

Capítulo 1

Resumen

Esta tesis toma como referencia los conceptos creados en un trabajo anterior sobre análisis de conformaciones de proteínas que concluye sobre la presencia de estados intermedios presentes en el plegamiento de las proteínas, y los utiliza para analizar trayectorias grandes de plegamiento de proteínas simuladas con Dinámica Molecular. Este tipo de trayectoria por lo general contienen una inmensa cantidad de conformaciones lo cual trae consigo retos sobre cómo analizarlas y obtener información útil de estas. En esta tesis creamos un algoritmo que permite reducir de gran manera el número de conformaciones de una trayectoria, obteniendo una muestra representativa de la misma mientras se preserva la dinámica de la trayectoria original en cuanto a los eventos principales y la relación de tiempo. Utilizando este algoritmo realizamos la reducción de algunas de las trayectorias simuladas por el supercomputador Anton, especializada para simulaciones de Dinámica Molecular, y construimos un flujo de trabajo para analizar estas trayectorias de acuerdo a los conceptos definidos en el trabajo de referencia. Los resultados nos mostraron que los estados intermedios encontrados en el trabajo de referencia no están presentes en el plegamiento de estas proteínas de acuerdo a las simulaciones de Anton, lo cual es coherente con la literatura y con el tipo de proteínas analizadas en el trabajo de referencia y en esta tesis.