

## Explorando el paisaje de energía mediante redes complejas: Del doble pozo al análisis del espacio conformacional de proteínas.

Diego Prada-Gracia, Pablo Echenique, Jesús Gómez-Gardeñes, Fernando Falo\*.  
*Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI).*  
*Universidad de Zaragoza.*

Proponemos un método de análisis del paisaje de energía<sup>1</sup> mediante el estudio de las propiedades de la red compleja construida a partir de la simulación de la dinámica estocástica del sistema.

Esta red, que denominaremos “red de Markov”, se construye discretizando el espacio de coordenadas y representando cada celda de este espacio con un nodo en la red. Así la trayectoria pasa a ser a una secuencia de saltos entre nodos. Asignamos un peso a cada nodo de la red que depende del número relativo de veces que ha sido visitado. E Incluimos también las probabilidades de salto entre los nodos mediante el peso de sus links direccionales.

Con los pesos debidamente normalizados, esta red cumple propiedades como la del balance detallado u otras relaciones propias de una cadena de Markov<sup>2</sup>. Disponemos tras esta transformación de una matriz estocástica.

Con estas herramientas y con las herramientas propias de la teoría de redes complejas como capaces de:

- Localizar mínimos, que llamaremos globales o locales, del sistema.
- Definir estados conformacionales del sistema.
- Calcular las constantes de equilibrio entre estos estados.
- Definir tiempos de decorrelación estructural.
- Relacionar temperaturas de transición termodinámicas con cambios en la topología de la red.

- Calcular magnitudes termodinámicas como la diferencia de energía libre entre conformaciones, entropía, diferencias de energía interna...
- Predecir el comportamiento del sistema en un rango de temperaturas próximo a la temperatura simulada.
- Analizar y extraer información de trayectorias de sistemas con un alto número de grados de libertad mediante la red generada por el subespacio de coordenadas que llamamos “de reacción”.
- ...

Este método de análisis y las herramientas que lo complementan han sido aplicados para su desarrollo a sistemas tan elementales como el oscilador armónico unidimensional, doble pozo, doble pozo modulado por una función seno... y a sistemas más complejos como el modelo de polímero HP (20 monómeros) en dos dimensiones “off-lattice”<sup>3</sup>. En este último caso aplicamos el método propuesto para advertir diferencias entre el paisaje de una secuencia buena plegadora y el paisaje de una secuencia mala o no plegadora.

---

\* fff@unizar.es

<sup>1</sup> D. J. Wales, *Energy Landscapes* (Cambridge University Press, Cambridge, 2003).

<sup>2</sup> N.G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland Personal Library, 1997).

<sup>3</sup> Bongini L., Livi R., Politi A. and Torcini A. *Physical Review E*, vol.68, 061111, 2003.