

TREFEMAC 2021

XVIII Taller Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia
Condensada

28 de Junio - 2 de Julio

Modalidad virtual

Comité Organizador:

- Sergio A. Cannas, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Francisco A. Tamarit, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Silvia Menchón, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Lucas Barberis, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Juan I. Perotti, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina

Comité Científico:

- Celso Manuel Aldao - Universidad Nacional de Mar del Plata
- Mario Campo - Universidad Nacional de La Pampa
- Carlos A. Condat - Universidad Nacional de Córdoba
- Marisa Alejandra Frechero - Universidad Nacional del Sur
- Tomás Sebastián Grigera - Universidad Nacional de La Plata
- Héctor O. Martín - Universidad Nacional de Mar del Plata
- Bernardo Gabriel Mindlin - Universidad de Buenos Aires
- Silvina M. Ponce Dawson - Universidad de Buenos Aires
- Verónica I. Marconi - Universidad Nacional de Córdoba
- Claudio F. Narambuena - UTN, Regional San Rafael
- Fabricio Sánchez-Varretti - UTN, Regional San Rafael
- Daniel A. Vega - Universidad Nacional del Sur
- Damián H. Zanette - Centro Atómico Bariloche

	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes
9:00	Conexión				
9:15	Apertura	Conexión	Conexión	Conexión	Conexión
9:30	Antonio Ramírez Pastor	Constantino Tsallis	Federico Vázquez	Paula Bergero	Elena Rufell Fiori
10:30	dos Santos	Cicchini	R. Puzzo	Kowalski	Albornóz
10:50	Kolton	Pinto	Döppler	V.Rojas	Caballero
11:10	Break	Break	Break	Break	Break
11:20	G. Albarracín	Giménez	Boari	Cornes	Bustingorry
11:40	Bab	Balenzuela	Guisoni	Fabrizius	Ferrero
12:00	Guruciaga	B. Lemarchand	Montani	Sarratea	Hoyuelos
12:20	Break	Break	Break	Break	Break
14:30	Bringa	Di Muro	Cristina Masoller	Cwilich	Pablo Gleiser
14:50	Borzi	Revelli		Luque	
15:10	Iroulart	Pedraza		Benítez	
15:30	Break	Break	Break	Break	Cierre
15:40	Martín	Neñer	Uribarri	Rodríguez	
16:00	Almeira	Ferreya	G.Garay	Sevlever	
16:20	Torres	Madrid	Hernández	Tomás	
16:40	Campo	Break	Break	Break	
17:00	Sesión de microcharlas (1-14)	Sesión de microcharlas (15-29)	Sesión de microcharlas (30-43)	Sesión de microcharlas (44-58)	Invitada
					Corta
17:45					Microcharla



I F E G



SECyT . UNC
Secretaría de Ciencia y Tecnología
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CORDOBA



Facultad
de Matemática,
Astronomía, Física
y Computación



PAPERS IN PHYSICS
www.papersinphysics.org



Prosecretaría
de Informática



the air and meteorological variables of environmental interest. Finally, a hybrid model is proposed based on the results, combining the models that worked best according to different specific scenarios. Neural networks were found to be superior in almost all cases, except when there is a lack of other related variables and the gaps consist of one or two consecutive missing data. Hybrid models performed very well and showed promise as viable solutions to the problem of lack of data in time series of environmental measurements when a historical database is available to train them.

Contacto: Ariel Scagliotti, afscaglio@gmail.com

27. Optimización de redes basadas en grafo para clasificación compuestos químicos según bioactividad

Villafañe R¹, Luchi A¹, Peruchena N¹, Angelina E¹

¹ Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste (CONICET)

Las redes neuronales basadas en grafo (GNN) han ganado importancia estos últimos años debido a su versatilidad para trabajar en datos no estructurados. La complejidad de los datos no estructurados ha traído desafíos en el campo del aprendizaje profundo que tradicionalmente se ha definido para espacios euclídeos. Al respecto, recientemente han surgido propuestas para lidiar con estos inconvenientes, como son las redes basadas en grafo aumentadas con mecanismos de atención y con *gates*.

El campo de la química, y en particular, de la química computacional no ha sido ajena a estos avances, en los cuales las redes basados en grafos han sido utilizados para predicción de propiedades químicas, diseño molecular, estudio de reacciones, entre otras.

En particular, el docking molecular es la técnica más popular para cribado virtual de compuestos, es decir, a partir de una gran base de datos, es capaz de ir seleccionando compuestos en etapas, para tener futuros candidatos a posibles fármacos/drogas. En este sentido, la exactitud obtenida mediante el docking molecular es menor comparado a otras técnicas computacionales (dinámica molecular, QM/MM, etc). Sakai et al. (Sakai, 2021) demostraron recientemente que, basándose solamente en la estructura 2D de compuestos, no sólo se pueden estudiar las propiedades físico-químicas sino también la bioactividad de compuestos.

En este trabajo se presentan los resultados correspondientes a la optimización de una red convolucional basada en grafo (GCN) vanilla y otras redes aumentadas con mecanismos de atención y con *gate*. El set de datos corresponde a ligandos clasificados como activos e inactivos, con respecto a su poder inhibitorio, frente a la Cruzipaina, una proteína perteneciente a la familia de las cisteín-proteasas. Estos compuestos se encuentran en formato SMILES o formato de texto, a partir del cual se construye el grafo correspondiente que es la entrada para la red neuronal.

Los datos pertenecientes a AID1478 presentan un fuerte desbalance de compuestos activos e inactivos, para lo cual en el training set se realizó un *random undersampling* para dar como resultado una proporción de 1:2 activos/inactivos.

Durante el entrenamiento de la red, se realizó la optimización de varios hiperparámetros, a saber: número de capas convolucionales, tasa de aprendizaje, tamaño del batch, número de épocas. La optimización del algoritmo se detuvo mediante *early stopping* para evitar sobreajuste. Los resultados obtenidos superan a los obtenidos mediante métodos computacionales más clásicos como el docking en exactitud (aprox. 50 % vs aprox. 80 %) y tiempo de cómputo (días vs min).

Referencias:

Sakai, M; Nagayasu, K; Shibui, N; Andoh, C; Takayama, K; Shirakawa, H; Kaneko, S. 2021. *Prediction of pharmacological activities from chemical structures with graph convolutional neural networks*. Scientific Reports 11:525.