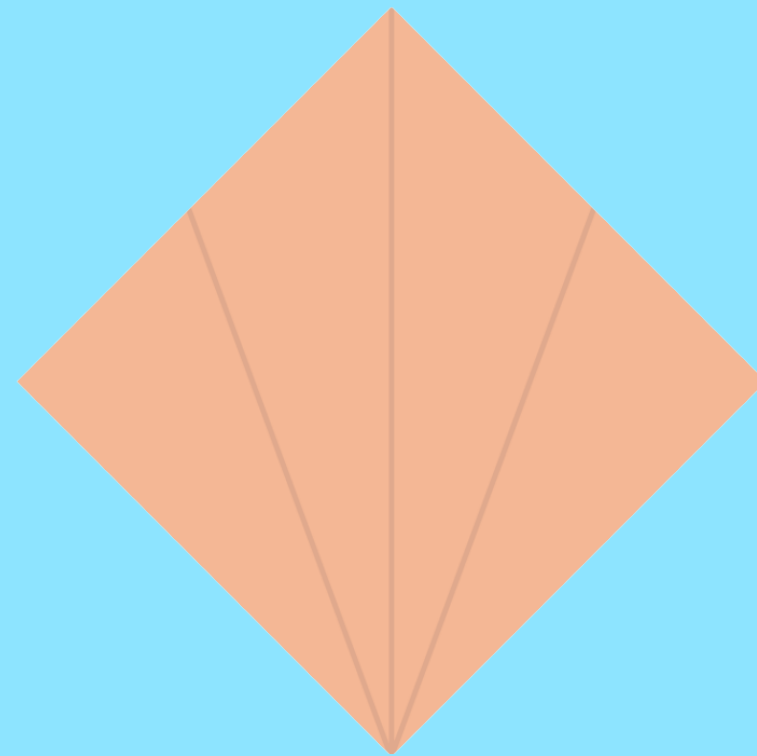
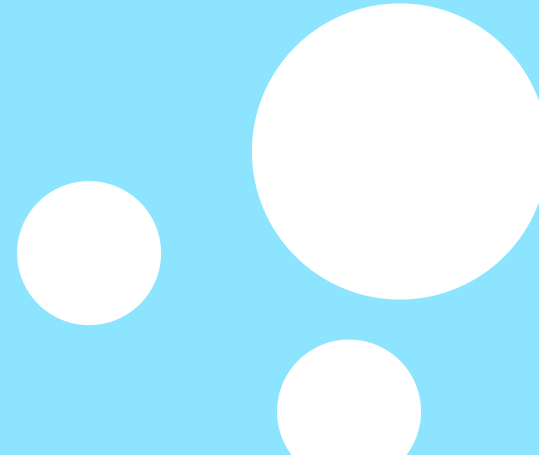
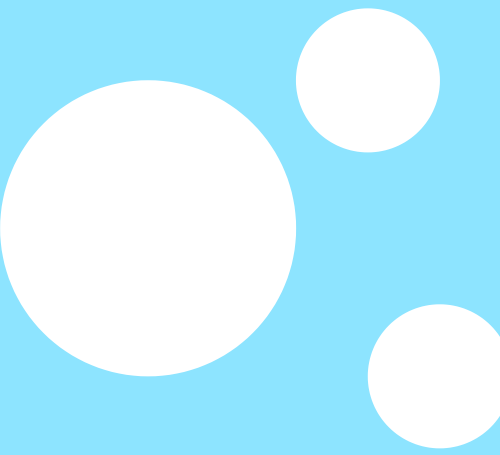


