1. INFORMACIÓN GENERAL DEL PROYECTO:

Título: *Modelado de cadenas de ADN a escala mesoscópica usando redes neuronales avanzadas para aplicaciones biomédicas y nanotecnológicas*	
Línea Matriz de Investigación: (Manual de Líneas de Investigación): Línea Matriz de Investigación en Ciencias Básicas (LMI-CB)	
Nombre de la Sede de ejecución del Proyecto: **Oriente** - De acuerdo al numeral 1 de los términos de referencia.	
Nombre del(los) Objetivo(s) de Desarrollo(s) Sostenible: Salud y Bienestar (ODS 3), Industria, Innovación e Infraestructura (ODS 9)	
Duración del Proyecto (en meses): 12 meses	
Financiación	
Valor solicitado al Politécnico (en efectivo): $60000000	
Valor solicitado al Politécnico (en especie): $23046859	
Valor aprobado por otra entidad (en efectivo): $0	
Valor aprobado por otra entidad (en especie): $27739313	
Valor total del proyecto (efectivo + especie): $110786172	
Administrador del Presupuesto (solo personal vinculado, si aplica): Stiven Villada Gil	C.C. 8104092
Correo electrónico: svillada@elpoli.edu.co	Teléfono: 3014897403
Dirección de correspondencia: Carrera 48 No. 7-151 Oficina P19-131	
Nombre del Grupo de Investigación: Grupo de Ciencias y Educación (GICED)	
Equipo Investigador	
Investigador Principal: Stiven Villada Gil	C.C. 8104092
Correo electrónico: svillada@elpoli.edu.co	Teléfono: 3014897403
Nombre de la Facultad: Facultad de Ciencias y Educación	
Tipo de Vinculación con la Institución: Docente Ocasional de Tiempo Completo	
Nombre de la Sede (Sede Central o Regiones: Urabá, Rionegro, Granjas): Sede Central	
Dirección de correspondencia: Carrera 48 No. 7-151 Oficina P19-131	
Nombre del Grupo de Investigación: Grupo de Ciencias y Educación (GICED)	
Nombre del Semillero de Investigación: Semillero de didáctica de la Física	
Conivestigador 1: Jarol Molina Mosquera	C.C. 83091057
Correo electrónico: jarol.molina@pascualbravo.edu.co	Teléfono: 3174313703
Nombre de la Facultad: Facultad de Ingeniería	
Tipo de Vinculación con la Institución: Personal Externo	
Nombre de la Sede (Sede Central o Regiones: Urabá, Rionegro, Granjas): Institución Universitaria Pascual Bravo	
Dirección de correspondencia: Cl. 73 # 73a-226	
Nombre del Grupo de Investigación: Grupo de Investigación e Innovación en energía (GIIEN)	
Nombre del Semillero de Investigación: Modelado Computacional	

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Conivestigador 2: Alejandro Vasquez Echeverri		C.C. 1037573815	
Correo electrónico: avasquezdais@gmail.com		Teléfono: 317 3195888	
Nombre de la Facultad: Facultad de Ciencias y Educación			
Tipo de Vinculación con la Institución: Docente de cátedra			
Nombre de la Sede (Sede Central o Regiones: Urabá, Rionegro, Granjas): Sede Central			
Dirección de correspondencia: Carrera 48 No. 7-151 Oficina P19-131			
Nombre del Grupo de Investigación: Grupo de Ciencias y Educación (GICED)			
Nombre del Semillero de Investigación: Semillero de didáctica de la Física			
Estudiantes en Formación		Trabajo de pregrado*	
		Si	No
Estudiante 1: por definir	C.C.		X
Correo electrónico:	Teléfono:		
Nombre del Semillero de Investigación:	Facultad:		

2. RESUMEN PROYECTO (*Máximo 250 palabras)*

Este proyecto presenta un enfoque innovador para el modelado de cadenas de ADN a escala mesoscópica, destacando la importancia crítica de entender el comportamiento físico del ADN para su manipulación en aplicaciones biomédicas y nanotecnológicas. A pesar de los avances en la modelización atómica mediante campos de fuerza como CHARMM y AMBER, los costos computacionales impiden la simulación de procesos biológicos a escalas temporales y de tamaño relevantes para la biología. Por lo tanto, esta investigación se enfoca en desarrollar un modelo simplificado a través de la técnica de grano grueso (Coarse Graining, CG), construido mediante el uso de herramientas de aprendizaje profundo para superar las limitaciones actuales en el modelado del ADN. Se pone a prueba la eficacia de los modelos de aprendizaje profundo para predecir el comportamiento del ADN bajo diversas concentraciones iónicas y su capacidad de extrapolación más allá de los valores con los que fueron entrenados. Este trabajo no solo aborda desafíos fundamentales en la comprensión de la topología y compactación del ADN, sino que también explora la dinámica de su interacción con otras macromoléculas y su aplicación en el desarrollo de técnicas emergentes, como el ADN origami para la administración de fármacos. En consonancia con la ODS 3 (Salud y Bienestar) y la ODS 9 (Industria, Innovación e Infraestructura), este estudio busca superar barreras computacionales y de conocimiento, estableciendo bases sólidas para futuras investigaciones y aplicaciones prácticas en la ingeniería genética y la medicina personalizada.

3. DESCRIPCIÓN DEL PROYECTO

3.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA (*Máximo 1.000 palabras)*

El ADN contiene toda la información necesaria para los procesos de regulación y replicación a nivel celular; sin embargo, la comprensión física de su comportamiento es aún limitada. Dicha comprensión es imprescindible para entender sus propiedades y

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

funciones específicas. Por ejemplo, existen dificultades en la comprensión de la topología durante el proceso de replicación [1], y hay vacíos en el conocimiento del proceso de compactación [2]. Además, se reconoce un entendimiento limitado de la interacción dinámica entre el ADN y otras macromoléculas. [3]. Cambiando de escala, el estudio del ADN a nivel nanométrico ha sido un foco de interés en los últimos años. La relevancia de la nanoescala se ilustra en el desarrollo del ADN origami, que ha encontrado aplicaciones versátiles, como la construcción de nanojaulas para la administración de fármacos en tratamientos contra el cáncer y otras enfermedades [4-6].

Cualquier aplicación requiere un conocimiento detallado del comportamiento físico del ADN, desde el nivel atomístico (nanómetros) hasta el macromolecular o mesoscópico (milimétrico), para poder manipular, cortar o unir cadenas, lo que permite diseñar y controlar sistemas basados en las propiedades atómicas o macromoleculares del ADN. En el área de los campos de fuerza utilizados para modelar interacciones átomo-átomo (AA) en el ADN, se ha logrado un progreso considerable. Campos de fuerza AA como CHARMM [7] o AMBER [8] ofrecen un alto nivel de detalle. Estos han sido perfeccionados para añadir nuevas características o para mejorar aspectos como la polarización y la interacción con proteínas, entre otros [9-13]. No obstante, el elevado costo computacional limita su aplicación práctica a simulaciones que abarcan millones de átomos y microsegundos [14]. Generalmente, la observación de procesos de interés biológico requiere escalar a miles de millones de átomos y milisegundos o incluso segundos de tiempo de simulación; estas magnitudes de tiempo y tamaño aún están fuera del alcance con técnicas como la Dinámica Molecular Átomo-Átomo (AA-MD) [15-16].

