G²RINS: una representación digital de polímeros para acelerar el descubrimiento computacional de materiales poliméricos

Dr. Gervasio Zaldívar

Tandon School of Engineering, New York University (EEUU)

- **Martes 24 de Noviembre a las 14 horas**
- **Aula: RFP 3er piso DQIAQF/INQUIMAE**
- **Streaming por el canal de YouTube del DQIAyQF**

Resumen

Existe un considerable interés en desarrollar modelos de inteligencia artificial generativos para el diseño de nuevos materiales poliméricos. Uno de los principales retos para el desarrollo de estos modelos es diseñar representaciones digitales que reflejen la naturaleza estocástica y jerárquica de los polímeros. Los polímeros están usualmente formados por un ensamble de moléculas que varían en peso molecular, composición, secuencia de monómeros y arquitectura, resultando en correspondientes distribuciones estadísticas. A pesar de afectar fuertemente el comportamiento del material, este carácter estocástico no es capturado por las representaciones digitales de polímeros actualmente disponibles. Asimismo, los materiales poliméricos relevantes en la industria a menudo se crean utilizando protocolos complejos de síntesis que incluyen varios pasos de polimerización, agregando una capa de complejidad a la hora de representar su naturaleza jerárquica.

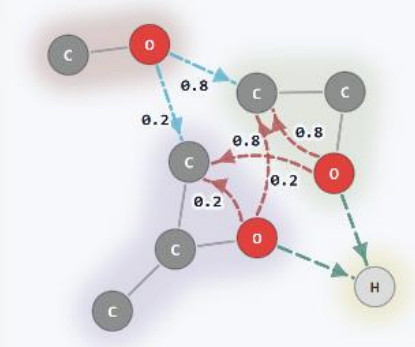
En esta charla se presentará G²RINS, una representación de línea y de grafo que captura la naturaleza estocástica y la microestructura jerárquica de los polímeros. La notación establece reglas gramaticales para la descripción adecuada de los polímeros considerando su camino sintético. G²RINS es además un código abierto (https://github.com/depablolab/g2rins) implementado en Python que toma una representación de texto provista por el usuario, realiza una verificación sintáctica y semántica, la convierte en un grafo con capacidades generativas, y utiliza el grafo para generar un ensamble de moléculas representativo del material. De esta manera, G²RINS se constituye en una representación múltiple (texto, grafo y ensamble) con el potencial de acelerar significativamente el descubrimiento computacional de polímeros a través de su conexión con la búsqueda por similitud eficiente, la automatización de simulaciones computacionales y el desarrollo de modelos de aprendizaje automático generativos.

G²RINS

Texto

```
{[] [<|.8|]CCO[>|.8|], [<|.2|]CC(C)O[>|.2|]; CO[>]; [<][H] []}|log_normal(1400,1.15)|
```

Grafo



Ensamble

