

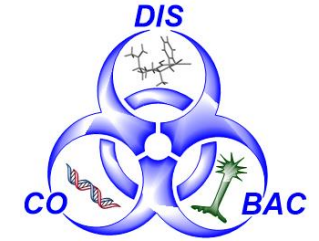
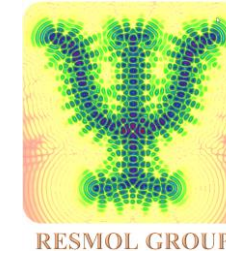
# Metodología y recursos

- Metodologías:

- Docking molecular, para identificar las interacciones favorables fármaco-biomolécula
- Dinámica molecular, para evaluar la estabilidad de las interacciones
- Potencial de fuerza media, para estimar las energías de asociación

- Centros de cálculo a disposición del proyecto:

- Grupo RESMOL (Universidad de Alcalá)
- Grupo DISCOBAC (Universidad de Alcalá)
- Centro de cálculo francés IDRIS CNRS (“Jean Zay”)
- Laboratorio LPCT (Université de Lorraine)



- Colaboradores experimentales:

- *Caracterización:*

Prof. de Investigación **José Luis Marco Contelles**

Laboratorio de Química Médica, Instituto de Química Orgánica General del CSIC

- *Pruebas in vitro:*

Dres. **Urtzi Garaigorta de Dios** y **Pablo Gastaminza**

Centro Nacional de Biotecnología (CNB) del CSIC

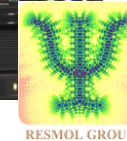


## • ¿ Que presupuesto necesitamos ?

En realidad, ya hemos empezado a conseguir resultados, pero usando las infraestructuras de cálculo que ya tenemos (además de la generosa aportación del centro de cálculo francés CNRS IDRIS, que nos permite temporalmente su uso).

Esto puede ser suficiente al principio, cuando las ideas sirven más de la potencia de cálculo. Sin embargo, al estar estas infraestructuras compartidas con otros proyectos, pronto será difícil llevar a cabo rápidamente todas las simulaciones necesarias.

- **Entonces, ¿habría que comprar infraestructuras computacionales dedicadas a este proyecto?** Sí. Para los que sean familiares con la informática, lo ideal sería equiparnos con un centro multi-procesador híbrido CPU+GPU. Para que sea eficiente, necesitamos como mínimo **150.000 €**.



*Centro de cálculo  
RESMOL*

- **Y...¿para el estudio experimental?** Todas las infraestructuras están al alcance gracias a la colaboración con el CSIC.



- **Una última pregunta: ¿Cuánto tiempo necesitáis?** Considerando que ya hemos propuesto algunos antivirales como potenciales fármacos, podríamos tener resultados positivos en pocos (3 o 4) meses. Sin embargo, habrá probablemente que mejorar varios aspectos: toxicidad, eficacia y selectividad del fármaco. Esto supondrá un tiempo de 6 meses hasta un año.