Esta propuesta tiene como objetivo modelar cadenas de ADN a escala mesoscópica. Para ello, se utilizarán datos procedentes de simulaciones moleculares, que son representaciones precisas del comportamiento a nivel molecular. Mediante el uso de herramientas de aprendizaje profundo (Deep Learning), se pretende construir modelos más sencillos, conocidos como modelos de grano grueso (Coarse Graining, CG), que reproduzcan con la mayor fidelidad posible el comportamiento del sistema “real” (sistema atomístico, AA). Aunque esta no es una novedad, la extrapolación sigue siendo un problema en estos sistemas. En este trabajo, se propone desarrollar un modelo de ADN entrenado con técnicas de Deep Learning, utilizando para el entrenamiento diferentes valores de concentración de iones (concentración iónica) y comprobar si el modelo entrenado puede extrapolarse a valores de concentración iónica distintos a aquellos con los que se le entrenó.

3.2 MARCO TEÓRICO (*Máximo 3.000 palabras)*

Para modelar sistemas de tamaño mesoscópico, la técnica que se utiliza tradicionalmente consiste en agrupar átomos en unidades de interacción conocidas como perlas o 'beads'. Esta metodología reduce la resolución del modelo, pero permite simular sistemas en escalas de tiempo y espacio que no son factibles para modelos AA debido al elevado costo computacional. A este tipo de representación se le conoce como modelo CG, y existen varias propuestas para implementar este proceso [17-22]. En general, un modelo CG se compone de dos elementos principales: i) el modelo de mapeo, que establece la correspondencia entre el modelo de alta resolución o FG (modelo de grano fino, como

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

puede ser un modelo AA) y el CG; ii) la definición del espacio de estado del modelo CG, es decir, la formulación de las ecuaciones de estado que regulan el sistema CG basadas en el análisis estadístico del modelo FG. Estas ecuaciones pueden definirse a través de a) ecuaciones de movimiento o b) interacciones energéticas. Un resumen de estos conceptos se ilustra en la figura 1, extraída de [23].

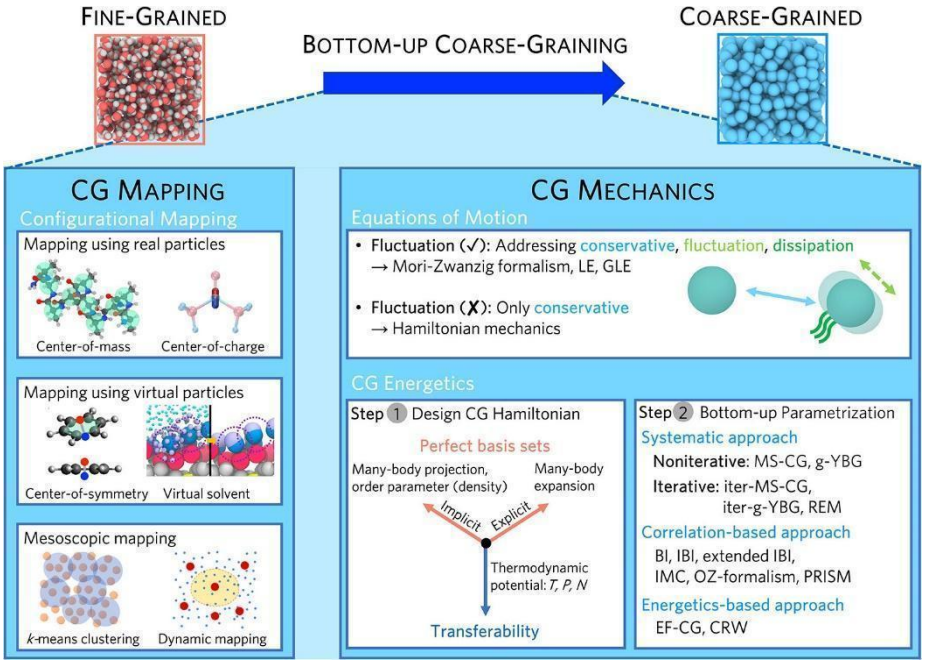


Figura 1. Resumen de la estrategia de modelado CG tomado de [23]

El desafío con los modelos CG radica en definir un esquema de mapeo y ecuaciones de estado adecuadas; una tarea que es más un arte que una ciencia exacta. Por esta razón, en trabajos recientes se ha empezado a utilizar el aprendizaje automático (Machine Learning, ML) para mejorar la precisión de estos modelos. Por ejemplo, para el SARS-CoV-2, se desarrolló un modelo ML informado físicamente: se partió de un modelo AA con 22,815 átomos que se simplificó a un modelo CG de solo 60 partículas representativas. En este enfoque, se creó un campo de fuerza potencial análogo a los usados en los sistemas AA, y los parámetros de dicho campo fueron ajustados con ML utilizando los datos de coordenadas atómicas proporcionados por el modelo AA [14]. Una estrategia similar se ha empleado para modelar el plegamiento de proteínas [24]. En general, esta estrategia implica usar ML para optimizar la búsqueda de parámetros energéticos en campos de potencial tradicionales, parecidos a los usados en los sistemas AA, pero aplicados a conglomerados de átomos representados por las 'beads' en los modelos CG [25, 26], constituyendo en esencia un proceso de calibración de parámetros.

Un enfoque alternativo propuesto en [27] busca desarrollar un modelo que minimice el error en comparación con los datos utilizados durante el entrenamiento. Este error se analiza descomponiéndolo en sesgo, varianza y ruido. El método implica tomar una representación del modelo AA, que consta de un conjunto de coordenadas **r** en un

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

espacio tridimensional R^{3N}, donde N denota el número de átomos o entidades. Posteriormente, esta representación se transforma en un sistema de dimensiones reducidas n, que corresponde a la representación CG. El proceso se detalla en la ecuación (1).

$$x = \xi(r) \in R^{3n} \qquad (1)$$

Donde **x** son las coordenadas del sistema CG. con n < N. Se asume que ξ es una función lineal, lo que implica la existencia de una matriz que agrupa los datos originales en 'beads' dentro del sistema CG. Dicha matriz actúa como una transformación, estableciendo una conexión entre las fuerzas del modelo AA y las del modelo CG. Considerando la energía del sistema CG, se define una función potencial U(x;θ). Para un set de M configuraciones CG obtenidas, aplicando la ecuación anterior se obtiene la ecuación 2 que es para un tiempo t instantáneo o definido e igual entre los sistemas AA y CG:

$$\nabla U(\xi(r);\theta) = \nabla_x U(x;\theta) \qquad (2)$$

En la ecuación (2), ***r*** simboliza las coordenadas del sistema AA, mientras que ***x*** indica las del sistema CG. La ecuación (2) se aplica individualmente a cada configuración posible del sistema, lo cual nos permite formular una ecuación para el ajuste de fuerzas que adopta la estructura mostrada en la ecuación (3):

$$L(r;\theta) = \frac{1}{3Nn}\sum_{i=1}^{N} \quad \|\xi(F(r)) + \nabla U(\xi(r);\theta\|^2 \qquad (3)$$

