

Autómatas Celulares en la Simulación de la Dinámica de Dominios Proteicos

Juan C. Castrejón E.

Universidad Nacional Autónoma de México

17 de abril de 2023



- Importancia de la evolución de dominios de proteínas en la biología y medicina.
- Uso de métodos computacionales para modelar y predecir evolución de dominios de proteínas.
- Automatas celulares como herramienta poderosa para modelar sistemas dinámicos complejos.



- ¿Cómo se pueden utilizar los autómatas celulares para simular la evolución de dominios de proteínas?



- Desarrollar un modelo basado en autómatas celulares para simular la evolución de dominios de proteínas.
- Analizar y validar el modelo propuesto utilizando datos experimentales.



Métodos (Idea general)

- Crear un autómata celular para representar la estructura y función de una proteína.
- Definir reglas de transición basadas en la dinámica de evolución de dominios de proteínas.
- Simular la evolución de dominios de proteínas utilizando el autómata celular propuesto.

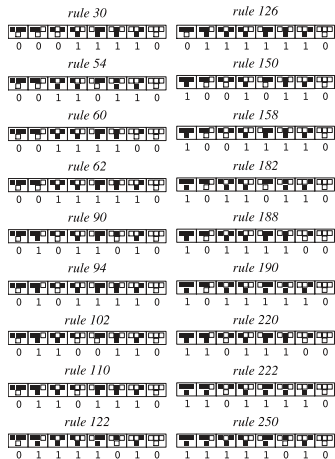


Figure: Ejemplos de reglas.



Autómatas Celulares

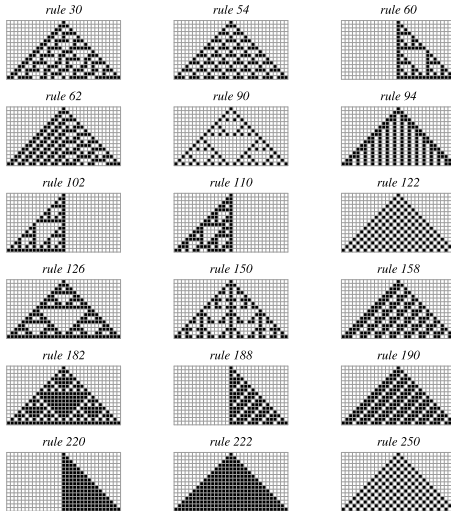


Figure: Ejemplos de reglas propagadas.



- Qiu, Y., Zhang, X. (2020). Using Cellular Automata to Simulate Domain Evolution in Proteins. *Frontiers in Genetics*, 11, 515. <https://doi.org/10.3389/fgene.2020.00515>



- Repositorio de Github <https://github.com/JCastrejonE/proyecto-computacion-genomica/tree/main/>
- Código de esta presentación <https://github.com/JCastrejonE/proyecto-computacion-genomica/blob/main/presentacion/main.tex>

