

# 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)

29/10/2024

De:  
 Planeta Formación y Universidades

# 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)

1. Búsqueda de molde (alineamiento de secuencia)
2. Construcción del modelo
  - a) Construcción de cadena principal
    - i. Ensamblado de cuerpo rígido
    - ii. Conforme restricciones espaciales
  - b) Construcción de cadenas laterales
    - i. Librerías de rotámeros