

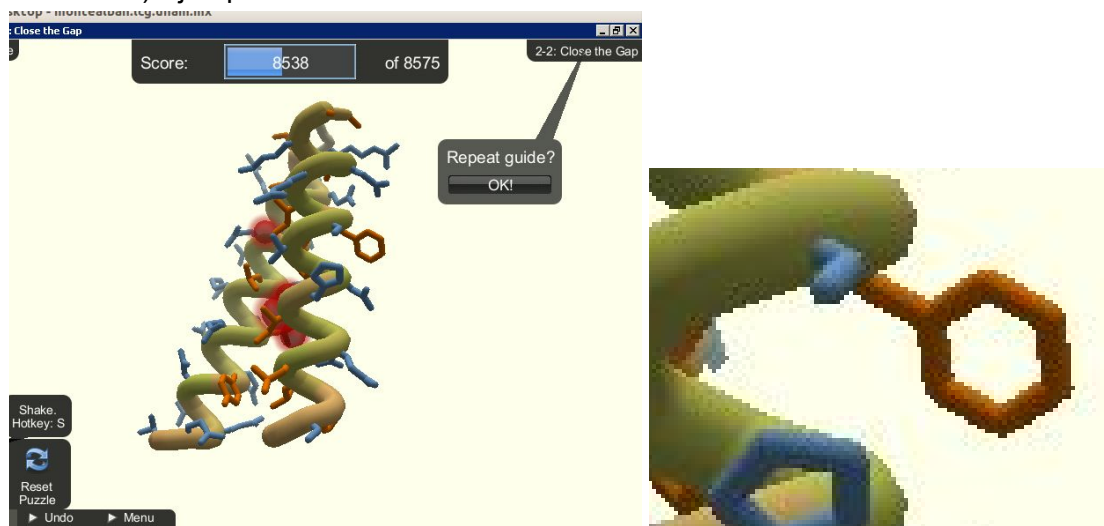
Practica 1
Carmina Barberena Jonas
LCG

1) Creen un repositorio git en tepeu, por ejemplo en su home/algoritmos3D, para ir añadiendo ahí las tareas de los 4 días y sus respectivos informes.

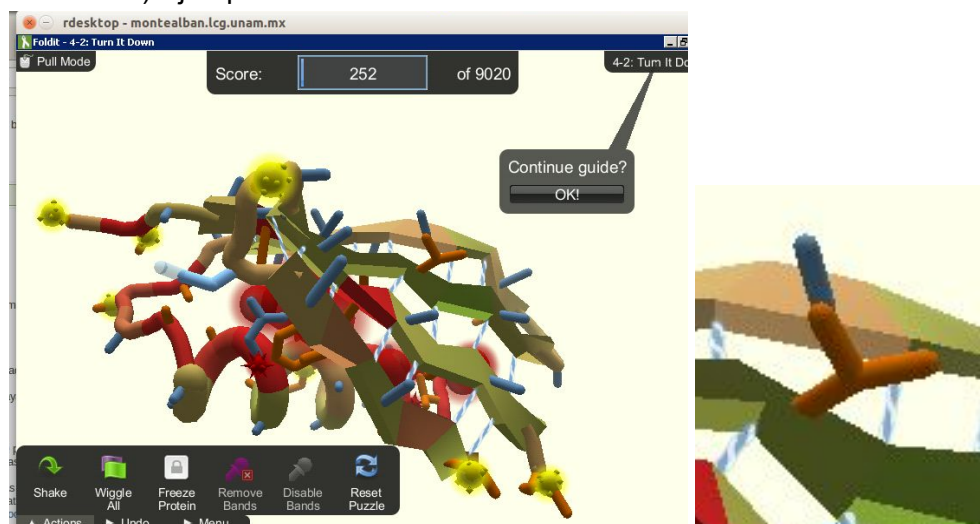
<https://github.com/CarBarJon/CarminaBJ-LCG-2016>

2) Que completen los puzzles de Foldit al menos hasta el nivel 4-5, y por el camino vayan tomando capturas de pantalla que reflejen algunos de los conceptos teóricos que hablamos por la mañana:

