



**GUSTAVO ESTEBAN
VAZQUEZ**

Dr.

["http://www.ucu.edu.uy/es/gustavo-vazquez"](http://www.ucu.edu.uy/es/gustavo-vazquez)

Av. 8 de Octubre 2801,
Montevideo, CP 11600

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información

Categorización actual: Nivel II (Activo)

Fecha de publicación: 05/10/2018
Última actualización SNI: 05/10/2018

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad Católica del Uruguay Dámaso Antonio Larrañaga/ UCUDAL - Facultad de Ingeniería y Tecnologías / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad Católica del Uruguay Dámaso Antonio Larrañaga / UCUDAL - Facultad de Ingeniería y Tecnologías / Sector Educación Superior/Privado

Dirección: Av. 8 de Octubre 2801 / 11600 / Montevideo , Montevideo , Uruguay

Teléfono: (598) 24872717 / 6425

Correo electrónico/Sitio Web: gustavo.vazquez@ucu.edu.uy <http://www.ucu.edu.uy/es/gustavo-vazquez>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Ciencias de la Computación (1998 - 2002)

Universidad Nacional del Sur , Argentina

Título de la disertación/tesis: Procesamiento paralelo distribuido heterogéneo aplicado a ingeniería de procesos

Tutor/es: Nélda Beatriz Brignole

Obtención del título: 2002

Sitio web de la disertación/tesis: [http://cs.uns.edu.ar/~gev/Tesis Doctoral Gustavo Vazquez - 2002.PDF](http://cs.uns.edu.ar/~gev/Tesis%20Doctoral%20Gustavo%20Vazquez%202002.PDF)

Institución financiadora: Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas , Argentina

Palabras Clave: Procesamiento Paralelo Ingeniería de procesos Optimización

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

GRADO

Licenciatura en Ciencias de la Computación (1991 - 1996)

Universidad Nacional del Sur , Argentina

Título de la disertación/tesis: Reducción de sistemas de ecuaciones diferenciales y lineales

Obtención del título: 1996

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Formación complementaria

CONCLUIDA

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Análisis y predicción de características complejas usando datos genómicos (01/2015 - 01/2015)

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

30 horas

Global Entrepreneurial Marketing (01/2014 - 01/2014)

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay

20 horas

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

Diseño de cursos universitarios para aprendizaje significativo (2015)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Universidad Católica del Uruguay, Uruguay

Idiomas

Inglés

Entiende muy bien / Habla bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Areas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Bioinformática

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Informática Química

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Computación /Aprendizaje automático

Actuación profesional

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PRIVADO - UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL URUGUAY DÁMASO ANTONIO LARRAÑAGA - URUGUAY

UCUDAL - Facultad de Ingeniería y Tecnologías

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (03/2016 - a la fecha)

Director del Departamento de Informática y Ci ,10 horas semanales

Otro (02/2014 - a la fecha)

Profesor Asociado - Grado 4 ,30 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Bioenergía Forestal (04/2014 - a la fecha)

Código: IAI_X_2011_1_2949 Área del Proyecto: Biotecnología El proyecto Bioenergía_Forestal apunta al desarrollo de tecnologías que soporten la gestión de plantaciones forestales para el suministro rentable y sostenible de biomasa destinada a producción de biocombustibles sólidos. Este tipo de plantaciones permitirían sustentar la instalación de nuevos negocios (producción de pellets dendroenergéticos y cogeneración electricidad-vapor) que serán gestionados por las empresas proponentes, previéndose su incorporación al paquete tecnológico que será utilizado en posteriores fases de escalamiento productivo. La innovación propuesta consiste en integrar, validar, e implantar a nivel productivo un sistema de gestión tecnológica intensivo en conocimiento que

combina herramientas bioinformáticas, ensayos biotecnológicos y composicionales a nivel de laboratorio y validaciones experimentales a nivel de campo, como respaldo al desarrollo de una cadena productiva de biocombustibles sólidos para exportación (en particular pellets para uso industrial) y mercado interno (generación de vapor y cogeneración vapor-electricidad). Existen tres áreas principales de aplicación comercial para la biomasa producida a partir de las plantaciones dendroenergéticas que serán establecidas con apoyo del sistema tecnológico propuesto: 1) producción de pellets de madera de alta densidad energética destinados al mercado europeo de generación de energía eléctrica, 2) abastecimiento logístico de biomasa con alto valor energético como fuente de energía más eficiente para diversas industrias, y 3) abastecimiento logístico de biomasa con alto valor energético para abastecer nuevas cogeneraciones vapor-electricidad a instalarse en el marco de desarrollo del sector de biocombustibles y energías renovables en Uruguay. El proyecto se considera de alto impacto por su potencial para contribuir al desarrollo del sector de energías renovables dentro de la matriz energética de Uruguay, impulsando un crecimiento de la base productiva para biomasa cultivada en forma sostenible, y favoreciendo el posicionamiento competitivo de los biocombustibles basados en plantaciones dendroenergéticas, como productos intensivos en conocimiento que agregan valor a cadenas productivas insertas dentro del marco internacional de la bioeconomía.

5 horas semanales

Universidad Católica del Uruguay, Facultad de Ingeniería y Tecnologías

Desarrollo

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Teyma SA, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo:

Palabras clave: Bioenergía Forestal Modelado Matemático Sistemas de Soporte de Decisión

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

DOCENCIA

Ingeniería en Informática (02/2014 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Investigación Operativa, 10 horas, Teórico-Práctico

Programación, 10 horas, Teórico-Práctico

SECTOR ORGANIZACIONES PRIVADAS SIN FINES DE LUCRO/SOCIEDADES CIENTÍFICO-TECNOLÓGICAS - INSTITUT PASTEUR DE MONTEVIDEO - URUGUAY

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Colaborador (03/2011 - a la fecha)

Investigador visitante - Colaborador, 1 hora semanal

Desde Marzo de 2011 (inicio de la primera visita al IPMon) me desempeño como colaborador del grupo de trabajo dirigido por el Dr. Hugo Naya de la Unidad de Bioinformática.

<http://www.pasteur.edu.uy/ubi>

Becario (03/2012 - 06/2012)

Investigador posdoctoral visitante, 40 horas semanales

Esta estada de investigador posdoctoral visitante fue financiada por el programa de Becas Externas Posdoctorales (Conicet-Argentina. Res. D 43 2 del 08/02/2012)

Becario (03/2011 - 08/2011)

Investigador posdoctoral visitante, 40 horas semanales

Esta estada de investigador posdoctoral visitante fue financiada por el programa de Becas Externas IPMON-CONICET (2011)

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Universidad Nacional del Sur

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (08/2005 - 02/2014)

Jefe de trabajos prácticos ,10 horas semanales / Dedicación total
Dedicación Exclusiva, área VI - Aplicaciones - Dto. de Ciencias e Ingeniería de la Computación (Universidad Nacional del Sur), asignatura MÉTODOS EN COMPUTACIÓN CIENTÍFICA (extensión SIMULACIÓN). Acceso al mismo por inscripción de títulos, antecedentes y oposición. Hasta 31 de Julio de 2013 (resolución CDCIC-N°108/08; cambio dedicación exclusiva resolución CDCIC-N°165/06).

Funcionario/Empleado (04/2005 - 12/2006)

Profesor interino ,10 horas semanales
Profesor interino asignatura SIMULACIÓN DE MODELOS ADMINISTRATIVOS Primer cuatrimestre 2006 - Designación directa CDCA 017/06 (extensión de funciones, por el término de 10 meses) y Primer cuatrimestre 2005 - Designación directa CDCA 488/04 (extensión de funciones, por el término de 4 meses). Departamento de Ciencias de la Administración. UNS. Bahía Blanca.

Funcionario/Empleado (03/2004 - 06/2006)

Profesor ,10 horas semanales
Profesor asignatura PROCESAMIENTO DE DATOS (Programa PEUZO - Universidad Provincial del Sudoeste organizado por Universidad Nacional del Sur) Primer cuatrimestre 2006 - Designación directa CDCIC-264/05. TALLER DE OPERACIÓN DE COMPUTADORAS PERSONALES (Programa PEUZO) Segundo cuatrimestre 2005 - Designación directa. INTRODUCCIÓN A LA OPERACIÓN DE COMPUTADORAS PERSONALES (Programa PEUZO) Primer cuatrimestre 2005 - Designación directa CDCIC-232/04. PROCESAMIENTO DE DATOS (Programa PEUZO) Primer cuatrimestre 2004 - Designación directa CDCIC-205/03. UNS. Bahía Blanca.