El primer término de la ecuación (3) representa las fuerzas reales mapeadas al modelo CG desde el modelo AA. El segundo término corresponde a las fuerzas (negativas) obtenidas por el modelo CG. Así, la ecuación (3) establece una comparación de error cuadrático entre los valores reales y aquellos propuestos por el modelo CG. Esta comparación es conocida como la función de pérdida, la cual es minimizada por la red neuronal. El término U de energía en la ecuación (3) tiene una correspondencia termodinámica exacta entre la energía del modelo CG y el sistema atomístico, que se expresa de la siguiente manera:

$$U(x) = -k_B T ln\left(p^{CG}(x)\right) + CST \qquad (4)$$

La función de energía descrita en la ecuación (4) se identifica como el potencial de campo medio (PMF, por sus siglas en inglés) del sistema CG, en la que k_B representa la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta. La función p^{CG} es una densidad de probabilidad que se expresa a continuación.

$$p^{CG}(x) = \frac{\int \quad exp\left(-\frac{V(r)}{k_B T}\right)\delta(x-\xi(r))dr}{\int \quad exp\left(-\frac{V(r)}{k_B T}\right)dr} \qquad (5)$$

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

En la ecuación (5), se integra sobre todas las posibles configuraciones del sistema AA, donde ***V(r)*** es la función de potencial correspondiente. Respecto a la función delta de Dirac, se nota que su valor es uno cuando hay una correspondencia entre las configuraciones atomísticas y las configuraciones de grano grueso, reflejando así la contribución del sistema atomístico. Por otro lado, cuando no hay correspondencia entre x y r, el valor de la delta de Dirac es cero, indicando que no hay contribución de dicha configuración atomística a la densidad de probabilidad p^{CG}.

Finalmente, la arquitectura de la red neuronal está diseñada para minimizar la función de pérdida descrita en la ecuación (3). Para ello, es necesario contar con un modelo energético a priori, que podría ser una función de repulsión del tipo Lennard-Jones (LJ) y un potencial de Hooke para átomos o 'beads' enlazados. Estos parámetros pueden establecerse antes del entrenamiento mediante técnicas de ajuste, o bien, pueden ser determinados por otra red neuronal, tal como sugieren las referencias [28-30]. Basándose en esta aproximación inicial, se emplea una red neuronal para aprender a corregir los errores energéticos en cada iteración de entrenamiento. Dado que la fuerza es el gradiente de la energía, se utiliza un 'framework' con autodiferenciación, siendo PyTorch [31] uno de los más utilizados, aunque no el único. Este marco permite derivar la energía en función de las coordenadas del sistema original y compararla con las fuerzas conocidas del conjunto de entrenamiento. En términos generales, se define el error promedio como se muestra en la ecuación 6:

$$\chi^2(\theta) = \langle \| \xi(F(r)) + \nabla U(\xi(r); \theta \|^2 \rangle_r \quad (6)$$

Donde $\langle . \rangle$ denota el promedio sobre la distribución en equilibrio. Basándonos en la ecuación anterior, definimos el PMF como:

$$f(x) = \langle \xi(F(r)) \rangle_{x|r} \quad (7)$$

Aquí, el subíndice x|r indica que se trata de la distribución en equilibrio de r, restringida a las coordenadas x del sistema CG. Un esquema gráfico que ejemplifica el proceso de CG-Deep Learning se encuentra en la referencia [32] y se presenta de manera ilustrativa en la Figura 2.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

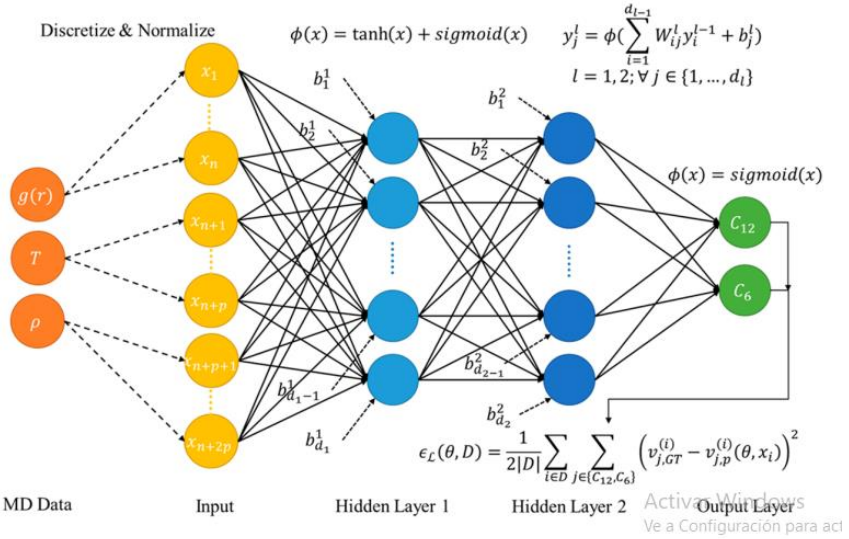


Figura 2. Representación esquemática del Deep neural network, tomado de [32]

Los sistemas CG, tanto los que han sido entrenados como los construidos mediante técnicas clásicas, son extrapolables en términos de escala [17, 33-35] y, en menor medida, de temperatura [36, 37]. No obstante, en el caso de los fluidos iónicos, como el agua con iones disueltos, las extrapolaciones a sistemas con concentraciones mayores o menores no son directas. Los iones en solución pueden solvatar a los macroiones, alterando sus tamaños aparentes en función de las longitudes de Debye, lo que resulta en cambios significativos en la dinámica y el comportamiento del sistema. Por lo general, los sistemas iónicos presentan una complejidad elevada, incluso para los modelos AA [38-40]. En este estudio, se adoptará la estrategia propuesta en [37] para el modelo CG combinado con aprendizaje profundo (Deep Learning), aplicándola a un modelo de ADN con iones en solución, con el objetivo de construir un modelo que pueda extrapolarse eficazmente en cuanto a la concentración de iones.

3.3 OBJETIVOS DEL PROYECTO

3.3.1 Objetivo General

Entrenar una red neuronal para modelar un sistema CG de ADN que reproduzca fielmente las variaciones estructurales derivadas del cambio en la concentración de iones en solución.

