



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: 29/01/2024  
Última actualización: 27/12/2023

## Datos Personales

### IDENTIDAD

Nombre en citas bibliográficas: VAZQUEZ G.E.  
Documento: Cédula de identidad - 60717172 ,Pasaporte - AAE084700  
Sexo: Masculino  
País de pasaporte: Argentina  
Fecha de nacimiento: 14/06/1972  
Lugar de nacimiento: Argentina / Bahía Blanca  
País de Nacionalidad: Argentina

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad Católica del Uruguay/ Facultad de Ingeniería y Tecnologías / Departamento de Informática / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad Católica del Uruguay / Facultad de Ingeniería y Tecnologías / Sector Educación Superior/Privado / Departamento de Informática  
Dirección: Av. 8 de Octubre 2801 / 11600  
País: Uruguay / Montevideo / Montevideo  
Teléfono: 24872717  
Correo electrónico/Sitio Web: [gustavo.vazquez@ucu.edu.uy](mailto: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/defensa: Procesamiento paralelo distribuido heterogéneo aplicado a ingeniería de procesos  
Tutor/es: Nélida Beatriz Brignole  
Obtención del título: 2002  
Sitio web de la disertación/tesis/defensa: [http://cs.uns.edu.ar/~gev/Tesis Doctoral Gustavo Vazquez - 2002.PDF](http://cs.uns.edu.ar/~gev/Tesis%20Doctoral%20Gustavo%20Vazquez%202002.PDF)  
Financiación:  
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/defensa: 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

## Áreas 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 - URUGUAY

Facultad de Ingeniería y Tecnologías / Departamento de Informática

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### Otro (03/2019 - a la fecha)

Profesor Titular 30 horas semanales

#### Otro (03/2016 - a la fecha) Trabajo relevante

Director del Departamento de Informática 10 horas semanales

Otro (02/2014 - 02/2019)

Profesor Asociado 30 horas semanales

## ACTIVIDADES

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

#### **Desarrollo de métodos computacionales para bioinformática y química informática (03/2019 - a la fecha)**

Determinar el valor de diferentes propiedades para una entidad o realizar una clasificación en función de características específicas constituye un importante desafío de la ciencia en la actualidad. Dado que los métodos clásicos involucran el uso de técnicas experimentales para obtener estos valores, existen numerosas razones para desarrollar métodos computacionales para la estimación de los mismos. Las ventajas se concentran fundamentalmente en la reducción de costos de experimentación, ahorro de tiempo, seguridad, disponibilidad de las muestras, etc. Esta área de la informática puede recibir diferentes denominaciones en función de las entidades a estudiar. Cuando las mismas son a nivel atómico/molecular se denomina química computacional o informática molecular, cuando estas ocurren a nivel de sistemas biológicos se denomina bioinformática. Para abordar estos problemas la metodología QSAR (Quantitative structure-activity relationship) ha sido una de las estrategias más difundidas; ésta consiste en relacionar cuantitativamente diferentes parámetros de una entidad con un proceso bien definido de la misma. Uno de los campos de aplicación ha sido la química computacional, donde diferentes atributos de una molécula (descriptores) son relacionados con una propiedad de interés. También una actividad biológica puede ser expresada cuantitativamente como la concentración de una sustancia requerida para que suceda una determinada respuesta biológica. De esta manera se busca establecer una relación y predecir el comportamiento para nuevos casos de los cuales no se dispone de información experimental. En esta línea de investigación se propone fundamentalmente el desarrollo de modelos predictivos, fundamentalmente mediante el uso de técnicas que permitan la explicabilidad de dichos modelos. Esto puede provenir del desarrollo de técnicas que utilizan principios de visual analytics, explainable AI, etc. Esta línea de investigación es continuación de la que había iniciado a partir de Marzo de 2014 con mi arribo a la Universidad Católica del Uruguay Aplicada

15 horas semanales , Coordinador o Responsable

Equipo: VAZQUEZ G.E.