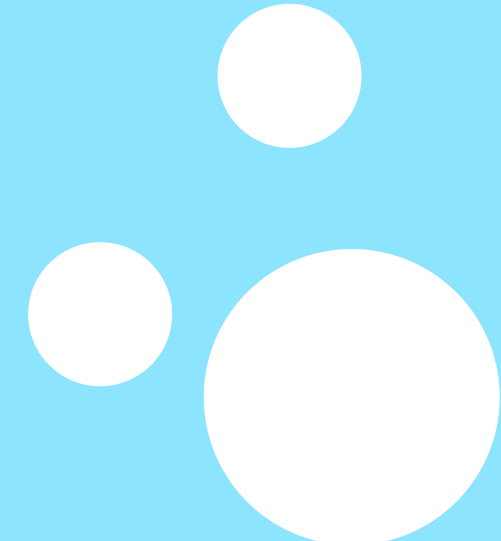
# Sitios de plegamiento co-traducciona





¿Que es el plegamiento cotraduccional?

¿Que son los intermediarios de plegamiento  
cotraduccional?



# Sitio relevante en la cotraduccion

- Alto grado de conservación de codones raros lentos
- Que los codones tengan una baja probabilidad de aparecer en un modelo neutral
- Debe haber equilibrio en la energia libre del intercambio de plegamiento
- Que la tasa de plegamiento sea rápida en relación con la tasa de elongación de la proteína.

