



manualproyectodegrado

© 2010 Enter your company name

Note:

To change the product logo for your own print manual or PDF, click "Tools > Manual Designer" and modify the print manual template.

Title page 1

Use this page to introduce the product

by Enter your company name

This is "Title Page 1" - you may use this page to introduce your product, show title, author, copyright, company logos, etc.

This page intentionally starts on an odd page, so that it is on the right half of an open book from the readers point of view. This is the reason why the previous page was blank (the previous page is the back side of the cover)

manualproyectodegrado

© 2010 Enter your company name

All rights reserved. No parts of this work may be reproduced in any form or by any means - graphic, electronic, or mechanical, including photocopying, recording, taping, or information storage and retrieval systems - without the written permission of the publisher.

Products that are referred to in this document may be either trademarks and/or registered trademarks of the respective owners. The publisher and the author make no claim to these trademarks.

While every precaution has been taken in the preparation of this document, the publisher and the author assume no responsibility for errors or omissions, or for damages resulting from the use of information contained in this document or from the use of programs and source code that may accompany it. In no event shall the publisher and the author be liable for any loss of profit or any other commercial damage caused or alleged to have been caused directly or indirectly by this document.

Printed: noviembre 2010 in (whereever you are located)

Publisher

...enter name...

Managing Editor

...enter name...

Technical Editors

...enter name...

...enter name...

Cover Designer

...enter name...

Team Coordinator

...enter name...

Production

...enter name...

Special thanks to:

All the people who contributed to this document, to mum and dad and grandpa, to my sisters and brothers and mothers in law, to our secretary Kathrin, to the graphic artist who created this great product logo on the cover page (sorry, don't remember your name at the moment but you did a great work), to the pizza service down the street (your daily Capricciosas saved our lives), to the copy shop where this document will be duplicated, and and and...

Last not least, we want to thank EC Software who wrote this great help tool called HELP & MANUAL which printed this document.

Table of Contents

Foreword	5
Part I Introduccion	7
1 Acerca del proyecto	7
Part II Intalacion de la aplicacion	9
1 Requerimientos del sistema	9
2 Ejecutar la aplicacion.....	9
Part III Manual de Usuario	11
1 Esquema Conceptual.....	11
2 Formulario principal.....	11
3 busqueda de motivos.....	12
4 busqueda de proteinas.....	16
5 busqueda de interacciones.....	20
6 Docking.....	21
Index	0

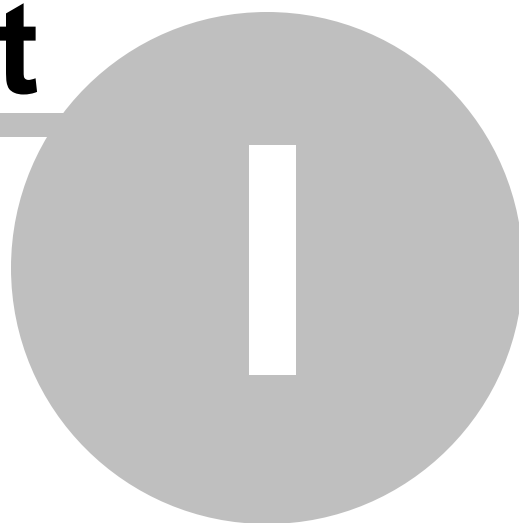
Foreword

This is just another title page
placed between table of contents
and topics

Top Level Intro

This page is printed before a new
top-level chapter starts

Part



1 Introduccion

Enter topic text here.

1.1 Acerca del proyecto

Director del proyecto:

IRENE TISCHER

Aplicacion desarrollada por :

HERNAN DAVID RAMIREZ MEJIA

DAVID MOLINA

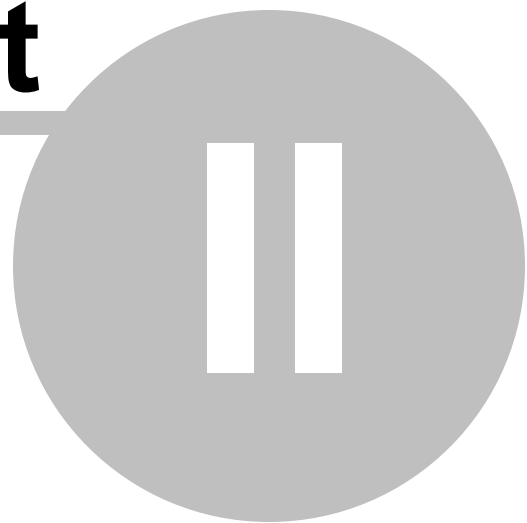
Este aplicativo se desarrollo por parte del grupo de bioinformática, implementado por los estudiantes Hernan David Ramirez Mejia y David Molina como proyecto de grado para la faculta de de Ingenieria de Sistemas y Computación de la Universidad del Valle (Cali, Colombia), partiendo de la idea propuesta por el grupo de biología molecular de (BIOMOL).

