



## Deep Learning Aplicado al Diseño de Compuestos Bioactivos

Carácter del curso	ELECTIVO
Semestre en que se dicta	PAR (Segundo Hemisemestre)
Número de créditos	7
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 4 hs Clases prácticas: 5 hs
Previaturas	NO TIENE
Cupo	30

### **Estructura Responsable:**

Área Bioinformática-DETEMA, Facultad de Química, UdelaR.

### **Docente Responsable:**

Margot Paulino

### **Docentes colaboradores**

**Pablo García**

Jorge Cantero

Andrés Camilo Ballesteros

### **Objetivos:**

- Introducir al estudiante en el uso de inteligencia artificial aplicada al diseño de compuestos bioactivos.
- Profundizar el uso de técnicas de aprendizaje automático de la categoría de Deep Learning, introduciendo al estudiante en la teoría de redes neuronales, diferentes arquitecturas de redes y su aplicación a diferentes etapas del diseño de compuestos bioactivos
- Entrenar al estudiante en las principales herramientas de aplicación de estas técnicas y entornos de ejecución de las mismas

### **Contenido:**

#### **TEÓRICO:**

<b>Fecha</b>	<b>MA-SGC-2-3</b>	<b>V.01</b>
Res. 91 CFQ 25/09/2025	Página 1 de 5	

- 1 Introducción al diseño de compuestos bioactivos
- 2 Introducción a las redes neuronales, teoría y algoritmos básicos y su aplicación a problemas de regresión y clasificación.
  - Introducción a las redes neuronales. Redes neuronales biológicas.
  - Construcción de una red neuronal, tipos de capas, dimensionalidad (ancho y profundidad), visualización de la red.
  - Redes neuronales artificiales, forward propagation.Algoritmos básicos :
  - Gradient Descent
  - Backpropagation
    - Vanishing Gradient
  - Funciones de activación
- 3 Regularización y optimización (hyperparameters tuning)
  - Métodos de evaluación (Mean Squared Error, Binary Cross Entropy, Categorical Cross Entropy)
  - Hyperparameters tuning
  - Inicialización
  - Regularización Dropout
  - Normalización batch
- 4 Métodos de optimización
  - Gradient Descent
  - Stochastic Gradient Descent
  - Momentum
  - Variable and Adaptive Learning Rates
  - Adam
- 5 Convolutional Neural Networks
  - Concepto de convolución y kernels comúnmente utilizados
  - Max Polling
  - Aplicación de las redes convolucionales a estructuras 3D e imágenes
- 6 Redes neuronales deep, otras arquitecturas de uso específico:

- RNN Recurrent Neural Networks
- LSTM Long Short Term Memory
- 7 Introducción a los frameworks de mayor uso en la implementación de redes neuronales deep aplicadas a diseño de compuestos bioactivos:
  - Sci-kit learn
  - Keras
  - Tensorflow
- 8 GAN Generative adversarial networks
  - Modelos generativos.
  - Teoría de las GANs
  - Construcción de GANs
  - Autoencoders y Variational Auto Encoders
- 9 Despliegue en producción:
  - Transfer Learning
  - Estándares de transferencia de modelos ONNX
  - Desplegar en Docker containers
  - Entrenar usando GPUs y TPUs
  - Desplegar a la nube (GoogleColab, AzureML y Kaggle)

### **PRÁCTICO:**

- 1) Herramientas básicas para Deep Life Sciences
- 2) Introducción a MoleculeNet
- 3) Molecular Fingerprints
- 4) Creando modelos con TensorFlow
- 5) Introduction a las Convoluciones para Grafos (2) Molecular Featurizations
- 6) Interpretability de modelos
- 7) Entrenamiento Avanzado de Modelos
- 8) Unsupervised Embeddings para Moléculas
- 9) Predicción de Ki de Ligandosa una proteína
- 10) Modelado de interacciones proteína-ligando, con u sin atomic convolutions
- 11) Entrenando una Generative Adversarial Network
- 12) Chemical Screens en grandes volúmenes de datos