Funcionario/Empleado (08/1995 - 07/2005)

Ayudante de docencia ,10 horas semanales
Ayudante de Docencia categoría A. Asignaturas Computación Científica, Simulación, Sistemas Operativos. Universidad Nacional del Sur, Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación. Resoluciones CDCIC-N°024/04, CDCIC-N°009/05, CDCIC-N°051/03, CDCIC-N°105/04, CDCIC-N°198/03, CDCC-N°150/01, CDCC-N°039/99, MD-N°028/96, MD-N°208/95

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Métodos de Predicción Basados en Técnicas de Aprendizaje Automático para el Diseño de Modelos QSAR/QSPR en Informática Molecular (01/2012 - 12/2015)

PGI. Código del Proyecto: no asignado aún. En este proyecto se desarrollarán métodos basados en inteligencia computacional para mejorar el desempeño de los métodos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) en la predicción de propiedades. Para alcanzar este objetivo, las investigaciones se centrarán en el desarrollo de técnicas de feature selection (selección de atributos) para minimizar el uso de descriptores (y así aumentar la generalidad del método). También se desarrollarán técnicas de dominio de aplicación de modelos. Los casos de estudio se orientarán hacia diferentes problemas asociados a informática molecular (predicción de propiedades ADME-Tox, polímeros, mezclas de materiales, etc).

20 horas semanales

Universidad Nacional del Sur

Desarrollo

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: PALOMBA D , DIAZ M.L. , SOTO A.J. , PONZONI I. , CECCHINI R. , MARTINEZ M.J.

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

PGI 24/N019 y 24/N026: Aplicaciones de Computación Científica (01/2006 - 12/2012)

Proyectos continuados Códigos PGI 24/N019 (2006-2009) y PGI 24/N026 (2009-2012). El propósito general de esta línea de investigación es el desarrollo de nuevos métodos computacionales para resolver eficientemente problemas complejos de predicción de propiedades, simulación e instrumentación de plantas que surgen en Ingeniería de Procesos Industriales. Se realizará la reingeniería de nuestro Sistema de Soporte de Decisión para diseño de instrumentación. Se trabajará en la estandarización de módulos de simulación de equipos industriales y predicción de propiedades según las especificaciones CAPE-Open. Con respecto al área de bioinformática, se aplicarán técnicas de aprendizaje automático (incluyendo programación genética y redes neuronales) y computación científica para la predicción de parámetros ADME-Tox

5 horas semanales
Universidad Nacional del Sur , Departamento de Ciencias de la Computación

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:4

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: DIAZ M.L. , PONZONI I. , CECCHINI R. , CARBALLIDO J. , BRIGNOLE N.B. (Responsable) , GALLO C. , OLIVERA A.C.

Palabras clave: Modelamiento Computación Científica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

PGI 24/ZN16: Diseño de métodos basados en inteligencia computacional para la predicción in-silico de propiedades ADME-Tox (01/2008 - 12/2011)

Código de Proyecto: PGI 24/ZN16 En este proyecto se desarrollan métodos basados en inteligencia computacional para mejorar el desempeño de los métodos QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) en la predicción de propiedades. Para alcanzar este objetivo, las investigaciones se centran en el desarrollo de técnicas de feature selection (selección de atributos) y clustering (agrupamiento de datos) tanto para minimizar el uso de descriptores (y así aumentar la generalidad del método) como para desarrollar en forma sistemática modelos de predicción específicos para familias de datos. Los casos de estudio se orientan hacia problemas de química computacional, especialmente la predicción de propiedades ADME-Tox.

20 horas semanales

Universidad Nacional del Sur

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: PALOMBA D , SOTO A.J. , PONZONI I. , CECCHINI R.

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

PGI 24/ZN15: Técnicas de Aprendizaje Automático y Computación Evolutiva aplicadas al Diseño de Modelos Predictivos en Bioinformática (01/2008 - 12/2011)

Código de Proyecto: 24/ZN15 Este proyecto tiene por principal objetivo desarrollar modelos predictivos, basados en el uso de técnicas de computación evolutiva y aprendizaje automático, para adquisición de conocimientos en el ámbito de Bioinformática. Al respecto, la motivación general del proyecto no apunta únicamente al diseño de métodos de inferencia, sino también al desarrollo de una arquitectura de software integral que facilite y guíe las distintas etapas vinculadas al modelado y simulación in silico de procesos biológicos y fisicoquímicos, mediante un tratamiento sistémico asistido por computadora.

10 horas semanales

Universidad Nacional del Sur , Departamento de Ciencias de la Computación

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: PONZONI I. (Responsable), CECCHINI R., CARBALLIDO J., GALLO C.
Palabras clave: Bioinformática
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

DOCENCIA

Licenciatura en Ciencias de la Computación (08/2005 - 02/2014)

Grado
Responsable
Asignaturas:
Simulación, 10 horas, Teórico-Práctico
Métodos en Computación Científica, 10 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Licenciatura en Administración de Empresas (04/2005 - 12/2006)

Grado

Asignaturas:
Simulación de Modelos Administrativos, 4 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Economía y Negocios / Negocios y Administración / Administración de Empresas

Tecnicaturas de la Universidad Provincial del Sudoeste (UPSOU) (03/2004 - 06/2006)

Técnico nivel superior
Responsable
Asignaturas:
Procesamiento de datos, 10 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

PASANTÍAS

(12/1995 - 04/1996)

Universidad Nacional del Sur, Dirección General de Economía y Finanzas
30 horas semanales
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

GESTIÓN ACADÉMICA

Miembro de la comisión curricular de la carrera Técnico Superior en Administración y Gestión de Recursos para Instituciones Universitarias (01/2011 - a la fecha)

Universidad Nacional del Sur, Comisión Curricular
Participación en consejos y comisiones
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Miembro Comisión Curricular de la carrera de Ingeniería en Sistemas de Computación (06/2003 - a la fecha)

Universidad Nacional del Sur
Participación en consejos y comisiones
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (05/2005 - 02/2014)

Investigador Adjunto ,45 horas semanales / Dedicación total
La carga horaria semanal (45 hs) incluye como parte de las actividades la función docente (6 hs presenciales en aula o consultas adicionales, total 10hs semanales), formación de RRHH (8 hs) y actividad de gestión (1 h). La actividad de formación de RRHH se comparte con las tareas de investigación.

Becario (08/2002 - 06/2005)

Becario Posdoctoral CONICET ,45 horas semanales / Dedicación total

Becario (08/1998 - 03/2002)

Becario de formación de posgrado Doctoral ,45 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo de métodos computacionales para bioinformática y química informática (01/2005 - a la fecha)

30 horas semanales
Conicet, Universidad Nacional del Sur , Coordinador o Responsable
Equipo:
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Informática Molecular

Procesamiento Paralelo aplicado a problemas de Ingeniería Química (04/1998 - 12/2004)

45 horas semanales
Conicet, Planta Piloto de Ingeniería Química , Coordinador o Responsable
Equipo:
Palabras clave: Observability Analysis Procesamiento Paralelo Optimización
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

PIP 11220090100322 - Desarrollo de Técnicas de Computación Evolutiva Multiobjetivo y Aprendizaje Automático orientadas al Diseño de Modelos Predictivos en Bioinformática. Inferencia de Redes Regulatorias de Genes y Predicción de Propiedades ADMET (01/2010 - 12/2012)

PIP 11220090100322 Las metas de este proyecto están orientadas a desarrollar modelos predictivos para adquisición de conocimientos en el ámbito de Bioinformática. En particular, se planifica desarrollar metodologías para abordar de manera integral dos aplicaciones de gran relevancia: la inferencia de redes regulatorias de genes (GRNs), y la predicción de propiedades ADMET para el diseño in-silico de medicamentos. El primer problema consiste en reconstruir la estructura de GRNs mediante algoritmos de inferencia. La meta es lograr deducir asociaciones regulatorias entre genes a partir de datos de expresión genética obtenidos con microarrays. Esta tarea presenta varios aspectos desafiantes. Una de ellas está dada por las dificultades existentes para descubrir relaciones de regulación con efecto diferido en el tiempo. Este es un problema abierto para la comunidad de Bioinformática, el cual empezó a ser abordado recientemente. Por otra parte, una vez reconstruida la dinámica de una GRN, es necesario proveer mecanismos de validación que evalúen la consistencia del sistema temporal obtenido por la inferencia. Estos aspectos centrales, inferencia de relaciones de regulación diferidas en el tiempo y verificación del comportamiento dinámico discreto de las redes, son los que se busca atacar con la concreción de

este proyecto. Para la inferencia se propone usar técnicas de aprendizaje automático y computación evolutiva, mientras que para el segundo, se propone el uso de técnicas de verificación formal de sistemas. La segunda aplicación también consiste en diseñar algoritmos de predicción mediante técnicas de inteligencia computacional. En particular, apunta a desarrollar nuevos métodos QSAR para predicción de propiedades fisicoquímicas que mejoren el desempeño de las técnicas existentes. En la actualidad este problema presenta varias aristas, lo cual complejiza su resolución. En tal sentido, este proyecto apunta a mejorar el proceso de entrenamiento predictivo, mediante la construcción de modelos con mejores propiedades de generalización. En particular, nuestra propuesta consiste en diseñar técnicas de selección de atributos, para minimizar el uso de descriptores y así aumentar la generalidad del método, y técnicas de agrupamiento de compuestos, para desarrollar sistemáticamente modelos de predicción específicos para familias de datos.

