



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: PREDICCIÓN DE LA IRRITACIÓN DÉRMICA DE FORMULADOS COSMÉTICOS MEDIANTE TÉCNICAS DE MACHINE LEARNING

Descripción general (resumen y metodología):

La evaluación de la seguridad de los productos cosméticos es esencial para garantizar la protección de los consumidores. La irritación dérmica es una de las reacciones adversas más comunes asociadas a este tipo de productos que están formulados fundamentalmente por productos de base tensioactiva. Tradicionalmente, la evaluación de la irritación se realiza mediante pruebas in vitro e in vivo, las cuales son costosas y requieren un tiempo elevado de trabajo en el laboratorio. Este trabajo se propone la determinación experimental en el laboratorio de la irritación dérmica mediante métodos in vitro de productos cosméticos formulados con tensioactivos y el uso de técnicas de machine learning (ML) para predecir la irritación dérmica de este tipo de formulados, ofreciendo una alternativa más rápida y económica.

Tipología: Trabajos experimentales, de toma de datos de campo o de laboratorio.

Objetivos planteados:

- Evaluar Experimentalmente la Irritación Dérmica. Realizar pruebas de irritación dérmica in vitro en productos cosméticos formulados con tensioactivos para obtener datos experimentales precisos.
- Investigar y determinar cuáles ingredientes y propiedades químicas de los tensioactivos son los más influyentes en la irritación dérmica.
- Desarrollar un modelo predictivo de Machine Learning. Crear y entrenar un modelo de Machine Learning que pueda predecir la irritación dérmica de formulados cosméticos con tensioactivos, utilizando los datos experimentales obtenidos.

Bibliografía básica:

- Wu, X., et al. (2020). "Machine learning algorithms for predicting skin irritation of cosmetic formulations." *Computational Toxicology*, 16, 100137.
- Touw, D. J., et al. (2018). "Predicting the skin sensitization potential of chemicals using machine learning and molecular dynamics." *Journal of Chemical Information and Modeling*, 58(4), 742-752.
- McKim, J. M., et al. (2012). "An in vitro method for identifying chemical sensitizers using human reconstructed skin models and machine learning algorithms." *Toxicology In Vitro*, 26(5), 718-726.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: MANUELA MARÍA LECHUGA VILLENA

Ámbito de conocimiento/Departamento: INGENIERÍA QUÍMICA

Correo electrónico: nlvillen@ugr.es

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

Nombre y apellidos: LUIS JAVIER HERRERA MALDONADO

Ámbito de conocimiento/Departamento: ARQUITECTURA Y TECNOLOGÍA DE COMPUTADORES

Correo electrónico: jherrera@ugr.es

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:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: