Informe - Clasificación de Péptidos Antimicrobianos

# Descripción del problema

Encontrar nuevas moléculas antimicrobianas que puedan ser usadas contra bacterias resistentes a los antibióticos actuales se ha tronado en un problema farmacéutico mundial. Los péptidos antimicrobianos han tomado importancia en el desarrollo de nuevos antibióticos, dado que tienen grandes propiedades que actúan como medio de defensa en contra de enfermedades producidas por microorganismos.

Existe una gran cantidad de péptidos presentes en diferentes partes como plantas, mamíferos, insectos, entre otros. Como hay tantos agentes presentes en la naturaleza y medio ambiente, su identificación se ha convertido en unos de los más grandes retos de la inteligencia artificial con miras a construir soluciones que apoyen la investigación y desarrollo de nuevas moléculas antimicrobianas.

# Metodología implementada

Para efectos de lograr identificar los péptidos antimicrobianos se implementaron tres diferentes técnicas de machine learning teniendo en cuenta:

1. Uso de datos de entrenamiento con información de péptidos antimicrobianos y no antimicrobianos, adicionalmente datos de validación independientes a los de entrenamiento.
2. División de los datos de entrenamiento en dos, un subconjunto de datos utilizado netamente para entrenar los modelos de machine learning y otro para probar que tan efectivos son dichos modelos clasificando los péptidos.
3. Selección de características, teniendo en cuenta que se dispone de 1760 características de los péptidos, encontrar cuales de ellas describen mejor a uno con propiedades microbianas.
4. Comparar resultado de ejecutar los modelos con las 1760 características y solo con aquellas que describen mejor las propiedades microbianas.
5. Balanceo de los péptidos antimicrobianos y no antimicrobianos, con el fin de que sean comparables la dos clases y así obtener resultados más confiables.
6. Normalización de la información con el fin de que cada una de las características sean homogéneas entre sí.
7. Evaluar cada métrica otorgada por las técnicas de machine learning para concluir sobre cada una de ellas y su poder de clasificación.

# Análisis y discusión de los resultados

## Prueba 1. Bosques aleatoreos

### Técnica de machine learning

Bosques aleatorios o random forest por su nombre en inglés fue usado como clasificador

### Hiperparámetros ajustados

### Análisis de métricas

### Tiempos de entrenamiento

# Conclusiones

# Referencias

[1]. Péptido antimicrobiano. <https://es.wikipedia.org/wiki/P%C3%A9ptido_antimicrobiano#Clasificaci%C3%B3n>