

INFORME CIENTIFICO DE BECA

Legajo N°:

BECA DE Estudio

PERIODO 2014

1. APELLIDO: Cravero

NOMBRES: Firoella

Dirección Particular:

Localidad:

Dirección electrónica (donde desea recibir información): f

A menudo debe hacerse una selección entre distintos materiales de modo de satisfacer requisitos de rendimiento y/o costo [1]. Al abordar un problema de diseño, el ingeniero pensará primero en las propiedades que desea para un material específico. Aunque el enfoque típico en el diseño de nuevos materiales ha sido empírico, actualmente se avanzó mucho en el conocimiento de las relaciones entre la estructura molecular de un material y sus propiedades, lo que conduce a la capacidad de predecir las propiedades del material, previo a su síntesis [2]. Estos avances condujeron a mejorar la capacidad de predecir las propiedades del material previo a su síntesis, que a su vez se traduce en enormes ahorros en tiempo y costo. Sin embargo, no es fácil conseguir estas predicciones ya que las variables que intervienen son muy complejas desde un punto de vista cuantitativo y cualitativo. De este modo, el diseño y la síntesis de nuevos materiales con propiedades específicas y novedosas han resultado en uno de los campos más dinámicos de la ciencia moderna [1].

En el mundo actual, los plásticos o polímeros están en todas partes y su uso se ha incrementado casi 20 veces en los últimos 30 años. Los polímeros han sido modificados con el fin de mejorar su utilidad y en consecuencia se han desarrollado polímeros sintéticos [3]. Estudiar la posibilidad de estimar o predecir las propiedades mecánicas de un "polímero virtual" (molécula de diseño) antes de la síntesis es nuestro objetivo. Este dominio ha sido poco investigado debido a su complejidad. Sin embargo, sería una herramienta muy útil para describir el perfil de aplicación del nuevo polímero, ahorrando así tiempo y dinero. Muchos investigadores han adoptado enfoques computacionales para predecir comportamientos de materiales [4]. En particular, la técnica de QSPR (Quantitative Structure- Property Relationship) relaciona parámetros específicos de la estructura de la molécula (descriptores moleculares) con la propiedad estudiada mediante el uso de un conjunto de datos de moléculas y valores de propiedad experimentales.

Esta técnica comenzó a ser utilizada para predecir propiedades de materiales en los años 80 [4]. Desde entonces, esta área de estudio ha sido muy compleja ya que no sólo depende de las propiedades intrínsecas, sino de la historia del material (método de síntesis, procesamiento, y preparación para los ensayos) y en especial el perfil mecánico ha sido muy poco explorado. Por lo tanto, es importante para el desarrollo de la técnica QSPR, generar descriptores que tengan en cuenta todos estos aspectos, es decir, las propiedades fisico-químicas del material y descriptores relacionados con la síntesis, procesamiento y la preparación de las muestras, de modo de obtener modelos más predictivos, útiles e

interpretables [4]. Por otra parte, al abordar la problemática de los polímeros sintéticos, aparece la dificultad del diseño molecular ya que la representación de estructuras poliméricas no se puede definir claramente a diferencia de las moléculas pequeñas. Entre otros factores a considerar se encuentran: la estructura (por ejemplo, longitud de la cadena, tacticidad y segmentos de monómero) y los de la composición (contenido de monómeros, mezclas y aditivos) [5]. Por estas razones, también se convierte en un desafío generar un conjunto de datos asociados que sean confiables.

Nuestra hipótesis para el presente plan de trabajo, en el contexto de las investigaciones de nuestro grupo, es que la aplicabilidad de nuestros desarrollos en el marco de modelado QSPR para diseño de fármacos y los primeros aportes sobre polímeros puede trasladarse de manera efectiva al campo del diseño de materiales, siempre que las dificultades presentes en el cálculo de descriptores moleculares para materiales poliméricos puedan ser salvadas a través de técnicas de cómputo de descriptores especialmente orientadas a este tipo de macromoléculas. En tal sentido, creemos que la clave para lograr estos desafíos consiste en incorporar información relativa no sólo a la estructura de estas moléculas, sino también a su proceso de síntesis, historia térmica y la variabilidad de los pesos moleculares que presentan estos materiales, entre otros aspectos que definen su perfil de aplicación.