3.3.2 Objetivos Específicos

- Definir el modelo completamente atomístico AA de una cadena de ADN con NaCl para realizar simulaciones mediante dinámica molecular (MD).
- Establecer el modelo CG de la cadena de ADN y ajustar el campo de potencial inicial del modelo CG.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

- Emplear la teoría CGSchNet para entrenar el modelo CG-DNA, empleando datos obtenidos de la simulación MD-AA.

3.4 METODOLOGÍA PROPUESTA

3.4.1 Diseño (*Máximo 200 palabras)*

- ***Definición de la estrategia de simulación:*** *En la primera etapa del proyecto, se establecerá la estrategia de simulación para modelar el sistema de ADN completamente atomístico. Esto implica la elección del tipo de modelo o campo de potencial a utilizar, así como la determinación del tamaño del segmento de ADN a modelar. Entre los campos de potencial disponibles, se considerarán CHARMM, AMBER y GROMOS. Posteriormente, se seleccionará el software de dinámica molecular adecuado, con un enfoque particular en la eficiencia al utilizar unidades de procesamiento gráfico (GPUs). Se dará preferencia a OpenMM para las simulaciones de ADN debido a su eficiencia.*

3.4.2 Características de los participantes (*Máximo 200 palabras)*

Los sujetos de este estudio son representados por sistemas moleculares simulados que conforman cadenas de ADN. No se establecen criterios de inclusión ni exclusión, dado que la selección se fundamenta en modelos moleculares particulares. Se implementará un muestreo probabilístico tanto en las simulaciones preliminares como en el experimento final, asegurando así una diversidad representativa de condiciones de concentración de NaCl.

3.4.3 Procedimiento *(Máximo 250 palabras)*

- ***Simulaciones preliminares para selección de condiciones:*** *Una vez definida la estrategia de simulación, se llevarán a cabo simulaciones preliminares con diferentes longitudes de cadenas de ADN y concentraciones de NaCl. Estas simulaciones ayudarán a estimar los tiempos requeridos para las simulaciones MD-AA y permitirán la selección de cuatro concentraciones de NaCl de interés biológico. Tres de estas concentraciones se utilizarán para el entrenamiento de la red neuronal, mientras que la cuarta se reservará para la validación del modelo.*

- ***Modelado del ADN en la escala CG:*** *La construcción de un modelo a nivel de grano grueso (CG) de ADN es un paso crucial en el proyecto. Se basará en investigaciones previas y representará cada nucleótido con un único "bead". El objetivo es modelar cadenas de al menos 20 nucleótidos, aunque esto estará limitado por las capacidades del sistema MD-AA. Una vez determinado el número de nucleótidos, se realizará un ajuste inicial del campo de potencial CG para iniciar el entrenamiento. Esta calibración puede llevarse a cabo mediante técnicas de optimización directa o utilizando otra red neuronal.*

3.4.4 Análisis de Información *(Máximo 200 palabras)*

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

- ***Entrenamiento de la red neuronal:*** *Utilizando los resultados del modelo MD-AA y el campo de potencial CG ajustado, se establecerá la interfaz con las bibliotecas de PyTorch para entrenar la red neuronal. La red se entrenará utilizando datos de tres simulaciones MD-AA a distintas concentraciones de NaCl. La validación del modelo se realizará utilizando la cuarta concentración de NaCl.*

- ***Experimento computacional final:*** *La etapa final del experimento implicará la simulación de un sistema que contenga una cadena de ADN de mayor tamaño (50 kbp) a varias concentraciones de NaCl. Este estudio permitirá explorar el comportamiento estructural del ADN en escalas más largas y comparar los resultados con datos experimentales para evaluar la precisión y la extrapolabilidad del modelo.*

3.5 CRONOGRAMA

ACTIVIDAD	TIEMPO (MESES)											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Revisión Bibliográfica												
Definición Modelo AA												
Definir concentración de NaCl												
Correr simulación MD-AA												
Establecer el modelo CG del DNA												
Realizar los ajustes iniciales de los parámetros CG-DNA												
Entrenar el modelo CG-DNA												
Preparación de evento científico												
Validación del modelo entrenado CG-DNA												
Escritura Artículo												
Escritura informe final												

3.6 COMPROMISOS DE PRODUCCIÓN Y ESTRATEGIAS DE COMUNICACIÓN

Compromisos de producción:

- Una (1) publicación en revista indexada Publindex Minciencias: A1, A2 o B.
- Un (1) producto de apropiación social del conocimiento: participación en evento científico en el que se mostrarán resultados producto de la investigación.

Estrategias de comunicación:

- Elaboración y entrega del Informe Final del Proyecto.
- Evento de Divulgación Interna de resultados (previa programación desde la Dirección de Investigación y Posgrados y con el apoyo Oficina Asesora de comunicación).
- Propuesta de Impacto del Currículo.

Formación de recurso humano:

- Un estudiante en formación de pregrado.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

3.7 RESULTADOS ESPERADOS

OBJETIVO	RESULTADO	RESPONSABLE	INDICADOR DE LOGRO	MES DE CUMPLIMIENTO
Definir el modelo completamente atomístico AA de una cadena de ADN con NaCl para realizar simulaciones mediante dinámica molecular (MD).	Fuerzas de interacción de molecular entre el agua, iones y DNA, además de parámetros como longitud de persistencia de DNA con la concentración iónica	Stiven Villada Gil (Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid). Jarol Molina Mosquera (Institución Universitaria Pascual Bravo) Alejandro Vasquez Echeverri (Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid).	Resultados de datos numéricos de simulaciones del modelo átomo-átomo de MD	Quinto mes
Establecer el modelo CG de la cadena de ADN y ajustar el campo de potencial inicial del modelo CG.	Definir el modelo de CG del DNA, definir cuántos sitios por nucleótido definirán una base de DNA.	Stiven Villada Gil (Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid). Jarol Molina Mosquera (Institución Universitaria Pascual Bravo) Alejandro Vasquez Echeverri (Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid).	Modelo CG de DNA	Quinto mes
Emplear la teoría CGSchNet para entrenar el modelo	Entrenar la red neuronal para obtener los parámetros del campo de	Stiven Villada Gil (Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid).	Campo de potencial de la red neuronal definido y	

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

CG-DNA, empleando datos obtenidos de la simulación MD-AA.	potencia de modelo CG del DNA definido	Jarol Molina Mosquera (Institución Universitaria Pascual Bravo) Alejandro Vasquez Echeverri (Politécnico Colombiano Jaime Isaza Cadavid).	validado con el 20% de los datos atomísticos.	Décimo mes

3.8 COMPROMISOS DE LAS ENTIDADES EXTERNAS PARTICIPANTES (Si Aplica)

INFORMACIÓN GENERAL DE ENTIDAD PARTICIPANTE	
Entidad	Institución Universitaria Pascual Bravo
NIT	890.980.153-1
País	Colombia
Dirección	Cl. 73 # 73a-226
Teléfono	(604) 4480520
Dirección electrónica	investigacionaplicada@pascualbravo.edu.co
Representante legal-cédula	JUAN PABLO ARBOLEDA GAVIRIA, CC 71.388.513
Compromisos	
1. Una (1) publicación en revista indexada Publindex Minciencias: A1, A2 o B	
2. Un (1) producto de apropiación social del conocimiento: participación en evento científico en el que se mostrarán resultados producto de la investigación	
3. Proporcionar al docente las horas definidas en el aval (3 horas semana) para participar en el proyecto	

