

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 de solución	3
1.3. Hipótesis	3
1.4. Objetivos	4
1.4.1. Objetivo general	4
1.4.2. Objetivos específicos	4
1.5. Metodología de desarrollo del proyecto	4
2. Conceptos básicos	6
2.1. Protein Data Bank (PDB)	6
2.2. Proteínas, aminoácidos y ligandos	7
2.3. Patrones de interacción proteína-ligando	10
2.4. Interfaces de usuarios basada en facetas	12
2.5. Herramientas de consulta de patrones estructurales	14
3. Diseño y Construcción	21
3.1. Requisitos generales	21
3.2. Requisitos específicos	22

3.3.	Arquitectura de la aplicación	24
3.3.1.	Arquitectura cliente-servidor	24
3.4.	Diagrama de clases	26
3.5.	Esquema de base de datos	29
3.6.	Implementación	31
3.6.1.	Filtros de búsqueda	31
3.7.	Exploración de patrones	33
3.8.	Archivo en formato JSON del patrón estructural	39
4.	Evaluación del Software	42
4.1.	Metodología de evaluación	42
4.1.1.	Diseño	43
4.1.2.	Protocolo de tratamiento de sujetos	43
4.1.3.	Presentación de la aplicación	43
4.1.4.	Definición de actividades	43
4.1.5.	Entrega de cuestionario	44
4.1.6.	Ejecución	44
4.2.	Resultados de la evaluación	45
4.2.1.	Interfaz de la aplicación	47
4.2.2.	Filtrado de patrones estructurales	48
4.2.3.	Visualización de patrones	49
4.2.4.	Metadatos sobre patrones	50
4.2.5.	Funcionalidad de exportar patrones	50
4.2.6.	Correctitud de la información visualizada	51
4.2.7.	Utilidad de la aplicación	52
4.2.8.	Usabilidad de la aplicación	53
4.2.9.	Percepción general de la aplicación	54
5.	Conclusiones	56
	Bibliografía	58
	Anexos	

A: Documentos para evaluación de usabilidad	61
A.1. Guía de actividades	61
A.2. Cuestionario de evaluación	65

ÍNDICE DE FIGURAS

	página
1.1. Representación basada en grafos de un patrón estructural proteína-ligando, dibujado con la aplicación GSP4PDB	2
2.1. Proteína compuesta por cadena lineal de aminoácidos, un grupo carboxilo y un grupo amino.[3]	8
2.2. Estructura de las proteínas [15].	9
2.3. Representación de un ligando uniéndose a una proteína. [11]	10
2.4. Patrón estructural del tipo C2H2 Zinc Finger representado en un grafo [14].	11
2.5. Ejemplo de búsqueda de contenido mediante el uso de interfaces de usuario basada en facetas.	13
2.6. Implementación de interfaz de usuario basada en facetas para el repositorio de patrones estructurales proteína-ligando.	14
2.7. Ligplot usando una representación esquemática bidimensional de la proteína 2HYY	15
2.8. PLIP mostrando el resultado del análisis de la proteína 2HYY.	16
2.9. Prosite mostrando información acerca del patrón Zinc Finger.	17
2.10. GSP4PDB mostrando un patrón estructural proteína-ligando dibujado y al costado derecho, las estadísticas obtenidas de la búsqueda de coincidencias del patrón en el PDB.	18
2.11. GSP4PDB2 mostrando un patrón estructural proteína-ligando dibujado.	19
2.12. GSP4PDB2 visualizando resultados de búsqueda del patrón previamente diseñado (Figura 2.10).	20
3.1. Arquitectura cliente-servidor de 3 capas.	25
3.2. Diagrama de clases de alto nivel para la aplicación GSPRepository.	26
3.3. Diagrama de clases de Repository.	28
3.4. Base de datos relacional de GSPRepository.	30
3.5. Interfaz de filtros de búsqueda.	32
3.6. Paneles de filtro y visualización de patrón donde se realiza la exploración de patrones estructurales.	33

3.7.	Función de exportación de patrón estructural y descarga de archivo en formato <i>JSON</i>	34
3.8.	Función de descarga del patrón estructural proporcionando un nombre al archivo que contiene la estructura en formato <i>JSON</i>	35
3.9.	Representación de código CATH en metadata del patrón estructural.	38
4.1.	Sala de computación de la Escuela de Ingeniería en Bioinformática, Universidad de Talca, Campus Lircay.	45
4.2.	Experimentación de un estudiante de Ingeniería en Bioinformática con la aplicación GSP4PDB3.	46
4.3.	Percepción de la interfaz de la aplicación GSPRepository.	47
4.4.	Percepción del filtrado de patrones de GSPRepository.	48
4.5.	Percepción de la visualización de patrones estructurales basados en grafos de GSPRepository.	49
4.6.	Percepción de los metadatos de patrones estructurales.	50
4.7.	Percepción de la funcionalidad de exportar patrones estructurales. . .	51
4.8.	Percepción de la correctitud de la información visualizada.	52
4.9.	Percepción de la utilidad de GSPRepository.	53
4.10.	Percepción de la usabilidad de GSPRepository.	54
4.11.	Percepción general de GSPRepository.	55
A.1.	Botones de navegación de GSP4PDB3.	64
A.2.	Exportar patrones (izquierda), realizar búsqueda (derecha)	64

ÍNDICE DE TABLAS

	página
2.1. Tabla	20
3.1. Historias de usuario	23
3.2. Ejemplo de distribución de códigos de jerarquía del árbol CATH. . .	37