

8. CONCLUSIONES

8.1. CONSECUCCIÓN DE LOS OBJETIVOS

En este trabajo se ha desarrollado una aplicación para la optimización de fármacos a partir de datos obtenidos previamente mediante un DOE utilizando redes neuronales como alternativa al método de regresión habitualmente utilizado en el ámbito del laboratorio.

Se vio el problema que suponía el escaso número de datos disponibles para el entrenamiento y validación de la red neuronal por lo que se han comparado dos métodos distintos de validación. En el primero se entrenaba la red neuronal con una parte de los datos y se validaba con los datos restantes. En el segundo método se entrenaba la red neuronal con todos los datos y se validaba con el método de bootstrap donde para obtener el error que comete la red neuronal en la predicción de datos se halla mostrando a la red muchas remuestras con reposición de los datos disponibles.

Se vio que con el método de validación con patrones de validación se obtenían resultados que diferían mucho de una red a otra demostrando así los problemas que supone la insuficiencia de datos para una red neuronal. En este caso, se aplicaría el método de bootstrap en la validación de la red neuronal. Si los datos experimentales que se muestran a la red neuronal son una buena representación de la población, este método hallará el error real que cometerá la red neuronal en la predicción de nuevos datos.

A continuación, se realizó una prueba de la optimización de un fármaco cuyos resultados de la optimización de todas las salidas de fármacos aplicando el método de regresión fueron facilitados por el Grupo de Investigación en Sistemas de Liberación Controlada de Medicamentos, de la Universidad de Sevilla. Aquí se vio que los resultados diferían de los resultados obtenidos utilizando una red neuronal debido a la característica no lineal de la red neuronal.

Por último, una vez demostrado la viabilidad del uso de redes neuronales en la optimización de fármacos, se creó una aplicación sencilla para realizar esta tarea de optimización. En esta aplicación se puede elegir la arquitectura de un perceptrón multicapa (número neuronas de entrada, de salida y ocultas) y los parámetros del algoritmo aprendizaje de backpropagation que se adapte a las necesidades de cada problema. Además, esta aplicación permite elegir el método de verificación de la red entre el método bootstrap o empleando patrones de validación. Con esta aplicación se podría simplificar la labor del farmacéutico a la hora de optimizar los fármacos.

De esta manera se han cumplido los objetivos marcados al inicio del proyecto, aunque quedan abiertas futuras líneas de trabajo que a continuación se detallan.

8.2. NUEVAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Una futura línea de trabajo de interés sería la realización de pruebas con el objeto de confirmar la veracidad de las predicciones realizadas al emplear las redes neuronales en la optimización de fármacos.

Otra línea de investigación podría ser el estudio del uso de otras arquitecturas de redes neuronales y de algoritmos de entrenamiento. Algunas de estas arquitecturas y algoritmos se explicaron brevemente en el apartado de introducción a las redes neuronales. Sin embargo, el abanico donde elegir es mucho más amplio.

Otra posible continuación sería aplicar el método de bootstrap de otras formas. En este trabajo, este método se empleó en los datos en la verificación de la red neuronal. Sin embargo, bootstrap se puede utilizar en otras situaciones como por ejemplo se puede aplicar el remuestreo con reposición a los datos durante el entrenamiento con el objetivo de minimizar el sobreentrenamiento o se puede aplicar de diversas formas para crear diferentes arquitecturas de redes neuronales.

Finalmente y dados los buenos resultados obtenidos en el presente trabajo, podría ser de interés el desarrollo de una aplicación profesional, basándose en el desarrollo piloto de este trabajo que pueda ser empleado para su uso cotidiano en el laboratorio.