

---

---

# Virtual Screening and Convolutional Neural Network

---

---

Guilherme Rafael Graeff

# Índice

- Aprendizado de Máquina
  - Redes Neurais Convolucionais
    - Entrada
    - Convolução
    - Pooling
    - Camada de rede neural *fully connected*
    - Retorno
- *Virtual Screening*
  - Docking
  - Scoring Function
  - Actives/Decoys/Targets
- Descrição dos conjuntos de Dados
  - DUD-E
  - Conjunto independente de testes
- Discussão dos Resultados
  - Validação da tarefa de virtual screening através dos *datasets*
    - DUD-E
    - Conjunto independente de testes
    -
- Conclusão/Desafios encontrados

# Aprendizado de Máquina - Redes Neurais Convolucionais

o que é uma rede neural?

o que é especificamente uma rede neural convolucional? Com quais problemas ela lida?

A aplicação deste tipo de rede a diferentes tipos de dado, até mesmo biológicos.

# Redes Neurais Convolucionais

Entrada

Retorno

# Redes Neurais Convolucionais

Convolução

# Redes Neurais Convolucionais

Pooling

# Redes Neurais Convolucionais

Fully Connected

# Virtual Screening

- Docking
- Scoring Function
- Actives/Decoys/Targets



# Descrição dos conjuntos de Dados

DUD-E

# Descrição dos conjuntos de Dados

Conjunto independente de testes

# Reflexões Sobre a Aplicação

Entendendo a utilização de um Grid

# Reflexões Sobre a Aplicação

Utilizando rede neural convolutiva

# Discussão dos resultados

Utilizando dados de treinamento

# Discussão dos resultados

Utilizando conjuntos de testes independentes

# Conclusão

Este trabalho apresenta o tema de Redes Neurais Convolucionais utilizadas em biologia estrutural, uma área multidisciplinar que envolve profundo conhecimento tanto sobre computação quanto sobre biologia. A ideia inicial do trabalho seria realizar a reprodução do artigo selecionado, a possibilidade de reprodução não obtiveram sucesso ao se deparar com a complexidade referente a esta tarefa. Então o trabalho tomou uma forma que busca contextualizar os colegas quanto a utilização de CNN em dados que possuam forma que permita a sua utilização, estudando um pouco o formato de entrada utilizado no trabalho de M. Ragoza [8]. O relatório é uma acaba se tornando uma ferramenta de reflexão, não só sobre o artigo objeto de estudo, mas também sobre o processo de aprendizagem, se referindo a dificuldade na realização do trabalho, sobre a mudança de planos, e sobre a apresentação e compreensão do conteúdo.

