UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2025/2026

GRADO: Grado en Química

CÓDIGO DEL TFG: 291-008-2025/2026

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Aplicaciones de Aprendizaje Máquina en Química

Descripción general (resumen y metodología):

La Inteligencia Artificial y en concreto las técnicas de Aprendizaje Máquina (AM) 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.

Metodología:

El estudiante realizará en primer lugar una lectura de diversos trabajos que abordan el uso de técnicas de AM en problemas químicos.

Posteriormente el estudiante abordará, utilizando un lenguaje de programación adecuado, el estudio y experimentación con técnicas diversad de AM en problemas básicos.

Por último se abordará un problema original aplicando distintas técnicas de ML a un problema químico escogido por el estudiante y los tutores.

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: Claudia Villalonga Palliser

Ámbito de conocimiento/Departamento: ARQUITECTURA Y TECNOLOGÍA DE COMPUTADORES

Correo electrónico: cvillalonga@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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: