

Documentación de Software Bio-Suite-T

Nombre del software: Bio-Suite-T

Versión: 1.0.0

Fecha: 📅 Nov 16, 2023

TABLE OF CONTENTS

- Pasos previos
- Resumen del software
- Requisitos para ejecutar el software(Recomendados) 🙌
- Datos genómicos y proteómicos de de la BD de datos no relacional MongoDB
- Configuración inicial ⚙️
 - Servidor local/Computadora local/Servidor externo
 - Computadora propia

Funciones

- Función 1. Análisis de propiedades del ADN
 - Resumen
- Función 2. Análisis de propiedades de Proteínas
 - Resumen
- Función 3. Transcripción a mRNA
 - Resumen
- Función 4. Transcripción inversa
 - Resumen
- Función 5. Traducción mRNA o ADN a proteína
 - Resumen

- Función 6. Alineación de secuencias por pares
 - Resumen:
- Función 7. BLAST
 - Resumen
- Función 8. Visor de PDBs
 - Resumen
- Función 9. Análisis de PDBs
 - Resumen
- Función 10. Árboles filogenéticos
 - Resumen
- Función 11. Análisis de MOTIFS
 - Resumen
- Función 12. Expresiones Regulares
 - Resumen
 - Sobre Expresiones Regulares 
- Guía de uso 
 - Paso 4 - Abre la aplicación
 - Paso 4 - Usa alguno de los módulos de la aplicación
- Preguntas frecuentes 
 - Enfoque
 - Preguntas, consultas y soporte
- Soporte 

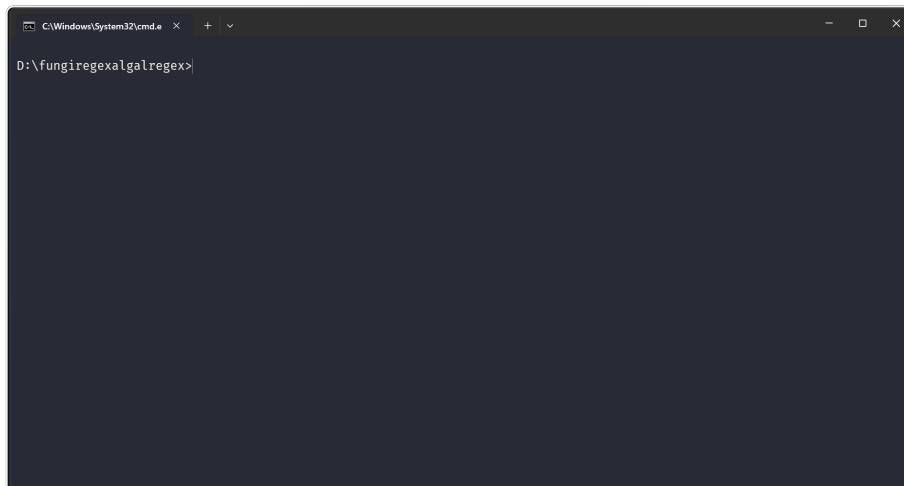
Software web desarrollado por Víctor Miguel Terrón Macías en conjunto a diferentes autores respectivamente citados en cada módulo.

Pasos previos

Antes de ejecutar el software, asegúrese de cumplir con los requisitos previos y ejecutar los siguientes comandos:

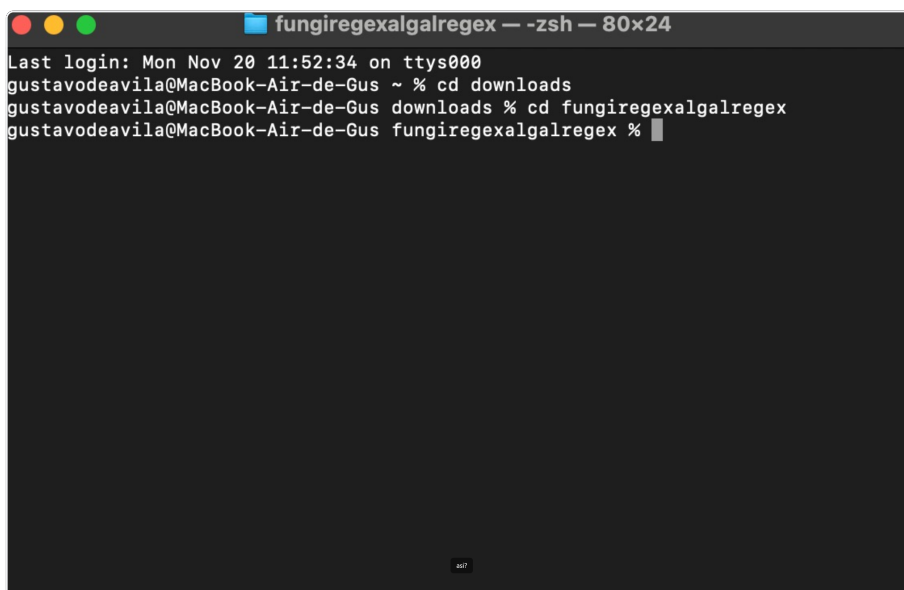
1. Recibes la carpeta compresada con el código completo, por tanto es necesario que tengas descargado.

- a. Python 3.11.
 - b. 7-Zip para descomprimir.
2. Descomprimir la carpeta.
 3. Con la consola de tu S.O. navega hasta la ruta de la carpeta donde hayas descargado, como se ve en las imagenes:
 - a. Windows.



Ruta del archivo donde está descargado Bio-Suite-T.

- a. MacOS.



Ruta del archivo donde está descargado Bio-Suite-T.