# Workflow

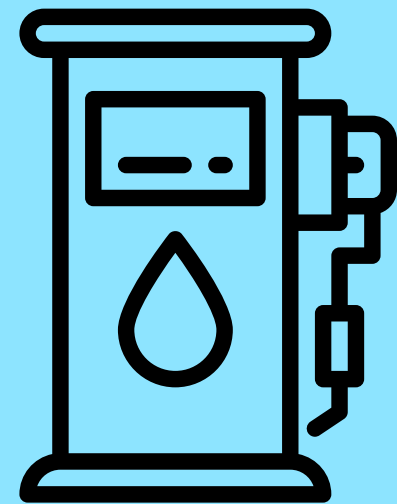
## Extracción



**ProtList.py**

Generar una lista que contenga id de proteína y su id de familia

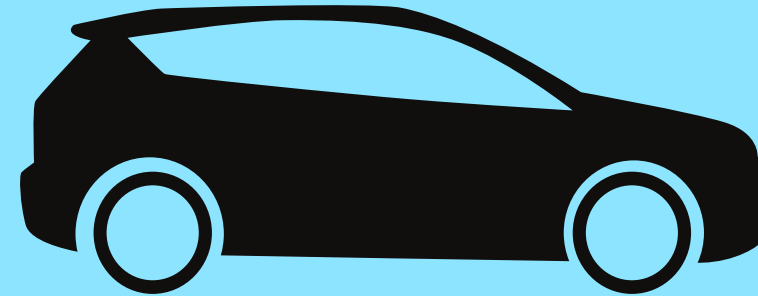
## Preparación



**aa-to-nt.py**  
**GetPDBs.py**

Fastas de secuencia de nucleotidos y PDBs de las proteínas

## Ejecución



**MinMax.py**  
**ASaknovih.sh**

Detección de codones raros y cambios de energía

## Descubrimiento



**MEFiles.sh**  
**CoTransSites.py**

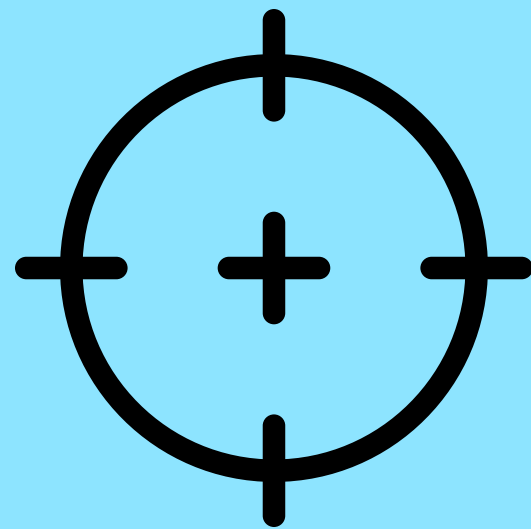
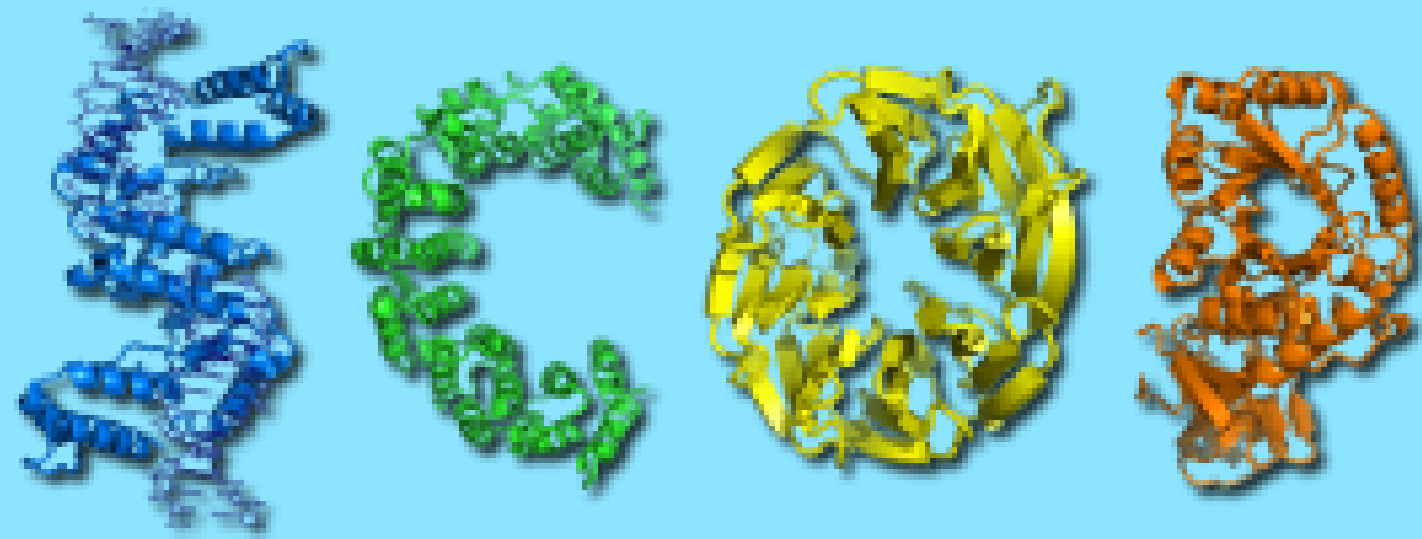
Ubicación de sobrelapes entre codones raros y cambios de energía

# Extracción

# ProtList.py

## Ejecución

```
python3 ProtList.py -i ./documents -o ./documents
```



## Salida

d1ux8a\_ a.1.1.1

d1dlwa\_ a.1.1.1

d1dlya\_ a.1.1.1

d2gkma\_ a.1.1.1

d2qrwa\_ a.1.1.1

# Preparación

# aa-to-nt.py

## Ejecución

```
python3 aa_to_nt-copia.py --  
  inputPath ../Documents --  
  outputPath ../Documents --  
  listNameFile ScopeList.txt --  
  cut FALSE
```

## Salida



# GetPDBs.py

## Ejecución

```
python3 GetPDBs -i  
./descargas -o ./PDBs
```

## Salida

A screenshot of a file explorer window showing a list of files. The files are: '3hsy.pdb.gz', '8abp.pdb.gz', '1dp4.pdb.gz', '1jye.pdb.gz', '4zjp.pdb.gz', and '1byk.pdb.gz'. Each file has a small icon to its left, which appears to be a document or folder icon.

