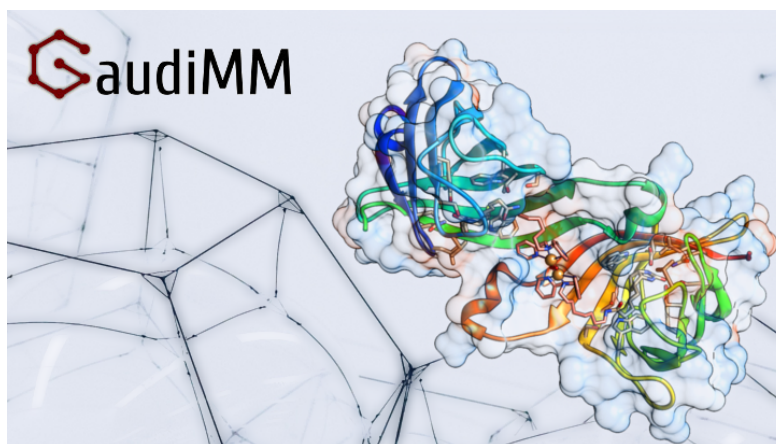


14/02/2018

Una nueva estrategia para diseñar sistemas moleculares a ordenador



GaudiMM es un programa de diseño molecular desarrollado en el departamento de Química de la Universidad Autónoma de Barcelona. Usa algoritmos inspirados en la propia selección natural para optimizar estructuras químicas que satisfagan varios criterios a la vez. Está disponible de forma gratuita y libre en www.github.com/insilichem/gaudi.

Más allá de los laboratorios experimentales, existe un tipo de química dedicada a discernir u optimizar reacciones químicas, simular el comportamiento de moléculas a lo largo del tiempo o identificar posibles dianas terapéuticas... a ordenador. De eso trata la modelización molecular: crear descripciones atómicas sobre el comportamiento (bio)químico a escala subnanométrica (10^{-9} m). El grupo InsiliChem, dirigido por el Prof. Dr. Jean-Didier Maréchal, lleva años invirtiendo esfuerzos en crear una plataforma de software que integre varias herramientas de modelización molecular en una experiencia de usuario cohesiva. GaudiMM es la puerta de entrada a esta plataforma, proporcionando una forma de crear modelos moleculares de partida para cualquier problema de naturaleza química, eludiendo la frecuente escasez de información experimental (rayos X, RMN...).

Para ello utiliza un tipo de algoritmos de optimización llamados algoritmos genéticos, basados en los mismos principios que la selección natural ha puesto al servicio de la evolución: las características de los individuos mejor adaptados al medio tendrán más probabilidades de pasar a la siguiente generación. En un problema de optimización, cada individuo no es más que una

posible solución al problema. Cuanto mejor lo resuelva o más se acerque a la solución, mejor 'adaptado' estará al medio y, por tanto, sus características serán propagadas a la siguiente ronda de intentos. Tras generar una población inicial aleatoria de candidatos, estos son evaluados y sólo los mejores pasan a la siguiente ronda. Los que no logren pasar el corte, son sustituidos por nuevos candidatos generados aleatoriamente o procedentes de la combinación de los supervivientes de la generación anterior. Repitiendo este proceso de 'selección natural' un número suficiente de veces, los individuos serán cada vez más aptos y ofrecerán una mejor solución al problema. En GaudiMM, cada individuo es un conjunto de características que definen una estructura molecular: una serie de átomos unidos de una forma particular que se pueden mover según reglas geométricas básicas (rotación, traslación, torsión...).

El entorno en el que son evaluados son los criterios que esa potencial estructura molecular ha de cumplir: que no existan choques atómicos desfavorables pero que existan interacciones favorables, que se cumpla una distancia clave entre dos átomos para que exista una reacción química, etc. Cualquier problema químico podría abordarse de esta forma: sólo hay que identificar la combinación adecuada de características que el sistema puede explorar y luego definir con qué criterio evaluarlas.

GaudiMM ha sido utilizado para optimizar estructuras caracterizadas sólo parcialmente (útil en diseño de materiales y catalizadores), averiguar la mejor orientación colectiva de varias moléculas en el seno de una proteína (vital para la caracterización de nuevos fármacos) o, incluso, refinar bases de datos de estructuras orgánicas que contienen metales de transición.

Jaime Rodríguez-Guerra, Jean-Didier Maréchal

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

Departamento de Química

Área de Química Física

Universidad Autónoma de Barcelona

Referencias

Jaime Rodríguez-Guerra Pedrega, Giuseppe Sciortino, Jordi Guasp, Martí Municoy, Jean-Didier Maréchal **GaudiMM: A modular multi-objective platform for molecular modeling.** *Computational Chemistry Volume 38, Issue 24 2017* 10.1002/jcc.24847

www.github.com/insilichem/gaudi .

[View low-bandwidth version](#)