4. Una vez dentro de la carpeta escribe los siguientes comandos para activar el entorno virtual:
 - a. Windows:

- ```
1 cd env
2 cd Scripts
```

```
3 activate
4 cd ..
5 cd ..
```

#### a. MacOS

```
1 source env/scripts/activate
```

5. Se requiere instalar todas las dependencias necesarias para que el proyecto funcione, por tanto ejecuta el siguiente comando:

```
1 pip install -r requirements.txt
```

6. En MacOS se ha experimentado dificultades en el proceso de instalación asociado a incompatibilidades con ciertos paquetes, si ello sucede instala cada paquete que muestre el error por separado utilizando la siguiente sintaxis:

```
1 pip install "nombre_paquete"
```

7. Si el problema persiste trata de omitir la instalación de dicho paquete borrándolo del archivo de requirements.txt. Si aún con ello aún persisten problemas en esta etapa, puedes contactarme directamente al siguiente correo: ✉ [victor.terron@cimat.mx](mailto:victor.terron@cimat.mx)

8. Posterior a la instalación de los paquetes puedes ejecutar el programa utilizando el siguiente comando:

```
1 python .\manage.py runserver
```

9. El software debe mostrarte la siguiente salida en la consola:

```
November 20, 2023 - 13:39:13
Django version 4.1.13, using settings 'biosuite.settings'
Starting development server at http://127.0.0.1:8000/
Quit the server with CTRL-BREAK.
```

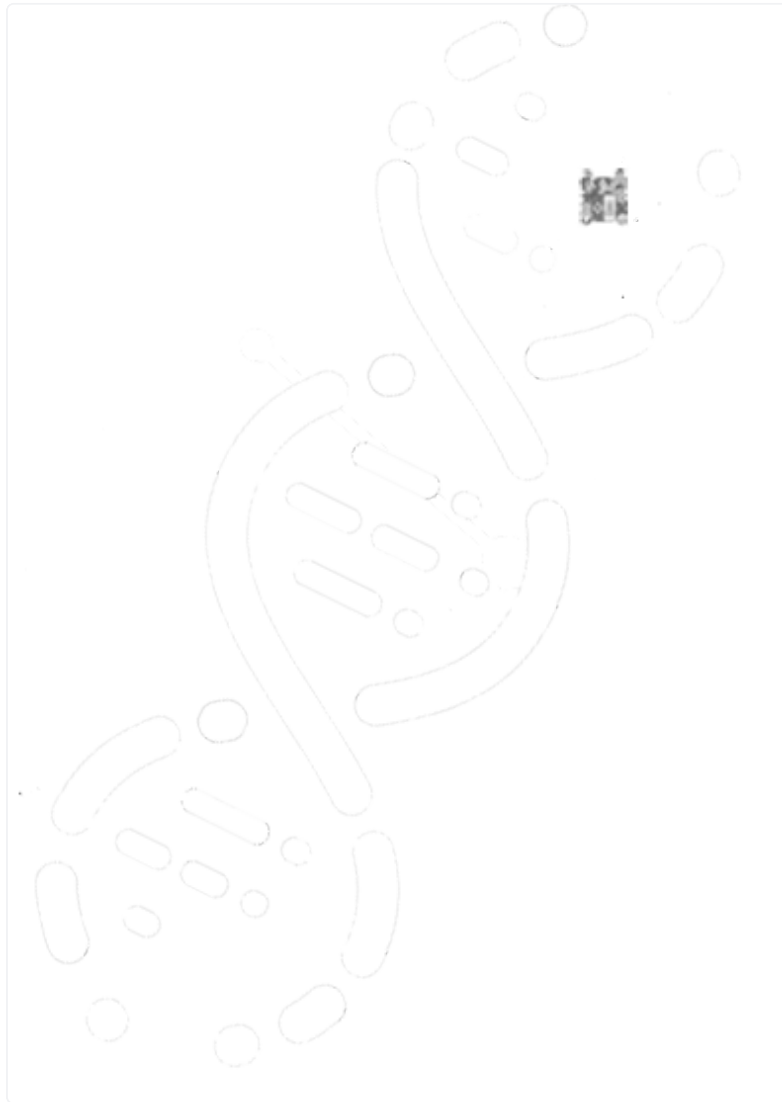
Console output.

10. Posteriormente ya puedes hacer uso de la aplicación entrando desde tu navegador a la dirección:

```
1 127.0.0.1:8000
```

Después de ejecutar los comandos estas listo para ejecutar Bio-Suite-T.

## Resumen del software



Bio-Suite-T logo.

Esta herramienta es una aplicación web planificada para reunir una serie de herramientas para el análisis de secuencias proteómicas y genómicas, enfocado principalmente a Algal y Fungi, sin embargo, no se limita unicamente a estas, sino que es capaz de llevar a cabo el análisis de diferentes secuencias, cuenta con 16 herramientas dentro de las cuales están:

1. Análisis de propiedades de secuencias de ADN o nucleótidos.
2. Análisis de propiedades de secuencia de Proteínas.
3. Transcripción de secuencias.
4. Transcripción inversa de secuencias.
5. Traducción de secuencias.
6. Alineación de secuencias.
7. BLAST.
8. Visor de archivos PDB.

9. Analizador de archivos PDB.
10. Calculo y generación de Árboles filogenéticos.
11. Análisis de secuencias MOTIFS.
12. Búsqueda de regiones conservadas a nivel genómico y proteómico de Algal y Fungi mediante expresiones regulares.
13. Visor de información de bases de datos de proteínas Fungi. (requieres tener instalado MongoDB, MongoAtlas y cargar las base de datos disponibles en JGI o NCBI, entre otras).
14. Visor de información de bases de datos de genómas Fungi. (requieres tener instalado MongoDB, MongoAtlas y cargar las base de datos disponibles en JGI o NCBI, entre otras).
15. Visor de información de bases de datos de proteínas Algal. (requieres tener instalado MongoDB, MongoAtlas y cargar las base de datos disponibles en JGI o NCBI, entre otras).
16. Visor de información de bases de datos de genómas Algal. (requieres tener instalado MongoDB, MongoAtlas y cargar las base de datos disponibles en JGI o NCBI, entre otras).

Esta versión utiliza funciona con DJANGO como framework de desarrollo para front y back conjunto a JS .

## Requisitos para ejecutar el software(Recomendados) 🙌

El software ha sido desarrollado y probado en una computadora con las siguientes características:

- 8 GB RAM
- Cent OS 7, Windows 10 y MAC OS como sistemas operativos.
  - `Nota: MAC OS presenta incompatibilidades con el módulo BLAST, por tanto es posible que no puedas ejecutar este módulo desde este sistema operativo.`
- Procesador AMD Ryzen 5 5600H.

Sobre las características de software:

- Python 3.11.
- MongoDBCompass.
- Chrome como navegador recomendado.