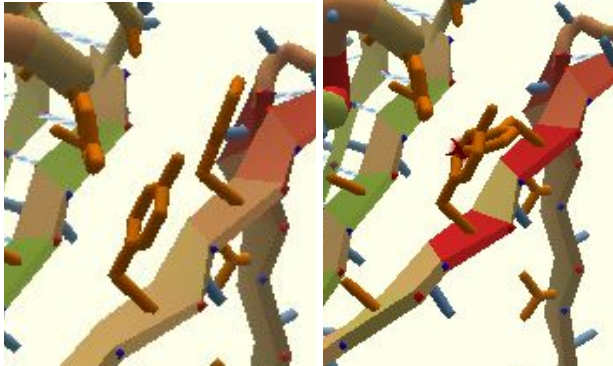
2.1) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral aromática



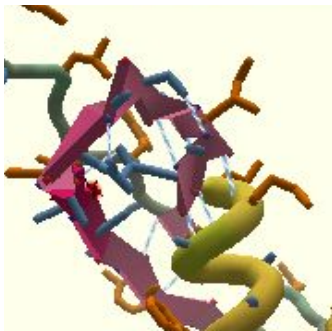
2.2) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral chica



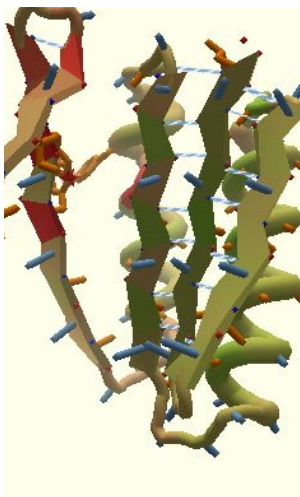
2.3) Ejemplo de giro en torno a los ángulos phi/psi de un residuo seleccionado, que pasa cuando si sus vecinos tienen cadenas laterales voluminosas?



2.4) Ejemplo de puentes de hidrógeno entre residuos de una alfa-hélice y entre hojas de una lámina beta. Desde el punto de vista algorítmico, cuál de los estados de estructura secundaria les parece más difícil de programar?