#### **Nuevas direcciones para el Cómputo Hiperdimensional (08/2023 - a la fecha)**

El cómputo hiperdimensional (HyperDimensional Computing ó HDC) es un acercamiento alternativo a la inteligencia artificial basado en el uso de operaciones algebraicas muy simples aplicadas a vectores de muy altas dimensiones. Por la simplicidad de su estructura, este acercamiento lleva a algoritmos de clasificación que, a diferencia de los métodos de aprendizaje profundo (deep learning), permiten una interpretación clara de sus resultados y usan menos recursos energéticos y de cómputo. Adicionalmente los algoritmos basados en HDC poseen la capacidad de razonar de manera simbólica sobre conceptos agregados, lo que los hace los mejores métodos disponibles para resolver tareas complejas de razonamiento por analogía, que son difíciles incluso para los seres humanos. En este proyecto proponemos nuevos algoritmos para entrenamiento e inferencia de clasificadores HDC, nuevos modelos algebraicos / geométricos para cómputo HDC y nuevos teoremas que relacionan el comportamiento de HDC y las matemáticas de la adquisición compresiva (compressive sensing). El proyecto traerá al Uruguay las capacidades técnicas para el desarrollo de algoritmos HDC y abrirá la puerta para el desarrollo de una industria en inteligencia artificial basada en HDC que sea menos demandante en recursos y energía y que genere modelos explicables.

Fundamental

20 horas semanales , Coordinador o Responsable

Equipo: VAZQUEZ G.E.

Palabras clave: Aprendizaje automático Cómputo hiperdimensional

### PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

#### **Nuevas direcciones para el Cómputo Hiperdimensional (FCE\_1\_2023\_1\_176242) (12/2023 - a la fecha)**

Proyecto ganador FCE\_1\_2023\_1\_176242 - Período Feb 2024/Feb 2027 El cómputo hiperdimensional (HyperDimensional Computing ó HDC) es un acercamiento alternativo a la inteligencia artificial basado en el uso de operaciones algebraicas muy simples aplicadas a vectores de muy altas dimensiones. Por la simplicidad de su estructura, este acercamiento lleva a algoritmos de clasificación que, a diferencia de los métodos de aprendizaje profundo (deep learning), permiten

una interpretación clara de sus resultados y usan menos recursos energéticos y de cómputo. Adicionalmente los algoritmos basados en HDC poseen la capacidad de razonar de manera simbólica sobre conceptos agregados, lo que los hace los mejores métodos disponibles para resolver tareas complejas de razonamiento por analogía, que son difíciles incluso para los seres humanos. En este proyecto proponemos nuevos algoritmos para entrenamiento e inferencia de clasificadores HDC, nuevos modelos algebraicos / geométricos para cómputo HDC y nuevos teoremas que relacionan el comportamiento de HDC y las matemáticas de la adquisición compresiva (compressive sensing). El proyecto traerá al Uruguay las capacidades técnicas para el desarrollo de algoritmos HDC y abrirá la puerta para el desarrollo de una industria en inteligencia artificial basada en HDC que sea menos demandante en recursos y energía y que genere modelos explicables.

20 horas semanales

Departamento de Informática

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: VAZQUEZ G.E. (Responsable)

Palabras clave: Aprendizaje automático Cómputo hiperdimensional

Areas de conocimiento:

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

Computación e Información / Inteligencia Artificial

#### **Aprendizaje Automático con Garantías Matemáticas (FCE\_1\_2023\_1\_176172) (12/2023 - a la fecha)**

Proyecto Financiado FCE\_1\_2023\_1\_176172 - Feb 2024/Feb 2026

5 horas semanales

Departamento de Informática

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: VAZQUEZ G.E.