El proyecto contiene todos los elementos necesarios para desplegarse en un servidor si así se requiriera, para iniciar la aplicación se debe ejecutar el siguiente comando.

```
1 python .\manage.py runserver #desde la carpeta raíz del proyecto
```

# Datos genómicos y proteómicos de de la BD de datos no relacional MongoDB

La información de los genomas y proteomas es necesaria para que puedas ejecutar los módulos de las bases de datos pertenece a cada respectivo autor, sin embargo, se ha descargado de algunas especies, por ello debes generar una base de datos no relacional de documentos en MONGODB llamada fungiRegExAlgal y posteriormente importar los archivos disponibles en el siguiente enlace:

[https://drive.google.com/drive/folders/1Q68uTHQw7UFHjdYhDsoV40NS5l\\_mIJzl?usp=sharing](https://drive.google.com/drive/folders/1Q68uTHQw7UFHjdYhDsoV40NS5l_mIJzl?usp=sharing)

 [https://drive.google.com/drive/folders/1Q68uTHQw7UFHjdYhDsoV40NS5l\\_mIJzl?usp=sha...](https://drive.google.com/drive/folders/1Q68uTHQw7UFHjdYhDsoV40NS5l_mIJzl?usp=sha...)

## Configuración inicial

Como se mencionó, este software puedes desplegar esta aplicación tanto local como en un servidor si es necesario, esto esta a consideración del usuario de la aplicación y sus necesidades dependiendo de los recursos computacionales disponibles.

Tome en consideración que si múltiples usuarios se conectan al mismo tiempo, se interrumpirán las tareas uno a otro, por tanto la aplicación es para uso de un usuario a la vez, si el otro usuario encola tareas a la aplicación mientras otro usuario esta ejecutando otras se dará prioridad a las del ultimo usuario y se eliminaran las del anterior usuario.

## Servidor local/Computadora local/Servidor externo

En caso de que despliegues la aplicación usando un servidor local (que puede ser otra computadora). Sigue las siguientes instrucciones:

1. Obtén la dirección IP de la computadora.
  - a. Para Windows sigue las siguientes instrucciones:
    - i. <https://support.microsoft.com/en-us/windows/find-your-ip-address-in-windows-f21a9bbc-c582-55cd-35e0-73431160a1b9>
  - b. Para Linux:
    - i. Ubuntu: <https://help.ubuntu.com/stable/ubuntu-help/net-findip.html.en>
    - ii. Cent OS / Red Hat: [https://access.redhat.com/documentation/es-es/red\\_hat\\_enterprise\\_linux/7/html/migration\\_planning\\_guide/ch04s04s07](https://access.redhat.com/documentation/es-es/red_hat_enterprise_linux/7/html/migration_planning_guide/ch04s04s07)

- iii. Para otras distribuciones busca información en el sitio oficial
2. Navega por el sistema de archivos hasta que encuentres la carpeta raíz que contiene el proyecto.
3. Ejecuta la aplicación con su respectivo comando.

```
1 python .\manage.py runserver
```

## Computadora propia

Si estás ejecutándolo localmente en tu computadora la IP no cambia, por tanto debes ingresar a <http://127.0.0.1:8000/>. La configuración del firewall depende de cada usuario y para esta aplicación si se ejecutara localmente no es necesario la apertura de puertos a usuarios externos.

## Funciones

### Función 1. Análisis de propiedades del ADN

En esta funcionalidad, debes introducir una secuencia de nucleótido como entrada. A partir de esta, la herramienta generará y te mostrará una serie de propiedades relevantes del ADN de la secuencia ingresada.

Entre estas propiedades, encontrarás:

- Complemento de la secuencia.
- Secuencia complementaria inversa.
  - En su representaciones en formato decimal y porcentual.
- Distribución de los aminoácidos presentes en la secuencia.
- Un gráfico de pastel visual e informativo que ilustra la distribución de (A) adenina, (C) citosina, (G) guanina y (T) timina en la secuencia.

### Resumen

Las entradas son:

- Usuario proporciona la secuencia de ADN.

Proceso:

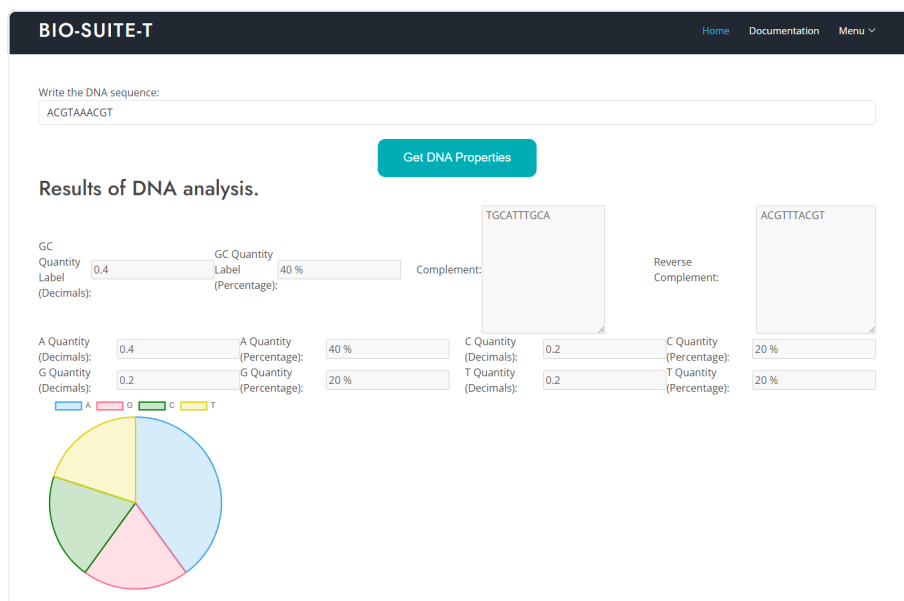
- Software Analiza la secuencia de ADN.

Salida:

- Complemento de la secuencia.
- Secuencia complementaria inversa.



- En su representaciones en formato decimal y porcentual.
- Distribución de los aminoácidos presentes en la secuencia.
- Un gráfico de pastel visual e informativo que ilustra la distribución de (A) adenina, (C) citosina, (G) guanina y (T) timina en la secuencia.



Salida de ejemplo.

