
**DESARROLLO DE UN REPOSITORIO DE PATRONES ESTRUCTURALES EN
PROTEÍNAS**

**CARLOS BERNARDO HERNÁNDEZ ROJAS
INGENIERO CIVIL EN COMPUTACIÓN**

RESUMEN

En las últimas décadas, gracias a los avances de la ciencia y la tecnología, muchos investigadores han utilizado variadas técnicas para determinar y entender la estructura de moléculas tales como las proteínas, ADN, ARN, entre otras. La información obtenida a partir de estos estudios, ha sido muy útil para describir las interacciones que se dan entre las moléculas, y así poder entender las estructuras y funciones que realizan muchos procesos biológicos importantes. La cantidad de información disponible acerca de las moléculas es considerable, y va creciendo de forma exponencial día a día. En este sentido, se han creado diversas bases de datos que intentan unificar o integrar información a nivel global. Este es el caso del Protein Data Bank (PDB). Poder analizar todos los datos de PDB es una tarea compleja y requiere tiempo. Actualmente, esto se lleva a cabo a través de software especializado, el cual suele estar diseñado para cumplir tareas específicas para usuarios expertos. En este sentido, dichas herramientas presentan restricciones de usabilidad y adaptabilidad. El objetivo general del proyecto descrito en este documento consiste en desarrollar una herramienta de software para la gestión de patrones estructurales disponibles en PDB. Específicamente, se desarrolló una aplicación Web que permite almacenar, explorar y visualizar patrones estructurales proteína-ligando. La principal característica de la herramienta es que los patrones son representados como estructuras en forma de grafo, las cuales pueden ser exploradas a través de diversos metadatos. El prototipo funcional desarrollado fue validado y evaluado positivamente por un grupo de usuarios del área de bioinformática. El resultado final es una herramienta de interfaz sencilla y fácil de usar, que cambia drásticamente el modo de interacción habitual para la exploración de patrones estructurales.