación misma puede empeorar el desequilibrio fiscal, por ejemplo, al licuar ingresos fiscales o encarecer la deuda en moneda extranjera, afectando así el ciclo inflacionario.

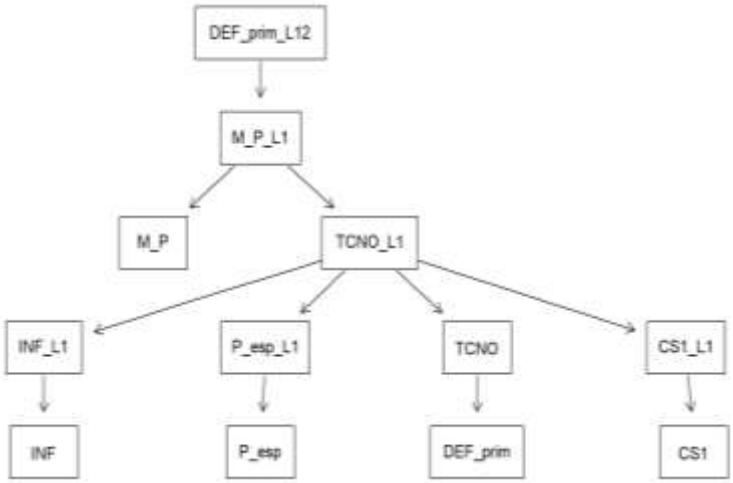


Figura 3: Red aprendida con rezagos.

Conclusiones

En este trabajo se implementó el enfoque de las redes bayesianas como herramienta para modelar y realizar inferencia causal sobre teorías económicas complejas, aplicándolas al fenómeno de la inflación alta/fiscal en Argentina. El análisis comparativo entre un modelo estático y uno dinámico arroja luz sobre la naturaleza temporal de las relaciones macroeconómicas. Mientras que la red estática no encontró una conexión directa contemporánea entre el déficit fiscal y la inflación, validando la idea de que su efecto no es inmediato, el modelo con rezagos logró identificar esta relación causal clave, revelando que el impacto del déficit primario se manifiesta con un rezago de aproximadamente un año. Este hallazgo subraya la importancia de la dimensión fiscal para capturar correctamente la dinámica inflacionaria.

El modelo con rezagos no solo posiciona al desequilibrio fiscal como el origen del proceso, sino que también identifica al tipo de cambio en el primer rezago como el principal canal de transmisión a través del cual los shocks se propagan a la inflación, las expectativas y la sustitución de monedas. Además, la estructura aprendida sugiere la existencia de inercia inflacionaria y un ciclo de retroalimentación, donde la devaluación del tipo de cambio actual contribuye a deteriorar el resultado fiscal primario. Metodológicamente, el algoritmo de aprendizaje en dos etapas ha probado ser una solución eficaz para manejar la complejidad de la selección de rezagos. En conclusión, los resultados ofrecen un respaldo empírico robusto a la teoría de inflación alta/fiscal, considerando la existencia de rezagos significativos y mecanismos de retroalimentación que perpetúan la inestabilidad.

Referencias Bibliográficas

Barro, R. J. (1995). *Inflation and Economic Growth*. NBER Working Paper No. 5326.

Cagan, P. (1956). The monetary dynamics of hyperinflation. En M. Friedman (Ed.), *Studies in the quantity theory of money* (pp. 25-117). Chicago, IL: University of Chicago Press.

Calvo, G. A., & Végh, C. A. (1992). *Currency substitution in developing*

countries: An introduction. Washington, D.C.: International Monetary Fund.

Chickering, D. M., Geiger, D., & Heckerman, D. (1995). Learning Bayesian networks: The combination of knowledge and statistical data. *Machine Learning*, 20(3), 197–243.

Dornbusch, R., & Fischer, S. (1993). Moderate Inflation. *The World Bank Economic Review*, 7(1), 1–44.

Gonzalez, D. A. (2025). ¿Qué causa la inflación? Una revisión de la literatura. *Estudios Económicos – En prensa*.

Forte, F. D. (2024). Pronóstico de inflación de corto plazo en Argentina con modelos Random Forest. *Documento de trabajo BBVA*, 24(10), 2

Hartemink, A. J. (2001). *Principled Computational Methods for the Validation and Discovery of Genetic Regulatory Networks* (Tesis doctoral). Massachusetts Institute of Technology.

Kiguel, M. A., & Neumeyer, P. A. (1995). Seigniorage and inflation: The case of Argentina. *Journal of Money, Credit and Banking*, 27(3), 672-682.

Koller, D., & Friedman, N. (2009). *Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques*. MIT Press.

Nagarajan, R., Scutari, M., & Lèbre, S. (2019*). Bayesian Networks in R: with Applications in Systems Biology* (2da ed.). Springer.

Nerlove, M. (1972). Lags in Economic Behavior. *Econometrica*, 40(2), 221–251.

Pearl, J. (2009*). Causality: Models, Reasoning, and Inference*. Cambridge University Press.

Scutari, M., & Denis, J. B. (2021). *Bayesian Networks: With Examples in R*. CRC Press.

C. Eje Ciencias Exactas – 27. Ciencia, tecnología e innovación

Nivel de aplicación de inteligencia artificial en estudiantes de la carrera de Medicina. Año 2025

Autor: Cristaldo Ramírez, Alex Miguel, email: cristaldoalex1993@gmail.com
Coautor: Villalba Salinas, Bienvenido Ariel, email: ariel.villalbas.@gmail.com
Orientadores: Blanca Elida Ramírez González; blanquela142@gmail.com Universidad Nacional de Concepción/ Facultad de Medicina; Jorge Daniel Méndez Arguello; jordani36-@outlook.com Universidad Nacional de Concepción/ Facultad de Medicina; Milciades Daniel Sánchez Denis; msanchezdenis@gmail.com

Resumen

Este estudio evalúa el nivel de aplicación de la inteligencia artificial (IA) en estudiantes de Medicina en la Universidad Nacional de Concepción en 2025. El objetivo de este estudio fue determinar el nivel de conocimiento, las áreas de aplicación y las barreras percibidas frente a la IA en estos estudiantes. Se utilizó un enfoque cuantitativo, de alcance o nivel descriptivo, de corte transversal y diseño no experimental, con una muestra de 167 estudiantes, mediante encuestas con preguntas cerradas y escala Likert. Los resultados muestran que el 65% posee conocimientos básicos a intermedios, con mayor familiaridad en diagnóstico por imágenes y apoyo clínico, mientras que áreas como la personalización de tratamientos son menos conocidas. Las principales barreras identificadas son la falta de formación especializada y recursos tecnológicos. Se concluye que, si bien existe interés y reconocimiento de la utilidad de la IA, la limitada formación y los obstáculos tecnológicos dificultan su integración efectiva, especialmente en niveles iniciales. Es fundamental implementar programas de formación específicos, mejorar infraestructura y promover una cultura académica que fomente el conocimiento y uso de la IA, contribuyendo a la formación de profesionales capaces de afrontar los desafíos de un sistema de salud cada vez más digitalizado.

Palabras Clave: aplicación, inteligencia artificial, estudiantes

Introducción

La incorporación de la inteligencia artificial (IA) al campo de la salud es sin duda uno de los cambios tecnológicos más significativos producidos en el siglo XXI, con capacidad para repensar la práctica clínica, la investigación y la educación en Medicina. Al respecto, Wu et al. (2023), menciona que una de las cualidades que tanto la medicina como la educación deben poseer es la de mantenerse vinculadas al momento actual que vive la humanidad y, en la medida de lo posible, no desconectarse del futuro para estar siempre actualizadas. Actualmente, en ambas disciplinas, ya estamos inmersos en la era de la inteligencia artificial (IA), la cual se define como la capacidad de las computadoras para recopilar, procesar y analizar grandes volúmenes de datos. En la actualidad, existen múltiples aplicaciones de la IA en procesos diagnósticos, pronósticos, investigación básica y aplicada. En 2023, las aplicaciones de IA aprobadas por la FDA superan las 500.

Este fenómeno es relevante porque a partir de su implantación es capaz de mejorar la precisión diagnóstica, personalizar la terapia y optimizar la eficacia y la eficiencia de los sistemas de salud. Pero, a nivel mundial y de forma regional, la inserción efectiva de la IA en la educación de los futuros médicos tiene todavía muchos desafíos a superar, como la falta de conocimientos, la resistencia a la inserción de mejoras en la educación y la falta de infraestructura para ello (Topol, 2019).

Sin embargo, Imran & Jawaid (2020) señalan que en ese entonces no se tiene conocimiento de ninguna universidad que haya incorporado en sus programas de ciencias básicas o clínicas cursos obligatorios de inteligencia artificial. La mayoría de los estudiantes enfrentan dificultades para entender los métodos estadísticos utilizados en la IA (Blacketer et al., 2021).

Por otro lado, Wang et al. (2021), menciona que, en el ámbito de la inteligencia artificial, el aprendizaje automático destaca como una función de gran relevancia, con aplicaciones concretas en el área de la salud, especialmente en el diagnóstico mediante imágenes médicas. Este método consiste en que las computadoras adquieren conocimientos a partir de los datos, empleando técnicas estadísticas y probabilísticas para optimizar su desempeño. En América Latina y el Caribe, según

manifestó O'Neill et al. (2020), el empleo de las tecnologías de IA en la educación médica es incipiente mientras que la inserción se ve dificultada por la falta de recursos, la escasa formación

especializada y la existencia de cuestiones culturales que obstaculizan la innovación tecnológica en la educación médica y en la práctica médica. En el caso de Paraguay el panorama es aún más precario por la escasa infraestructura tecnológica, la poca formación del personal docente y la escasa difusión de la tecnología para la medicina.

La falta de investigaciones que versen sobre el nivel de conocimiento y las actitudes o la aplicación de la inteligencia artificial en los estudiantes de Medicina paraguayos pone en manifiesto la necesidad de evaluar el nivel de preparación de los mismos en este campo con el fin de poder lograr una correcta integración de la misma en la formación académica y práctica clínica (MSPyBS, 2021).

Es importante mencionar que esta investigación se apoya, entre otros estudios internacionales, en los que avalan la necesidad de implementar la IA en los programas de estudio de Medicina para contribuir al desarrollo de competencias digitales y a un mejor desempeño en la formación clínica. Así, Kim et al. (2023) en Corea del Sur, por ejemplo, mediante un estudio cualitativo, llevaron a cabo una investigación que concluyó que la inserción de módulos de IA sirve para aumentar la comprensión de las herramientas clínicas y el pensamiento analítico, pero señalaban la necesidad de incrementar la formación en práctica y recursos. De igual manera, García López et al. (2022) en Madrid, a partir de un estudio descriptivo, y con cierta mezcla de métodos, evidenciaron que la mayoría de los estudiantes tienen limitados conocimientos sobre las aplicaciones de IA, aunque como conclusión general, mostraron una valoración positiva de su potencial, de forma más notable en los niveles avanzados de la carrera. En este sentido, estos antecedentes evidencian la necesidad de evaluar el estado actual del conocimiento y de la percepción de los estudiantes en contextos variados que, en particular.

En este contexto, el siguiente estudio se plantea evaluar el nivel de aplicación de la inteligencia artificial en los estudiantes de la carrera de Medicina de la Facultad de Medicina de la Universidad Nacional de Concepción en el año 2025. Los objetivos específicos son determinar el nivel de conocimiento que tienen los estudiantes sobre los conceptos básicos de IA, el ámbito de aplicación de la IA que utilizan como parte de su formación y el reconocimiento de las barreras para una adecuada implementación. La importancia de esta investigación radica en obtener datos que sirvan para el diseño de estrategias pedagógicas o tecnológicas

que incorporen la IA en la educación médica y preparar mejor a los profesionales en un sistema de salud cada vez más digitalizado. Además, la IA es una herramienta clave que puede transformar la práctica clínica, la investigación y la educación en salud, alineándose con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), particularmente el ODS 3 (Salud y Bienestar) y el ODS 4 que es educación de calidad. **Materiales y métodos.**

La presente investigación se fundamenta en aspectos metodológicos descriptos por Hernández Sampieri, et.al. (2014) El enfoque fue cuantitativo, con un alcance o nivel descriptivo y transversal, orientado a evaluar el nivel de aplicación de la inteligencia artificial en los estudiantes de la carrera de Medicina en el año 2015.

Población y muestra: La población estuvo constituida por 292 estudiantes de la carrera de Medicina, matriculados en diferentes cursos de la carrera. Se realizó un censo, incluyendo a todos los estudiantes, dado que la población es manejable y se buscó obtener información a partir de una muestra representativa que fue de 167 estudiantes.

Técnicas e instrumentos de recolección de datos:

Se empleó como técnica a encuesta con el instrumento que fue un cuestionario con preguntas cerradas y con valoración Likert elaborado y validado previamente, que abordó los siguientes aspectos:

1. Conocimiento sobre conceptos fundamentales de inteligencia artificial.
2. Áreas en las que los estudiantes aplican la inteligencia artificial en su formación médica.
3. Barreras percibidas para la implementación efectiva de la inteligencia artificial en su formación. El cuestionario estuvo conformado por preguntas cerradas y Likert para facilitar el análisis estadístico.

Procedimiento:

Se realizó una revisión bibliográfica para la elaboración de los ítems del cuestionario.

Se validó mediante juicio de expertos y se realizó una prueba piloto para garantizar su confiabilidad y validez.

La aplicación del cuestionario fue en línea y otros de manera presencial, con previa autorización institucional.

Los datos recopilados fueron ingresados y procesados en un software estadístico para su análisis.

Análisis de datos:

Los datos cuantitativos fueron analizados mediante estadísticas descriptivas.

Aspectos Éticos

Se garantizó la confidencialidad y anonimato de los participantes. Se solicitó su consentimiento informado, asegurando que su participación es voluntaria y que pueden retirarse en cualquier momento. El proyecto contó con la aprobación del comité de ética de investigación pertinente.

Resultados

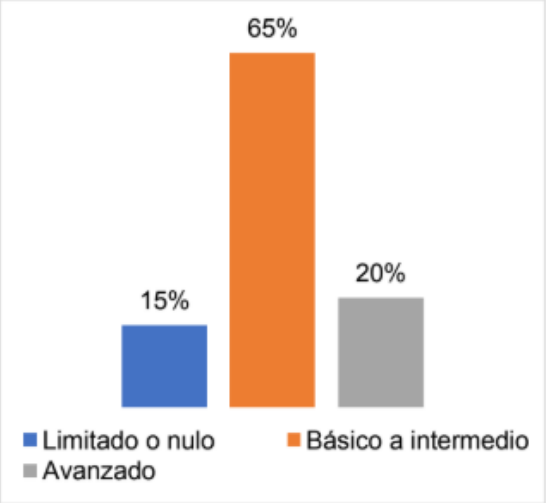


Figura 1. Grado de conocimiento sobre conceptos fundamentales de la IA De acuerdo con los datos recopilados, se observa que el 65% de los estudiantes de la carrera de Medicina poseen un nivel de conocimiento básico a intermedio sobre los conceptos fundamentales de la inteligencia artificial (IA), mientras que el 20% demuestra un conocimiento avanzado, y el 15% reporta un conocimiento limitado o nulo. La media de puntuación en la escala Likert fue de 3.2 (sobre 5), indicando un nivel moderado de comprensión general. Específicamente, las áreas mejor conocidas incluyen la definición de IA y sus aplicaciones generales, mientras que conceptos más técnicos, como algoritmos de aprendizaje automático y redes neuronales, muestran menor familiaridad.



Figura 2. Áreas en las que los estudiantes aplican la inteligencia artificial en su formación médica

El análisis revela que las principales áreas donde los estudiantes aplican o identifican la utilización de IA son:

1. Diagnóstico asistido por computador (60% de los estudiantes)
2. Análisis de imágenes médicas (55%) Sistemas de apoyo a la toma de decisiones clínicas (50%)

Por otro lado, áreas como la personalización de tratamientos y la investigación en salud digital muestran menor aplicación percibida, con un 30% y un 25% respectivamente. La mayoría de los estudiantes consideran que la IA es

relevante principalmente en el ámbito del diagnóstico por imágenes y en apoyo a decisiones clínicas.

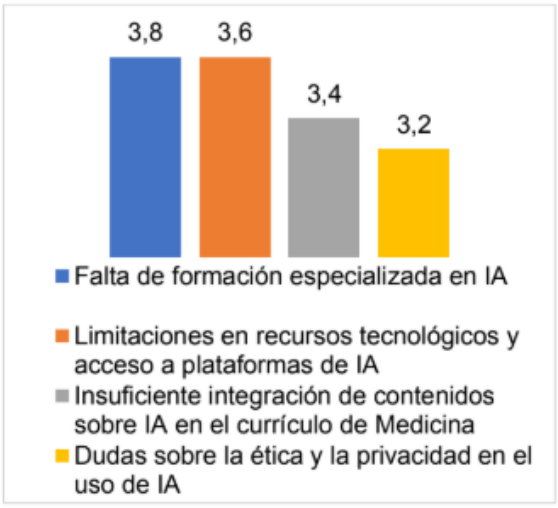


Figura 3. Barreras percibidas para la implementación efectiva de la inteligencia artificial en la formación médica. Las principales barreras identificadas, según las respuestas en la escala Likert, son:

1. Falta de formación especializada en IA (media 3.8/5)
2. Limitaciones en recursos tecnológicos y acceso a plataformas de IA (3.6/5)
3. Insuficiente integración de contenidos sobre IA en el currículo de Medicina (3.4/5)
4. Dudas sobre la ética y la privacidad en el uso de IA (3.2/5)

Asimismo, un 70% de los estudiantes considera que la falta de orientación académica y recursos adecuados limita su potencial para aplicar IA en su formación.

Notas adicionales

El análisis estadístico detallado, incluyendo pruebas de asociación y comparación de medias, reveló que los estudiantes en niveles avanzados de carrera poseen mayor conocimiento y percepción de aplicación de IA, con diferencias estadísticamente significativas ($p<0.05$).

La mayoría de los estudiantes expresaron interés en recibir mayor formación y recursos sobre IA para potenciar su competencia clínica y de investigación.

Discusión de resultados

Los resultados obtenidos en esta investigación evidencian que los estudiantes de Medicina de la Universidad Nacional de Concepción poseen un nivel moderado de conocimiento sobre los conceptos fundamentales de la inteligencia artificial (IA), con un promedio de 3.2 sobre 5 en la escala Likert. Este hallazgo se alinea con las observaciones de García-López et al. (2022), quienes reportaron que los estudiantes universitarios en contextos similares tienen conocimientos limitados sobre las aplicaciones de IA, especialmente en aspectos técnicos como algoritmos de aprendizaje automático y redes neuronales. La mayor familiaridad con definiciones generales y aplicaciones en diagnóstico por imágenes y apoyo a decisiones clínicas puede explicarse por la

exposición previa a contenidos básicos y la experiencia práctica en áreas clínicas donde estas tecnologías son más visibles y aplicadas, como se señala en la literatura internacional (Wang et al., 2021; Kim et al., 2023).

Por otro lado, las áreas menos conocidas o aplicadas, como la personalización de tratamientos y la investigación en salud digital, reflejan una brecha en la formación y en la exposición a conceptos avanzados de la IA. Esto confirma las hipótesis planteadas en antecedentes, donde se señala que la falta de formación especializada y la insuficiente integración curricular limitan la comprensión y aplicación efectiva de estas tecnologías en la educación médica (Topol, 2019; O'Neill et al., 2020). La percepción de barreras como la falta de recursos tecnológicos, la insuficiente formación y las dudas éticas también coincide con estudios previos en la región y a nivel internacional, que identifican estos obstáculos como principales impedimentos para una integración efectiva de la IA en la formación y práctica clínica (Imran & Jawaid, 2020; Blacketer et al., 2021).

En relación con los ámbitos de aplicación percibidos por los estudiantes, los resultados muestran que el diagnóstico asistido por computador y el análisis de imágenes médicas son las áreas donde existe mayor reconocimiento y aplicación percibida. Esto puede atribuirse a la presencia de estas tecnologías en la práctica clínica actual y a su mayor cobertura en la formación básica y clínica, en concordancia con las tendencias internacionales (Wang et al., 2021; García López et al., 2022). Sin embargo, la menor percepción de aplicación en áreas como la personalización de tratamientos y la investigación en salud digital revela una oportunidad para ampliar la formación en estos aspectos, alineándose con las recomendaciones de Kim et al. (2023), quienes destacan la necesidad de fortalecer la formación práctica y el conocimiento en diferentes ámbitos de la IA para mejorar la competencia del futuro profesional. Desde la perspectiva de los objetivos de desarrollo sostenible (ODS), específicamente del ODS 3 (Salud y Bienestar) y el ODS 4 (Educación de Calidad), estos resultados subrayan la importancia de fortalecer la educación en competencias digitales y tecnológicas en la formación médica. La incorporación de la IA en la educación y práctica clínica puede contribuir a mejorar la precisión diagnóstica, la eficiencia en la atención sanitaria y la equidad en el acceso a servicios de salud de calidad, aspectos fundamentales para avanzar hacia sistemas de salud más inclusivos y

sostenibles. Además, la identificación de barreras y la alta valoración del interés en recibir mayor formación en IA reflejan una voluntad de los estudiantes de adaptarse a los cambios tecnológicos, lo que puede ser aprovechado para diseñar estrategias pedagógicas que impulsen la innovación educativa y tecnológica, en línea con las metas globales de promover la educación inclusiva y de calidad (ODS 4) y fortalecer los sistemas de salud (ODS 3).

Conclusión:

Los resultados de esta investigación señalan que, los estudiantes poseen un nivel moderado de conocimiento sobre los conceptos básicos de la inteligencia artificial, existe una limitada familiaridad con los aspectos técnicos más especializados. La aplicación percibida de la IA en su formación se concentra principalmente en áreas como el diagnóstico asistido por computador, análisis de imágenes médicas y apoyo en decisiones clínicas, lo que refleja un reconocimiento de su relevancia en dichas áreas. No obstante, las barreras identificadas, como la falta de formación especializada, recursos tecnológicos insuficientes y una integración curricular limitada, dificultan una mayor incorporación y aprovechamiento de la IA en la formación médica. Además, las dudas respecto a aspectos éticos y de privacidad, junto con la percepción de recursos y orientación académica insuficientes, resaltan la necesidad de promover estrategias educativas y tecnológicas que superen estos obstáculos. La mayor percepción de aplicación y conocimiento en los niveles avanzados de la carrera indica que la integración curricular y la experiencia práctica pueden potenciar significativamente estas competencias.

De esta manera, es imperativo diseñar programas de formación específicos, mejorar la infraestructura tecnológica y promover una cultura académica que valore y entienda las potencialidades y desafíos de la IA. Esto contribuirá no solo a mejorar el desempeño académico y clínico de los futuros profesionales, sino también a enmarcarse con los objetivos de desarrollo sostenible relacionados con la salud y la educación de calidad.

“La integración de la inteligencia artificial en la formación médica no solo transforma el aprendizaje, sino que también plantea la necesidad de cultivar un pensamiento crítico y ético, para que los futuros médicos puedan utilizar estas herramientas con responsabilidad y humanidad”.

Bibliografía

Blacketer, C., Parnis, R., Franke, K. B., Wagner, M., Wang, D., Tan, Y., et al. (2021). Conocimiento y evaluación crítica del aprendizaje automático por estudiantes de medicina: un estudio multicéntrico internacional transversal. Internacional Medicine Journal, 51(9), 1539-1542. https://doi.org/10.1111/imj.15479

García-López, J., Martínez, A., & Pérez, R. (2022). Conocimientos y percepciones sobre inteligencia artificial en estudiantes de Medicina: Estudio en la Universidad Complutense de Madrid. Revista Española de Medicina Educativa, 41(2), 87–94. https://doi.org/10.1016/j.revespmede duc.2022.01.005

Hernández Sampieri, R., Fernández Collado, C., & Baptista Lucio, P. (2014). Metodología de la investigación (6ª ed.). McGraw Hill.

Imran, N., & Jawaid, M. (2020). La inteligencia artificial en la educación médica: ¿Estamos preparados para ello? Pakistan Journal of Medical Sciences, 36(5), 857–859. https://doi.org/10.12669/pjms.36.5.3042

Kim, S., Lee, H., & Park, J. (2023). Integration of artificial intelligence courses into medical education: Perceptions and challenges in Korean universities. Journal of Medical Education, 27(1), 45–53. https://doi.org/10.1234/jmeded.2023.0105

Ministerio de Salud Pública y Bienestar Social de Paraguay. (2021). Plan nacional de salud digital. https://www.mspbs.gov.py

O'Neill, O., García, J., & Martínez, A. (2020). Artificial intelligence in healthcare:Opportunities and challenges in Latin America. Journal of Medical Systems, 44, 1–9. https://doi.org/10.1007/s10916-020-1534-9

Topol, E. J. (2019). High-performance medicine: The convergence of human and artificial intelligence. Nature Medicine, 25(1), 44–56. https://doi.org/10.1038/s41591-018-0300-7

Wang, J., Zhu, H., Wang, S. H., & Zhang, Y. D. (2021). Una revisión del aprendizaje profundo en el análisis de imágenes médicas. Mobile Networks and Applications, 26(1), 351–380. https://doi.org/10.1007/s11036-020-01672-7

Wu, K., Wu, E., Theodorou, B., Liang, W., Mack, C., Glass, L., et al. (2023). Caracterización de la adopción clínica de dispositivos de inteligencia artificial médica a través de reclamaciones de seguros en Estados Unidos. NEJM AI, 1(1). https://doi.org/10.1056/AIoa2300030

28.- Productos naturales bioactivos y sus aplicaciones

Evaluación de la actividad antiprotozoaria y la toxicidad del sesquiterpeno α-Humuleno

Autor: Melgarejo, Keyla[1,2], keylamelgachavez@gmail.com
Co-autores: Alvarenga Eliana[2], elialvarengat@gmail.com; Gayozo Elvio[1], egayoso@facen.una.py; Marín Luís[1], luis.marinsfran@hotmail.com; Portillo Nilda[2], nportillo@iics.una.py
Orientadora: Yaluff, Gloria[1,2], gyaluff@iics.una.py
Universidad Nacional de Asunción / [1]Facultad de Ciencias Exactas y Naturales; [2]Instituto de Investigaciones en Ciencias de la Salud (IICS)

Resumen

La leishmaniasis visceral y la tripanosomiasis son enfermedades tropicales desatendidas causadas por los protozoarios *Leishmania infantum* y *Trypanosoma cruzi*, responsables de altas tasas de morbilidad y mortalidad a nivel mundial. Debido a las limitaciones de los tratamientos actuales, resulta fundamental la búsqueda de nuevas moléculas con potencial terapéutico contra estas parasitosis. En este trabajo se evaluó la actividad antiprotozoaria y la toxicidad del sesquiterpeno α-humuleno mediante técnicas *in vitro* e *in vivo*. Para ello, se diseñó un estudio experimental basándose en análisis cuantitativos para medir los efectos del compuesto a distintas concentraciones sobre formas promastigotes de *L. infantum* y tripomastigotes de *T. cruzi*, determinando la concentración inhibitoria media máxima (IC_{50}) y su toxicidad en *D. melanogaster* mediante la dosis letal media (DL_{50}). En la actividad leishmanicida se observó un 99 % de mortalidad de parásitos a la concentración 100 µg/mL y más del 80 % a 50 y 25 µg/mL (IC_{50} = 15,5 µg/mL). En la actividad tripanocida, sobre la cepa CL Brener se observó una mortalidad del 72 % y 56 % de tripomastigotes a 100 y 50 µg/mL (IC_{50} = 9,083 µg/mL) y del 73 % y 68 % en la cepa Y a 100 y 50 µg/mL, con una IC_{50} de 35,32 µg/mL. En *D. melanogaster* no se evidenció toxicidad a las concentraciones probadas (DL_{50}>100 µg/mL). Estos resultados evidencian una importante actividad antiprotozoaria y nula toxicidad del α-humuleno, lo que sugiere su potencial como cabeza de serie para el tratamiento de estas enfermedades desatendidas.

Palabras clave: antiprotozoario, *Drosophila melanogaster*, sesquiterpenos monocíclicos

Introducción

La leishmaniasis y la tripanosomiasis americana constituyen un conjunto de enfermedades antropozoonóticas. Ambas son patologías de transmisión vectorial, causadas por protozoarios pertenecientes a la familia Trypanosomatidae y presentan una distribución endémica en determinadas regiones del mundo, particularmente en América Latina (Ministerio de Salud Pública y Bienestar Social, 2019; Murillo-Godínez, 2018; Sánchez Casaccia et al., 2019).

La leishmaniasis visceral (LV), causada principalmente por *Leishmania infantum*, es una enfermedad sistémica que afecta principalmente a niños menores de cinco años, adultos mayores e individuos inmunocomprometidos (Organización Panamericana de la Salud, 2023). La transmisión ocurre mediante la picadura de flebótomos del género *Lutzomyia*, siendo el perro doméstico el principal reservorio en zonas urbanas de Paraguay (Alvarenga et al., 2025; Armúa-Fernández y Venzal, 2019). Las manifestaciones clínicas incluyen fiebre prolongada, pérdida de peso, hepatoesplenomegalia y adenopatías, pudiendo causar la muerte si no se trata adecuadamente (Abadías-Granado et al., 2021).

Por otro lado, la enfermedad de Chagas es causada por *Trypanosoma cruzi*, un protozoario flagelado que presenta diferentes formas morfológicas en función de su localización en el vector o en el hospedador mamífero (Galiana Roselló, 2017). La principal vía de transmisión es a través de las heces de insectos hematófagos del suborden Triatominae, conocidos como “vinchucas” o “chichã guasu”, aunque también puede transmitirse por vía congénita, transfusiones de sangre o trasplante de órganos (Sánchez Casaccia et al., 2019; Vera Cabral et al., 2020). Clínicamente, cursa con una fase aguda, generalmente asintomática, una fase latente sin síntomas y una fase crónica que puede comprometer el corazón y el tracto digestivo, siendo la cardiomiopatía chagásica una de las principales causas de muerte en esta etapa (Murillo-Godínez, 2018; Sanabria Calvo, 2016).

Ambas enfermedades son consideradas desatendidas por la Organización Panamericana de la Salud debido a su estrecha vinculación con condiciones socioeconómicas deficientes y su escasa prioridad en los sistemas de salud. En Paraguay, si bien se ha logrado interrumpir la transmisión vectorial de Chagas desde 2012, continúan registrándose casos, principalmente por transmisión congénita. En cuanto a la LV, sigue representando un problema de salud pública, con casos anuales y alta letalidad si no se trata a tiempo (Dirección General

de Vigilancia de la Salud, 2023; Organización Panamericana de la Salud, 2023).

El tratamiento convencional para estas enfermedades se basa en antimoniales pentavalentes como el antimoniato de meglumina, en el caso de la leishmaniasis, y benznidazol y nifurtimox para la enfermedad de Chagas. Sin embargo, estos tratamientos presentan efectos adversos importantes, toxicidad, tratamientos prolongados y en algunos casos, aparición de cepas resistentes (Acosta et al., 2020; Alvarenga Torres, 2021; Pradhan et al., 2022).

En este sentido, el estudio de metabolitos secundarios de origen vegetal se ha convertido en una alternativa prometedora. Entre ellos, los terpenos, particularmente los sesquiterpenos, han demostrado una variedad de propiedades farmacológicas, incluyendo actividades antiinflamatorias, antimicrobianas y antiparasitarias (Rodrigues et al., 2023; Sülsen et al., 2013). El α-humuleno, un sesquiterpeno monocíclico presente en aceites esenciales de diversas especies vegetales, ha mostrado efectos antiinflamatorios, antitumorales y antimicrobianos en diferentes modelos experimentales (Mendes de Lacerda et al., 2021). No obstante, los estudios en su forma aislada son escasos, especialmente en investigaciones sobre su potencial antiparasitario, por lo que resulta fundamental profundizar su evaluación terapéutica (Liktor-Busa et al., 2021).

Drosophila melanogaster ha sido ampliamente utilizada como modelo experimental en investigaciones biológicas debido a su alta tasa reproductiva, corto ciclo de vida, fácil mantenimiento en laboratorio y un genoma bien caracterizado (Staats et al., 2018). A pesar de las diferencias evolutivas, muchas funciones biológicas, fisiológicas y neurológicas están conservadas entre esta especie y los mamíferos. Aproximadamente el 75% de los genes asociados a enfermedades humanas presentan ortólogos funcionales en *D. melanogaster*, lo que la convierte en una herramienta valiosa para estudios de toxicología y cribado de fármacos (Pandey y Nichols, 2011). Las larvas atraviesan tres estadios antes de formar la pupa, completando el desarrollo larvario en menos de 6 días (Wipfler et al., 2013). Por ello, su utilización como modelo *in vivo* para la evaluación de compuestos bioactivos, como el α-humuleno, permite valorar su toxicidad de manera eficiente y económica.

El objetivo de este trabajo es evaluar la actividad antiprotozoaria y la toxicidad del sesquiterpeno α-humuleno mediante técnicas *in vitro* e *in vivo*, contribuyendo al desarrollo de nuevas alternativas farmacológicas más seguras y eficaces

frente a estas enfermedades desatendidas.

Objetivos

Objetivo General

Evaluar la actividad antiprotozoaria y la toxicidad del sesquiterpeno α-humuleno mediante técnicas *in vitro* e *in vivo*.

Objetivos Específicos

- Determinar el efecto leishmanicida del compuesto sobre promastigotes de cepas de referencia de *Leishmania infantum*.
- Establecer la actividad tripanocida del sesquiterpeno en tripomastigotes de dos cepas de referencia de *Trypanosoma cruzi*.
- Analizar la toxicidad del compuesto utilizando *Drosophila melanogaster* como modelo biológico.

Materiales y Métodos

Preparación de solución madre

El compuesto α-humuleno (PubChem CID 5281520) fue adquirido de la empresa PhytoLab (2022) (Vestenbergsgreuth, Alemania). Se pesó 20 mg del compuesto utilizando una balanza analítica y se disolvió con 1000 µL de dimetilsulfóxido (DMSO), luego se realizó las distintas diluciones con DMSO al 1 % y 0,5 %. Bajo condiciones de esterilidad, se etiquetaron tubos eppendorf para la preparación de una disolución seriada. A esta solución se le añadió medio nutritivo o solución fisiológica (PBS) para ajustar las concentraciones de trabajo a 100, 50, 25 y 12,5 µg/mL.

Evaluación de la actividad leishmanicida del compuesto

Para establecer el efecto antileishmania del sesquiterpeno α-humuleno sobre las formas promastigotes del parásito, se utilizó la cepa *Leishmania* (*L.*) *infantum* (MHOM/BR/1972/LD) obtenida del Departamento de Medicina Tropical (IICS). La cepa se mantuvo mediante pasajes sucesivos en medio de cultivo Schneider's. A partir de la solución madre, se tomó 10 µL y se llevó a 1000 µL con medio de cultivo Schneider's sin Suero Fetal Bovino (SFB), obteniéndose así una concentración de 200 µg/mL y un porcentaje de DMSO al 1%. Esta solución se utilizó como primera solución de trabajo, a partir del cual se realizaron diferentes disoluciones: 100 µg/mL, 100 µg/mL, 50 µg/mL, 25 µg/mL, 12,5 µg/mL, 6,25 µg/mL, 3,125 µg/mL y 1,5625 µg/mL, siguiendo la dilución seriada. Para la solución de control DMSO, se tomó 5 µL del concentrado y se disolvió con 995 µL de Schneider's sin SFB.

El cribado farmacológico del α-humuleno frente a las formas promastogites se realizó de acuerdo con el protocolo estandarizado en el laboratorio del Departamento de Medicina Tropical. El cultivo de parásitos obtenido se expuso a las diferentes

concentraciones del compuesto. Se incluyeron los respectivos controles y se realizaron todas las pruebas por triplicado en tres experimentos independientes. La suspensión homogénea de promastigotes en fase exponencial de crecimiento fue ajustado a una concentración de $3x10^6$ parásitos/pocillo y se distribuyó en una microplaca de 96 pocillos, donde cada pocillo fue tratado con las distintas concentraciones preparadas, obteniendo un volumen final de 100 µL por cada pocillo. Se incluyó un control negativo utilizando 50 µL del cultivo de parásitos y 50 µL del medio Schneider's sin SFB y el control de diluyente, ambos por triplicado. Todo el proceso se realizó bajo esterilidad en la cabina de flujo laminar. Se incubo en estufa a 26°C durante 72 horas. Pasado el tiempo, se observó a los parásitos utilizando un microscopio binocular. La evaluación se realizó mediante recuento óptico de parásitos en cámara de Neubauer y los resultados se expresaron en valores de porcentajes de mortalidad en una tabla y gráficos en Excel (2016).

Evaluación de la actividad tripanocida del compuesto

Para el estudio *in vitro* del compuesto α-humuleno frente a las formas tripomastigotes sanguíneas de *Trypanosoma cruzi*, se emplearon las cepas CL Brener e Y, obtenidas mediante punción cardíaca de un modelo murino BALB/c infectado, el día en que la parasitemia alcanzó su pico máximo de crecimiento. Las cepas y los ratones utilizados para su mantenimiento fueron proporcionados por el Departamento de Medicina Tropical y el Bioterio (IICS), respectivamente.

De la solución madre se tomó 50 µL y se agregó 950 µL PBS para una concentración inicial de 1000 µg/mL. A partir de esta solución, se realizaron diluciones seriadas para obtener las concentraciones 500, 250 y 125 µg/mL. Es importante destacar que, al depositar 10 µL de cada concentración en los pocillos de la microplaca, se redujo proporcionalmente una unidad de medida de las concentraciones, quedando en la microplaca 100, 50, 25 y 12,5 µg/mL. Para el control DMSO, se tomó 50 µL de una solución de DMSO y se disolvió en 950 µL de PBS, quedando al 0,5 % en la microplaca. Para establecer el efecto tripanocida del sesquiterpeno, se trató la sangre extraída de ratones infectados con diferentes concentraciones del compuesto, siguiendo el protocolo estandarizado por el Departamento de Medicina Tropical. Se incluyeron los controles correspondientes y todas las pruebas se llevaron a cabo por triplicado en tres experimentos aislados.

Para la obtención de tripomastigotes sanguíneos, los ratones infectados fueron sacrificados mediante eutanasia con un agente químico inhalatorio, específicamente CO_2, luego se realizó la

punción cardíaca, utilizando citrato de sodio al 3,8 % como anticoagulante. Se sembró 90 µL de la sangre en una microplaca de 96 pocillos, el cual contenía una concentración de $4x10^6$ parásitos/mL y en cada pocillo se adicionó 10 µL de cada concentración preparada, obteniendo un volumen final de 100 µL por cada pocillo. Se incluyó los respectivos controles, 90 µL de sangre sin tratar y el control DMSO, 90 µL de sangre y 10 µL de la solución de DMSO. La microplaca fue incubada en la heladera durante 24 horas a 4 ºC.

El recuento de parásitos se realizó por observación directa al microscopio óptico, en una lámina se agregó 5 µL y se cubrió con una laminilla, se contaron los parásitos presentes en 50 campos tomados al azar utilizando un aumento de 400x. Los resultados se expresaron en valores de porcentajes de mortalidad en una tabla en Excel (2016).

Ensayo de toxicidad en *D. melanogaster*

Se diluyó el compuesto α-humuleno en DMSO y se agregó PBS para ajustar las concentraciones iguales a 100, 50, 25 y 12,5 µg/mL. A estas concentraciones se sometieron 100 larvas de tercer instar obtenidas mediante la cruza de hembras (cepa *flr*^{3}*/In(3LR)TM3*, *ri p*^{p}*sep l(3)89Aa bx*^{34e} y *Bd*^{S}) y machos (cepa *mwh*/*mwh*) de *Drosophila melanogaster* en proporción 2:1.

Se evaluaron las cuatro concentraciones del compuesto α-humuleno para ensayos de toxicidad. Se utilizaron de cada concentración preparada, soluciones de 5 mL para rehidratar 1,5 g de puré de papas. En estas muestras se colocaron las 100 larvas de tercer estadio de la cruza realizada durante 72 horas. La dosis letal media (DL_{50}) se estimó con el análisis Probit basado en el porcentaje de mortalidad y la curva de concentración transformado a una escala logarítmica (Finney, 1952; Mancuello et al., 2024).

Análisis de datos

Con los datos obtenidos se calculó la concentración inhibitoria media máxima (IC_{50}), el cual consiste en una medida cuantitativa que determina la concentración necesaria de una sustancia para inhibir el 50 % de un proceso o componente biológico específico *in vitro* (Alvarenga Torres, 2021), mediante una curva de regresión de mortalidad, utilizando el método estadístico de Probit. La curva dosis-respuesta se obtuvo graficando el porcentaje de mortalidad frente a las distintas concentraciones.

Las diferencias entre los grupos experimentales se evaluaron mediante la prueba de análisis de varianza (ANOVA) de una sola vía, seguido de un análisis post hoc con la prueba de comparaciones múltiples de Dunnett en relación con el control negativo, utilizando el software

GraphPad Prism versión 6.01 para Windows. Las diferencias fueron consideradas estadísticamente significativas a $p \leq 0,05$.

Asuntos éticos

Todos los procedimientos que requirieron la utilización de animales siguieron las recomendaciones establecidas por la Guía de Principios Internacionales para Investigaciones Biomédicas que envuelven animales, elaborado por el Consejo de Organizaciones Internacionales de Ciencias Médicas (CIOMS-ICLAS). Se empleó la cantidad mínima posible de animales y se tomaron todas las precauciones para evitar sufrimientos innecesarios a los mismos. Este trabajo de investigación, en el marco del proyecto PINV01-318, fue aprobado por el comité de ética en investigación del Instituto de Investigaciones en Ciencias de la Salud de la Universidad Nacional de Asunción, bajo el código P26/2023.

Resultados y discusión

Evaluación de la actividad leishmanicida del compuesto

En la Figura 1 se observa la actividad leishmanicida de las distintas concentraciones del sesquiterpeno α-humuleno. La dosis de 100 µg/mL presentó una alta efectividad, con un porcentaje de mortalidad del 99 %, seguido de las concentraciones de 50 y 25 µg/mL, donde la mortalidad fue del 84 % y 83 %, respectivamente. Las concentraciones de 12,5; 6,25 y 3,125 µg/mL presentaron un porcentaje de mortalidad mayor e igual al 30 % y la concentración más baja (1,5625 µg/mL) no mostró una reducción significativa de parásitos, representado por el 8,81 % de mortalidad. La concentración inhibitoria media máxima (IC_{50}) determinada para el compuesto es de 15,5 µg/mL.

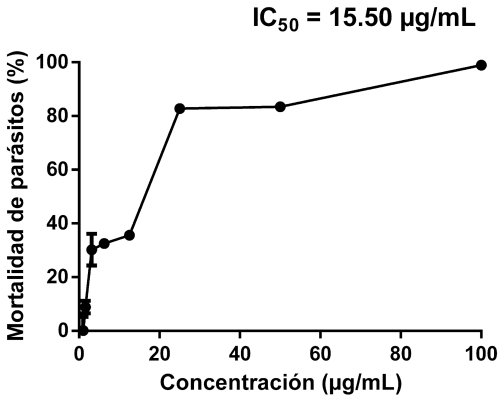


Figura 1. Efecto *in vitro* del α-humuleno sobre promastigotes de *L. infantum*. Posterior a 72 h de exposición, se calculó el porcentaje de mortalidad a las diferentes concentraciones del compuesto. Se calculó la IC_{50} con la curva de regresión de mortalidad mediante el método estadístico de Probit.

Para verificar si las concentraciones de α-humuleno difierían significativamente del control negativo, se llevó a cabo un ANOVA de una vía, considerando como factores las distintas concentraciones de α-humuleno y el control. Los resultados, representados en la Figura 2 para las

distintas concentraciones y el control, muestran una diferencia significativa en la mortalidad de los parásitos ($p<0,05$). Para el análisis entre los grupos experimentales, la prueba post hoc de Dunnett reveló diferencias estadísticamente significativas en el porcentaje de mortalidad de promastigotes de *L. infantum* para las dosis de 100, 50, 25, 12,5, 6,25 y 3,125 µg/mL frente al control negativo ($p < 0,05$). En cambio, la dosis más baja (1,5625 µg/mL) no mostró diferencias significativas ($p > 0,05$).

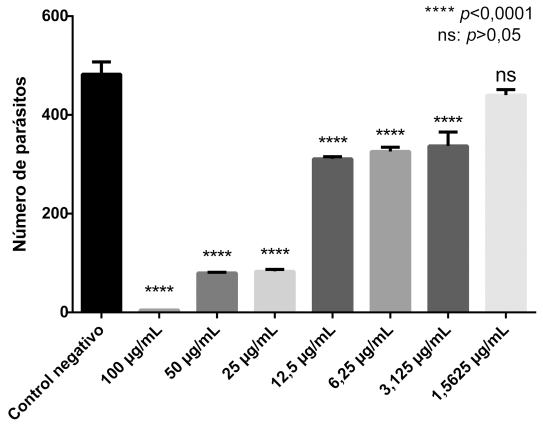


Figura 2. Número de promastigotes de *L. infantum* presentes en las diferentes concentraciones testadas posterior a 72 h de exposición. El control negativo corresponde a los promastigotes de *L. infantum* sin tratar. Los datos se expresan como promedios más la desviación estándar (DE) en las pruebas por triplicado. ****: Diferencia significativa en relación con el control negativo de acuerdo con la prueba de Dunnett ($p<0,05$). ns: no significativo.

Evaluación de la actividad tripanocida del compuesto

En la Figura 3 se muestra el porcentaje de mortalidad de los parásitos de la cepa CL Brener expuestos a las diferentes dosis probadas. La concentración de 100 µg/mL presentó mayor eficacia, con 72 % de mortalidad de parásitos, mientras que la concentración de 50 µg/mL, mostró un porcentaje de mortalidad del 56 %. Las dosis más bajas, 25 y 12,5 µg/mL, estuvieron representadas por 46 % y 45 % de mortalidad de parásitos. La concentración inhibitoria mínima estimada del compuesto que produjo una disminución del 50 % (IC_{50}) en la viabilidad del parásito, fue 9,083 µg/mL.

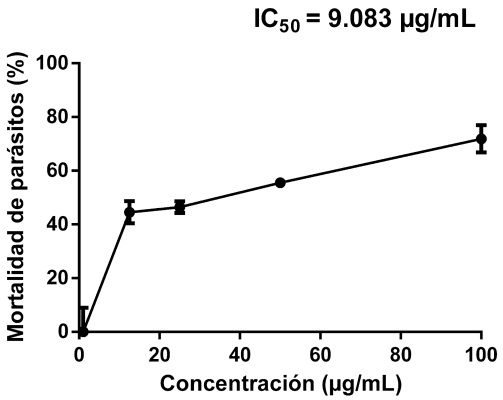


Figura 3. Efecto *in vitro* del α-humuleno sobre tripomastigotes de *T. cruzi* de la cepa CL Brener. Posterior a 24 h de exposición, se calculó el porcentaje de mortalidad a las diferentes concentraciones del compuesto. Se calculó la IC_{50} con la curva de regresión de mortalidad mediante el método estadístico de Probit.

Se determinó la existencia de diferencias entre los grupos experimentales mediante un análisis ANOVA de una sola vía. Los resultados (Figura 4) indican una diferencia estadísticamente significativa en la mortalidad de los parásitos ($p<0,05$) entre las concentraciones analizadas con respecto al control negativo. Asimismo, la prueba post hoc de Dunnett comprobó que el porcentaje de mortalidad de tripomastigotes sanguíneos de *T. cruzi*, en todas las dosis del compuesto, es significativamente diferente al del control negativo ($p<0,05$).

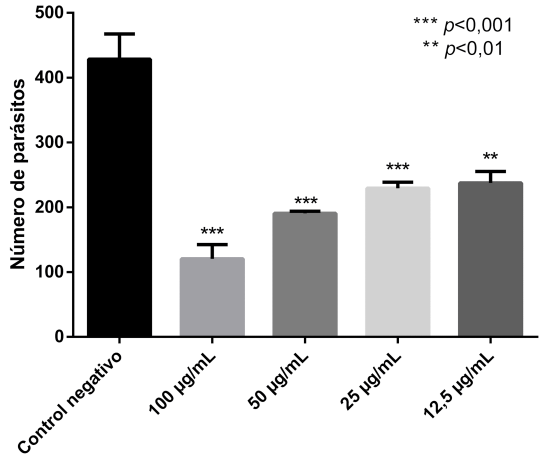


Figura 4. Número de tripomastigotes de *T. cruzi* de la cepa CL Brener presentes en las diferentes concentraciones testadas posterior a 24 h de exposición. El control negativo corresponde a los tripomastigotes de *T. cruzi* sin tratar. Los datos se expresan como promedios más la desviación estándar (DE) en las pruebas por triplicado. ***: Diferencia significativa en relación con el control negativo de acuerdo con la prueba de Dunnett ($p<0,05$).

En relación con la Cepa Y, se consiguieron resultados similares a los obtenidos con la cepa CL Brener. En la Figura 5 se ilustra el porcentaje de mortalidad de los tripomastigotes sanguíneos después de 24 horas de exposición a las diferentes concentraciones del compuesto α-humuleno. Se observó una mortalidad del 73 % de parásitos en la concentración de 100 µg/mL, siendo la más efectiva, seguido de la concentración 50 µg/mL, que presentó un porcentaje de mortalidad del 68 %. La dosis de 25 µg/mL mostró una actividad moderada, con 39 % de mortalidad y la dosis de 12,5 µg/mL presentó una actividad baja, con 19 % de mortalidad de parásitos. La concentración inhibitoria semimáxima (IC_{50}) calculada fue de 35,32 µg/mL. Así también, se observó diferencia estadísticamente significativa entre las concentraciones utilizadas y el control ($p<0,05$) (Figura 6). El porcentaje de mortalidad de tripomastigotes fue significativamente diferente con todas las concentraciones testadas, comparado con el control negativo ($p<0,05$).

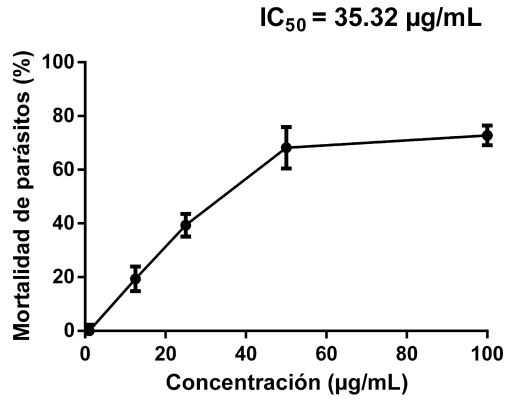


Figura 5. Efecto *in vitro* del α-humuleno sobre tripomastigotes de T. cruzi de la cepa Y (épsilon). Posterior a 24 h de exposición, se calculó el porcentaje de mortalidad a las diferentes concentraciones del compuesto. Se calculó la IC_{50} con la curva de regresión de mortalidad mediante el método estadístico de Probit.

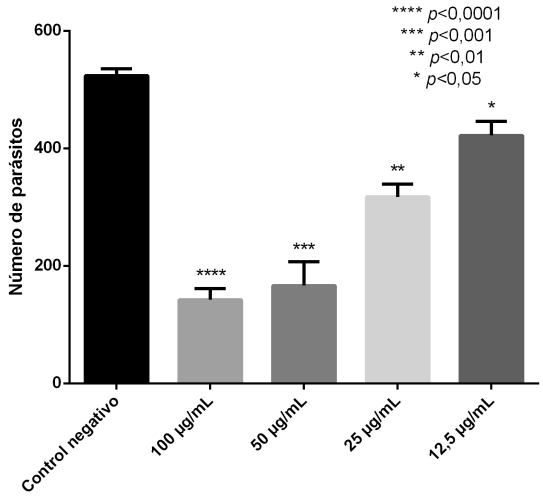


Figura 6. Número de tripomastigotes de *T. cruzi* de la cepa Y (épsilon) presentes en las diferentes concentraciones testadas posterior a 24 h de exposición. El control negativo corresponde a los tripomastigotes de *T. cruzi* sin tratar. Los datos se expresan como promedios más la desviación estándar (DE) en las pruebas por triplicado. *: Diferencia significativa en relación con el control negativo de acuerdo con la prueba de Dunnett ($p<0,05$).

Ensayo de toxicidad en *D. melanogaster*

La Figura 7 muestra el porcentaje de supervivencia de moscas adultas tras la exposición de 100 larvas de *D. melanogaster* a las concentraciones 100, 50, 25 y 12,5 µg/mL, el cual se mantuvo por encima del 90 % en todas las dosis evaluadas. Por el contrario, los porcentajes de mortalidad no fueron superiores al 10 %. La dosis letal media (DL_{50}) se estima que se encontraría sobre la dosis más alta ensayada (100 µg/mL).

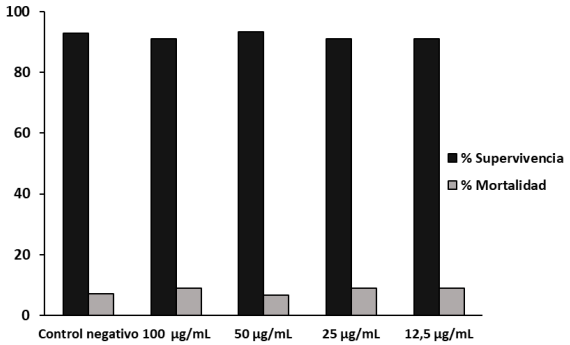


Figura 7. Comparación del porcentaje de supervivencia versus mortalidad de *D. melanogaster* expuestos a distintas concentraciones del compuesto.

Las especies *Leishmania infantum* y *Trypanosoma cruzi* son los agentes

etiológicos de la leishmaniasis visceral y la enfermedad de Chagas, respectivamente. Ambas parasitosis se encuentran dentro del grupo de enfermedades tropicales desatendidas y son responsables de altas tasas de morbilidad y mortalidad a nivel mundial (Galiana Roselló, 2017).

La terapia actual utilizada contra estas parasitosis presenta limitaciones, como la baja eficacia, la presencia de intolerancias o toxicidad como efecto secundario y la aparición de resistencia por los fármacos disponibles (Steverding et al., 2020). Los sesquiterpenos son metabolitos secundarios de origen vegetal muy estudiados, que han demostrado importantes actividades biológicas con efectos farmacológicos, como antivirales, antiinflamatorias y antiprotozoarias (Han et al., 2024; Sülsen et al., 2013). En particular, el α-humuleno, en conjunto con otro sesquiterpeno, ha demostrado una actividad antiparasitaria con efecto esquistosomicida (de Oliveira et al., 2017), lo que sugiere que podría presentar efectos similares frente a otros parásitos, por lo que no se puede descartar su actividad leishmanicida y tripanocida.

En este trabajo se evaluó la actividad antiprotozoaria y la toxicidad del sesquiterpeno α-humuleno, comprobando el efecto leishmanicida y tripanocida sobre cepas de referencia, así como también, comprobando la toxicidad sobre *Drosophila melanogaster*.

En la Figura 1 se presentó el ensayo de evaluación de la actividad leishmanicida y se observó que el compuesto α-humuleno produjo entre 99 % y 80 % de mortalidad de parásitos en las dosis más altas probadas comparando con el control negativo, con una IC50 de 15,5 µg/mL. La alta eficacia de este sesquiterpeno se evidencia en el trabajo realizado por Rodrigues et al. (2023), en el cual destacan la notable efectividad de los sesquiterpenos para el tratamiento de la leishmaniasis, además, mencionan que estos compuestos muestran una actividad inmunomoduladora contra *L. infantum*.

Al compuesto β-cariofileno, un isómero del α-humuleno, se le atribuyen propiedades antileishmania y presenta resultados similares en cuanto a la inhibición de promastigotes de *L. amazonensis*, con un 68,3 % a la concentración de 50 µg/mL, aunque, no se conoce el mecanismo de acción de este compuesto sobre los parásitos (Soares et al., 2013). Otro sesquiterpeno, el (-)-α-bisabolol, mostró actividad frente a promastigotes de *L. infantum* (IC_{50} = 4,45 µg/mL) y se demostró su capacidad de inducir un mecanismo de muerte celular programada a la forma promastigote del parásito, además de provocar la externalización de fosfatidilserina, un marcador de apoptosis (Araújo et al., 2022; Hajaji et al., 2018). Por lo tanto, es posible atribuirle al α-humuleno un

mecanismo de acción similar, sin embargo, se requieren de estudios adicionales para evaluar su modo de acción.

Si bien, la IC_{50} del fármaco de referencia sobre la leishmaniasis visceral, Anfotericina B, es igual a 0,8 µg/mL y posee una gran eficacia contra esta parasitosis, los graves efectos secundarios que presenta cuando se administra a dosis terapéuticas, como nefrotoxicidad, llevan a la búsqueda de otros tratamientos debido a su rechazo como tratamiento de primera elección (Alvarenga Torres, 2021; Palma et al., 2018).

En cuanto al ensayo de evaluación de la actividad tripanocida, en la Figura 3 se observó que el sesquiterpeno α-humuleno redujo en un 72 % los tripomastigotes sanguíneos de la cepa CL Brener en la concentración más alta testada. Para la cepa Y, en la Figura 5 se observó una mortalidad del 73 % de parásitos, también en la concentración más alta testada, ambos comparados con el control negativo. La IC_{50} calculada para CL Brener fue de 9,083 µg/mL y para Y, fue de 35,32 µg/mL.

Un estudio realizado con trans-cariofileno (sinónimo de β-cariofileno) sobre epimastigotes de *Trypanosoma cruzi* cepa Y, reportó una mortalidad del 99,4 % de parásitos a una concentración de 100 µg/mL (Martínez-Díaz et al., 2015). Por otra parte, lactonas sesquiterpénicas, santhemoidina C y 2-oxo-8-desoxiligustrina, mostraron resultados parecidos a los obtenidos, redujeron el número de tripomastigotes sanguíneos en función de la concentración utilizada y poseen una actividad moderada sobre estas formas (IC_{50} = 23,58 µg/mL y IC_{50} = 6,39 µg/mL) (Borgo et al., 2023).

Asimismo, se observaron alteraciones estructurales causadas por el compuesto trans-cariofileno, resultando en una desorganización total del kinetoplasto en la forma epimastigote. Es importante resaltar que la forma no reproductiva de *T. cruzi*, el tripomastigote, presenta una mayor resistencia a los efectos tóxicos de diversos compuestos. Por el contrario, las formas intracelulares, como los amastigotes, son más susceptibles (Izumi et al., 2012). Por lo tanto, no puede descartarse que la actividad significativa observada sobre las formas resistentes a las concentraciones evaluadas, para ambas cepas, refleje también una actividad eficaz contra las formas susceptibles.

Las distintas cepas de *T. cruzi* presentan un amplio rango de respuesta frente a los fármacos con actividad tripanocida. La cepa CL Brener es considerada sensible, mientras que la cepa Y es medianamente resistente, a los fármacos de referencia benznidazol y

nifurtimox (Acosta et al., 2020). Esto se refleja en la variación de valores de IC_{50} obtenidos para ambas cepas, siendo la cepa CL Brener más susceptible al α-humuleno, que la cepa Y.

El benznidazol posee actividad sobre las formas tripomastigotes, con una IC_{50} de 2,5 µg/mL sobre la cepa CL Brener y una $IC_{50} \geq 15$ µg/mL sobre Y (Musikant et al., 2019), pero se han asociado efectos adversos graves al mismo, como neutropenia, anorexia, entre otros (Galiana Roselló, 2017). A pesar de que los valores obtenidos para ambas cepas son más elevados, no se puede descartar su potencial actividad contra estos parásitos, así como también, es importante realizar un cribado más amplio que incluya las cepas circulantes en el país.

Con respecto a la toxicidad del compuesto, en la Figura 7 se observó una alta supervivencia de *D. melanogaster* expuestas a distintas concentraciones del α-humuleno, siendo superior al 90 %, por lo que se puede descartar signos de toxicidad a estas concentraciones, además de estimar un $DL_{50} > 100$ µg/mL. Estos resultados coinciden con los reportados por de Oliveira et al. (2019), quienes observaron una mortalidad del 10 % de moscas a concentraciones entre 0,12 y 0,48 g/mL, tras la exposición al aceite esencial de hojas de *Lantana montevidensis*, con los sesquiterpenos germacreno D y β-cariofileno como componentes principales. De igual manera, otro estudio demostró la baja toxicidad que pueden poseer los sesquiterpenos sobre la mosca de la fruta, como (E)-β-farneseno y α-bisabolol óxido A, principales compuestos del aceite esencial de la manzanilla (Satyal et al., 2015).

Conclusiones

Este estudio evaluó la actividad antiprotozoaria del sesquiterpeno α-humuleno, obteniéndose resultados prometedores en la eliminación de parásitos de *Leishmania infantum* en sus formas promastigotes y de *Trypanosoma cruzi* en sus formas tripomastigotes. Los ensayos realizados demostraron que el α-humuleno actúa de manera eficaz contra estos parásitos y no presenta toxicidad sobre modelos de *D. melanogaster*.

De igual manera, se observaron bajos valores de IC_{50} para los efectos leishmanicida como tripanocida, especialmente frente a la cepa CL Brener de *T. cruzi*, lo que indica que se requieren bajas concentraciones del compuesto para lograr una actividad significativa contra estos parásitos. En conjunto, estos hallazgos posicionan al α-humuleno como cabeza de serie para el desarrollo de nuevos tratamientos dirigidos a estas enfermedades tropicales desatendidas.

Es fundamental continuar con estudios preclínicos con ensayos en líneas celulares, así como en modelos *in vivo* murinos que permitan caracterizar con mayor precisión su eficacia y permitan validar su viabilidad.

Bibliografía

Abadías-Granado, I., Diago, A., Cerro, P. A., Palma-Ruiz, A. M., y Gilaberte, Y. (2021). Leishmaniasis cutánea y mucocutánea. *Actas Dermo-Sifiliográficas*, *112*(7), 601–618. https://doi.org/10.1016/j.ad.2021.02.008

Acosta, N., Yaluff, G., López, E., Bobadilla, C., Ramírez, A., Fernández, I., y Escobar, P. (2020). Sensibilidad in vitro a benznidazol, nifurtimox y posaconazol de cepas de Trypanosoma cruzi de Paraguay. *Biomédica*, *40*(4), 749–763. https://doi.org/10.7705/biomedica.5187

Alvarenga, E., Yaluff, G., Galeano, M. E., y Samudio, M. (2025). Análisis epidemiológico de la leishmaniasis visceral y tegumentaria en Paraguay de 2017 a 2020. *Medicina Clínica y Social*, *9*, e514. https://doi.org/10.52379/MCS.V9.514

Alvarenga Torres, E. A. (2021). *Evaluación de la actividad antiprotozoaria sobre Leishmania infantum de extractos metanólicos de Solanum sisymbriifolium y Solanum americanum* [Tesis de maestría]. Facultad de Ciencias Químicas.

Araújo, I. A. C., De Paula, R. C., Alves, C. L., Faria, K. F., Oliveira, M. M. de, Takarada, G. G. M., Dias, E. M. F. A., Oliveira, A. B. de, y Silva, S. M. da. (2022). In vitro efficacy of isoflavonoids and terpenes against Leishmania (Leishmania) infantum and L. amazonensis. *Experimental Parasitology*, *242*, 108383. https://doi.org/10.1016/J.EXPPARA.2022.108383

Armúa-Fernández, M., y Venzal, J. (2019). Leishmaniosis: breve puesta al día. *Veterinaria (Montevideo)*, *55*(211–5), 29–36. https://doi.org/10.29155/vet.55.211.5

Borgo, J., Elso, O. G., Gomez, J., Coll, M., Catalán, C. A. N., Mucci, J., Alvarez, G., Randall, L. M., Barrera, P., Malchiodi, E. L., Bivona, A. E., Martini, M. F., y Sülsen, V. P. (2023). Anti-Trypanosoma cruzi Properties of Sesquiterpene Lactones Isolated from Stevia spp.: In Vitro and In Silico Studies. *Pharmaceutics*,

15(2), 647. https://doi.org/https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15020647

De Oliveira, M. R. C., Barros, L. M., Duarte, A. E., De Lima Silva, M. G., Da Silva, B. A. F., Pereira Bezerra, A. O. B., Oliveira Tintino, C. D. M., De Oliveira, V. A. P., Boligon, A. A., Kamdem, J. P., Melo Coutinho, H. D., y De Menezes, I. R. A. (2019). GC-MS Chemical Characterization and In Vitro Evaluation of Antioxidant and Toxic Effects Using Drosophila melanogaster Model of the Essential Oil of Lantana montevidensis (Spreng) Briq. *Medicina*, *55*(5), 194. https://doi.org/10.3390/medicina55050194

De Oliveira, R. N., Rodrigues dos Santos, K., Mendes, T. M. F., Garcia, V. L., Santos Oliveira, A. S., De Lourdes Sierpe Jeraldo, V., y Allegretti, S. M. (2017). Sesquiterpenes evaluation on Schistosoma mansoni: Survival, excretory system and membrane integrity. *Biomedicine & Pharmacotherapy*, *90*, 813–820. https://doi.org/10.1016/j.biopha.2017.04.058

Dirección General de Vigilancia de la Salud. (2023). *Chagas - DGVS*. Programa Nacional de Enfermedades Vectoriales. https://dgvs.mspbs.gov.py/programa-nacional-de-enfermedades-vectoriales/chagas/

Finney, D. J. (1952). Probit analysis: A statistical treatment of the sigmoid response curve. In *Probit analysis: A statistical treatment of the sigmoid response curve, 2nd ed.* (2nd ed.). Cambridge University Press.

