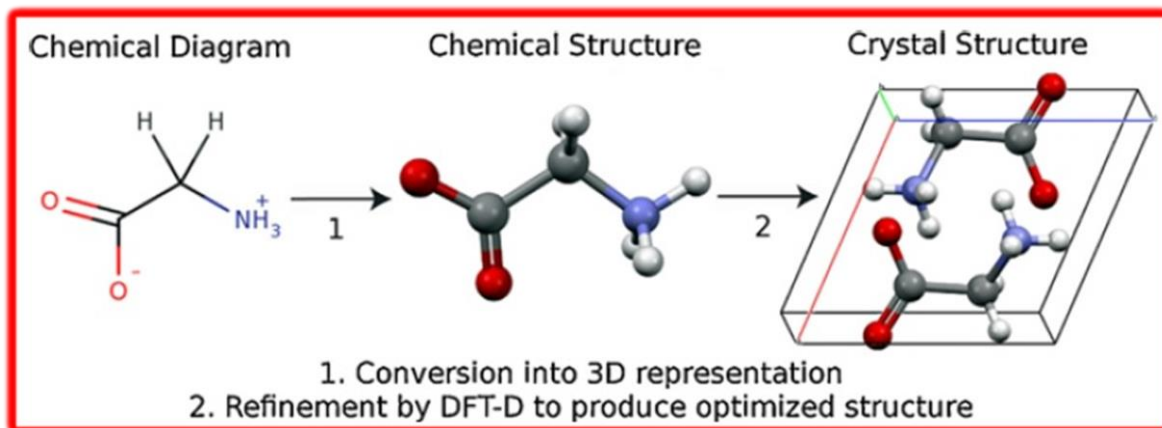


Tema: Desarrollo e implementación de metodologías para predecir estructuras cristalinas de compuestos farmacéuticos mediante algoritmos genéticos.



El código MGAC permite predecir la estructura cristalina a partir del conocimiento del diagrama de la molécula

Descripción breve: Desde hace más de 15 años 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 MGAC. Su diseño computacional es sumamente costoso, aún en clusters de alto rendimiento, debido a que se generan miles de estructuras candidatas para obtener la óptima. Por esta razón, se propone colaborar en la modificación y optimización del código para que los cálculos se distribuyan en forma no secuencial permitiendo utilizar recursos como la OSG (Open Science Grid, <https://www.opensciencegrid.org/>) a la que tenemos acceso a través de una colaboración con la Universidad de Utah.

Lugar de Trabajo: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires (IFIBA)

Los interesados deberán contactarse por correo electrónico: gpagola@df.uba.ar

Dr Gabriel Pagola