[1]. Handbook of Materials Selection. Editor: Myer Kutz, first ed., John Wiley & Sons, New York, United States, 2002.

[2]. D.W. Van Krevelen, Properties of Polymers, fourth ed., Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2009.

[3]. Polymer Blends Handbook, Editor: L.A. Utracki, first ed., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 2002.

[4]. T. Le, V. C. Epa, F. R. Burden, and D. A. Winkler. "Quantitative Structure-Property Relationship Modeling of Diverse Materials Properties". Chem. Rev. 112, (2012) 2889–2919.

[5]. N. Adams and U. S. Schubert. "From Data to Knowledge: Chemical Data Management, Data Mining, and Modeling in Polymer Science". J. Comb. Chem. 6, (2004) 12-23.

A continuación se presenta el cronograma estipulado para estas investigaciones, como se había mencionado oportunamente, se enmarcan en el contexto de realización de una tesis doctoral (proyectada a 4 años). El informe sobre las actividades del primer año ya fueron comunicadas a la CIC.

Plan de actividades:

Actividad 1: Revisión bibliográfica (1º y 2º trimestre)

Actividad 2: Realización de cursos de posgrado (1º, 2º, 3º, 4º, 5º, 6º, 7º, 8º, 9º y 10º trimestre)

Actividad 3: Estudio de principales algoritmos disponibles y sus implementaciones más difundidas (herramientas computacionales). (2º, 3º, 4º y 5º trimestre)

Actividad 4: Modelado de elongación a la rotura, introduciendo relaciones físico-químicas asociadas a ductilidad y resistencia, teniendo en cuenta la dispersión de pesos moleculares. (4º, 5º, 6º y 7º trimestre)

Actividad 5: Evaluación del desempeño de la nueva propuesta. Comparación con los modelos previos. Validación. (6º, 7º, 8º y 9º trimestre)

Actividad 6: Análisis de otros descriptores moleculares no considerados hasta el momento, en especial aquellos que consideran al material con su dispersión de peso molecular. Posible desarrollo de nuevos modelos en base a los mismos. (8º, 9º, 10º y 11º trimestre)

Actividad 7: Modelado de propiedades mecánicas no estudiadas hasta el momento (derivadas del ensayo de tensión y de impacto), ópticas y eléctricas de polímeros termoplásticos siguiendo la metodología propuesta en 3, 4 y 5. (10º, 11º, 12º y 13º trimestre)

Actividad 8: Validación de los modelos. (12º, 13º, 14º y 15º trimestre)

Actividad 9: Redacción de la tesis doctoral y defensa. (14º, 15º y 16º trimestre)

3. OTROS DATOS (Completar lo que corresponda)

BECA DE ESTUDIO: 1º AÑO: *Fecha de iniciación:*

2º AÑO: *Fecha de iniciación:* 01/04/2015

BECA DE PERFECCIONAMIENTO: 1º AÑO: *Fecha de iniciación:*

2º AÑO: *Fecha de iniciación:*

4. INSTITUCIÓN DONDE DESARROLLA LOS TRABAJOS

Universidad y/o Centro: Planta Piloto de Ingeniería Química (UNS-CONICET)

Facultad:

Departamento:

Cátedra:

Otros:

Dirección: Calle: Camino La Carrindanga Nº: Km 7

Localidad: Bahía Blanca *CP:* 8000 *Tel:* 0291-4861700

5. DIRECTOR DE BECA

Apellido y Nombres: Díaz, Mónica Fátima

Dirección Particular:

Localidad:

Dirección electrónica:

6. EXPOSICIÓN SINTÉTICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO. (Debe exponerse la orientación impuesta a los trabajos, técnicas empleadas, métodos, etc., y dificultades encontradas en el desarrollo de los mismos, en el plano científico y material).

Durante el periodo de beca (01-04-2015 / 30-09-2015) se realizaron las actividades propuestas en el plan de trabajo para el segundo año según el cronograma (ver Item 2), a saber:

-Modelado de elongación a la rotura, introduciendo relaciones fisico-químicas asociadas a ductilidad y resistencia, teniendo en cuenta la dispersión de pesos moleculares.

-Evaluación del desempeño de la nueva propuesta. Comparación con los modelos previos. Validación.

-Análisis de otros descriptores moleculares no considerados hasta el momento, en especial aquellos que consideran al material con su dispersión de peso molecular. Posible desarrollo de nuevos modelos en base a los mismos.