## Función 2. Análisis de propiedades de Proteínas

En esta funcionalidad, la aplicación te permite introducir una secuencia de proteínas. Además, tienes la opción de modificar el pH de la secuencia. Con base en estos datos, el sistema generará automáticamente una serie de parámetros importantes relacionados con el proteoma ingresado, tales como:

- Tamaño del proteoma.
- Peso molecular.
- Aromaticidad.
- Índice de inestabilidad.
- Punto isoelectrico.
- Estructura secundaria.
- Coeficiente de extinción molecular.
- Coeficiente de extinción con cisteínas reducidas.
- Cantidad de puentes disulfuro.
- Índice de hidropaticidad (Gravy).
- Carga eléctrica a un pH específico.
- Datos de flexibilidad.
- Distribución de elementos en la secuencia.

- Hidrofobicidad K&D.

Además, para facilitar la interpretación de estos datos, la herramienta incluye gráficos representativos que te brindan una forma de facilitar la visualización de la información.

## Resumen

Las entradas son:

- Usuario proporciona secuencia de proteína.
- Carga a pH.

Proceso:

- Software analiza la secuencia de proteína.

Salida:

- Tamaño del proteoma.
- Peso molecular.
- Aromaticidad.
- Índice de inestabilidad.
- Punto isoelectrico.
- Estructura secundaria.
- Coeficiente de extinción molecular.
- Coeficiente de extinción con cisteínas reducidas.
- Cantidad de puentes disulfuro.
- Grado de hidrofobicidad (Gravy).
- Carga eléctrica a un pH específico.
- Datos de flexibilidad.
- Distribución de elementos en la secuencia.
- Relaciones KB/KV.

BIO-SUITE-T

[Home](#)
[Documentation](#)
[Contact](#)
[Menu](#)

Write the PROTEOME sequence:  
MEQPATKRRKQHNNLEPTGADYERMSAWLQREGADFNVTIHKSHSEGYGYAARA  
Charge at pH:  
2

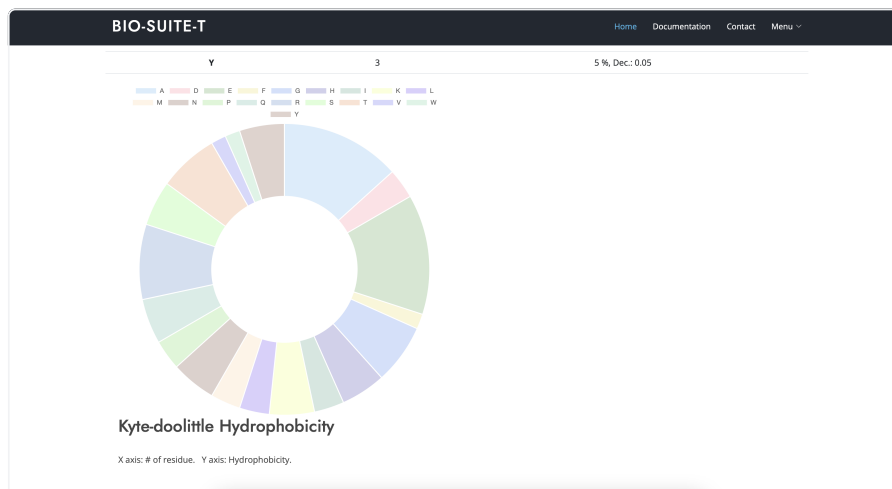
Get PROTEOME Properties

Results of PROTEOME analysis.

| #  | Parameter                         | Value                                          |
|----|-----------------------------------|------------------------------------------------|
| 1  | Lenght of the Proteome:           | 60                                             |
| 2  | Molecular weight:                 | 6878.4238000000005                             |
| 3  | Aromaticity:                      | 0.08333333333333333                            |
| 4  | Inestability index:               | 64.68499999999997                              |
| 5  | Iso-electric point:               | 5.849550819396971                              |
| 6  | Secondary Structure Fraction:     | (0.16666666666666666, 0.2, 0.3333333333333333) |
| 7  | Molar Extinction Coefficient (E): | (9970, 9970)                                   |
| 8  | E Reduced cysteines:              | 9970                                           |
| 9  | Disulfide bridges:                | 9970                                           |
| 10 | Gravy:                            | -1.2133333333333336                            |
| 11 | Charge at pH:                     | 11.926312289610369                             |

Flexibility data.

| BIO-SUITE-T                                                                                     |          |                                |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|--------------------------------|
| <a href="#">Home</a> <a href="#">Documentation</a> <a href="#">Contact</a> <a href="#">Menu</a> |          |                                |
| Aminoacid Letter                                                                                | Quantity | Percentage                     |
| A                                                                                               | 8        | 13 %, Dec.: 0.1333333333333333 |
| C                                                                                               | 0        | 0 %, Dec.: 0.0                 |
| D                                                                                               | 2        | 3 %, Dec.: 0.0333333333333333  |
| E                                                                                               | 8        | 13 %, Dec.: 0.1333333333333333 |
| F                                                                                               | 1        | 2 %, Dec.: 0.0166666666666666  |
| G                                                                                               | 4        | 7 %, Dec.: 0.0666666666666667  |
| H                                                                                               | 3        | 5 %, Dec.: 0.05                |
| I                                                                                               | 2        | 3 %, Dec.: 0.0333333333333333  |
| K                                                                                               | 3        | 5 %, Dec.: 0.05                |
| L                                                                                               | 2        | 3 %, Dec.: 0.0333333333333333  |
| M                                                                                               | 2        | 3 %, Dec.: 0.0333333333333333  |
| N                                                                                               | 3        | 5 %, Dec.: 0.05                |
| P                                                                                               | 2        | 3 %, Dec.: 0.0333333333333333  |
| Q                                                                                               | 3        | 5 %, Dec.: 0.05                |
| R                                                                                               | 5        | 8 %, Dec.: 0.0833333333333333  |
| S                                                                                               | 3        | 5 %, Dec.: 0.05                |
| T                                                                                               | 4        | 7 %, Dec.: 0.0666666666666667  |
| V                                                                                               | 1        | 2 %, Dec.: 0.0166666666666666  |
| W                                                                                               | 1        | 2 %, Dec.: 0.0166666666666666  |



Salida de ejemplo

## Función 3. Transcripción a mRNA

A partir de una secuencia de nucleótidos o ADN, la herramienta es capaz de generar la transcripción correspondiente al mRNA, así como proporcionar el ADN plantilla. Además, te facilita la visualización de las hebras plantilla de ADN en ambas direcciones, tanto de 5' a 3' como de 3' a 5'.

