

# NEWSLETTER

En esta entrega:

1. Presentación
2. ¿Que es un modelo QSAR?
3. ¿Que es una DBF?
4. Lecturas recomendadas

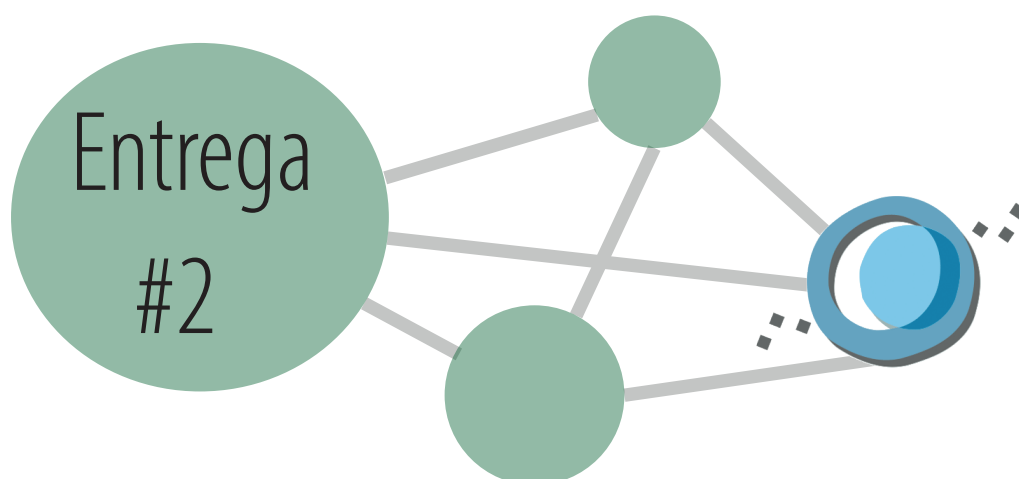
## 1. Presentación

---

Queridos lectores,

Con esta segunda entrega de la newsletter del proyecto ProMiTox vamos a profundizar en este proyecto y su importancia. Además presentaremos una serie de lecturas recomendadas relacionadas con la temática del proyecto.

¡Esperamos que os guste!



## 2. ¿Que es un modelo QSAR?

Los modelos QSAR son algoritmos matemáticos complejos que permiten facilitar, economizar y acelerar una importante tarea en campos como la química: la evaluación predictiva de las propiedades o actividades biológica de compuestos químicos a partir exclusivamente de su estructura molecular. Se basan en que existe una relación entre la estructura de un compuesto y su actividad, idea propuesta por el químico escocés Crum Brown hace ya más de cien años, y ampliamente demostrada desde entonces.

## 3. ¿Que es una DBF?

Una red de creencia profunda (en inglés Deep Belief Network, DBF) es un tipo de red neuronal profunda, compuesta por múltiples capas de variables latentes, con conexiones entre las capas pero no entre unidades dentro de cada capa.

Una DBN puede ser vista como una composición de redes simples y no supervisadas donde cada capa oculta de una subred sirve como la capa visible para la siguiente.

## 4. Lecturas recomendadas

Heo, Sung Ku, Usman Safder, and Chang Kyoo Yoo. 2019. "Deep Learning Driven QSAR Model for Environmental Toxicology: Effects of Endocrine Disrupting Chemicals on Human Health." *Environmental Pollution* 253:29–38. doi: 10.1016/J.ENVPOL.2019.06.081.

Hisaki, Tomoka, Maki Aiba Née Kaneko, Masahiko Yamaguchi, Hitoshi Sasa, and Hirokazu Kouzuki. 2015. "Development of QSAR Models Using Artificial Neural Network Analysis for Risk Assessment of Repeated-Dose, Reproductive, and Developmental Toxicities of Cosmetic Ingredients." *The Journal of Toxicological Sciences* 40(2):163–80. doi: 10.2131/JTS.40.163.

Khan, Kabiruddin, Kunal Roy, and Emilio Benfenati. 2019. "Ecotoxicological QSAR Modeling of Endocrine Disruptor Chemicals." *Journal of Hazardous Materials* 369:707–18. doi: 10.1016/J.JHAZ-MAT.2019.02.019.

# ¡Sigue atento a los avances de ProMiToX!



<https://www.linkedin.com/company/protoqsar>



<https://www.twitter.com/protoqsar>



<https://www.promitox.es/>

Este proyecto ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Empresa del Gobierno de España.