Galiana Roselló, C. (2017). *Diseño, Síntesis y Evaluación de Nuevos Derivados de Sulfonamidas y Poliaminas de Acción Antiparasitaria y Antitumoral* [Tesis doctoral]. Universidad CEU Cardenal Herrera.

Hajaji, S., Sifaoui, I., López-Arencibia, A., Reyes-Batlle, M., Jiménez, I. A., Bazzocchi, I. L., Valladares, B., Akkari, H., Lorenzo-Morales, J., y Piñero, J. E. (2018). Leishmanicidal activity of α-bisabolol from Tunisian chamomile essential oil. *Parasitology Research*, *117*(9), 2855–2867. https://doi.org/10.1007/S00436-018-5975-7/METRICS

Han, J., Wu, B., y Wang, D. (2024). The potential efficacy of sesquiterpenes and their derivatives in treating rheumatoid arthritis: A systematic review. *International Immunopharmacology*, *141*, 112946.

https://doi.org/10.1016/J.INTIMP.2024.112946

Izumi, E., Ueda-Nakamura, T., Veiga, V. F., Pinto, A. C., y Nakamura, C. V. (2012). Terpenes from Copaifera Demonstrated in vitro Antiparasitic and Synergic Activity. *J. Med. Chem.*, *55*(7), 2994–3001. https://doi.org/https://doi.org/10.1021/jm201451h

Liktor-Busa, E., Keresztes, A., Lavigne, J., Streicher, J. M., y Largent-Milnes, T. M. (2021). Analgesic Potential of Terpenes Derived from Cannabis sativa. *Pharmacological Reviews*, *73*(4), 1269–1297. https://doi.org/10.1124/PHARMREV.120.000046

Mancuello, C., Maubet, Y., Cristaldo, E., Veloso, B., Robledo, G., Traba, A., Marin, L., Gayozo, E., y Campi, M. (2024). Oudemansiella cubensis an Edible Mushroom from the Neotropics with Biological and Nutritional Benefits. *Natural Resources for Human Health*, *4*(3), 257–268. https://doi.org/10.53365/NRFHH/189170

Martínez-Díaz, R. A., Ibáñez-Escribano, A., Burillo, J., De Las Heras, L., Del Prado, G., Agulló-Ortuño, T., Julio, L. F., y González-Coloma, A. (2015). Trypanocidal, trichomonacidal and cytotoxic components of cultivated Artemisia absinthium Linnaeus (Asteraceae) essential oil. *Mem Inst Oswaldo Cruz*, *110*(5), 693–699. https://doi.org/10.1590/0074-02760140129

Mendes de Lacerda, G., de Oliveira Barbosa, M., Pereira, M. J., de Araújo Delmondes, G., Bezerra, D. S., Araújo, I. M., Carvalho de Alencar, C. D., Melo Coutinho, H. D., Peixoto, L. R., Barbosa-Filho, J. M., Bezerra Felipe, C. F., Barbosa, R., Alencar de Menezes, I. R., y Kerntof, M. R. (2021). Pharmacological and toxicological activities of α-humulene and its isomers: A systematic review. *Trends in Food Science & Technology*, *115*, 255–274. https://doi.org/10.1016/J.TIFS.2021.06.049

Ministerio de Salud Pública y Bienestar Social. (2019). *Programa Nacional de Control de las Leishmaniasis*. Ministerio de Salud Pública y Bienestar Social.

Murillo-Godínez, G. (2018). Enfermedad de Chagas (tripanosomiasis americana). *Med Int Méx*, *34*(6), 959–970. https://doi.org/10.24245/mim.v34i6.2217

Musikant, D., Leverrier, A., Bernal, D., Ferri, G., Palermo, J. A., y Edreira, M. M. (2019). Hybrids of Cinchona Alkaloids and Bile Acids as Antiparasitic Agents Against Trypanosoma cruzi. *Molecules*, *24*(17), 3168. https://doi.org/10.3390/molecules24173168

Organización Panamericana de la Salud. (2023, December). *Leishmaniasis: Informe epidemiológico de las Américas. Núm. 12*. Washington, D.C.: OPS. https://iris.paho.org/handle/10665.2/51742

Palma, E., Pasqua, A., Gagliardi, A., Britti, D., Fresta, M., y Cosco, D. (2018). Antileishmanial Activity of Amphotericin B-loaded-PLGA Nanoparticles: An Overview. *Materials*, *11*(7), 1167. https://doi.org/10.3390/MA11071167

Pandey, U. B., y Nichols, C. D. (2011). Human Disease Models in Drosophila melanogaster and the Role of the Fly in Therapeutic Drug Discovery. *Pharmacological Reviews*, *63*(2), 411. https://doi.org/10.1124/PR.110.003293

PhytoLab. (2022). *α-Humulene phyproof® Reference Substance | PhytoLab*. PhytoLab Phyproof. https://phyproof.phytolab.com/en/reference-substances/details/alpha-humulene-83351

Pradhan, S., Schwartz, R. A., Patil, A., Grabbe, S., y Goldust, M. (2022). Treatment options for leishmaniasis. *Clinical and Experimental Dermatology*, *47*(3), 516–521. https://doi.org/10.1111/CED.14919

Rodrigues, A. C. J., Carloto, A. C. M., Gonçalves, M. D., Concato, V. M., Detoni, M. B., Santos, Y. M. dos, Cruz, E. M. S., Madureira, M. B., Nunes, A. P., Pires, M. F. M. K., Santos, N. C., Marques, R. E. dos S., Bidoia, D. L., Borges Figueiredo, F., y Pavanelli, W. R. (2023). Exploring the leishmanicidal potential of terpenoids: a comprehensive review on mechanisms of cell death. *Frontiers in Cellular and Infection Microbiology*, *13*, 1260448. https://doi.org/10.3389/FCIMB.2023.1260448

Sanabria Calvo, M. (2016). Tripanosomiasis Americana o Enfermedad de Chagas. *Revista Médica de Costa Rica y Centroamérica*, *72*(616), 539–544.

Sánchez Casaccia, P., González-Britez, N., Acosta, N., y López, E. (2019). Vectores de Trypanosoma cruzi en

ambientes domésticos y silvestres de las comunidades Ayoreo Totobiegosode del Alto Paraguay. *Revista de La Sociedad Científica Del Paraguay*, *24*(1), 218–229. https://doi.org/10.32480/rscp.2019-24-1.218-229

Satyal, P., Shrestha, S., y Setzer, W. N. (2015). Composition and Bioactivities of an (E)-β-Farnesene Chemotype of Chamomile (Matricaria chamomilla) Essential Oil from Nepal. *Natural Product Communications*, *10*(8), 1453–1457. https://doi.org/10.1177/1934578X1501000835

Soares, D. C., Portella, N. A., Ramos, M. F. D. S., Siani, A. C., y Saraiva, E. M. (2013). Trans-β-Caryophyllene: An Effective Antileishmanial Compound Found in Commercial Copaiba Oil (Copaifera spp.). *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine*, *2013*(1), 761323. https://doi.org/10.1155/2013/761323

Staats, S., Lüersen, K., Wagner, A. E., y Rimbach, G. (2018). Drosophila melanogaster as a Versatile Model Organism in Food and Nutrition Research. *J. Agric. Food Chem.*, *66*(15), 3737–3753. https://doi.org/https://doi.org/10.1021/acs.jafc.7b05900

Steverding, D., Sidjui, L. S., Ferreira, É. R., Ngameni, B., Folefoc, G. N., Mahiou-Leddet, V., Ollivier, E., Stephenson, G. R., Storr, T. E., y Tyler, K. M. (2020). Trypanocidal and leishmanicidal activity of six limonoids. *Journal of Natural Medicines*, *74*(3), 606–611. https://doi.org/10.1007/S11418-020-01408-7

Sülsen, V. P., Cazorla, S. I., Frank, F. M., Laurella, L. C., Muschietti, L. V., Catalán, C. A., Martino, V. S., y Malchiodi, E. L. (2013). Natural Terpenoids from Ambrosia Species Are Active In Vitro and In Vivo against Human Pathogenic Trypanosomatids. *PLoS Neglected Tropical Diseases*, *7*(10), e2494. https://doi.org/10.1371/JOURNAL.PNTD.0002494

Vera Cabral, E., San Miguel, M. C., Chaparro, F., y Franco, G. (2020). Conocimientos sobre Enfermedad de Chagas y Triatoma infestans en Pobladores del Departamento de San Pedro, Paraguay 2019. *Anales de La Facultad de Ciencias Médicas (Asunción)*, *53*(1), 81–92. https://doi.org/10.18004/anales/2020.053.01.81-092

Wipfler, B., Schneeberg, K., Löffler, A., Hünefeld, F., Meier, R., y Beutel, R.

G. (2013). The skeletomuscular system of the larva of Drosophila melanogaster (Drosophilidae, Diptera) – A contribution to the morphology of a model organism. *Arthropod Structure & Development*, *42*(1), 47–68. https://doi.org/10.1016/J.ASD.2012.09.005

Financiamiento

Este trabajo de investigación se encuentra desarrollado dentro del marco del proyecto PINV 01-318, el cual es cofinanciado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) con el apoyo del FEEI.

27.- Ciencia, tecnología e innovación

DESARROLLO DE SISTEMA DE MONITOREO DE GASES INDICADORES DE LA CALIDAD DEL AIRE INTERIOR CON APLICACIÓN DE IOT, EN EL CENTRO MULTIDISCIPLINARIO DE INVESTIGACIONES TECNOLÓGICAS

Autor: León Piris, Augusto Iván; email: aileonp1998@fpuna.edu.py
Co-autor(es): Moreno Olmedo, Jonathan Gabriel, jgmolmedo27@fpuna.edu.py; Nakayama Nakashima, Héctor David, hnakayama@rec.una.py; Paniagua Rojas, Mauricio Daniel, mauricio.d.paniagua@fpuna.edu.py; Ruiz Diaz Arias, Erika Arami, erika_rd.kita@fpuna.edu.py; Saldívar Bernal, María Belén, paldbernal@fpuna.edu.py; Vázquez Fernández, Sergio Ismael, vazquezs997@fpuna.edu.py
Orientador/a: Giménez, José; ejose.duarte@pol.una.py
Universidad de origen / Facultad, Centro o Instituto

Resumen

Con el objetivo de conocer las condiciones de la calidad del aire interior en las diversas dependencias del Centro Multidisciplinario de Investigaciones Tecnológicas de la Universidad Nacional de Asunción, se ha desarrollado un sistema de monitoreo de la calidad del aire interior preciso y confiable, desde marzo a octubre de 2024. Esta investigación corresponde al área de instrumentación, automatización, Internet de las Cosas y aplicación de sistemas embebidos, específicamente, en el monitoreo de oxígeno y dióxido de carbono. El estudio reveló que, mediante la implementación de dispositivos validados y verificados por los fabricantes, proporcionando mediciones consistentes y útiles bajo diversas condiciones ambientales de funcionamiento, es posible el monitoreo de estos gases en tiempo real, asegurando la fiabilidad, exactitud y precisión de los datos registrados, con el fin de facilitar el análisis estadístico para determinar las condiciones de la calidad del aire interior, y orientar en la toma de medidas efectivas para su optimización. Se concluyó con el diseño de un sistema de monitoreo automático, mediante la programación de un módulo microcontrolador ESP32 a través del entorno de desarrollo de Arduino IDE y la implementación de la plataforma ThingSpeak para la visualización de los datos en tiempo real. Para estudios futuros, se sugiere el estudio de otros parámetros, como la temperatura, humedad, gases como el monóxido de carbono y contaminantes como el material particulado, para un análisis más completo de la calidad del aire en ambientes cerrados y con condiciones de ventilación subóptimas.

Palabras clave: Calidad del aire, IoT, Monitoreo, Equipo de Medición, Sensor, Oxígeno, Dióxido de Carbono, Arduino IDE.

Introducción

La calidad del aire interior es un tema crucial para la salud pública, especialmente en espacios cerrados donde las personas pasan entre el 80% y 90% de su tiempo (OMS, 2022). La ventilación deficiente puede derivar en efectos negativos para la salud, siendo el monitoreo de gases como el dióxido de carbono (CO_2) y oxígeno una herramienta fundamental para evaluar las condiciones del ambiente interior.

A raíz de la pandemia por COVID-19, se intensificó la atención sobre este tema. En 2021, el Ministerio de Educación y Ciencias recibió 500 medidores de CO_2 donados por el Gobierno de Taiwán. Sin embargo, su implementación en instituciones como el CEMIT reveló lecturas inexactas, lo que motivó la búsqueda de soluciones confiables.

Esta propuesta técnica plantea el diseño de un sistema automático y preciso para el monitoreo de CO_2 y oxígeno, con visualización en tiempo real y almacenamiento de datos. El objetivo es proporcionar una herramienta eficaz para la toma de decisiones sobre calidad del aire interior en entornos laborales y educativos.

Entre los objetivos específicos se encuentran: el análisis de la normativa vigente, la identificación de variables relevantes, el desarrollo de hardware y software para los sensores, y la validación funcional mediante ensayos, incluyendo la conexión remota mediante Wi-Fi a la plataforma ThingSpeak.

El trabajo se estructura en cinco partes: revisión bibliográfica, metodología, ingeniería de diseño, conclusiones y recomendaciones. La propuesta se alinea con el Plan Nacional de Desarrollo 2030, la Política Nacional de Salud 2015-2030 y la Política Nacional de Ciencia y Tecnología, así como con el Plan Estratégico de la UNA, buscando contribuir con datos confiables a la salud ocupacional y al desarrollo científico del país.

Objetivos

Objetivo general.

Diseñar e implementar un sistema para el monitoreo de los niveles de oxígeno y dióxido de carbono en el Centro Multidisciplinario de Investigaciones Tecnológicas de la Universidad Nacional de Asunción.

Objetivos específicos.

- Analizar los criterios técnicos manejados en la normativa vigente sobre los parámetros que definen las condiciones de la calidad del aire.
- Examinar los factores asociados a la calidad del aire en las oficinas del CEMIT.
- Identificar las variables a ser

controladas por los prototipos de monitoreo.

- Desarrollar el código de programación y diseñar el hardware para la adquisición de datos de los sensores, la visualización en tiempo real de los valores de concentraciones de los gases y el almacenamiento de los datos en una memoria externa.
- Construir los prototipos monitores de los niveles de oxígeno y dióxido de carbono para espacios interiores.
- Validar el funcionamiento de los prototipos mediante pruebas y ensayos con los circuitos construidos, en diferentes ambientes.
- Monitorear de forma remota y representar los datos obtenidos por los sensores del sistema, utilizando protocolos Wi-Fi para la visualización de los datos a través de la plataforma "ThingSpeak".
- Determinar la viabilidad económica de la implementación del sistema para el monitoreo de la calidad del aire en el ambiente estudiado.

Materiales y Métodos

En la Tabla 1 se detalla la lista de componentes necesarios para la conformación del circuito de cada dispositivo, y los elementos necesarios para la estructura final del hardware, con los costos unitarios señalados en dólares y en guaraníes. Considerando los costos de cada componente necesario para la construcción de cada prototipo, el costo total del hardware resulta en 1.180.062 Gs.

Tabla 1. Costo global del hardware de un dispositivo.

Descripción	Cantidad	Precio Unitario (USD)
Sensor O_2	1	33,36
Sensor CO_2	1	33
Módulo ESP32	1	14,61
Lector de tarjeta miniSD	1	4,81
Tarjeta de memoria 8GB	1	4,12
RTC	1	5,51
Fuente de 5V/2A	1	4,64
ADC 24 bits	1	9,95
Conversor de Nivel Lógico	2	6,64
Pantalla LCD 16x2	1	9,30
Placa PCB	1	13,278
Caja de paso	1	4,65
Otros (Resistencias, espadines, y otros insumos)	1	6,18
TOTAL:		**156,69**

Costos del capital humano.

El tiempo ocupado en crear los prototipos, que incluye la investigación realizada, el diseño del hardware y software del sistema, el análisis de las

especificaciones y selección de los componentes de acuerdo con los requerimientos del diseño, la compra de los componentes y el montaje de los 5 prototipos se estima en 3 meses, con un promedio de 12 horas de trabajo semanales. Considerando que se asigna un pago por hora de 20$ a cada uno de los dos ingenieros junior involucrados en el desarrollo del proyecto, el costo unitario del capital humano será de $3.120, por lo que, para dos ingenieros junior, el pago total en concepto de mano de obra será de $6.240 En la Tabla 2 puede observarse el precio unitario de la mano de obra por 156 horas trabajadas, esto corresponde al pago de honorarios para un ingeniero junior.

Se utilizó el software Proteus Professional V8.13, el entorno de desarrollo Arduino IDE y la plataforma en línea ThingSpeak. Ambas plataformas son de código abierto, facilitando la accesibilidad a los recursos de software, y reduciendo la dependencia sobre sistemas operativos específicos para la realización de los diseños óptimos del hardware y software.

Tabla 2. Costos del capital Humano.

Descripción	Horas trabajadas	Precio nitario (USD)
Mano de Obra	156	20
TOTAL:		**3.120**

Costo total de desarrollo.

Considerando los costos de los componentes que han sido requeridos, los costos de capital humano y los correspondientes a la fabricación, además de aplicar un prorrateo del costo total de desarrollo sobre las 5 unidades fabricadas, en la Tabla 3 se establece el costo tentativo para el producto terminado. Esto resulta en un precio de venta unitario final de $1404,69. Según el valor obtenido para el precio unitario de venta, el precio de venta para los 5 dispositivos fabricados será de $7023,45 en total.

Tabla 3. Costo de Venta del Producto.

Descripción	Costo Unitario (USD)	Cantidad	Costo total (USD)
Prototipo	156,69	5	783,45
Honorarios (Prorrateo sobre 5 unidades)	1248	5	6240
TOTAL:	**1404,69**	**5**	**7023,45**

Aunque ya se han desarrollado dispositivos con características similares y están disponibles en el mercado, en muchos casos estos dispositivos no ofrecen la posibilidad de mantener el monitoreo de los parámetros de manera remota, miden parámetros que son de difícil comprensión de parte del público no

especializado; o bien, no son indicadores útiles para discernir las condiciones más importantes que hacen a la calidad del aire o para señalar cuando es necesario corregir los niveles de ventilación. Otro punto que se debe considerar es el elevado costo de muchos de los dispositivos, que los hacen inaccesibles para los interesados que poseen limitaciones económicas. La Tabla 4 detalla los precios de los dispositivos monitores de calidad del aire interior disponibles en el mercado. Los valores han sido extraídos de los sitios web oficiales de los proveedores de estas marcas.

Tabla 4. Costos del prototipo desarrollado vs. dispositivos disponibles en el mercado.

Dispositivo	Descripción	Costo (USD)	Reducción de costo (%)
PCE-AQD 20	Medidor de Partículas y CO_2	2031,55	30,86
SOUTHLAND SENSING	Medidor de O_2 y CO_2	1731,60	18,88
PureAire	Medidor de O_2 y CO_2	2400,00	41,47
Prototipo desarrollado	Medidor de O_2, CO_2, temperatura y humedad	1404,69	—

En la quinta columna de la Tabla 4, puede observarse la diferencia expresada en términos de porcentaje entre el costo de cada dispositivo investigado y el costo del prototipo desarrollado en esta propuesta técnica. De esta manera, se observa que, en todos los casos, con el prototipo desarrollado en este trabajo de grado se obtiene una reducción positiva del costo, en comparación con los precios de la competencia.

Considerando el interés que origina este proyecto, que es contribuir con la ciencia y la investigación, se decidió donar las dos terceras partes (66,66%) del valor del trabajo realizado para la investigación y desarrollo. De esta manera, el costo unitario por prototipo se reduce a ₲. 3.526.329, lo que determina en la práctica el costo total del desarrollo de los 5 dispositivos en ₲. 17.631.645.

Conclusión de la viabilidad económico-financiera del proyecto.

El prototipo desarrollado tiene en promedio un costo menor a los dispositivos comerciales analizados en un 29% aproximadamente. Si se considera el costo final para este prototipo luego de restar el monto correspondiente en concepto de colaboración con la institución financiadora, el costo global final será menor al de los dispositivos comerciales analizados en un 78%, en promedio. Es importante mencionar que el prototipo desarrollado mide dos variables más, que son la temperatura y la humedad, gracias a

que son funciones integradas en el sensor SCD30 de CO_2 que se ha implementado. De esta manera, se concluye satisfactoriamente que el dispositivo desarrollado es financieramente viable y ventajoso con respecto a los dispositivos similares disponibles en el mercado.

Resultados y Discusión

A través de la automatización del sistema de monitoreo de calidad del aire interior, mediante la construcción de 5 dispositivos medidores de oxígeno y dióxido de carbono, se busca tener a disposición un sistema que permita conocer los datos de las concentraciones de estos gases en las oficinas del CEMIT, de manera precisa y disponible en tiempo real.

Los datos procesados por el microcontrolador se envían para su visualización mediante la plataforma en línea ThingSpeak, en donde la información es visualizada gráficamente cada 30 segundos, para un seguimiento en tiempo real de las variaciones de los niveles de los gases.

Paralelamente, los datos de las concentraciones de los gases se envían a una pantalla LCD integrada en la carcasa del dispositivo, para la visualización in situ de los valores sin necesidad de acceso a internet. Con el fin de tener acceso posterior a los datos de las mediciones con fines de análisis de los mismos, los datos son almacenados en periodos de 1 minuto en la tarjeta de memoria de 8GB, suficiente para un almacenamiento prolongado; esto permite el registro histórico de las mediciones, sin sobrescribir información previa.

Estos equipos son de fácil instalación, se conectan directamente al tomacorriente, y gracias a su compacto diseño y reducido peso, se evita crear molestias a los ocupantes del ambiente en que se realiza la medición.

El proyecto también previó la incorporación de un sistema de avisos, mediante el uso de correo electrónico, con el fin de indicar niveles de concentración por fuera de los intervalos normales señalados por las Normativas Nacionales e Internacionales.

De esta manera, se ha desarrollado una solución que cumple con todos los requerimientos del proyecto a un precio competitivo.

RESULTADOS.

Gráficos de mediciones tomadas en el CEMIT.

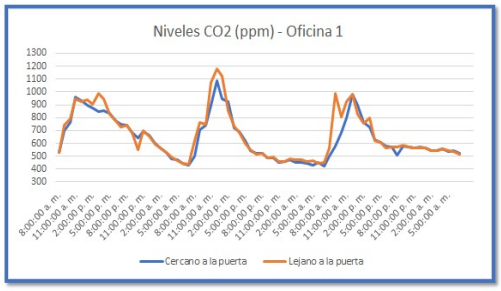


Figura 1. Mediciones tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes durante el monitoreo en la oficina 1, por 72 horas.[1]

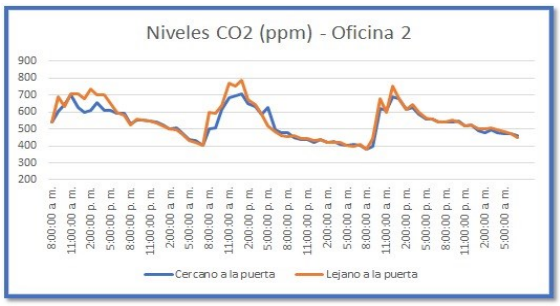


Figura 2. Mediciones tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes durante el monitoreo en la oficina 2.[2]

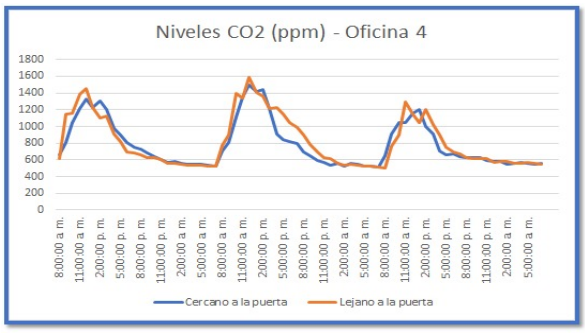


Figura 3. Mediciones tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes durante el monitoreo en la oficina 4.[3]

Se observó una tendencia a la elevación en los niveles de CO_2 cuando las oficinas están ocupadas. Durante los horarios de ocupación (8:00 a.m. a 12:00 a.m.), y tras un monitoreo de 3 días, se observó que el promedio de CO_2 en las tres oficinas fue de 850 ppm.

Tabla 5. Especificaciones técnicas del prototipo.

CATEGORÍA	NIVELES DE CO2 DEL AIRE	SOBRE EL NIVEL EXTERIOR ppm
	Intervalo típico	Valores por defecto
IDA 1	≤400	350
IDA 2	400 - 600	500
IDA 3	600 - 1000	800
IDA 4	>1000	1200

Por otro lado, los niveles de CO_2 tienden a disminuir en ausencia de personas. En los horarios de no ocupación

[1] *VAZQUEZ, Sergio; SALDIVAR, María. Mediciones tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes durante el monitoreo en la oficina 1, por 72 horas. Imagen registrada en fecha 4 de octubre del 2024.*

[2] *VAZQUEZ, Sergio; SALDIVAR, María. Mediciones tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes durante el monitoreo en la oficina 2. Imagen registrada en fecha 4 de octubre del 2024*.

[3] VAZQUEZ, Sergio; SALDIVAR, María. *Mediciones tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes durante el monitoreo en la oficina 4*. Imagen registrada en fecha 4 de octubre del 2024.

(8:00 p.m. a 00:00 a.m.), el promedio en las tres oficinas fue de 577 ppm.

Para entender mejor estos valores, a continuación, se observa una tabla con los valores en las diferentes categorías de calidad del aire según el nivel de CO_2:

Por último, se pudo observar que la oficina 4 presenta los niveles más elevados de concentraciones de CO_2, alcanzando valores de hasta 1600 ppm durante horarios de ocupación.

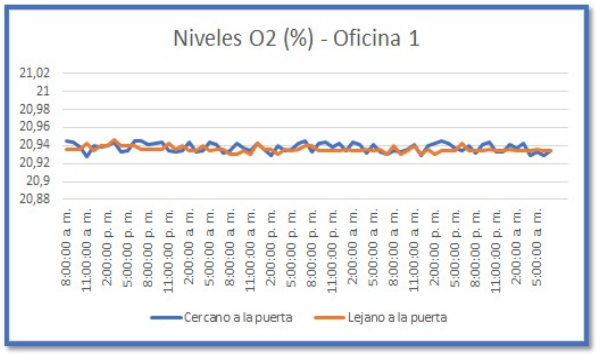


Figura 4. Mediciones de niveles de oxígeno tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes durante el monitoreo en la oficina 1[4]

En la Figura 4 se observa que los niveles de oxígeno se mantuvieron dentro de rangos muy estables al comparar ambos monitores instalados en la misma oficina. Este comportamiento también se registró con valores similares en las oficinas 2 y 4.

De esta manera, es posible deducir que los volúmenes de dióxido de carbono generados durante los horarios de ocupación de estas dependencias son insuficientes para causar disminuciones notables en los niveles de oxígeno, si bien indican la necesidad de mantener mejores condiciones en los sistemas de ventilación, ya que podrían acumularse otros contaminantes, además de propiciar la proliferación de microorganismos.

Especificaciones técnicas del dispositivo fabricado.

Para determinar los parámetros característicos de los prototipos construidos, se han revisado y analizado rigurosamente las documentaciones técnicas de cada componente, además de verificar algunos valores mediante procedimientos de medición realizados en los laboratorios del GIEM, FP-UNA. De este modo, se han determinado las características más significativas y útiles a tener en cuenta para el correcto manejo de los dispositivos, a fin de evitar la degradación de los componentes por el mal uso o la exposición a condiciones ambientales perjudiciales.

[4] VAZQUEZ, Sergio; SALDIVAR, María. *Mediciones de niveles de oxígeno tomadas con dos dispositivos en ubicaciones diferentes, durante el monitoreo en la oficina 1.* Imagen registrada en fecha 4 de octubre del 2024.

Tabla 6. Especificaciones técnicas del prototipo.[5]

ESPECIFICACIONES TÉCNICAS			
MONITOR DE CALIDAD DEL AIRE INTERIOR			
Descripción		**Especificación**	**Unidad de medida**
Sensor de CO_2	Rango de medición:	0 - 40.000 ± (30 + 3%)	ppm
	Resolución	1	ppm
	Vida útil	15	años
Sensor de O_2	Rango de medición:	0 - 25	%
	Resolución	,00253 (de 20,9 a 21,0)	%
	Vida útil	2	años
Voltaje de alimentación		5 ± 0,25	V
Corriente máxima		190	mA
Capacidad de almacenamiento		8	GB
Peso aproximado		395	g
Dimensiones		150x150x70	mm
Actualización de datos	Display LCD	60	s
	ThingSpeak	30	s
	Memoria SD	60	s
Rango de temperatura		0 - 50	°C

Otras características:

* Fuente de alimentación tipo adaptador AC/DC.
* Medición de parámetros adicionales: temperatura y humedad relativa.
* Pantalla LCD retroiluminada para visualización local.
* Informe de valores fuera de rango vía e-mail.
* Archivo de registros en formato CSV.
* Código QR disponible en carcasa para acceso a visualización de datos en línea.

[5] VAZQUEZ, Sergio; SALDIVAR, María. *Especificaciones técnicas del prototipo.* Tabla elaborada en fecha 10 de octubre del 2024.

DISCUSIÓN

Durante la elaboración del proyecto fueron detectadas algunos problemas que se mencionan a continuación.

Uno de los inconvenientes al inicio fue la falta del módulo de acondicionamiento de la señal para el sensor de oxígeno, es decir, un módulo que permite que las corrientes de baja magnitud arrojados por el sensor de oxígeno, es decir, la celda electroquímica, sean amplificados y convertidos a un valor digital de voltaje que pueda ser procesado directamente por el microcontrolador. Sin embargo, considerando la necesidad de mantener el prototipo dentro de un rango económicamente accesible, se prescindió de la compra del módulo y en su lugar se realizó la compra de las celdas electroquímicas solamente.

En una primera etapa, se incorporó el conversor analógico-digital ADS1115 para el acondicionamiento de la señal, sin embargo, al ser un ADC con resolución de 16 bits, se pudo notar que los datos de las mediciones no eran lo suficientemente precisos y carecían de gran exactitud.



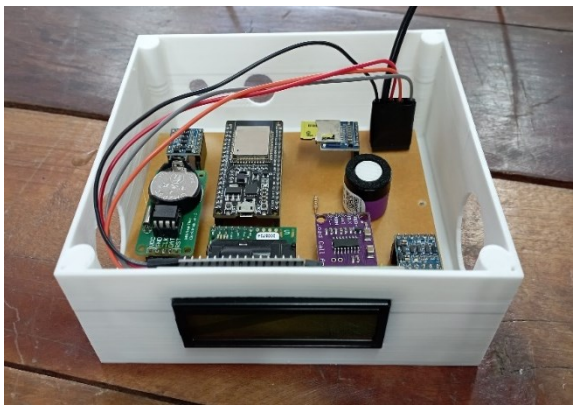
Fotografía 1. Diseño del primer prototipo utilizando un ADC ADS1115.[6]

Posteriormente, se llevaron a cabo las investigaciones necesarias para optimizar el acondicionamiento de la señal. En este contexto, se analizó la viabilidad de implementar un amplificador de transimpedancia, el cual convertiría las señales de corriente generadas por el sensor en un valor de voltaje analógico (Gupta, 2019). Dado que el amplificador de transimpedancia requiere una conversión analógica a digital para que la información sea procesada por el microcontrolador, se consideró necesario incorporar un ADC externo de mayor resolución. Esto se debió a que el ADC del microcontrolador tiene una resolución de 12 bits, lo que podría comprometer la precisión de las mediciones. Sin embargo, esta decisión

[6] VAZQUEZ, Sergio; SALDIVAR, María. *Diseño del primer prototipo utilizando un ADC ADS1115.* Imagen registrada en fecha 3 de agosto del 2024.

implicaba un aumento en la complejidad del diseño y los costos.

Finalmente, se optó por implementar el ADC HX711, una solución que reduce los costos del prototipo y también proporciona una gran precisión gracias a su resolución de 24 bits y minimiza el ruido. Además, este ADC amplifica la señal, facilitando su procesamiento por parte del microcontrolador. Después de verificar el funcionamiento del circuito montado con el ADC HX711, se constató que los resultados proporcionados por el sensor eran bastante precisos y exactos. Esto demostró que el ruido no afectaba significativamente a la señal, lo que reafirmó la viabilidad del uso del ADC HX711 en el sistema.



Fotografía 2. Prototipo final montado dentro de la carcasa impresa en 3D propuesta.

Conclusiones

En el contexto del desarrollo del diseño del prototipo de monitoreo de calidad del aire, se llevó a cabo un relevamiento exhaustivo de la información relacionada con los antecedentes del monitoreo en el Centro Multidisciplinario de Investigaciones Tecnológicas, así como un análisis de las características edilicias del mismo. Se examinaron las implicancias del oxígeno y del dióxido de carbono en espacios cerrados, evaluando las causas de la variación de estos gases, los factores que inciden en la calidad del aire y el impacto que esto tiene en la salud y el bienestar de las personas en entornos laborales. Además, se revisaron las tecnologías disponibles para la medición precisa de gases, y se evaluó la viabilidad de implementar soluciones basadas en IoT para garantizar un monitoreo continuo y eficiente.

En función de los objetivos específicos establecidos, a continuación, se presentan las conclusiones más relevantes:

- Del análisis de los criterios técnicos establecidos en las normativas, leyes, decretos y ordenanzas concernientes a la calidad del aire, se identificó al dióxido de carbono como un gas de interés a ser monitoreado en ambientes cerrados, proporcionando también información

sobre los valores límites de exposición, los que fueron utilizados para el desarrollo del sistema de avisos sobre niveles por fuera de los rangos normales. Además, estas normativas enfatizan en la necesidad de mantener condiciones atmosféricas adecuadas en los ambientes de trabajo, evitando la contaminación del aire interior, con el fin de mitigar los efectos en la salud y promover el mantenimiento adecuado de los ambientes laborales.

- Con relación al estudio de los factores asociados a la calidad del aire en las oficinas del CEMIT, se ha determinado mediante visitas técnicas, condiciones subóptimas en el sistema de ventilación, dejando en evidencia la necesidad del estudio de las condiciones de la calidad del aire en el Centro, con el fin de trazar planes de acondicionamiento de las estructuras edilicias.
- En cuanto a la identificación de las variables a ser controladas por los prototipos, se llevó a cabo una revisión de la documentación académica relacionada y las normativas vigentes. Esto permitió identificar al dióxido de carbono como un gas de interés para el monitoreo de espacios interiores como indicador directo de la calidad del aire y ventilación, y sus influencias en la salud a elevadas concentraciones. Asimismo, se determinó que el oxígeno es un parámetro esencial, dado su vínculo con problemas de salud, lo que hace necesario su monitoreo para garantizar una evaluación integral de la calidad del aire.
- Con relación al desarrollo del código de programación y diseño del hardware, se utilizó el software Proteus Professional V8.13 para el diseño del circuito esquemático y la placa de circuito impreso. Por otro lado, mediante el uso del software de programación Arduino IDE, se incorporó la visualización de los datos mediante la plataforma ThingSpeak, el sistema de avisos sobre valores fuera de los rangos normales, el almacenamiento de datos en la memoria extraíble y la visualización de los datos mediante un display LCD.
- En cuanto a la construcción de los prototipos monitores, se llevó a cabo la fabricación de los prototipos en los laboratorios del Grupo de Investigación en Electrónica y Mecatrónica. La fabricación de la placa se realizó utilizando una fresadora CNC, seguida del montaje y la soldadura de los componentes electrónicos. Una vez ensamblada, la placa fue colocada dentro de una caja de paso de PVC, la cual se acondicionó con una malla para evitar la entrada de agentes externos a través de los orificios. Además, se integró una pantalla LCD en la parte lateral de la caja para la visualización de datos.

- Con respecto a la validación del funcionamiento de los prototipos, se realizaron las pruebas de verificación de precisión en las instalaciones del GIEM, comparando simultáneamente los valores registrados por los 5 monitores durante un periodo de 24 horas. Los dispositivos arrojaron mediciones consistentes bajo distintas condiciones de operación. Adicionalmente, se efectuaron pruebas en distintos ambientes, como aulas de la Facultad Politécnica, oficinas del CEMIT y exteriores, comprobando el correcto desempeño de los prototipos en escenarios con diversas ocupaciones y condiciones ambientales.
- Con relación al monitoreo de forma remota, se logró representar los datos obtenidos por los sensores de manera exitosa a través de la plataforma ThingSpeak, mediante el uso del microcontrolador ESP32 que incorpora conectividad Wi-Fi.
- En cuanto a la viabilidad financiera del dispositivo, se demostró que la adquisición de este sistema resulta económicamente viable para el Centro Multidisciplinario de Investigaciones Tecnológicas, constituyendo una inversión importante para la Institución, en el marco de los planes de mitigación de los efectos de la calidad del aire en el personal, a fin de implementar soluciones de manera óptima en concordancia con lo establecido en la normativa vigente.

Por último, cumpliendo de esta forma con todos los objetivos planteados para este trabajo, se logró el desarrollo y la implementación exitosa de un sistema de monitoreo de calidad de aire preciso y confiable, que brinda solución a las necesidades del CEMIT de conocer las condiciones de calidad del aire en sus dependencias.

Referencias Bibliográficas

[1] AIRE PARAGUAY. *Introducción* [en línea]. 2019 [consultado el 19 de agosto de 2024]. Disponible en: https://aireparaguay.org/

[2] Aprobado por Decreto Nº 4541/2015 y Resolución S.G. Nº 612 del 25 de agosto del 2015. *MSPyBS* [en línea] Consultado 12 oct. 2024. Disponible en:https://www.mspbs.gov.py/dependencias/portal/adjunto/9753ad-POLITICANACIONALDESALUD.pdf

[3] AV ELECTRONICS. *Módulo Lector Micro SD* [en línea]. [sin fecha] [consultado el 30 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://avelectronics.cc/producto/modulo-micro-sd/

[4] BADINO, Giovanni. *The legend of Carbon Dioxide heaviness.* Journal of Cave and Karst Studies [en línea]. 2009, **71**(1) [consultado el 14 de julio de 2024]. Disponible en: https://caves.org/wp-content/uploads/Publications/JCKS/v71/cave-71-01-100.pdf

[5] BOLDO, Elena. *La contaminación del aire* [en línea]. Madrid: Instituto de Salud Carlos III, 2016 [consultado el 29 de agosto de 2024]. ISBN 978-84-95463-55-5. Disponible en: doi:10.4321/repisalud.7274

[6] CALEL OTZOY, Melvin Saúl. Diseño e implementación de un dispositivo modular de medición de concentración de dióxido de carbono en la atmósfera con sistema de ubicación GPS [en línea]. Trabajo de grado, Universidad de San Carlos de Guatemala, 2018 [consultado el 2 de agosto de 2024]. Disponible en: http://www.repositorio.usac.edu.gt/10956/

[7] CAMPANO, Miguel Ángel; FERNÁNDEZ-AGÜERA, Jessica y SENDRA, Juan José. *Calidad del aire interior en los edificios para el bienestar: estrategias de aplicación práctica* [en línea]. Barcelona, 2023 [consultado el 15 de agosto de 2024]. ISBN 978-84-19506-75-7. Disponible en: https://octaedro.com/libro/calidad-del-aire-interior-en-los-edificios-para-el-bienestar-estrategias-de-aplicacion-practicas/

[8] CEMIT. *Destacan experiencia del CEMIT en cooperación con el sector privado* [en línea]. 16 de marzo de 2023 [consultado el 20 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://cemit.una.py/destacan-experiencia-del-cemit-en-cooperacion-con-el-sector-privado/

[9] CENTRO NACIONAL DE CONDICIONES DE TRABAJO. NTP 358, *Olores: un factor de calidad y confort en ambientes interiores.* [sin fecha] [consultado el 26 de julio de 2024]. Disponible en: https://www.cso.go.cr/legislacion/notas_tecnicas_preventivas_insht/NTP%20358%20-%20Olores%20un%20factor%20de%20calidad%20y%20confort%20en%20ambientes%20interiores.pdf

[10] CENTRO NACIONAL DE CONDICIONES DE TRABAJO. NTP 742, *Ventilación general de edificios.* [sin fecha] [consultado el 26 de julio de 2024]. Disponible en: https://preventoronline.com/imagesbd/down/attach4324.pdf

[11] CINCINELLI, Alessandra y MARTELLINI, Tania. Indoor Air Quality and Health. *International Journal of Environmental Research and Public Health* [en línea]. 2017, 14(11), 1286 [consultado el 25 de agosto de 2024]. ISSN 1660-4601. Disponible en: doi:10.3390/ijerph14111286

[12] CO2METER. How does an NDIR CO2 Sensor Work? [en línea]. 9 de septiembre de 2024 [consultado el 13 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://www.co2meter.com/blogs/news/how-does-an-ndir-co2-sensor-work

[13] CUEVAS, Gustavo y GOTO, Raúl. *Sistema de trazabilidad de producción láctea de la división ganado bovino de la Facultad de Ciencias Veterinarias de la UNA*. Trabajo de grado, Universidad Nacional de Asunción, 2022.

[14] DA RÓZ, Alessandra L. et al. *Nanoscience and its Applications* [en línea]. Elsevier, 2016 [consultado el 19 de octubre de 2024]. ISBN 978-0-323-49780-0. Disponible en:

https://books.google.com.py/books?id=ec_8DAAAQBAJ&dq=electrochemical+sensors+history&lr=&hl=es&source=gbs_navlinks_s

[15] ELECTROMER. *Fuente 5V 2A* [en línea]. [sin fecha] [consultado el 1 de octubre de 2024]. Disponible en: https://electromer.com.py/product/fuente/

[16] ELETROGATE. *Pantalla LCD de 16x2 con retroiluminación verde e I2C* [en línea]. [sin fecha] [consultado el 30 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://www.eletrogate.com/display-lcd-16x2-i2c-backlight-verde

[17] ESPINAL, Georgina y NIVAR, Sócrates. Estudio comparativo de las condiciones ambientales al interior de las viviendas en dos barrios de la Capital Dominicana. *Red de Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal* [en línea]. 2004, 20(2) [consultado el 18 de agosto de 2024]. ISSN 0378-7680. Disponible en: https://revistas.intec.edu.do/index.php/ciso/article/view/719

[18] Espressif Systems. *ESP32-WROOM-32E* [en línea]. Shanghai: Espressif Systems, 2023 [consultado el 26 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.espressif.com/sites/default/files/documentation/esp32-wroom-32e_esp32-wroom-32ue_datasheet_en.pdf

[19] ESTADOS UNIDOS, Agencia de Protección Ambiental. *Descripción general de los gases de efecto invernadero* [en línea]. 7 de junio de 2023 [consultado el 15 de abril de 2024]. Disponible en: https://espanol.epa.gov/la-energia-y-el-medioambiente/descripcion-general-de-los-gases-de-efecto-invernadero

[20] ESTÁNDAR, ANSI ASHRAE 62.1.(2007). *Ventilación para una Calidad Aceptable de Aire Interior.* [en línea]. [consultado el 20 de junio de 2024]. Disponible en: https://www.ditar.cl/archivos/Normas_ASHRAE/T0120ASHRAE-62.1-2007-sp-Ventil-p-CAAI.pdf.

[21] FERREIRA, Nicolas; SANCHEZ, Matias y LOPEZ, Walter. IoT enabled indoor air quality monitoring system for sustainable health management in an industry laboratory, a case study. En: *6th North American International Conference on Industrial Engineering and Operations Management* [en línea]. 2021 [consultado el 22 de marzo de 2024]. ISBN 978-1-7923-6130-2. Disponible en: https://index.ieomsociety.org/index.cfm/article/view/ID/3928

[22] FRAIGI, L. et al. Sensores de gases semiconductores y electroquímicos: Un estudio comparativo. ANALES AFA [en línea]. 2001, 13 [consultado el 25 de julio de 2024]. Disponible en: https://anales.fisica.org.ar/index.php/analesafa/article/view/641/644

[23] GARCÍA, Salvador Cristina. *Implementación de analizadores de protocolos de comunicaciones SPI, I2C* [en línea]. Trabajo de grado, Universidad Carlos III de Madrid, 2014 [consultado el 22 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://e-archivo.uc3m.es/rest/api/core/bitstream

s/be601b8d-eaf7-45d6-a545-f094beacabb7/content

[24] GRIDLING, Gunther y WEISS, Bettina. *Introduction to Microcontrollers* [en línea]. Vienna, 2007 [consultado el 26 de julio de 2024]. Disponible en: http://hopfen.topfen.net/uni/mc/MC-Things/Microcontroller.pdf

[25] GUILLÉN MEZA, Sandy Alexandra. Diseño, construcción y aplicación de un dispositivo electrónico basado en Arduino para monitoreo en tiempo real de parámetros ambientales. [en línea]. Tesis de Licenciatura, Universidad Estatal del Sur de Manabí, 2022 [consultado el 7 de agosto de 2024]. Disponible en: https://repositorio.unesum.edu.ec/handle/53000/4351

[26] GUPTA, Sourav. *Transimpedance Amplifier - Current to Voltage Converter.* Circuit Digest [en línea]. 10 de julio de 2019 [consultado el 5 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://circuitdigest.com/tutorial/transimpedance-amplifier-design-working-and-applications

[27] IARC. *Outdoor Air Pollution* [en línea]. Lyon, 2016 [consultado el 30 de agosto de 2024]. Disponible en: https://publications.iarc.fr/538

[28] INDOBOT ACADEMY. *Aprendiendo Thingspeak: Explicación del menú y tutorial de IoT* [en línea]. 1 de septiembre de 2022 [consultado el 30 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://blog.indobot.co.id/belajar-thingspeak-penjelasan-menu-dan-tutorial-iot/

[29] INTN. NP 49 019 16, *Calidad de aire interior en instalaciones de aire acondicionado. Sistemas centrales y unitarios.* Asunción, 2016 [consultado el 25 de julio de 2024]. Disponible en: https://www.studocu.com/latam/document/universidad-nacional-de-asuncion/higiene-y-seguridad-industrial/np-49-019-16-calidad-del-aire-interior-en-instalaciones-de-aire-acondicionado/35349532.

[30] KASTILLO, Juan Pablo y BELTRAN, Robinson David. *Optimización Energética para el aprovechamiento de ventilación natural en edificaciones en climas cálidos del Ecuador* [en línea]. Trabajo de grado, Escuela Politécnica Nacional, 2015 [consultado el 3 de septiembre de 2024]. Disponible en: doi:10.13140/2.1.1704.4803

[31] LABSOL. *Medidor de partículas PCE-AQD 20* [en línea]. [sin fecha] [consultado el 24 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.labsol.com.py/producto/356/medidor-de-particulas-pce-aqd-20 movido de ID

[32] LARMAT GONZÁLEZ, Fernando Enrique. *Sensores electroquímicos. Teoría y aplicaciones*. Cali: Programa Editorial, 2022. ISBN 978-628-7566-66-8.

[33] MAHYUDDIN, Norhayati y ESSAH, Emmanuel A. Spatial distribution of CO2 *Impact on the indoor air quality of classrooms within a University.* Journal of Building Engineering [en línea]. 2024, 89, 109246 [consultado el 17 de agosto de 2024]. ISSN 2352-7102. Disponible en: doi:10.1016/j.jobe.2024.109246

[34] MARQUES, Gonçalo y PITARMA, Rui. IAQ Evaluation Using an IoT CO2 Monitoring System for Enhanced Living Environments. En: *Advances in Intelligent Systems and Computing* [en línea]. Cham: Springer International Publishing, 2018, pp. 1169–1177 [consultado el 7 de marzo de 2024]. ISBN 9783319777115. Disponible en: doi:10.1007/978-3-319-77712-2_112

[35] MECHATRONICSTORE. *Módulo Reloj RTC DS1302 chip extraíble* [en línea]. [sin fecha] [consultado el 29 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://www.mechatronicstore.cl/modulo-reloj-rtc-ds1302-chip-extraible/

[36] MINISTERIO DEL AMBIENTE Y DESARROLLO SOSTENIBLE. *MADES inauguró primera estación de monitoreo de calidad del aire del Paraguay* [en línea]. 3 de marzo de 2021 [consultado el 19 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.mades.gov.py/2021/03/03/mades-inauguro-primera-estacion-de-monitoreo-de-calidad-del-aire-del-paraguay/

[37] MUNICIPALIDAD DE SAN LORENZO. *Prevención contra incendios* [en línea]. Ordenanza n.º 10 de 27 de marzo de 2019 [consultado el 31 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.sanlo.gov.py/index.php/normativas/ordenanzas

[38] NESCOLARDE LÓPEZ, Diego. *Diseño e implementación de un dispositivo IoT de bajo coste para la medida de la calidad del aire* [en línea]. Trabajo de grado, Universidad Miguel Hernández de Elche, 2023 [consultado el 19 de marzo de 2024]. Disponible en: https://hdl.handle.net/11000/30196

[39] Observatorio Regional de Planificación para el Desarrollo de América Latina y el Caribe. *Plan Nacional de Desarrollo: Paraguay 2030*. [en línea] Consultado 12 oct. 2024. Disponible en: https://observatorioplanificacion.cepal.org/es/planes/plan-nacional-de-desarrollo-paraguay-2030

[40] ORGANIZACIÓN INTERNACIONAL DE NORMALIZACIÓN. ISO 9000, *Sistemas de gestión de la calidad — Fundamentos y vocabulario*. Suiza, 2015 [consultado el 17 de abril de 2024]. Disponible en: https://dai.uas.edu.mx/pdfs/NORMA_ISO_9000-2015_FyV.pdf

[41] ORGANIZACIÓN MUNDIAL DE LA SALUD. *Carga de morbilidad derivada de los efectos conjuntos de la contaminación del aire en los hogares y en el ambiente en 2012.* Climate and Clean Air Coalition [en línea]. 2014 [consultado el 23 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.ccacoalition.org/resources/world-health-organization-burden-disease-joint-effects-household-and-ambient-air#:~:text=Joint%20Effects%20of%20HAP%20&%20AAP,and%202.3%20million%20deaths,%20respectively.

[42] ORGANIZACION PANAMERICANA DE LA SALUD. Calidad del aire [en línea]. [sin fecha] [consultado el 17 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.paho.org/es/temas/calidad-aire

[43] ORTEGA SEGURA, Diego Raúl. *Implementación de un prototipo para el Monitoreo de dióxido de carbono (CO2), monóxido de carbono (CO) y metano (CH4) en lugares residenciales utilizando el sistema operativo Android y Arduino* [en línea]. Trabajo de grado, Escuela Politécnica Nacional, 2017 [consultado el 2 de marzo de 2024]. Disponible en: http://bibdigital.epn.edu.ec/handle/15000/17554

[44] PALACIOS RIQUELME, Diego Fermín. *Informe Técnico sobre Calidad del Aire* [en línea]. San Lorenzo, agosto de 2017 [consultado el 15 de abril de 2024]. Disponible en: https://repositorio.conacyt.gov.py/xmlui/bitstream/handle/20.500.14066/3459/14-INV-386informe.pdf?sequence=1&isAllowed=y

[45] PARAGUAY. Congreso Nacional. Biblioteca y Archivo del Congreso Nacional. *Ley Nº 213/1993 Establece el código del trabajo* [en línea]. [consultado el 7 de julio de 2024]. Disponible en: https://www.bacn.gov.py/leyes-paraguayas/2608/ley-n-213-establece-el-codigo-del-trabajo

[46] PARAGUAY. Congreso Nacional. *Constitución Nacional de la República del Paraguay: 1992* [en línea]. [consultado el 13 de mayo de 2024]. Disponible en: https://www.bacn.gov.py/constitucion-nacional-de-la-republica-del-paraguay

[47] PARAGUAY. Congreso Nacional. *De la calidad del aire* [en línea]. Ley n.º 5211 de 3 de julio de 2014 [consultado el 25 de julio de 2024]. Disponible en: https://www.bacn.gov.py/leyes-paraguayas/4637/ley-n-5211-de-calidad-del-aire

[48] PARAGUAY. Decreto N.º 14390/92, *Reglamento General Técnico de Seguridad, Higiene y Medicina en el Trabajo.* Asunción, 1992 [consultado el 30 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.mtess.gov.py/viceministerio-de-trabajo/direccion-de-salud-y-seguridad-ocupacional

[49] PARRALES, Abel. *Evaluación y control de los riesgos en espacios confinados para la prevención de accidentes laborales en la Empresa Eléctrica Pública Estratégica Corporación Nacional de Electricidad CNEL EP– Unidad de Negocio Santa Elena.* [en línea]. Tesis de grado, UNIVERSIDAD ESTATAL PENÍNSULA DE SANTA ELENA, 2016 [consultado el 1 de agosto de 2024]. Disponible en: https://repositorio.upse.edu.ec/bitstream/46000/3617/1/UPSE-TII-2015-048.pdf

[50] Presidencia de la República del Paraguay. Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología – CONACYT. *Política Nacional de Ciencia y Tecnología* [en línea]. Consultado 31 de oct. 2024. Disponible en: https://www.conacyt.gov.py/sites/default/files/politicasdecyt.pdf

[51] PROMART. *Caja de derivación con cono 15x15x7cm* [en línea]. [sin fecha] [consultado el 29 de septiembre de 2024]. Disponible en:

https://www.promart.pe/caja-de-derivacion-con-cono-15x15x7cm/p

[52] QUINTÁNS, Camilo. *Estructuras avanzadas de Convertidores Analógico-Digital: metodologías de diseño, simulación y enseñanza* [en línea]. Tesis doctoral, Universidad Nacional de Educación a Distancia, 2008 [consultado el 3 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://apidspace.linhd.uned.es/server/api/core/bitstreams/2537b022-c3fb-46d1-89d3-89f04b1f86b1/content

[53] RICO MENDEZ, Favio; LÓPEZ CASTAÑARES, Rafael y JAIMES FIGUEROA, Ezequiel. *Daños a la salud por contaminación atmosférica* [en línea]. Toluca, 2001 [consultado el 17 de agosto de 2024]. ISBN 968-835-570-4. Disponible en: https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=RBuVVl0yTq4C&oi=fnd&pg=PR11&dq=historia+de+la+contaminacion+atmosferica&ots=GCnnKbsyN1&sig=TZ5vL2GttKrVC8y-kmvE4v_wdSI#v=onepage&q=historia%20de%20la%20contaminacion%20atmosferica&f=false

[54] ROMERO PLACERES, Manuel; DIEGO OLITE, Francisca y ÁLVAREZ TOSTE, Mireya. La contaminación del aire: su repercusión como problema de salud. *Revista Cubana de Higiene y Epidemiología* [en línea]. 2006, **44**(2) [consultado el 1 de septiembre de 2024]. ISSN 0253-1751. Disponible en: https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=223214848008

[55] Sensores electroquímicos. Academia Testo [en línea]. [sin fecha] [consultado el 13 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://www.academiatesto.com.ar/cms/sensores-electroquimicos

[56] SEVERINGHAUS, John W. *History of Respiratory Gas Monitoring in Anesthesia.* En: The Wondrous Story of Anesthesia [en línea]. New York, NY: Springer New York, 2014, pp. 745–759 [consultado el 18 de octubre de 2024]. ISBN 978-1-4614-8440-0. Disponible en: doi:10.1007/978-1-4614-8441-7_55

[57] SOUTHLAND SENSING LTD. *OMD-351-O2-CO2 Ambient Air Oxygen/Carbon Dioxide Monitor* [en línea]. [sin fecha] [consultado el 1 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://www.buysso2.com/products/omd-351-o2-co2-ambient-air-oxygen-carbon-dioxide-monitor?srsltid=AfmBOop8-S2k55T_5I_5jBQpVPs06TSVsyb7Q6kj0sOe90j6KQ909ag0

[58] Texas Instruments. *ADS1113,ADS1114,ADS1115* [en línea]. Texas: Texas Instruments, 2009 [consultado el 15 de agosto de 2024]. Disponible en: https://www.ti.com/product/ADS1115?keyMatch=datasheet%20ADS1115&tisearch=universal_search

[59] UNIT ELECTRONICS. Convertidor de Nivel Lógico 4 Canales Bidireccional 5V a 3.3V [en línea]. [sin fecha] [consultado el 27 de septiembre de 2024]. Disponible en: https://uelectronics.com/producto/conve

rtidor-de-nivel-logico-4-canales-bidireccional-5v-a-3-3v/

[60] UNIVERSIDAD NACIONAL DE ASUNCIÓN. Plan estratégico institucional 2021-2025. Asunción: Universidad Nacional de Asunción, 2021, p. 19-20. [consultado el 31 de octubre de 2024]. Disponible en: https://www.una.py/wp-content/uploads/2021/06/Plan-Estrategico-UNA-Período-2021-2025.pdf

[61] VELEZ MIRABA, Karina Mercedes. *Estudio de factibilidad de un sistema inalámbrico con sensores para el monitoreo y medición de la calidad del aire ambiental en la Universidad Estatal del Sur de Manabí* [en línea]. Trabajo de grado, Universidad Estatal del Sur de Manabí, 2022 [consultado el 13 de marzo de 2024]. Disponible en: http://repositorio.unesum.edu.ec/handle/53000/3564

[62] VÉLEZ-GUERRERO, Angela Carolina; CALLEJAS-CUERVO, Mauro y ALARCÓN-ALDANA, Andrea Catherine. *The Evolution of Air Quality Monitoring: Measurement Techniques and Instruments.* Journal of Hunan University Natural Sciences [en línea]. 2023, 50(5) [consultado el 17 de agosto de 2024]. ISSN 1674-2974. Disponible en: doi:10.55463/issn.1674-2974.50.5.14

[63] WALSH, Brian K. y SMALLWOOD, Craig D. *Pediatric Oxygen Therapy: A Review and Update.* Respiratory Care [en línea]. 2017, **62**(6), 645–661 [consultado el 13 de septiembre de 2024]. ISSN 1943-3654. Disponible en: doi:10.4187/respcare.05245

[64] WISCONSIN DEPARTMENT OF HEALTH SERVICES. *Carbon Dioxide* [en línea]. 29 de marzo de 2023 [consultado el 12 de julio de 2024]. Disponible en: https://www.dhs.wisconsin.gov/chemical/carbondioxide.htm#:~:text=400–1,000%20ppm:%20typical%20level,stagnant,%20stale,%20stuffy%20air.

[65] ZHU, Sha et al. *An Exonuclease III Protection-Based Electrochemical Method for Estrogen Receptor Assay.* International Journal of Molecular Sciences [en línea]. 2013, 14(5), 10298–10306 [consultado el 14 de octubre de 2024]. ISSN 1422-0067. Disponible en: doi:10.3390/ijms140510298

Agradecimientos

Expresamos nuestro sincero agradecimiento al **Centro Multidisciplinario de Investigaciones Tecnológicas (CEMIT)** de la Universidad Nacional de Asunción, por su apertura, buena predisposición y confianza para la implementación de este proyecto en sus instalaciones.

Asimismo, agradecemos al **Grupo de Investigación en Electrónica y Mecatrónica (GIEM)** por brindar el espacio físico necesario y el apoyo técnico fundamental para el desarrollo de esta propuesta.

30 – Produtos Naturais Bioativos e suas Aplicações

Atividade citotóxica seletiva do óleo essencial rico em sesquiterpenos de *Euphorbia leucocephala* (Euphorbiaceae)

Autor: Francisco, Izabela F. (izabelafrancisco@estudante.ufscar.br)
Co-autor(es): Ferreira, Carlos J. da Silva (carlosferreira@estudante.ufscar.br);
Tavares, Denise C. (denisecrispim2001@yahoo.com)
Orientadora: Silva, Virgínia Claudia Paulino (virginiapaulino@ufscar.br)
Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) / Centro de Ciências Agrárias (CCA)

Resumo

O óleo essencial (OE) das partes aéreas de *Euphorbia leucocephala* (Euphorbiaceae) foi caracterizado quimicamente e avaliado quanto à atividade citotóxica seletiva. As análises por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM) e detecção por ionização em chama (CG-DIC) identificaram 40 compostos, responsáveis por 96,4% do OE, com predominância de sesquiterpenos (61,7%), sendo espatulenol o constituinte majoritário (18,0%). Ensaios in vitro de viabilidade celular, realizados pelo método de resazurina, evidenciaram citotoxicidade seletiva do OE frente a células tumorais humanas, com valores de IC_{50} de 19,6 µg/mL para HeLa (adenocarcinoma cervical), 14,1 µg/mL para MCF-7 (adenocarcinoma mamário) e 83,0 µg/mL para U-251MG (glioblastoma). Além disso, o OE apresentou baixa toxicidade em fibroblastos humanos não tumorais (GM07492A), refletida em um IC_{50} significativamente mais elevado (122,7 µg/mL). Os índices de seletividade (IS) de 6,2 para HeLa e 8,7 para MCF 7 indicam potencial citotóxico preferencial contra células neoplásicas. Esses dados sugerem que o OE de *E. leucocephala*, rico em sesquiterpenos bioativos, representa uma fonte promissora de compostos naturais com aplicação farmacológica na busca por agentes antitumorais seletivos e com menor toxicidade em células normais.

Palavras-chave: *Euphorbia leucocephala*, sesquiterpenos bioativos, citotoxicidade seletiva.

Introdução

Os óleos essenciais têm sido utilizados desde a Antiguidade, sendo valorizados tanto por suas propriedades terapêuticas quanto por seu significado cultural (Hoffmann, 2020). Derivados de plantas aromáticas por processos de extração, esses compostos correspondem a metabólitos secundários que desempenham papel importante na defesa das plantas. Sua composição é dominada por terpenos voláteis, de grande diversidade estrutural. Estudos recentes destacam a eficácia dos óleos essenciais e de seus constituintes químicos como potenciais fontes de novos produtos naturais bioativos (Mounira, 2024).

Entre os grupos vegetais de interesse, destaca-se o gênero *Euphorbia* (Euphorbiaceae), que reúne cerca de 2.000 espécies, sendo o maior da família e o quarto maior entre as angiospermas (Frodin, 2004). Amplamente distribuído em regiões tropicais e subtropicais, apresenta grande diversidade morfológica (Govaerts et al., 2000; Radcliffe-Smith, 2001; Horn et al., 2012). Uma característica marcante do gênero é o látex leitoso, rico em metabólitos secundários biologicamente ativos, especialmente diterpenos e triterpenos (Ernst et al., 2015; Benjamaa et al., 2022).

Estudos prévios demonstraram que espécies de *Euphorbia* apresentam grande diversidade de metabólitos, incluindo diterpenos (macrocíclicos e lineares), triterpenos, esteroides, flavonoides, fenólicos e compostos aromáticos (Shi et al., 2008). Esses produtos naturais exibem amplo espectro de atividades biológicas, como ações antibacteriana, antifúngica, antiviral, antiplasmódica, antioxidante, antiproliferativa, anti-inflamatória, antinociceptiva e cicatrizante (Mavundza, Street & Baijnath, 2022).

Euphorbia leucocephala Lotsy (Euphorbiaceae) é um arbusto nativo da América Central, amplamente cultivado como planta ornamental. Naturalizou-se em diversas regiões, incluindo Brasil, Caribe, Índia, América do Sul, Havaí e Polinésia Francesa (Rojas-Sandoval, 2020). Apesar de sua ampla distribuição, há poucas informações sobre seu perfil fitoquímico. Até o momento, apenas um estudo relatou o isolamento de triterpenoides das folhas de *E. leucocephala*, com alguns compostos apresentando potente atividade contra o vírus da gripe A (Chen et al., 2022).

Apesar dos expressivos avanços nos campos científico e tecnológico, diversas enfermidades ainda representam um desafio significativo para sua completa erradicação em escala global. Entre essas enfermidades, o câncer destaca-se como uma doença de complexidade genética,

caracterizada por múltiplos mecanismos celulares, incluindo sustentação da sinalização proliferativa, evasão de supressores de crescimento, resistência à morte celular, habilitação da imortalidade replicativa, indução da angiogênese, ativação da invasão e metástase, reprogramação do metabolismo energético e evasão da destruição imunológica (Hanahan & Weinberg, 2011).

Segundo a Organização Mundial da Saúde, a incidência e mortalidade por câncer continuam em crescimento, configurando um desafio crítico de saúde pública (World Health Organization, 2019). Esse cenário está diretamente relacionado ao Objetivo de Desenvolvimento Sustentável (ODS) 3 – Saúde e Bem-Estar, que prevê a redução da mortalidade prematura por doenças não transmissíveis, incluindo o câncer.

Nesse contexto, o estudo de produtos naturais tem se mostrado uma estratégia eficaz na descoberta de novos fármacos para a terapia anticâncer. Estima-se que mais de dois terços dos medicamentos atualmente utilizados no tratamento do câncer sejam derivados de produtos naturais ou desenvolvidos a partir do conhecimento obtido sobre a atividade de seus componentes (Efferth, 2010).

Diversos óleos essenciais e seus constituintes, como acetato de linalila, α-terpineol, cânfora, carvacrol e limoneno, já demonstraram efeitos antitumorais em diferentes modelos celulares (Itani et al., 2008; Gedara, 2008; Crowell, Ayoubi & Burke, 1996; Sobral et al., 2014). Além disso, há evidências de que óleos essenciais possam atuar seletivamente sobre células tumorais, potencializar a ação de quimioterápicos e exercer efeitos imunomodulatórios (Blowman et al., 2018).