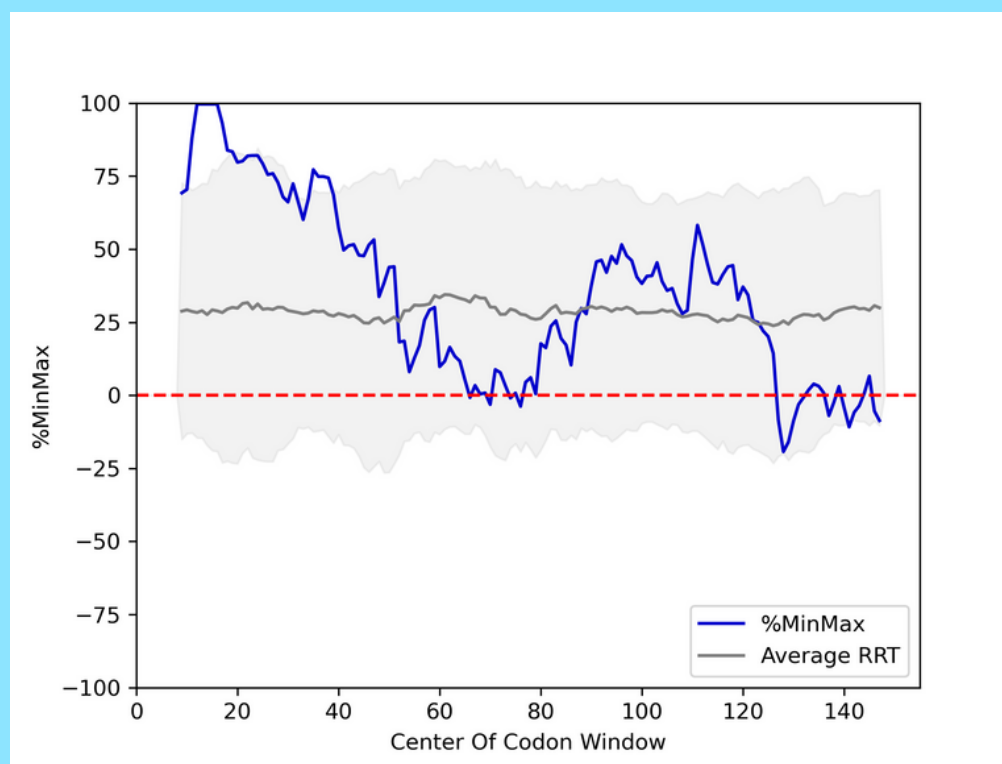


# Ejecución

# MinMax.py

## Ejecución

```
python3  
MinMax_modified.py --  
inputFolderPath  
..\descargas --  
outputPath .
```

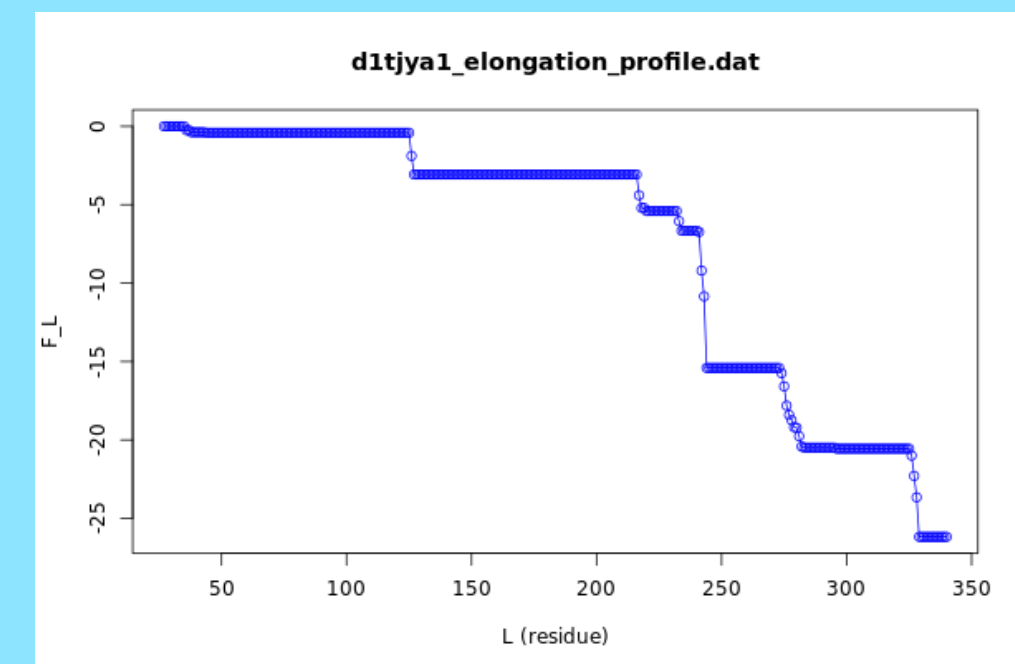


# ASaknovich.sh

## Ejecución

```
AutomaticSaknovich.sh
```

## Salida

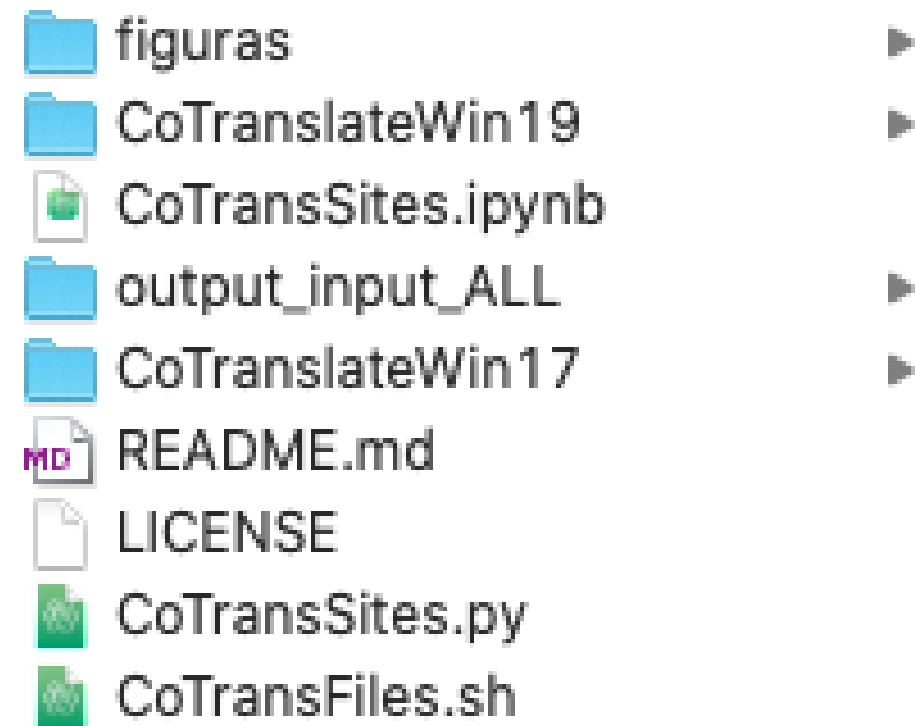


# Descubrimiento

# MEFiles.sh

## Ejecución

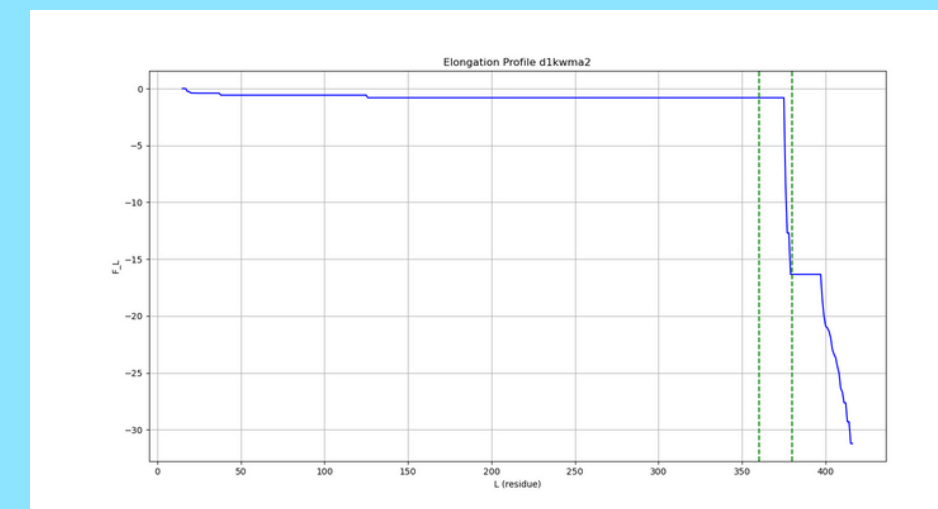
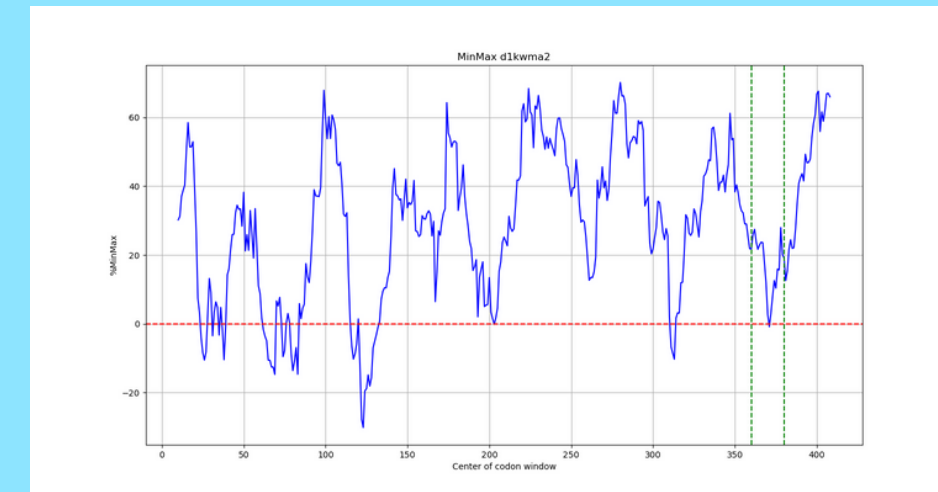
```
./CoTransFiles.sh  
./output_input_ALL  
./figuras ./CoTranslate  
./CoTransSites.py
```



# CoTransSites.py

## Ejecución

```
python3 ./CoTransSites.py -E  
./output_input_ALL -M ./figuras -O  
./CoTrans
```



# Complicaciones

**aa-to-nt.py**

utiliza selenium y ademas de que es lento, no se puede  
correr en la maquina virtual

**AutomaticSaknovich.sh**

Es excesivamente lento

# aa-to-nt.py

Carpetas  
descarga y error



Abrir navegador  
con chrome driver



Ubicar los  
botones a  
presionar



Clickear  
automaticamente  
los botones

## Paginas visitadas

- <https://scop.berkeley.edu/>
- <https://ebi.ac.uk>
- <https://uniprot.org>

# AutomaticSaknovich.sh

El programa fundamentalmente se encarga de llamar estos scripts de python:

calc\_consensus\_contacts.py → calc\_absolute\_energies.py → calc\_elongation.py



Modela el pregamiento  
cotraduccional  
formando los contactos  
nativos de los primeros  
codones



Calcula la energia  
libre mínima de la  
cadena naciente en  
relación con un conjunto  
desplegado



Indica los sitios probables  
donde la formación de la  
estructura nativa se ha  
hecho de manera  
discontinua durante la  
elongación