20 horas semanales

Conicet, UNS

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: PONZONI I. (Responsable), CARBALLIDO J. (Responsable)

Palabras clave: Molecular Modeling Chemoinformatics Bioinformatica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Proyecto de Cooperación Internacional Alemania-Argentina AL0811: Modelamiento adaptivo de relaciones estructura-actividad e identificación de marcadores biológicos y químicos a partir de datos high-throughput mediante métodos de inteligencia computacional (02/2009 - 01/2011)

Proyecto de Cooperación Internacional Bilateral Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF-Ministerio Federal de Educación e Investigación) de Alemania y Ministerio de Ciencia y Tecnología de Argentina (MinCyT) Código: AL0811 Directores: Dr. Marc Strickert y Dr. Gustavo Vazquez. Environmental and biomedical sciences share major properties that push utilization of state-of-the-art analysis tools from computational intelligence and machine learning research. Common properties are large numbers of data attributes, attribute correlations caused by spatio-temporal dependencies, and the presence of uncertainty induced by noise and missing values. We plan to combine the learning metrics principle with genetic algorithms for a uniform approach to retrieve relevant subsets of data attributes, and to minimalistic models of associations between different data sets. This way, robust mappings of physico-chemical substance properties to octanol-water partitioning coefficients shall be generated, which are essential building blocks in models of compound transport, e.g. PCB, in the environment. Using the same computational framework, modelling and understanding metabolic processes shall be enhanced by mapping gene- and protein-expression levels to phenotypic properties - a first essential step towards systems biology of stress tolerance in crop plants. The joint development of the new computational methods will allow addressing these and upcoming analytical challenges.

10 horas semanales

BMBF / MinCyT

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2

Financiación:

Institución del exterior, Cooperación

Equipo: SOTO A.J., STRICKERT M. (Responsable), PONZONI I., SEIFERT M., MOCK H.P., FERNANDEZ E., SREENIVASULU N.

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

PICT 11-12778: Re-Ingeniería de un sistema de soporte de decisión para localización estratégica de sensores en plantas industriales (11/2005 - 11/2007)

Código del proyecto: 11-12778 Métodos para el desarrollo de un sistema de soporte de decisión (DSS) aplicable al diseño de instrumentación

10 horas semanales

Conicet, Planta Piloto de Ingeniería Química

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:2
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: PONZONI I., CECCHINI R., CARBALLIDO J., BRIGNOLE N.B. (Responsable)
Palabras clave: Modelamiento Diseño de Instrumentación
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

PIP 5930: Métodos Computacionales para Predicción de Propiedades, Simulación e Instrumentación de Procesos Industriales (09/2005 - 09/2007)

PIP 5930 - Proyecto de Investigación Plurianual (CONICET)
10 horas semanales
Conicet, Planta Piloto de Ingeniería Química
Desarrollo
Integrante del Equipo
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Doctorado:1
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: PONZONI I., CARBALLIDO J., BRIGNOLE N.B. (Responsable)

Subsidio Planes de Trabajo 2004 (01/2005 - 12/2005)

Subsidio Planes de Trabajo para Investigadores recién ingresados a la Carrera de Investigador. Otorgado por el Directorio del CONICET, bajo Resolución N° 1290 (26/11/2004). Rendición final aprobada.
30 horas semanales
Conicet
Investigación
Coordinador o Responsable
Concluido
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo:
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/ENSEÑANZA SUPERIOR - CUBA

Centro de Química Farmacéutica

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Profesor visitante (02/2007 - 06/2007)

Investigador Visitante ,45 horas semanales / Dedicación total
Tipo: Estadía como Investigador Visitante. Centro de Química Farmacéutica, Ciudad de la Habana, Cuba. Director: Dr. Eladio Jorge Pardillo-Fontdevila, Jefe del Departamento de Bioinformática.

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 6 horas
Carga horaria de investigación: 30 horas
Carga horaria de formación RRHH: 8 horas
Carga horaria de extensión: Sin horas
Carga horaria de gestión: 1 hora

Producción científica/tecnológica

Una de nuestras líneas de investigación consiste en determinar cuáles son los parámetros o descriptores más relevantes de una entidad (química o biológica) para una propiedad de interés. Hemos abordado este problema mediante el uso novedoso de algoritmos genéticos multiobjetivo, donde uno de los objetivos corresponde al error de predicción del método y el otro es el número de descriptores seleccionados. Claramente estos dos objetivos son contrapuestos u ortogonales. Sin embargo la optimización simultánea de ambos permite la obtención de modelos con gran capacidad

predictiva y baja cardinalidad de descriptores, lo cual define modelos más robustos y confiables. Otra propuesta desarrollada consistió en realizar la selección de esos descriptores como parte del mismo proceso de construcción del modelo de predicción (o clasificación) y se denominó Correlative Matrix Mapping (CMM). El objetivo es encontrar un subespacio de las variables del problema, de manera que las distancias de a pares en este espacio este en máxima correlación con las distancias en el espacio de la propiedad de interés.

Otra de las líneas de investigación en las que se trabaja es la identificación del dominio de aplicación de modelos desarrollados en química computacional y bioinformática. Una de las propuestas consistió en categorizar la calidad de cada predicción mediante la identificación de problemas de interpolación, extrapolación, etc. La ventaja radica en que no se requiere del conocimiento de la probabilidad de distribución de los datos. Una segunda propuesta ha sido determinar el porcentaje de exactitud de la predicción para cada elemento del espacio muestral, lo cual puede modelarse utilizando un clasificador Gaussiano-Bayesiano (BC). Aunque la hipótesis de que los datos siguen una distribución normal no es sencilla de cumplir en espacios de grandes dimensiones mostramos la utilización de la metodología CMM previamente reportada para proyectar los datos a un espacio de menor dimensión donde esta condición se verifica.

Otra área de trabajo complementaria a las líneas de investigación descritas anteriormente es el uso de la inteligencia computacional para el modelamiento de parámetros físico-químicos en aplicaciones de química informática. En esta área hemos trabajado en la predicción de las denominadas propiedades ADME-Tox de compuestos químicos que son candidatos a convertirse en drogas. Nuestros principales aportes ha sido el modelamiento de las propiedades partición octanol-agua, penetración de la barrera hemato-encefálica y absorción intestinal humana (HIA). También en el área de química informática aplicada al desarrollo de polímeros hemos propuesto una novedosa estrategia para la predicción de la temperatura de transición vítrea (Tg). El enfoque consistió en definir estructuralmente los fragmentos correspondientes a la cadena principal y a la cadena lateral, en base a la unidad repetitiva media de una estructura trimérica.

En cuanto al modelamiento en el área de informática se ha trabajado en el uso de técnicas de aprendizaje automático para determinar patogenicidad de bacterias en humanos. Se propuso la identificación de genes relevantes utilizando un método de selección de atributos para luego establecer las relaciones subyacentes entre genes (grupos de ortólogos) y patogenicidad de los organismos.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Feature Learning applied to the Estimation of Tensile Strength at Break in Polymeric Material Design (Completo, 2016)

CRAVERO, F. , MARTINEZ M.J. , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.F. , PONZONI I.

Journal of integrative bioinformatics, v.: 13 2 , p.:1 - 15, 2016

Palabras clave: Cheminformatics Machine Learning Visual Analytics QSPR Polymeric Materials

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Aprendizaje automático

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Alemania

ISSN: 16134516

DOI: [10.2390/biecoll-jib-2016-286](https://doi.org/10.2390/biecoll-jib-2016-286)

<http://journal.imbio.de/article.php?aid=286>

Scopus'

Visual Analytics in Cheminformatics: User-Supervised Descriptor Selection for QSAR Methods (Completo, 2015)

MARTINEZ M.J. , PONZONI I. , DIAZ M.F. , VAZQUEZ G.E. , SOTO A.J.