Palabras clave: Aprendizaje automático Sumas de cuadrados Estabilidad de GNNs

#### **Aprendizaje de habilidades sociales en personas con discapacidad intelectual y personas con desarrollo normativo mediante tecnología digital (12/2019 - 12/2021 )**

Las nuevas tecnologías ofrecen posibilidades no solo de acceso a la información y comunicación, sino también permiten el aprendizaje de habilidades socioafectivas. Específicamente, el uso de la realidad virtual como herramienta que permite simular entornos y manipularlos con un fin terapéutico para que el sujeto los vivencie como si ocurriera en un entorno verdadero, posibilita el aprendizaje guiado de habilidades sociales que pueden transferirse a situaciones de la vida real. En relación con esto, se entiende que las habilidades sociales son críticas para interacciones sociales efectivas y que, por ende, el uso de procedimientos para la enseñanza de habilidades sociales podrían ser beneficiosos para aquellas personas que presenten déficits en competencias de interacción social, como pudieran ser aquellas diagnosticadas con discapacidad intelectual. Este proyecto pretende desarrollar un herramienta de intervención digital, mediante realidad virtual, con el que desarrollar habilidades sociales en personas con y sin discapacidad intelectual.

5 horas semanales

Facultad de Psicología

Otra

Integrante del Equipo

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: VAZQUEZ G.E.

Palabras clave: habilidades sociales discapacidad intelectual realidad virtual

#### **Proyecto STIC-AmSud - SNPs-PHE: Computational models for predicting SNPs-phenotype associations (03/2017 - 03/2019 )**

Project Code 17STIC-07 In a medical post-genomic age the accurate diagnosis of common complex diseases requires a clear correlation between genotype variants and phenotypic diseases. As expected, with the advance in Next Generation Sequencing (NGS) technologies, new approaches for the meta-analysis of genetic association studies began to emerge. For all these new approaches, the major challenge is to understand the correlation between SNPs and phenotypic traits. Advances in this problem offer unprecedented opportunities to foster translational health research. However, the high diversity observed in genomes of natural populations, in the order of millions of SNPs, together with the hardness of modeling the underlying genomics and systems biology turns the problem of predicting SNP-phenotype associations hard to deal with. In this proposal, a multigenic prototype model for predicting non-trivial associations between SNPs and the eye color defective trait in the model organism *Drosophila melanogaster* is considered. For this purpose, SNPs are modeled as information sources and machine learning methods for modeling complex interactions between information sources are considered. We expect these models can be able to, i) differentiate between two main types of SNPs interactions, redundant and complementary, and ii) to quantify their contributions to the phenotypic trait under study. To accomplish these computational objectives, a two-stage approach based on a supervised fuzzy-measure characterization of sets of SNPs is assumed. The key elements of innovation in this proposal are the integration of expert knowledge to machine learning models and the use of fuzzy measures to aid in the interpretation of SNPs interactions. Coordinación General del proyecto: Pilar Bulacio (Centro Internacional Franco Argentino de Ciencias de la Información y de Sistemas (CIFASIS), UNR, CONICET) Argentina Coordinador regional Francia: Sebastien Destercke (Université de Technologie de Compiègne, Centre de recherche de Royallieu) Coordinador regional Uruguay: Gustavo Vazquez (Universidad Católica del Uruguay) Página web del proyecto: <http://www.cifasis-conicet.gov.ar/bioinformatica/blog/index.html>

5 horas semanales

Universidad Católica del Uruguay, Facultad de Ingeniería y Tecnologías  
Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Cooperación

Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología de la República Argentina., Argentina, Cooperación

Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Francia, Cooperación

Equipo: Gustavo Esteban VAZQUEZ

Areas de conocimiento:

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

### **Bioenergía Forestal (04/2014 - 12/2015)**

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

Concluido

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Teyma SA, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Gustavo Esteban VAZQUEZ

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

Areas 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

Simulación, 64 horas, Teórico-Práctico

### **Maestría en Ciencia de Datos (03/2023 - a la fecha)**

Maestría

Responsable

Asignaturas:

Aprendizaje Automático, 64 horas, Teórico-Práctico

## **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

Universidad Nacional del Sur

## **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

### **Funcionario/Empleado (08/2005 - 02/2014)** Trabajo relevante

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-Nº108/08; cambio dedicación exclusiva resolución

CDCIC-Nº165/06).

