

Optimización de parámetros de difusión en red para la priorización de drogas

- Bruno Kaufman,^{1,2} Ariel Chernomoretz^{1,3}

¹*Fundación Instituto Leloir*

²*Instituto de Investigaciones Bioquímicas de Buenos Aires*

³*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires*

El aprendizaje automático ha sido utilizado ya por muchos años para descubrir nuevos propósitos para drogas ya existentes. El enfoque de este método es proponer qué drogas podrían tener una interacción desconocida con una dada proteína (target). Utilizando redes de similaridad entre drogas, gracias al aprendizaje semisupervisado se puede extender el conocimiento de drogas cuyas interacciones con el target ya con conocidas (denominadas drogas "semilla") para obtener estas drogas nuevas.

En este trabajo, se propone difundir sobre una red que combina distintas medidas de similaridad química entre drogas, además de una medida de similaridad basada en las interacciones en común que las drogas tienen con proteínas target. La pregunta que se responde es cómo obtener el balance correcto entre las distintas redes para formar la red híbrida cuya información contribuida sea óptima para el propósito de la priorización. Además de optimizar estos parámetros, se busca obtener la difusión en red más conveniente y el punto de corte más correcto para recomendar un conjunto de drogas.

En distintas componentes de la red se obtiene distinto rendimiento. Exploramos esta variabilidad en torno a la estructura en red de estas componentes, además de la información que se tiene disponible para entrenar el algoritmo en cada caso.