Journal of Cheminformatics, v.: 7 39 , p.:1 - 17, 2015

Palabras clave: QSAR Cheminformatics Feature Selection Visual Analytics

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 17582946

DOI: [10.1186/s13321-015-0092-4](https://doi.org/10.1186/s13321-015-0092-4)

<http://www.jcheminf.com/content/7/1/39>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Parallel Optimization by Means of a Spectral-Projected-Gradient Approach (Completo, 2015)

ARDENGI J.I. , VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.
Computers and Chemical Engineering, en prensa, 2015
Palabras clave: Parallel Processing
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00981354
DOI: [10.1016/j.compchemeng.2015.04.010](https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.04.010)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135415001118>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Prediction of Elongation at Break for Linear Polymers (Completo, 2014)

PALOMBA D , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.L.
Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, v.: 139 p.:121 - 131, 2014
Palabras clave: QSAR Molecular Modelling Mechanical Properties Polymers Elongation at Break
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería de los Materiales / Ingeniería de los Materiales /
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Amsterdam
ISSN: 01697439
DOI: [10.1016/j.chemolab.2014.09.009](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2014.09.009)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169743914001981>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Novel Descriptors from Main and Side Chains of high-molecular-weight Polymers applied to Prediction of Glass Transition Temperatures (Completo, 2012)

PALOMBA D , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.L.
Journal of molecular graphics & modelling, v.: 38 p.:137 - 147, 2012
Palabras clave: Molecular Modeling Structure-property Relations Glass transition temperature
Molecular Informatics Machine Learning
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Informática Molecular
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Amsterdam
ISSN: 10933263
DOI: [10.1016/j.jmgm.2012.04.006](https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2012.04.006)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1093326312000435>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Reduced set of virulence genes allows high accuracy prediction of bacterial pathogenicity in humans (Completo, 2012)

IRAOLA G. , VAZQUEZ G.E. , SPANGENBERG L. , NAYA H.
PLoS ONE, v.: 7 8 , 2012
Palabras clave: Computational Biology Pathogenicity Prediction Machine Learning Bioinformatics
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: United States
ISSN: 19326203
DOI: [10.1371/journal.pone.0042144](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0042144)
plosone.org/article/info:doi/10.1371/journal.pone.0042144

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

QSPR Models for Predicting Log Pliver Values for Volatile Organic Compounds Combining Statistical Methods and Domain Knowledge (Completo, 2012)

PALOMBA D., MARTINEZ M.J., PONZONI I., DIAZ M.L., VAZQUEZ G.E., SOTO A.J.
Molecules, v.: 17 12, 2012
Palabras clave: Chemoinformatics Molecular Informatics
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Basilea, Suiza
ISSN: 14203049
DOI: [10.3390/molecules171214937](https://doi.org/10.3390/molecules171214937)
<http://www.mdpi.com/1420-3049/17/12/14937>
Scopus' WEB OF SCIENCE"

Subspace Mapping of Noisy Text Documents (Completo, 2011)

SOTO A.J., VAZQUEZ G.E., STRICKERT M., MILOS E.
Lecture Notes in Computer Science, v.: 6657 p.:377 - 383, 2011
Palabras clave: Text Mining Subspace Mapping Machine Learning
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Berlin
ISSN: 03029743
DOI: [10.1007/978-3-642-21043-3_45](https://doi.org/10.1007/978-3-642-21043-3_45)
http://rd.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-21043-3_45
Scopus'

Target-driven subspace mapping methods and their applicability domain estimation (Completo, 2011)

SOTO A.J., VAZQUEZ G.E., STRICKERT M., PONZONI I.
Molecular Informatics, v.: 30 9, p.:779 - 789, 2011
Palabras clave: Chemoinformatics QSAR Applicability Domain Property Prediction Machine Learning
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Informática Molecular
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Reino Unido
ISSN: 18681751
DOI: [10.1002/minf.201100053](https://doi.org/10.1002/minf.201100053)
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/minf.201100053/abstract>
(La revista "Molecular Informatics" se encuentra indexada en ISI-Thompson. Impact Factor año 2011: 2.39)
Scopus'

Adaptive matrix metrics for molecular descriptor assessment in QSPR classification (Resumen, 2010)

SOTO A.J., STRICKERT M., VAZQUEZ G.E.
Journal of Cheminformatics, v.: 2 s1, 2010
Palabras clave: QSAR Adaptive matrix metrics Cheminformatics
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Informática Molecular
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 17582946
DOI: [10.1186/1758-2946-2-S1-P47](https://doi.org/10.1186/1758-2946-2-S1-P47)
<http://www.jcheminf.com/content/2/S1/P47>
Journal of Cheminformatics se encuentra indexada en ISI-Thompson a partir del año 2011. Factor de impacto: 3.419
Scopus' WEB OF SCIENCE"

Segregating Confident Predictions of Chemical s Properties for Virtual Screening of Drugs (Completo, 2009)

SOTO A.J., PONZONI I., VAZQUEZ G.E.

Lecture Notes in Computer Science, v.: 5518 p.:1005 - 1012, 2009

Palabras clave: QSAR Property Prediction Cheminformatics Molecular Informatics Machine Learning

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Informática Molecular

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Berlin

ISSN: 03029743

DOI: [10.1007/978-3-642-02481-8_153](https://doi.org/10.1007/978-3-642-02481-8_153)

<http://www.springerlink.com/content/n70138554p57111v4/>

Scopus'

Multi-Objective Feature Selection in QSAR Using a Machine Learning Approach (Completo, 2009)

SOTO A.J. , CECCHINI R. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I.

QSAR and Combinatorial Science, v.: 28 11 , p.:1509 - 1523, 2009

Palabras clave: QSAR Cheminformatics Properties Prediction Genetic Algorithms Machine Learning Feature Selection

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Informática Molecular

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Weinheim

ISSN: 1611020X

DOI: [10.1002/qsar.200960053](https://doi.org/10.1002/qsar.200960053)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qsar.200960053/abstract>

La revista Molecular Informatics reemplazó a QSAR & Combinatorial Science en 2010. Este artículo pertenece a la revista QSAR & Combinatorial Science, indexada en ISI-Thompson con factor de impacto 3.027 (2009). Por más información sobre este cambio: <http://www.wiley-vch.de/publish/en/journals/alphabeticalIndex/2022/>

Scopus' WEB OF SCIENCE"

An Evolutionary Approach for Feature Selection applied to ADMET Prediction (Completo, 2008)

SOTO A.J. , CECCHINI R. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I.

Inteligencia artificial, v.: 37 p.:55 - 63, 2008

Palabras clave: QSAR Cheminformatics Properties Prediction Genetic Algorithms Feature Selection

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Valencia

ISSN: 11373601

<http://redalyc.uaemex.mx/pdf/925/92503707.pdf>

Scopus' *latindex*

Diagramas de Ciclos de Actividades y su uso en la Simulación de Sistemas de Eventos Discretos (Completo, 2007)

SOTO A.J. , PONZONI I. , VAZQUEZ G.E.

Revista de la Escuela de Perfeccionamiento en Investigación Operativa, v.: 29 p.:145 - 154, 2007

Palabras clave: Simulación de Eventos Discretos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Argentina

ISSN: 03297322

latindex

Using Computational Intelligence and Parallelism to solve an Industrial Design Problem (Completo, 2006)

ASTEASUAIN F., CARBALLIDO J., VAZQUEZ G.E., PONZONI I.

Lecture Notes in Computer Science, v.: 4140 p.:188 - 197, 2006

Palabras clave: Genetic Algorithms Parallel Processing Observability Analysis

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Berlin

ISSN: 03029743

DOI: [10.1007/11874850_23](https://doi.org/10.1007/11874850_23)

http://rd.springer.com/chapter/10.1007/11874850_23

Scopus' WEB OF SCIENCE"

The Software Architecture of a Decision Support System for Process Plant Instrumentation (Completo, 2003)

VAZQUEZ G.E., FERRARO S., CARBALLIDO J., PONZONI I., SANCHEZ M., BRIGNOLE N.B.

WSEAS Transactions on Computers, v.: 4 2 , p.:1074 - 1078, 2003

Palabras clave: Observability Analysis Modeling

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Grecia

ISSN: 11092750

Optimization Of Industrial Problems Using Parallel Processing Under Distributed Environments (Completo, 2002)

VAZQUEZ G.E., DIAZ S., BRIGNOLE N.B., BANDONI J.A.