La aplicación se desarrollo bajo los conceptos de software libre, usando como lenguaje de desarrollo JAVA. Permite que el usuario guarde la información obtenida en una base de datos en postgres y dando la opción para que los resultados se exporten a archivos de texto separados por tabulación, con esto el usuario pueda usar lo obtenido en otras herramientas. La aplicación usa bases de datos de servidores externos como PDB, UNIPROT, SWISSPROT, MINT y BIOGRID en su funcionamiento lo que permite un manejo detallado de la información de las proteínas.

Top Level Intro

This page is printed before a new
top-level chapter starts

Part



2 Intalacion de la aplicacion

2.1 Requerimientos del sistema

Para la instalación y ejecución de la aplicación son necesarios los siguientes programas:

- ☐ PostgreSQL 8.3 o superior.
- ☐ PyMol.
- ☐ jdk1.6.0_19

Hardware:

Requisitos recomendado de hardware.

- ☐ Procesador de 2.0 GHz Dual Core
- ☐ Memoria RAM de 2 GB DDR2
- ☐ Espacio en disco para la instalación de 200Mb.

Requisitos minimos de hardware:

- ☐ Procesador de 1.4 GHz sencillo
- ☐ Memoria RAM DDR 1 1 GB.
- ☐ Espacio en disco para la instalación de 30Mb pero teniendo en cuenta que la carpeta repositorio aumentara de tamaño.

Software:

Aplicaciones que se debe tener intaladas antes de instalar el proyecto.

- ☐ PostgreSQL version 8.2 o superior
- ☐ PyMol.
- ☐ jdk1.6.0_19

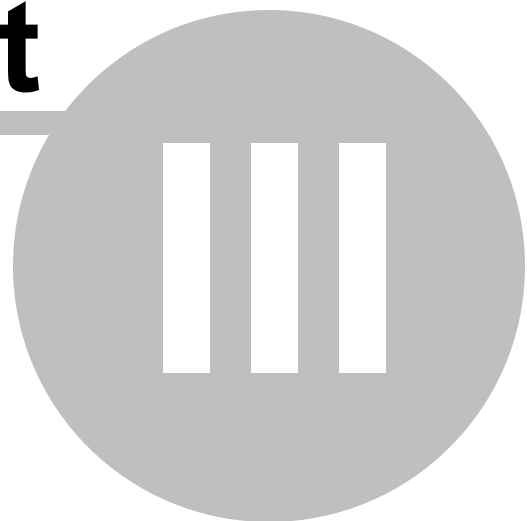
2.2 Ejecutar la aplicacion

Enter topic text here.