Nota: Las propuestas de investigación que se presenten con personal externo, cumplen en el proceso las siguientes fases:
Carta de contrapartida o intensión
Convenio Marco de cooperación entre las entidades
Convenio Específico en desarrollo del proyecto

3.9 COMUNIDAD IMPACTADA CON EL DESARROLLO DE LA PROPUESTA (directa e indirecta)

3.9.1 Impacto Social: *(Máximo 250 palabras)*

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

El impacto del proyecto en el Oriente Antioqueño y en nuestra institución será trascendental, alineándose con las metas de Salud y Bienestar (ODS 3) e Industria, Innovación e Infraestructura (ODS 9). Desde una perspectiva de salud, la investigación biomolecular y simulación de cadenas de ADN abrirán posibilidades para avances médicos significativos, permitiendo diagnósticos más precisos y terapias personalizadas. En términos de desarrollo regional, la implementación de estas tecnologías avanzadas fortalecería la infraestructura científica y tecnológica en la región, propiciando la innovación y posicionando al Oriente Antioqueño como un centro especializado en biotecnología y nanotecnología, lo que la ayudaría a consolidar como un referente en el ámbito tecnológico a nivel nacional e internacional.

3.9.2 Impacto al Currículo: *(Máximo 250 palabras)*

La implementación del proyecto impactará de manera significativa y contundente el currículo de las asignaturas de ciencias básicas e ingeniería en la institución, sentando las bases para una propuesta de creación de un nuevo semillero de investigación especializado en **modelación y simulación**. Este proyecto servirá como cimiento para la formación del semillero en mención que se enfocaría en la investigación interdisciplinaria, explorando las aplicaciones de la simulación molecular en la ingeniería y la biotecnología. Los posibles participantes del semillero podrían estar involucrados en proyectos de investigación que aborden desafíos contemporáneos utilizando herramientas de modelación, como el diseño eficiente de nuevos materiales o la optimización de procesos físicos. Este enfoque práctico no sólo enriquecerá la experiencia de aprendizaje de los estudiantes, sino que también contribuirá al avance de la investigación en ciencias básicas e ingeniería en la institución.

3.10 ASPECTOS ÉTICOS *(Máximo 200 palabras)*

Este proyecto no genera impacto ambiental medible, no usa material tóxico o difícil de procesar. Adicionalmente, el desarrollo de este proyecto no involucra estudios en seres humanos ni en animales, y no genera impactos negativos en el medio ambiente dado su carácter computacional. El trabajo se limita a estudios *in silico* con un alcance claramente definido. Todos los resultados obtenidos serán presentados con honestidad y analizados contrastando la literatura científica, respetando la propiedad intelectual y realizando las debidas citaciones. No se realizará ninguna manipulación ni falsificación de datos, y se asumirá la responsabilidad por cualquier error que pueda surgir a lo largo del proyecto. Se reconocerá adecuadamente a los autores y colaboradores correspondientes.

4.0 FUNCIONES DEL ESTUDIANTE

NOMBRE DEL ESTUDIANTE	COMPROMISOS
Por definir.	Realizar una documentación rigurosa de los procesos, resultados y hallazgos, facilitando la transparencia, la replicabilidad y el intercambio efectivo de conocimientos en el equipo de investigación.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

	Colaborar estrechamente en la optimización de algoritmos utilizados en las simulaciones, contribuyendo a la eficiencia y precisión de los resultados. Familiarizarse y adaptarse rápidamente a herramientas clave como OpenMM, facilitando una integración fluida en el entorno de trabajo del proyecto.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

5. PRESUPUESTO

Tabla 5.1 Presupuesto global de la propuesta por fuentes de financiación.

RUBROS	FUENTES				TOTAL
	CONTRAPARTIDA PCJIC		OTRAS ENTIDADES *		
	Flujo de Efectivo	Recursos Propios	Flujo de Efectivo	Recursos Propios	
Personal (*Integrantes equipo Investigador***)**	22000000	20346859	0	24755025	67101884
Equipos	28000000	0	0	0	28000000
Software	0	0	0	0	0
Materiales y suministros	0	2700000	0	2984288	5684288
Salidas de campo	0	0	0	0	0
Publicaciones y patentes	8000000	0	0	0	8000000
Prestación de servicios profesionales	0	0	0	0	0
Viajes	2000000	0	0	0	2000000
Totales	60000000	23046859	0	27739313	110786172

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Tabla 5.1.1. Descripción mensual del valor de la ejecución del presupuesto

RUBROS	EJECUCIÓN MENSUAL											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Personal (*Integrantes equipo Investigador*)	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833337
Equipos	28000000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Software	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Materiales y suministros	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Salidas de campo	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Publicaciones y patentes	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8000000
Prestación de servicios profesionales	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Viajes	0	0	0	0	0	0	0	0	2000000	0	0	0
Totales	29833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	1833333	3833333	1833333	1833333	9833337

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Tabla 5.2 Descripción de los gastos de personal.

INVESTIGADOR / COINVESTIGADOR / ESTUDIANTE EN FORMACIÓN	FORMACIÓN ACADÉMICA	FUNCIÓN DENTRO DEL PROYECTO	DEDICACIÓN (hora / semana)	FUENTES				TOTAL
				Contrapartida PCJIC		Otras entidades		
				Flujo de efectivo	Recursos Propios	Flujo de efectivo	Recursos Propios	
Stiven Villada Gil	Doctor en ingeniería	Investigador principal	6	0	20346859	0	0	20346859
Jarol Molina Mosquera	Doctor en ingeniería	Co-investigador	3	0	0	0	24755025	24755025
Alejandro Vasquez Echeverri	Magister en matemáticas aplicadas	Co-investigador	10	18000000	0	0	0	18000000
Por definir	Estudiante del PCJIC	Estudiante en formación	4	4000000	0	0	0	4000000
TOTAL				22000000	20346859	0	24755025	67101884

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Tabla 5.3 Descripción de los equipos que se planea adquirir y de uso propio.