Chemical Engineering Communications, v.: 189 5 , p.:642 - 656, 2002

Palabras clave: Parallel Processing Chemical Engineering Optimization

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Londres

ISSN: 00986445

DOI: [10.1080/00986440211739](https://doi.org/10.1080/00986440211739)

<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00986440211739#preview>

Scopus' WEB OF SCIENCE"

Thesis Overview: Heterogeneous Parallel-Distributed Processing applied to Process Engineering (Resumen, 2002)

VAZQUEZ G.E., BRIGNOLE N.B.

Journal Of Computer Science And Technology, v.: 2 7 , p.:49 - 50, 2002

Palabras clave: Parallel Processing

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: La Plata

ISSN: 10009000

Este trabajo pertenece a la revista Journal of Computer Science and Technology ISSN 16666046.

<http://www.latindex.org/buscador/ficRev.html?opcion=1&folio=12515> Esta publicación consiste en un breve resumen de la tesis doctoral.

Scopus' WEB OF SCIENCE"

Parallel NLP Strategies using PVM on Heterogeneous Distributed Environments (Completo, 1999)

VAZQUEZ G.E., BRIGNOLE N.B.

Lecture Notes in Computer Science, v.: 1697 p.:533 - 540, 1999

Palabras clave: Parallel Processing Optimization

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Berlin

ISSN: 03029743

DOI: [10.1007/3-540-48158-3_66](https://doi.org/10.1007/3-540-48158-3_66)
<http://www.springerlink.com/content/2udc9ywdrpmn1u79/>
WEB OF SCIENCE™

NO ARBITRADOS

A Wrapper-Based Feature Selection Method for ADMET Prediction Using Evolutionary Computing (Completo, 2008)

SOTO A.J., CECCHINI R., VAZQUEZ G.E., PONZONI I.

Lecture Notes in Computer Science, v.: 4973 p.:188 - 199, 2008
Palabras clave: QSAR Cheminformatics Properties Prediction Genetic Algorithms
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Informática Molecular
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Berlin
ISSN: 03029743
DOI: [10.1007/978-3-540-78757-0_17](https://doi.org/10.1007/978-3-540-78757-0_17)
<http://www.springerlink.com/content/84vu332476834143/>

ModGen: A Model Generator for Instrumentation Analysis (Completo, 2001)

VAZQUEZ G.E., PONZONI I., SANCHEZ M., BRIGNOLE N.B.

Advances in Engineering Software, v.: 32 1, p.:37 - 48, 2001
Palabras clave: Observability Analysis Chemical Process Engineering
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Edimburgo
ISSN: 09659978
DOI: [10.1016/S0965-9978\(00\)00073-9](https://doi.org/10.1016/S0965-9978(00)00073-9)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0965997800000739>

Parallel Observability Analysis on Networks of Workstations (Completo, 2001)

PONZONI I., VAZQUEZ G.E., SANCHEZ M., BRIGNOLE N.B.

Computers and Chemical Engineering, v.: 25 7-8, p.:997 - 1002, 2001
Palabras clave: Parallel Processing Observability Analysis Chemical Process Engineering
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: West Lafayette
ISSN: 00981354
DOI: [10.1016/S0098-1354\(01\)00625-1](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(01)00625-1)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135401006251>

LIBROS

Advances in Intelligent Systems and Computing (Participación , 2016)

CRAVERO, F. , MARTINEZ, M. J. , VAZQUEZ G.E. , DIAZ, M. F. , PONZONI, I.
Número de volúmenes: 477
Edición: ,
Editorial: ,
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.1007/978-3-319-40126-3_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-40126-3_1)
Referado
Palabras clave: QSAR
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Cheminformatics

Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN: 21945357
Financiación/Cooperación:
Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Remuneración, Uruguay

Capítulos:
Intelligent Systems for Predictive Modelling in Cheminformatics: QSPR Models for Material Design
Using Machine Learning and Visual Analytics Tools
Organizadores:
Página inicial 3, Página final 11

Computer Aided Chemical Engineering (Participación , 2014)

ARDENGHI J.I. , VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.
Número de volúmenes: 34
Edición: ,
Editorial: Elsevier,
DOI: [10.1016/B978-0-444-63433-7.50097-3](https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63433-7.50097-3)
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Computación /
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN: 9780444634337
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444634337500973>

Capítulos:
A Parallel Spectral-Projected-Gradient Method for Optimization in Process Engineering
Organizadores:
Página inicial 675, Página final 680

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Predicción del módulo elástico para polímeros lineales aplicando analítica visual y aprendizaje automático (2015)

Completo
MARTINEZ M.J. , CRAVERO, F. , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.F. , PONZONI I.

Evento: Nacional
Descripción: Simposio Argentino de Polímeros (SAP 2015)
Ciudad: Santa Fe
Año del evento: 2015
Palabras clave: QSAR Machine Learning
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Computación / Cheminformatics
Medio de divulgación: Internet

Desarrollo de modelos QSPR asistido por técnicas de analítica visual para la predicción de propiedades mecánicas de polímeros lineales (2015)

Completo
MARTINEZ M.J. , CRAVERO, F. , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.F. , PONZONI I.

Evento: Nacional
Descripción: Simposio Argentino de Polímeros (SAP 2015)
Ciudad: Santa Fe
Año del evento: 2015
Palabras clave: QSAR Machine Learning
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Computación / Cheminformatics
Medio de divulgación: Internet

Modelado QSPR de Propiedades Mecánicas de Materiales Poliméricos empleando Técnicas de Reducción de Variables basadas en Algoritmos de Aprendizaje Automático (2015)

Completo
CRAVERO, F. , DIAZ M.F. , PONZONI I. , VAZQUEZ G.E.

Evento: Nacional

Descripción: CAIQ2015 Congreso Argentino de Ingeniería Química
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 2015
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Cheminformatics
Medio de divulgación: Internet

Prediction of tensile strength at break for linear polymers applied to new materials development (2014)

Completo
PALOMBA D , CRAVERO F. , VAZQUEZ G.E. , DÍAZ M.F.

Evento: Internacional
Descripción: Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET / IBEROMAT 2014
Ciudad: Santa Fe - Argentina
Año del evento: 2014
Publicación arbitrada
Palabras clave: QSAR Tensile Strength Mechanical Properties Polymers
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
<http://www.unl.edu.ar/materiales2014/>

Prediction of tensile modulus for linear polymers applied to new materials development (2014)

Completo
PALOMBA D , CRAVERO F. , VAZQUEZ G.E. , DÍAZ M.F.

Evento: Internacional
Descripción: Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales SAM-CONAMET / IBEROMAT 2014
Ciudad: Santa Fe - Argentina
Año del evento: 2014
Publicación arbitrada
Palabras clave: QSAR Mechanical Properties Polymers Tensile Modulus
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
<http://www.unl.edu.ar/materiales2014/>

Predicción de propiedades mecánicas del ensayo de tensión para polímeros lineales. Modelado QSPR con inteligencia computacional y análisis visual interactivo (2014)

Completo
PALOMBA D , MARTINEZ M.J. , CRAVERO, F. , SOTO A.J. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I. , DIAZ M.L.

Evento: Nacional
Descripción: 30° Congreso Argentino de Química
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 2014
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería de los Materiales / Ingeniería de los Materiales /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Interactive Visual Analysis Methodology for Improving Descriptor Selection in QSPR: First Steps (2014)

Resumen expandido
MARTINEZ M.J. , CRAVERO F. , VAZQUEZ G.E. , DÍAZ M.F. , SOTO A. , PONZONI I.

Evento: Nacional
Descripción: V Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional - 2014
Ciudad: Bariloche, Argentina
Año del evento: 2014

Publicación arbitrada
Palabras clave: Bioinformatica
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Internet

Progress on Prediction of Mechanical Properties of Linear Polymers (2013)

Completo
PALOMBA D , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.L.

Evento: Nacional
Descripción: X Simposio Argentino de Polímeros (SAP 2013)
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 2013
Anales/Proceedings: Proceedings SAP 2013
Palabras clave: Inteligencia Computacional Predicción de propiedades Ciencias de los Materiales
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

Importance of developing new descriptors in QSAR/QSPR (2013)

Resumen expandido
PALOMBA D , VAZQUEZ G.E. , DÍAZ M.F.

Evento: Internacional
Descripción: 4ta. Conferencia Internacional de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática (SolBio)
Ciudad: Rosario
Año del evento: 2013
Anales/Proceedings: Proceedings Conferencia Internacional de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática (SolBio)
Palabras clave: QSAR Modelado Matemático
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

Confidence Assessment of Candidate Drug Property Predictions by Subspace Mapping Methods (2012)

Completo
SOTO A.J. , VAZQUEZ G.E. , STRICKERT M. , PONZONI I.