Búsqueda bibliográfica y revisión de algoritmos existentes, son actividades que se mantienen a lo largo de todo el periodo de beca (Item 2), ya que es de total importancia conocer el estado del arte y mantenerse actualizado en la bibliografía que se está empleando [1-9].

En relación al modelado QSPR de elongación a la rotura y su evaluación, fue iniciada durante el primer año de beca y continúa, se utilizaron métodos tradicionales de

selección de descriptores basado en Algoritmos Genéticos, como DELPHOS [9], una herramienta desarrollada en nuestro grupo, del cual se han publicado dos trabajos [10, 11]. Avanzando con esta metodología de trabajo se incorporó el uso de una nueva herramienta de analítica visual, también desarrollada en el grupo, llamada VIDEAN [12], que facilita la tarea de construcción y evaluación de los modelos QSPR. Con el objetivo de maximizar la interpretabilidad fisicoquímica del modelo, minimizar la cardinalidad, y mejorar el rendimiento estadístico. Se utiliza esta herramienta que, al ser interactiva, facilita el aporte del conocimiento experto en la construcción de modelos. Un análisis comparativo de las ventajas de trabajar con este tipo de herramientas frente a la forma clásica se presentó en el Congreso Argentino de Polimeros SAP 2015 [13] y IVCAB2C [14]. Además se estudió el módulo elástico con esta herramienta [15] y su modelo de predicción QSPR es analizado y contrastado con el modelo propuesto por Palomba [11], obteniendo en su rendimiento mejores resultados. Estos trabajos se encuentran listados en la sección 7.5.2 y 7.5.3.

En cuanto al análisis de nuevos descriptores, en los nuevos modelos propuestos se han tenido en cuenta descriptores que hasta el momento no se habían utilizado en la caracterización de polímeros como es el caso de la familia de los ETA (Extended Topochemical Atom) que son Índices Atómicos Topoquímicos Extendidos que conservan información sobre tipo de átomo y enlace (numero atómico y valencia).

Además, comenzó a estudiarse una nueva clase de descriptores obtenidos a través de la técnica CODES-TSAR [16], como una alternativa a las metodologías tradicionales de modelado QSAR. Esta nueva metodología consiste en el empleo de técnicas de transformación y proyección entre dominios, evitando el proceso de selección de descriptores mediante optimización combinatorial (muy costoso). El primer paso de la metodología CODES-TSAR consiste en describir estructuralmente cada molécula mediante su código SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification). Este código ingresa a la herramienta CODES, la cual genera una matriz dinámica, que contiene información sobre la molécula estabilizada. Posteriormente, esta matriz numérica ingresa a la herramienta TSAR encargada de realizar una reducción de dimensionalidad a través de una red neuronal, método conocido como autoencoder [17]. Generando así un nuevo conjunto, fuertemente reducido, de características que capturan información derivada de la estructura molecular de los compuestos. Esta metodología mostró buen desempeño en el estudio de compuestos químicos de interés farmacéutico o biológico [18], pero su efectividad no había sido testeada en el diseño de polímeros sintéticos hasta ahora. Con el fin de contrastar el desempeño de la técnica se estudió la tensión a la rotura se apreció que la información capturada por los descriptores inferidos por el autoencoder no resultaba suficiente para describir la propiedad. Lo cual podría deberse a la diversidad de moléculas que integran una base de datos de polímeros ya que se conoce que uno de los principales problemas del uso del autoencoder en el modelado QSPR reside en que hay un descriptor para cada átomo de la molécula, restringiendo así la aplicación de la metodología a conjuntos de moléculas que pertenecen a una misma familia química [16]. Sin embargo, para modelos que combinan descriptores provenientes de la metodología CODES-TSAR así como de parámetros del ensayo de tensión y otros incluidos por criterio experto (modo en que fueron obtenidos los modelos anteriores) los resultados son prometedores. Todos estos experimentos realizados para el estudio de la resistencia a la rotura [19] fueron presentados en el Congreso Argentino de Ingeniería Química (CAIQ2014), como puede verse en la sección 7.5.4

Bibliografía:

[1]. Handbook of Materials Selection. Editor: Myer Kutz, first ed., John Wiley & Sons, New York, United States, 2002.

