

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

Adrián Antonio Rodríguez Pié

21 de noviembre de 2019

Universidad Nacional Autónoma de México

Sobre proteínas

Sobre inteligencia artificial

Sobre redes y neuronas

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.

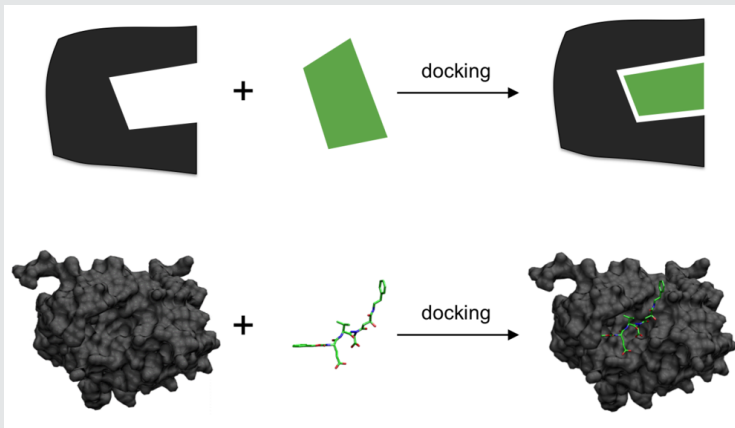
- Un **ligando** es una molécula que se une a otra molécula específica, en algunos casos mandando una señal en el proceso.

- 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**.

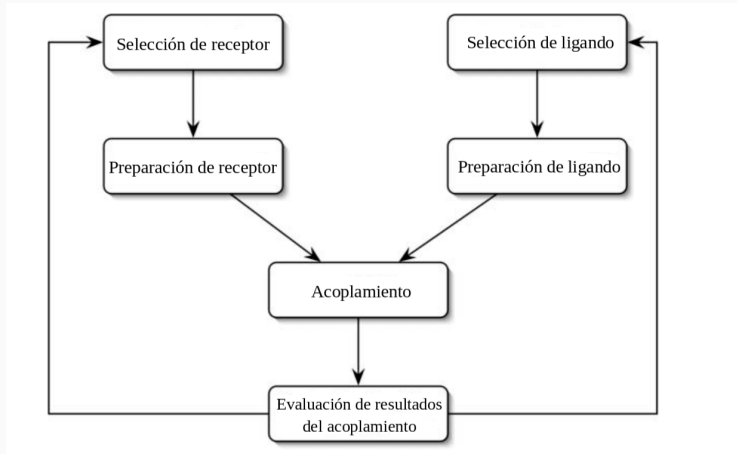
Docking

Acoplamiento molecular

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

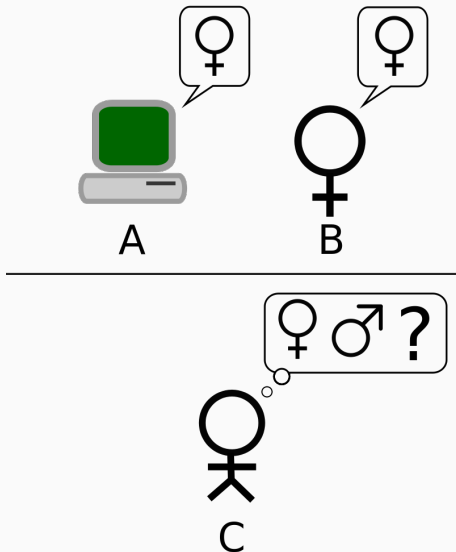


Pasos del docking



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

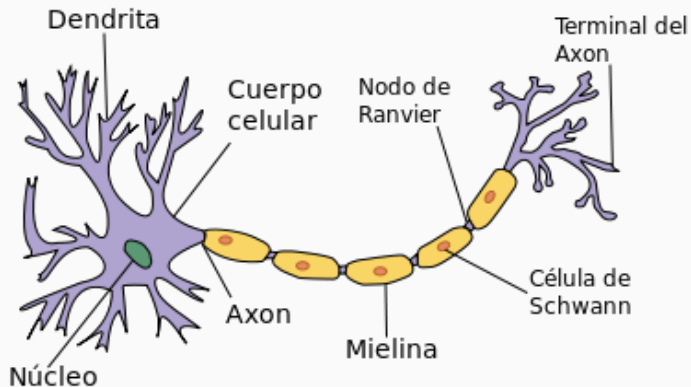
Agentes racionales que, mediante **sensores**, pueden percibir su **entorno** y actuar sobre él a partir de un sistema de decisión.