Diante da reconhecida bioatividade de óleos essenciais do gênero *Euphorbia* e da escassez de informações sobre *E. leucocephala*, este estudo investigou, de forma inédita, a composição química e o potencial citotóxico do óleo essencial dessa espécie.

Objetivos

Este trabalho teve como objetivo caracterizar quimicamente o óleo essencial das partes aéreas de *Euphorbia leucocephala* e avaliar seu potencial citotóxico frente a diferentes linhagens celulares. Para isso, o óleo foi obtido por hidrodestilação em aparelho tipo Clevenger, submetido à análise qualitativa por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM) e à análise quantitativa por cromatografia gasosa com detector de ionização em chama (CG-DIC), possibilitando a identificação e a quantificação dos constituintes majoritários e minoritários.

A atividade citotóxica foi avaliada em três linhagens de células tumorais humanas: HeLa (adenocarcinoma cervical), MCF-7 (adenocarcinoma mamário) e U-251MG (glioblastoma), e em fibroblastos não tumorais (GM07492A), por meio do ensaio com resazurina. Foram determinados os valores de IC_{50} para cada linhagem e calculados os índices de seletividade, a fim de verificar a citotoxicidade diferencial entre células normais e tumorais.

Além disso, buscou-se estabelecer uma correlação entre a composição química do óleo essencial e os efeitos citotóxicos observados, com ênfase nos sesquiterpenos oxigenados como possíveis principais responsáveis pela bioatividade. Este estudo também visou ampliar o conhecimento fitoquímico e biológico sobre *E. leucocephala*, espécie amplamente distribuída, mas ainda pouco explorada sob a perspectiva da química de produtos naturais e da farmacologia de seus óleos essenciais.

Materiais e métodos

Material vegetal

As partes aéreas de *Euphorbia leucocephala* (Figura 1) foram coletadas em agosto de 2023 no campus da Universidade Federal de São Carlos em Araras, São Paulo, Brasil, sob as coordenadas geográficas 22°21'26.6"S, 47°23'02.4"W. A identificação taxonômica foi confirmada pela Dra. Renata Sebastiani (CCA/UFSCar), e um exemplar testemunho foi depositado no Herbário da UFSCar sob o número 065. A coleta está registrada no Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético (SISGEN), sob o código AD9CF9C.



Figura 1. Exemplar de *Euphorbia leucocephala* Lotsy (Euphorbiaceae).

Extração do óleo essencial

O óleo essencial (OE) das partes aéreas de *Euphorbia leucocephala* foi obtido por hidrodestilação em aparelho do tipo Clevenger, durante 3 horas contadas a partir do início da ebulição (Figura 2). Foram realizadas três extrações independentes, cada uma contendo 150 g de material vegetal fresco recém-triturado, em mistura com 500 mL de água destilada. Ao final do processo, o óleo essencial foi separado e a água residual removida com sulfato de sódio anidro. O produto foi filtrado e armazenado em

frascos de vidro âmbar, sob refrigeração a 4 °C (Figura 3). O rendimento da extração foi calculado em triplicata e expresso como a porcentagem da massa de óleo essencial obtida em relação à massa seca do material vegetal (% m/m), conforme indicado na Equação 1.

$$Rendimento = \left[\frac{massa\ do\ óleo\ (g)}{massa\ do\ material\ vegetal\ (100g)}\right] x100$$

Equação 1.

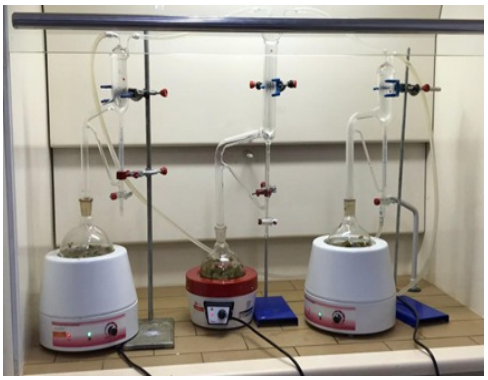


Figura 2. Sistema de hidrodestilação por aparelho do tipo clevenger.

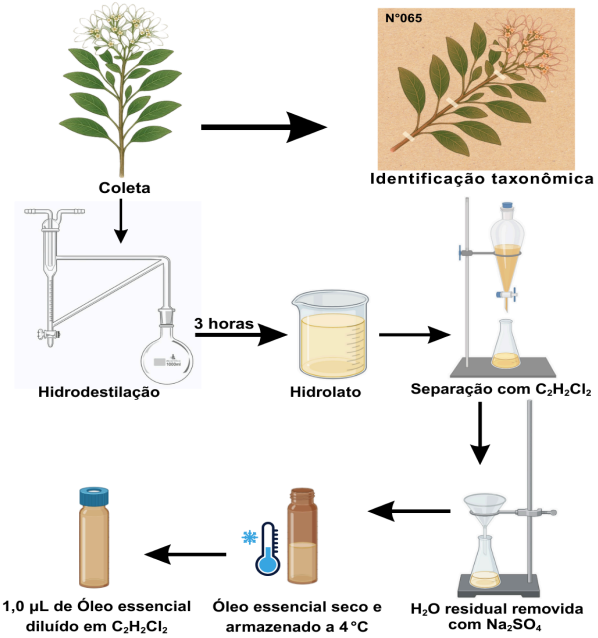


Figura 3. Diagrama da metodologia de extração.

Identificação química dos constituintes do OE

As análises cromatográficas dos óleos essenciais e dos compostos isolados foram realizadas por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM), utilizando o sistema Shimadzu CG-EM, modelo GC-17A/QP2010 Plus. As análises empregaram uma coluna capilar Factor Four-VF-5ms (30 m × 0,25 mm de diâmetro interno × 0,25 µm de espessura de filme), com um programa de temperatura iniciando em 60 °C, aumentando até 260 °C a uma taxa de 3 °C/min, e depois até 290 °C a 10 °C/min.

A temperatura do injetor foi fixada em 220 °C, da interface em 310 °C, da fonte de íons em 220 °C, com energia de ionização de 70 eV. O hélio foi utilizado como gás de arraste, a um fluxo de 1 mL/min, com razão de divisão de 1:30. Foram injetados 1,0 µL de óleo essencial diluído em diclorometano. Os fragmentos foram analisados na faixa de varredura de 40 a 500 amu. A identificação dos constituintes foi realizada com base nos índices de retenção (IR), de acordo com o método de Van den Dool & Kratz (1963), calculados para cada composto por meio da injeção de uma série de hidrocarbonetos lineares (C_7–C_{40}) sob as mesmas condições da amostra (Equação 2). A caracterização qualitativa dos

constituintes foi realizada pela comparação dos índices de retenção experimentais com valores tabulados e pela correspondência dos espectros de massas com a biblioteca NIST (versão 23) e Adams (2007).

$$IR = 100\ \frac{(tR\ -\ t'n)}{(t'n + 1 -\ t'n)}$$

Equação 2.

IR = índice de retenção do composto.
tR = tempo de retenção do composto de interesse.
t'n = tempo de retenção do n-alcano anterior, on n é o número de carbonos.
t'n+1= tempo de retenção do n-alcano posterior.

As análises quantitativas foram realizadas por cromatografia gasosa com detector de ionização em chama (CG-DIC), utilizando um cromatógrafo HP-5890 Série II, sob as mesmas condições experimentais descritas para a análise qualitativa. A temperatura do detector foi ajustada para 280 °C. A quantificação relativa (%) de cada componente do óleo essencial foi expressa como a razão entre a área do pico individual e a soma das áreas de todos os picos detectados na amostra.

Ensaio Citotóxico

Neste estudo, diferentes linhagens de células humanas foram utilizadas para avaliar a atividade citotóxica das amostras, incluindo fibroblastos não tumorais (GM07492A), adenocarcinoma cervical (HeLa), adenocarcinoma mamário (MCF-7) e glioblastoma (U-251MG). As células foram cultivadas em uma mistura dos meios Ham's Nutrient Mixture F10 (HAM-F10) e Dulbecco's Modified Eagle's Medium (DMEM) (1:1; Sigma-Aldrich), suplementada com 10% de soro fetal bovino (Cultilab, Campinas, SP, Brasil), antibióticos (0,01 mg/mL de estreptomicina e 0,006 mg/mL de penicilina; Sigma-Aldrich) e 2,38 mg/mL de Hepes (Sigma-Aldrich), sendo incubadas a 37 °C com 5% de CO_2.

A viabilidade celular foi avaliada por meio do ensaio colorimétrico com Resazurina (ACS Scientific, São Paulo, Brasil), conforme as instruções do fabricante e o protocolo descrito por Riss et al. (2016). Para os experimentos, $1x10^4$ células foram semeadas em microplacas de 96 poços. A amostra de óleo essencial (OE) de *E. leucocephala* foi inicialmente dissolvida em 1% de dimetilsulfóxido (DMSO; Sigma-Aldrich) e, em seguida, diluída no meio completo. Seguindo os protocolos, as concentrações testadas variaram de 0,80 a 100 µg/mL para as células tumorais, e de 39 a 5000 µg/mL para as células não tumorais. Os experimentos foram realizados em triplicata (Figura 4).

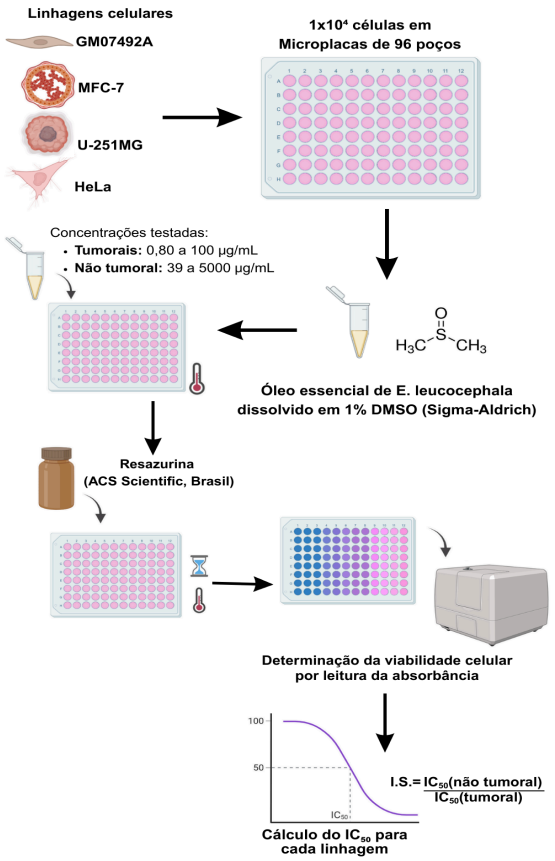


Figura 4. Diagrama da metodologia do ensaio citotóxico.

Os valores de absorbância foram utilizados para determinar a viabilidade celular e calcular os valores de IC_{50}. O índice de seletividade (IS) para as linhagens tumorais foi calculado como a razão entre o IC_{50} da linhagem não tumoral e o IC_{50} obtido para cada linhagem tumoral.

Resultados e Discussão

O óleo essencial (OE) obtido das partes aéreas de *E. leucocephala* apresentou um rendimento de 0,05% (m/m) em relação ao peso fresco do material vegetal. A análise química por GC-DIC e GC-EM identificou 40 constituintes, descritos na tabela 1, que juntos representaram 96,4% da composição total do óleo.

Os sesquiterpenos foram a classe química dominante, compreendendo sesquiterpenos oxigenados (35,6%) e hidrocarbonetos (26,1%) (Tabela 2). Frações menores incluíram diterpenos oxigenados (4,0%), hidrocarbonetos monoterpênicos (3,9%) e monoterpenos oxigenados (7,2%), fenilpropanóides (5,7%) e outros compostos não-terpenoides (13,9%). O óleo essencial foi predominantemente composto por espatulenol (18,0%), seguido por óxido de cariofileno (6,1%), α-humuleno (6,0%), (*E*)-β-cariofileno (4,6%), β-eudesmol (4,2%) e fitol (4,0%).

Tabela 1. Componentes químicos identificados no OE das partes aéreas de *E. leucocephala*

Componente	RIexp	RIlit	AR %
3-Heptino	720	716	0,2
p-Cymeno	1020	1025	3,9
p-Cresol	1068	1070	0,5
p-Tolualdeído	1077	1079	1,4

Borneol	1166	1169	1,1
α-Terpineol	1190	1193	1,2
Benzo[f]urano, 2,3-dihidro-	1221	1223	0,2
(*Z*)-Carveol	1226	1223	1,3
Timol	1290	1298	3,6
2-Metoxi-4-vinilfenol	1315	1319	1,5
(*2E,4E*)-Decadienal	1324	1324	1,2
δ-Elemeno	1345	1341	2,6
2-Metoxi-4-propilfenol	1376	1373	2,3
β-Cubebeno	1390	1390	2,0
α-Copaeno	1393	1393	0,5
(*E*)-β-Cariofileno	1417	1419	4,6
(*Z*)-β-Farneseno	1440	1438	0,6
α-Humuleno	1452	1449	6,0
(*Z*)-14-Metil-8-hexadecen-1-ol	1470	1474	3,8
γ-Muuroleno	1478	1474	3,8
Patchouleno	1482	1484	0,1
β-Selineno	1493	1491	0,9
Bicyclogermacreno	1504	1505	1,6
γ-Cadineno	1520	1514	2,4
(*E*)-Calameneno	1535	1529	3,7
α-Calacoreno	1544	1548	1,0
Espatulenol	1588	1582	18,0
Óxido de cariofileno	1592	1593	6,1
Selin-6-en-4α-ol	1636	1636	1,6
epi-α-Muurolol	1645	1640	1,2
Selin-11-en-4α-ol	1662	1660	3,5
β-Eudesmol	1695	1691	4,2
α-Bisabolol	1708	1710	1,0
n-Octadecano	1805	1800	3,5
Acetona de hexahidrofarnesila	1843	1845	1,0
Ácido hexadecanoico	1929	1928	1,5
Ácido 9,12-octadecadienoico (*Z,Z)*, metil éster	2070	2078	2,0
Metil estearato	2127	2130	0,3
Fitol	2220	2219	4,0
1-Heptacoseno	2681	2688	0,2

RIexp: Índice de retenção determinado em relação aos *n*-alcanos (C_7–C_{40}) na coluna VF-5ms; RIlit: Índice de retenção conforme a literatura (Adams, 2007 e NIST023); RA%: Área relativa (área do pico em relação à área total dos picos no cromatograma obtido por CG-DIC), média de três repetições.

Tabela 2. Relação percentual da composição do OE das partes aéreas de *E. leucocephala.*

Classe dos compostos	%
Hidrocarbonetos monoterpênicos	3,9
Monoterpenos oxigenados	7,2
Hidrocarbonetos sesquiterpênicos	26,1
Sesquiterpenos oxigenados	35,6
Diterpenos oxigenados	4,0
Fenilpropanóides	5,7
Outros componentes	13,9
Total de Componentes identificados	96,4

O perfil cromatográfico do óleo essencial de *E. leucocephala* está ilustrado pelo cromatograma de íons totais (TIC) (Figura 5).

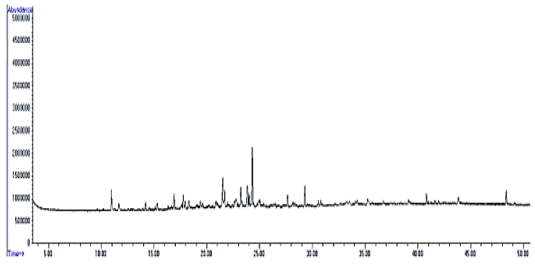


Figura 5. Cromatograma de íons totais (TIC) do OE das partes aéreas de *E. leucocephala*.

Para avaliar a segurança do óleo, sua citotoxicidade foi avaliada em fibroblastos humanos não tumorais (GM07492A) em concentrações de até 5000 µg/mL, de acordo com a diretriz 487 da OECD (2023). O óleo essencial demonstrou baixa citotoxicidade contra células normais, com um IC_{50} de 122,7 µg/mL. Em contraste, apresentou efeitos citotóxicos significativamente maiores em linhagens celulares tumorais, como indicados na tabela 3, com valores de IC_{50} de 14,1 ± 1,2 µg/mL para MCF-7, 19,6 ± 1,7 µg/mL para HeLa e 83,0 ± 2,1 µg/mL para células U-251MG. Esses resultados destacam uma sensibilidade diferencial entre células tumorais e não tumorais, sugerindo um potencial citotóxico seletivo.

O índice de seletividade (IS), um parâmetro relevante para avaliar a citotoxicidade preferencial, foi calculado como 8,7 para MCF-7, 6,2 para HeLa e 1,4 para U-251MG, indicando seletividade promissora contra células de câncer de mama e colo do útero (Calderón-Montaño et al. 2021).

Tabela 3. IC_{50} e índice de seletividade (IS) obtidos após 24 horas de tratamento com o OE das partes aéreas de *E. leucocephala.*

Linhagens celulares	IC_{50} (µg/mL)	IS
GM07492A	122,7 ± 1,5	–
HeLa	19,6 ± 1,7	6,2

MCF-7	14,1 ± 1,2	8,7
U-251MG	83,0 ± 2,3	1,4

GM07492A: fibroblastos humanos não tumorais; HeLa: adenocarcinoma cervical humano; MCF-7: adenocarcinoma mamário humano; U-251MG: glioblastoma humano. Os valores estão expressos como média ± desvio padrão.

Óleos essenciais têm ganhado atenção como potenciais adjuvantes na terapia contra o câncer, não apenas devido à sua capacidade de aumentar a eficácia de agentes quimioterápicos, mas também por mitigar efeitos colaterais relacionados ao tratamento, como estresse oxidativo e náuseas (Reis et al. 2017). Dentre seus constituintes bioativos, terpenoides, especialmente sesquiterpenos e monoterpenos, têm demonstrado interações sinérgicas com fármacos convencionais, melhorando respostas citotóxicas, superando resistência a drogas e reduzindo toxicidade fora do alvo em vários modelos de câncer (Ambrož et al. 2017; Thalappil et al. 2024).

Sesquiterpenos, o principal grupo químico identificado no OE, são conhecidos por múltiplos mecanismos antitumorais, incluindo modulação da sinalização de NF-κB, inibição da peroxidação lipídica e redução de espécies reativas de oxigênio e nitrogênio (Abu-Izneid et al. 2020).

A atividade citotóxica observada neste estudo pode ser amplamente atribuída ao alto teor de sesquiterpenos, especialmente à presença de espatulenol, (E)-β-cariofileno, óxido de cariofileno, α-humuleno e β-eudesmol. O espatulenol, em particular, demonstrou atividade antiproliferativa ao induzir apoptose e alterar a morfologia de células cancerosas, com valores de IC_{50} reportados de 40,1 µg/mL em células humanas de melanoma SK-MEL-28 e 49,3 µg/mL em células humanas de câncer de ovário OVCAR-8 (Santos et al. 2020; Nascimento et al. 2018).

(E)-β-Cariofileno (BCP) e seu derivado oxidado, óxido de cariofileno (BCPO), demonstraram propriedades citotóxicas e anti-inflamatórias. Esses compostos são conhecidos por promover apoptose em células tumorais e aumentar os efeitos de agentes quimioterápicos. Em células de adenocarcinoma cervical humano HeLa, BCP apresentou um IC_{50} de 18,2 µg/mL e BCPO de 14,8 µg/mL, enquanto em células de adenocarcinoma mamário MCF-7, os valores de IC_{50} foram de 14,5 µg/mL para BCP e 19,7 µg/mL para BCPO (Fidyt et al. 2016). Além da citotoxicidade, o BCP também demonstrou atividade imunomodulatória, atuando como agonista seletivo do receptor canabinoide tipo 2 (CB2) e reduzindo a expressão de citocinas pró-inflamatórias, o que pode contribuir ainda mais para seu potencial anticâncer (Mannino et al. 2021; Fidyt et al. 2016). O α-humuleno demonstrou forte atividade antitumoral em

diversos modelos de câncer, incluindo colorretal (HCT-116, IC_{50} = 64,2 µg/mL), mama (MCF-7, IC_{50} = 81,9 µg/mL), próstata (LNCaP, IC_{50} = 11,0 µg/mL) e carcinoma hepatocelular (HepG2), onde reduziu a viabilidade celular em aproximadamente 60% a 80 µM após 48 horas. Seu mecanismo envolve inibição da via de sinalização Akt e indução de apoptose via ativação da caspase-3.

Adicionalmente, foi relatado que o α-humuleno potencializa a eficácia de agentes quimioterápicos como oxaliplatina e 5-fluorouracil (Chen et al. 2019; Leite et al. 2021; Dalavaye et al. 2024). Outros sesquiterpenos, como eudesmol e seus isômeros, também foram identificados como agentes citotóxicos potentes. Em células humanas de carcinoma hepatocelular HepG2, α-, β- e γ-eudesmol apresentaram valores de IC_{50} de 36,2 µg/mL, 40,5 µg/mL e 35,4 µg/mL, respectivamente, induzindo apoptose por ativação de caspases (Bomfim et al. 2013). Adicionalmente, o β-eudesmol induziu apoptose dependente de JNK via a via mitocondrial em células de leucemia mieloide aguda HL60, com um IC_{50} de 52,1 µg/mL (Li et al. 2013). O fitol, um diterpeno e um dos constituintes majoritários identificados no OE de *E. leucocephala*, demonstrou propriedades anticancerígenas ao suprimir o crescimento de tumor de cólon (IC_{50} = 51,7 µg/mL) e modular a progressão do câncer de mama (Lee et al. 1999; Yu et al. 2005). Além desses efeitos, estudos recentes mostraram que o fitol pode superar resistência múltipla a fármacos em modelos de leucemia mieloide aguda ao suprimir a expressão da P-glicoproteína (P-gp) por meio da inibição da via de sinalização NF-κB, aumentando assim o acúmulo intracelular e a eficácia citotóxica de agentes quimioterápicos como a doxorrubicina. Em células HL-60R, o fitol apresentou um IC_{50} de 10,7 µM (Labbozzetta et al. 2022).

O potencial citotóxico dos óleos essenciais de *Euphorbia* tem ganhado atenção crescente, com diversas espécies demonstrando notável atividade anticancerígena. Por exemplo, o OE de *E. larica* exibiu citotoxicidade seletiva contra células de câncer de mama triplo-negativo (MDA-MB-231) sem afetar células normais (IC_{50} = 377 µg/mL) (Shah et al. 2023).

Similarmente, o OE de *E. intisy* demonstrou capacidade de reverter resistência múltipla a fármacos ao inibir a expressão de P-glicoproteína (P-gp) e bloquear a via NF-kappaB, aumentando assim a retenção e a citotoxicidade do fármaco (IC_{50} = 22,0 µg/mL em HL-60 e 24,5 µg/mL em HL-60R). Esses efeitos sugerem seu potencial como agente quimiossensibilizante, atuando por mecanismos distintos e não tóxicos (Poma et al. 2021). Além disso, foi relatado que o OE de *E. esula* induz apoptose em células

de câncer hepático HepG2 via disfunção mitocondrial e estresse oxidativo, demonstrando 72,08% de inibição a 100 µg/mL após 24 horas de tratamento (Lv et al. 2020). Ademais, o OE de *E. macrorrhiza* demonstrou atividade antitumoral promissora contra células Caco-2, uma linhagem humana de câncer colorretal (IC_{50} = 11,9 µg/mL) (Lin et al. 2012).

Conclusão

O óleo essencial (OE) das partes aéreas de *E. leucocephala* demonstrou citotoxicidade significativa, atribuída principalmente à sua alta concentração de sesquiterpenos oxigenados, incluindo espatulenol, óxido de cariofileno, α-humuleno e β-eudesmol. O OE inibiu efetivamente a proliferação das células cancerígenas HeLa, MCF-7 e U-251MG, ao mesmo tempo em que apresentou toxicidade mínima em fibroblastos humanos não tumorais. Esses achados sugerem um índice terapêutico favorável, provavelmente potencializado por interações sinérgicas entre seus constituintes bioativos. Dada sua citotoxicidade seletiva e baixa toxicidade em células normais, o óleo essencial de *E. leucocephala* mostra-se promissor como um potencial agente terapêutico no tratamento do câncer, possivelmente em combinação com a quimioterapia convencional para mitigar efeitos adversos.

Referências Bibliográficas:

Abu-Izneid, T., Rauf, A., Shariati, M. A., Khalil, A. A., Imran, M., Rebezov, M., Uddin, M. S., Mahomoodally, M. F., & Rengasamy, K. R. R. (2020). Sesquiterpenes and their derivatives—natural anticancer compounds: An update. *Pharmacological Research, 161,* 105165. https://doi.org/10.1016/j.phrs.2020.105165

Adams, R. P. (2007). *Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry* (4th ed.). Carol Stream, IL: Allured Publishing Corporation.

Ambrož, M., Matoušková, P., Skarka, A., Zajdlová, M., Žáková, K., & Skálová, L. (2017). The effects of selected sesquiterpenes from *Myrica rubra* essential oil on the efficacy of doxorubicin in sensitive and resistant cancer cell lines. *Molecules, 22*(6), 1021. https://doi.org/10.3390/molecules22061021

Benjamaa, R., Moujanni, A., Kaushik, N., Choi, E. H., Essamadi, A. K., & Kaushik, N. K. (2022). *Euphorbia* species latex: A comprehensive review on phytochemistry and biological activities. *Frontiers in Plant Science, 13,* 1008881. https://doi.org/10.3389/fpls.2022.1008881

Blowman, K., Magalhães, M., Lemos, M. F. L., Cabral, C., & Pires, I. M. (2018). Anticancer properties of essential oils and other natural products. *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine, 2018,* 3149362. https://doi.org/10.1155/2018/3149362

Bomfim, D. S., Ferraz, R. P. C., Carvalho, N. C., Soares, M. B. P., Pinheiro, M. L. B., Costa, E. V., & Bezerra, D. P. (2013). Eudesmol isomers induce caspase-mediated apoptosis in human hepatocellular carcinoma HepG2 cells. *Basic & Clinical Pharmacology & Toxicology, 113*(5), 300–306. https://doi.org/10.1111/bcpt.12097

Calderón-Montaño, J. M., Martínez-Sánchez, S. M., Jiménez-González, V., Burgos-Morón, E., Guillén-Mancina, E., Jiménez-Alonso, J. J., & López-Lázaro, M. (2021). Screening for selective anticancer activity of 65 extracts of plants collected in Western Andalusia, Spain. *Plants, 10*(10), 2193. https://doi.org/10.3390/plants10102193

Chen, H., Chuang, C. W., Cheng, J. C., Yeh, Y. J., Chang, T. H., Shi, Y. T., & Chao, C. H. (2022). Terpenoids with anti-influenza activity from the leaves of *Euphorbia leucocephala*. *Natural Product Research, 37*(6), 936–943. https://doi.org/10.1080/14786419.2022.2098739

Chen, H., Yuan, J., Hao, J., Wen, Y., Lv, Y., Chen, L., & Yang, X. (2019). α-Humulene inhibits hepatocellular carcinoma cell proliferation and induces apoptosis through the inhibition of Akt signaling. *Food and Chemical Toxicology, 134,* 110830. https://doi.org/10.1016/j.fct.2019.110830

Crowell, P. L., Ayoubi, A. S., & Burke, Y. D. (1996). Antitumorigenic effects of limonene and perillyl alcohol against pancreatic and breast cancers. In A. S. Ip, A. L. Birt, & C. D. Rogers (Eds.), *Dietary*

phytochemicals in cancer prevention and treatment (pp. 131–136). New York, NY: Springer. https://doi.org/10.1007/978-1-4613-0399-2_10

Dalavaye, N., Nicholas, M., Pillai, M., Erridge, S., & Sodergren, M. H. (2024). The clinical translation of α-humulene – A scoping review. *Planta Medica, 90*(9), 664–674. https://doi.org/10.1055/a-2307-8183

Ernst, M., Grace, O. M., Saslis-Lagoudakis, C. H., Nilsson, N., Simonsen, H. T., & Rønsted, N. (2015). Global medicinal uses of *Euphorbia* L. (Euphorbiaceae). *Journal of Ethnopharmacology, 176,* 90–101. https://doi.org/10.1016/j.jep.2015.10.025

Efferth, T. (2010). Cancer therapy with natural products and medicinal plants. *Planta Medica, 76*(11), 1035–1036. https://doi.org/10.1055/s-0030-1250062

Fidyt, K., Fiedorowicz, A., Strządała, L., & Szumny, A. (2016). Beta-caryophyllene and beta-caryophyllene oxide—natural compounds of anticancer and analgesic properties. *Cancer Medicine, 5,* 3007–3017. https://doi.org/10.1002/cam4.816

Frodin, D. G. (2004). History and concepts of big plant genera. *Taxon, 53*(3), 753–776. https://doi.org/10.2307/4135449

Govaerts, R., Frodin, D. G., & Radcliffe-Smith, A. (2000). *World checklist and bibliography of Euphorbiaceae (and Pandaceae)* (Vol. 2). London, UK: Royal Botanical Gardens, Kew.

Gedara, S. R. (2008). Terpenoid content of *Thymus algeriensis* Boiss leaves. *Mansoura Journal of Pharmaceutical Sciences, 24,* 133–143.

Hanahan, D., & Weinberg, R. A. (2011). Hallmarks of cancer: The next generation. *Cell, 144*(5), 646–674. https://doi.org/10.1016/j.cell.2011.02.013

Hoffmann, K. H. (2020). Óleos essenciais. *Zeitschrift für Naturforschung C, 75*(7–8). https://doi.org/10.1515/znc-2020-0124

Horn, J. W., Van Ee, B. W., Morawetz, J. J., Riina, R., Steinmann, V. W., Berry, P. E., Wurdack, K. J. (2012).

Phylogenetics and the evolution of major structural characters in the giant genus *Euphorbia* L. (Euphorbiaceae). *Molecular Phylogenetics and Evolution, 63*(2), 305–306. https://doi.org/10.1016/j.ympev.2011.12.022

Itani, W. S., El-Banna, S. H., Hassan, S. B., Larsson, R. L., Bazarbachi, A., & Gali-Muhtasib, H. U. (2008). Anti-colon cancer components from Lebanese sage (*Salvia libanotica*) essential oil: Mechanistic basis. *Cancer Biology & Therapy, 7*(11), 1765–1773.

Labbozzetta, M., Poma, P., Tutone, M., McCubrey, J. A., Notarbartolo, M., & Sajeva, M. (2022). Phytol and heptacosane are possible tools to overcome multidrug resistance in an in vitro model of acute myeloid leukemia. *Pharmaceuticals, 15*(3), 356. https://doi.org/10.3390/ph15030356

Lee, K. I., Rhee, S. H., & Park, K. Y. (1999). Anticancer activity of phytol and eicosatrienoic acid identified from Perilla leaves. *Journal of the Korean Society of Food Science and Nutrition, 28*(5), 1107–1112.

Leite, G. M., Barbosa, M. O., Lopes, M. J. P., Delmondes, G. A., Bezerra, D. S., Araújo, I. M., … Menezes, I. R. A. (2021). Pharmacological and toxicological activities of α-humulene and its isomers: A systematic review. *Trends in Food Science & Technology, 115,* 255–274. https://doi.org/10.1016/j.tifs.2021.06.049

Li, Y., Li, T., Miao, C., Li, J., Xiao, W., & Ma, E. (2013). β-Eudesmol induces JNK-dependent apoptosis through the mitochondrial pathway in HL60 cells. *Phytotherapy Research, 27*(3), 338–343. https://doi.org/10.1002/ptr.4727

Lin, J., Dou, J., Xu, J., & Aisa, H. A. (2012). Chemical composition, antimicrobial and antitumor activities of the essential oils and crude extracts of *Euphorbia macrorrhiza*. *Molecules, 17*(5), 5030–5039. https://doi.org/10.3390/molecules17055030

Lv, D., Pan, L. H., Zhang, R., Yang, J., Chen, H., Wen, Y., … Yang, X. (2020). Essential oil from *Euphorbia esula* inhibits proliferation and induces apoptosis in HepG2 cells via mitochondrial

dysfunction. *Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences, 56,* e17542. https://doi.org/10.1590/s2175-97902019000317542

Mannino, F., Pallio, G., Corsaro, R., Minutoli, L., Altavilla, D., Vermiglio, G., … Irrera, N. (2021). Beta-caryophyllene exhibits anti-proliferative effects through apoptosis induction and cell cycle modulation in multiple myeloma cells. *Cancers, 13*(22), 5741. https://doi.org/10.3390/cancers13225741

Mavundza, E. J., Street, R., & Baijnath, H. (2022). A review of the ethnomedicinal, pharmacology, cytotoxicity and phytochemistry of the genus *Euphorbia* in southern Africa. *South African Journal of Botany, 144,* 403–418. https://doi.org/10.1016/j.sajb.2021.08.029

Mkaddem Mounira, G. (2024). Óleos essenciais e suas moléculas bioativas: Avanços recentes e novas aplicações. *Bioquímica*. IntechOpen. http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.113406

Naeem, A., Hu, P., Yang, M., Zhang, J., Liu, Y., Zhu, W., & Zheng, Q. (2022). Natural products as anticancer agents: Current status and future perspectives. *Molecules, 27*(23), 8367. https://doi.org/10.3390/molecules27238367

Nascimento, K. F., Moreira, F. M. F., Santos, J. A., Kassuya, C. A. L., Croda, J. H. R.Cardoso , C., C. A. L.,. Formagio, A. S. N. (2018). Antioxidant, anti-inflammatory, antiproliferative and antimycobacterial activities of the essential oil of *Psidium guineense* Sw. and spathulenol. *Journal of Ethnopharmacology, 210,* 351–358. https://doi.org/10.1016/j.jep.2017.08.030

OECD. (2023). *Test No. 487: In vitro mammalian cell micronucleus test. OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 4.* Paris: OECD Publishing. https://doi.org/10.1787/9789264224438-en

World Health Organization. (2019, July 12). Cancer. Retrieved August 24, 2025, from https://www.who.int/health-topics/cancer#tab=tab_1

Poma, P., Labbozzetta, M., Ramarosandratana, A. V., Rosselli, S., Tutone, M., Sajeva, M., & Notarbartolo, M. (2021). In vitro modulation of P-glycoprotein activity by *Euphorbia intisy* essential oil on acute myeloid leukemia cell line HL-60R. *Pharmaceuticals, 14*(2), 111. https://doi.org/10.3390/ph14020111

Radcliffe-Smith, A. (2001). *Genera Euphorbiacearum.* Kew: Kew Publishing.