Top Level Intro

This page is printed before a new
top-level chapter starts

Part

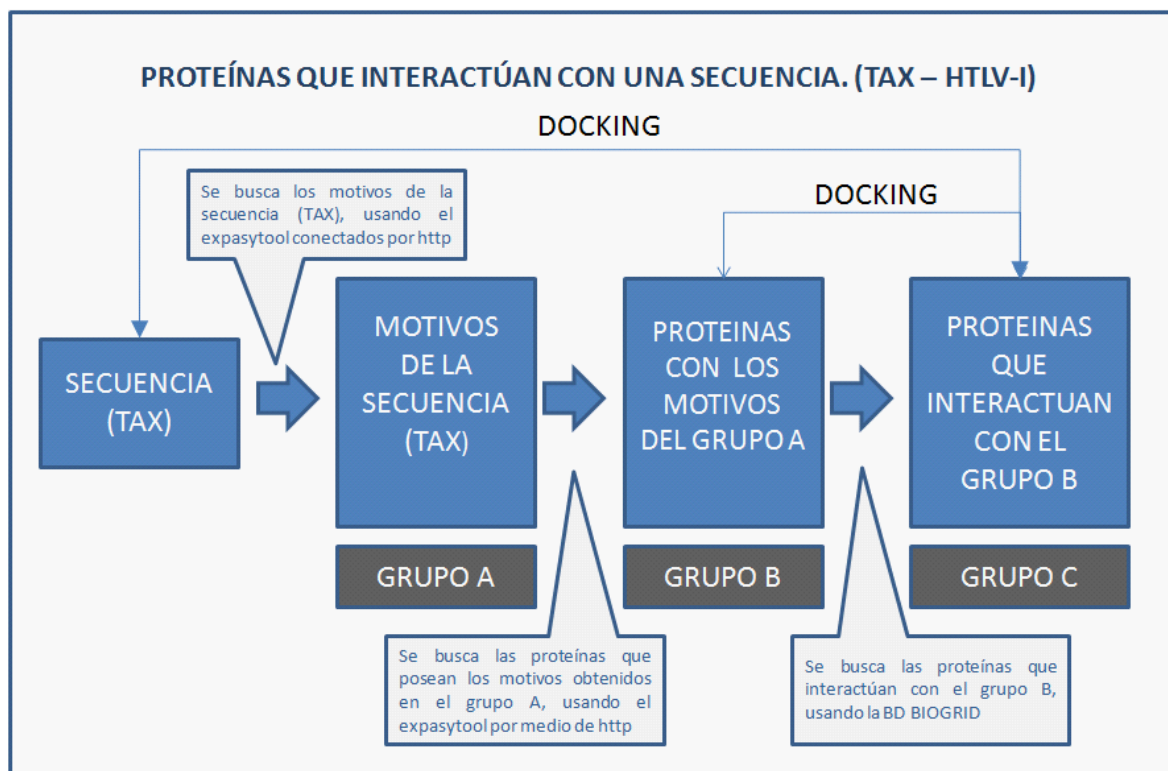


3 Manual de Usuario

Enter topic text here.

3.1 Esquema Conceptual

Enter topic text here.



3.2 Formulario principal

Enter topic text here.

The screenshot shows a web application window titled 'Formularios'. It has a menu bar with 'Archivo' and 'Ayuda'. Below the menu is a toolbar with icons and labels: 'Nuevo', 'Abrir .txt', 'Resguardos', 'Guardar', 'Info', 'Ayuda', and 'Salir'. The main area has three tabs: 'MOTIVOS', 'INTERACCION PROTEINAS BD', and 'PROTEINAS DADO MOTIVOS' (which is selected). Inside the selected tab, there is a section labeled 'Motivo:' containing a large empty text box. Below this box are two buttons: 'Limpiar' and 'Cargar lista Motivos'. Further down, there is a section labeled 'Linage Taxonomy:' with a text input field and an 'Enviar' button.

3.3 busqueda de motivos

Este formulario permite al usuario realizar una búsqueda de lo motivos que posee una secuencia.

Secuencia:

Limpia el area de texto permitiendo arrancar de nuevo con la selección de proteínas

Limpiar

Permitir archivar de proteínas

Cargar Secuencia

Cargar Secuencia usando codigo PDB

Traer Secuencia del

Dependiendo del codigoPDB

Enviar

Envía la consulta

Secuencia con almenos estos hits:

Linage Taxonomy:

Una vez enviada la consulta nos conectamos con la herramienta expasytool en swissprot para obtener los motivos relacionados a la secuencia ingresada.

luego son cargados en una pantalla como lo muestra la siguiente figura.

MOTIVOS ENCONTRADOS DE LA ANTERIOR BÚSQUEDA

Seleccionar Todos

REGISTRO CARGADO DE LA BASE DE DATOS

Motivo	Sector	Id Prosite	Familia	Seleccionar
GGlcSA	33-38	PS00008	MYRISTYL	☐
GLcsAR	34-39	PS00008	MYRISTYL	☐
SaR	37-39	PS00005	PKC_PHOSPHO...	☐
TcpE	48-51	PS00006	CK2_PHOSPHO...	☐
TqR	80-82	PS00005	PKC_PHOSPHO...	☐
TsK	83-85	PS00005	PKC_PHOSPHO...	☐
TIK	86-88	PS00005	PKC_PHOSPHO...	☐
RKyS	110-113	PS00004	CAMP_PHOSPH...	☐

Linage Taxonomy:

Buscar proteínas **Filtrar Resultado**

Posee un boton para seleccionar todos o solo se chequea los motivos con los q se desea trabajar para buscarles que proteínas estan relacionadas a esos motivos.

