

# Obtención de herramientas para la simulación computacional y reconocimiento de estructuras proteínicas

## INTRODUCCIÓN

$10^{100}$  es el número de posibles proteínas que puedan crearse a partir de los aminoácidos (AA) que formen una cadena de hasta 300. Menos de una en  $1 \times 10^9$  logra alcanzar una estructura tridimensional estable. Reconocer la forma espacial que toman, es una tarea para los biólogos estructurales y unos nanotecnólogos que entran a estos trabajos.

Los objetos en el espacio tienen lo que se llama un centro de gravedad o un punto de masa, esto aplica a todos los objetos físicos. El término centroide aplica a nivel geométrico y aquí, el objeto en cuestión es la proteína. En este trabajo, se obtendrá LAS BASES para obtener el algoritmo que obtenga el centro matemático para calcular la de todos los componentes de la proteína y, poder codificar toda su secuencia.

La importancia de esta investigación parcial consiste en plantear las herramientas necesarias para desarrollar un algoritmo que permita predecir la estructura de una proteína dada una codificación de centroides de los aminoácidos y pueda reconocerse para su posterior aplicación, principalmente en medicina humana. Para esto, se recopilan las herramientas necesarias para ello, tales como las matemáticas, biología, química y física cuántica.

Sasakthi (2008) se muestra la codificación de una proteína y con base en el modelado, determinan las hélices y ramas de la misma. Esta codificación se basa en la secuencia de aminoácidos que la componen. El objetivo es encontrar una simulación computacional para optimizar el modelado de una proteína a través de sus centroides.

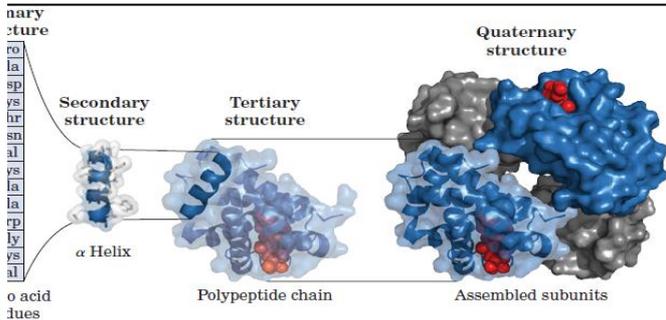


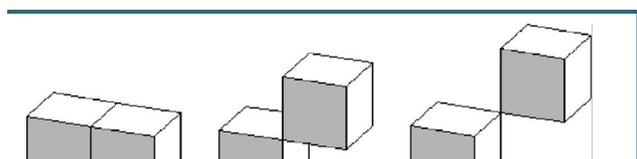
Figura 1. Diseñar un algoritmo que permita visualizar una imagen de estructura cuaternaria de una proteína

## OBJETIVOS

Recopilar las herramientas matemáticas necesarias para el desarrollo de la investigación

Determinar las operaciones matemáticas requeridas para conocer las combinaciones que se puedan dar en las secuencias de los aminoácidos.

Detectar los elementos biológicos ligados a la formación estructural de las proteínas



## MÉTODOS

Se hace una recopilación de los elementos tomados por aplicaciones ya establecidas como SCRWL

Se agregan los elementos necesarios desde la geometría para definir los centroides de los aminoácidos.

Se tomará C++ por su paradigma de programación orientada a objetos, además de que en la literatura, aplicaciones como SCRWL 4.0 se ha basado en dicho lenguaje.

```

10      20      30      40
MALWMRLRLPL LALLALWGPD PAAAFVNQHL CGSHLVEALY

50      60      70      80
LVCGERGFFY TPKTRREAED LQVGQVELGG GPGAGSLQPL

90      100     110
ALEGSLQKRG IVEQCCTSIIC SLYQLENYCN
    
```

Figura 3. Secuencia de aminoácidos de la insulina

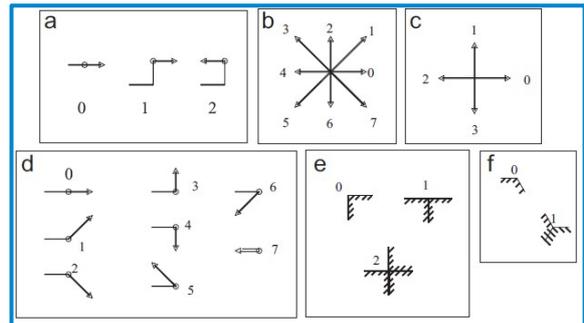


Figura 4. Cadenas de códigos para comprimir imágenes

## RESULTADOS

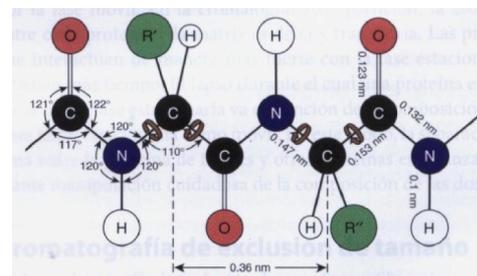
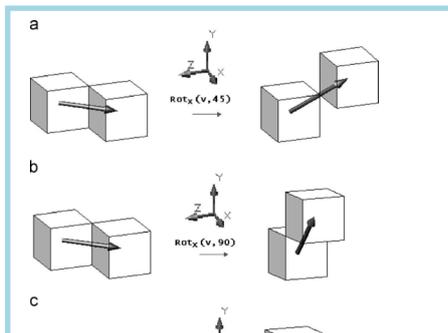


Figura 5. Dimensiones de una cadena polipeptídica extendida.



## CONCLUSIONES

El modelo planteado por el Dr. Sánchez es el idóneo para aplicarlo en el reconocimiento de la estructura terciaria y cuaternaria de