

## TABLA DE CONTENIDOS

	página
Dedicatoria	I
Agradecimientos	II
Tabla de Contenidos	III
Índice de Figuras	VI
Índice de Tablas	VIII
Resumen	IX
Abstract	x
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
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
<b>2. Conceptos básicos</b>	<b>6</b>
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
<b>3. Diseño y Construcción</b>	<b>21</b>
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
<b>4.</b>	<b>Evaluación del Software</b>	<b>42</b>
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
<b>5.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>56</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>58</b>
	<b>Anexos</b>	

<b>A: Documentos para evaluación de usabilidad</b>	<b>61</b>
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