

**FIGURELLA CRAVERO**

Dra. en Cs. de la Computación

fiocravero7@gmail.comAlvarado 287 8b - Bahía Blanca, Argentina
0349115414546**SNI**

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información

Categorización actual: Iniciación (Activo)

Fecha de publicación: 13/10/2025

Última actualización: 13/10/2025

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad Católica del Uruguay/ Facultad de Ingeniería y Tecnologías / Depto. Informática / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad Católica del Uruguay / Departamento de Informática y Ciencias de la Computación / Sector Educación Superior/Privado

/ Instituto de Ciencias e Ingeniería de la Computación

Dirección: San Andrés / 8000

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Teléfono: (+54) 291-459-5101 / 2611

Correo electrónico/Sitio Web: infoweb@ucu.edu.uy ucu.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA**DOCTORADO****Doctorado en Ciencias de la Computación (2015 - 2020)**

Universidad Nacional del Sur, Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación (DCIC), Argentina

Título de la disertación/tesis/defensa: Modelado predictivo de sistemas complejos para informática molecular: desarrollo de métodos de selección y extracción de variables en presencia de incertidumbre

Tutor/es: Dr. Ignacio Ponzoni - Dra. Mónica F. Díaz

Descripción del título obtenido: El Doctorado en Ciencias de la Computación, tiene como objetivo principal la formación de profesionales altamente especializados en el campo de la computación.

Los participantes se inician en la investigación, adquieren habilidades para la docencia y

Obtención del título: 2020

Sitio web de la disertación/tesis/defensa:

[https://repositoriodigital.uns.edu.ar/handle/123456789/8/browse?](https://repositoriodigital.uns.edu.ar/handle/123456789/8/browse?type=author&value=Cravero%2C+Fiorella)[type=author&value=Cravero%2C+Fiorella](https://repositoriodigital.uns.edu.ar/handle/123456789/8/browse?type=author&value=Cravero%2C+Fiorella)

Financiación:

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina

Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires, Argentina

Palabras Clave: Informática de polímeros Feature Selection Polidispersidad Sistemas complejos

Machine Learning Modelos predictivos QSPR

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Computación / Polymer Informatics

ESPECIALIZACIÓN/PERFECCIONAMIENTO**Especialización en Ciencia de Datos (2022 - 2023)**

Universidad Nacional del Sur, Departamento de Ciencia e Ingeniería de la Computación, Argentina

Título de la disertación/tesis/defensa: Exploración y evaluación de embeddings para la representación de polímeros basados en SMILES: comparativa con técnicas tradicionales de caracterización molecular.

Tutor/es: Dr. Axel Soto

Descripción del título obtenido: La Especialización en Ciencia de Datos se enfoca en la extracción

de conocimientos significativos a partir de datos en diversos formatos. Este programa reconoce la importancia de la recolección, almacenamiento, procesamiento e interpretación ética y

Obtención del título: 2023

Financiación:

Universidad Nacional del Sur , Argentina

Palabras Clave: Embeddings Aprendizaje automático Fingerprints Modelado predictivo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información / Ciencia de Datos

GRADO

Licenciatura en Bioinformática (2007 - 2014)

Universidad Nacional de Entre Ríos, Facultad de Ingeniería (FIUNER) , Argentina

Título de la disertación/tesis/defensa: Aportes a la sistematización de Análisis Filogeográficos orientada a la detección de Ejemplos Críticos en el Laboratorio de Genética de la FHUC - UNL
Tutor/es: Dr. Alejandro Javier Hadad

Descripción del título obtenido: El Licenciado en Bioinformática es un profesional es un profesional multidisciplinario capaz de abordar desafíos en la interfaz de la informática y las ciencias biomédicas, contribuyendo a la investigación y desarrollo tecnológico en diversos campos.

Obtención del título: 2014

Palabras Clave: Filogeografía Análisis Filogenético Bioinformática Análisis Críticos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Computación /Machine Learning

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Bioinformática

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas /Ciencias Químicas /Quimioinformática

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Computación /Informática de Polímeros

Actuación profesional

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PRIVADO - UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL URUGUAY - URUGUAY

Departamento de Informática y Ciencias de la Computación

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (02/2025 - a la fecha) Trabajo relevante

PIAD 40 horas semanales / Dedicación total

Funcionario/Empleado (02/2025 - a la fecha)

Investigador 40 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES

DOCENCIA

INGENIERÍA EN INFORMÁTICA (02/2025 - a la fecha)

Grado

Responsable
Asignaturas:
Algoritmos y Estructuras de Datos, 10 horas, Teórico-Práctico

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

CONSEJO NACIONAL DE INVESTIGACIONES CIENTIFICAS Y TECNICAS (CONICET) / Instituto de Ciencias e Ingeniería de la Computación

