



---

---

**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL  
ESCUELA SUPERIOR DE CÓMPUTO**

**ESCOM**

*Trabajo Terminal*

**“Machine Learning aplicado al QSAR de los fármacos”**

2019-A032

*Presentan*

**Luis Enrique García Peregrino.  
Adolfo Erik Morales Castellanos.  
Esteban Sanchez Cuevas.**

*Directores*

**Dr. Rosaura Palma Orozco  
Dr. Jorge Luis Rosas Trigueros**

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL



ESCOM®

*Junio 2020*



**INSTITUTO POLITÉCNICO  
NACIONAL ESCUELA  
SUPERIOR DE CÓMPUTO  
SUBDIRECCIÓN ACADÉMICA**



No. de TT: 2019-A032

24 de Junio del 2020

Documento Técnico

## **“Machine Learning aplicado al QSAR para los fármacos”**

*Presentan*

**Luis Enrique García Peregrino.  
Adolfo Erik Morales Castellanos  
Esteban Sanchez Cuevas**

*Directores*

**Dr. Rosaura Palma Orozco  
Dr. Jorge Luis Rosas Trigueros**

### **Resumen**

En este reporte se explica todo lo realizado para la elaboración del sistema de información, que a partir de machine learning y QSAR puede obtener una predicción cuantitativa de la interacción entre compuesto y proteína.

Palabras clave: Bioinformática, Machine Learning, Modelado, Simulación.

## Advertencia

“Este documento contiene información desarrollada por la Escuela Superior de Cómputo del Instituto Politécnico Nacional, a partir de datos y documentos con derecho de propiedad y por lo tanto, su uso quedará restringido a las aplicaciones que explícitamente se convengan.”

La aplicación no convenida exime a la escuela su responsabilidad técnica y da lugar a las consecuencias legales que para tal efecto se determinen.

Información adicional sobre este reporte técnico podrá obtenerse en:

La Subdirección Académica de la Escuela Superior de Cómputo del Instituto Politécnico Nacional, situada en Av. Juan de Dios Bátiz s/n Teléfono: 57296000, extensión 52000.