- [2]. Todeschini, R. & Consonni, V. (2010) (eds.), In: *Molecular Descriptors for Chemoinformatics: Volume I: Alphabetical Listing / Volume II: Appendices, References, Volume 41*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, German
- [3]. Paul F. Holmes, Mike Bohrer, and Joachim Kohn (2008) "Exploration of polymethacrylate structure-property correlations: Advances towards combinatorial and high-throughput methods for biomaterials discovery" *Prog Polym Sci.* 2008 August; 33(8): 787–796. doi:10.1016/j.progpolymsci.2008.05.002.
- [4] Afantitis, A., Melagraki, G., Makridima, K., Alexandridis, A., Sarimveis, H., Igllesi-Markopoulou, O. (2005) "Prediction of high weight polymers glass transition temperature using RBF neural networks", *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 716, 193–198, 2005.
- [5] Baumann, K., Ecker, G.F., Mestres, J., Schneider, G. (2010) "Molecular Informatics - From Models to Molecules and Systems", *Molecular Informatics*, 29:1-2, pp. 9. Wiley, 2010.
- [6] Buckley, J.J. & Hayashi, Y. (1994) "Fuzzy neural networks: A survey Fuzzy Set and Systems, 1994- Elsevier, 66, 1-13, 1994.
- [7] Ren, J., Lee, S.D., Chen, X., Kao, B., Cheng, R., Cheung, D. (2009) "Naïve Bayes Classification of Uncertain Data". Ninth IEEE International Conference on Data Mining, no. 60703110, pp. 944-949.
- [8] Zhao T., Pei, B., Zhao, S. Chen, H. & Li, C. (2013) "Distance-Based Feature Selection from Probabilistic Data" *Lecture Notes in Computer Science Volume 7923*, 2013, pp 282-288.
- [9]. A.J. Soto, R.J. Cecchini, G.E. Vazquez, I. Ponzoni. "Multi-Objective Feature Selection in QSAR/ QSPR using a Machine Learning Approach", *QSAR & Combinatorial Science*, Vol. 28, No. 11-12, (2009a) 1509-1523.
- [10] Palomba, D.; Cravero, F.; Vazquez, G.E.; Diaz, M. (2014) "Prediction of tensile strength at break for linear polymers applied to new materials development" *Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales Sam-Conamet/Iberomat/Materia 2014*. Santa Fe, Argentina.
- [11] Palomba, D.; Cravero, F.; Vazquez, G.E.; Diaz, M. (2014) "Prediction of tensile modulus for linear polymers applied to new materials development" *Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales Sam-Conamet/Iberomat/Materia 2014*. Santa Fe, Argentina.
- [12] Martínez M.J., Ponzoni I., Díaz M.F., Vazquez G.E., Soto A.J. "Visual Analytics in Cheminformatics: User-Supervised Descriptor Selection for QSAR Methods", *Journal of cheminformatics*, 7 (39), (2015). doi: 10.1186/s13321-015-0092-4.
- [13] Cravero, F.; Martínez, M.J.; Ponzoni, I.; Vazquez, G.E.; Díaz, M.F. (2015) "Desarrollo de modelos QSPR asistido por técnicas de analítica visual para la predicción de propiedades mecánicas de polímeros lineales". *Simposio Argentino de Materiales (SAP2015)*. Octubre, 2015. Santa Fe, Argentina.
- [14] Cravero, F.; Martínez, M.J.; Díaz, M.F.; Vazquez, G.E.; Ponzoni, I. (2015) "An integral framework for QSAR Modelling using Computational Intelligence and Visual Analytics". *VI Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (6CAB2C)*. Octubre, 2015. Bahía Blanca, Argentina.
- [15] Cravero, F.; Martínez, M.J.; Ponzoni, I.; Vazquez, G.E.; Díaz, M.F. (2015) "Predicción del módulo elástico para polímeros lineales aplicando analítica visual y aprendizaje automático". *Simposio Argentino de Materiales (SAP2015)*. Octubre, 2015. Santa Fe, Argentina.
- [16] Dorronsoró, I., Chana, A., Abasolo, M.A., Castro, A., Gil, C., Stud, M., Martínez, A. (2004). *CODES/Neural Network Model: a Useful Tool for in Silico Prediction of Oral Absorption and Blood-Brain Barrier Permeability of Structurally Diverse Drugs*, *QSAR Comb. Sci.*, 23, 89.