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (06/2022 - a la fecha) Trabajo relevante

Investigadora Asistente 40 horas semanales / Dedicación total

Becario (04/2019 - 05/2022) Trabajo relevante

Becaria Posdoctoral 40 horas semanales / Dedicación total

Becario (04/2017 - 03/2019)

Becario Doctoral 40 horas semanales

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Informática de polímeros: diseño de representaciones de datos, quimiotecas y algoritmos para el tratamiento de macromoléculas polidispersas. (07/2023 - a la fecha)

Las investigaciones propuestas en este proyecto se enmarcan en el campo de la Quimioinformática y, más específicamente, en el ámbito de la Informática de Polímeros. El objetivo general es contribuir con soluciones para distintos problemas que surgen en el diseño computacional de nuevos polímeros polidispersos de alto peso molecular. Aplicar ciencia de datos a la ciencia molecular se volverá una práctica común en unos pocos años, sin embargo, predecir las propiedades de mezclas de moléculas o de estructuras complejas, como es el caso de los polímeros, sigue siendo uno de los retos más desafiantes y menos explorados. Esto es así, porque los materiales poliméricos son significativamente más complejos que moléculas pequeñas, dado que están integrados por colecciones de macromoléculas de diferentes tamaños (este fenómeno se conoce como polidispersión) compuestas por miles de cadenas que, a su vez, están formadas por la unión de cientos de miles de Unidades Repetitivas Estructurales (UREs). Entre los desafíos más destacados se encuentra la elección de una adecuada representación computacional que capture del fenómeno de la polidispersión, así como el desarrollo de algoritmos que permitan inferir modelos QSPR necesarios para la predicción de propiedades de interés en el perfilado industrial de estos materiales poliméricos y la generación de quimiotecas que alimenten estos algoritmos. Los objetivos específicos a alcanzar en el presente proyecto son: 1) Diseñar una representación computacional de la información estructural química de materiales polidispersos, que permita caracterizaciones que se acerquen más rigurosamente a la realidad de estas macromoléculas a partir del uso de números difusos. 2) Desarrollar algoritmos de aprendizaje automático para selección de variables (feature selection), especialmente ideados para operar sobre las representaciones difusas de los materiales poliméricos propuestas como modelo molecular en el objetivo 1. 3) Desarrollar algoritmos de aprendizaje automático para la inferencia de modelos QSPR de propiedades mecánicas de materiales poliméricos con representación difusa, sobre la base de los resultados alcanzados para los objetivos 1 y 2. 4) Generar quimiotecas de novo de UREs de polímeros basadas en modelos generativos para entrenar modelos de relación estructura-propiedad.

10 horas semanales

Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica, Instituto de Ciencias e Ingeniería de la Computación (UNS- CONICET)

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Financiación:

Agencia de Promoción de la Ciencia y la Tecnología, Argentina, Apoyo financiero

Equipo: Cravero F., Ignacio Ponzoni, Mónica Fátima Díaz, Carlos Barranco González

Palabras clave: machine learning polimeros representacion computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Quimioinformática

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Universidad Nacional del Sur / Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (09/2021 - a la fecha)

Docente Ayudante A 10 horas semanales

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 10 horas

Carga horaria de investigación: 40 horas

Carga horaria de formación RRHH: 10 horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

Soy una profesional con experiencia en Ciencias de la Computación y Ciencia de Datos, destacándome en la aplicación de técnicas avanzadas de aprendizaje automático en quimioinformática. Mi formación incluye un Doctorado en Ciencias de la Computación con enfoque en modelado predictivo de sistemas moleculares complejos.

Actualmente, soy Investigadora Asistente en el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) en Argentina, contribuyendo a grupos de investigación en Bioinformática, Quimioinformática e Informática de Polímeros. Además, tengo experiencia en docencia universitaria, impartiendo clases en áreas como Simulación y Computación Científica.

A lo largo de mi carrera, he generado una valiosa producción científica con publicaciones en revistas indexadas y participación en congresos nacionales e internacionales. Mis contribuciones abarcan desde la aplicación de técnicas bioinformáticas, hasta el desarrollo de algoritmos de aprendizaje automático para el modelado de propiedades de macromoléculas polidispersas. Mi compromiso con la excelencia académica se refleja en mi continua contribución al avance del conocimiento en este campo desde 2014.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Can we gain insight about the ductile behavior of materials by using polymer informatics? (Completo, 2024) Trabajo relevante

FIGIELLA CRAVERO , IGNACIO PONZONI , MÓNICA F. DÍAZ

Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, v.: 244 p.:105025 2024

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 01697439

DOI: [10.1016/j.chemolab.2023.105025](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2023.105025)