### Resumen

Las entradas son:

- Usuario, proporciona secuencia de ADN o nucleótidos.

Proceso:

- Software analiza la secuencia.

Salida:

- Transcripción ADN a mRNA.
- Hebras plantilla ADN tanto de 5' a 3' como de 3' a 5'.

Salida de ejemplo

## Función 4. Transcripción inversa

Esta funcionalidad permite introducir una secuencia de mRNA. Una vez ingresada, el sistema procesará automáticamente esta secuencia y realizará una transcripción inversa, generando la secuencia de ADN o nucleótidos correspondiente.

### Resumen

Las entradas son:

- Usuario proporciona secuencia de mRNA.

Proceso:

- Software analiza la secuencia.

Salida:

- Transcripción inversa mRNA a ADN.

Salida de ejemplo

## Función 5. Traducción mRNA o ADN a proteína

Esta funcionalidad te permite introducir una secuencia de mRNA o ADN. Tienes la opción de seleccionar cualquiera de las 27 tablas de codones disponibles o utilizar la tabla estándar por defecto. Una vez que hayas introducido la secuencia y seleccionado la tabla de codones, el sistema identificará y mostrará el tipo de secuencia. Además, te proporcionará la traducción correspondiente de mRNA a ADN y los detalles del codón específico que elegiste de la tabla.

### Resumen

Las entradas son:

- Usuario proporciona secuencia de mRNA.
- Selecciona cualquiera de las 27 tablas de codones disponibles o el estándar.

Proceso:

- Software analiza la secuencia.

Salida:

- Tipo de secuencia.
- Traducción de mRNA a ADN de la secuencia.
- Codón seleccionado para la traducción.

**BIO-SUITE-T** Home Documentation Contact Menu

### Translation Tool.

Write the mRNA or DNA sequence:

AUUUUUUUUUGCUCUUGAGCUCUGGACAUUCUCUGCUGCUCUG

Select the codon table that you want to use to translate the sequence:

|                                                                                                                     |                                                                        |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| <input checked="" type="radio"/> Standard Code.                                                                     | <input type="radio"/> Chlorophycean Mitochondrial Code.                |
| <input type="radio"/> Vertebrate Mitochondrial Code.                                                                | <input type="radio"/> Trematode Mitochondrial Code.                    |
| <input type="radio"/> Yeast Mitochondrial Code.                                                                     | <input type="radio"/> Scenedesmus obliquus Mitochondrial Code.         |
| <input type="radio"/> The Mold, Protozoan, and Coelenterate Mitochondrial Code and the Mycoplasma/Spiroplasma Code. | <input type="radio"/> Thraustochytrium Mitochondrial Code.             |
| <input type="radio"/> The Invertebrate Mitochondrial Code.                                                          | <input type="radio"/> Rhabdopleuridae Mitochondrial Code.              |
| <input type="radio"/> The Ciliate, Dasycladacean and Hexamita Nuclear Code.                                         | <input type="radio"/> Candidate Division SR1 and Gracilibacteria Code. |
| <input type="radio"/> The Echinoderm and Flatworm Mitochondrial Code                                                | <input type="radio"/> Pachysolen tannophilus Nuclear Code.             |
| <input type="radio"/> The Euplotid Nuclear Code.                                                                    | <input type="radio"/> Karyorelict Nuclear Code.                        |
| <input type="radio"/> The Bacterial, Archaeal and Plant Plastid Code.                                               | <input type="radio"/> Condyllostoma Nuclear Code.                      |
| <input type="radio"/> The Alternative Yeast Nuclear Code.                                                           | <input type="radio"/> Mesodinium Nuclear Code.                         |
| <input type="radio"/> The Ascidian Mitochondrial Code.                                                              | <input type="radio"/> Peritrich Nuclear Code.                          |
| <input type="radio"/> The Alternative Flatworm Mitochondrial Code.                                                  | <input type="radio"/> Blastocrithidia Nuclear Code.                    |
| <input type="radio"/> Blepharisma Nuclear Code.                                                                     | <input type="radio"/> Cephalodiscidae Mitochondrial UAA-Tyr Code.      |
|                                                                                                                     | <input type="radio"/> Try with all (Brute Force).                      |

Translate sequence

#### Results of translation

|                     |                         |
|---------------------|-------------------------|
| Type of sequence    | This is a mRNA sequence |
| Translation result: | IFFALELWHFSAAV          |
| Used Codon Table:   | 1 - Standard Code.      |

Salida de ejemplo

## Función 6. Alineación de secuencias por pares

La función de alineación de secuencias por pares permite al usuario comparar dos secuencias de nucleótidos o ADN para identificar similitudes y diferencias. A continuación, se describen los pasos para utilizar esta función:

### 1. Ingreso de Secuencias:

- El usuario debe ingresar las secuencias de nucleótidos o ADN que desea comparar. Puede seleccionar la opción de alineación local o global según sus necesidades.

## 2. Parámetros Opcionales:

- *Porcentaje de Coincidencia y No Coincidencia:*
  - Estos valores son opcionales y se establecen por defecto. Si el usuario desea personalizar estos parámetros, puede hacerlo para adaptarse a sus criterios específicos.
- *Matriz de Penalización:*
  - La matriz de penalización es un parámetro opcional. Si el usuario desea aplicar una matriz de penalización personalizada, puede seleccionar esta opción.

## 3. Visualización de Resultados:

- Después de ejecutar la alineación, la herramienta proporcionará los siguientes resultados:
  - Porcentaje de Coincidencia.
  - Porcentaje de No Coincidencia.
  - Alineación de las secuencias.

## 4. Matriz de Penalización (Opcional):

- Si se selecciona la opción de matriz de penalización, la herramienta mostrará la matriz utilizada para el cálculo de la alineación.

## Resumen:

### Entrada:

- El usuario proporciona dos secuencias de nucleótidos o ADN para comparación.

### Proceso:

- El software analiza las secuencias, permitiendo al usuario elegir entre alineación local o global.
- Se pueden ajustar parámetros opcionales, como el porcentaje de coincidencia, no coincidencia y una matriz de penalización personalizada.