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

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., OLIVERA A.C., GALLO C., BRIGNOLE N.B. (Responsable), CARBALLIDO J., CECCHINI R., PONZONI I.

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

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: GALLO C. , CARBALLIDO J. , CECCHINI R. , PONZONI I. (Responsable)

Palabras clave: Bioinformatica

Areas 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

Areas 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

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Economía y Negocios / Negocios y Administración / Administración de Empresas

#### **Tecnicaturas de la Universidad Provincial del Sudoeste (UPSO) (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 /

#### **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Funcionario/Empleado (05/2005 - 02/2014) Trabajo relevante**

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

Institut Pasteur de Montevideo / Unidad de Bioinformática

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Profesor visitante (03/2013 - 06/2013)**

Visita Posdoctoral 40 horas semanales

##### **Profesor visitante (03/2012 - 06/2012)**

Investigador posdoctoral visitante 40 horas semanales

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

##### **Profesor visitante (03/2011 - 08/2011)**

Investigador posdoctoral visitante 40 horas semanales

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

#### **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: 10 horas

Carga horaria de investigación: 20 horas

Carga horaria de formación RRHH: 5 horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: 5 horas

#### **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 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. Uno de los principales aspectos en el desarrollo de modelos es lograr la transparencia de los mismos, con el objeto de lograr una mayor explicabilidad de las predicciones (lo cual es fundamental en el ámbito molecular o biológico). Para esto hemos propuesto metodologías basadas en visual analytics que permiten examinar, evaluar y mejorar modelos propuestos por mecanismos automatizados.

En cuanto al modelamiento en el área de bioinformática 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. También se ha trabajado en mecanismos que evalúan la consistencia de predicción de modelos de inferencia patogénica y la revisión de modelos de imputación genómica en el caso de datos faltantes.

A partir de 2023 se plantea una nueva línea de trabajos basada en cómputo hiperdimensional (HyperDimensional Computing ó HDC). Esto es un acercamiento alternativo a la inteligencia artificial basado en el uso de operaciones algebraicas muy simples aplicadas a vectores de muy altas dimensiones. Por la simplicidad de su estructura, este acercamiento lleva a algoritmos de clasificación que, a diferencia de los métodos de aprendizaje profundo (deep learning), permiten una interpretación clara de sus resultados. Esta es una línea de investigación fundamental y de reciente aparición. Se plantea el desarrollo de nuevas formas de representación hiperdimensional para diferentes problemas, especialmente en casos de nuestro interés principal como grafos (para la representación de moléculas) y estructuras lineales (como por ejemplo secuencias de genomas).

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

#### **Evaluation of different approaches for missing data imputation on features associated to genomic data (Completo, 2021)**

Ben O. Petrazzini, NAYA H., LOPEZ-BELLO J., VAZQUEZ G.E., SPANGENBERG L.

BioData Mining, v.: 14 44 , p.:1 - 13, 2021

Palabras clave: Machine learning imputation missing data genomics pathogenic variants

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 17560381

DOI: [10.1186/s13040-021-00274-7](https://doi.org/10.1186/s13040-021-00274-7)

<https://rdcu.be/cw9eo>

Scopus\*

#### **A Preliminary Comparison of P-Tool Consistency (Completo, 2019)**

MURILLO J. , SPETALE F. , TAPIA E. , KRSTICEVIC F. , CAILLOUX O. , GUILLAUME S. , VAZQUEZ G.E. , FERNANDEZ T. , DESTERCKE S. , PONCE S. , BULACIO P.

