

Tarea I: FoldIt

Citlali Gil Aguillon.

Jessica Danielly Medina Sánchez.

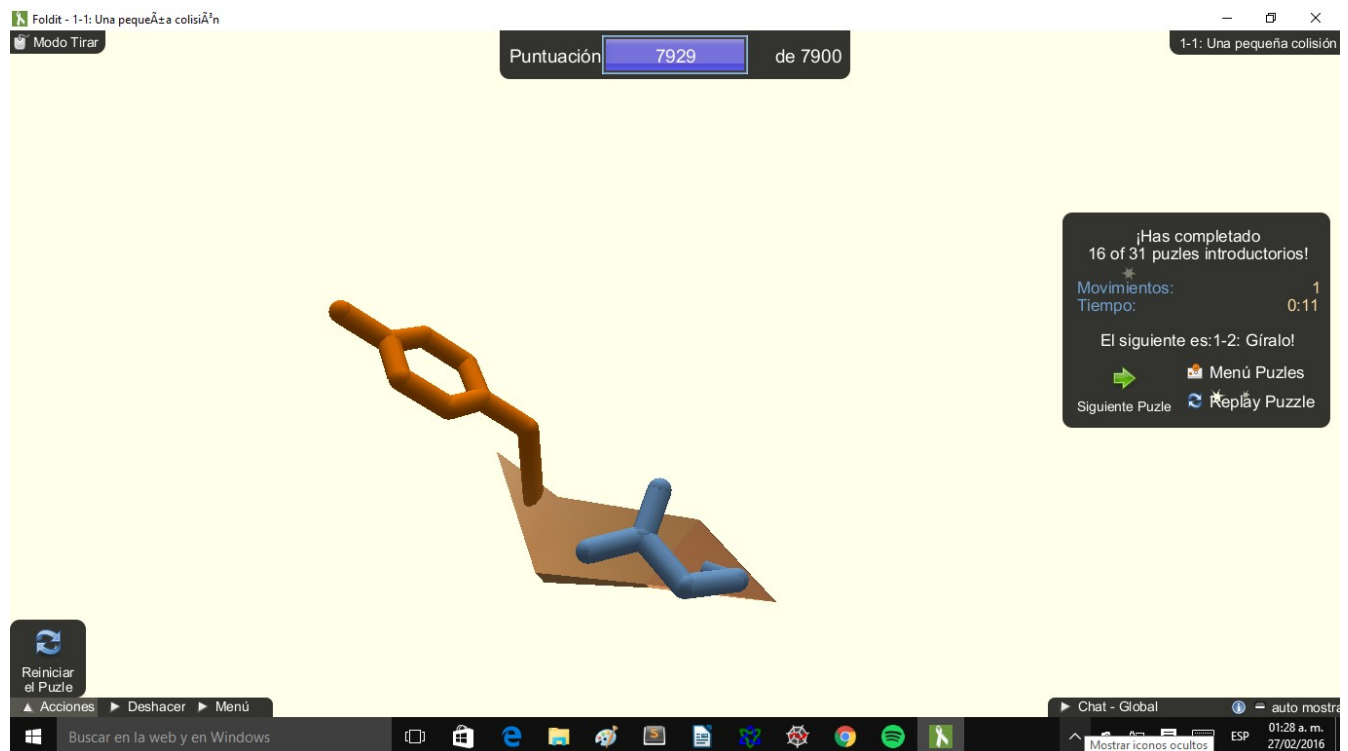
Anali Migueles Lozano.

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/anamigueeles/Bioinformatica/>

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:

1-1



1-2

Foldit - 1-2: GÃ-ralo

Modo Tirar

Puntuación 7918 de 7900

1-2: Gíralo

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 2
Tiempo: 0:12

El siguiente es: 1-3: ¡Sacude!

➡ Menú Puzles

➡ Siguiendo Puzle ➡ Replay Puzzle

Reiniciar el Puzle

Acciones ▶ Deshacer ▶ Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global

01:29 a. m. 27/02/2016

1-3

Foldit - 1-3: ¡Sacude!

Modo Tirar

Puntuación 8083 de 8000

1-3: ¡Sacude!

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 1
Tiempo: 0:29

El siguiente es: 2-1: Colisión del Esqueleto!

➡ Menú Puzles

➡ Siguiendo Puzle ➡ Replay Puzzle

Sacudir Reiniciar el Puzle

Acciones ▶ Deshacer ▶ Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global

01:30 a. m. 27/02/2016

2-1

Foldit - 2-1: Colisión del Esqueleto

Modo Tirar

Puntuación 7420 de 7340

2-1: Colisión del Esqueleto

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 1
Tiempo: 0:09

El siguiente es: 2-2: Cerrar el Hueco!

Menú Puzles
Replay Puzzle

Sacudir Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Chat - Global

01:32 a. m. 27/02/2016

2-2

Foldit - 2-2: Cerrar el Hueco

Modo Tirar

Puntuación 8636 de 8575

2-2: Cerrar el Hueco

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 8
Tiempo: 0:49

El siguiente es: 2-3: ¡Menea!

Menú Puzles
Replay Puzzle

Sacudir Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Chat - Global

01:34 a. m. 27/02/2016

2-3

Foldit - 2-3: ¡Menealo!

Modo Tirar

Puntuación 8704 de 8600

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: *
Tiempo: 0:59

El siguiente es: 3-1: Láminas Juntas!