### Salidas:

- Porcentaje de coincidencia entre las secuencias.
- Porcentaje de no coincidencia.
- La alineación visual de las secuencias.
- Opcional: Visualización de la matriz de penalización utilizada en el cálculo de la alineación.

## Función 7. BLAST

La función BLAST facilita al usuario la exploración de la base de datos de NCBI con el objetivo de identificar secuencias similares a la secuencia proporcionada. Para iniciar el análisis, el usuario simplemente ingresa la secuencia de nucleótidos, proteínas o genes que desea estudiar. BLAST llevará a cabo una búsqueda en la base de datos de NCBI, identificando y presentando una lista de secuencias que comparten similitudes con la proporcionada por el usuario. Este conjunto de resultados ofrece una visión amplia y detallada de las posibles correspondencias en la base de datos de NCBI.

## Resumen

### Entrada:

- El usuario proporciona una secuencia de nucleótidos, proteínas o genes.

### Proceso:

- BLAST realiza una búsqueda en la base de datos de NCBI para identificar secuencias similares.

### Salidas:

- BLAST presenta una lista de secuencias encontradas en la base de datos de NCBI que comparten similitudes con la secuencia proporcionada por el usuario.

## Función 8. Visor de PDBs

El Visor de PDBs es una herramienta que permite al usuario explorar y visualizar archivos en formato PDB (Protein Data Bank). A continuación, se describe el funcionamiento:

### 1. Carga de Archivo PDB:

- El usuario debe cargar un archivo en formato PDB para comenzar la visualización. Este archivo contendrá información detallada sobre la estructura tridimensional.

### 2. Configuración de Visualización:

- Una vez cargado el archivo se puede visualizar una estructura tridimensional. El Visor de PDBs ofrece varias opciones para personalizar la visualización, incluyendo:
  - Visualización por líneas, cruces, esferas o puntos.
  - Control de enredamiento para facilitar la interpretación de estructuras complejas.
  - Etiquetado de átomos para identificación rápida.
  - Cambio de colores para resaltar diferentes componentes de la estructura.

### 3. Exploración y Navegación:

- El usuario puede explorar la estructura tridimensional cargada, ampliando, rotando y desplazándose para obtener una comprensión completa de la disposición espacial de los elementos.

## Resumen

### Entrada:

- El usuario carga un archivo en formato PDB.

### Proceso:

- Una vez cargado el archivo, el Visor de PDBs permite visualizar la estructura tridimensional.
- Se proporcionan opciones de personalización para la visualización, como la elección entre líneas, cruces, esferas o puntos.
- Ofrece herramientas para el control de enredamiento, etiquetado de átomos y cambio de colores para mejorar la interpretación de estructuras complejas.

### Salidas:

- El usuario puede explorar la estructura tridimensional cargada mediante acciones como ampliar, rotar y desplazar.

## Función 9. Análisis de PDBs

En esta función se proporciona una evaluación detallada de la información contenida en un archivo PDB (Protein Data Bank). El usuario debe cargar un archivo PDB, una vez cargado la herramienta mostrara diferentes aspectos de la estructura ingresada, entre los aspectos claves son datos generales, información bibliográfica, composición de estructuras, residuos faltantes, información adicional, propiedades físicas, átomos específicos y heteroatomos.

## Resumen

### Entrada:

- El usuario carga un archivo PDB.

### Proceso:

- La herramienta realiza una evaluación detallada de varios aspectos de la estructura ingresada.

### Salidas:

- **Datos Generales:**
  - Nombre de la estructura.
  - Fecha de depósito.
  - Fecha de lanzamiento.
  - Resolución de la estructura en Ångströms.
- **Información Bibliográfica:**
  - Palabras clave de la estructura.



- Método de determinación de la estructura.
- Referencia de la estructura.
- Referencia al journal donde se publicó.
- Autores.
- **Composición de la Estructura:**
  - Compuesto químico.
  - Origen de la estructura.
- **Residuos Faltantes:**
  - Presencia de residuos faltantes (booleano).
  - Lista de residuos faltantes.
- **Información Adicional:**
  - Información de glicosilación.
  - Lista de modelos presentes.
  - Lista de cadenas.
  - Lista de residuos.
  - Nombre y coordenadas de los átomos.
- **Propiedades Físicas:**
  - B-factor.
  - Distribución de elementos.
  - Distribución de átomos.
- **Átomos Específicos:**
  - Información detallada sobre los átomos, incluyendo su nombre y coordenadas.
- **Heteroátomos:**
  - Distribución de los heteroátomos en la estructura.

## Función 10. Árboles filogenéticos

La función de Árboles Filogenéticos permite a los usuarios analizar y visualizar las relaciones evolutivas entre secuencias biológicas utilizando archivos en formato Clustal.

El usuario cargar el archivo y la herramienta realiza un cálculo de distancias entre estas secuencias, generando una matriz que refleja las diferencias evolutivas. También muestra un árbol filogenético.

### Resumen

**Entrada:**

- El usuario carga un archivo en formato Clustal.

**Proceso:**

- La herramienta realiza un cálculo de distancias entre las secuencias cargadas, generando una matriz que refleja las diferencias evolutivas.

**Salidas:**

- La herramienta presenta un árbol filogenético.

## Función 11. Análisis de MOTIFS

Esta función facilita el análisis detallado de secuencias de ADN y la comprensión de este tipo de secuencias sobre la función biológica, ayuda a la identificación de la secuencia de nucleótidos más común en un conjunto de secuencias de MOTIFS relacionadas. Esto puede ser útil para identificar regiones conservadas en promotores u otras regiones.

### Resumen

**Entrada:**

- El usuario carga una secuencia de MOTIFS para el análisis.

**Proceso:**

- La herramienta realiza su análisis.

**Salidas:**

- Consenso.
- Consenso degenerado.
- Reversa Complementaria.
- Consenso de la reversa complementaria.

## Función 12. Expresiones Regulares

En el contexto genómico y proteómico, las expresiones regulares son herramientas poderosas que permiten realizar búsquedas y análisis en secuencias de ADN, ARN y proteínas.

Esto permite la búsqueda de MOTIFS en el ADN para identificar sitios de unión a factores de transcripción, elementos reguladores, entre otros. Otra aplicación que se puede dar es la identificación de sitios de fosforilación, glicosilación, entre otros.

