

TABLA DE CONTENIDOS

	página
Dedicatoria	I
Agradecimientos	II
Tabla de Contenidos	III
Índice de Figuras	VI
Índice de Tablas	VIII
Resumen	IX
Abstract	x
1. Introducción	1
1.1. Definición del problema	1
1.2. Propuesta	2
1.3. Hipótesis	3
1.4. Metodología	3
2. Contexto	5
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
3. Diseño y Construcción	16
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
4. Verificación, Validación y Evaluación	48
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
5. Conclusiones	64
5.1. Conclusiones generales	64
5.2. Aportes del proyecto	65
5.3. Trabajo futuro	66
Glosario	68
Bibliografía	69
Anexos	
A: Extracto archivo de la Hemoglobina (4HHB.pdb)	73
B: Lista de herramientas para PDB revisadas	74
C: Requisitos funcionales de la aplicación	78
D: Códigos SQL para creación de vistas materializadas	85

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

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