- [17] Bengio, Y. (2009) Learning Deep Architectures for AI, Foundations and Trends in Machine Learning, 2, 1.
- [18] Guerra, A., Páez, J.A., Campillo, N.E. (2008). Artificial Neural Networks in ADMET Modeling: Prediction of Blood – Brain Barrier Permeation. QSAR Comb. Sci., 27, 586.
- [19] Cravero, F.; Vazquez, G.E.; Díaz, M.F.; Ponzoni, I. (2015) "Modelado QSPR de Propiedades Mecánicas de Materiales Poliméricos empleando Técnicas de Reducción de Variables basadas en algoritmos de Aprendizaje Automático". VIII Congreso Argentino de Ingeniería Química (CAIQ2015) y III Jornada Argentina de Seguridad de Procesos (3 JASP). Agosto, 2015. Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

7. TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN REALIZADOS O PUBLICADOS EN EL PERIODO.

7.1. PUBLICACIONES. Debe hacerse referencia, exclusivamente a aquellas publicaciones en la cual se halla hecho explícita mención de su calidad de Becario de la CIC. (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha aclaración no debe ser adjuntada. Indicar el nombre de los autores de cada trabajo, en el mismo orden que aparecen en la publicación, informe o memoria técnica, donde fue publicado, volumen, página y año si corresponde; asignándole a cada uno un número. En cada trabajo que el investigador presente -si lo considerase de importancia- agregará una nota justificando el mismo y su grado de participación.

1. "Modelado QSPR de Propiedades Mecánicas de Materiales Poliméricos empleando Técnicas de Reducción de Variables basadas en Algoritmos de Aprendizaje Automático" (20 pag).

F. Cravero, G.E. Vazquez, M.F. Díaz., I. Ponzoni

Congreso Argentino de Ingeniería Química. Agosto, 2015. CABA, Argentina.

2. "An Integral Framework for QSAR Modelling using Computational Intelligence and Visual Analytics" (1 Pag).

F. Cravero, M.J. Martínez, M.F. Díaz, G.E. Vazquez, I. Ponzoni.

Enviado a Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Molecular. Octubre, 2015. Bahía Blanca.

3. "Desarrollo de modelos QSPR asistido por técnicas de analítica visual para la predicción de propiedades mecánicas de polímeros lineales" (6 pag.).

F. Cravero, M.J. Martínez, I. Ponzoni, G.E. Vazquez, M.F. Díaz

Enviado a Simposio Argentino de Materiales (SAP2015). Octubre, 2015. Santa Fe, Argentina.

4. "Predicción del módulo elástico para polímeros lineales aplicando analítica visual y aprendizaje automático" (6 pag.).

F. Cravero, M.J. Martínez, I. Ponzoni, G.E. Vazquez, M.F. Díaz

Enviado a Simposio Argentino de Materiales (SAP2015). Octubre, 2015. Santa Fe, Argentina.

7.2. PUBLICACIONES EN PRENSA. (Aceptados para su publicación. Acompañar copia de cada uno de los trabajos y comprobante de aceptación, indicando lugar a que ha sido remitido. Ver punto 7.1.)

7.3. PUBLICACIONES ENVIADAS Y AUN NO ACEPTADAS PARA SU PUBLICACIÓN. (Adjuntar copia de cada uno de los trabajos. Ver punto 7.1.)

7.4. PUBLICACIONES TERMINADAS Y AUN NO ENVIADAS PARA SU PUBLICACIÓN.
(Adjuntar resúmenes de no más de 200 palabras)

7.5. COMUNICACIONES. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores)

7.6. TRABAJOS EN REALIZACIÓN. (Indicar en forma breve el estado en que se encuentran)

Se continua con el modelado QSPR de propiedades mecánicas empleando Técnicas de Reducción de Variables basadas en Algoritmos de Aprendizaje Automático, con el fin de entender la metodología de trabajo y el enfoque utilizado por CODES-TSAR que tan bien funcionó en el diseño de drogas y ha arrojado resultados interesantes en las primeras aproximaciones que hemos realizado con Polímeros. Continuamos con diferentes ensayos estadísticos más complejos que puedan arrojar una idea más clara acerca de las potencialidades y limitaciones de la técnica en el campo de los materiales poliméricos.

8. OTROS TRABAJOS REALIZADOS. (Publicaciones de divulgación, textos, etc.)

8.1. DOCENCIA

8.2. DIVULGACIÓN

8.3. OTROS

9. ASISTENCIA A REUNIONES CIENTÍFICAS. (Se indicará la denominación, lugar y fecha de realización y títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas)

"II Congreso Internacional de Ciencia y Tecnología de la Provincia de Buenos Aires", que tendrá lugar en Octubre de 2015 en la ciudad de La Plata.

10. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC. (Señalar características del curso o motivo del viaje, duración, instituciones visitadas y si se realizó algún entrenamiento)

11. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO

12. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO

13. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES (Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período)

ORGANIZACIÓN DE REUNIONES Y ENCUENTROS CIENTÍFICOS:

En esta ocasión se participa al igual que en 2014, en la organización y coordinación de los Workshops Pre Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (6 CAB2C 2015), como parte del Comité Organizador, en el marco de una de las actividades realizadas por el Grupo de Estudiantes de Bioinformática y Biología Computacional de Argentina (RSG-Argentina, miembro parte del Student Council (SC) perteneciente a la International Society for Computational Biology (ISC B)).

Así como también se integra el Comité Organizador General del 6to Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (6to CAB2C 2015). Dichos eventos se realizarán en Octubre de 2015 en la ciudad Bahía Blanca.

FUTURAS ASISTENCIAS A REUNIONES CIENTÍFICAS: Además de lo mencionado en los puntos anteriores, durante los próximos meses comprendidos en el período de la beca se asistirá a los siguientes congresos:

"VI Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional" (6to CAB2C), que tendrá lugar en Octubre de 2015 en la ciudad de Bahía Blanca.

"XI Simposio Argentino de Argentina" (11SAP), que tendrá lugar en Octubre de 2015 en la ciudad de Sante Fe.

FUTUROS CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO:

En el marco del "XI Simposio Argentino de Argentina" se participará del taller Pre-Simposio:

El Taller consistirá de cuatro módulos:

Módulo 1. "Fundamentos de la Caracterización Reométrica-Reológica de Polímeros". Profesor: Dr. Julio Deiber, INTEC (UNL - CONICET)

Módulo 2. "Caracterización Estructural de Polímeros y Estructuras Poliméricas mediante Dispersión de Radiación a Bajo Ángulo". Profesor: Dr. Marcelo Ceolin, INIFTA (UNLP - CONICET)

Módulo 3. "Aplicaciones de NMR en Polímeros". Profesora: Dra. Griselda Barrera Galland - Instituto de Química (Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil)

Módulo 4. "Caracterización de Polímeros por Cromatografía Líquida de Exclusión con Detección Múltiple". Profesor: Dr. Gregorio Meira, INTEC (UNL - CONICET)

También se participará del Workshop "A day with (the) Julia (language)" perteneciente a uno de los eventos satélites al 6to CAB2C.

14. TITULO DEL PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PERIODO DE PRORROGA O DE CAMBIO DE CATEGORÍA (Deberá indicarse claramente las acciones a desarrollar)

PARA CAMBIO DE CATEGORIA (PERFECCIONAMIENTO) : "Modelado predictivo de sistemas complejos para informática molecular: aplicado al desarrollo de Nuevos Descriptores Moleculares para propiedades mecánicas de Materiales Poliméricos"

Con el objetivo de llevar a cabo un estudio de posgrado (Doctorado en Ciencias de la Computacion-UNS) se proyecta el plan de estudio que se adjunta al pedido de cambio de categoría (CIC-SIGEVA y en papel).

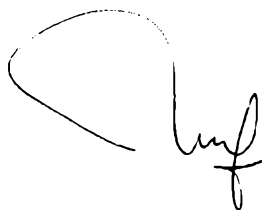
Condiciones de Presentación

A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Becario, la que deberá incluir:

- a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 14).
- b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, deben agregarse al término del desarrollo del informe

- c. Informe del Director de tareas con la opinión del desarrollo del becario (en sobre cerrado).

Nota: El Becario que desee ser considerado a los fines de una prórroga, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.



Firma del Director

Monica Felissia Díaz
Bahía Blanca, 05/10/15



Firma del Becario

Fiorella Cravero
Bahía Blanca 05/10/15