### Resumen

**Entrada:**

- El usuario escribe una expresión regular a buscar ya sea a nivel genómico u proteómico.

**Proceso:**

- La herramienta realiza la búsqueda de la expresión regular en la secuencia.

**Salidas:**

- Lista de organismos, secuencias e identificadores de los coincidentes.
- Número de coincidencias dentro de la secuencia.

## Sobre Expresiones Regulares

Para hacer coincidir una sola "a" seguida de cero o más "b" seguidas de "c", usaría el patrón `/ab*c/`: el `*` después de "b" significa "0 o más ocurrencias del elemento anterior." En la cadena "cbbabbbbbcdebc", este patrón coincidirá con la subcadena "abbbbc".

Si necesita usar cualquiera de los caracteres especiales literalmente (en realidad, buscando un `"*"`, por ejemplo), debe escaparlos colocando una barra invertida delante de él. Por ejemplo, para buscar "a" seguido de `"*"` seguido de "b", usaría `/a\b/` — la barra invertida "escapa" del `"*"`, haciéndolo literal en lugar de especial.

Para obtener más información acerca de las expresiones regulares, consulte:

<https://docs.python.org/3/library/re.html>

Solo recuerda que no tienes que escribir `/` al principio y al final, solo coloca los aminoácidos que deseas buscar.

|    |                     |                                                                                         |
|----|---------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| 1  | Characters          |                                                                                         |
| 2  | <code>x</code>      | The character <code>x</code>                                                            |
| 3  | <code>\\</code>     | The backslash character                                                                 |
| 4  | <code>\0n</code>    | The character with octal value <code>0n</code> ( $0 \leq n \leq 7$ )                    |
| 5  | <code>\0nn</code>   | The character with octal value <code>0nn</code> ( $0 \leq n \leq 7$ )                   |
| 6  | <code>\0mnn</code>  | The character with octal value <code>0mnn</code> ( $0 \leq m \leq 3, 0 \leq n \leq 7$ ) |
| 7  | <code>\xhh</code>   | The character with hexadecimal value <code>0xhh</code>                                  |
| 8  | <code>\uhhhh</code> | The character with hexadecimal value <code>0xhhhh</code>                                |
| 9  | <code>\t</code>     | The tab character ( <code>'\u0009'</code> )                                             |
| 10 | <code>\n</code>     | The newline (line feed) character ( <code>'\u000A'</code> )                             |
| 11 | <code>\r</code>     | The carriage-return character ( <code>'\u000D'</code> )                                 |
| 12 | <code>\f</code>     | The form-feed character ( <code>'\u000C'</code> )                                       |
| 13 | <code>\a</code>     | The alert (bell) character ( <code>'\u0007'</code> )                                    |
| 14 | <code>\e</code>     | The escape character ( <code>'\u001B'</code> )                                          |

```

15 \cx The control character corresponding to x
16
17 Character classes
18 [abc] a, b, or c (simple class)
19 [^abc] Any character except a, b, or c (negation)
20 [a-zA-Z] a through z or A through Z, inclusive (range)
21 [a-d[m-p]] a through d, or m through p: [a-dm-p] (union)
22 [a-z&&[def]] d, e, or f (intersection)
23 [a-z&&[^bc]] a through z, except for b and c: [ad-z]
 (subtraction)
24 [a-z&&[^m-p]] a through z, and not m through p: [a-lq-z]
 (subtraction)
25
26 Predefined character classes
27 . Any character (may or may not match line terminators)
28 \d A digit: [0-9]
29 \D A non-digit: [^0-9]
30 \s A whitespace character: [\t\n\x0B\f\r]
31 \S A non-whitespace character: [^\s]
32 \w A word character: [a-zA-Z_0-9]
33 \W A non-word character: [^\w]
34 Boundary matchers
35 ^ The beginning of a line
36 $ The end of a line
37 \b A word boundary
38 \B A non-word boundary
39 \A The beginning of the input
40 \G The end of the previous match
41 \Z The end of the input but for the final terminator, if any
42 \z The end of the input
43
44 Greedy quantifiers
45 X? X, once or not at all
46 X* X, zero or more times
47 X+ X, one or more times
48 X{n} X, exactly n times
49 X{n,} X, at least n times
50 X{n,m} X, at least n but not more than m times
51
52 Reluctant quantifiers

```

|    |                        |                                         |
|----|------------------------|-----------------------------------------|
| 53 | X??                    | X, once or not at all                   |
| 54 | X*?                    | X, zero or more times                   |
| 55 | X+?                    | X, one or more times                    |
| 56 | X{n}?                  | X, exactly n times                      |
| 57 | X{n,}?                 | X, at least n times                     |
| 58 | X{n,m}?                | X, at least n but not more than m times |
| 59 |                        |                                         |
| 60 | Possessive quantifiers |                                         |
| 61 | X?+                    | X, once or not at all                   |
| 62 | X*+                    | X, zero or more times                   |
| 63 | X++                    | X, one or more times                    |
| 64 | X{n}+                  | X, exactly n times                      |
| 65 | X{n,}+                 | X, at least n times                     |
| 66 | X{n,m}+                | X, at least n but not more than m times |
| 67 |                        |                                         |
| 68 | Logical operators      |                                         |
| 69 | XY                     | X followed by Y                         |
| 70 | X Y                    | Either X or Y                           |

## Guía de uso 🐤

Antes de ejecutar la aplicación asegurate de cumplir con pasos previos y requisitos para ejecutar el software, así mismo, define si vas a desplegar la aplicación en tu computadora local o si vas a ejecutarlo desde un servidor externo o un servidor local.

Nota: Recuerda considerar las observaciones definidas para el sistema operativo: MAC OS.

Para detener la aplicación presiona Ctrl+C en la consola que hayas abierto.

Es importante ver la salida de cada consola por que esta indicara si hay algún problema en la ejecución de la aplicación.

Nota: Si quieres desplegar la aplicación en un servidor tienes que editar el archivo settings ubicado en: `/biosuite/settings.py`

Posteriormente editar la sección de DEVELOPMENT\_MODE y configurar parámetros acorde a tu configuración.