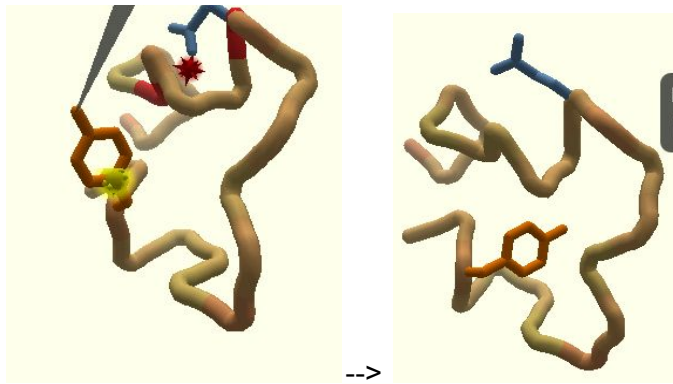
-Alfa-helice



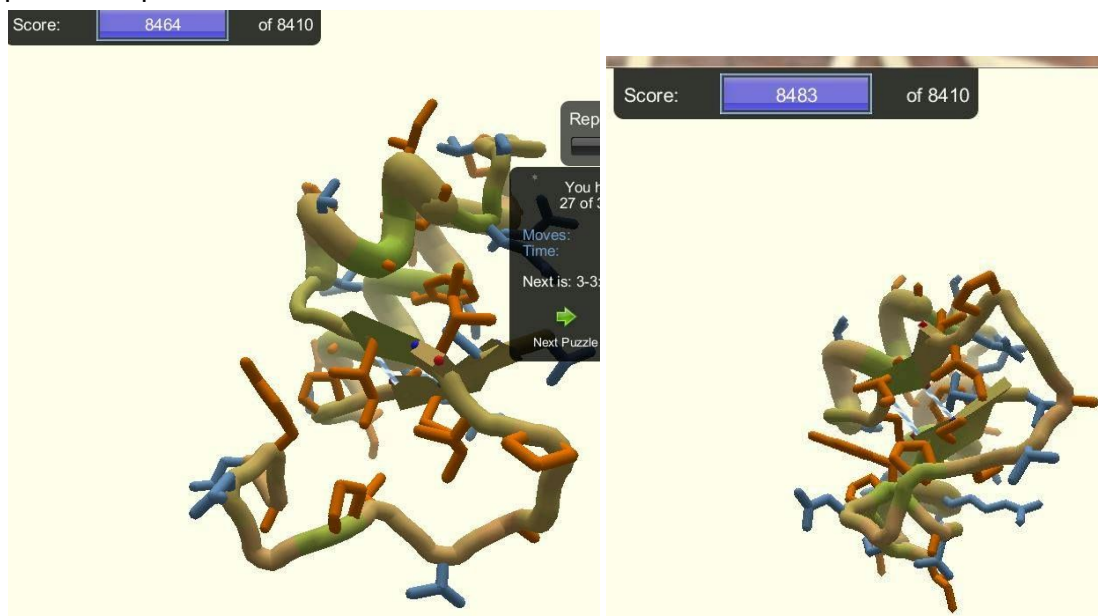
Beta-beta

Me parece más complejo programar puentes entre alfa-hélices debido a las curvaturas que tienen pueden formar una cantidad mayor de combinaciones donde los puentes pueden estar alrededor de toda la hélice mientras que las sábanas beta al unirse con sus laterales me parece es más fácil ubicar los enlaces.

2.5) Ejemplo de residuo hidrofóbico expuesto y luego correctamente "enterrado" tras operaciones con los vecinos.



2.6) Ejemplo de conformaciones distintas con puntuaciones similares, para hacer patente el problema de evaluar lo correcto de una conformación.



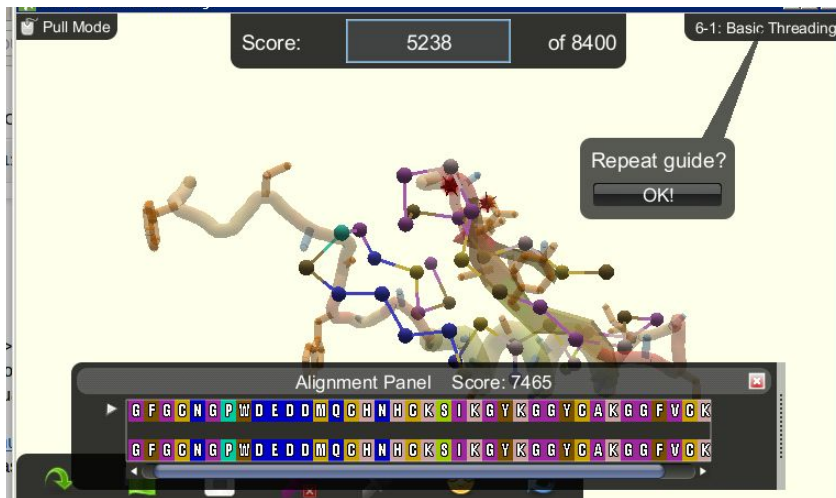
Aunque tienen puntajes muy similares se puede ver que son muy diferentes y los residuos que exponen son muy diferentes lo que puede variar sus interacciones con otras moléculas y por ende su función.

2.7) De acuerdo con

http://eead-csic-compbio.github.io/bioinformatica_estructural/node17.html calcula el tiempo que llevaría explorar todas las conformaciones posibles de uno de los péptidos o proteínas que utilicen en los puzzles.

Para esto utilizaré la siguiente estructura, la cual tiene 37 residuos.

Según la paradoja de Levithan una proteína dependiendo de sus aminoácidos tomará un tiempo determinado en explorar todas sus conformaciones posibles, para la siguiente proteína se tienen $(10^{13})(10)^{37} = 1e+50$. Lo cual es un tiempo extremadamente grande en comparación al que se toma biológicamente .



≈ 100