

# ENTRADA

Estructuras mmCIF  
(archivos .cif)

## Extracción de Segmentos(Interactions.py)

Parsear estructura con BioPython → NeighborSearch: filtrar por distancia al ligando → Extraer segmentos con mayúsculas (AA interactuantes)

## Comparación mediante LCS(batchcompare/patternfinder)

Calcular matriz de programación dinámica (LCS) → Backtracking: reconstruir subsecuencias → Calcular gaps entre residuos conservados

## Reconstrucción de Patrones

Extraer patrones con regex [n.m] pattern → Contar mayúsculas (AA conservados) → Agregar estadísticas por secuencia

## Generación de CSV con Patrones PROSITE

res.csv  
Patrón, Cantidad Mayúsculas, Cantidad Secuencias, Porcentaje  
C-x(2)-C-x(16)-H, 3, 6, 100.00%  
C-x(4)-C-x(16)-H, 3, 5, 83.33%  
C-x(17)-C-x(2)-H, 3, 6, 100.00%  
...

# SALIDA