### Paso 1 - Descomprimir la aplicación

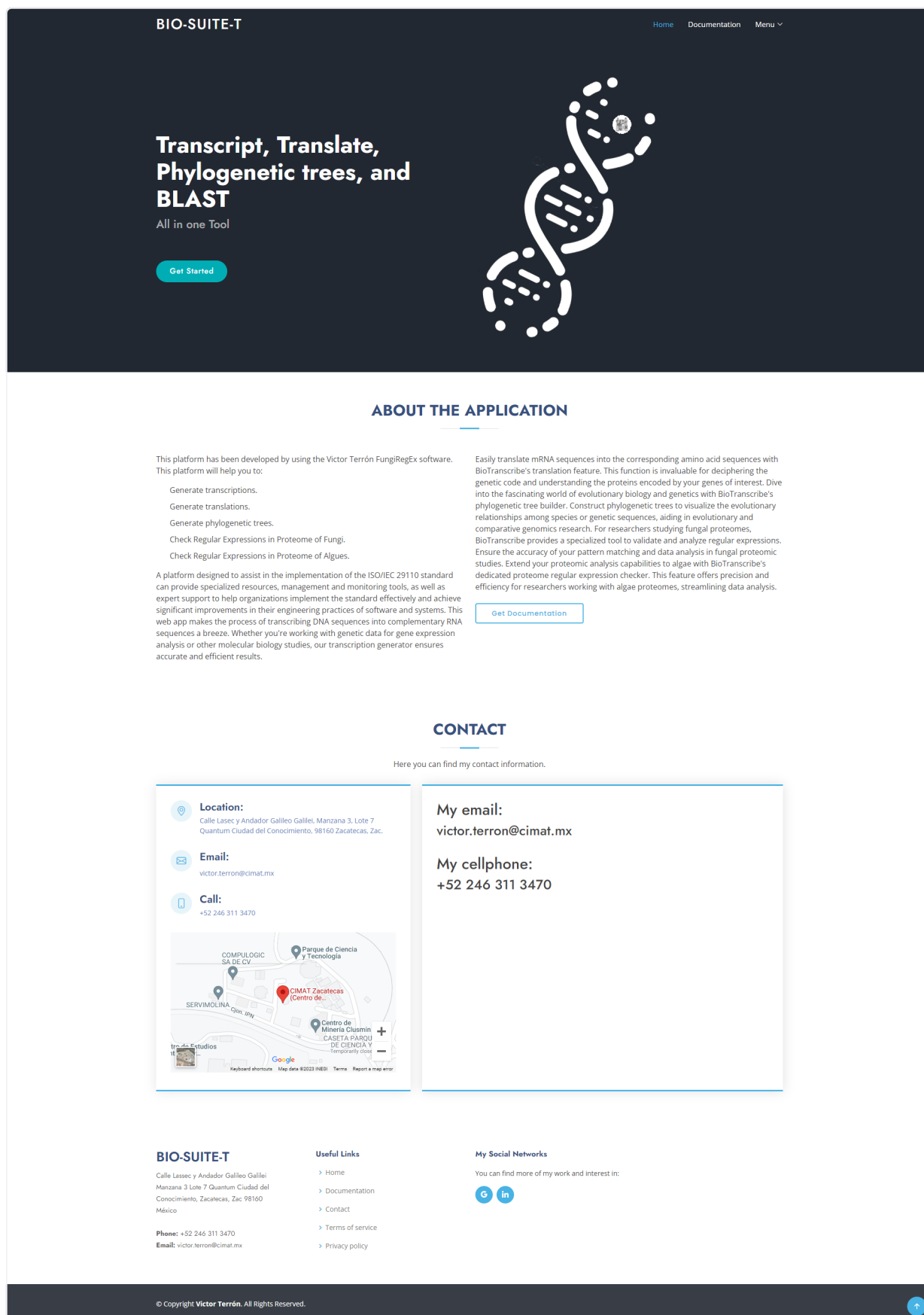
Paso 2 - Instalar requisitos de la aplicación

Paso 3 - Iniciar la aplicación

## **Paso 4 - Abre la aplicación**

Después de los pasos 1, 2 y 3 puedes ir a tu navegador, y en la barra de direcciones escribir 127.0.0.1:8000 o la dirección IP de tu servidor local o externo.

Posteriormente verás una pantalla como la siguiente.



Interfaz de usuario de la aplicación Bio-Suite-T.

Posteriormente debes dar click en Menú > Login. E ingresar por cuenta social. Es requisito que para ingresar entres desde una cuenta de Google, sin embargo, se aclara que sus datos están

protegidos conforme a la normatividad aplicable vigente. Así mismo los datos de cada usuario son responsabilidad unicamente del usuario ya que al liberarle la copia del software el usuario acepta que sus datos son unicamente de su responsabilidad, eximiendoo a los autores del software de cualquier daño, perdida o robo de información sensible. Los datos que se recolectan son: Nombre y UID, entre otros.

## Paso 4 - Usa alguno de los módulos de la aplicación

Al entrar desde tu cuenta lograrás ver el tablero de la aplicación, del cuál, podrás entrar a cualquiera de los módulos previamente descritos en la sección de Funciones.

BIO-SUITE-T

[Home](#)
[Documentation](#)
[Menu](#)

Dashboard

Welcome, Victor Miguel Terrón Macías.

Analyze and get Properties of a DNA.

Analyse and get properties of Proteome.

Transcription (Nucleotide to mRNA).

Back Transcription (mRNA to DNA).

Translation (mRNA/DNA to Proteins).

Pairwise Sequence Aligner.

Blast Tool.

PDB viewer.

PDB analysis.

Phylogenetic Trees.

MOTIFS.

FungiRegEx Module.

FUNGI Proteome Database.

FUNGI Genome Database.

ALGAL Proteome Database.

Algal Genome Database.

Tablero de la aplicación Bio-Suite-T



## Preguntas frecuentes 🙋

Responde y documenta preguntas frecuentes aquí:

### Enfoque

Esta aplicación se enfoca en el análisis de secuencias en diferentes niveles.

### Preguntas, consultas y soporte

Para cualquier duda relacionada con el uso del software por favor contactarme por los siguientes medios:

✉ [victor.terron@ciamat.mx](mailto:victor.terron@ciamat.mx)

### Soporte 💬

Para recibir soporte o consulta sobre el uso del software contactame en el siguiente correo:

- ✉ [victor.terron@ciamat.mx](mailto:victor.terron@ciamat.mx)
-