IFMBE proceedings, v.: 75 p.:731 - 735, 2019

Palabras clave: SNP Gene functionality Missense nonsense mutation

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Switzerland

ISSN: 16800737

E-ISSN: 1727-1983

DOI: [10.1007/978-3-030-30648-9\\_97](https://doi.org/10.1007/978-3-030-30648-9_97)

[https://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-030-30648-9\\_97](https://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-030-30648-9_97)

#### **Feature Selection for Polymer Informatics: Evaluating Scalability and Robustness of the FS4RV-DD Algorithm using Synthetic Polydisperse Datasets (Completo, 2019)**

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

Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 60 2 , p.:592 - 603, 2019

Palabras clave: Feature Selection Polymer Informatics Synthetic Database Polydisperse Data

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 15499596

E-ISSN: 1549960X

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00867>

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jcim.9b00867>

Scopus\* WEB OF SCIENCE\*

#### **QSAR Classification Models for Predicting the Activity of Inhibitors of Beta-Secretase (BACE1) Associated with Alzheimer?s Disease (Completo, 2019)**

PONZONI I. , SEBSTIAN-PEREZ V. , MARTINEZ M.J. , ROCA C. , DE LA CRUZ PEREZ C. , CRAVERO F. , VAZQUEZ G.E. , PAEZ J.A. , DIAZ M.F. , CAMPILLO N.E.

Scientific Reports, v.: 9 9102 , p.:1 - 13, 2019

Palabras clave: Alzheimer?s disease BACE1 QSAR Backward Elimination Machine Learning

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 20452322

DOI: [doi.org/10.1038/s41598-019-45522-3](https://doi.org/10.1038/s41598-019-45522-3)

<https://www.nature.com/articles/s41598-019-45522-3>

Scopus\* WEB OF SCIENCE\*

#### **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

Areas 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  
E-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  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /  
Medio de divulgación: Internet  
E-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)**

ARDENGHI J.I., VAZQUEZ G.E., BRIGNOLE N.B.  
Computers & 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)** Trabajo relevante

PALOMBA D., VAZQUEZ G.E., DIAZ M.L.  
Journal of Molecular Graphics and Modelling, v.: 38 p.:137 - 147, 2012  
Palabras clave: Molecular Modeling Structureproperty 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)

**Reduced set of virulence genes allows high accuracy prediction of bacterial pathogenicity in humans**

**(Completo, 2012)** Trabajo relevante

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

E-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](https://pubs.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

E-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

E-ISSN: 1611-3349

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](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)** Trabajo relevante

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

E-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<sup>®</sup>

#### **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

E-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<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

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

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

E-ISSN: 1611-3349

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/n70138554p5711v4/>

Scopus<sup>®</sup>

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

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

QSAR & 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

E-ISSN: 16110218

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/alphabeticIndex/2022/>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

#### **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  
E-ISSN: 19883064  
<http://redalyc.uaemex.mx/pdf/925/92503707.pdf>

Scopus<sup>®</sup> *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  
E-ISSN: 1611-3349  
DOI: [10.1007/11874850\\_23](https://doi.org/10.1007/11874850_23)  
[http://rd.springer.com/chapter/10.1007/11874850\\_23](http://rd.springer.com/chapter/10.1007/11874850_23)

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**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  
E-ISSN: 22242872

**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  
E-ISSN: 15635201  
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 (Estados Unidos), v.: 27, 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  
E-ISSN: 18604749  
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  
E-ISSN: 1611-3349  
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  
E-ISSN: 1611-3349  
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 Analsys 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 & Chemical Engineering, v.: 25 7-8 , p.:997 - 1002, 2001

Palabras clave: Parallel Processing Observability Analsys 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.

Publicado

Número de volúmenes: 477

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.

Publicado

Número de volúmenes: 34

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**

### **In silico study of tools that predict SNPs impact in protein functionality (2018)**

MURILLO J., SPETALE F., BULACIO P., TAPIA E., GUILLAMUME S., CAILLOUX O., KRSTICEVIC F., VAZQUEZ G.E., FERNANDEZ CALERO T., DESTRECKE S.