EQUIPO	JUSTIFICACIÓN	FUENTES				TOTAL
		Contrapartida PCJIC		Otras entidades		
		Flujo de efectivo	Recursos Propios	Flujo de efectivo	Recursos Propios	

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Equipo de computo de alto rendimiento con características similares o mejores a las siguientes: - Memoria: 96G ó 128G de RAM. - Disco: 2 TB, M.2, PCIe NVMe, SSD. - Procesador: Intel® Xeon® W3-2423 (15 MB cache, 6 cores, 12 threads, 2.1 GHz to 4.2 GHz Turbo, 120 W) - Tarjeta de Video: NVIDIA® RTX™ A4500, 20 GB GDDR6, 4 DP. - Monitor P27222H	La adquisición de un computador de última generación es indispensable para el éxito del proyecto, debido a la complejidad y exigencias computacionales inherentes a la simulación molecular y el modelado de cadenas de ADN. Este equipo avanzado permitirá una ejecución eficiente de algoritmos de dinámica molecular y simulaciones detalladas, optimizando la precisión y rapidez en la generación de resultados. La capacidad de procesamiento mejorada, especialmente en unidades de procesamiento gráfico (GPUs) y una alta RAM, es crucial para manejar grandes conjuntos de datos y para el postprocesamiento de la información. Además, la compra de este computador garantizará la compatibilidad con software libre especializado como OpenMM, proporcionando una plataforma robusta y compatible con las últimas herramientas de modelado y simulación, lo que sin duda será vital para el cumplimiento de los objetivos científicos del proyecto.	28000000	0	0	0	28000000
TOTAL		28000000	0	0	0	28000000

icontec ISO 9001 SC5206-1
CERTIFIED IQNet MANAGEMENT SYSTEM

Tabla 5.4 Descripción de software que se planea adquirir y de uso propio.

NOMBRE DE SOFTWARE	JUSTIFICACIÓN	FUENTES				TOTAL
		Contrapartida PCJIC		Otras entidades		
		Flujo de efectivo	Recursos Propios	Flujo de efectivo	Recursos Propios	
No aplica	En este proyecto, emplearemos OpenMM, un software de dinámica molecular de código abierto. Dado su carácter gratuito, no se requieren recursos financieros adicionales para adquirir licencias, lo que optimiza la disponibilidad de recursos para otras áreas del proyecto.	0	0	0	0	0
TOTAL		0	0	0	0	0

Tabla 5.5 Descripción y justificación de los viajes para el cumplimiento de la presentación de resultados del proyecto en eventos de socialización.

Lugar	Justificación **	Pasajes ($)	Estadía ($)	Total días	FUENTES				TOTAL
					Contrapartida PCJIC		Otras Entidades		
					Flujo de efectivo	Recursos Propios	Flujo de efectivo	Recursos Propios	
Por definir	Inscripción, pasajes y alojamiento para evento nacional en el año 2024	1000000	1000000	5	2000000	0	0	0	2000000
TOTAL					2000000	0	0	0	2000000

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Tabla 5.6 Descripción y justificación de las salidas de campo.

Lugar /No. de viajes	Justificación**	Pasajes ($)	Estadía ($)	Total días	FUENTES				TOTAL
					Contrapartida PCJIC		Otras Entidades		
					Flujo de efectivo	Recursos Propios	Flujo de efectivo	Recursos Propios	
No aplica	En este proyecto de modelación y simulación, no se requieren salidas de campo, ya que la investigación se centra en análisis computacionales y simulaciones, eliminando la necesidad de desplazamientos, lo que optimiza la disponibilidad de recursos para otras áreas del proyecto.	0	0	0	0	0	0	0	0
TOTAL					0	0	0	0	0

Tabla 5.7 Materiales, suministros y bibliografía.

Materiales*	Justificación	FUENTES				TOTAL
		Contrapartida PCJIC		Otras Entidades		
		Flujo de efectivo	Recursos Propios	Flujo de efectivo	Recursos Propios	
Uso de bases de datos	Búsqueda de información científica relevante al proyecto	0	2700000	0	2984288	5684288
TOTAL		0	2700000	0	2984288	5684288

Pueden agruparse por categorías, Ejemplo: vidriería, reactivos, papelería, suscripciones a revistas, libros, etc.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Tabla 5.8 Prestación de servicios profesionales.

No aplica.

Tipo de servicio	Justificación	FUENTES				TOTAL
		Contrapartida PCJIC		Otras Entidades		
		Flujo de efectivo	Recursos Propios	Flujo de efectivo	Recursos Propios	
TOTAL						

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

6. BIBLIOGRAFÍA *(Mínimo 20 referencias)*

[1] L. Postow, C. Ullsperger, R. W. Keller, C. Bustamante, A. V. Vologodskii, and N. R. Cozzarelli, “Positive Torsional Strain Causes the Formation of a Four-way Junction at Replication Forks,” Journal of Biological Chemistry, vol. 276, no. 4. Elsevier BV, pp. 2790–2796, Jan. 2001. doi: 10.1074/jbc.m006736200.

[2] H. Schiessel, “The physics of chromatin.” arXiv, 2003. doi: 10.48550/ARXIV.COND-MAT/0303455.

[3] J. Vermehren et al., “Multicenter Comparison Study of both Analytical and Clinical Performance across Four Roche Hepatitis C Virus RNA Assays Utilizing Different Platforms,” Journal of Clinical Microbiology, vol. 55, no. 4. American Society for Microbiology, pp. 1131–1139, Apr. 2017. doi: 10.1128/jcm.02193-16.

[4] W. G. Noid et al., “The multiscale coarse-graining method. I. A rigorous bridge between atomistic and coarse-grained models,” The Journal of Chemical Physics, vol. 128, no. 24. AIP Publishing, Jun. 27, 2008. doi: 10.1063/1.2938860.

[5] K. A. Ullal, “DNA Origami: Its Evolution and Application in Nanotechnology,” International Journal of High School Research, vol. 4, no. 3. Terra Science and Education, pp. 109–115, Jun. 30, 2022. doi: 10.36838/v4i3.18.

[6] Z. H. Zhang et al., “A Comparative Study of Techniques for Differential Expression Analysis on RNA-Seq Data,” PLoS ONE, vol. 9, no. 8. Public Library of Science (PLoS), p. e103207, Aug. 13, 2014. doi: 10.1371/journal.pone.0103207.

[7] A. D. MacKerell Jr., J. Wiorkiewicz-Kuczera, and M. Karplus, “An all-atom empirical energy function for the simulation of nucleic acids,” Journal of the American Chemical Society, vol. 117, no. 48. American Chemical Society (ACS), pp. 11946–11975, Dec. 1995. doi: 10.1021/ja00153a017

[8] T. E. Cheatham III, P. Cieplak, and P. A. Kollman, “A Modified Version of the Cornellet al.Force Field with Improved Sugar Pucker Phases and Helical Repeat,” Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, vol. 16, no. 4. Informa UK Limited, pp. 845–862, Feb. 1999. doi: 10.1080/07391102.1999.10508297.

[9] A. D. MacKerell Jr., J. Wiorkiewicz-Kuczera, and M. Karplus, “An all-atom empirical energy function for the simulation of nucleic acids,” Journal of the American Chemical Society, vol. 117, no. 48. American Chemical Society (ACS), pp. 11946–11975, Dec. 1995. doi: 10.1021/ja00153a017.

