



SciForum  
MOL2NET

## Modelos PTMLIF en la predicción de sistemas de nanopartículas decoradas con fármacos.

Viviana F. Quevedo-Tumaili <sup>1,2</sup>, Bernabé Ortega-Tenezaca <sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> RNASA-IMEDIR, Computer Science Faculty, University of A Coruña, 15071, A Coruña, Spain;

<sup>2</sup> Universidad Estatal Amazónica UEA, Puyo, Pastaza, Ecuador;

### Abstract:

Los modelos PTMLIF (Perturbation Theory, Machine Learning and Information Fusion) son la combinación de la teoría de la perturbación con el aprendizaje automático y la fusión de la información. Estos modelos se usaron en esta investigación para predecir la probabilidad de que los complejos nanopartícula decoradas con fármacos (Drugs-decorated Nanoparticles ó DDNP) tengan actividad antipalúdica en este caso de estudio contra el Plasmodium. Esta enfermedad es la causa de la malaria en los seres humanos que se transmite a través de la picadura del mosquito hembra del género Anopheles. Se fusionó 107 características de entrada y 249.990 ejemplos aproximadamente desde la base de datos ChEMBL. El mejor modelo de clasificación fue proporcionado por método Random Forest, con solo 27 características seleccionadas de fármacos / compuestos y nanopartículas en todas las condiciones experimentales consideradas. El alto rendimiento del modelo se demostró mediante el área media bajo las características operativas del receptor (AUC) en un subconjunto de prueba con un valor de  $0,9921 \pm 0,000244$  (validación cruzada de 10 veces). En este trabajo también se demostró el poder de la fusión de información de las características experimentales de fármacos / compuestos y nanopartículas para la predicción de la actividad antipalúdica de nanopartículas-compuestos.

**Keywords:** Machine Learning, Perturbation Theory, Information Fusion, Nanoparticle, Random Forest.

### References:

1. Dutta, P.P.; Bordoloi, M.; Gogoi, K.; Roy, S.; Narzary, B.; Bhattacharyya, D.R.; Mohapatra, P.K.; Mazumder, B. Antimalarial silver and gold nanoparticles: Green synthesis, characterization and In Vitro study. *Biomed. Pharmacother.* 2017,91, 567–580.
2. Quevedo-Tumaili, V.F.; Ortega-Tenezaca, B.; González-Díaz, H. Chromosome gene orientation inversión networks (GOINs) of plasmodium proteome. *J. Proteome Res.* 2018,17, 1258-1268.
3. Ferreira da Costa, J.; Silva, D.; Caamaño, O.; Brea, J.M.; Loza, M.I.; Munteanu, C.R.; Pazos, A.; García-Mera, X.; González-Díaz, H. Perturbation theory/machine learning modelo f ChEMBL data for dopamine targets: Docking, synthesis, and Assay of new L-prolyl-L-leucyl-glycinamide peptidomimetics. *ACS Chem. Neurosci.* 2018, 9, 2572-2587
4. Kleandrova, V.V.; Luan, F.; González-Díaz, H.; Ruso, J.M.; Speck-Planche, A.; Cordeiro, M.N.D.S. Computational tool for risk assessment of nanomaterials: Novel QSTR-perturbation

model for simultaneous prediction of ecotoxicity and cytotoxicity of uncoated and coated nanoparticles under multiple experimental conditions. *Environ. Sci. Technol.* 2014, 48, 14686–14694.

5. Kleandrova, V.V.; Luan, F.; González-Díaz, H.; Ruso, J.M.; Melo, A.; Speck-Planche, A.; Cordeiro, M.N.D.S. Computational ecotoxicology: Simultaneous prediction of ecotoxic effects of nanoparticles under different experimental conditions. *Environ. Int.* 2014, 73, 288-294.
6. Papadatos, G.; Overington, J.P. The ChEMBL database: A taster for medicinal chemists *Future Med. Chem.* 2014, 6, 361–364.