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: ISCB-LA SOIBIO EMBnet 2018

Ciudad: Concepción

Año del evento: 2018

Anales/Proceedings: Proceedings ISCB-LA SOIBIO EMBnet 2018

Palabras clave: SNP protein functionality

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 Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: Internet

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

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

Publicado

Completo

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)**

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

Publicado

Completo

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)**

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

Publicado

Completo

Evento: Nacional

Descripción: CAIQ2015 Congreso Argentino de Ingeniería Química

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 2015

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

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

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

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

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

Evento: Nacional

Descripción: 30° Congreso Argentino de Química

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 2014

Publicación arbitrada

Areas 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)**

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

Publicado

Resumen expandido

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)**

PALOMBA D , VAZQUEZ G.E., DIAZ M.L.  
Publicado  
Completo  
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)**

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

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

IRAOLA G. , VAZQUEZ G.E., SPANGENBERG L. , NAYA H.  
Publicado  
Resumen  
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)**

PALOMBA D , VAZQUEZ G.E., DIAZ M.L.  
Publicado  
Resumen  
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)**

PALOMBA D , VAZQUEZ G.E., DIAZ M.L.  
Publicado  
Completo  
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)**

STRICKERT M., SOTO A.J., VAZQUEZ G.E.  
Publicado  
Completo  
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)**

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

Publicado

Resumen

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

Areas 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)**

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

Publicado

Resumen

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

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

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

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Neural Information Processing Systems (NIPS)

Ciudad: Whistler, Canadá

Año del evento: 2010

Anales/Proceedings:Proceedings NIPS 2010

Publicación arbitrada

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

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)

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 metrics for molecular descriptor assessment in QSPR classification (2009)**

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

Publicado

Completo

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

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

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

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

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

Areas 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)**

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

Publicado

Completo

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)**

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

Publicado

Completo

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)**

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

Publicado

Completo

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)**

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

Publicado

Completo

Evento: Nacional

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

Ciudad: Santa Fe, Argentina

Año del evento: 2006

Anales/Proceedings: Mecánica Computacional  
Pagina inicial: 993  
Pagina 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)**

CECCHINI R. , VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Completo  
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)**

SOTO A.J. , PONZONI I. , VAZQUEZ G.E.  
Publicado  
Completo  
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)**

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

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

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

ASTEASUAIN F. , CARBALLIDO J. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I. , BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Completo  
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  
Areas 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)**

VAZQUEZ G.E. , DOMANCICH A. , ARDENGHI J.I. , BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Completo  
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  
Areas 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)**

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

Completo  
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: Otros

**A Decentralized Parallel-Distributed Observability Algorithm (2002)**

FAPITALLE F. , VAZQUEZ G.E. , PONZONI I. , BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Completo  
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)**

PONZONI I. , VAZQUEZ G.E. , CARBALLIDO J. , BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Resumen  
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)**

VAZQUEZ G.E. , BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Resumen  
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)**

PONZONI I., VAZQUEZ G.E., BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Resumen  
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)**

VAZQUEZ G.E., BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Resumen  
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)**

VAZQUEZ G.E., PONZONI I., SANCHEZ M., BRIGNOLE N.B.  
Publicado  
Completo  
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  
MARTINEZ M.J., SOTO A.J., VAZQUEZ G.E., DÍAZ M.F., PONZONI I.  
Aplicación Web para la el análisis visual e interactivo 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  
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](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**