El resultado obtenido puede ser guardado por el usuario tanto en la DB como en un archivo externo,

El boton filtrar resultado permite al usuario realizar una serie de consultas para solo tomar los motivos q el necesite.

Interfaz Filtrar resultado: esta ventana se despliega despues de oprimir el boton "Filtrar Resultado"

Archivo Ayuda

Nuevo Abrir .txt Resguardos Guardar Info Ayuda Salir

MOTIVOS PROTEINAS DADO MOTIVOS INTERACCION PROTEINAS BD

MOTIVOS ENCONTRADOS

Seleccionar

found: 8 hits in

Motivo
61.438
14.479
9.003
10.419
12.636
12.770
11.032
36.196

Linage Taxonomy:

Exportar resultados

Realizar Filtro Motivos

Buscar Todos Cargar Cancelar

motivo familia

☐ 61.438 ☐ SET

☐ 11.032 ☐ ANK_REP_REGION

☐ 9.003 ☐ ANK_REPEAT

☐ 10.419 ☐ PRE_SET

☐ 12.770

secuencia	sector	id_prosite	familia	motivo	id
USERSEQ1	654-887	PS50297	ANK_REP_...	61.438	1247
USERSEQ1	1037-1159	PS50280	SET	36.196	1254
USERSEQ1	684-716	PS50088	ANK_REPE...	14.479	1248
USERSEQ1	717-749	PS50088	ANK_REPE...	9.003	1249
USERSEQ1	750-774	PS50088	ANK_REPE...	10.419	1250
USERSEQ1	784-816	PS50088	ANK_REPE...	12.636	1251
USERSEQ1	850-882	PS50088	ANK_REPE...	12.770	1252
USERSEQ1	972-1035	PS50867	PRE_SET	11.032	1253

3.4 búsqueda de proteínas

Enter topic text here.

The screenshot shows a web interface for protein search. It has two main sections. The top section is titled 'Motivo:' and contains a large text input area. Below this input area is a button labeled 'Cargar Secuencia' with a folder icon, which is highlighted with a red rectangle. A blue callout bubble points to this button with the text 'Permite cargar archivo .txt con una de proteínas'. The bottom section is titled 'Linage Taxonomy:' and contains a smaller text input field. Below this field are two buttons: 'Limpiar' and 'Enviar'. The 'Enviar' button is highlighted with a red rectangle, and a blue callout bubble points to it with the text 'Envía la consulta'.

Una vez enviada la consulta nos conectamos con la herramienta expasytool en swissprot para obtener los motivos relacionados a la secuencia ingresada.

luego son cargados en una pantalla como lo muestra la siguiente figura.

PROTEÍNAS ENCONTRADAS DE LA ANTERIOR BÚSQUEDA

Seleccionar Todos

HALLADOS: 7 HITS

Proteína	Sector	Id Prosite	Motivo Relación	Seleccionar
Q9UBX2	DUX4_HUMAN		161-166	☐
P03409	TAX_HTL1A		33-38	☐
P14079	TAX_HTL1C		33-38	☐
P0C213	TAX_HTL1F		33-38	☐
P0C222	TAX_HTL1L		33-38	☐
Q0R5R1	TAX_HTL32		33-38	☐
Q4U0X7	TAX_HTL3P		33-38	☐

