

# Máster Universitario en Bioinformática

## Proteómica y Bioinformática Estructural

Curso académico 2024-2025



**Universidad**  
Internacional  
de Valencia

**Dra. Magdalena Nikolaeva Koleva**

[magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com](mailto:magdalena.nikolaeva@professor.universidadviu.com)

# Resumen

## Modelado de proteínas

Cuando existe una proteína homóloga

Por homología

Cuando es imposible encontrar un homólogo

Por reconocimiento del plegamiento

Ab initio

### 1. Threading (enhebrado)

- a) Evaluación con potenciales estadísticos  
(cálculo de energías)

### 2. Homología remota

### 3. Predicción de estructura secundaria

### 1. Basados en principios físicos

- a) Termodinámica, mecánica clásica (*bonded, non-bonded*)
  - i. Monte-Carlo
    - A. *Steepest Descent*
    - B. *Conjugate Gradient*
    - C. *Simulated annealing*
  - ii. Dinámica molecular

### 2. Basados en principios empíricos (probabilidad)