[10] “Assessment of Available AMBER Force Fields to Model DNA-Ligand Interactions,” Biointerface Research in Applied Chemistry, vol. 13, no. 2. AMG Transcend Association, p. 156, Mar. 28, 2022. doi: 10.33263/briac132.156.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

[11] A. Savelyev and A. D. MacKerell Jr., “All-atom polarizable force field for DNA based on the classical drude oscillator model,” Journal of Computational Chemistry, vol. 35, no. 16. Wiley, pp. 1219–1239, Apr. 18, 2014. doi: 10.1002/jcc.23611.

[12] R. P. Koirala, S. P. Khanal, S. Shiwakoti, and N. P. Adhikari, “Intermolecular Interaction of Hthyni Protein with Double Methylated DNA at 5m-Cytosine Nucleotide,” Journal of Institute of Science and Technology, vol. 25, no. 1. Nepal Journals Online (JOL), pp. 37–44, Jun. 14, 2020. doi: 10.3126/jist.v25i1.29444.

[13] E. A. Ramírez-González, M. C. Moreno-Lafont, A. Méndez-Tenorio, M. E. Cancino-Díaz, I. Estrada-García, and R. López-Santiago, “Prediction of Structure and Molecular Interaction with DNA of BvrR, a Virulence-Associated Regulatory Protein of Brucella,” Molecules, vol. 24, no. 17. MDPI AG, p. 3137, Aug. 29, 2019. doi: 10.3390/molecules24173137.

[14] D. Liang, Z. Zhang, M. Rafailovich, M. Simon, Y. Deng, and P. Zhang, “Coarse-Grained Modeling of the SARS-CoV-2 Spike Glycoprotein by Physics-Informed Machine Learning,” Computation, vol. 11, no. 2. MDPI AG, p. 24, Feb. 02, 2023. doi: 10.3390/computation11020024.

[15] A. K. Shaytan, G. A. Armeev, A. Goncearenco, V. B. Zhurkin, D. Landsman, and A. R. Panchenko, “Coupling between Histone Conformations and DNA Geometry in Nucleosomes on a Microsecond Timescale: Atomistic Insights into Nucleosome Functions,” Journal of Molecular Biology, vol. 428, no. 1. Elsevier BV, pp. 221–237, Jan. 2016. doi: 10.1016/j.jmb.2015.12.004.

[16] T. Sun, V. Minhas, N. Korolev, A. Mirzoev, A. P. Lyubartsev, and L. Nordenskiöld, “Bottom-Up Coarse-Grained Modeling of DNA,” Frontiers in Molecular Biosciences, vol. 8. Frontiers Media SA, Mar. 17, 2021. doi: 10.3389/fmolb.2021.645527.

[17] M. Salanne, “Simulations of room temperature ionic liquids: from polarizable to coarse-grained force fields,” Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 17, no. 22. Royal Society of Chemistry (RSC), pp. 14270–14279, 2015. doi: 10.1039/c4cp05550k.

[18] Z. Peng, Y.-L. Chen, H. Lu, Z. Pan, and H.-C. Chang, “Mesoscale simulations of two model systems in biophysics: from red blood cells to DNAs,” Computational Particle Mechanics, vol. 2, no. 4. Springer Science and Business Media LLC, pp. 339–357, Sep. 10, 2015. doi: 10.1007/s40571-015-0057-4.

[19] N. Watari, M. Makino, N. Kikuchi, R. G. Larson, and M. Doi, “Simulation of DNA motion in a microchannel using stochastic rotation dynamics,” The Journal of Chemical Physics, vol. 126, no. 9. AIP Publishing, Mar. 01, 2007. doi: 10.1063/1.2538831.

[20] Y.-L. Chen, M. D. Graham, J. J. de Pablo, G. C. Randall, M. Gupta, and P. S. Doyle, “Conformation and dynamics of single DNA molecules in parallel-plate slit microchannels,” Physical Review E, vol. 70, no. 6. American Physical Society (APS), Dec. 13, 2004. doi: 10.1103/physreve.70.060901.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

[21] J. P. Hernández-Ortiz, M. Chopra, S. Geier, and J. J. de Pablo, “Hydrodynamic effects on the translocation rate of a polymer through a pore,” The Journal of Chemical Physics, vol. 131, no. 4. AIP Publishing, Jul. 24, 2009. doi: 10.1063/1.3184798.

[22] J. J. de Pablo, “Coarse-Grained Simulations of Macromolecules: From DNA to Nanocomposites,” Annual Review of Physical Chemistry, vol. 62, no. 1. Annual Reviews, pp. 555–574, May 05, 2011. doi: 10.1146/annurev-physchem-032210-103458.

[23] J. Jin, A. J. Pak, A. E. P. Durumeric, T. D. Loose, and G. A. Voth, “Bottom-up Coarse-Graining: Principles and Perspectives,” Journal of Chemical Theory and Computation, vol. 18, no. 10. American Chemical Society (ACS), pp. 5759–5791, Sep. 07, 2022. doi: 10.1021/acs.jctc.2c00643.

[24] J. M. Jumper, N. F. Faruk, K. F. Freed, and T. R. Sosnick, “Trajectory-based training enables protein simulations with accurate folding and Boltzmann ensembles in cpu-hours,” PLOS Computational Biology, vol. 14, no. 12. Public Library of Science (PLoS), p. e1006578, Dec. 27, 2018. doi: 10.1371/journal.pcbi.1006578.

[25] K. Moritsugu, “Multiscale Enhanced Sampling Using Machine Learning,” Life, vol. 11, no. 10. MDPI AG, p. 1076, Oct. 12, 2021. doi: 10.3390/life11101076.

[26] H. Chan et al., “Machine learning coarse grained models for water,” Nature Communications, vol. 10, no. 1. Springer Science and Business Media LLC, Jan. 22, 2019. doi: 10.1038/s41467-018-08222-6.

[27] J. Wang et al., “Machine Learning of Coarse-Grained Molecular Dynamics Force Fields,” ACS Central Science, vol. 5, no. 5. American Chemical Society (ACS), pp. 755–767, Apr. 15, 2019. doi: 10.1021/acscentsci.8b00913.

[28] K. Schutt, P.-J. Kindermans, H. E. Sauceda Felix, S. Chmiela, A. Tkatchenko, and K.-R. Muller, “SchNet: A continuous-filter convolutional neural network for modeling quantum interactions,” in Advances in Neural Information Processing Systems 30, edited by I. Guyon, U. V. Luxburg, S. Bengio, H. Wallach, R. Fergus, S. Vishwanathan, and R. Garnett (Curran Associates, Inc., 2017), pp. 991–1001.

[29] K. T. Schütt, F. Arbabzadah, S. Chmiela, K. R. Müller, and A. Tkatchenko, “Quantum-chemical insights from deep tensor neural networks,” Nature Communications, vol. 8, no. 1.
Springer Science and Business Media LLC, Jan. 09, 2017. doi: 10.1038/ncomms13890.