### **Bibliografía:**

- 1) Demystifying Deep Convolutional Neural Networks. Adam Harley <https://www.cs.ryerson.ca/~aharley/neural-networks/>
- 2) Ramsundar, B. (2018). *Molecular machine learning with DeepChem* (Doctoral dissertation, Stanford University).
- 3) Haghightalari, M., Vishwakarma, G., Altarawy, D., Subramanian, R., Kota, B. U., Sonpal, A., ... & Hachmann, J. (2019). Chemml: A machine learning and informatics program package for the analysis, mining, and modeling of chemical and materials data. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, e1458.
- 4) Wen, Ming, et al. "Deep-learning-based drug-target interaction prediction." *Journal of proteome research* 16.4 (2017): 1401-1409.
- 5) Baskin, I. I. (2020). The power of deep learning to ligand-based novel drug discovery. *Expert Opinion on Drug Discovery*, 1-10.
- 6) Lin, E., Lin, C. H., & Lane, H. Y. (2020). Relevant Applications of Generative Adversarial Networks in Drug Design and Discovery: Molecular De Novo Design, Dimensionality Reduction, and De Novo Peptide and Protein Design. *Molecules*, 25(14), 3250.
- 7) Colby, S. M., Nuñez, J. R., Hodas, N. O., Corley, C. D., & Renslow, R. R. (2019). Deep learning to generate in silico chemical property libraries and candidate molecules for small molecule identification in complex samples. *Analytical chemistry*, 92(2), 1720-1729.
- 8) Senior, Andrew W., et al. "Improved protein structure prediction using potentials from deep learning." *Nature* 577.7792 (2020): 706-710.
- 9) Bronstein, M. M., Bruna, J., LeCun, Y., Szlam, A., & Vandergheynst, P. (2017). Geometric deep learning: going beyond euclidean data. *IEEE Signal Processing Magazine*, 34(4), 18-42.
- 10) ODENA, Augustus. Semi-supervised learning with generative adversarial networks. *arXiv preprint arXiv:1606.01583*, 2016.
- 11) GUI, Jie, et al. A review on generative adversarial networks: Algorithms, theory, and applications. *arXiv preprint arXiv:2001.06937*, 2020.

### Frameworks:


Keras: [https://keras.io/getting\\_started/](https://keras.io/getting_started/)

Tensorflow: <https://www.tensorflow.org/learn>

Scikit-learn: [https://scikit-learn.org/stable/user\\_guide.html](https://scikit-learn.org/stable/user_guide.html)

### Modalidad del Curso:

	Teórico	Práctico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria	No	Sí		

	<h2>Deep Learning Aplicado al Diseño de Compuestos Bioactivos</h2>
---	--

Modalidad Flexible	Sí**	Sí**		
--------------------	------	------	--	--

\*\*Todas las clases se dictarán en modalidad virtual a través de la plataforma de Zoom. Los parciales deben realizarse de manera presencial.

**Régimen de ganancia:**

El curso se evaluará mediante dos pruebas parciales, las cuales representarán un 60% del puntaje total. Además, los estudiantes deberán realizar entregables sobre las clases prácticas. Estas entregas representarán un 40% del puntaje total. Puntaje total: 60 puntos.

De acuerdo al resultado global obtenido en los dos parciales, los entregables y la asistencia a clases, el estudiante obtendrá el estado de:

- Aprobado (entre 18 y 29 puntos)
- Exonerado (30 o más puntos)
- A examen (menos de 18 puntos)
- Perdido (asistencia a las clases prácticas no alcanza el 80% del total)

Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente con el docente responsable: [margot@fq.edu.uy](mailto:margot@fq.edu.uy).

<b>Fecha</b>	<b>MA-SGC-2-3</b>	<b>V.01</b>
Res. 91 CFQ 25/09/2025	Página 5 de 5	