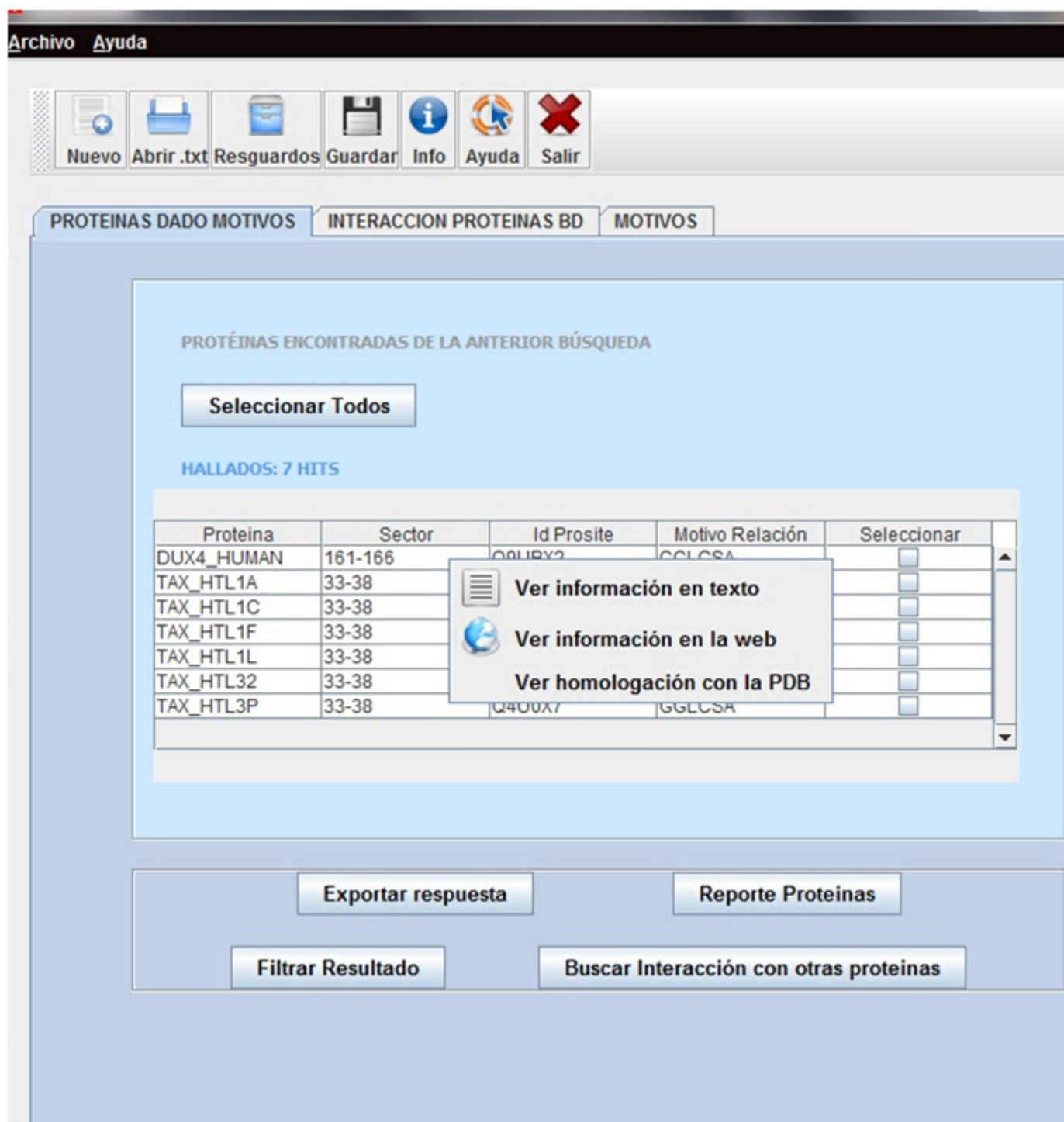
Reporte Proteínas

Buscar Interacción con otras proteínas

Filtrar Resultado

Cuando escoges filtrar Resultados se muestra una pantalla como la siguiente que permite realizar diversos filtros y trabajar solo con los datos necesarios,

filtra por la cantidad de motivos que tenga una proteína esto para trabajar con las proteínas que poseen mayor cantidad de motivos (como se muestra en la figura Realizar Filtro).



➤ **Ver información en texto:** trae un texto con la información de la proteína.

➤ **Ver información en la web:** carga una url en la página de uniprot para ver la

informacion referente a esta proteina.

- **Ver homologacion con PDB:** busca si posee o no una proteina homologa por codigo en la base de datos de la PDB.

Figura Realizar Filtro

sector	id prosite	proteina	id	motivo rel
161-166	Q9UBX2	DUX4_HUMAN	65884	GGLCSA
33-38	P03409	TAX_HTL1A	65885	GGLCSA
33-38	P14079	TAX_HTL1C	65886	GGLCSA
33-38	P0C213	TAX_HTL1F	65887	GGLCSA
33-38	P0C222	TAX_HTL1L	65888	GGLCSA
33-38	Q0R5R1	TAX_HTL32	65889	GGLCSA
33-38	Q4U0X7	TAX_HTL3P	65890	GGLCSA

- **El boton Buscar:** permite realizar la busqueda cruzando los datos seleccionados en el panel proteina y motivo_rel.
- **El boton Todos:** carga todos los datos obtenidos antes del filtro.
- **El boton cantidad de motivos:** despliega una opcion para indicar la cantidad de veces q debe aparecer un registro. Realiza un filtro mostrando solo los q aparecen mas de la cantidad de veces que se ingrese.
- **El boton relacionPDB:** permite mostrar solo los resultados de las proteinas que poseen un map con los id de la base de datos del PDB, para esto se usa una informacion obtenida de la base de datos de

uniprot digitalizada en la BD local que permite buscar la relacion.(con estas proteinas obtenidas se podra visualizar su estructura en PyMol).

