

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 CSVcon 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