



# Proyecto V.A.L.L.Y.

*Redefiniendo la Agilidad en el Descubrimiento de Fármacos:  
Un Nuevo Marco Computacional para la Salud Global y Local*

**Autoría:**

*White Paper Técnico | v1.0 (Prueba de Concepto) | Autor: Lionell E. Nava Ramos.*

## El Desafío Global - La Barrera Computacional en la Lucha contra Enfermedades

A escala global, la capacidad de respuesta ante amenazas sanitarias, desde enfermedades endémicas hasta pandemias emergentes, está limitada por un cuello de botella fundamental en el descubrimiento de fármacos: el tiempo y el coste computacional. Las metodologías de simulación molecular, pilares de la farmacología moderna, presentan un dilema insostenible. Mientras la Dinámica Molecular ofrece una precisión inigualable a un coste temporal y económico prohibitivo, las alternativas de cribado rápido sacrifican la fiabilidad biofísica. Este paradigma no solo frena la innovación en los grandes centros de investigación, sino que excluye a naciones enteras de la posibilidad de generar soluciones terapéuticas soberanas.

## Nuestra Solución - El Método V.A.L.L.Y.

El **Proyecto V.A.L.L.Y. (Vibrational Analysis for Ligand Likelihood Yielding)** es una respuesta estratégica a este desafío. Es un marco computacional disruptivo que reemplaza la fuerza bruta por la eficiencia inteligente. Nuestro método realiza un **Análisis Vibracional** ultrarrápido de la proteína mediante Modelos de Red Elástica, capturando su "huella digital dinámica" —la esencia de su función biológica— en una fracción del tiempo de los métodos tradicionales.

Este perfil dinámico, denso en información biofísica, alimenta un motor de Inteligencia Artificial que evalúa la **Probabilidad del Ligando** (Ligand Likelihood) de ser un candidato terapéutico viable. El sistema **Produce (Yields)** un resultado dual y accionable: una predicción cuantitativa de la afinidad de enlace y una identificación cualitativa de los epicentros moleculares de la interacción, proporcionando una hoja de ruta precisa para el diseño farmacéutico.

## La Ventaja Estratégica

**EFICIENCIA EXPONENCIAL:** Transforma semanas de cómputo en segundos, permitiendo el análisis de vastas librerías de compuestos en hardware local y redefiniendo la escala del cribado virtual.

**DEMOCRATIZACIÓN CIENTÍFICA:** Al eliminar la barrera del supercómputo, V.A.L.L.Y. capacita a la comunidad científica global, especialmente en países en desarrollo, para abordar problemas de salud locales con herramientas de clase mundial.

**INTELIGENCIA ESTRUCTURAL:** Proporciona una guía biofísica que va más allá de la predicción, iluminando los mecanismos de interacción y acelerando el ciclo de diseño racional de fármacos.

# La Prueba de Concepto y la Visión a Futuro

## Validación en Objetivos de Alto Impacto

Para validar la robustez y versatilidad del método V.A.L.L.Y., el prototipo funcional **VALLY-Scan v1.3** se aplicó a dos objetivos virales de máxima prioridad para la salud pública global y nacional: la proteasa del virus del Dengue (NS2B/NS3) y la proteasa principal del SARS-CoV-2 (Mpro).

## Resultados de la Prueba de Concepto

La ejecución de VALLY-Scan en una estación de trabajo estándar demostró un rendimiento y una viabilidad excepcionales, generando reportes de análisis en menos de un segundo por estructura.

**Análisis:** El prototipo no solo validó el flujo de trabajo de extremo a extremo, sino que, al ser informado con conocimiento experto de la literatura, identificó regiones de alto impacto dinámico en ambas proteínas. Este resultado confirma el inmenso potencial del método V.A.L.L.Y. como una herramienta de primer nivel para la generación rápida de hipótesis terapéuticas.

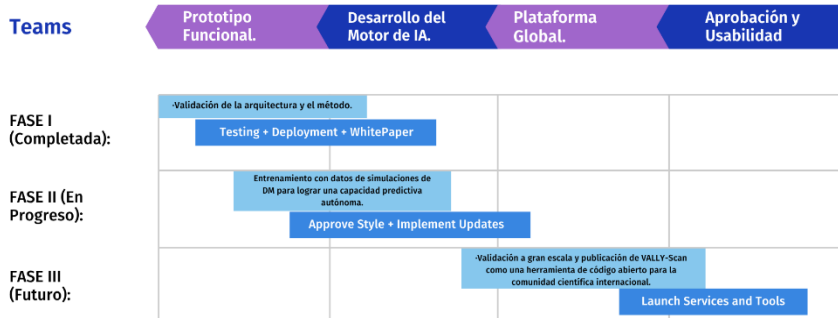
## Hoja de Ruta - Hacia una Plataforma Predictiva Autónoma

Este prototipo es el cimiento de un ambicioso proyecto de investigación doctoral destinado a consolidar a V.A.L.L.Y. como una plataforma robusta, autónoma y al servicio de la ciencia global.