➤ **El boton cancelar:** cierra la ventana

3.5 busqueda de interacciones

Este es el formulario para buscar con que proteinas interactua una proteina.

The image shows a web interface for searching protein interactions. It features a large text input field at the top labeled "Código de la Protéina:". Below this field are two buttons: "Limpiar" (highlighted with a red box) and "Cargar lista proteínas" (highlighted with a red box). A callout bubble points to the "Limpiar" button, stating: "Limpia el area de texto permitiendo arrancar de nuevo con la selección de proteinas". To the right, another callout bubble points to the "Cargar lista proteínas" button, stating: "Permite cargar un archivo de proteínas". Below the buttons is a section titled "Buscar interacción con" containing three radio button options: "BioGrid local", "BioGrid Web", and "MINT web". The "BioGrid local" option is selected and highlighted with a red box. To the right of these options are three callout bubbles: "Realiza la consulta usando la BD de Biogrid" (pointing to "BioGrid local"), "Realiza la consulta usando el Biogrid web" (pointing to "BioGrid Web"), and "Realiza la consulta usando el MINT web y e" (pointing to "MINT web"). At the bottom of the form is a button labeled "Realizar búsqueda" (highlighted with a red box). A callout bubble points to this button, stating: "Envía la consulta dependiendo de que opción se haya seleccionado".

La BD local es la base de datos descaragada de la BIOGRID "www.thebiogrid.org", para las otras opciones las web lo que se hace es un paso de parametros para

obtener resultado como si estuviéramos navegando dentro de sus formularios de búsqueda y mostrar el vínculo de forma directa en el navegador.

El resultado de una consulta lo podemos ver en la siguiente imagen.

RESULTADO DE LA INTERACCIÓN CON LAS PROTEÍNAS, COMO INTERANDO A O B

Seleccionar Todos

HALLADOS: 20 Interacciones

INTERACT...	INTERACT...	SINONIMO ...	SINONIMO ...	METODO	AUTOR	TIPO
H3F3B	EHMT2 DA...	H3.3B H3...	DKFZp68...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...
EHMT2 D...	BAT2L RP...	DKFZp68...	MGC1052...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...
HGS	EHMT2 DA...	ZFYVE8 V...	DKFZp68...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...
EHMT2 D...	C10orf12	DKFZp68...	FLJ13022 ...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...
PLOD3	EHMT2 DA...	LH3	DKFZp68...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...
LIMS1	EHMT2 DA...	PINCH1 PI...	DKFZp68...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...
KLF6 RP1...	EHMT2 DA...	BCD1 ZF9...	DKFZp68...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...
LMO2	EHMT2 DA...	TTG2 RBT...	DKFZp68...	two hybrid	Rual JF (2...	direct int...

Esta imagen es del formulario de respuesta, indica cuantas interacciones arrojó el resultado para este caso fueron 20 INTERACCIONES

3.6 Docking

Esta es la interfaz que permite realizar el docking entre dos proteínas, para ello se debe escoger los ligandos de una y la otra como proteína receptor.

Receptor	Ligando
717 6716 718 6716 6719 719 6718 726 6727 6728 727 6726 728 6726 6729 6730 729 6728 730 6728 6731 731 6730 732 6733 6734 733 6732 734 6732 6735 6736 735 6734 736 6734 6737 737 6736 553 0 7 7 61 0 6 6 6732 5	1.2060 -1.7270 0.0510 H 0 0 0 0 3.2440 -0.4830 -0.0030 H 0 0 0 0 1 2 1 0 0 0 1 3 1 0 0 0 1 7 1 0 0 0 1 8 1 0 0 0 2 9 1 0 0 0 3 4 1 0 0 0 3 5 1 0 0 0 3 10 1 0 0 0 4 11 1 0 0 0 5 6 1 0 0 0 5 12 1 0 0 0 5 13 1 0 0 0 6 14 1 0 0 0 M END \$\$\$\$
Limpiar	Limpiar
Cargar Receptor	Cargar Ligando
CODE PDB 	Traer PDB
Realizar DOCKING Aceptar	

Endnotes 2... (after index)

Back Cover