[30] B. E. Husic et al., “Coarse graining molecular dynamics with graph neural networks,” The Journal of Chemical Physics, vol. 153, no. 19. AIP Publishing, Nov. 16, 2020. doi: 10.1063/5.0026133.

[31] A. Paszke, S. Gross, F. Massa, A. Lerer, J. Bradbury, G. Chanan, T. Killeen, Z. Lin, N. Gimelshein, L. Antiga, A. Desmaison, A. Kopf, E. Yang, Z. DeVito, M. Raison, A. Tejani, S.

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

Chilamkurthy, B. Steiner, L. Fang, J. Bai, and S. Chintala, “PyTorch: An imperative style, high-performance deep learning library,” in Advances in Neural Information Processing Systems 32, edited by H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. dAlche Buc, E. Fox, and R. Garnett (Curran Associates, Inc., 2019), pp. 8024–8035.

[32] A. Moradzadeh and N. R. Aluru, “Transfer-Learning-Based Coarse-Graining Method for Simple Fluids: Toward Deep Inverse Liquid-State Theory,” The Journal of Physical Chemistry Letters, vol. 10, no. 6. American Chemical Society (ACS), pp. 1242–1250, Feb. 28, 2019. doi: 10.1021/acs.jpclett.8b03872.

[33] L. Zhang, J. Han, H. Wang, R. Car, and W. E, “DeePCG: Constructing coarse-grained models via deep neural networks,” The Journal of Chemical Physics, vol. 149, no. 3. AIP Publishing, Jul. 16, 2018. doi: 10.1063/1.5027645.

[34] A. Moradzadeh, M. H. Motevaselian, S. Y. Mashayak, and N. R. Aluru, “Coarse-Grained Force Field for Imidazolium-Based Ionic Liquids,” Journal of Chemical Theory and Computation, vol. 14, no. 6. American Chemical Society (ACS), pp. 3252–3261, May 11, 2018. doi: 10.1021/acs.jctc.7b01293.

[35] S. Y. Joshi and S. A. Deshmukh, “A review of advancements in coarse-grained molecular dynamics simulations,” Molecular Simulation, vol. 47, no. 10–11. Informa UK Limited, pp. 786–803, Oct. 11, 2020. doi: 10.1080/08927022.2020.1828583.

[36] Y. Wang, S. Izvekov, T. Yan, and G. A. Voth, “Multiscale Coarse-Graining of Ionic Liquids,” The Journal of Physical Chemistry B, vol. 110, no. 8. American Chemical Society (ACS), pp. 3564–3575, Nov. 04, 2005. doi: 10.1021/jp0548220.

[37] J. Ruza, W. Wang, D. Schwalbe-Koda, S. Axelrod, W. H. Harris, and R. Gómez-Bombarelli, “Temperature-transferable coarse-graining of ionic liquids with dual graph convolutional neural networks,” The Journal of Chemical Physics, vol. 153, no. 16. AIP Publishing, Oct. 22, 2020. doi: 10.1063/5.0022431.

[38] K. Goloviznina, J. N. Canongia Lopes, M. Costa Gomes, and A. A. H. Pádua, “Transferable, Polarizable Force Field for Ionic Liquids,” Journal of Chemical Theory and Computation, vol. 15, no. 11. American Chemical Society (ACS), pp. 5858–5871, Sep. 17, 2019. doi: 10.1021/acs.jctc.9b00689.

[39] J. N. Canongia Lopes and A. A. H. Pádua, “CL&P: A generic and systematic force
field for ionic liquids modeling,” Theoretical Chemistry Accounts, vol. 131, no. 3. Springer Science and Business Media LLC, Feb. 17, 2012. doi: 10.1007/s00214-012-1129-7.

[40] B. Kirchner, O. Hollóczki, J. N. Canongia Lopes, and A. A. H. Pádua, “Multiresolution calculation of ionic liquids,” WIREs Computational Molecular Science, vol. 5, no. 2. Wiley, pp. 202–214, Dec. 05, 2014. doi: 10.1002/wcms.1212.

7. ASPECTOS NORMATIVOS ÉTICA DE LA INVESTIGACIÓN

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet

El Politécnico colombiano Jaime Isaza Cadavid como entidad de educación superior e investigación, viene fortaleciendo los procesos para garantizar el apoyo a grupos e investigadores que buscan la generación de nuevo conocimiento, es por tal motivo que se conforma el Comité de Ética de la Institución CEPI cuyo objetivo es evaluar el cumplimiento de la normatividad nacional e internacional relacionada con la ética de la investigación, garantizando la protección animal y humana en la investigación y la cualificación de la producción científica dentro de la institución.

Los proyectos deben estar ajustados a la normatividad internacional tal como la declaración de Helsinki, las pautas éticas para la investigación biomédica preparadas por el Consejo de Organizaciones Internacionales de las Ciencias Médicas –CIOMS, el Código Núremberg y a los parámetros establecidos en la Resolución 8430 de 1993 expedida por el Ministerio de Salud de Colombia, la ley 84 de 1989 en los casos que competa.

Adicionalmente se debe tener en cuenta la siguiente normativa (en caso de que aplique):

- República de Colombia. Ministerio de Salud. Resolución 8430. 4 de octubre de1993.
- República de Colombia. Ministerio de la Protección Social. Resolución 2378. 25 de junio de 2008.
- República de Colombia. Ministerio de Medio Ambiente. Resolución 068. 22 de enero de 2002.
- República de Colombia. Congreso de la Republica. Ley 84. 27 de diciembre de 1989.
- República de Colombia. Congreso de la Republica. Ley 576. 15 de febrero de 2000.
- República de Colombia. Ministerio de Medio Ambiente. Decreto 1375. 21 de junio de 2013.
- República de Colombia. Ministerio de Medio Ambiente. Decreto 1376. 27 de junio de 2013.
- República de Colombia. Presidente de la Republica. Decreto 309. 25 de febrero de 2000.
- República de Colombia. Organización de las Naciones Unidas. Protocolo de Cartagena sobre seguridad en la biotecnología. Ley 165 de 1994.

- Consejo de Organizaciones Internacionales de las Ciencias Médicas (CIOMS), Organización Mundial de la Salud - OMS. Pautas éticas internacionales para la investigación biomédica en seres humanos. 2002.

- International Conference on Harmonisation of Technical Requirements for Registration of Pharmaceuticals for Human Use. Good Clinical Practice (GCP). Published in the Federal Register, 9 May 1997, Vol. 62, No. 90, p. 25691-25709.

- Council for International Organization of Medical Sciences, International Council for Laboratory Animal Science. Guía internacional para investigación biomédica que involucre animales. Pág. 4. 2012.

- Manila conference on animal welfare, Costa Rica steering committee meeting for ministerial conference. Universal Declaration on Animal Welfare. 2007. Pág. 2.

- Directive 86/609/EEC on the protection of animals used for experimental and other scientific purposes.

Fecha de entrega: _____

Firma del Investigador principal: Stiven Villada Gil

icontec ISO 9001 SC5206-1 IQNet