Agentes

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

Sobre redes y neuronas

Inspiración en la biología



El perceptrón

Definiciones

- $x \in \mathbb{R}^n$ (muestra)
- $w \in \mathbb{R}^n$ (vector de pesos)
- $\theta \in \mathbb{R}^n$ (umbral de activación)
- $y \in \{0, 1\}$ (valor real de la muestra)
- $\hat{y} \in \{0, 1\}$ (valor predicho de la muestra)

Por último, definimos z como una combinación lineal de x y w

$$z = w_1x_1 + \dots w_nx_n$$

Llamamos a z la *entrada de la red*.

El perceptrón

Definiciones

- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ (muestra)
- $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ (vector de pesos)
- $\theta \in \mathbb{R}^n$ (umbral de activación)
- $y \in \{0, 1\}$ (valor real de la muestra)
- $\hat{y} \in \{0, 1\}$ (valor predicho de la muestra)

Por último, definimos z como una combinación lineal de \mathbf{x} y \mathbf{w}

$$z = w_1x_1 + \dots w_nx_n$$

Llamamos a z la *entrada de la red*.

Función de activación

Definimos

$$\phi(z) = \begin{cases} 1 & \text{si } z \geq \theta \\ -1 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

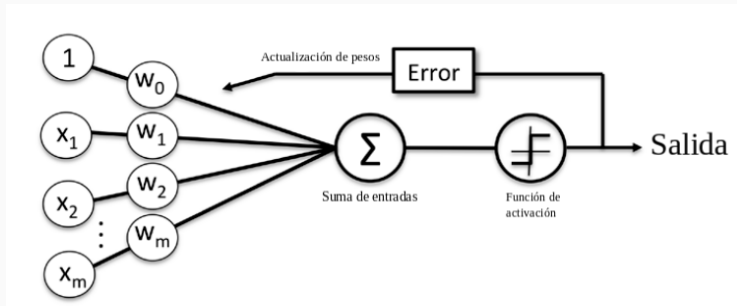
Pasos del perceptrón

1. Inicializar los pesos en cero o en números aleatorios cercanos a cero.
2. Para cada muestra de entrenamiento x , realizar lo siguiente:
 - a) Calcular el valor de salida \hat{y} ($\hat{y} = \phi(z)$).
 - b) Actualizar los pesos en w a partir del error Δw .Con Δw dado por:

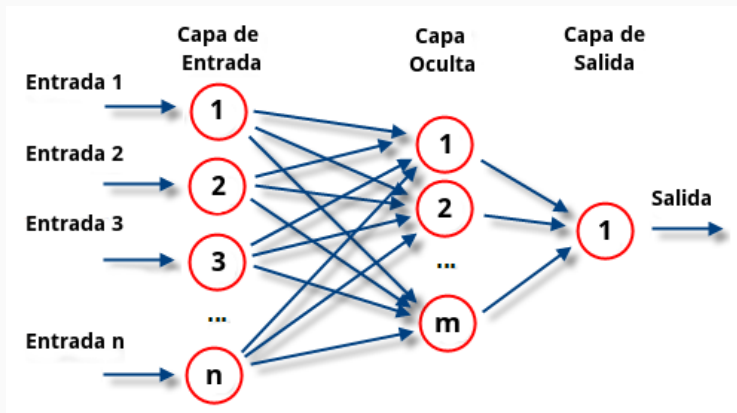
$$\Delta w = \eta(y - \hat{y})x$$

Donde $\eta \in [0, 1]$ es el *índice de aprendizaje*.

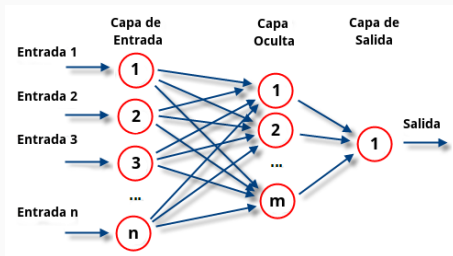
Diagrama del perceptrón



El perceptrón multicapa



El perceptrón multicapa

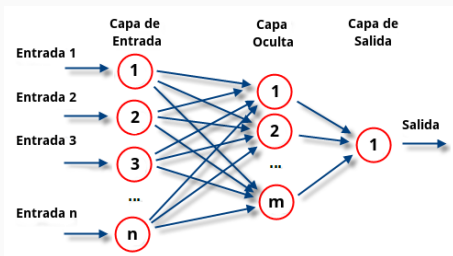


Función de costo o error

Definimos la función de costo J para el perceptrón multicapa como la suma de los errores cuadrados entre la salida calculada y el valor real:

$$J(w) = 1/2n \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i^2)$$

El perceptrón multicapa



Función de costo o error

Definimos la función de costo J para el perceptrón multicapa como la suma de los errores cuadrados entre la salida calculada y el valor real:

$$J(w) = 1/2n \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i^2)$$

¡Es diferenciable!

Descenso por el gradiente

