

**3P  
08**      **PREDICCIÓN DE LAS CONDICIONES DE  
CRISTALIZACIÓN DE PROTEÍNAS APLICANDO  
TÉCNICAS DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL**

---

*Pérez-Priede, M.<sup>1</sup>, García-Granda, S.<sup>1</sup>, Puente, J.<sup>2</sup>, Coz, J. J. Del<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo.  
Facultad de Química, 33006 Oviedo.

<sup>2</sup> Departamento de Informática, Universidad de Oviedo  
Campus de Viesques s/n 33204 Gijón

---

La cristalización de grandes moléculas es el primer paso para su determinación estructural mediante técnicas de difracción de Rayos X. Sin embargo, la obtención de cristales de macromoléculas es un proceso muy complejo, que hoy en día sigue siendo un desafío.

Un problema como éste puede ser abordado aplicando técnicas de Inteligencia Artificial[1] En el trabajo que se presenta, se pone de manifiesto que los Algoritmos de Aprendizaje llegan a predecir, con un cierto margen de fiabilidad, condiciones de cristalización; reduciendo de forma considerable el número de experimentos de laboratorio.

El porcentaje máximo de aciertos alcanzado por los sistemas de aprendizaje en diversos experimentos realizados, es superior en todos los casos, a la clase mayoritaria (la probabilidad de éxito que se tendría ensayando las condiciones de cristalización que en el pasado, permitieron cristalizar el mayor número de proteínas pertenecientes a una familia determinada)

[1] Pérez-Priede, M., "Aplicación de Algoritmos de Aprendizaje a la determinación de las condiciones de cristalización de macromoléculas", Proyecto Fin de Carrera de Ingeniería Técnica Informática (Diciembre-2003)