

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 Rufeil 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	Fabricius	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
17:45					Corta
					Microcharla

CONICET



Universidad
Nacional
de Córdoba

I F E G



SECyT . UNC

Secretaría de Ciencia y Tecnología

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CORDOBA

FAMAF

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 bache, 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.

Contacto: Roxana Villafañe, noelia0618@gmail.com

28. Las propiedades mecánicas de las mitocondrias dependen de la integridad del citoesqueleto

Fernández Casafuz A B¹, De Rossi M C², Bruno L¹

¹ Instituto de Cálculo, FCEN, CONICET-UBA

² Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

Las mitocondrias son organelas involucradas en gran cantidad de procesos, como la generación de ATP y la mantención del equilibrio homeostático de la célula entre otros. Los requerimientos funcionales de las células están correlacionados con cambios en la dinámica, morfología y posicionamiento mitocondrial. Estudios recientes han demostrado que el citoesqueleto regula la dinámica, posición y función de las mitocondrias dentro de la célula. Por ejemplo, los filamentos de actina facilitan la fisión mitocondrial, mientras que los microtúbulos actúan como vías de transporte mediante la acción de motores moleculares. Sin embargo, todavía se desconocen los mecanismos específicos por los cuales esta interacción altera la función mitocondrial y falta explorar si existe una relación causal entre la disrupción del citoesqueleto y la disfunción observada en algunas patologías vinculadas a estas organelas.

En este trabajo exploramos cómo la integridad del citoesqueleto y la fuerza que ejercen los motores asociados a esas redes afectan las propiedades mecánicas de las mitocondrias. Utilizamos un enfoque experimental en el cual obtenemos imágenes de microscopía confocal de mitocondrias en células melanóforas de *Xenopus laevis* en condición control y al tratarlas con latrunculina, droga que despolimeriza los filamentos de actina. Mediante el análisis de estas imágenes recuperamos las formas de mitocondrias individuales y calculamos la longitud de persistencia, parámetro asociado a la rigidez flexural de la organela. Los resultados obtenidos demuestran que la rigidez de las mitocondrias en ausencia de actina es mayor, sugiriendo que los contactos con esta red constituyen un factor clave en la regulación de la morfología de estas organelas, afectando probablemente su dinámica.

Contacto: Agustina Belén Fernández Casafuz, afcasafuz@gmail.com

29. Liposoma bioindicador de un contaminante emergente

San Román Napoli F^{1 2}, Acebal C^{1 2}, Sierra M B^{1 2}

¹ Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur

² Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca

Los *liposomas* son estructuras vesiculares altamente organizadas constituidos por lamelas o bicapas lipídicas concéntricas que encierran un interior acuoso y pueden ser estudiados como vehículos de transporte adecuados para medicamentos, proteínas, enzimas o ADN.

Los liposomas formados por fosfolípidos pueden ser utilizados como *membranas modelo* para estudiar el comportamiento de membranas biológicas debido a que muestran similitudes como pueden ser su estructura, composición y permeabilidad selectiva [1]. Por lo tanto, las membranas lipídicas también pueden utilizarse para predecir los efectos de la exposición de seres vivos a *contaminantes de preocupación emergente (CECs)* [2-4]. Los CECs son compuestos bioacumulables de distinta naturaleza química que pueden ser potencialmente tóxicos para el ambiente y han pasado desapercibidos por falta de información o de técnicas adecuadas para su identificación. Entre ellos se encuentran productos como: fármacos, plaguicidas, cosméticos, artículos de limpieza y aseo personal entre otros.

El liposoma se convierte en un *bioindicador* que brindará información sobre la toxicidad e interacción de los CECs con las membranas celulares, detectando la acción de contaminantes emergentes sobre