Riss, T. L., Moravec, R. A., Niles, A. L., Duellman, S., Benink, H. A., Worzella, T. J., & Minor, L. (2016). Cell viability assays. In *Assay Guidance Manual.* Bethesda, MD: Eli Lilly & Company and the National Center for Advancing Translational Sciences.

Rojas-Sandoval, J. (2020). *Euphorbia leucocephala* (white Christmas bush). CAB International. https://doi.org/10.1079/cabicompendium.95917925

Reis, D., & Jones, T. (2017). Aromatherapy: Using essential oils as a supportive therapy. *Clinical Journal of Oncology Nursing, 21*(1), 16–19. https://doi.org/10.1188/17.cjon.16-19

Santos, L. K. B., Veras, M. D. A., Marques, K. K. G., Alves, M. M. M., Mendes, A. N., Carvalho, F. A. A., … Gonçalves, J. C. R. (2020). Assessment of in vitro anti-melanoma potential of *Ephedranthus pisocarpus* R.E.Fr. *Anticancer Research, 40*(9), 5015–5024. https://doi.org/10.21873/anticanres.14504

Shah, M., Khan, F., Ullah, S., Mohanta, T. K., Khan, A., Zainab, R., … Al-Harrasi, A. (2023). CG-EM profiling and biomedical applications of *Euphorbia larica* essential oil: A new report. *Antioxidants, 12*(3), 662. https://doi.org/10.3390/antiox12030662

Shi, Q. W., Su, X. H., & Kiyota, H. (2008). Chemical and pharmacological research of the plants in genus *Euphorbia*. *Chemical Reviews, 108*(10), 4295–4327. https://doi.org/10.1021/cr078350s

Sobral, M. V., Xavier, A. L., Lima, T. C., & de Sousa, D. P. (2014). Antitumor activity of monoterpenes found in essential oils. *The Scientific World*

Journal, 2014, 1–35. https://doi.org/10.1155/2014/953451

Thalappil, M. A., Singh, P., Carcereri de Prati, A., Sahoo, S. K., Mariotto, S., & Butturini, E. (2024). Essential oils and their nanoformulations for breast cancer therapy. *Phytotherapy Research, 38*(2), 556–591. https://doi.org/10.1002/ptr.8054

Van Den Dool, H., & Kratz, P. D. (1963). A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography. *Journal of Chromatography, 11,* 463–471. https://doi.org/10.1016/s0021-9673(01)80947-x

Yu, F. L., Gapor, A., & Bender, W. (2005). Evidence for the preventive effect of the polyunsaturated phytol side chain in tocotrienols on 17β-estradiol epoxidation. *Cancer Detection and Prevention, 29*(4), 383–388.https://doi.org/10.1016/j.cdp.2005.03.003

Financiamento

Os autores gostariam de agradecer ao CCA/UFSCar, à FAPESP (2023/15348-4), ao CNPq, à FAPERJ e à CAPES pelo apoio financeiro.

27. Ciencia, tecnología e innovación

Morfogénesis computacional aplicada a la arquitectura: pruebas de diseño biomimético para un pabellón en la Plaza João Francisco de la ciudad de Goiás

Autor: Ribeiro, João P. S.; joao.ribeiro@discente.ufg.br
Orientador/a: Góes, Thiago M.; thiago_goes@ufg.br
Universidad Federal de Goiás – Campus de Goiás, Unidad Académica Especial de Ciencias Sociales Aplicadas

Resumen

Este trabajo investiga el potencial de la morfogénesis digital y la biomímesis, mediada por herramientas computacionales paramétricas, para generar arquitecturas adaptativas y eficientes. Basado en un estudio de caso de un pabellón en la Plaza Jornalista Goiás do Couto, en la ciudad de Goiás, Goiás, la investigación aplica Diseño Basado en el Rendimiento y metodologías de búsqueda de forma en Rhinoceros®/Grasshopper®, integrando simulaciones físicas (Kangaroo) y ambientales (Ladybug). La forma emerge de un algoritmo de rendimiento: inicialmente, la malla triangular se estresa por cargas y restricciones; luego, se somete a una abstracción biomimética inspirada en la morfología de la vegetación nativa; finalmente, evoluciona en una envolvente responsiva que modula las aberturas según la radiación solar. Los resultados muestran reducciones de hasta el 41,2% en la radiación incidente y del 37,3% en el escenario responsivo, lo que demuestra la efectividad del flujo de trabajo. El estudio también analiza los desafíos de las métricas únicas y propone la incorporación de UDI para la optimización de múltiples objetivos, contribuyendo a una arquitectura más resiliente, económica y consciente del medio ambiente.

Palabras clave: morfogénesis digital, biomimética, diseño paramétrico.

La arquitectura contemporánea está experimentando un cambio de paradigma, pasando de la composición de formas estáticas a la generación de sistemas complejos y adaptativos, impulsados por avances computacionales en respuesta a las urgentes transformaciones culturales y ambientales. La intensificación de los impactos climáticos globales, como señala Medeiros (2002), ha catalizado la demanda de prácticas más responsables, impulsando a sectores como la construcción a buscar nuevas metodologías. Es en este contexto que el «segundo giro digital», descrito por Mario Carpo (2023), cobra importancia fundamental, marcando la transición de la mera representación a la generación de formas. Esta evolución proporciona a los arquitectos herramientas que les permiten no solo explorar geometrías innovadoras, sino también, fundamentalmente, predecir comportamientos y optimizar el rendimiento ambiental de los edificios mediante simulaciones, un campo de investigación que ha crecido exponencialmente en las últimas décadas (Brotas y Rusovan, 2013; Delgarm et al., 2016).

Esta evolución se sustenta en una confluencia de ideas. El principio de Buckminster Fuller (1996) de "hacer más con menos" y el concepto de desarrollo sostenible consolidado por Brundtland (1987) sientan las bases éticas y de eficiencia. Al mismo tiempo, el diseño paramétrico, definido por Eltaweel y Su (2017) como una metodología basada en variables interconectadas, ofrece el marco técnico para materializar estas ambiciones. Autores como Oxman (2005) destacan que el diseño generativo, al emplear algoritmos que generan, evalúan y refinan múltiples propuestas, permite una exploración formal y performativa sin precedentes, evocando la fascinación por la naturaleza de pioneros como Gaudí. Este enfoque encuentra en la biomímesis un vasto repertorio de soluciones optimizadas por la evolución, donde la naturaleza actúa como modelo y mentor. La integración del diseño paramétrico y la simulación de rendimiento, destacada por Fonseca et al. (2016), se convierte así en el mecanismo central para la optimización de proyectos, especialmente en lo que respecta a la eficiencia de las envolventes de los edificios (Cartana, Pereira y Mayer, 2017). El diálogo entre arquitectura y biología se intensifica, y conceptos como la morfogénesis, impulsada por herramientas digitales, comienzan a explicar el surgimiento de formas adaptativas y eficientes (Nascimento, 2014), validando la visión de Le Corbusier de los edificios como organismos vivos (Steadman, 1979).

A pesar del avance de las herramientas digitales, su potencial sigue infrautilizado, lo que genera una serie de contradicciones. La automatización y la capacidad de generar formas complejas, integradas con simulaciones ambientales,

suelen estar desvinculadas del rigor científico o la conciencia crítica (Sanchez, 2019). Esto resulta en un formalismo estético que, en casos como Digital Grotesque I (Hansmeyer & Dillenburger, 2013), puede constituir una estética hostil, alejada de las preocupaciones funcionales o sociales. Enfoques como el parametricismo de Patrik Schumacher, si bien promueven la fluidez orgánica, son criticados por ignorar la reconstrucción colaborativa y la distribución del conocimiento.

Gilles Retsin (2019) amplía esta crítica, argumentando que, en lugar de democratizar el campo, estas tecnologías pueden reforzar las desigualdades al favorecer a las grandes empresas y aumentar las barreras de entrada. La automatización también redefine el rol del arquitecto, quien pasa de ser un diseñador de formas a un gestor de sistemas complejos. Esto potencialmente democratiza el acceso al diseño, como señala Srnicek (2016), pero requiere nuevas estructuras de autoría y responsabilidad legal (Kolarevic, 2003; Migayrou, 2003). Además, la integración con la biología enfrenta límites a la hora de traducir sistemas vivos a soluciones inanimadas, lo que exige una profunda interdisciplinariedad (Löbach, 2001; Roudavski, 2009). La pregunta central que surge es: en un escenario de crisis ambiental y escasez de vivienda, ¿cómo se pueden orientar la automatización y el diseño computacional para posibilitar una producción arquitectónica que sea simultáneamente eficiente en el uso de recursos, asequible y alineada con las necesidades sociales, superando el riesgo del formalismo y la exclusión?

Objetivo

Analizar, mediante pruebas comparativas de diseño, el potencial de la morfogénesis digital —proceso donde se genera y optimiza la forma en función de parámetros de rendimiento— como metodología para desarrollar soluciones arquitectónicas eficientes y adaptativas.

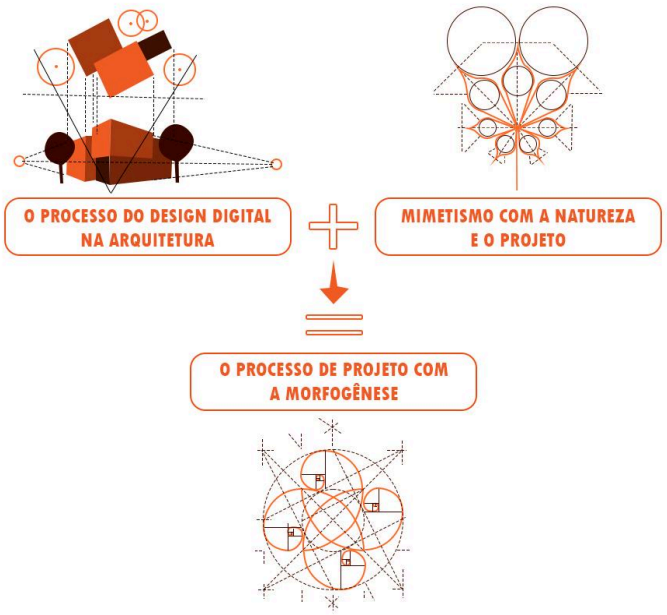
Justificación

A relevância desta pesquisa reside na necessidade de conectar o potencial exploratório das ferramentas de design generativo com a resolução de problemas concretos. A concepção de formas arquitetônicas não como objetos pré-concebidos, mas como sistemas emergentes gerados por computador, é uma abordagem ainda pouco consolidada na prática. Este trabalho justifica-se por investigar a morfogênese não como um fim estético, mas como um algoritmo de desempenho, onde a inspiração biomimética e a simulação ambiental atuam como critérios que guiam a geração formal. Ao fazê-lo, a pesquisa busca preencher a lacuna entre a exploração formalista e a aplicação propositiva do design computacional, visando uma arquitetura mais resiliente, econômica e ecologicamente integrada.

Fundamentação teórica

Como ya se explicó, la arquitectura contemporánea se encuentra en un punto de inflexión, impulsada por la confluencia de dos vectores de investigación aparentemente distintos: la evolución de las herramientas computacionales y el redescubrimiento de la naturaleza como matriz de procesos eficientes. Por lo tanto, como primer paso, proponemos construir el marco teórico para comprender este nuevo paradigma, cuya cúspide es la práctica de la morfogénesis sintética: la generación de forma arquitectónica mediante la emulación de lógicas biológicas por medios digitales. Para abordar este fundamento, el argumento se estructuró en torno a tres ejes interdependientes, como se ilustra en la Figura 1.

Figura 1: Trípode de la revisión utilizado



Fuente: Autor.

En primer lugar, se analiza la trayectoria histórica y conceptual del diseño digital, trazando su evolución desde una herramienta de representación hasta un entorno de simulación y génesis. Este eje establece los medios instrumentales que hacen operativa la morfogénesis. A continuación, se explora la relación entre el diseño y la imitación con la naturaleza, entendiendo esta no como un repertorio de formas para copiar, sino como mentora de procesos y lógicas de optimización. Este eje proporciona inspiración y la base conceptual. Finalmente, el tercer eje investiga el diálogo y la síntesis de estas dos vías, profundizando en el concepto de morfogénesis como el proceso de diseño donde la forma emerge de la interacción entre algoritmos adaptativos y principios bioinspirados, analizando sus métodos e implicaciones.

O Processo do Design Digital:

De la representación a la génesis computacional

La práctica arquitectónica contemporánea está experimentando una transición epistemológica que redefine sus fundamentos, pasando de la representación estática al modelado computacional generativo. Históricamente, el diseño ha sido inseparable del dibujo, una traducción de ideas a representaciones y perspectivas ortogonales que, incluso con la introducción de los primeros sistemas CAD como Sketchpad, mantuvieron la computadora como una sofisticada, aunque conceptualmente limitada, "mesa de dibujo digital" (Kolarevic, 2003).

El cambio de paradigma se consolida cuando el medio digital trasciende su función representativa para convertirse en un agente activo en la generación de forma. El modelado paramétrico, ejemplificado por herramientas de programación visual como Grasshopper, inaugura esta nueva fase.

En él, el arquitecto no diseña un objeto final e inmutable, sino un sistema de relaciones, reglas y parámetros —un algoritmo— capaz de generar un espectro de variaciones formales en respuesta a diferentes datos de entrada (Menges, 2008). Este enfoque performativo desplaza el foco del objeto al proceso, fusionando el acto de diseñar con la simulación en tiempo real. En consecuencia, el rol del arquitecto se transforma: de maestro constructor que compone a partir de un repertorio canónico a "curador de procesos emergentes" (Weinstock, 2010), que orquesta sistemas complejos y selecciona los resultados más apropiados.

Este cambio llevó a teóricos como Patrik Schumacher (2009) a defenderlo como un nuevo estilo, el parametricismo. Paralelamente, y en parte como crítica a este estilo, surge un "giro discreto", ejemplificado en proyectos como la Silla Bolívar. Este enfoque, defendido por teóricos como Gilles Retsin (2019) en instalaciones como Real Virtuality, propone una arquitectura basada en la agregación de componentes modulares, en consonancia con una visión de la materia como discontinua (DeLanda, 2002). Esta visión es posible gracias a la fabricación digital, que permite la "personalización masiva" y la construcción de geometrías complejas con componentes simples, como se observa en iniciativas como WikiHouse. En el centro de esta evolución se encuentra el modelo de rendimiento, en el que la forma emerge como la solución optimizada para un conjunto de criterios contextuales y performativos (Oxman, 2006), articulando la generación, la evaluación y el rendimiento. El diseño se convierte así en un sistema cognitivo y adaptativo, que requiere una nueva alfabetización computacional.

Mimetismo con la naturaleza: de la analogía formal a la lógica procedimental

La inspiración en los sistemas naturales, si bien es una constante en la historia de la arquitectura, desde las proporciones clásicas hasta las analogías estructurales de Gaudí en la Sagrada Familia, adquiere nueva urgencia y profundidad en el contexto contemporáneo.

La crisis ambiental y el avance de las herramientas digitales reposicionan la naturaleza no solo como un repositorio de formas, sino como un vasto manual de estrategias de optimización y resiliencia (Benyus, 1997). La biomímesis, como metodología de diseño, sistematiza esta búsqueda, operando en distintos niveles: imitación de formas, emulación de procesos y replicación de ecosistemas. El mayor potencial de innovación reside en el nivel de proceso, centrándose no en "qué" crea la naturaleza, sino en "cómo" lo hace. Este enfoque requiere el reconocimiento de patrones recurrentes, como la modularidad celular, las espirales logarítmicas, los fractales y la proporción áurea, que revelan una geometría subyacente a la vida. La naturaleza pasa a ser vista como un repositorio de algoritmos de optimización. La Ley de Wolff, que describe cómo se remodela el tejido óseo, sirve de base para los algoritmos de optimización topológica, que distribuyen la materia solo donde se necesita; un principio evidente tanto en sistemas biológicos como en materiales avanzados como la espuma de aluminio. El trabajo de D'Arcy Thompson (1961) es un pilar teórico que demuestra que la forma biológica es un diagrama de fuerzas, comparando las estructuras óseas con las estructuras de ingeniería, una lección que inspiró la investigación de Frei Otto y, posteriormente, la de Santiago Calatrava en obras como Turning Torso.

Sin embargo, el valor de este enfoque no reside en la aplicación aislada de estos principios, sino en su hibridación. La práctica avanzada consiste en acoplar la lógica de ramificación de un sistema L a un motor de análisis estructural, creando sistemas donde la forma se guía simultáneamente por las lógicas de crecimiento y rendimiento (Pawlyn, 2011). De esta manera, el mimetismo trasciende la analogía superficial y se convierte en una sólida estrategia de diseño para la arquitectura regenerativa (Zari, 2007).

El proyecto como morfogénesis: el surgimiento de la forma algorítmica

El concepto de morfogénesis, tomado de la biología para describir el origen y desarrollo de la forma de los organismos, se ha consolidado como el paradigma central de la arquitectura computacional avanzada. Propone que la forma arquitectónica no se impone a partir de un ideal abstracto, sino que emerge de un proceso dinámico de

interacciones materiales e informativas (Hensel et al., 2004). Esta perspectiva, influenciada por las teorías de Manuel DeLanda (2002) sobre una "materia prima informada", entiende el material no como un receptor pasivo de la forma, sino como un participante activo en el proceso de formación, cuya geometría final es el resultado de su historia material y de las fuerzas que actúan sobre él.

La morfogénesis computacional, por lo tanto, es el campo que utiliza algoritmos para simular estos procesos de autoorganización, donde el resultado no está completamente predeterminado, sino que se descubre mediante la exploración de un espacio de posibilidades (Roudavski, 2009).

En este paradigma, el arquitecto no diseña directamente el edificio, sino su ADN digital: un conjunto de reglas, parámetros e interacciones que guiarán la generación de la forma, siguiendo un marco de diseño computacional integrado. Herramientas de programación visual como Grasshopper funcionan como laboratorios para cultivar estos procesos. El estudio de los radiolarios, analizado por Khabazi (2011), ejemplifica este método. La investigación no se limita a su geometría, sino que decodifica el proceso físico de su formación: la interacción de fuerzas neumáticas entre "burbujas" que, al organizarse, generan una estructura porosa y optimizada. Este principio, una vez comprendido, se convierte en un "concepto generativo" transferible. La lógica de la porosidad estructural puede abstraerse de su contexto biológico y aplicarse a cualquier geometría de "receptáculo", ya sea la fachada de un edificio o la cubierta de un estadio, que comience a "asimilar estas propiedades" (Lima, 2015). La morfogénesis, por lo tanto, promueve una fusión ontológica entre el proceso de generación (génesis) y la lógica de organización (sintaxis).

El mismo algoritmo que define cómo se desarrolla la forma en respuesta a fuerzas (génesis) define simultánea e inseparablemente las relaciones topológicas y jerárquicas de sus componentes (sintaxis). La forma deja de ser un sustantivo —un objeto estático— para convertirse en un verbo —un proceso dinámico de «formación». Este enfoque disuelve la distinción clásica entre estructura y ornamento, ya que la articulación formal se convierte en la expresión directa de la lógica performativa.

La arquitectura se concibe ahora como una práctica de cultivo de sistemas complejos y adaptativos, donde la estética emerge no de cánones preestablecidos, sino de la inteligibilidad y eficiencia del proceso generativo. El resultado es una tectónica informada, donde la expresión del edificio narra la historia computacional y material de su propia creación, convirtiendo la forma en un registro visible de su propia génesis.

Materiales y Métodos

Este trabajo utiliza una metodología de investigación cuantitativa y exploratoria, basada en el concepto de Diseño Basado en el Rendimiento (DPR), para diseñar un pabellón que mejora el confort ambiental en la Plaza Jornalista Goiás do Couto, en la ciudad de Goiás, GO. El objetivo principal es reducir la concentración de radiación solar y modular la iluminación natural, impactando positivamente el microclima local.

El enfoque utiliza la simulación por computadora como herramienta principal, abarcando desde el modelado paramétrico y algoritmos de búsqueda hasta la simulación del rendimiento ambiental con herramientas validadas.

La metodología se estructura en seis etapas principales. La primera consiste en: i) un estudio del contexto local, analizando el tejido urbano, los diagramas de flujo, la vegetación, la topografía y el uso del suelo para identificar puntos de referencia y las ubicaciones de mayor vulnerabilidad a la radiación solar. La segunda etapa se centra en: ii) la estructuración de la forma inicial, mediante el modelado paramétrico en el software Rhinoceros con el complemento Grasshopper.

La geometría base se genera a partir de la simulación de cargas estructurales con el complemento Kangaroo, que permite la búsqueda de la forma de una malla que responde a puntos de apoyo estratégicamente definidos. En el tercer paso, iii. la malla se reconstruye basándose en patrones análogos a los procesos morfogenéticos naturales, delimitando el universo de posibles soluciones formales.

El cuarto paso consiste en iv. la simulación comparativa del rendimiento, evaluando el escenario existente, una solución con cobogó tradicional y la malla modelada inicial. Para ello, se utiliza el complemento Ladybug Tools, que integra los motores de simulación EnergyPlus, para el análisis termoenergético.

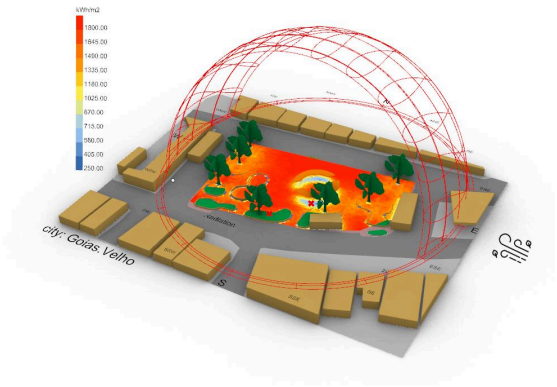
El quinto paso consiste en desarrollar una prueba de respuesta: un algoritmo que modifica los parámetros de la malla geométrica en respuesta directa a los datos de incidencia de la radiación solar. Este proceso de diseño basado en datos busca generar una forma que surja de su rendimiento ambiental.

El paso final implica la agregación y el análisis comparativo de los datos de todos los escenarios. Dado que se trata de un estudio en curso, la intención es abordar el estudio y la iluminación útil de la luz natural (UDI), así como la incorporación de un marco de analogías simbólicas de la naturaleza.

Finalmente, la zona de intervención, la Praça Jornalista Goiás do Couto (conocida popularmente como Praça do João Francisco), es el centro comercial de la ciudad, con un intenso tráfico peatonal, especialmente durante la feria local.

A pesar de su ubicación céntrica, el espacio carece de estrategias de sombreado que fomenten la permanencia, presentando una alta vulnerabilidad a la radiación solar, como se observa en la Figura 2. El análisis climático, realizado con Ladybug Tools, indica un predominio de vientos del este y una alta incidencia solar anual, lo que confirma la necesidad de una intervención para mejorar el confort térmico.

Figura 2: Gráficos solares y estudio de insolación



Fuente: Autor.

El estudio cualitativo identificó que el principal flujo peatonal se concentra en el centro de la plaza, mientras que el tráfico vehicular es más intenso en la zona sur. El uso del espacio varía significativamente: las mañanas se caracterizan por la presencia de mototaxis y vendedores ambulantes, las tardes son menos frecuentes debido al sol, y la actividad se intensifica al final de la tarde con el mercado y al anochecer con los food trucks. Considerando estos factores, se identificaron ubicaciones para los soportes estructurales que no interfieran con la circulación ni la visibilidad, buscando una cubierta que proporcione sombra y una escala más humana al espacio.

Resultados y Discusión

El objetivo es detallar la hoja de ruta metodológica y los resultados de las pruebas de diseño desarrolladas en el entorno de programación visual Grasshopper®, integrado con Rhinoceros®. El enfoque adoptado se encuentra en la confluencia de dos líneas teóricas destacadas en el diseño computacional: la búsqueda de formas y el diseño basado en el rendimiento. El proceso de búsqueda de formas busca geometrías que emergen de un estado de equilibrio en respuesta a fuerzas y restricciones, replicando los procesos de autoorganización de la naturaleza para lograr la máxima eficiencia material.

Al mismo tiempo, el proyecto se alinea con el paradigma del diseño basado en el rendimiento, articulado por teóricos como Neri Oxman, que propone que los criterios performativos (estructurales y ambientales) no solo evalúan, sino que también generan activamente la forma. La filosofía de la Ecología de Materiales de Oxman profundiza esta visión, integrando computación, fabricación y biología en sistemas que se comportan como si crecieran en respuesta a su contexto.

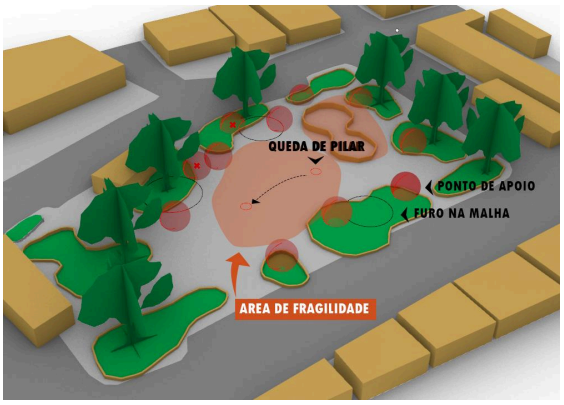
En este contexto, las pruebas se estructuran como una investigación progresiva: comienzan con la generación de una estructura base mediante la búsqueda digital de formas, centrándose en la distribución de cargas; luego, la geometría se refina modulando la malla y, finalmente, se basa en variables climáticas. La directriz central es desarrollar una envolvente que proporcione sombreado, mitigando la radiación solar. La primera prueba, el foco de esta fase de la investigación, se centra en la reestructuración de una malla para que responda al índice de radiación, demostrando un flujo de trabajo que integra lógica estructural, abstracción biomimética y rendimiento ambiental.

Estrategia I: Génesis estructural mediante simulación de búsqueda de formas

La primera fase de la metodología se centra en la definición del volumen base, mediante simulaciones físicas en el plugin Kangaroo para integrar las restricciones estructurales y espaciales. El objetivo es generar una forma que surja lógicamente de un sistema de fuerzas y restricciones, emulando digitalmente los procesos de relajación dinámica explorados por Otto.

El proceso comienza con una superficie plana delimitada por los parámetros contextuales del terreno: retranqueos legales, zonas de preservación de la vegetación, flujos de circulación y zonas de conexión. Sobre esta base, se insertan curvas que representan las restricciones físicas, como pilares de soporte y espacios vacíos, como se muestra en la Figura 3.

Figura 3: Puntos de apoyo notables



Fuente: Autor.

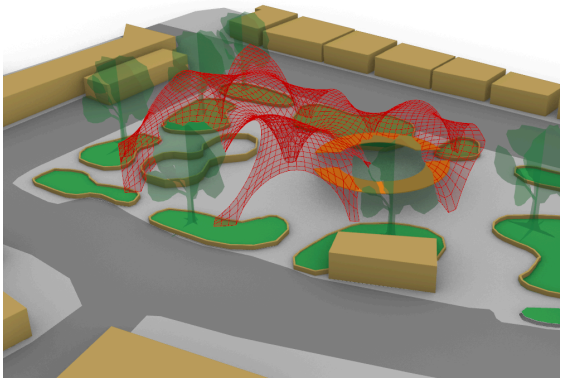
La superficie se discretiza en una malla triangular regular, un proceso de teselación que transforma la geometría en una topología de elementos finitos, esencial para la simulación. El tamaño de los bordes y los parámetros de interacción permiten un control preciso del equilibrio entre el detalle geométrico y el rendimiento computacional. Al identificar los vértices de la malla que funcionarán como puntos de anclaje, se agregan y crean esferas de influencia alrededor de puntos relevantes, como pilares.

Los vértices identificados se clasifican, separando los que permanecerán fijos (anclajes) de los que estarán libres. Los puntos restringidos se convierten en objetivos en Kangaroo, actuando como soportes inamovibles en la simulación.

Una vez establecidos los anclajes, el algoritmo define los objetivos físicos que guiarán el comportamiento de la malla: I. Integridad de la malla: Mantiene la regularidad de los bordes, evitando distorsiones excesivas; II. Carga gravitacional: Simula la acción de la gravedad con una fuerza vectorial en el eje Z negativo; III. Puntos de anclaje: Fija los vértices previamente identificados. Al activar el componente de simulación, la malla busca iterativamente una configuración de energía mínima. El resultado es una superficie deformada fluidamente que adopta la forma de una membrana tensada.

Esta forma final no es arbitraria, sino la consecuencia lógica de las condiciones impuestas, lo que resulta en una geometría que combina ligereza estructural y racionalidad constructiva (Figura 4).

Figura 4: Malla simulada.



Fuente: Autor.

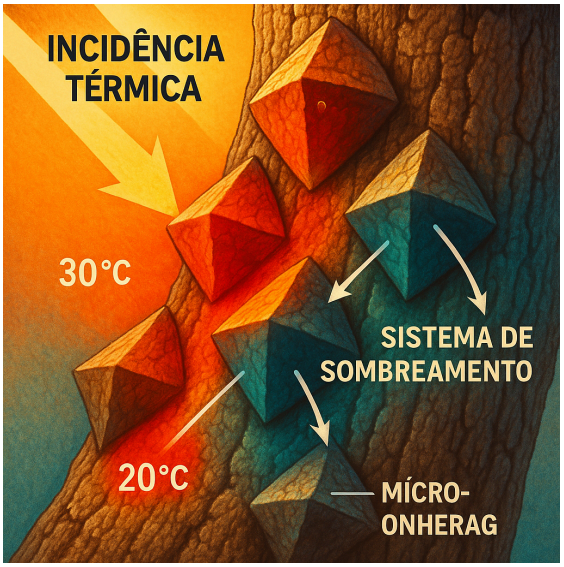
Estrategia II: Abstracción biomimética y teselación geométrica

En esta etapa, la malla estructural evoluciona hacia un expresivo volumen tridimensional. El enfoque es una abstracción biomimética, inspirada en la

morfología de la "maminha-de-porca" (Campomanesia phaea), una fruta nativa de la región.

La morfología de la fruta, con sus segmentos prominentes, sugiere un principio geométrico de modulación de la forma para influir en la interacción con el entorno, como el microsombreado. Si bien no existe evidencia científica de una función termorreguladora específica, es este principio de diseño el que se traduce al lenguaje arquitectónico (Figura 5).

Figura 5: Analogía simbólica de la teta de una cerda

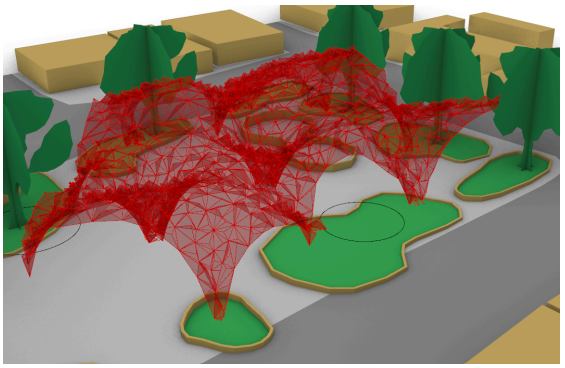


Fuente: Autor.

La traducción de este principio a un modelo digital comienza con la reconstrucción de la malla base para garantizar una teselación regular. Cada cara triangular se trata como un módulo individual. El algoritmo extrae su centroide y calcula el vector normal a la cara, que se convierte en la guía para una extrusión paramétrica, creando un punto elevado que servirá como vértice de una pirámide.

Con los vértices definidos, cada triángulo original se subdivide en tres nuevas caras, conectando sus vértices con el punto elevado. Esta operación, aplicada a toda la malla, da como resultado una configuración geométrica facetada compuesta por una teselación de elementos piramidales (Figura 6).

Figura 6: Malla con pirámides facetadas



Fuente: Autor.

Esta nueva geometría no es meramente estática; su estructura modular permite diversas aplicaciones y puede reintegrarse al sistema de simulación física para explorar nuevos estados de equilibrio. El uso de la extrusión controlada por normales garantiza que la forma surja de la lógica intrínseca de la malla, y la variación de la altura de extrusión permite un control preciso de su expresividad.

Estrategia III: Validación del rendimiento y análisis de la radiación solar

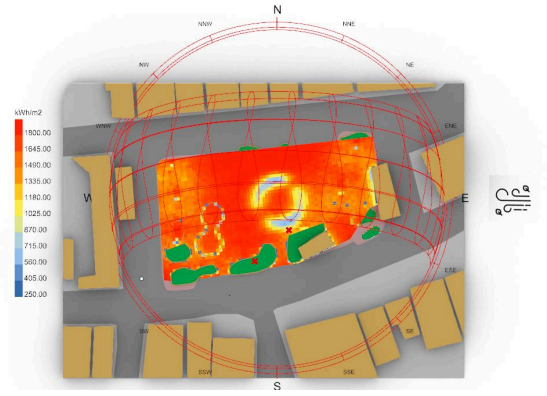
La tercera estrategia se centra en la

integración de variables climáticas, validando la geometría mediante simulaciones de desempeño ambiental con el plugin Ladybug.

Para un análisis preciso, se modelaron e insertaron en la simulación las dimensiones volumétricas del entorno urbano de la ciudad de Goiás, actuando como obstrucciones que proyectan sombras. La malla facetada se posicionó sobre el terreno, lo que permitió calcular su interacción con el sol y el entorno circundante.

La métrica de evaluación fue la radiación solar incidente acumulada (kWh/m²/año). Se simularon tres escenarios para su comparación. El primero (Figura 7), el terreno continuo, reveló una radiación de 1845,49 kWh/m².

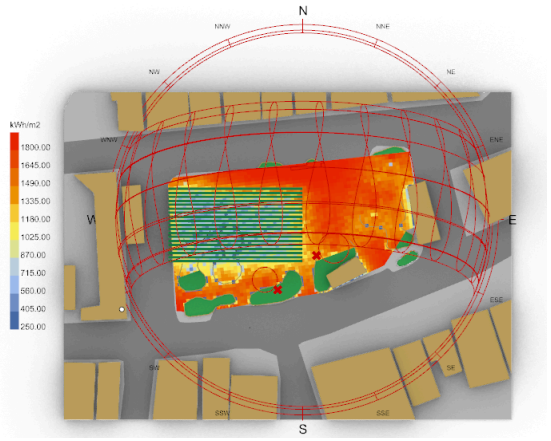
Figura 7: Mapas solares y estudio de insolación



Fuente: Autor.

Para cuantificar la radiación, el componente genera un mapa de calor, cuyos resultados se suman y dividen por la superficie. El segundo escenario (Figura 8), una pérgola convencional, sirvió como referencia, con un resultado de 1445,14 kWh/m² (una reducción del 21,7%).

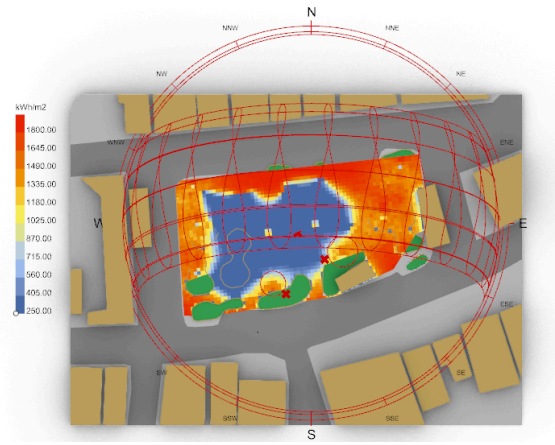
Figura 8: Mapas solares y estudio de insolación II



Fuente: Autor.

El tercer escenario (Figura 9), con la cuadrícula facetada, mostró un cambio significativo en el patrón de radiación solar, resultando en 1084,86 kWh/m², una reducción del 41,2 % en comparación con el sitio original y una mejora del 25 % en comparación con la pérgola.

Figura 9: Comparación de los escenarios de radiación solar con y sin el pabellón.



Fuente: Autor.

Además, el estudio de la trayectoria solar en el modelo 3D permitió una comprensión intuitiva del comportamiento de la luz y la sombra, lo que orientó las decisiones de diseño y proporcionó a la malla una capa de inteligencia ambiental.

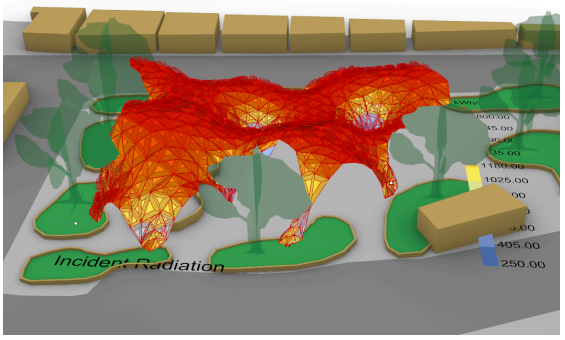
Síntesis metodológica: La malla responsiva y la modulación ambiental

La fase final consiste en configurar una estructura responsiva, que adapta su geometría localmente en respuesta a los estímulos ambientales. Cada pirámide del teselado funciona como un módulo cuya apertura varía según los niveles de insolación.

El algoritmo utiliza los datos de radiación de Ladybug, reasignando los valores de insolación para controlar el factor de escala de las aperturas en cada módulo. La lógica es simple: a mayor radiación, menor apertura. La conexión entre la curva triangular original y su versión escalada interna crea la geometría de la apertura modulada.

El resultado es una envolvente con comportamiento heterogéneo (Figura 79), donde las aperturas responden directamente a las zonas de mayor y menor carga solar, creando un filtro climático dinámico (Figura 10).

Figura 10: Prueba de respuesta: resultado aplicado a la malla



Fuente: Autor.

Sin embargo, la evaluación cuantitativa arrojó un resultado contradictorio: 1156,55 kWh/m². Si bien esto representa una reducción sustancial (37,3 %) en comparación con el sitio original, el valor es ligeramente superior al de la red estática (1084,86 kWh/m²). Este fenómeno pone de manifiesto las limitaciones de la optimización con un solo objetivo y subraya la necesidad de métricas más sofisticadas, como la Iluminancia Útil de Luz Natural (IDU). La IDU evalúa la calidad de la luz en rangos de iluminancia (lux), distinguiendo entre iluminación insuficiente, útil y excesiva, y está más alineada con el confort humano que la simple medición de energía. La ausencia de esta métrica en el ciclo de

retroalimentación es la hipótesis principal del resultado observado.

Análisis concluyente: Resumen de resultados y eficacia de la metodología

La evaluación final del proceso se resume en las Figuras 11, 12, 13 y 14:

Figura 11: Escenario 1



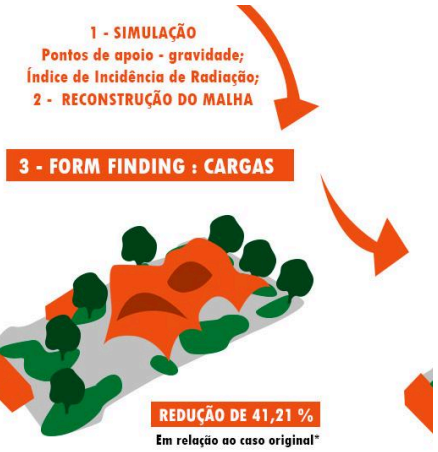
Fuente: Autor.

Figura 12: Escenario 2



Fuente: Autor.

Figura 13: Escenario 3



Fuente: Autor.

Figura 14: Escenario 4



Fuente: Autor.

Los datos demuestran que la metodología computacional generó soluciones más eficientes que un enfoque convencional. El pabellón estático (Escenario 3) logró la mayor reducción de radiación (41,2%), superando la efectividad de la pérgola en casi 20 puntos porcentuales. La malla responsiva (Escenario 4), a pesar del resultado paradójico, proporcionó una mejora del 15,64% en comparación con el modelo de pérgola.

Este resultado no invalida la estrategia, sino que resalta la importancia de seleccionar métricas de rendimiento adecuadas. El simple objetivo de minimizar la radiación total (métrica energética) no se corresponde necesariamente con la optimización del confort ambiental, que implica un equilibrio complejo entre la protección solar y la iluminación natural.

Por lo tanto, el principal valor de esta investigación reside en la validación de un flujo de trabajo metodológico robusto que conectó con éxito la lógica estructural de búsqueda de formas, la abstracción biomimética y la validación del rendimiento ambiental. La investigación establece un protocolo viable para la generación de arquitecturas complejas y performativas. Los próximos pasos deberían incorporar una optimización de múltiples objetivos, utilizando UDI como el principal impulsor para refinar la lógica de respuesta de la envolvente, apuntando a un equilibrio más sofisticado entre la eficiencia energética y el confort humano.

Conclusiones

Este estudio demuestra que el diseño generativo y la morfogénesis digital proporcionan mayor conocimiento y control sobre el proceso de diseño, ya que registran y parametrizan sistemáticamente las etapas de generación de formas y evaluación del rendimiento. La generación de múltiples variaciones no destructivas permite un refinamiento progresivo: cada ajuste paramétrico genera nuevas soluciones que se evalúan automáticamente, mejorando la optimización de la forma.

Sin embargo, la adopción de estas tecnologías requiere sólidos conocimientos de programación y acceso a hardware robusto, lo que puede suponer barreras de entrada y limitar su difusión entre principiantes y profesionales con recursos limitados. Se recomienda seguir investigando la optimización multiobjetivo, incorporando métricas como la Iluminancia Útil de Luz Natural (UDI) para equilibrar la protección solar y el confort lumínico, así como el desarrollo de interfaces y estrategias didácticas más sistemáticas para hacer estas metodologías paramétricas y biomiméticas más accesibles y ampliar su impacto en la práctica arquitectónica.

Referencias bibliográficas

Brotas, L., & Rusovan, D. (2013). *Parametric daylight envelope*. In *Proceedings of the 29th PLEA Conference: Sustainable Architecture for a Renewable Future*. Munich, Germany.

Cartana, R. P., Pereira, F. O. R., & Mayer, A. (2017). Estudo piloto para análise de elementos de controle solar com formas complexas. In *Anais do Encontro Nacional e Encontro Latino-americano de Conforto do Ambiente Construído* (14ª e 10ª eds., pp. 1684–1693). Balneário Camboriú, Brazil.

Carpo, M. (2023, março). *A short but believable history of the digital turn in architecture*. e-flux. Recuperado de https://www.e-flux.com/architecture/chronograms/528659/a-short-but-believable-history-of-the-digital-turn-in-architecture/

Delgarm, N., Sajadi, B., Kowsary, F., & Delgarm, S. (2016). Multi-objective optimization of the building energy performance: A simulation-based approach by means of particle swarm optimization (PSO). *Applied Energy, 170*, 293–303. https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.02.141

DeLanda, M. (2002). *Intensive science and virtual philosophy*. London, UK: Continuum.

Eltaweel, A., & Su, Y. (2017). Parametric design and daylighting: A literature review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews, 73*, 1086–1103.

Fuller, R. B. (1981). *Critical path*. New York, NY: St. Martin's Press.

Hensel, M., Menges, A., & Weinstock, M. (2004). *Emergence: Morphogenetic design strategies*. London, UK: Wiley Academy.

Löbach, B. (2001). *Design industrial: Bases para configuração dos produtos industriais* (F. Van Camp, Trad.). Rio de Janeiro, Brazil: Edgard Blücher.

Menges, A. (2008). Integral formation and materialization: Computational form and material gestalt. In *Manufacturing Material Effects: Rethinking Design and Making in Architecture* (pp. 195–210). New York, NY: Routledge.

Migayrou, F. (2003). *Arquiteturas não padronizadas* [Catálogo da exposição]. Paris, France: Éditions du Centre Pompidou.

Roudavski, S. (2009). Towards morphogenesis in architecture. *International Journal of Architectural Computing, 7*(3), 345–374. https://minerva-access.unimelb.edu.au/bitstream/handle/11343/26591/116799_Roudavski_Towards_Morphogenesis_in_Architecture_09.pdf?sequence=1

Sánchez, J. (2019). Architecture for the commons: Participatory systems in the age of platforms. In G. Retsin (Ed.), *Discrete: Reappraising the digital in architecture* (Vol. 89, pp. 25–27). Barcelona, Spain: Actar Publishers.

Schumacher, P. (2011). *The autopoiesis of architecture: A new framework for architecture*. Chichester, UK: Wiley.

Srnicek, N. (2016). *Platform capitalism*. Cambridge, UK: Polity Press.

Steadman, P. (2008). *The evolution of designs: Biological analogy in architecture and the applied arts* (2nd ed.). London, UK: Routledge.

Weinstock, M. (2010). *The architecture of emergence: The evolution of form in nature and civilisation*. Chichester, UK: Wiley.

World Commission on Environment and Development. (1987). *Our common future*. Oxford, UK: Oxford University Press.

.

30.- Productos naturales bioactivos y sus aplicaciones

Síntesis enantioselectiva de potenciales bioherbicidas

Autor: Vega, Juan; juanvega@fq.edu.uy
Orientadora: Schapiro, Valeria: vschapir@fq.edu.uy
Udelar / Facultad de Química

1. Resumen

La síntesis enantioselectiva de productos biológicamente activos es una de las principales áreas de interés de la química orgánica actual. Los métodos quimioenzimáticos, basados en biotransformaciones en donde se introduce quiralidad gracias a la estereoespecificidad de las enzimas, son una excelente alternativa a los métodos clásicos. Metabolitos ópticamente puros como los *cis*-dihidrodioles obtenidos por dihidroxilación de arenos monsustituídos, han sido utilizados para preparar un amplio espectro de moléculas con estructuras y actividades biológicas interesantes. En nuestro grupo hemos trabajado por años en su utilización para la preparación de moléculas quirales pequeñas, altamente funcionalizadas y con potencial actividad biológica, tanto naturales como análogas. En particular, hemos abordado meroterpenoides con estructura epoxiquinoide. No sólo incursionamos en la funcionalización estereoselectiva de los sintones quirales de partida, sino también en la formación de nuevos enlaces carbono-carbono para la introducción de las cadenas laterales. La experiencia acumulada, nos llevó a interesarnos en la familia de la biscognieninas, meroterpenoides polifuncionalizados que presentan una cadena alquenílica. Las biscognieninas han sido aisladas de hongos patógenos del árbol del té, y han mostrado una actividad fitotóxica que los convierte en potenciales bioherbicidas para el tratamiento de enfermedades tanto de cultivos de té como de otros cultivos de importancia económica.

Palabras clave: biscognieninas, bioherbicidas, quimioenzimática

2. Introducción

La síntesis enantioselectiva de productos biológicamente activos es una de las principales áreas de interés de la química orgánica sintética actual. [1] Es sabido que la actividad biológica de las sustancias quirales es, en la mayoría de los casos, debida a un enantiómero específico.

Los métodos químicos convencionales para la introducción de quiralidad, como el uso de catalizadores asimétricos o de bloques de construcción quirales y la resolución de racematos, no siempre permiten obtener la deseada pureza enantiomérica con buenos rendimientos. Una excelente alternativa a los métodos clásicos son los métodos basados en biotransformaciones, que recurren a la estereoespecificidad de las enzimas para la introducción de quiralidad en el proceso de síntesis.[2] En nuestro grupo de investigación se trabaja con la oxidación microbiana de arenos para dar ciclohexadiendioles tipo I (Figura 1). Dichos metabolitos presentan una enorme potencialidad como precursores para la obtención de compuestos naturales como lo documentan las numerosas síntesis que se han realizado a partir de ellos, [3–5] incluyendo un importante volumen de ellas realizadas en nuestro laboratorio.[6]

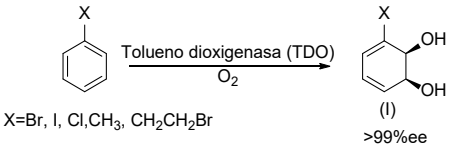


Figura 1: biotransformación de bencenos monosustituídos

En este trabajo centramos nuestra atención en meroterpenoides naturales que contienen una cadena lateral alquenínica, en particular la familia de las biscognieninas (Figura 2).

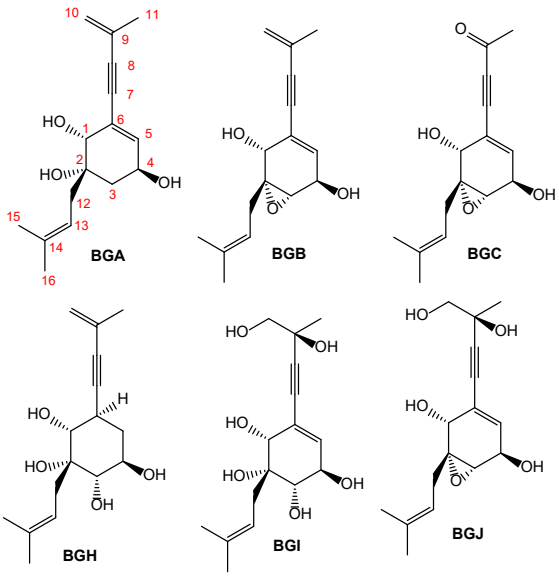


Figura 2: ejemplos de biscognieninas

Las biscognieninas se han aislado de *Pseudopestalotiopsis theae,*[7] que junto

con *Pestalotiopsis theae*, son causantes de enfermedades en la hoja de la planta del té, que provocan pérdidas importantes en la calidad y volumen de la producción mundial de este cultivo. Aún no se ha determinado qué sustancias son responsables de la fitotoxicidad de estas especies fúngicas. Estudiar y ser capaces de preparar las moléculas provenientes del metabolismo de estos hongos fitopatógenos, es un importante aporte para conocer los mecanismos de la patogenia y poder incursionar en el control de plagas del té y otros cultivos de importancia desde un enfoque sustentable. La posibilidad de utilizar estas moléculas y análogos de ellas, como bioherbicidas de alta eficacia y baja toxicidad, es un desafío interesante. Recientemente se reportaron 6 nuevas moléculas de la familia de las biscognieninas (BG) [8] que fueron aisladas del mismo hongo fitopatógeno, *Pseudopestalotiopsis theae.*

En cuanto a los antecedentes sintéticos de las biscognieninas, sólo se ha reportado una síntesis total de la biscognienina B, de carácter racémico. [9] Asimismo, hasta donde sabemos, ningún análogo de ningún tipo (estereoisómeros, estructuras similares, estructuras simplificadas) ha sido preparado. Por todos estos motivos, se propone una estrategia para obtener biscognieninas y análogos (biscognieninas no naturales) en forma enantioselectiva.

3. Objetivos

El objetivo de este trabajo es una aproximación a la síntesis de biscognieninas naturales y no naturales, a partir de ciclohexadienodioles quirales provenientes de una biotransformación de compuestos aromáticos.

4. Materiales y Métodos

4.1 Materiales

Los reactivos utilizados son de origen comercial (Sigma-Aldrich, Fluka, Merck). Los disolventes se purificaron por métodos convencionales previamente a su utilización. Las reacciones en condiciones anhidras fueron llevadas a cabo en atmósfera de nitrógeno. Para las cromatografías en columna se utilizó sílica gel tipo flash (tamaño 40-63 µm) J. T. Bakery para las cromatografías en capa fina, placas de sílica con indicador UV Marcherey - Nagel. El revelado de las cromatografías en capa fina se realizó por exposición a luz ultravioleta (254 nm) y también por asperjado con una solución de anisaldehído y ácido sulfúrico en etanol (anisaldehído:H_2SO_4:EtOH, 1:4:95) y

revelado con calor.Los espectros de ^{1}H RMN son obtenidos en un equipo Bruker Advance DPX-400 de 400MHz y los desplazamientos químicos de protón son reportados en ppm referenciado al TMS.

4.2 Métodos sintéticos

Síntesis de (3a*S*,7a*S*)-4-bromo-2,2-dimetil-3a,7a-dihidrobenzo[d][1,3]dioxolano (1)

A (1*S*,2*S*)-3-bromociclohexa-3,5-dien-1,2-diol (1,4 g, 7,3 mmol) se le agrega dimetoxipropano (DMP) (2,7 mL), la mínima cantidad de acetona para disolver completamente y un cristal de *p*-TsOH. Se agita a temperatura ambiente y la reacción se sigue mediante cromatografía de capa fina con una mezcla de Hexano:AcOEt (9:1) como fase móvil y se revela con anisaldehído. Se agrega $NaHCO_{3(s)}$, se destila el disolvente a presión reducida sin llegar a sequedad, se retoma en Et_2O y se lava con $NaHCO_{3(ac)}$ (3 x 25 mL) y con $NaCl_{(ac)}$ (2 x 25 mL). Se seca con $Na_2SO_{4(s)}$. Se filtra y se destila el solvente a presión reducida. El producto se purifica mediante cormatografía en columna con fase móvil Hexano:AcOEt (9:1). Se obtiene un aceite incoloro (1,6 g, 6,73 mmol, 92%)

Síntesis (3aR,4R,5S,7aS)-4,7-dibromo-2,2-dimetil-3a,4,5,7a-tetrahidrobenzo[d][1,3]dioxol-5-ol (2)

A **1** (430 mg, 1,86 mmol) se le agrega DME (9 mL) y agua (9 mL), el sistema se enfría a 0ºC, se protege de la luz y se agrega N-bromosuccinimida (507 mg, 2,84 mmol). La reacción se sigue mediante cromatografía de capa fina con una mezcla de Hexano:AcOEt (8:2) como fase móvil y se revela con anisaldehído. Se agrega $NaHSO_{3(ac)}$, se extrae con CH_2Cl_2 (3 x 20 mL), se lava la fase orgánica con $NaCl_{(ac)}$ (3 x 20 mL) y se seca con $Na_2SO_{4(s)}$. Se filtra y se destila el solvente a presión reducida. El producto se purifica mediante cromatografía en columna con fase móvil Hexano:AcOEt (9:1). Se obtiene un aceite incoloro (482 mg, 1,47 mmol, 80%)

Síntesis de (3aR,4R,5S,7aS)-4,7-dibromo-2,2-dimetil-3a,4,5,7a-tetrahidrobenzo[d][1,3]dioxol-5-il acetato (3)

A **2** (211 mg, 0,64 mmol) se lo lleva a 0°C, se agrega una mezcla de trietilamina (0,27 mL) y anhidrido acético (0,5 mL) y se agrega un cristal de DMAP. A los 5 minutos se retira del frio. La reacción se sigue mediante cromatografía de capa fina con una mezcla de Hexano:AcOEt (8:2) como

fase móvil y se revela con anisaldehído. Se agrega dietiléter y se lleva a 0°C, se agrega $NaHCO_{3(ac)}$, se extrae con dietil éter, se lava la fase orgánica con $CuSO_{4(ac)}$ (3 x 25 mL), $NaCl_{(ac)}$ (2 x 25 mL) y se seca con $Na_2SO_{4(s)}$. Se filtra y se destila el solvente a presión reducida. El producto se purifica mediante cromatografía en columna con una fase móvil Hexano:AcOEt (9:1). Se obtiene un sólido blanco (222 mg, 0,6 mmol, 94%).

Síntesis de (3aR,4R,5S,7aR)-4-bromo-7-(3-((4-metoxibenzil)oxi)but-1-n-1-il)-2,2-dimetil-3a,4,5,7a-tetrahidrobenzo[d][1,3]dioxol-5-il acetato (4)

A **3** (220 mg, 0,59 mmol) en atmosfera inerte, se le agrega 1-((but-3-in-2-iloxi)metill)-4-metoxibenceno (228mg, 1,2 mmol), diacetato de paladio (5,4 mg, 0,024 mmol), XantPhos (28 mg, 0,048 mmol), fosfato tribásico de potasio (508 mg, 2,4 mmol) y tolueno seco (2 mL) y se lleva a 65°C. La reacción se sigue mediante cromatografía de capa fina con una mezcla de Hexano:AcOEt (8:2) como fase móvil y se revela con anisaldehído. El solvente se destila a presión reducida, se retoma en CH_2Cl_2 y se filtra mediante SiO_2 utilizando una mezcla CH_2Cl_2:AcOEt (1:1) como eluyente. Los solventes se destilan a presión reducida. El producto se purifica mediante cromatografía en columna con fase móvil Hexano:AcOEt (9:1). Se obtiene un aceite incoloro (107 mg, 0,22 mmol, 38%).

Síntesis de (3aR,4R,5S,7aR)-4-bromo-7-(3-hidroxibut-1-in-1-il)-2,2-dimetil-3a,4,5,7a-tetrahidrobenzo[d][1,3]dioxol-5-il acetato (5)

A **4** (89mg, 0,19 mmol) se le agrega CH_2Cl_2 (4 mL), 2,3-Dicloro-5,6-diciano-1,4-benzoquinona (278 mg, 1,22 mmol) y agua (0,2 mL). La reacción se sigue mediante cromatografía de capa fina con una mezcla de Hexano:AcOEt (6:4) como fase móvil y se revela con anisaldehído. Se agrega tiosulfato de sodio suficiente para destruir el excedente de oxidante y detener la reacción, agua (5 mL), CH_2Cl_2 (5 mL), se lava la fase orgánica con $NaHCO_{3(ac)}$ (3 x 10 mL), $NaCl_{(ac)}$ (2 x 10 mL) y se seca con $Na_2SO_{4(s)}$. Se filtra y se destila el solvente a presión reducida. El producto se purifica mediante cromatografía en columna con fase móvil Hexano:AcOEt (7:3). Se obtiene un aceite incoloro (55 mg, 0,15 mmol, 83%).

Síntesis de (3aR,4R,5S,7aR)-4-bromo-2,2-dimetil-7-(3-oxobut-1-in-1-il)-3a,4,5,7a-tetrahidrobenzo[d][1,3]dioxol-5-il acetato (6)

A **5** (150 mg, 0,42mmol) se le agrega CH_2Cl_2 (10 mL) y dicromato de piridinio (189 mg, 0,5 mmol). La reacción se sigue mediante cromatografía de capa fina con una mezcla de Hexano:AcOEt (6:4) como fase móvil y se revela con anisaldehído. Se agrega dietiléter, se filtra por papel y luego mediante SiO_2m utilizando una mezcla Hex:AcOEt (1:1) como eluyente. Los solventes se destilan a presión reducida. El producto se purifica mediante cromatografía en columna con fase móvil Hexano:AcOEt (9:1). Se obtiene un aceite incoloro (100 mg, 0,28 mmol, 67%).

5. Resultados y Discusión

Como se ha explicado, en primer lugar se lleva a cabo una biotransformación, en este caso de bromobenceno y el diol obtenido se protege como acetónido para impedir su aromatización y permitir el trabajo sintético posterior (Figura 3)

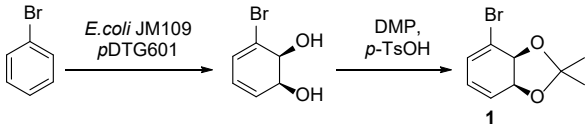


Figura 3: preparación del material de partida quiral (**1**)

Seguidamente, corresponde funcionalizar el doble enlace más rico en electrones, lo cual se realiza mediante una halohidroxilación con *N*-bromosuccinimida. La bromohidrina obtenida (**2**) fue posteriormente acetilada como se muestra en la Figura 4.

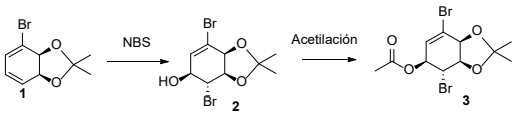


Figura 4: funcionalización de doble enlace

Con la bromohidrina protegida (**3**) en nuestras manos, estamos en condiciones de realizar un acoplamiento carbono-carbono para introducir el precursor de la cadena lateral, a través de un procedimiento tipo Sonogashira (Figura 5).

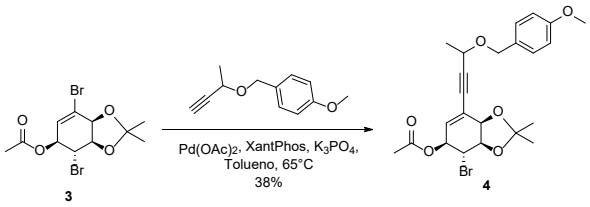


Figura 5: acoplamiento C-C

Si bien el rendimiento de esta etapa continúa siendo optimizado, es adecuado para seguir adelante con la secuencia sintética.

En los pasos subsiguientes se pretende modificar la cadena lateral, de forma de lograr las cadenas presentes en distintas biscognieninas naturales. Para ello, en primer lugar, se procede a la ruptura del éter bencílico para dejar libre un hidroxilo sobre la cadena lateral (Figura 6)

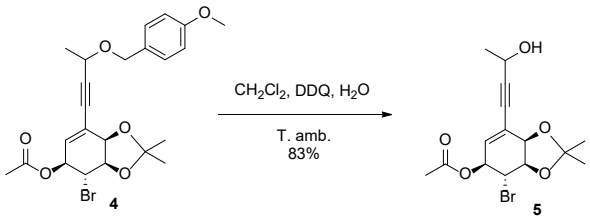


Figura 6: desprotección de alcohol de cadena lateral

Finalmente, el alcohol secundario de la cadena lateral fue oxidado a cetona, como se muestra en la Figura 7

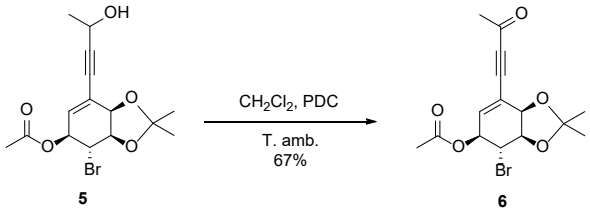


Figura 7

Los compuestos **5** y **6** constituyen valiosos intermedios avanzados para la síntesis de biscognieninas naturales y no naturales (BGNN). Variando la cadena lateral y la funcionalización y estereoquímica del núcleo de ciclohexeno podremos contar con una numerosa biblioteca de biscognieninas y análogos (Figura 8)

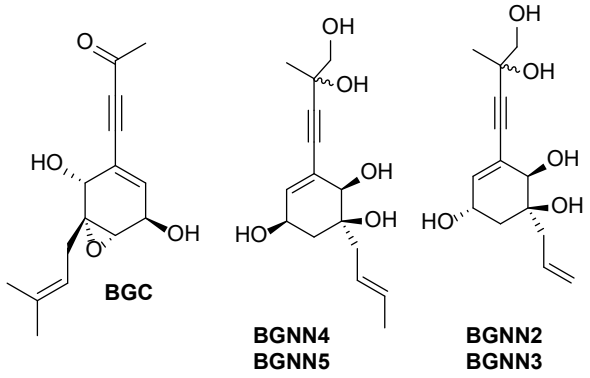


Figura 8: ejemplos de biscognieninas que pueden prepararse a partir de **5** y **6**

6. Conclusiones

Se lograron obtener intermedios quirales avanzados para la preparación de biscognieninas no naturales, a partir de precursores obtenidos enzimáticamente, mediante una estrategia eficiente y con resultados promisorios.

7. Referencias Bibliográficas

1. *Chirality in Industry*, John Wiley and Sons, Chichester, England, **1994**.

2. K. Faber, *Biotransformations in Organic Chemistry*, Springer-Verlag, Berlin, Germany, **2000**.

3. T. Hudlicky, J. W. Reed, *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 3117.

4. T. Hudlicky, D. González, D. T. Gibson, *Aldrichim. Acta* **1999**, *32*, 35–61.

5. R. A. Johnson, *Org. React.* **2004**, *63*, 117–264.

6. V. Schapiro, M. Brovetto, I. Carrera, D. Gamenara, D. González, E. Pandolfi, G. Seoane, *Asian J. Org. Chem.* **2022**, *e202200530*.

7. H. Zhao, G.-D. Chen, J. Zou, R.-R. He, S.-Y. Qin, D. Hu, G.-Q. Li, L.-D. Guo, X.-S. Yao, H. Gao, *Org. Lett.* **2017**, *19*, 38.

