

## Predicción de estructuras cristalinas de interés farmacológico mediante algoritmos genéticos. Desarrollo de un nuevo código que utiliza eficientemente los recursos de la Open Science Grid (OSG)

- Kristal N. Varela,<sup>1</sup> Gabriel I. Pagola,<sup>1</sup> Marta B. Ferraro,<sup>1</sup> Albert M. Lund,<sup>2</sup> Anita M. Orendt,<sup>3</sup> Julio C. Facelli<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*

<sup>2</sup>*Department of Biomedical Informatics, University of Utah, Salt Lake City, US*

<sup>3</sup>*Center for High Performance Computing, University of Utah, Salt Lake City, US*

Desde hace casi dos décadas nuestro grupo trabaja en la predicción de estructuras de cristales moleculares de interés farmacológico mediante el desarrollo de un código propio basado en algoritmos genéticos, denominado Modified Genetic Algorithms for Crystals (MGAC). Actualmente estamos desarrollando una nueva versión del código, donde las optimizaciones locales de las estructuras candidatas se realizan a nivel Density Functional Theory (DFT) empleando el código Quantum Espresso (QE) [1]. Dado que estos cálculos insumen mucho tiempo de cómputo, estos se realizan de manera asincrónica empleando los recursos provistos la Open Science Grid (OSG) [2]. El programa principal del MGAC corre en un servidor y se encarga de ir enviando las optimizaciones a efectuar a la OSG y de mantener una lista actualizada de los cristales candidato con menor energía (mejores candidatos). Al finalizar cada optimización se envía la salida de QE al servidor donde corre el código maestro (MGAC) que se encarga de procesarla y evaluar si corresponde descartar el candidato optimizado o incorporarlo a la lista de mejores cristales. Por otra parte, el MGAC se encarga de construir periódicamente una segunda lista con un conjunto de cristales hijos, generados a partir de la recombinación de elementos de la lista de mejores cristales (padres). Los cristales de la segunda lista son los candidatos disponibles, listos para ser distribuidos en forma asincrónica a medida que lo permitan los recursos disponibles en la OSG. En este trabajo se analizan las características de esta nueva implementación y se presenta un conjunto de resultados preliminares empleando como sistema molecular de testeo el metanol. Se ha elegido este sistema por ser un sistema pequeño y que es de interés en la bibliografía [3].

### Referencias:

[1] [www.quantum-espresso.org](http://www.quantum-espresso.org)

[2] [www.opensciencegrid.org](http://www.opensciencegrid.org)

[3] Tzu-Jen Lin *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 2736 (2016).