Evento: Internacional
Descripción: ISCB Latin America 2012 Conference on Bioinformatics
Ciudad: Santiago de Chile
Año del evento: 2012
Anales/Proceedings: ISCB Latin America 2012 Conference
Publicación arbitrada
Editorial: ISCB
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

Shedding light into bacterial pathogenicity prediction: a machine learning approach (2012)

Resumen
IRAOLA G. , VAZQUEZ G.E. , SPANGENBERG L. , NAYA H.

Evento: Internacional
Descripción: ISCB Latin America 2012 Conference on Bioinformatics
Ciudad: Santiago de Chile
Año del evento: 2012
Anales/Proceedings: ISCB Latin America 2012 Conference
Publicación arbitrada

Editorial: ISCB
Palabras clave: Biología Computacional Patogenicidad
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

About using new descriptors in cheminformatics: Application for predicting the glass transition temperature of high molecular weight polymers (2011)

Resumen
PALOMBA D , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.L.

Evento: Nacional
Descripción: 2do Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional 2011
Ciudad: Córdoba, Argentina
Año del evento: 2011
Anales/Proceedings: Proceedings 2do Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional 2011
Publicación arbitrada
Editorial: A2B2C (Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional)
Ciudad: Córdoba, Argentina
Palabras clave: Cheminformatics Properties Prediction Aprendizaje automático
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

Predicción de Temperatura de Transición Vítrea de Polímeros de Alto Peso Molecular. Nuevo Enfoque en la Generación de Descriptores (2011)

Completo
PALOMBA D , VAZQUEZ G.E. , DIAZ M.L.

Evento: Nacional
Descripción: IX Simposio Argentino de Polímeros (SAP2011)
Ciudad: Bahía Blanca, Argentina
Año del evento: 2011
Anales/Proceedings: Proceedings IX Simposio Argentino de Polímeros (SAP2011)
Publicación arbitrada
Editorial: SAP2011
Palabras clave: Property Prediction Cheminformatics
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

Adaptive matrix distances aiming at optimum regression subspaces (2010)

Completo
STRICKERT M. , SOTO A.J. , VAZQUEZ G.E.

Evento: Internacional
Descripción: European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning
Ciudad: Bruges, Bélgica
Año del evento: 2010
Anales/Proceedings: Proceedings ESSAN 2010
Publicación arbitrada
Ciudad: Bélgica
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

A mapping method for linking chemical compounds to biological and physicochemical properties in drug discovery (2010)

Resumen
SOTO A.J. , STRICKERT M. , VAZQUEZ G.E.

Evento: Internacional
Descripción: ISCB - International Society for Computational Biology - Latin America Conference 2010
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2010
Anales/Proceedings: Proceedings ISCB-LA 2010
Publicación arbitrada
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

A new method for multi-objective selection of molecular descriptors for QSAR/QSPR (2010)

Resumen
SOTO A.J., CECCHINI R., VAZQUEZ G.E., PONZONI I.

Evento: Internacional
Descripción: ISCB - International Society for Computational Biology - Latin America Conference 2010
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2010
Anales/Proceedings: Proceedings ISCB-LA 2010
Publicación arbitrada
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

Identifying the Applicability Domain of QSPR Models using Machine Learning (2010)

Completo
SOTO A.J., PONZONI I., VAZQUEZ G.E.

Evento: Internacional
Descripción: The 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010
Ciudad: Chillán, Chile
Año del evento: 2010
Anales/Proceedings: Proceedings SOIBIO 2010
Publicación arbitrada
Ciudad: Chillán, Chile
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

Adaptive Visualization of Text Documents Incorporating Domain Knowledge (2010)

Completo
SOTO A.J., STRICKERT M., VAZQUEZ G.E., MILOS E.

Evento: Internacional
Descripción: Neural Information Processing Systems (NIPS)
Ciudad: Whistler, Canadá
Año del evento: 2010
Anales/Proceedings: Proceedings NIPS 2010
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Towards matrix-based selection of feature pairs for efficient ADMET prediction (2009)

Completo
STRICKERT M., SOTO A.J., KEILWAGEN J., VAZQUEZ G.E.

Evento: Nacional
Descripción: Argentine Symposium on Artificial Intelligence (ASAI 2009)
Ciudad: Mar del Plata, Argentina
Año del evento: 2009
Anales/Proceedings: Proceedings ASAI 2009
Publicación arbitrada
Editorial: Sociedad Argentina de Investigación Operativa (SADIO)
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

Adaptive matrix metrics for molecular descriptor assessment in QSPR classification (2009)

Completo
SOTO A.J. , STRICKERT M. , VAZQUEZ G.E.

Evento: Nacional
Descripción: 5th German Conference on Chemoinformatics
Ciudad: Goslar, Alemania
Año del evento: 2009
Anales/Proceedings: Proceedings 5th German Conference on Chemoinformatics 2009
Publicación arbitrada
Ciudad: Goslar, Alemania
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

An Evolutionary Approach for Multi-Objective Feature Selection in ADMET Prediction (2008)

Completo
SOTO A.J. , CECCHINI R. , PALOMBA D. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I.

Evento: Internacional
Descripción: CLEI 2008 (XXXIV Conferencia Latinoamericana de Informática)
Ciudad: Santa Fe, Argentina
Año del evento: 2008
Anales/Proceedings: Proceedings CLEI 2008
Publicación arbitrada
Editorial: Centro Latinoamericano de Estudios en Informática (CLEI) - SADIO
Ciudad: Santa Fe, Argentina
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

Aplicaciones de Aprendizaje Automático sobre Clusters de Compuestos Químicos (2008)

Completo
SOTO A.J. , PALOMBA D. , DIAZ M.L. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I.

Evento: Nacional
Descripción: ENIEF 2008 - XVII Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones
Ciudad: San Luis, Argentina
Año del evento: 2008
Anales/Proceedings: Proceedings ENIEF 2008
Publicación arbitrada
Editorial: AMCA - Asociación Argentina de Mecánica Computacional
Ciudad: San Luis, Argentina
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

Feature Selection for ADMET Prediction using Genetic Algorithms (2007)

Completo

SOTO A.J. , CECCHINI R. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I.

Evento: Nacional

Descripción: Argentine Symposium on Artificial Intelligence (ASAI 2007)

Ciudad: Mar del Plata, Argentina

Año del evento: 2007

Anales/Proceedings:Proceedings ASAI 2007

Publicación arbitrada

Editorial: Sociedad Argentina de Investigación Operativa (SADIO)

Ciudad: Mar del Plata, Argentina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: CD-Rom

A Genetic Algorithm for Detection of Relevant Descriptors in ADMET Prediction (2007)

Completo

CECCHINI R. , SOTO A.J. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I.

Evento: Nacional

Descripción: Brazilian Symposium on Bioinformatics

Ciudad: Angra dos Reis - Brasil

Año del evento: 2007

Anales/Proceedings:Proceedings BSB 2007

Publicación arbitrada

Editorial: Brazilian Computing Society

Ciudad: Angra dos Reis - Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: CD-Rom

Predicting Physicochemical Properties for Drug Design Using Clustering and Neural Network Learning (2007)

Completo

SOTO A.J. , PONZONI I. , VAZQUEZ G.E.

Evento: Nacional

Descripción: Brazilian Symposium on Bioinformatics

Ciudad: Angra dos Reis - Brasil

Año del evento: 2007

Anales/Proceedings:Proceedings BSB 2007

Publicación arbitrada

Editorial: Brazilian Computing Society

Ciudad: Angra dos Reis - Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: CD-Rom

Análisis Numérico de diferentes Criterios de Similitud en Algoritmos de Clustering (2006)

Completo

VAZQUEZ G.E. , SOTO A.J. , PONZONI I.

Evento: Nacional

Descripción: 15° Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, ENIEF 2006

Ciudad: Santa Fe, Argentina

Año del evento: 2006

Anales/Proceedings: Mecánica Computacional

Página inicial: 993

Página final: 1012

ISSN/ISBN: 16666070

Publicación arbitrada

Editorial: AMCA

Ciudad: Santa Fe, Argentina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Programación Genética y Métodos Numéricos en Regresión Simbólica (2006)

Completo
CECCHINI R. , VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.

Evento: Nacional
Descripción: ASAI 2006 - 8º Simposio Argentino de Inteligencia Artificial
Ciudad: Mendoza, Argentina
Año del evento: 2006
Anales/Proceedings: Proceedings ASAI 2006
Publicación arbitrada
Editorial: Sociedad Argentina de Investigación Operativa (SADIO)
Ciudad: Mendoza, Argentina
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

Resolución Paralelo Distribuída de Sistemas de Ecuaciones Basadas en Técnicas de Descomposición de Grafos (2005)

Completo
SOTO A.J. , PONZONI I. , VAZQUEZ G.E.

