

## TABLA DE CONTENIDOS

	página
<b>Dedicatoria</b>	<b>I</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>II</b>
<b>Tabla de Contenidos</b>	<b>III</b>
<b>Índice de Figuras</b>	<b>VI</b>
<b>Índice de Tablas</b>	<b>VIII</b>
<b>Resumen</b>	<b>IX</b>
<b>Abstract</b>	<b>x</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Definición del problema . . . . .	1
1.2. Propuesta . . . . .	2
1.3. Hipótesis . . . . .	3
1.4. Metodología . . . . .	3
<b>2. Contexto</b>	<b>5</b>
2.1. El Protein Data Bank . . . . .	5
2.2. Proteínas, aminoácidos y ligandos . . . . .	6
2.3. Herramientas de consulta para PDB . . . . .	8
2.4. Búsqueda de patrones estructurales en PDB . . . . .	10
2.5. Herramientas basadas en grafos para búsqueda de patrones en PDB .	13
<b>3. Diseño y Construcción</b>	<b>16</b>
3.1. Requisitos de la aplicación . . . . .	16
3.1.1. Requisitos funcionales . . . . .	16
3.1.2. Requisitos no funcionales . . . . .	17
3.2. Arquitectura del sistema . . . . .	18
3.3. Componentes y asociaciones en un patrón . . . . .	20

3.4.	Mockups y elementos de la interfaz . . . . .	22
3.5.	Interacción con la interfaz . . . . .	25
3.6.	Estructura de la base de datos . . . . .	27
3.7.	Confección de consultas desde el patrón gráfico . . . . .	30
3.7.1.	Asociaciones de componentes a consultas SQL . . . . .	30
3.7.2.	Definición inductiva de patrones y ejemplo de transformación .	37
3.7.3.	Resultados repetidos para un patrón diseñado correctamente .	40
3.8.	Prototipo final . . . . .	42
3.9.	Optimización de la base de datos . . . . .	45
<b>4.</b>	<b>Verificación, Validación y Evaluación</b>	<b>48</b>
4.1.	Verificación de funcionalidades . . . . .	48
4.2.	Validación de funcionalidades . . . . .	51
4.3.	Evaluación de usabilidad . . . . .	58
4.3.1.	Metodología del proceso . . . . .	58
4.3.2.	Aspectos de la evaluación . . . . .	58
4.3.3.	Análisis de resultados . . . . .	59
<b>5.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>64</b>
5.1.	Conclusiones generales . . . . .	64
5.2.	Aportes del proyecto . . . . .	65
5.3.	Trabajo futuro . . . . .	66
	<b>Glosario</b>	<b>68</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>69</b>
	<b>Anexos</b>	
<b>A:</b>	<b>Extracto archivo de la Hemoglobina (4HHB.pdb)</b>	<b>73</b>
<b>B:</b>	<b>Lista de herramientas para PDB revisadas</b>	<b>74</b>
<b>C:</b>	<b>Requisitos funcionales de la aplicación</b>	<b>78</b>
<b>D:</b>	<b>Códigos SQL para creación de vistas materializadas</b>	<b>85</b>

<b>E:</b>	<b>Capturas de la aplicación web</b>	<b>87</b>
<b>F:</b>	<b>Códigos SQL asociados a los patrones de prueba</b>	<b>90</b>
<b>G:</b>	<b>Documentos para evaluación de usabilidad</b>	<b>93</b>
<b>H:</b>	<b>Resumen evaluaciones de criterios de usabilidad</b>	<b>99</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

	página
2.1. Niveles de estructura en las proteínas . . . . .	7
2.2. Página oficial de PDBj Mine. . . . .	8
2.3. Página oficial de Ligand Expo. . . . .	9
2.4. Página oficial de PPI. . . . .	10
2.5. Distancias entre un ligando y un aminoácido . . . . .	11
2.6. Distancias entre dos aminoácidos . . . . .	12
2.7. Ejemplo de consulta en PatternQuery . . . . .	13
2.8. Marvin mostrando la estructura química de la Atorvastatina. . . . .	14
2.9. STRING mostrando la red de interacciones para Hemoglobina Beta. . . . .	15
3.1. Arquitectura y proceso de datos. . . . .	19
3.2. Panel donde se diseña el patrón estructural. . . . .	23
3.3. Panel donde se muestran los resultados de la búsqueda. . . . .	24
3.4. Modal donde se muestra la representación 3D de cada resultado. . . . .	25
3.5. Patrón estructural resultante siguiendo los pasos del ejemplo. . . . .	27
3.6. Esquema relacional para PDB. . . . .	28
3.7. Vistas materializadas. . . . .	29
3.8. Ligando asociado a un aminoácido fijo mediante distancia. . . . .	30
3.9. Ligando asociado a un aminoácido comodín mediante distancia. . . . .	31
3.10. Dos aminoácidos fijos asociados mediante distancia. . . . .	32
3.11. Aminoácido fijo asociado a un aminoácido comodín mediante distancia. . . . .	33
3.12. Dos aminoácidos comodín asociados mediante distancia. . . . .	33
3.13. Dos aminoácidos fijos asociados mediante secuencia. . . . .	34
3.14. Aminoácido fijo asociado a un aminoácido comodín mediante secuencia. . . . .	35
3.15. Aminoácido comodín asociado a un aminoácido fijo mediante secuencia. . . . .	35
3.16. Dos aminoácidos comodín asociados mediante secuencia. . . . .	36
3.17. Patrón de ejemplo para transformación. . . . .	38
3.18. Patrón estructural con resultados repetidos. . . . .	40
3.19. Ejemplos de casos donde se repiten los aminoácidos en el resultado. . . . .	41
3.20. Panel donde se diseña el patrón estructural. . . . .	42
3.21. Panel donde se muestran los resultados de la búsqueda. . . . .	43

3.22. Modal donde se muestra la representación 3D de cada resultado. . . . .	44
3.23. Patrón de prueba número uno. . . . .	46
3.24. Patrón de prueba número dos. . . . .	46
3.25. Patrón de prueba número tres. . . . .	47
4.1. Patrón objetivo para ejecutar el método de prueba manual. . . . .	52
4.2. Resultados obtenidos al ejecutar el método de prueba manual. . . . .	55
4.3. Resultados obtenidos de la búsqueda del patrón en la herramienta. . . . .	56
4.4. Vista tridimensional del resultado #1. . . . .	57
4.5. Vista tridimensional del resultado #4. . . . .	57
4.6. Ambiente de evaluación a nivel de software. . . . .	60

## ÍNDICE DE TABLAS

	página
4.1. Resumen de cumplimiento para lista de criterios. . . . .	61
C.1. Requisito funcional: Agregar ligando. . . . .	78
C.2. Requisito funcional: Agregar aminoácidos. . . . .	79
C.3. Requisito funcional: Agregar aminoácidos comodín. . . . .	79
C.4. Requisito funcional: Identificar ligando y aminoácidos. . . . .	80
C.5. Requisito funcional: Agregar conector distancia. . . . .	80
C.6. Requisito funcional: Agregar conector siguiente. . . . .	81
C.7. Requisito funcional: Incorporar propiedades. . . . .	81
C.8. Requisito funcional: Eliminar componentes. . . . .	82
C.9. Requisito funcional: Buscar patrón en PDB. . . . .	82
C.10. Requisito funcional: Mostrar resultados de búsqueda. . . . .	83
C.11. Requisito funcional: Enlazar resultados a PDB. . . . .	83
C.12. Requisito funcional: Visualizar resultados en JSmol. . . . .	84