



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



Facultad de Ciencias

### PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

#### DATOS BÁSICOS DEL TFG

|                           |  |                          |    |
|---------------------------|--|--------------------------|----|
| TÍTULO TFG                | Aplicaciones de Aprendizaje Máquina en Química |                          |    |
| CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup> | ARQ-23/24-1                                    | TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup> | A1 |

<sup>(1)</sup> A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden (p.e.: QA-01)

<sup>(2)</sup> Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

|              |   |                                     |
|--------------|---|-------------------------------------|
| OFERTADO POR | Profesor del Departamento                                 | <input checked="" type="checkbox"/> |
|              | Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución | <input type="checkbox"/>            |

#### DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

|  |  |                     |  |
|--|--|---------------------|--|
| CENTRO (Departamento, institución o empresa) | Facultad de Ciencias<br>Universidad de Granada |                     |  |
| DIRECCIÓN POSTAL <sup>(3)</sup>              |  |                     |  |
| LOCALIDAD <sup>(3)</sup>                     |  | C.P. <sup>(3)</sup> |  |

<sup>(3)</sup> A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

#### DATOS DEL TUTOR

| TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) |   |        |                 |
|---|---|--------|-----------------|
| NOMBRE Y APELLIDOS  | Herrera Maldonado, Luis Javier  |        |                 |
| DEPARTAMENTO  | Ingeniería de Computadores, Automática y Robótica (antiguo Arquitectura y Tecnología de Computadores) |        |                 |
| CARGO <sup>(4)</sup>  | Profesor Titular  |        |                 |
| TELÉFONO  | 958240569   | E-MAIL | jherrera@ugr.es |

#### Rellenar en caso de haber un segundo tutor

| TUTOR 2  |   |        |                    |
|--|---|--------|--------------------|
| NOMBRE Y APELLIDOS   | Claudia Villalonga Palliser   |        |                    |
| DEPARTAMENTO   | Ingeniería de Computadores, Automática y Robótica (antiguo Arquitectura y Tecnología de Computadores) |        |                    |
| CARGO <sup>(4)</sup>   | Profesora Contratada Doctora Indefinida   |        |                    |
| TELÉFONO   | 958248993   | E-MAIL | cvillalonga@ugr.es |
| TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución) |   |        |                    |
| NOMBRE Y APELLIDOS   |   |        |                    |
| TITULACIÓN   |   |        |                    |
| TELÉFONO   |   | E-MAIL |                    |

<sup>(4)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

### Introducción.

La Inteligencia Artificial y en concreto las técnicas de Aprendizaje Máquina y de Big data llevan años revolucionando la ciencia en general. Son numerosas las disciplinas cuya evolución no sería comprensible si el aporte de este tipo de técnicas, como son la Bioinformática, Biotecnología, etc. Actualmente además, los últimos avances en este tipo de técnicas están destinados a revolucionar nuestro día a día, permitiendo realizar tareas de aprendizaje puntual que son capaces a veces de mejorar la capacidad de discernimiento de un experto. Podemos citar algunos aportes ya reconocidos como los coches autónomos, sistemas de reconocimiento facial, etc.

La Química no queda ajena a dichos avances. Así la investigación en el diseño de fármacos, la predicción de plegamiento y estructura de proteínas, etc. son algunos de los problemas donde estas técnicas están aportando enormemente.

### Objetivos.

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.

### Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

- Revisión bibliográfica.
- Diseño y estudio de modelos de clasificación/regresión para un problema químico.

---

**Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) al correo: [gradoquimica@ugr.es](mailto:gradoquimica@ugr.es). El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.**

---

## TIPOLOGÍA<sup>(2)</sup>

- A.** Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:
- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
  - A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
  - A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.
- B.** Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:
- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
  - B2.** Elaboración de un plan de empresa.
  - B3.** Simulación de encargos profesionales.
- C.** Trabajos bibliográficos (**C**)