8. D. Gan, Q. Liu, Y. Yang, C. Wang, L. Zhu, C. Li, L. Cai, *Phytochemistry* **2023**, *206*, 113522.

9. N. R. Modugu, G. Mehta, *Tetrahedron Lett.* **2018**, *59*, 4036–4038.

8. Financiamiento

Este trabajo fue financiado con apoyo de la Agencia Nacional de Investigación e Innovación (ANII) y del Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas (PEDECIBA)

31.- Tecnologías de la información y comunicación

Evaluación del Impacto de Técnicas de Ataque Adversario en Modelos de Clasificación de Señales EEG

Autor: Costa, Beatriz Conceição da; beatrizdacosta1@gmail.com
Orientador: Dalmazo, Bruno Lopes; dalmazo@furg.br
Universidade Federal do Rio Grande / Centro de Ciências Computacionais

Resumen

Las interfaces cerebro-computadora (BCI) son sistemas que capturan señales cerebrales mediante técnicas como la electroencefalografía (EEG), procesando dichas señales para diversas aplicaciones, especialmente en el control de dispositivos para personas con limitaciones motoras. A pesar de sus beneficios, existen preocupaciones de seguridad, incluyendo ataques adversarios y amenazas cibernéticas. Con la creciente presencia de dispositivos de interacción cerebro-computadora en el mercado, que acceden a las ondas cerebrales de los usuarios y las analizan con distintos fines, es necesario evaluar su seguridad. Este trabajo tiene como objetivo emular y analizar ataques adversarios en clasificadores utilizados en dispositivos BCI. Nuestros experimentos utilizaron la herramienta Foolbox para evaluar distintas técnicas adversarias, como DeepFool, FGSM, PGD y Carlini-Wagner. La evaluación permitió identificar los efectos negativos de estos ataques en la clasificación de datos. Los resultados muestran una reducción significativa en la precisión de los clasificadores, con tasas de éxito del ataque entre 75,2% y 100%. Además, se desarrollaron y evaluaron tres detectores de ataques adversarios basados en Random Forest, SVM y KNN, alcanzando precisiones de 83%, 83% y 50% respectivamente.

Palabras clave: Interfaces cerebro-computadora ataques adversarios, ciberseguridad

Introducción

Las interfaces cerebro-computadora (BCI - Brain-Computer Interfaces) son sistemas que recopilan señales cerebrales, las procesan y las utilizan con un propósito determinado. Las aplicaciones más conocidas en el ámbito médico incluyen el control de sillas de ruedas, robots, brazos mecánicos y teclados. En general, los dispositivos BCI están diseñados para pacientes con algún tipo de discapacidad motora o de movilidad.

Para desarrollar sistemas basados en BCI, se requieren las señales cerebrales del paciente o usuario. Existen varias técnicas para recolectarlas, pero la electroencefalografía (EEG) es la más utilizada por su bajo costo y su naturaleza no invasiva. EEG emplea electrodos colocados en el cuero cabelludo para captar impulsos eléctricos. El proceso de uso de señales EEG en BCI, en términos generales, comienza con la generación de actividad cerebral por parte del usuario. Luego, los datos pasan por un preprocesamiento que permite la extracción de características (e.g. ondas cerebrales Delta, Theta, Alpha, Beta, asociadas a procesos mentales como la atención, concentración o resolución de problemas). Después del preprocesamiento, los datos se clasifican. Según la aplicación, puede haber una etapa de postprocesamiento, en la cual se proporciona feedback al usuario a través de la interfaz de la aplicación.

Actualmente, existen diversos productos comerciales con propósitos variados, como videojuegos, análisis de productividad y evaluación de emociones, como ejemplifica Neurable. Otros aún se encuentran en fase de prueba, como el implante cerebral Neuralink, que busca desarrollar una interfaz cerebro-computadora para asistir a personas con parálisis, pérdida de memoria, audición, visión u otros problemas neurológicos. Otro dispositivo en desarrollo es el de la empresa Kernel, enfocado en la medición cerebral para acelerar el desarrollo de tratamientos, mejorar los resultados clínicos y reducir los costos de atención médica, proporcionando datos más precisos para la toma de decisiones médicas.

En este contexto, con el avance de tecnologías como EEG y el surgimiento de dispositivos innovadores como Neuralink y Neurable, que amplían las posibilidades de interacción directa entre el cerebro y sistemas computacionales, surgen preocupaciones significativas en cuanto a la seguridad. Estos dispositivos se convierten en blancos potenciales de múltiples ataques cibernéticos, como ataques adversarios, desbordamientos de buffer, malware, entre otros (Bernal, Celdrán & Pérez,2022; Dalmazo, Vilela & Curado, 2017; Dalmazo, Vilela & Curado, 2018).

Dado el crecimiento del uso de estos productos y el proceso mediante el cual los datos EEG se transmiten hacia plataformas de análisis (ya sea en computadoras o en la nube), donde se procesan y almacenan, es imperativo discutir y evaluar los aspectos de seguridad de estas aplicaciones. La transmisión y el almacenamiento de información personal conllevan riesgos significativos para la privacidad y la seguridad de los usuarios. Por lo tanto, es de vital importancia que la comunidad científica investigue y desarrolle medidas sólidas que protejan estos datos, asegurando que las innovaciones tecnológicas no comprometan la privacidad ni la seguridad de los usuarios.

En este contexto, el presente trabajo tiene como objetivo emular y analizar ataques adversarios en clasificadores utilizados en dispositivos BCI, así como detectar dichos ataques mediante técnicas de aprendizaje automático. En nuestros experimentos, utilizamos la herramienta Foolbox y métodos como el Método del Gradiente Rápido (FGSM), el Descenso por Gradiente Proyectado (PGD), DeepFool y Carlini & Wagner para introducir perturbaciones con intensidad controlada y examinar la respuesta de los clasificadores bajo estas condiciones adversas. Observamos que, en promedio, la precisión del modelo disminuyó del 76,04% antes del ataque al 25,69% después del ataque, representando una caída significativa del 50,35%. Además, se evaluaron tres detectores de ataques adversarios basados en Random Forest, Support Vector Machine y K-Nearest Neighbors, los cuales mostraron un desempeño satisfactorio frente a ataques FGSM moderados. Sin embargo, la detección de ataques DeepFool resultó más desafiante, con un rendimiento considerablemente inferior, lo que evidencia la complejidad de identificar perturbaciones más sutiles.

Estos resultados demuestran no solo la vulnerabilidad de los sistemas BCI frente a ataques adversarios, sino también la relevancia de investigar métodos de defensa y mejorar los mecanismos automáticos de detección para garantizar la robustez y seguridad de dichos sistemas frente a posibles amenazas.

Objetivos

En los últimos años, diversos estudios han demostrado que los sistemas basados en aprendizaje automático son vulnerables a ataques adversarios, los cuales buscan generar salidas incorrectas mediante entradas manipuladas sutilmente (Barreno et al.,2006). Este tipo de ataque, originalmente aplicado a servicios como controladores de admisión y servidores web (Kanhere, S.S. & Naveed, A., 2005), ha ganado gran notoriedad en áreas como visión por computador, donde incluso

pequeñas modificaciones visuales pueden causar errores graves de clasificación (Wang et. al 2014). Asimismo, se han reportado ataques exitosos a clasificadores de malware, aun cuando se emplean defensas como el entrenamiento adversario (Espíndola et. al, 2024).

Este escenario también se extiende a las interfaces cerebro-computadora (BCI), donde se han identificado amenazas en diferentes fases del sistema. Ataques de envenenamiento pueden comprometer el modelo durante su entrenamiento, afectando la personalización del sistema a largo plazo, mientras que ataques de evasión pueden alterar entradas durante la inferencia, generando errores en tiempo real en aplicaciones críticas como control de prótesis o diagnósticos médicos (Chen et. al, 2024).

A partir de estas evidencias, este trabajo tiene como objetivo emular ataques adversarios en clasificadores de señales EEG usados en BCI, evaluar su impacto sobre la precisión del modelo y proponer mecanismos de detección utilizando algoritmos de aprendizaje supervisado.

Materiales y Métodos

En este trabajo, se presenta una revisión de la literatura con el objetivo de comprender los estudios previos sobre ataques adversarios en interfaces cerebro-computadora (BCI).

Utilizamos las plataformas IEEE Xplore y ArXiv para buscar artículos relevantes que permitieran comprender el estado del arte sobre este tema. IEEE Xplore es una fuente consolidada de información científica y, considerando que se trata de un tema reciente, también se incluyeron estudios disponibles en ArXiv, que ofrecen perspectivas emergentes.

Se utilizaron las siguientes palabras clave: “Brain-Computer Interfaces” y “Adversarial attacks”. Las Tablas 1 y 2 presentan los criterios de selección y los resultados compilados.

Criterios de Inclusión y Exclusión

Criterio de Inclusión	
IC1	Período de publicación entre 2019-2024
IC2	Acceso abierto
Criterio de Exclusión	
EC1	Ser una revisión (survey)
EC2	No abordar ataques adversarios

Tabla 1 - Criterios de inclusión (IC) y exclusión (EC)

Resultados	Total
IEEE Xplore	20
ArXiv	13 (dos fueron eliminados por duplicación con IEEE Xplore)
No incluidos por IC1, IC2	1
Artículos seleccionados	21

Tabla 2 - Estudios seleccionados

Análisis de los Trabajos

Entre los principales estudios, destacan investigaciones como la de Jiang, Zhang y Wu (2019), que exploran ataques tipo “caja negra”, donde el atacante solo observa las respuestas del modelo ante ciertas entradas. Por otro lado, Jung, Moon, Yu y Hwang (2023) proponen una red generativa llamada Generative Perturbation Network — capaz de generar ataques específicos para señales EEG.

Algunos estudios se centran en el impacto de los ataques en canales específicos del EEG (Feng, Wang y Ding, 2021), mientras que otros proponen redes neuronales adversarias para mejorar la robustez de los clasificadores (Aissa et al. 2024). También existen propuestas para la detección y mitigación de ataques, como enfoques basados en redes convolucionales (CNN) (Aissa, Lakas, Korichi, Kerrache y Belkacem 2023), y métodos estadísticos para detectar artefactos adversarios (Chen et al. 2024).

A pesar de los avances, se observa que la mayoría de las investigaciones se centran en proponer nuevos tipos de ataques adversarios, y pocos trabajos desarrollan métodos de defensa. Existe una clara brecha en la evaluación sistemática de la eficacia de los diferentes métodos de ataque y, especialmente, en el estudio de técnicas de detección. Solo algunos trabajos analizan el impacto de perturbaciones en distintos paradigmas de EEG o proponen estrategias prácticas para identificar señales adversarias automáticamente, lo cual es crucial para la seguridad en aplicaciones reales.

Considerando las áreas críticas en las que se aplican los sistemas BCI —como salud, seguridad y privacidad de datos—, el desarrollo de soluciones más robustas y confiables es fundamental. En este sentido, análisis comparativos que consideren tanto la eficacia de los ataques como las capacidades de defensa y detección de los modelos son esenciales. Este trabajo busca contribuir en ese escenario evaluando el impacto de diferentes ataques adversarios y proponiendo un pipeline de detección automática en señales EEG, cubriendo una laguna relevante identificada en la literatura.

Resultados y Discusión

El objetivo de este trabajo es emular y analizar ataques adversarios en la comunicación entre pacientes y sistemas BCI. La emulación del ataque se realiza mediante la introducción de ruido en la transmisión de las señales entre los pacientes y el sistema BCI. Además, se propone evaluar los efectos de estos ataques en el rendimiento de los clasificadores mediante la inyección de datos falsos (como se describe en la Relación 1 en la Figura 1. (Leite, Santo, Dalmazo y Riker 2024).

Adicionalmente, este trabajo propone la implementación de un mecanismo para la detección de ataques adversarios. Con estos objetivos, los experimentos fueron realizados utilizando una base de datos de la cual se extrajo una clasificación, seguida por la inserción de los ataques adversarios. Después de los ataques, se requiere una nueva clasificación (como se muestra en la Relación 2 de la Figura 1), y los resultados obtenidos son analizados y discutidos, con el fin de identificar patrones e impactos de los ataques, así como la eficacia del mecanismo de detección en el entorno de interfaz cerebro-computadora.

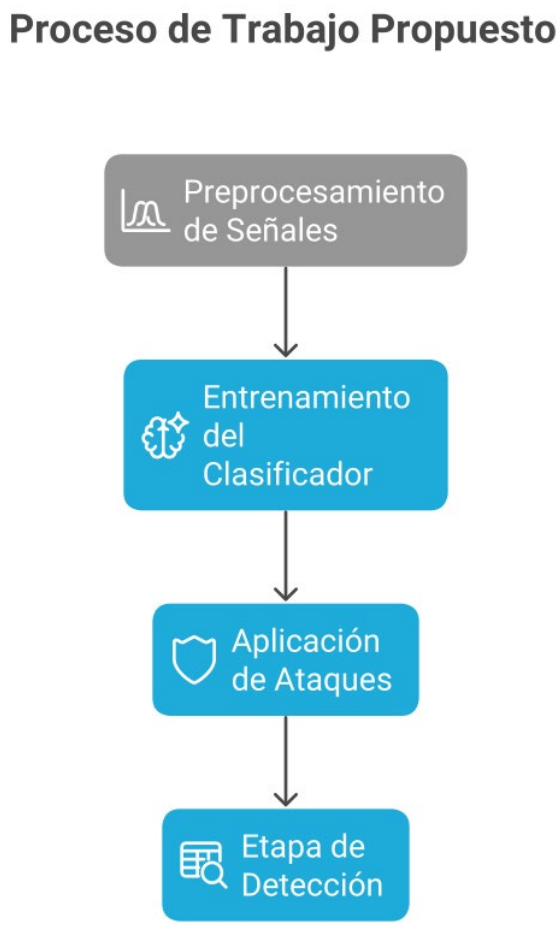


Figura 1 - Modelo conceptual

Conjunto de datos utilizado

El conjunto de datos utilizado es el BCI Competition 2008 Graz data set A (Brunner et al., 2008), que contiene datos adecuados para diversos tipos de análisis: incluye 9 participantes, totalizando 48 sesiones. En este trabajo se ejecutaron cuatro tareas de imaginación motora: mano izquierda (clase 1), mano derecha (clase 2), ambos pies (clase 3) y lengua (clase 4).

Para las grabaciones, los participantes permanecían sentados en sillas reclinables, utilizando un casco con

electrodos capaces de captar información, empleando el sistema EEG-10-20, un estándar con hasta 38 canales; en este trabajo se utilizaron 22 de estos canales, como se puede observar en la Figura 2. En ella se muestra la distribución de los canales utilizados; cada punto representa un canal específico colocado en la superficie del cuero cabelludo de los participantes, con el fin de captar señales eléctricas generadas por la actividad neuronal. Además, este conjunto de datos busca estimar la influencia del movimiento ocular sobre los datos; por ello, la sesión comienza con el participante manteniendo los ojos abiertos durante dos minutos, fijando la vista en una cruz en la pantalla, luego un minuto con los ojos cerrados, y finalmente un minuto con movimientos oculares. Los datos se proporcionan en archivos con extensión .gdf.

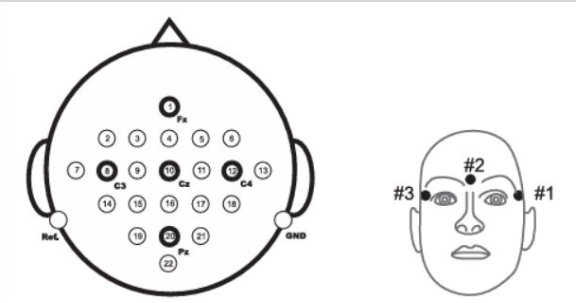


Figura 2 - Canales utilizados para la grabación de los datos

Evaluación e Implementación

En esta sección se presenta el proceso de desarrollo y análisis de un modelo de IA capaz de clasificar un conjunto de datos de EEG, además de explorar el rendimiento del clasificador ante ataques adversarios y su capacidad de detección.

Preprocesamiento: Se utilizaron los datos del conjunto BCI Competition 2008 Graz data set A. Para que puedan ser utilizados por un clasificador, primero es necesario eliminar el ruido y ajustar las frecuencias. Se empleó la biblioteca MNE de Python, que permite el análisis de datos neurofisiológicos como EEG y otras señales biométricas. El primer paso fue eliminar las señales relacionadas con el electrooculography (EOG), ya que no son relevantes para los objetivos de este trabajo. El enfoque está en señales cerebrales relacionadas con actividades motoras para pruebas de ataques adversarios. El EOG representa actividad muscular ocular, como movimientos y parpadeos, que pueden introducir artefactos no deseados, afectando negativamente el rendimiento del clasificador. Por lo tanto, su eliminación proporciona datos más específicos para los objetivos propuestos.

Luego, se aplicó un filtro FIR con corte entre 7Hz y 35Hz para eliminar ruidos de baja y alta frecuencia. También se redujo la frecuencia de muestreo a 200Hz para disminuir el costo computacional. Para eliminar señales no cerebrales, se utilizó Análisis de Componentes Independientes

(ICA), que permite eliminar ruidos como actividad muscular facial o interferencias eléctricas de equipos. Finalmente, los datos fueron segmentados en épocas de acuerdo con los eventos de imaginación motora, facilitando el análisis de patrones temporales.

Modelo: El modelo utilizado para la clasificación fue EEGNet propuesto por Lawhern et al. (2018), una red neuronal convolucional compacta creada específicamente para aplicaciones BCI. Se eligió este modelo ya que está presente en 14 de los 21 artículos analizados en nuestra revisión de literatura. Los hiperparámetros también fueron definidos de acuerdo con estudios previos: el entrenamiento se realizó con una tasa de aprendizaje de 0.001 y un batch size de 64 para evitar problemas con el gradiente. Se utilizó el optimizador Adam por su amplio uso en aprendizaje profundo.

Emulación de Ataques Adversarios

Para evaluar la robustez del modelo, se aplicaron técnicas de ataques adversarios a interfaces BCI, identificadas durante la revisión de literatura e implementadas usando la biblioteca Foolbox (Rauber et al., 2020):

- Método de Señal de Gradiente Rápido (FGSM) Goodfellow et al. (2015): Utiliza el gradiente para identificar la dirección que maximiza la pérdida, aplicando una perturbación controlada. Se definió una intensidad de 0.03 para mantener los datos dentro de un rango similar al original, induciendo errores sin perder la interpretabilidad de las señales.
- DeepFool Moosavi-Dezfooli et al. (2016): Diseñado para engañar redes profundas introduciendo perturbaciones mínimas. Busca la menor perturbación necesaria para alterar la clasificación, siendo útil para clasificadores binarios y multiclase.
- Gradiente Descendente Proyectado (PGD) Madry et al. (2019): Un método eficaz y simple que encuentra una perturbación dentro de una región restringida que engaña a la red.
- Carlini y Wagner 2017: Considerado altamente poderoso, formula el ataque como un problema de minimización, con diferentes métricas de distancia:
  - Minimizar los cambios de amplitud del conjunto de muestras;
  - Minimizar el número de puntos modificados en la señal;
  - Minimizar el mayor cambio en cualquier punto de la señal.

Evaluación

Los resultados obtenidos para los ataques adversarios se detallan en la Tabla 3. Comparativamente, el clasificador original presentó una precisión promedio del 66,67% entre todos los sujetos antes de la aplicación de los ataques. Las clases "mano izquierda" y "lengua" fueron notablemente precisas en varios sujetos.

La implementación de diferentes técnicas de ataque, como DeepFool, FGSM, PGD y Carlini & Wagner, demostró eficiencias variables, reflejadas tanto en la tasa de éxito como en la perturbación media causada por cada ataque, como se muestra en la tabla.

Para medir el impacto de estos ataques adversarios en el modelo, se utilizó el método de reducción porcentual relativa para cuantificar la caída en la precisión. Este método evalúa la proporción de la diferencia entre la precisión antes y después del ataque respecto al valor inicial.

Por ejemplo, para el Sujeto 1, la precisión antes del ataque FGSM era del 76,04% y, después del ataque, cayó al 25,69%. Aplicando la fórmula de la Ecuación 1, se obtiene una reducción significativa del 66,23% en la precisión, lo que indica que el ataque comprometió gravemente el modelo al inducir predicciones incorrectas generalizadas.

$$x = \left(\frac{\text{Precisión antes del ataque} - \text{Precisión después del ataque}}{\text{Precisión antes del ataque}}\right) \times 100$$

Ecuación 1

Ataque	Precisión inicial	Tasa de éxito	Perturba-ción media
DeepFool	0.00%	100.0%	0.009303
FGSM	24.80%	75.2%	0.005000
PGD	11.4%	88.6%	0.005097
CarliniWagner	0.00%	100.0%	0.017773

Tabla 3 - Comparación de los resultados de los ataques adversarios

Fuente: Elaborado por la autora.

- DeepFool y Carlini Wagner fueron especialmente devastadores, reduciendo la precisión al 0%, con una efectividad del 100% y perturbaciones medias de 0.009303 y 0.017773, respectivamente.
- FGSM y PGD, aunque no eliminaron completamente la capacidad predictiva del modelo, redujeron significativamente la precisión a 24.8% y 11.4%, con tasas de éxito del 75.2% y 88.6%, respectivamente.

Los resultados del Sujeto 2 se ilustran en las Figuras 3 hasta 7, que muestran las matrices de confusión comparando el rendimiento del modelo en datos limpios y tras los ataques. Estas matrices refuerzan los resultados de la tabla, mostrando el comportamiento del clasificador por clase y sujeto. Estas observaciones son esenciales para comprender la robustez del modelo frente a ataques más sofisticados y ayudan a establecer comparaciones claras sobre qué técnica resulta más perjudicial en contextos con señales EEG.

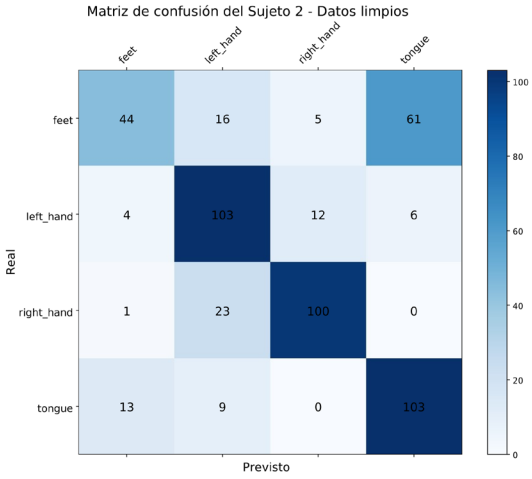


Figura 3 - Matriz de confusión del sujeto 2 - Datos límpios

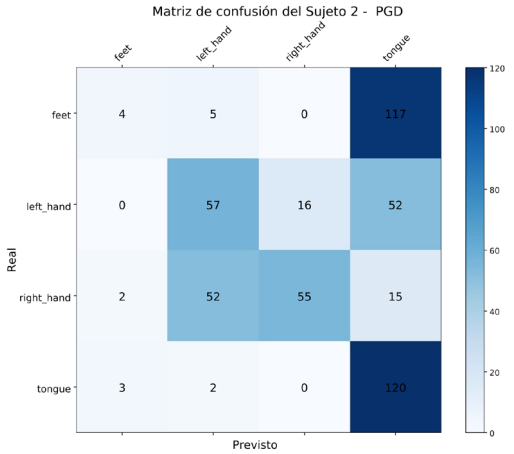


Figura 4 - Matriz de confusión del sujeto 2 - PGD

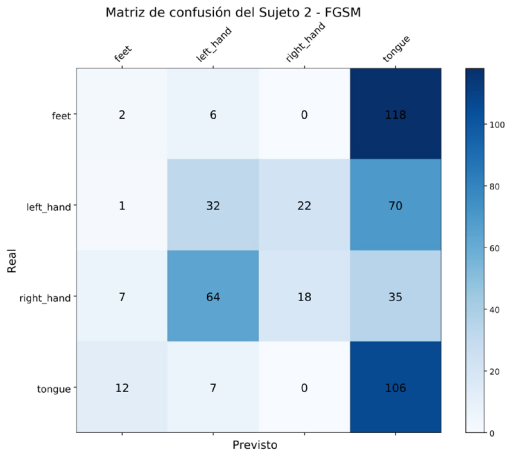


Figura 5 - Matriz de confusión del sujeto 2 - FGSM

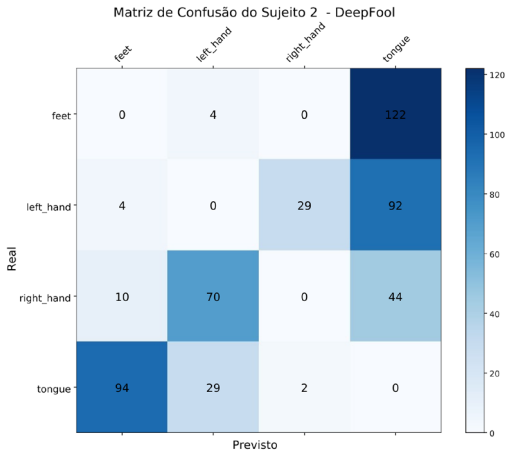


Figura 6 - Matriz de confusión del sujeto 2 - DeepFool

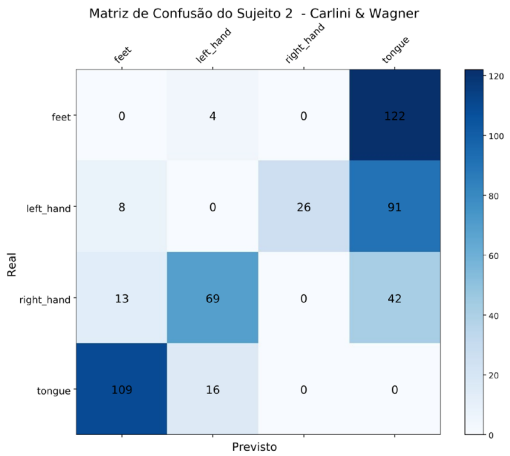


Figura 7 - Matriz de confusión del sujeto 2 - Carlini & Wagner

Detección de Ataques Adversarios

Tras evidenciar la vulnerabilidad de los clasificadores EEG frente a ataques adversarios, este trabajo propone la evaluación de mecanismos de detección, un aspecto central para aplicaciones prácticas, ya que permitiría identificar intentos de manipulación maliciosa que podrían comprometer decisiones sensibles.

Se planea construir un dataset compuesto por señales legítimas y señales adversarias generadas mediante los ataques FGSM y DeepFool. Estas señales serán sometidas a procesos de normalización y reducción de dimensionalidad (mediante PCA) para optimizar el aprendizaje.

Como estrategia, se pretende entrenar tres clasificadores: Random Forest, Support Vector Machine (SVM) y K-Nearest Neighbors (KNN). El conjunto de datos será dividido en 80% para entrenamiento y 20% para pruebas. Posteriormente, cada clasificador será evaluado de forma independiente en su capacidad para distinguir entre muestras limpias y adversarias.

Para el análisis detallado, se tomará como referencia el ataque FGSM que, ségun la literatura, degrada significativamente el rendimiento del clasificador sin destruir completamente su estructura interna. En este escenario, se planea evaluar tres clasificadores: Random Forest, SVM y KNN.

Además, se planea utilizar métricas como análisis de varianza (ANOVA), matriz de confusión, precisión (accuracy), exactitud (precision), recall, F1-score y curva ROC (Receiver Operating Characteristic) para evaluar las detecciones frente ejemplos adversarios. Estas métricas permitirán comprender no sólo el número de aciertos del modelo, sino su capacidad para diferenciar correctamente entre clases positivas y negativas.

Conclusiones

En este trabajo se revisó la literatura existente sobre ataques adversarios en interfaces cerebro-computador (BCI) y se realizaron experimentos para analizar el impacto de estos ataques en clasificadores de señales EEG. Se utilizaron datos del conjunto BCI

Competition 2008 Graz data set A, aplicando técnicas de preprocesamiento y evaluando el desempeño del clasificador EEGNet tanto en condiciones limpias como bajo diferentes tipos de ataque.

La evaluación de múltiples métodos adversarios — incluyendo FGSM, PGD, DeepFool y Carlini-Wagner — demostró que incluso perturbaciones mínimas pueden reducir drásticamente la precisión de los modelos, con tasas de éxito que variaron entre 75,2% y 100%. Estos resultados destacan la fragilidad de los clasificadores frente a amenazas que podrían comprometer sistemas sensibles como dispositivos médicos o herramientas de accesibilidad.

Además, este estudio propone el desarrollo futuro de un pipeline de detección de ataques adversarios. La propuesta incluye la generación de ejemplos manipulados (por ejemplo, mediante FGSM y DeepFool) y el entrenamiento de clasificadores tradicionales como Random Forest, SVM y KNN, con el objetivo de distinguir entre señales legítimas y adulteradas. Aunque esta etapa aún no fue implementada en su totalidad, se planea evaluarla mediante métricas estándar de aprendizaje automático, como curvas ROC, precisión, recall y F1-score.

La relevancia de este estudio radica en el aumento del uso de tecnologías BCI en áreas como la salud, el control de dispositivos, el entretenimiento y la mejora del enfoque cognitivo. En tales contextos, los ataques adversarios podrían comprometer la integridad de los datos, generando fallos en diagnósticos, tratamientos terapéuticos o frustración en experiencias de usuario.

Los resultados obtenidos refuerzan la necesidad de fortalecer tanto las estrategias de generación de ataques — con fines de prueba de robustez — como los métodos de detección.

Referencias Bibliográficas

Goodfellow, I. J., Shlens, J., & Szegedy, C. (2015). Explaining and harnessing adversarial examples. arXiv preprint arXiv:1412.6572. https://arxiv.org/abs/1412.6572

Madry, A., Makelov, A., Schmidt, L., Tsipras, D., & Vladu, A. (2019). Towards deep learning models resistant to adversarial attacks. arXiv preprint arXiv:1706.06083. https://arxiv.org/abs/1706.06083

Moosavi-Dezfooli, S. M., Fawzi, A., & Frossard, P. (2016). DeepFool: A simple and accurate method to fool deep neural networks. arXiv preprint arXiv:1511.04599. https://arxiv.org/abs/1511.04599

Carlini, N., & Wagner, D. (2017). Towards evaluating the robustness of neural networks. arXiv preprint arXiv:1608.04644. https://arxiv.org/abs/1608.04644

Rauber, J., Zimmermann, R., Bethge, M., & Brendel, W. (2020). Foolbox Native: Fast adversarial attacks to benchmark the robustness of machine learning models in PyTorch, TensorFlow, and JAX. Journal of Open Source Software, 5(53), 2607. https://doi.org/10.21105/joss.02607

Lawhern, V. J., Solon, A. J., Waytowich, N. R., Gordon, S. M., Hung, C. P., & Lance, B. J. (2018). EEGNet: A compact convolutional neural network for EEG-based brain–computer interfaces. Journal of Neural Engineering, 15(5), 056013. https://doi.org/10.1088/1741-2552/aace8c

Brunner, C., Leeb, R., Muller-Putz, G. R., Schlogl, A., & Pfurtscheller, G. (2008). BCI Competition 2008 Graz data set A. https://www.bbci.de/competition/iv/desc_2a.pdf

Chen, X., Meng, L., Xu, Y., & Wu, D. (2024). Adversarial artifact detection in EEG-based brain–computer interfaces. Journal of Neural Engineering, 21(5), 056043. https://doi.org/10.1088/1741-2552/ad8964

Aissa, N. E. H. S. B., Lakas, A., Korichi, A., Kerrache, C. A., & Belkacem, A. N. (2023). Robust detection of adversarial attacks for EEG-based motor imagery classification using hierarchical deep learning. In 2023 15th International Conference on Innovations in Information Technology (IIT) (pp. 156–161). IEEE. https://doi.org/10.1109/IIT59782.2023.10366492

Aissa, N. E. H. S. B., Kerrache, C. A., Korichi, A., Lakas, A., & Belkacem, A. N. (2024). Enhancing EEG signal classifier robustness against adversarial attacks using a generative adversarial network approach. IEEE Internet of Things Magazine, 7(3), 44–49. https://doi.org/10.1109/IOTM.001.2300262

Feng, B., Wang, Y., & Ding, Y. (2021). Saga: Sparse adversarial attack on EEG-based brain computer interface. In ICASSP 2021 - 2021 IEEE International Conference on

Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP) (pp. 975–979). IEEE. https://doi.org/10.1109/ICASSP39728.2021.9413507

Jung, J., Moon, H., Yu, G., & Hwang, H. (2023). Generative perturbation network for universal adversarial attacks on brain-computer interfaces. IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics, 27(11), 5622–5633. https://doi.org/10.1109/JBHI.2023.3303494

Jiang, X., Zhang, X., & Wu, D. (2019). Active learning for black-box adversarial attacks in EEG-based brain-computer interfaces. In 2019 IEEE Symposium Series on Computational Intelligence (SSCI) (pp. 361–368). IEEE. https://doi.org/10.1109/SSCI44817.2019.9002719



Asociación de Universidades
GRUPO MONTEVIDEO

UNT
UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN