

Informática Molecular: Polímeros modelados por Distribución de Peso

INTRODUCCIÓN

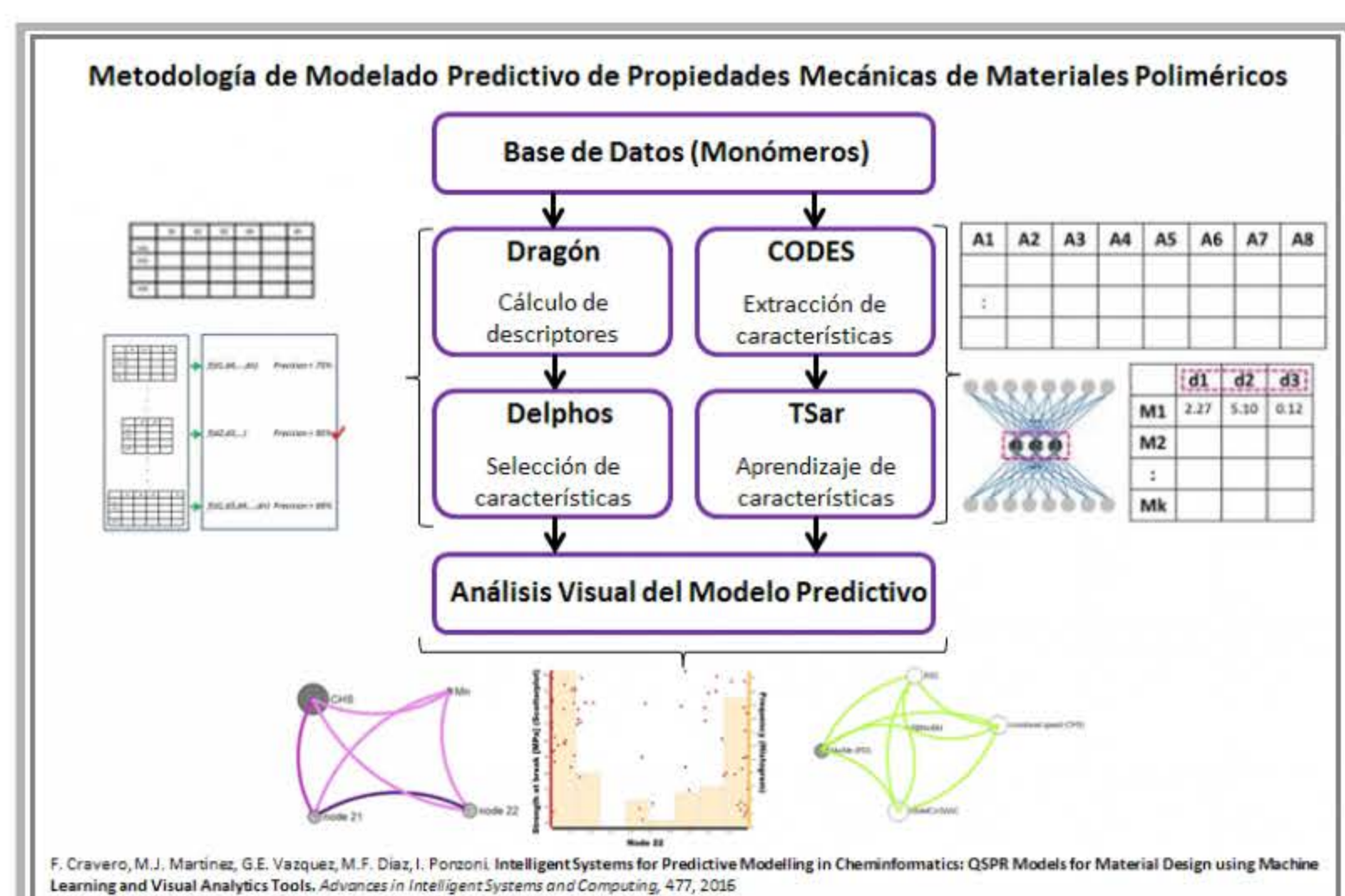
Estimar propiedades en moléculas virtuales, previo a su síntesis, permite tomar decisiones del diseño del nuevo material, ahorrando tiempo y costos (etapa experimental). Hasta ahora se trabajó con modelos moleculares sintéticos (monómero) del material polimérico (Fig 1). En esta tesis se propone trabajar sobre la polidispersión (PD) de pesos moleculares buscando modelos predictivos más realistas.

OBJETIVOS

Diseñar algoritmos de aprendizaje automático que asistan a científicos en el descubrimiento, análisis y estudio de propiedades moleculares en materiales poliméricos polidispersos. Incluir el concepto de polidispersión (PD). Modelar representantes de los diferentes pesos moleculares. Resolver el problema asociado de selección de características con incertidumbre, obteniendo un modelo más realista, interpretable y robusto.

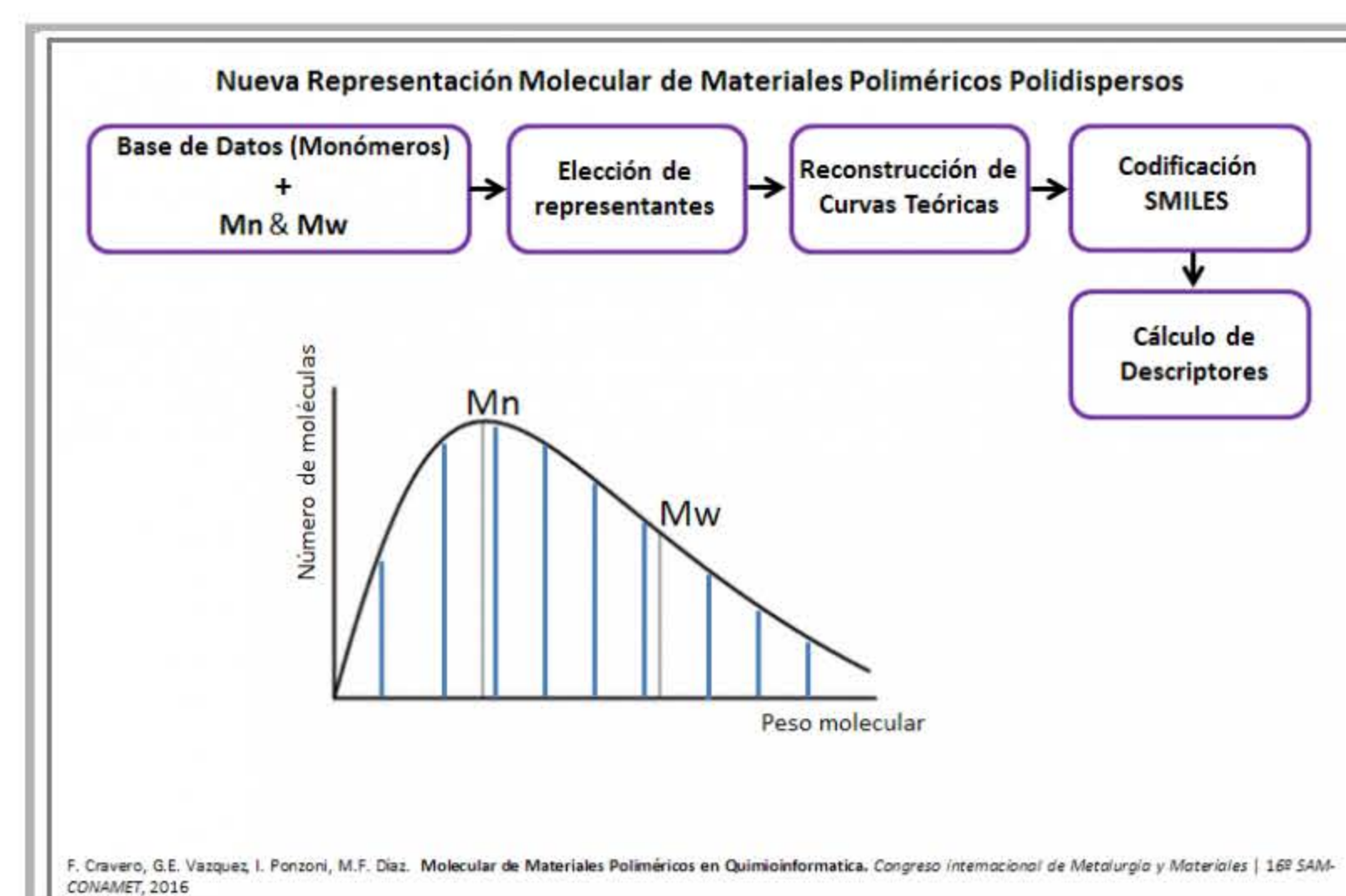
METODOLOGÍA

- Generación de la base de datos (código SMILES)
- Reconstrucción de las curvas de PD (lognormal)
- Representación molecular (base de datos polidispersa)
- Cálculo de descriptores moleculares y selección de los mejores
- Modelo Predictivo de regresión
- Validación e interpretación



Cravero Fiorella

Lic. en Bioinformática (FI-UNER)
PLAPIQUI (UNS-CONICET)
Dra. Mónica F. Díaz
Dr. Ignacio Ponzoni
TICs, Electrónica e Informática
fcravero@plapiqui.edu.ar



RESULTADOS

Se construyeron las curvas teóricas de PD para 77 materiales poliméricos a partir de los valores de Mn y Mw. Se consideraron 10 representantes (deciles). Debido al enorme PM (promedio 200000 g/mol), los graficadores más potentes (Ej. HyperChem) no logran resolver PM mayores a 20000 g/mol. Este problema se está abordando con codificación SMILES, para alcanzar el PM deseado (Fig. 2).

CONCLUSIONES

Se logró identificar la unidad repetitiva del medio de una molécula polimérica automáticamente, para polimerizar hasta un PM objetivo dentro de la curva de PD. Esta representación más realista de un material, supera ampliamente la visión limitada de modelado sobre el monómero o trímero. La interpretabilidad del modelo aumenta al considerar la dispersión de pesos, característica de estos materia