



## ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL PLEGAMIENTO DE SECUENCIAS HP EN MEDIOS CORRELACIONADOS Y FRACTALES

Salomón de Jesús Alas Guardado<sup>1</sup>, Pedro Pablo González Pérez<sup>2</sup>,  
Hiram Isaac Beltrán Conde<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ciencias Naturales, UAM Cuajimalpa, Ciudad de México

<sup>2</sup>Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas, UAM Cuajimalpa, Ciudad de México

e-mail: salas@correo.cua.uam.mx

El plegamiento de proteínas dentro de las células se lleva a cabo en un ambiente altamente poblado de moléculas, en donde la correlación entre los diferentes elementos juega un papel importante para que los procesos fisicoquímicos ocurran. Además, con el fin de optimizar el transporte, distribución y cambio de energía y materia dentro de la célula este ambiente adopta una geometría fractal. Por tanto, es importante incluir en los estudios teóricos y computacionales el medio en donde este fenómeno se desarrolla. En este trabajo se presenta la combinación de tres modelos que imitan el plegado de proteínas dentro de un espacio no homogéneo y correlacionado con propiedades fractales. Se utiliza el modelo minimalista de grano grueso hidrófobo-polar (HP) con un arreglo cuadrado en 2D para imitar las cadenas proteicas. También, se usa el modelo dual de sitios y enlaces (DSBM) para crear diferentes tipos de redes no homogéneas en 2D: correlacionadas y fractales, las cuales simulan el ambiente en donde las cadenas HP son plegadas. Por último, para plegar las cadenas HP se utiliza un algoritmo evolutivo (EA). Se hace el análisis del plegamiento de diferentes secuencias HP con la plataforma bioinformática *Evolution*, en donde los mejores rendimientos y convergencias se han obtenido cuando se utilizan medios no homogéneos, esto en comparación con un espacio homogéneo. Así, este enfoque se convierte en un importante avance en la simulación, no sólo para entender el plegado sino que también para tratar de entender la estructura química y las propiedades fisicoquímicas de las proteínas, así como también su función con el medio celular, el cual es el comportamiento normal de estas macromoléculas en la naturaleza.

### Referencias:

1. van den Berg, B., Ellis, R. J., and Dobson, C. M. (1999) Effects of macromolecular crowding on protein folding and aggregation. *EMBO J.* 18 (24), 6927–6933.
2. Hidalgo-Olguín, D. R., Cruz-Vázquez, R. O., Alas-Guardado, S. J., and Domínguez-Ortiz, A. (2015) Lacunarity of classical site percolation spanning clusters built on correlated square lattices. *Transport Porous Med.* 107 (3), 717–729.
3. Alas, S. J., and González-Pérez, P. P. (2016) Simulating the folding of HP-sequences with a minimalist model in an inhomogeneous medium. *BioSystems* 142, 52–67.