

Nueva estrategia para obtener modelos predictivos que mejoren la seguridad de productos cosméticos y de limpieza del hogar.

El proyecto “modelos de predicción de reacciones de hipersensibilidad de formulaciones cosméticas, ambientadores y productos de limpieza del hogar basados en algoritmos de aprendizaje automático”, también conocido por el nombre de ProMiTox, se dirige al desarrollo de un conjunto de nuevos modelos químico-informáticos basados en la aplicación de la inteligencia artificial en este campo.

20 de abril de 2021.

Como ya se comentó anteriormente, conseguir una mayor efectividad y seguridad de productos químicos, como cosméticos o productos de limpieza, es uno de los retos que presenta hoy en día el campo de la toxicología. Si a esto se le suma conseguir estos productos de la forma más económica posible y empleando el menor número de animales de experimentación, este trabajo se complica aún más.

En esta tarea se basa el proyecto ProMiToX llevado a cabo en ProtoQSAR: el desarrollo de modelos computacionales que sean capaces de predecir las reacciones de hipersensibilización de compuestos químicos presentes en productos cosméticos, ambientadores y/o productos de limpieza del hogar. De esta forma, con estos modelos basados en la metodología QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship, por sus siglas en inglés) se pretende conseguir estos modelos predictivos que faciliten la evaluación de los compuestos químicos.

Durante el transcurso de este proyecto, diferentes problemas se han encontrado a la hora de realizar los modelos, es por esto por lo que se ha tomado la decisión de ampliar el estudio y no centrarse únicamente en conseguir modelos predictivos por medio de técnicas de redes neuronales, sino que se plantea también ampliarlo a las técnicas más comunes de aprendizaje automático como pueden ser “Random Forest”, “Support Vector Machine” o “Extra Trees” entre otras. De este modo, sin excluir las técnicas planteadas desde un principio, se va a proceder con otras diferentes de forma adicional para así conseguir un estudio más completo.

Más información en las redes sociales y en la web de la empresa:

- Web: www.protoqsar.com
- LinkedIn: ProtoQSAR
- Twitter: @ProtoQSAR

Hashtag del proyecto: #ProMiTox

Contacto con la empresa en el siguiente correo electrónico: info@protoqsar.com