<https://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2023.105025>

Predicting the ductile behavior of thermoplastic materials is a significant challenge for both industry and research. In this study, we present a predictive model that classifies polymers based on their ductility degree, which is a relationship created in the present work to approach this problem. It

comes from relating two critical and measurable properties from the tensile test. This target was discretized into three classes, more ductile, intermediate, and less ductile. The feature selection process employed for finding the most relevant molecular descriptors for the predictive model used two approaches: a classical one and an expert-guided one. The model with higher performance penalizes the misclassification between the extremes of the ductile scale, which is considered more important than confusion with the intermediate class. A new metric, called relaxed %CC, was presented to measure this penalization. Our final model was able to successfully classify polymers, achieving a precision rate of 0.91, an %CC of 89.47% (traditional accuracy), and a relaxed %CC of 100% (no extremes confusion). This approach has the potential to help both the industry and R&D by selecting polymers with suitable ductile properties for specific applications during the design stage before their synthesis.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Polymer informatics for QSPR prediction of tensile mechanical properties. Case study: Strength at break (Completo, 2022) Trabajo relevante

FIORELLA CRAVERO , MÓNICA F. DÍAZ , IGNACIO PONZONI

The Journal of Chemical Physics, v.: 156 2022

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

Lugar de publicación: United states

ISSN: 00219606

E-ISSN: 10897690

DOI: [10.1063/5.0087392](https://doi.org/10.1063/5.0087392)

<http://dx.doi.org/10.1063/5.0087392>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

How can polydispersity information be integrated in the QSPR modeling of mechanical properties? (Completo, 2022)

F. CRAVERO , S. A. SCHUSTIK , M. J. MARTÍNEZ , M. F. DÍAZ , I. PONZONI

Science and Technology of Advanced Materials Methods, v.: 2 p.:1 - 13, 2022

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 27660400

DOI: [10.1080/27660400.2021.2012540](https://doi.org/10.1080/27660400.2021.2012540)

<http://dx.doi.org/10.1080/27660400.2021.2012540>

Polymer informatics is an emerging discipline that has benefited from the strong development that data science has experienced over the last decade. Machine learning methods are useful to infer QSPR (Quantitative Structure-Property Relationships) models that allow predicting mechanical properties related to the industrial profile of polymeric materials based on their structural repeating units (SRUs). Nonetheless, the chemical structure of the SRU is only one of the many factors that affects the industrial usefulness of a polymer. Other equally relevant factors are polymer molecular weight, molecular weight distribution, and production method, which are related to the inherent polydispersity of this kind of material. For this reason, the computational characterization used for the building of QSPR models for predicting mechanical properties should consider these main factors. The aim of this paper is to highlight recent advances in data science to address the inclusion of polydispersity information of polymeric materials in QSPR modeling. We present two dimensions of discussion: data representation and algorithmic issues. In the first one, we examine how different strategies can be applied to include polydispersity data in the molecular descriptors that characterize the polymers. We explain two data representation approaches designed by our group, named as trivalued and multivalued molecular descriptors. In the second dimension, we discuss algorithms proposed to deal with these new molecular descriptor representations during the construction of the QSPR models. Thus, we present here a comprehensible and integral methodology to address the challenges that polydispersity generates in the QSPR modeling of mechanical properties of polymers.

WEB OF SCIENCE™ 

PolyMaS: A new software to generate high molecular weight polymer macromolecules from repeating structural units (Completo, 2021)

SANTIAGO ARIEL SCHUSTIK , FIORELLA CRAVERO , MARIA JIMENA MARTINEZ , IGNACIO PONZONI , MONICA FATIMA DIAZ

Polimery, v.: 66 p.:293 - 297, 2021

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Poland

E-ISSN: 00322725

DOI: [10.14314/polimery.2021.5.2](https://doi.org/10.14314/polimery.2021.5.2)

<http://dx.doi.org/10.14314/polimery.2021.5.2>

The Polymer Maker SMILES-based (PolyMaS) software was used to generate linear macromolecules from the repeating structural units (SRU) of polymers without limiting their length and molar mass. The SRU input is stored in the SMILES code available on the Internet. PolyMaS makes head-tail junctions to the desired length of the macromolecule.



Polymer informatics: Expert-in-the-loop in QSPR modeling of refractive index (Completo, 2021)

SANTIAGO A. SCHUSTIK, FIORELLA CRAVERO, IGNACIO PONZONI, MÓNICA F. DÍAZ

Computational Materials Science, v.: 194 p.:110460 2021

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 09270256

DOI: [10.1016/j.commat.2021.110460](https://doi.org/10.1016/j.commat.2021.110460)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.commat.2021.110460>

Refractive index (RI) is a highly relevant property for the design of new polymeric materials for very specific applications in the telecommunications industry, medicine, and analytical chemistry, among many others. A particular case is that of plastic optical fibers, in which the information is transmitted by photons and then RI takes center stage. Therefore, the modeling and prediction of this property play a key role when characterizing and designing materials for these important industries. Over the last decades, the use of Machine Learning (ML) algorithms in the modeling of properties for the design of new materials has been consolidated thanks to the gradual increase in the available databases. In particular, the development of Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) models has benefited from these emerging technologies, providing the possibility of generating in silico testing strategies applicable to the early stages of the design of new materials. However, in many cases, it has been observed that using ML algorithms in a fully automatic way, without human intervention in the QSPR model design process, tend to generate black-box models that have a difficult interpretation and can lose sight about relevant aspects that require both criteria and an expert's knowledge in the chemical domain. For this reason, interactive ML methodologies that combine computational outputs with experts' knowledge, usually known as expert-in-the-loop strategies, are becoming more frequent. In this article, we present the design of QSPR models for RI modeling following two different approaches, a black-box ML methodology and an Interactive Machine Learning (IML) methodology with expert-in-the-loop, from a database whose curation is also described in the present work. In this regard, visual analytics strategies were used to capture the expert's knowledge, facilitating an effective and rapid interaction between the outputs provided by ML and the chemical analyst. In addition, we contrast the best models obtained by both approaches against two other predictive models for RI estimation reported in the literature, achieving promising performances in terms of cardinality and accuracy when the expert interacts during modeling. In summary, the obtained results allow us to claim that the expert-in-the-loop approach provides QSPR models with better generalizability properties and more interpretable from a physicochemical point of view, without losing accuracy. Finally, in addition to providing high quality QSPR models to predict the RI of polymeric materials, the present work lays the foundation for defining an effective methodology to incorporate experts' knowledge in the design of other material properties.



QSAR Classification Models for Predicting the Activity of Inhibitors of Beta-Secretase (BACE1) Associated with Alzheimer's Disease (Completo, 2019) Trabajo relevante

IGNACIO PONZONI, VÍCTOR SEBASTIÁN-PÉREZ, MARÍA J. MARTÍNEZ, CARLOS ROCA, CARLOS DE LA CRUZ PÉREZ, FIORELLA CRAVERO, GUSTAVO E. VAZQUEZ, JUAN A. PÁEZ, MÓNICA F. DÍAZ, NURIA E. CAMPILLO

Scientific Reports, v.: 9 2019

Palabras clave: Beta-Secretase BACE1 Alzheimer's Disease

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Lugar de publicación: United kingdom

E-ISSN: 20452322

DOI: [10.1038/s41598-019-45522-3](https://doi.org/10.1038/s41598-019-45522-3)

<http://dx.doi.org/10.1038/s41598-019-45522-3>

Alzheimer's disease is one of the most common neurodegenerative disorders in elder population. The β -site amyloid cleavage enzyme 1 (BACE1) is the major constituent of amyloid plaques and plays a central role in this brain pathogenesis, thus it constitutes an auspicious pharmacological target for its treatment. In this paper, a QSAR model for identification of potential inhibitors of BACE1 protein is designed by using classification methods. For building this model, a database with 215 molecules collected from different sources has been assembled. This dataset contains diverse compounds with different scaffolds and physical-chemical properties, covering a wide chemical space in the drug-like range. The most distinctive aspect of the applied QSAR strategy is the combination of hybridization with backward elimination of models, which contributes to improve the quality of the final QSAR model. Another relevant step is the visual analysis of the molecular descriptors that allows guaranteeing the absence of information redundancy in the model. The QSAR model performances have been assessed by traditional metrics, and the final proposed model has low cardinality, and reaches a high percentage of chemical compounds correctly classified.

WEB OF SCIENCE™ Scopus 

Feature Selection for Polymer Informatics: Evaluating Scalability and Robustness of the FS4RV_{DD} Algorithm Using Synthetic Polydisperse Data Sets (Completo, 2019) Trabajo relevante

FIORELLA CRAVERO, SANTIAGO A. SCHUSTIK, M. JIMENA MARTÍNEZ, GUSTAVO E. VÁZQUEZ, MÓNICA F. DÍAZ, IGNACIO PONZONI

Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 60 p.:592 - 603, 2019

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Polymer Informatics

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Machine Learning

Lugar de publicación: United states

ISSN: 15499596

E-ISSN: 1549960X

DOI: [10.1021/acs.jcim.9b00867](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00867)

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00867>

The feature selection (FS) process is a key step in the Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) modeling of physicochemical properties in Cheminformatics. In particular, the inference of QSPR models for polymeric material properties constitutes a complex problem because of the uncertainty introduced by the polydispersity of these materials. The main challenge is how to capture the polydispersity information from the molecular weight distribution (MWD) curve to achieve a more effective computational representation of polymeric materials. To date, most of the existing QSPR techniques use only a single molecule to represent each of these materials, but polydispersity is not considered. Consequently, QSPR models obtained by these approaches are being oversimplified. For this reason, we introduced in a previous work a new FS algorithm called Feature Selection for Random Variables with Discrete Distribution (FS4RV_{DD}), which allows dealing with polydisperse data. In the present paper, we evaluate both the scalability and the robustness of the FS4RV_{DD} algorithm. In this sense, we generated synthetic data by varying and combining different parameters: the size of the database, the cardinality of the selected feature subsets, the presence of noise in the data, and the type of correlation (linear and nonlinear). Moreover, the performances obtained by FS4RV_{DD} were contrasted with traditional FS techniques applied to different simplified representations of polymeric materials. The obtained results show that the FS4RV_{DD} algorithm outperformed the traditional FS methods in all proposed scenarios, which suggest the need of an algorithm such as FS4RV_{DD} to deal with the uncertainty that polydispersity introduces in human-made polymers.

WEB OF SCIENCE™ Scopus 

Computational modelling of mechanical properties for new polymeric materials with high molecular weight (Completo, 2019)

FIORELLA CRAVERO, M. JIMENA MARTÍNEZ, IGNACIO PONZONI, MÓNICA F. DÍAZ

Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, v.: 193 p.:103851 2019

Lugar de publicación: Netherlands

Escrito por invitación

ISSN: 01697439

DOI: [10.1016/j.chemolab.2019.103851](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2019.103851)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2019.103851>

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Computer-aided design of polymeric materials: Computational study for characterization of databases for prediction of mechanical properties under polydispersity (Completo, 2019)

FIORELLA CRAVERO , SANTIAGO A. SCHUSTIK , MARÍA JIMENA MARTÍNEZ , CARLOS D. BARRANCO , MÓNICA F. DÍAZ , IGNACIO PONZONI
Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, v.: 191 p.:65 - 72, 2019

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 01697439

DOI: [10.1016/j.chemolab.2019.06.006](https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2019.06.006)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.chemolab.2019.06.006>

WEB OF SCIENCE™ Scopus 

Hybridizing Feature Selection and Feature Learning Approaches in QSAR Modeling for Drug Discovery (Completo, 2017)

IGNACIO PONZONI , VÍCTOR SEBASTIÁN-PÉREZ , CARLOS REQUENA-TRIGUERO , CARLOS ROCA , MARÍA J. MARTÍNEZ , FIORELLA CRAVERO , MÓNICA F. DÍAZ , JUAN A. PÁEZ , RAMÓN GÓMEZ ARRAYÁS , JAVIER ADRIO , NURIA E. CAMPILLO

Scientific Reports, v.: 7 2017

Palabras clave: Feature Selection Feature Learning QSAR Modeling Drug Discovery

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información / Machine Learning

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Lugar de publicación: United kingdom

E-ISSN: 20452322

DOI: [10.1038/s41598-017-02114-3](https://doi.org/10.1038/s41598-017-02114-3)

<http://dx.doi.org/10.1038/s41598-017-02114-3>

Quantitative structure-activity relationship modeling using machine learning techniques constitutes a complex computational problem, where the identification of the most informative molecular descriptors for predicting a specific target property plays a critical role. Two main general approaches can be used for this modeling procedure: feature selection and feature learning. In this paper, a performance comparative study of two state-of-art methods related to these two approaches is carried out. In particular, regression and classification models for three different issues are inferred using both methods under different experimental scenarios: two drug-like properties, such as blood-brain-barrier and human intestinal absorption, and enantiomeric excess, as a measurement of purity used for chiral substances. Beyond the contrastive analysis of feature selection and feature learning methods as competitive approaches, the hybridization of these strategies is also evaluated based on previous results obtained in material sciences. From the experimental results, it can be concluded that there is not a clear winner between both approaches because the performance depends on the characteristics of the compound databases used for modeling. Nevertheless, in several cases, it was observed that the accuracy of the models can be improved by combining both approaches when the molecular descriptor sets provided by feature selection and feature learning contain complementary information.

WEB OF SCIENCE™ Scopus 

GeRNet: a gene regulatory network tool (Completo, 2017)

J.S. DUSSAUT , C.A. GALLO , F. CRAVERO , M.J. MARTÍNEZ , J.A. CARBALLIDO , I. PONZONI
Biosystems, v.: 162 p.:1 - 11, 2017

Palabras clave: Biclustering Gene Regulatory Network Microarray Machine Learning

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 03032647

DOI: [10.1016/j.biosystems.2017.08.006](https://doi.org/10.1016/j.biosystems.2017.08.006)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.biosystems.2017.08.006>

Gene regulatory networks (GRNs) are crucial in every process of life since they govern the majority of the molecular processes. Therefore, the task of assembling these networks is highly important. In particular, the so called model-free approaches have an advantage modeling the complexities of dynamic molecular networks, since most of the gene networks are hard to be mapped with accuracy by any other mathematical model. A highly abstract model-free approach, called rule-

based approach, offers several advantages performing data-driven analysis; such as the requirement of the least amount of data. They also have an important ability to perform inferences: its simplicity allows the inference of large size models with a higher speed of analysis. However, regarding these techniques, the reconstruction of the relational structure of the network is partial, hence incomplete, for an effective biological analysis. This situation motivated us to explore the possibility of hybridizing with other approaches, such as biclustering techniques. This led to incorporate a biclustering tool that finds new relations between the nodes of the GRN. In this work we present a new software, called GeRNeT that integrates the algorithms of GRNCOP2 and BiHEA along a set of tools for interactive visualization, statistical analysis and ontological enrichment of the resulting GRNs. In this regard, results associated with Alzheimer disease datasets are presented that show the usefulness of integrating both bioinformatics tools.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Second ISCB Latin American Student Council Symposium (LA-SCS) 2016 (Completo, 2017)

ALEXANDER MIGUEL MONZON , MARCIA A. HASENAHUER , ESTEFANÍA MANCINI , NILSON COIMBRA , FIORELLA CRAVERO , JAVIER CÁCERES-MOLINA , CÉSAR A. RAMÍREZ-SARMIENTO , NICOLAS PALOPOLI , PIETER MEYSMAN , R. GONZALO PARRA
F1000Research, v.: 6 p.:1491 2017

Lugar de publicación: United kingdom

E-ISSN: 20461402

DOI: [10.12688/f1000research.12321.1](https://doi.org/10.12688/f1000research.12321.1)

<http://dx.doi.org/10.12688/f1000research.12321.1>

Scopus®

Feature Learning applied to the Estimation of Tensile Strength at Break in Polymeric Material Design (Completo, 2016)

CRAVERO FIORELLA , MARTÍNEZ M. JIMENA , VAZQUEZ GUSTAVO , MÓNICA F. DÍAZ , PONZONI IGNACIO

Journal of Integrative Bioinformatics, v.: 13 p.:15 - 29, 2016

Palabras clave: Material Design Machine Learning Tensile Strength

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información / Polymer Informatics

Lugar de publicación: Germany

E-ISSN: 16134516

DOI: [10.1515/jib-2016-286](https://doi.org/10.1515/jib-2016-286)

<http://dx.doi.org/10.1515/jib-2016-286>

Several feature extraction approaches for QSPR modelling in Cheminformatics are discussed in this paper. In particular, this work is focused on the use of these strategies for predicting mechanical properties, which are relevant for the design of polymeric materials. The methodology analysed in this study employs a feature learning method that uses a quantification process of 2D structural characterization of materials with the autoencoder method. Alternative QSPR models inferred for tensile strength at break (a well-known mechanical property of polymers) are presented. These alternative models are contrasted to QSPR models obtained by feature selection technique by using accuracy measures and a visual analytic tool. The results show evidence about the benefits of combining feature learning approaches with feature selection methods for the design of QSPR models.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Concrete Decisions: How XAI is Paving the Way for Future Construction Materials. (2025)

Cravero F. , Ignacio Ponzoni , Gustavo E. Vazquez , Mónica F. Diaz

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Latin American and Caribbean Consortium of Engineering Institutions

Ciudad: México

Año del evento: 2025

Anales/Proceedings: "Engineering, Artificial Intelligence, and Sustainable Technologies in service of society" Proceedings of the 23rd LACCEI International Multi-Conference for Engineering, Education and Technology (LACCEI)

Publicación arbitrada

Ciudad: México
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / XAI
Medio de divulgación: Internet
DOI: <http://dx.doi.org/10.18687/laccei2025.1.1.1997>
<https://laccei.org/LACCEI2025-Mexico/meta/FP1997.html>

Machine Learning-driven Immersive Scenarios Classification and Generation for Virtual Reality (2024)

MARIO A. LEIVA , FIORELLA CRAVERO , MATIAS N. SELZER

Publicado

Completo

Descripción: 2024 L Latin American Computer Conference (CLEI)

Ciudad: Buenos Aires, Argentina

Año del evento: 2024

Anales/Proceedings: 2024 L Latin American Computer Conference (CLEI)

Publicación arbitrada

Editorial: IEEE

Palabras clave: Data Augmentation Immersive Scenarios Machine Learning Virtual reality

DOI: [10.1109/clei64178.2024.10700098](https://doi.org/10.1109/clei64178.2024.10700098)

<https://doi.org/10.1109/clei64178.2024.10700098>

Immersion is one of the most important properties of the virtual reality system that depends on both its hardware and software attributes. Currently, virtual reality systems try to improve immersion as much as possible. However, there is no metric to measure the level of immersion of a virtual reality system based on its characteristics. Additionally, there are no tools to classify and automatically generate scenarios with high immersion level. In this work, we conducted a user test to gather data on immersion, focusing on system variables. Using this data, we introduce a preliminary study aimed at classifying immersion scenarios according to these variables and the generation of highly immersive scenarios. These contributions offer a useful tool in the area of virtual reality and immersive technologies.

Scopus®

Improving predictive modeling of polymeric materials using a hybrid approach of machine learning and expert intervention (2023)

FIORELLA CRAVERO , IGNACIO PONZONI , MONICA FATIMA DIAZ

Completo

Evento: Internacional

Descripción: 21st LACCEI International Multi-Conference for Engineering, Education and Technology (LACCEI 2023): ?Leadership in Education and Innovation in Engineering in the Framework of Global Transformations: Integration and Alliances for Integral Development?

Año del evento: 2023

Anales/Proceedings: Proceedings of the 21th LACCEI International Multi-Conference for Engineering, Education and Technology (LACCEI 2023): ?Leadership in Education and Innovation in Engineering in the Framework of Global Transformations: Integration and Alliances for Integra
ISSN/ISBN: 2414-6390

Publicación arbitrada

Editorial: Latin American and Caribbean Consortium of Engineering Institutions

Palabras clave: Polymeric materials Machine learning Expert-in-the-Loop Mechanical properties Refractive index.

Medio de divulgación: Internet

DOI: [10.18687/laccei2023.1.1.1572](https://doi.org/10.18687/laccei2023.1.1.1572)

<https://doi.org/10.18687/laccei2023.1.1.1572>

This work describes a hybrid methodology that combines machine learning and the intervention of experts to improve the predictive modeling of properties of high interest of polymeric materials. Although these materials have many advantages, developing a new material with specific properties from a new molecular structure is very challenging and time-consuming and expensive. The demand for materials with very specific properties continues to grow, so machine learning techniques have been applied to predict these properties. The hybrid methodology was developed in an evolutionary way from an expert intervention at the end of the machine learning process, to a more decisive intervention throughout the cycle. This allows obtaining more robust and reliable models for the design of new materials, which can help designers obtain property profiles for prototypes prior to the synthesis stage, saving time and resources.

A Database Curation for Prediction of the Refractive Index in the Virtual Testing of Polymeric Materials by Using Machine Learning (2021)

SANTIAGO A. SCHUSTIK , FIORELLA CRAVERO , IGNACIO PONZONI , MÓNICA F. DÍAZ
Publicado
Completo
Año del evento: 2021
Anales/Proceedings:Production Research
ISSN/ISBN: 9783030763091
Publicación arbitrada
Editorial: Springer International Publishing
Ciudad: Cham
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /
DOI: [10.1007/978-3-030-76310-7_22](https://doi.org/10.1007/978-3-030-76310-7_22)
http://dx.doi.org/10.1007/978-3-030-76310-7_22

Feature Selection and Polydispersity Characterization for QSPR Modelling: Predicting a Tensile Property (2018)

FIORELLA CRAVERO , SANTIAGO SCHUSTIK , MARÍA JIMENA MARTÍNEZ , CARLOS D. BARRANCO , MÓNICA F. DÍAZ , IGNACIO PONZONI
Publicado
Completo
Año del evento: 2018
Anales/Proceedings:Practical Applications of Computational Biology and Bioinformatics, 12th International Conference
ISSN/ISBN: 9783319987019
Publicación arbitrada
Editorial: Springer International Publishing
Ciudad: Cham
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /
DOI: [10.1007/978-3-319-98702-6_6](https://doi.org/10.1007/978-3-319-98702-6_6)
http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-98702-6_6

FS4RVDD: A Feature Selection Algorithm for Random Variables with Discrete Distribution (2018)

FIORELLA CRAVERO , SANTIAGO SCHUSTIK , MARÍA JIMENA MARTÍNEZ , MÓNICA FÁTIMA DÍAZ , IGNACIO PONZONI
Publicado
Completo
Año del evento: 2018
Anales/Proceedings:Communications in Computer and Information Science
ISSN/ISBN: 9783319914787
Publicación arbitrada
Editorial: Springer International Publishing
Ciudad: Cham
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /
DOI: [10.1007/978-3-319-91479-4_18](https://doi.org/10.1007/978-3-319-91479-4_18)
http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-91479-4_18

QSAR Classification Models for Predicting Affinity to Blood or Liver of Volatile Organic Compounds in e-Health (2017)

FIORELLA CRAVERO , MARÍA JIMENA MARTÍNEZ , MÓNICA F. DÍAZ , IGNACIO PONZONI
Publicado
Completo
Año del evento: 2017
Anales/Proceedings:Bioinformatics and Biomedical Engineering
ISSN/ISBN: 9783319561530
Editorial: Springer International Publishing
Ciudad: Cham
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

DOI: [10.1007/978-3-319-56154-7_38](https://doi.org/10.1007/978-3-319-56154-7_38)
http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-56154-7_38

Intelligent Systems for Predictive Modelling in Cheminformatics: QSPR Models for Material Design Using Machine Learning and Visual Analytics Tools (2016)

F. CRAVERO, M. J. MARTINEZ, G. E. VAZQUEZ, M. F. DÍAZ, I. PONZONI

Publicado

Completo

Año del evento: 2016

Anales/Proceedings: Advances in Intelligent Systems and Computing

ISSN/ISBN: 9783319401256

Publicación arbitrada

Editorial: Springer International Publishing

Ciudad: Cham

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información /

DOI: [10.1007/978-3-319-40126-3_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-40126-3_1)

http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-40126-3_1

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

COMITÉ EVALUACIÓN DE PROYECTOS

Banco de Evaluadores en el sistema Agenciar - Sistema de Evaluación de Proyectos Científicos y Tecnológicos del FONCYT (2023 / 2023)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Agencia de Promoción de la Ciencia y la Tecnología / Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCYT), Argentina

Cantidad: Menos de 5

Evaluación del proyecto ?Desarrollo de métodos no supervisados para la detección de sesgos en aprendizaje automático?

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

concurso convocado para cubrir un (1) cargo de Profesor Titular con dedicación simple para FIUNER en ?Modelado y Simulación de Macromoléculas? y ?Diseño y Descubrimiento de Drogas? (2024 / 2024)

Comité evaluador

Argentina

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Entre Ríos - FIUNER - Argentina

Participación, el día 18 de septiembre de 2024, en el concurso convocado para cubrir un (1) cargo de Profesor Titular con dedicación simple y carácter ordinario en el Departamento Académico Biología con funciones docentes en las unidades curriculares ?Modelado y Simulación de Macromoléculas? y ?Diseño y Descubrimiento de Drogas? (Plan de Estudios vigente, carrera de Licenciatura en Bioinformática), y funciones de formación de recursos humanos.

JURADO DE TESIS

Ingeniería en Informática (2025)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Privado / Universidad Católica del Uruguay / Facultad de Ingeniería y Tecnologías, Uruguay

Nivel de formación: Grado

Formación de RRHH

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Codirectora (2024) Trabajo relevante

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional del Sur / Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación , Argentina

Programa: Doctorado en Ciencias de la Computación

Tipo de orientación: Cotutor

Nombre del orientado: Alice Raquel Rambo

País/Idioma: Argentina,

Palabras Clave: XAI fármacos informática molecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / XAI

Título de la tesis: Técnicas de inteligencia artificial explicable y ciencia de datos para la interpretación de modelos de informática molecular orientados al descubrimiento de fármacos

Información adicional

Mi trabajo se centra en el desarrollo de enfoques avanzados de machine learning aplicados a quimioinformática, diseño computacional de materiales y explicabilidad en inteligencia artificial (XAI). Soy investigadora asistente de CONICET, codirectora de una tesis de doctorado en Ciencias de la Computación enfocada en XAI para el diseño de fármacos en la Universidad Nacional del Sur (Argentina), y directora de un proyecto PICT financiado por la Agencia Nacional de Promoción Científica de Argentina, orientado a la informática de polímeros.

A partir de febrero de 2025, desarrollaré mis actividades de docencia e investigación como Profesor de Alta Dedicación en la subcategoría de Profesor Investigador de Alta Dedicación (PIAD) para el Departamento de Informática de la Universidad Católica del Uruguay.

En los últimos años, he realizado contribuciones significativas a la investigación en polímeros y fármacos mediante el desarrollo de modelos QSPR, representaciones computacionales innovadoras y técnicas de XAI para mejorar la comprensión y predictibilidad de modelos. Mi formación incluye una Licenciatura en Bioinformática, un Doctorado en Ciencias de la Computación y una especialización en Ciencia de Datos. He fortalecido capacidades de investigación interdisciplinarias, desarrollando herramientas computacionales útiles para aplicaciones científicas e industriales, contribuyendo al avance de la ciencia de materiales y la quimioinformática.

Indicadores de producción

ACTIVIDADES	2
Proyectos Investigación Desarrollo	1
Docencia	1
PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	21
Artículos publicados en revistas científicas	13
Completo	13
Trabajos en eventos	8
EVALUACIONES	3
Evaluación de proyectos	1
Evaluación de convocatorias concursables	1
Jurado de tesis	1
FORMACIÓN RRHH	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	1