Evento: Nacional
Descripción: MECOM 2005 - VIII Congreso Argentino de Mecánica Computacional
Ciudad: Buenos Aires, Argentina
Año del evento: 2005
Anales/Proceedings: Mecánica Computacional
Pagina inicial: 1743
Pagina final: 1760
ISSN/ISBN: 16666070
Publicación arbitrada
Editorial: AMCA - Asociación Argentina de Mecánica Computacional
Ciudad: Buenos Aires, Argentina
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

A CAPE-OPEN Compliant Simulation Module for an Ammonia Reactor Unit (2005)

Completo
PEREZ V. , DOMANCICH A. , VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.

Evento: Internacional
Descripción: 4th Mercosur Congress on Process Systems Engineering
Ciudad: Río de Janeiro, Brasil
Año del evento: 2005
Anales/Proceedings: Proceedings 4th Mercosur Congress on Process Systems Engineering
Publicación arbitrada
Editorial: UFRJ-UFRRJ, Brazil - PLAPIQUI, Argentina
Ciudad: Río de Janeiro, Brasil
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

A Database of Pharmacological Properties For Accurate Adme-tox Predictions (2005)

Completo
SANCHEZ J. , VAZQUEZ G.E. , BESSONE S. , PARDILLO-FONTDEVILA E. , BRIGNOLE N.B.

Evento: Internacional
Descripción: 4th Mercosur Congress on Process Systems Engineering
Ciudad: Río de Janeiro, Brasil

Año del evento: 2005
Anales/Proceedings: Proceedings 4th Mercosur Congress on Process Systems Engineering
Publicación arbitrada
Editorial: UFRJ-UFRRJ, Brazil - PLAPIQUI, Argentina
Ciudad: Río de Janeiro, Brasil
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: CD-Rom

pdAGMO para Configuración Inicial de Sensores en Procesos Industriales (2004)

Completo
ASTEASUAIN F., CARBALLIDO J., VAZQUEZ G.E., PONZONI I., BRIGNOLE N.B.

Evento: Nacional
Descripción: ENIEF 2004 - 14º Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones
Ciudad: Bariloche, Argentina
Año del evento: 2004
Anales/Proceedings: Mecánica Computacional
Página inicial: 3105
Página final: 3118
ISSN/ISBN: 16666070
Publicación arbitrada
Editorial: AMCA - Asociación Argentina de Mecánica Computacional
Ciudad: Bariloche, Argentina
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Desempeño de un algoritmo espectral para optimización rigurosa de plantas de procesos industriales (2004)

Completo
VAZQUEZ G.E., DOMANCICH A., ARDENGHI J.I., BRIGNOLE N.B.

Evento: Nacional
Descripción: ENIEF 2004 - 14º Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones
Ciudad: Bariloche, Argentina
Año del evento: 2004
Anales/Proceedings: Mecánica Computacional
Página inicial: 3047
Página final: 3057
ISSN/ISBN: 16666070
Publicación arbitrada
Editorial: AMCA - Asociación Argentina de Mecánica Computacional
Ciudad: Bariloche, Argentina
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

A Sensitivity-Analysis Approach for Domain Partitioning in Multisplitting Algorithms (2002)

Completo
VAZQUEZ G.E., BRIGNOLE N.B.

Evento: Internacional
Descripción: Fifth World Congress on Computational Mechanics
Ciudad: Viena, Austria
Año del evento: 2002
Anales/Proceedings: Proceedings Fifth World Congress on Computational Mechanics
Publicación arbitrada
Editorial: International Association for Computational Mechanics
Ciudad: Viena, Austria
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Otros

A Decentralized Parallel-Distributed Observability Algorithm (2002)

Completo

FAPITALLE F. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I. , BRIGNOLE N.B.

Evento: Internacional

Descripción: Fifth World Congress on Computational Mechanics

Ciudad: Viena, Austria

Año del evento: 2002

Anales/Proceedings:Proceedings Fifth World Congress on Computational Mechanics

Publicación arbitrada

Editorial: International Association for Computational Mechanics

Ciudad: Viena, Austria

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: CD-Rom

Diseño y Desarrollo de un Sistema de Soporte de Decisión para Análisis de Instrumentación de Plantas Industriales (2002)

Resumen

PONZONI I. , VAZQUEZ G.E. , CARBALLIDO J. , BRIGNOLE N.B.

Evento: Nacional

Descripción: WICC 2002: IV Workshop de Investigadores en Ciencias de la Computación

Ciudad: Bahía Blanca, Argentina

Año del evento: 2002

Anales/Proceedings:Proceedings WICC 2002

Publicación arbitrada

Editorial: Red UNCI

Ciudad: Bahía Blanca, Argentina

Palabras clave: Ingeniería de procesos Modelamiento Análisis de Instrumentación

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Papel

Procesamiento Paralelo Distribuido Heterogéneo en Aplicaciones Estructurales y Numéricas (2002)

Resumen

VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.

Evento: Nacional

Descripción: WICC 2002: IV Workshop de Investigadores en Ciencias de la Computación

Ciudad: Bahía Blanca, Argentina

Año del evento: 2002

Anales/Proceedings:Proceedings WICC 2002

Publicación arbitrada

Editorial: Red UNCI

Ciudad: Bahía Blanca, Argentina

Palabras clave: Procesamiento Paralelo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /

Medio de divulgación: Papel

Parallel Depth-First Search on Clusters of Workstations (1999)

Resumen

PONZONI I. , VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.

Evento: Internacional

Descripción: SIAM Annual Meeting 1999

Ciudad: Atlanta, Estados Unidos

Año del evento: 1999

Anales/Proceedings:Proceedings SIAM Annual Meeting 1999

Publicación arbitrada

Editorial: SIAM

Ciudad: Atlanta, Estados Unidos

Palabras clave: Procesamiento Paralelo
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /
Medio de divulgación: Papel

Parallel Distributed Optimization for Chemical Engineering Applications (1999)

Resumen
VAZQUEZ G.E., BRIGNOLE N.B.

Evento: Internacional
Descripción: SIAM Annual Meeting 1999
Ciudad: Atlanta, Estados Unidos
Año del evento: 1999
Anales/Proceedings: Proceedings SIAM Annual Meeting 1999
Publicación arbitrada
Editorial: SIAM
Ciudad: Atlanta, Estados Unidos
Palabras clave: Procesamiento Paralelo Optimización
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /
Medio de divulgación: Papel

ModGen: A Model Generator for Instrumentation Analysis. Industrial Application using New Observability Technique (1998)

Completo
VAZQUEZ G.E., PONZONI I., SANCHEZ M., BRIGNOLE N.B.

Evento: Internacional
Descripción: AIChE 1998 Annual Meeting
Ciudad: Miami, Estados Unidos
Año del evento: 1998
Anales/Proceedings: Proceedings AIChE Annual Meeting 1998
Editorial: American Institute for Chemical Engineering
Ciudad: Miami, Estados Unidos
Palabras clave: Ingeniería de procesos Modelamiento Análisis de Instrumentación
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /
Medio de divulgación: Papel

Producción técnica

PRODUCTOS

VIDEAN (Visual & Interactive Descriptor Analysis) (2014)

Software, Otra
MARTINEZ M.J., SOTO A.J., VAZQUEZ G.E., DÍAZ M.F., PONZONI I.
Aplicación Web para el análisis visual e interactivo de descriptores en modelos QSAR-QSPR
País: Argentina
Disponibilidad: Irrestringida
Palabras clave: QSAR Modelado Matemático Visual Analytics
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Internet
<http://lidecc.cs.uns.edu.ar/VIDEAN/>

Delphos (2009)

Software, Otra
SOTO A.J., CECCHINI R., VAZQUEZ G.E., PONZONI I.
Software para la selección automática de descriptores en QSAR
País: Argentina
Disponibilidad: Irrestringida

Institución financiadora: Conicet

Palabras clave: QSAR Molecular Modelling

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: Internet

http://lidecc.cs.uns.edu.ar/index.php?option=com_content&view=article&id=47&Itemid=33 (para descarg

DELPHOS is a computational tool for supporting the development of QSAR models. It was mainly aimed at assisting pharmacists who work with QSAR/QSPR prediction models. Nowadays, it comprises a tool for selecting subsets of descriptors. This tool is based on a novel approach which has been recently published in Soto et al. DELPHOS makes use of a two-phase computational method where the first phase executes a multi-objective optimization, using evolutionary algorithms, and the second phase is a thorough validation of the results obtained in the first step. Currently the DELPHOS software has the following features: GUI. A Graphic User Interface designed for using the software without the need to know specific details of the code or the applied methods. Data handling. Input data can be fed to the method using the CSV file format or standard Matlab matrix files. Computation performed after any phase can be saved and later restored. First Phase: Feature Searching and Evaluation. This phase is responsible of doing a coarse searching and a fast evaluation among all feasible subsets of descriptors. Several different parameters could be set for this phase. Second Phase: Learning Method. Using the data computed in the first phase, a thorough evaluation is applied in order to determine which subsets of the coarse selection are the most relevant ones. Post-processing. After the second phase has been executed, tables and graphics showing final results are presented.

