

1. Correr docking en todos los programas a usar y crear un SDF con columnas: Molécula, IX (numeración 1 a n), y Score
2. Correr RMSD de a pares entre todos los programas
3. Crear el excel para cada receptor a partir de los sdf
 - a. Para eso vamos a correr el código "**Consensus_file_NO_conformers.ipynb**"
 - i. No_conformers, porque el pipeline borra los confórmeros y se queda con el mejor según score ICM y otro file con el mejor según score de rDock
 - ii. También crear las columnas de ECR
4. Correr "**calc_prc_metrics_all_mols_FINAL.ipynb**"
 - a. El mismo se encarga de calcular las columnas según cantidad de poses coincidentes y según ECR que van a ser necesarias para después ver cuáles son las moléculas que pasan todos los filtros.
 - b. crea columnas "Max_coincidents_progs" y "Max_pose_cons_level"
 - c. Este código tiene también abajo para hacer los gráficos de las moléculas del paper
5. Correr el análisis de datos con el código: "**prc_metrics_ECR_rank_thr_5p**"
 - a. Este código tiene tanto #Option D (por el paper, es el primer paper publicado) y #PRC, el resultado que printee ese es el que nos importa