

Tesis, primer abstract

Título: Computational toxicology: IA and machine learning for predicting NPs cytotoxicity

Description: predicting the potential toxicity of NPs using machine learning algorithms.

Entrenar un dataset construido a partir de la caracterización fisicoquímica de NPs con (un número aproximado de descriptores) agrupados en categorías

Tutor... (Título, Descripción)

Abstract: Las NPs presentan aplicaciones prometedoras en diversos campos, sin embargo, su potencial citotóxico plantea preocupaciones significativas para la salud humana y ambiental. Los métodos experimentales tradicionales para evaluar la toxicidad de NPs son costosos, lentos y requieren el uso de modelos animales, lo que limita la evaluación sistemática de la gran diversidad de nanomateriales emergentes.

El presente estudio tiene como objetivo desarrollar modelos predictivos in silico para la citotoxicidad de NPs mediante algoritmos de machine learning. La metodología propuesta integra una caracterización multidimensional que incluye propiedades fisicoquímicas, estructurales y electrónicas de las NPs, complementada con propiedades periódicas de los elementos constituyentes, generando así una base de datos híbrida robusta para el entrenamiento de los modelos. basado en QSiAR

El conjunto de datos será balanceado para garantizar una representación equitativa de compuestos tóxicos y no tóxicos. Se implementarán y compararán diferentes algoritmos de machine learning para identificar el modelo con mejor rendimiento predictivo. La evaluación se realizará mediante validación cruzada, con el objetivo de alcanzar una precisión balanceada superior al 96% en el conjunto de pruebas.

Adicionalmente, se identificarán las variables predictoras más relevantes para la citotoxicidad, proporcionando insights sobre los mecanismos moleculares subyacentes. Los resultados de este estudio contribuirán al desarrollo de herramientas computacionales para la evaluación

rápida y eficiente de la seguridad de NPs, apoyando el diseño de stas más seguras y el proceso de toma de decisiones regulatorias.