

Implementación de redes neuronales convolucionales para el meta-análisis de acoplamientos moleculares de complejos proteína-ligando

Adrián Antonio Rodríguez Pié

2 de octubre de 1968

Universidad Nacional Autónoma de México

Sobre proteínas

Sobre inteligencia artificial

Sobre redes y neurona

Sobre proteínas

Orígen

Originado del griego *proteios* que significa "primario" o "de primer orden".

Orígen

Originado del griego *proteios* que significa "primario" o "de primer orden".

Definición (según la **RAE**)

Sustancia constitutiva de la materia viva, formada por una o varias cadenas de aminoácidos.

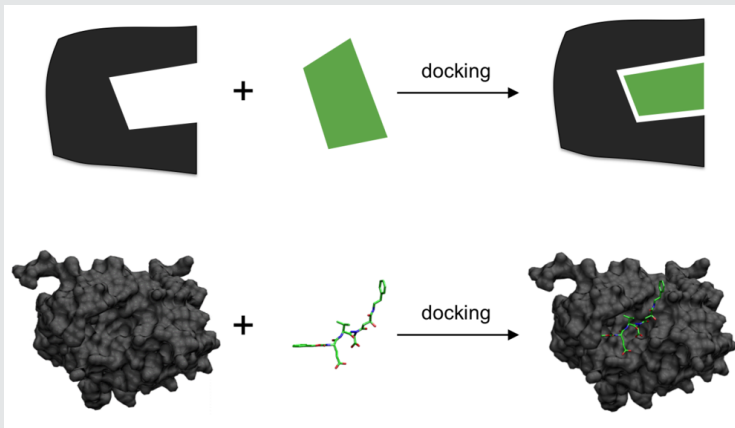
- Un **ligando** es una molécula que se une a otra molécula específica, en algunos casos mandando una señal en el proceso.

- Un **ligando** es una molécula que se une a otra molécula específica, en algunos casos mandando una señal en el proceso.
- Estos ligandos interactúan con moléculas objetivo (usualmente otras proteínas). Son a estas proteínas a las que llamamos **receptores** o **residuos**.

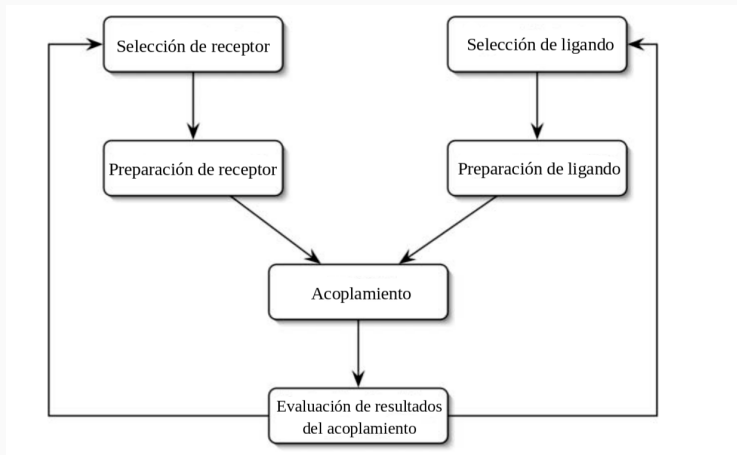
Docking

Acoplamiento molecular

Método cuyo objetivo es predecir los estados tanto estructurales, llamadas **poses**, como energéticos, prediciendo la afinidad del enlace entre moléculas.

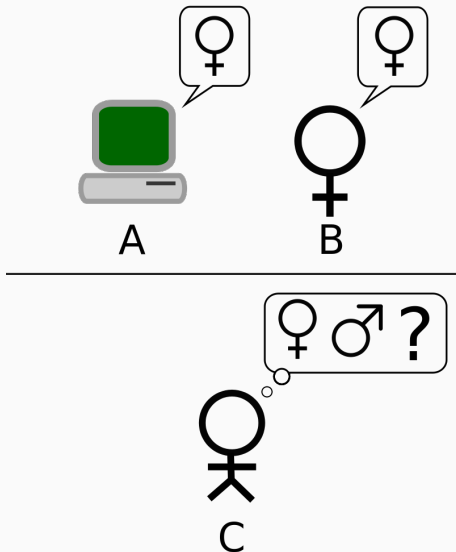


Pasos del docking



Sobre inteligencia artificial

La prueba de Turing



Inteligencia artificial

Agentes racionales que, mediante sensores, pueden percibir su entorno y actuar sobre él a partir de un sistema de decisión.

Inteligencia artificial

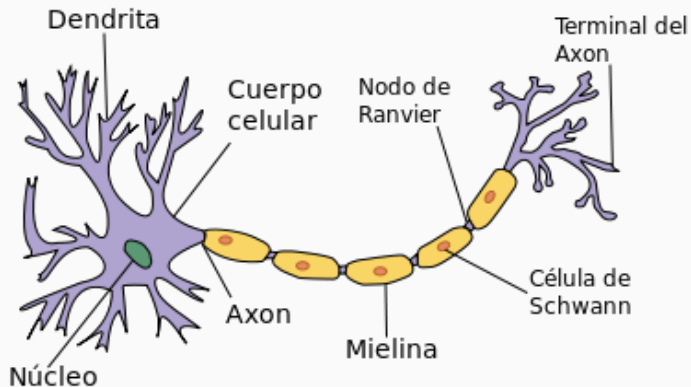
Agentes racionales que, mediante **sensores**, pueden percibir su **entorno** y actuar sobre él a partir de un sistema de decisión.

Agentes

Máquina compuesta por un conjunto finito de estados, cuyas transiciones están dadas por reglas de inferencias.

Sobre redes y neurona

Inspiración en la biología



Dados asdfasdf

asdasdfasdf asdfasd iqieid