##### **Comité de Evaluación y Seguimiento - Fondo María Viñas ( 2021 )**

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20

##### **Comité de Evaluación y Seguimiento - Becas Movilidad tipo Capacitación ( 2016 / 2020 )**

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20

##### **Evaluador Técnico - Amplia Cobertura Mayores ( 2015 / 2015 )**

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

## **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 / 2015 )**

Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20

### **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**

### **ASAI - Simposio Argentino de Inteligencia Artificial (JAIIO) ( 2021 )**

Comité programa congreso  
Argentina

SADIO

### **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 / 2019 )**

Comité programa congreso  
Argentina

Miembro de Comité Científico [http://bioingenieria.edu.ar/eventos/bioinformatica2012/index.php?option=com\\_content&view=article&id=31&Itemid=50](http://bioingenieria.edu.ar/eventos/bioinformatica2012/index.php?option=com_content&view=article&id=31&Itemid=50)

## **EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES**

### **Ingresos Carrera de Investigador - Sistema Nacional de Investigación - SENACYT - Panamá ( 2023 / 2023 )**

Comité evaluador  
Panamá  
Cantidad: De 5 a 20  
Secretaría Nacional de Ciencias, Tecnología e Innovación - Panamá

### **Fondo María Viñas ( 2021 )**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
ANII

### **Becas de posgrado nacionales ( 2020 / 2020 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
ANII

### **Fondo Sectorial de Investigación a partir de Datos ( 2017 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
ANII

### **Fondo Sectorial de Investigación a partir de Datos ( 2017 / 2018 )**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
ANII

### **Fondo Clemente Estable - ANII ( 2017 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
ANII

### **Becas de Movilidad ANII ( 2016 / 2020 )**

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**

### **Maestría en Bioinformática ( 2018 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Pedeciba Bioinformática. Departamento de Bioquímica y Genómica Microbianas. Instituto de Investigaci , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría  
Título de tesis: "Bioinformática aplicada al estudio genómico de las cepas endófitas Kosakonia sp. UYSO10 y Rhizobium sp. UYSO24", Martín Beracochea, PEDECIBA Bioinformática.

### **Maestría en Gerencia de Tecnologías de la Información ( 2018 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Privado / Universidad Católica del Uruguay / Facultad de Ingeniería y Tecnologías , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría  
Título de la tesis: "Modelos de predicción de comportamientos de clientes, basados en comprobantes fiscales electrónicos". Florencia Cedrés Viera.

### **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 / 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

### **Selección y uso de un modelo de NLP para desarrollo de un protocolo de atención al cliente (2022 - 2023)**

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad Tecnológica / Universidad Tecnológica , Uruguay

Programa: Maestría Profesional en Ciencia de Datos

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Federico Detta Segal, Annia Díaz Trivel, Marta Jara Otero

País: Uruguay

Palabras Clave: NLP entaliment

### **Predicción de Propiedades de Sustancias y Materiales de Interés en la Industria Química a Través del Desarrollo de Métodos Computacionales**

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: Argentina

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**

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: Argentina

Palabras Clave: Procesamiento Paralelo Optimización

Areas de conocimiento:

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

Computación

### **Desarrollo de Métodos Analíticos y de Predicción para Informática Molecular Basados en Técnicas de Aprendizaje Automático y Visualización**

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina

Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación

Nombre del orientado: María Jimena Martínez

País: Argentina

Palabras Clave: Chemoinformatics Bioinformatica

Areas de conocimiento:

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

Información y Bioinformática

### **Programacion Genetica Aplicada al Ajuste de Datos Experimentales en Problemas de Bioinformática**

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina

Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación

Nombre del orientado: Rocío Cecchini

País: Argentina

Palabras Clave: Bioinformatica Algoritmos Evolutivos

Areas 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**

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur , Argentina

Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación  
Nombre del orientado: Axel Soto  
País: Argentina  
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**

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  
País: Argentina  
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**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas , Argentina  
Nombre del orientado: María Jimena Martinez  
País: Argentina  
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.

