



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Aplicaciones de Aprendizaje Máquina en Química

Descripción general (resumen y metodología):

La Inteligencia Artificial (IA), y específicamente el Aprendizaje Automático (Machine Learning, ML) y la analítica de Big Data, han transformado de manera disruptiva el paradigma científico actual. Disciplinas como la Bioinformática y la Biotecnología han alcanzado hitos históricos gracias a estas herramientas; integración que hoy resulta igualmente imprescindible en las Ciencias Químicas. En la actualidad, la evolución hacia modelos de aprendizaje profundo (Deep Learning) y arquitecturas neuronales avanzadas permite procesar espacios químicos complejos, superando en ocasiones la capacidad de discernimiento de expertos humanos en tareas de clasificación y regresión. Más allá de aplicaciones cotidianas como los vehículos autónomos o el reconocimiento facial, la Química computacional moderna se beneficia del ML en áreas críticas como el cribado virtual (virtual screening) de fármacos, la predicción del plegamiento de proteínas (mediante hitos como AlphaFold) y la retrosíntesis asistida por ordenador.

Metodología: El proyecto se estructurará en tres fases. En primer lugar, se realizará una revisión bibliográfica crítica sobre el estado del arte de las técnicas de ML aplicadas al dominio químico. Posteriormente, el estudiante desarrollará una fase de experimentación técnica utilizando lenguajes de programación estándar en el sector, implementando modelos fundamentales en conjuntos de datos químicos de referencia. Finalmente, el TFG culminará con el abordaje de un problema original, donde se aplicarán y validarán distintas arquitecturas de aprendizaje sobre un caso de estudio químico específico, seleccionado conjuntamente por el estudiante y el equipo de tutorización.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

El objetivo de este trabajo es realizar una revisión de algunas de las técnicas de aprendizaje máquina más utilizadas y conocidas en el momento actual, y su aplicación a diversas áreas de la Química. Paralelamente, y para complementar dicha revisión se realizará un estudio comparativo de algunas de dichas técnicas en un problema Químico básico

Bibliografía básica:

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: LUIS JAVIER HERRERA MALDONADO

Ámbito de conocimiento/Departamento: ARQUITECTURA Y TECNOLOGÍA DE COMPUTADORES

Correo electrónico: jherrera@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: