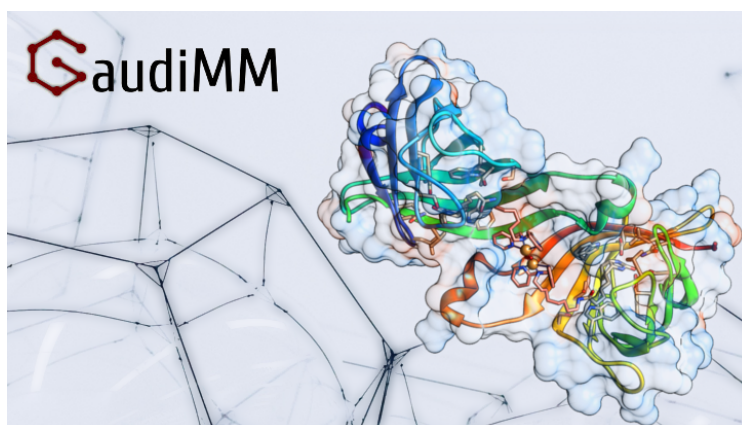


14/02/2018

Una nova estratègia per dissenyar sistemes moleculars a l'ordinador



GaudiMM és un programa de disseny molecular desenvolupat pel departament de Química de la UAB, que fa servir algorismes inspirats en la pròpia selecció natural per optimitzar estructures químiques que satisfacin diversos criteris alhora. El programari està disponible de forma gratuïta i lliure en www.github.com/insilichem/gaudi.

Més enllà dels laboratoris experimentals, existeix un tipus de química dedicada a destriar o optimitzar reaccions químiques, simular el comportament de molècules al llarg del temps o a identificar possibles dianes terapèutiques... a l'ordinador. D'això tracta la modelització molecular: crear descripcions atòmiques sobre el comportament (bio)químic a escala subnanomètrica (10^{-9} m). El grup InsiliChem, dirigit pel professor Jean-Didier Maréchal, porta anys invertint esforços en crear una plataforma de programari que integri diverses eines de modelització molecular en una experiència d'usuari cohesiva. GaudiMM és la porta d'entrada a aquesta plataforma, proporcionant una forma de crear models moleculars de partida per a qualsevol problema de naturalesa química, eludint la freqüent escassetat d'informació experimental (rajos X, RMN...).

Per a això, utilitza un tipus d'algorismes d'optimització anomenats algorismes genètics, basats en els mateixos principis que la selecció natural ha posat al servei de l'evolució: les característiques dels individus millor adaptats al medi tindran més

probabilitats de passar a la següent generació. En un problema d'optimització, cada individu no és més que una possible solució al problema. Quant millor ho resolgui o més s'acosti a la solució, millor 'adaptat' estarà al medi i, per tant, les seves característiques seran propagades a la següent ronda d'intents. Després de generar una població inicial aleatòria de candidats, aquests són avaluats i només els millors passen a la següent ronda. Els que no aconseguen passar el tall, són substituïts per nous candidats generats aleatòriament o procedents de la combinació dels supervivents de la generació anterior. Repetint aquest procés de 'selecció natural' un nombre suficient de vegades, els individus seran cada vegada més aptes i oferiran una millor solució al problema. En GaudiMM, cada individu és un conjunt de característiques que defineixen una estructura molecular: una sèrie d'àtoms units d'una forma particular que es poden moure segons regles geomètriques bàsiques (rotació, translació, torsió...).

L'entorn en el qual són avaluats són els criteris que aquesta potencial estructura molecular ha de complir: que no hi hagi xocs atòmics desfavorables, però que existeixin interaccions favorables, que es compleixi una distància clau entre dos àtoms perquè es doni una reacció química, etc. Qualsevol problema químic podria abordar-se d'aquesta manera: només cal identificar la combinació adequada de característiques que el sistema pot explorar i després definir amb quin criteri avaluar-les.

GaudiMM ha estat utilitzat per optimitzar estructures caracteritzades només parcialment (útil en disseny de materials i catalitzadors), esbrinar la millor orientació col·lectiva de diverses molècules en el si d'una proteïna (vital per a la caracterització de nous fàrmacs) o, fins i tot, refinar bases de dades d'estructures orgàniques que contenen metalls de transició.

Jaime Rodríguez-Guerra, Jean-Didier Maréchal

jaime.rodriguezguerra@uab.cat, jeandidier.marechal@uab.cat

Departament de Química

Àrea de Química Física

Universitat Autònoma de Barcelona

Referències

[View low-bandwidth version](#)