**Director de Beca de Formación de Posgrado Tipo I-CONICET.**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas , Argentina  
Nombre del orientado: Julieta Sol Dussaut  
País: Argentina  
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 técnicas de Machine Learning a la optimización de consultas en base de datos relacionales (2022)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Privado / Universidad Católica del Uruguay / Escuela de Postgrados , Uruguay  
Programa: Doctorado en Ingeniería  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Bernardo Rychtenberg  
País/Idioma: Uruguay,  
Palabras Clave: Aprendizaje Automático Bases de datos relacionales

**Generación automática de desafíos y ayudas para un lenguaje de programación funcional, utilizando**

### **inteligencia artificial aplicada (2022)**

Tesis de maestría  
Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Área Informática (PEDECIBA) , Uruguay  
Programa: Maestría en Informática  
Tipo de orientación: Cotutor  
Nombre del orientado: Bruno Cattáneo  
País/Idioma: Uruguay,  
Palabras Clave: NLP Modelos generativos

### **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  
Areas 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.

## **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° 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**

#### **Jornadas Tecnológicas: Inteligencia Artificial (2019)**

Encuentro  
Procesamiento del Lenguaje Natural: algunas aplicaciones  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: AGESIC Palabras Clave: Procesamiento de Lenguaje Natural Inteligencia Artificial

#### **Jornadas Nacionales de Telecomunicaciones (2019)**

Encuentro  
Inteligencia artificial: Historia, actualidad y desafíos futuros  
Uruguay  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Unidad Reguladora de Servicios Audiovisuales (URSEC) Areas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Inteligencia Artificial  
Difundido en Vera+ <http://veramas.com.uy/veramas/vod/51200>

#### **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

## CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL

En orden cronológico:

2023-(y continúa): participé en el desarrollo de la carrera de grado de Ingeniería en Inteligencia Artificial y Ciencia de Datos en la Universidad Católica del Uruguay (en evaluación ante el MEC). Actualmente ejerzo en forma interina (en forma simultánea con la dirección del Departamento de Informática) como director de dicha carrera. Las actividades incluyen el diseño curricular, estudio de reválidas, presentación documentación al MEC, gestión de evaluación del MEC de la carrera. Inicio: 2024.

2023: participé de la Mesa de diálogo "Inteligencia Artificial: oportunidades y desafíos de una estrategia Nacional" y la Mesa de diálogo "Elaboración de la Estrategia Nacional de Datos" en representación de la Universidad Católica del Uruguay,

2021-2023: lideré el desarrollo de la Maestría en Ciencia de Datos de la Universidad Católica del Uruguay (aprobada ante el MEC - Exp. 2021-2189 - DICTAMEN N° 739 22/11/2022). Las actividades incluyeron el diseño curricular, presentación documentación al MEC, gestión de evaluación del MEC de la carrera y apoyo a la dirección de la carrera. Inicio: 2023.

2020-(y continúa): participé en el desarrollo del nuevo plan de estudios de la carrera de grado de Ingeniería en Informática de la Universidad Católica del Uruguay (Aprobada MEC). Las actividades incluyeron el diseño curricular, estudio de reválidas, presentación documentación al MEC, gestión de evaluación del MEC de la carrera y Presentación a acreditación ARCUSUR (aprobada 2023). Inicio: 2021. Se continúa con el rediseño de los cursos de los años superiores.

## Información adicional

A partir de 2023 formo parte de la Asociación Uruguaya de Informática e Investigación Operativa (AUDIIO).

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>68</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	26
Completo	24
Resumen	2
<b>Trabajos en eventos</b>	40
<b>Libros y Capítulos</b>	2
Capítulos de libro publicado	2
<b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>	<b>2</b>
<b>Productos tecnológicos</b>	2
<b>EVALUACIONES</b>	<b>30</b>
<b>Evaluación de proyectos</b>	7
<b>Evaluación de eventos</b>	6
<b>Evaluación de convocatorias concursables</b>	12
<b>Jurado de tesis</b>	5

<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>12</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	<b>9</b>
Tesis de doctorado	6
Otras tutorías/orientaciones	2
Tesis de maestría	1
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</b>	<b>3</b>
Tesis de maestría	2
Tesis de doctorado	1