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

COMITÉ EVALUACIÓN DE PROYECTOS

Evaluador Técnico - Amplia Cobertura Mayores (2015)

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay

Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

Evaluador de Informe Científico-Técnico (2017)

Argentina

Universidad Nacional de la Patagonia Austral

Cantidad: Menos de 5

Evaluador Técnico - Amplia Cobertura Mayores (2015)

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Universidad de Buenos Aires (2014 / 2014)

Argentina

Universidad de Buenos Aires

Cantidad: Menos de 5

Conicet - Ministerio de Ciencia y Tecnología (MinCyT) (2009 / 2013)

Argentina

Conicet - Ministerio de Ciencia y Tecnología (MinCyT)

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de proyectos PIP financiados por el Conicet.

EVALUACIÓN DE EVENTOS Y CONGRESOS

CIARP 2016: XXI Iberoamerican Congress on Pattern Recognition (2016)

Comité programa congreso
Perú
Arbitrado

CIARP 2015: XX Iberoamerican Congress on Pattern Recognition (2015)

Revisiones
Uruguay

LASCAS 2015 - IEEE CAS VI Latin American Symposium on Circuits & Systems (2015)

Revisiones
Uruguay

IEEE

CLEI 2014: XL Latin American Computing Conference (2014)

Revisiones
Uruguay

3er. Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2012)

Argentina

Miembro de Comité Científico http://bioingenieria.edu.ar/eventos/bioinformatica2012/index.php?option=com_content&view=article&id=31&Itemid=50

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

Fondo Clemente Estable - ANII (2017)

Evaluación independiente
Uruguay
Cantidad: Menos de 5
ANII

Becas de Movilidad ANII (2016 / 2017)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: De 5 a 20
ANII
Integrante del comité de evaluación y seguimiento de la convocatoria.

Becas de Movilidad Tipo Capacitación (2015 / 2016)

Evaluación independiente
Uruguay
Cantidad: Menos de 5
ANII

Becas Posgrados Nacionales - ANII (2015)

Evaluación independiente
Uruguay
Cantidad: Menos de 5
ANII

Vinculación con Científicos y Tecnólogos en el Exterior (2014)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5
ANII

Ingreso a Carrera de Investigador Científico (CIC) (2008 / 2012)

Argentina
Cantidad: De 5 a 20
Conicet - Argentina
Tareas de evaluación como par consultor de postulantes a Carrera de Investigador Científico del Conicet.

Convocatoria de Becas de Formación de Posgrado (Doctorales) Tipo I y II (2006 / 2012)

Argentina
Cantidad: De 5 a 20
Conicet

JURADO DE TESIS

Doctorado en Ingeniería Química (2015)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina
Nivel de formación: Doctorado
Tesis de doctorado - Paola Oteiza: "Técnicas metaheurísticas aplicadas al diseño óptimo de redes de cañerías"

Ingeniero en Telecomunicación (2015)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Educación Superior/Privado / Universidad Católica del Uruguay Dámaso Antonio Larrañaga / UCUDAL - Facultad de Ingeniería y Tecnologías , Uruguay
Nivel de formación: Grado
Tesis María Ximena Fernández, Rosana García: "Estudio de Patrones y Análisis de EEG"

Doctorado en Informática (2015)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de Rosario , Argentina
Nivel de formación: Doctorado
Tesis de doctorado - Javier Murillo: "Caracterización de conjuntos de atributos en problemas de clasificación mediante medias borrosas"

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Predicción de Propiedades de Sustancias y Materiales de Interés en la Industria Química a Través del Desarrollo de Métodos Computacionales (2014)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina
Programa: Doctorado en Ciencias de los Materiales
Nombre del orientado: Damián Palomba
País/Idioma: Argentina, Español
Palabras Clave: QSAR Inteligencia Computacional Polímeros Predicción de propiedades
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

El método del gradiente espectral proyectado acelerado mediante paralelismo: Aplicaciones a Ingeniería de Procesos (2014)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina

Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación
Nombre del orientado: Juan Ignacio Ardenghi
País/Idioma: Argentina, Español
Palabras Clave: Procesamiento Paralelo Optimización
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación

Programación Genética Aplicada al Ajuste de Datos Experimentales en Problemas de Bioinformática (2010)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina
Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación
Nombre del orientado: Rocío Cecchini
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Argentina, Español
Palabras Clave: Bioinformática Algoritmos Evolutivos
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Técnicas de aprendizaje automático y computación científica aplicadas a la predicción de parámetros Adme-Tox (2010)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina
Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación
Nombre del orientado: Axel Soto
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Argentina, Español
Palabras Clave: Chemoinformatics Algoritmos Evolutivos
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Desarrollo teórico de técnicas meta-heurísticas para resolver problemas de optimización TN (Transit Networks) en entornos dinámicos (2009)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina
Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación
Nombre del orientado: Ana Carolina Olivera
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Argentina, Español
Palabras Clave: Algoritmos Evolutivos Transit Network Problem
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

OTRAS

Director de Beca de Formación de Posgrado Tipo I-CONICET. (2011)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas , Argentina
Nombre del orientado: Julieta Sol Dussaut
País/Idioma: Argentina, Español
Web: http://www.conicet.gov.ar/new_scp/detalle.php?id=36123&keywords=julieta+dussaut&datos_academicos=yes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática
CoDirector de Beca de Formación de Posgrado Tipo I-CONICET. Período Abril 2011/Marzo 2014.
Lugar de trabajo: Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación. Universidad Nacional del Sur.

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Aplicación de aprendizaje automático a la prevención de fraude en transacciones de crédito (2016)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay
Programa: Informática
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Ignacio Gomez Raggio
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Aprendizaje automático Modelos de predicción Detección de fraude Detección de anomalías
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Aprendizaje automático
Título de tesis genérico de la inscripción a la maestría.

Desarrollo de Métodos Analíticos y de Predicción para Informática Molecular Basados en Técnicas de Aprendizaje Automático y Visualización (2012)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina
Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación
Nombre del orientado: María Jimena Martinez
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Argentina, Español
Palabras Clave: Chemoinformatics Bioinformatica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

OTRAS

Director de Beca de Formación de Posgrado Tipo I-CONICET (2012)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas , Argentina
Nombre del orientado: María Jimena Martinez
País/Idioma: Argentina, Español
Web: http://www.conicet.gov.ar/new_scp/detalle.php?id=38674&keywords=martinez+maria+jimena&datos_academicos=yes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática
Director de Beca de Formación de Posgrado Tipo I-CONICET. Período Abril 2012/Marzo 2015.
Lugar de trabajo: Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación. Universidad Nacional del Sur.

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Tercer Premio Trabajos Estudiantiles (1995)

(Nacional)
SADIO - Sociedad Argentina de Investigación Operativa
Tercer Premio Trabajos Estudiantiles, por el trabajo Sistemas de Lindenmayer (Maller P. A., Ponzoni I., Vazquez G. E.) en el marco del capítulo estudiantil de las 24^º Jornadas Argentinas de Informática e Investigación Operativa JAIIO; organizadas por la SADIO del 7 al 9 de agosto de 1995 en UBA - Facultad de Ciencias Exactas, Capital Federal

PRESENTACIONES EN EVENTOS

V Congreso Argentino de Bioinformática (2014)

Congreso
Conferencista Invitado

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

Palabras Clave: Bioinformatica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	63
Artículos publicados en revistas científicas	22
Completo	20
Resumen	2
Trabajos en eventos	39
Libros y Capítulos	2
Capítulos de libro publicado	2
PRODUCCIÓN TÉCNICA	2
Productos tecnológicos	2
EVALUACIONES	20
Evaluación de proyectos	5
Evaluación de eventos	5
Evaluación de convocatorias concursables	7
Jurado de tesis	3
FORMACIÓN RRHH	9
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	6
Tesis de doctorado	5
Otras tutorías/orientaciones	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	3
Tesis de doctorado	1
Otras tutorías/orientaciones	1
Tesis de maestría	1