

V rámci diplomová práce byly prostudovány algoritmy numerické integrace. Poté byla provedena důkladná studie aktivních míst polymeras virů HCV a HIV v komplexech s přirozeným substrátem a komplexem, ve kterém byl přístupující nukleosidtrifosfát nahrazen inhibitorem (S)-HMPMGpp resp. (S)-HMPMApp. Následně byla použita metoda ABF pro získání profilů volné energie pro přechod vody a methanu přes rozhraní vody a vakua. Stejná metoda byla na závěr použita pro získání profilu volné energie pro průchod vody, methanu a guanosinu skrz lipidovou dvouvrstvu.