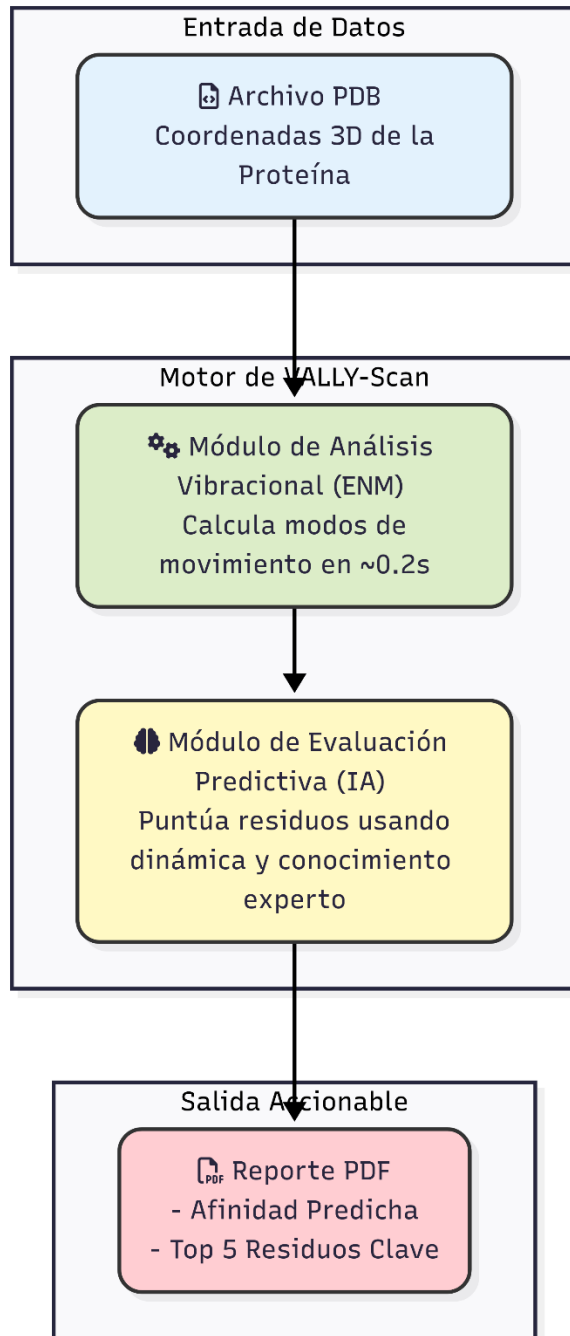
- **FASE I (Completada):** Prototipo Funcional. Validación de la arquitectura y el método.
- **FASE II (En Progreso):** Desarrollo del Motor de IA. Entrenamiento con datos de simulaciones de DM para lograr una capacidad predictiva autónoma.
- **FASE III (Futuro):** Plataforma Global. Validación a gran escala y publicación de VALLY-Scan como una herramienta de código abierto para la comunidad científica internacional.

## PROYECTO V.A.L.L.Y.

 | v1.0 (Prueba de Concepto) |  
Autor: Lionel E. Nava Ramos.



## Flujo de Trabajo de V.A.L.L.Y.:



RESULTADOS DETALLADOS DE LA PRUEBA DE CONCEPTO:  
REPORTES EMITIDOS

Proyecto V.A.L.L.Y.

Análisis Vibracional para la Probabilidad del Ligando

Resumen del Análisis

Estructura (PDB ID): 2FOM

Objetivo Terapéutico: Proteasa del Virus del Dengue (NS2B/NS3)

Fecha de Generación: 2025-10-01 00:12:39

Método Utilizado: Modelo de Red Elástica (ANM) + Predictor Heurístico Informado

Hardware Utilizado: CPU de Escritorio Estándar

Resultados de la Predicción

Afinidad de Enlace Predicha:

-11.54  
kcal/mol

Top 5 Residuos de Mayor Impacto:

1. GLY 43
2. SER 44
3. HIS 45
4. MET 46
5. ILE 30

Proyecto V.A.L.L.Y.

Análisis Vibracional para la Probabilidad del Ligando

Resumen del Análisis

Estructura (PDB ID): 6LU7

Objetivo Terapéutico: Proteasa Principal del SARS-CoV-2 (Mpro)

Fecha de Generación: 2025-10-01 11:39:02

Método Utilizado: Modelo de Red Elástica (ANM) + Predictor Heurístico Informado

Hardware Utilizado: CPU de Escritorio Estándar

Resultados de la Predicción

Afinidad de Enlace Predicha:

-10.99  
kcal/mol

Top 5 Residuos de Mayor Impacto:

1. GLY 278
2. ASN 277
3. ARG 279
4. ASN 274
5. GLN 306

Contacto:

Lionell E. Nava Ramos

Ingeniero en Informática | Candidato a Doctorado en Biofísica Computacional.

Email: lionnava@gmail.com | LinkedIn: linkedin.com/in/lionell-nava

El Proyecto V.A.L.L.Y. es una iniciativa de investigación y desarrollo inspirada en la visión de un futuro más saludable y dedicada a Vally Ramos, mi Madre.

© 2024 Lionell E. Nava Ramos. Todos los derechos reservados.