Siguiente Puzle Menú Puzles Replay Puzzle

Sacudir Menear Todo Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global auto mostr...
01:36 a. m.
27/02/2016

3-1

Foldit - 3-1: Láminas Juntas

Modo Tirar

Puntuación 8049 de 8020

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 3
Tiempo: 1:02

El siguiente es: 3-2: Láminas Solitarias!

Siguiente Puzle Menú Puzles Replay Puzzle

Sacudir Menear Todo Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global auto mostr...
01:39 a. m.
27/02/2016

3-2

Foldit - 3-2: Láminas Solitarias

Modo Tirar

Puntuación 8419 de 8410

3-2: Láminas Solitarias

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 1
Tiempo: 1:00

El siguiente es: 3-3: Láminas y Escaleras!

Siguiente Puzle Menú Puzles Replay Puzzle

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global Teclado táctil auto mostr 01:42 a. m. 27/02/2016

3-3

Foldit - 3-3: Láminas y Escaleras

Modo Tirar

Puntuación 8287 de 8250

3-3: Láminas y Escaleras

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 11
Tiempo: 3:20

El siguiente es: 3-4: Cerrar y Bajar!

Siguiente Puzle Menú Puzles Replay Puzzle

Menú de Puzles Opciones Generales Guardar/Abrir/Compartir Guardar y Salir

Acciones Deshacer Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global auto mostr 12:42 a. m. 27/02/2016

3-4

Foldit - 3-4: Cerrar y Bajar

Modo Tirar

Puntuación **9506** de 9500

3-4: Cerrar y Bajar

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 4
Tiempo: 2:46

El siguiente es: 3-5: Reconstruir!

➡ Menú Puzles
Siguiente Puzle Replay Puzle

Menú de Puzles Opciones Generales Guardar/Abrir/Compartir Guardar y Salir

Acciones Deshacer Menú

Chat - Global

12:47 a. m. 27/02/2016

3-5

Foldit - 3-5: Reconstruir

Modo Tirar

Puntuación **9168** de 9050

3-5: Reconstruir

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 3
Tiempo: 2:38

El siguiente es: 4-1: Esconde lo Hidrofóbico!

➡ Menú Puzles
Siguiente Puzle Replay Puzle

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Chat - Global

12:51 a. m. 27/02/2016

4-1

Foldit - 4-1: Esconde lo Hidrofóbico

Modo Tirar

Puntuación **7848** de 7847

4-1: Esconde lo Hidrofóbico

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 2
Tiempo: 1:47

El siguiente es: 4-2: Dale la Vuelta!

➡ Menú Puzles
➡ Siguiente Puzle
➡ Replay Puzzle

Reiniciar el Puzle

Acciones ▶ Deshacer ▶ Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global

12:54 a. m.
27/02/2016

4-2

Foldit - 4-2: Dale la Vuelta

Modo Tirar

Puntuación **9042** de 9020

4-2: Dale la Vuelta

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 7
Tiempo: 3:38

El siguiente es: 4-3: Dando la vuelta a las Láminas!

➡ Menú Puzles
➡ Siguiente Puzle
➡ Replay Puzzle

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones ▶ Deshacer ▶ Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global

01:01 a. m.
27/02/2016

4-3

Foldit - 4-3: Dando la vuelta a las Láminas

Modo Tirar

Puntuación **8375** de 8200

4-3: Dando la vuelta a las Láminas

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: ★★ 3
Tiempo: 1:52

El siguiente es: 4-4: La Rotación Correcta!

➡ Siguiente Puzle

📁 Menú Puzles

🔄 Replay Puzzle

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Chat - Global

01:07 a. m. 27/02/2016

4-4

Foldit - 4-4: La Rotación Correcta

Modo Tirar

Puntuación **8814** de 8780

4-4: La Rotación Correcta

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: ★ 7
Tiempo: 2:34

El siguiente es: 4-5: Modo Estructural!

➡ Siguiente Puzle

📁 Menú Puzles

🔄 Replay Puzzle

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Chat - Global

01:11 a. m. 27/02/2016

4-5

Foldit - 4-5: Modo Estructura

Modo Tirar

Puntuación 8103 de 8100

4-5: Modo Estructura

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 4
Tiempo: 2:48

El siguiente es: 5-1: Búsqueda de la Nativa!

Siguiente Puzle Menú Puzles Replay Puzle

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Modos Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global

01:23 a. m. 27/02/2016

2.2) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral chica.

Foldit - 2-1: Colisión del Esqueleto

Modo Tirar

Puntuación 7420 de 7340

2-1: Colisión del Esqueleto

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 1
Tiempo: 0:09

El siguiente es: 2-2: Cerrar el Huevo!

Siguiente Puzle Menú Puzles Replay Puzle

Sacudir Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global

01:32 a. m. 27/02/2016

2.1) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral aromática

Foldit - 3-3: Láminas y Escaleras

Modo Tirar

Puntuación: 8287 de 8250

3-3: Láminas y Escaleras

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 11
Tiempo: 3:20

El siguiente es: 3-4: Cerrar y Bajar!

➡ Menú Puzles
Siguiente Puzle Replay Puzzle

Menú de Puzles Opciones Generales Guardar Abrir/Compartir Guardar y Salir

Acciones Deshacer Menú

Buscar en la web y en Windows

Chat - Global

12:42 a. m. 27/02/2016

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?

Foldit - 4-2: Dale la Vuelta

Modo Tirar

Puntuación: 9042 de 9020

4-2: Dale la Vuelta

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

Movimientos: 7
Tiempo: 3:38

El siguiente es: 4-3: Dando la vuelta a las Láminas!

➡ Menú Puzles
Siguiente Puzle Replay Puzzle

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

Buscar en la web y en Windows

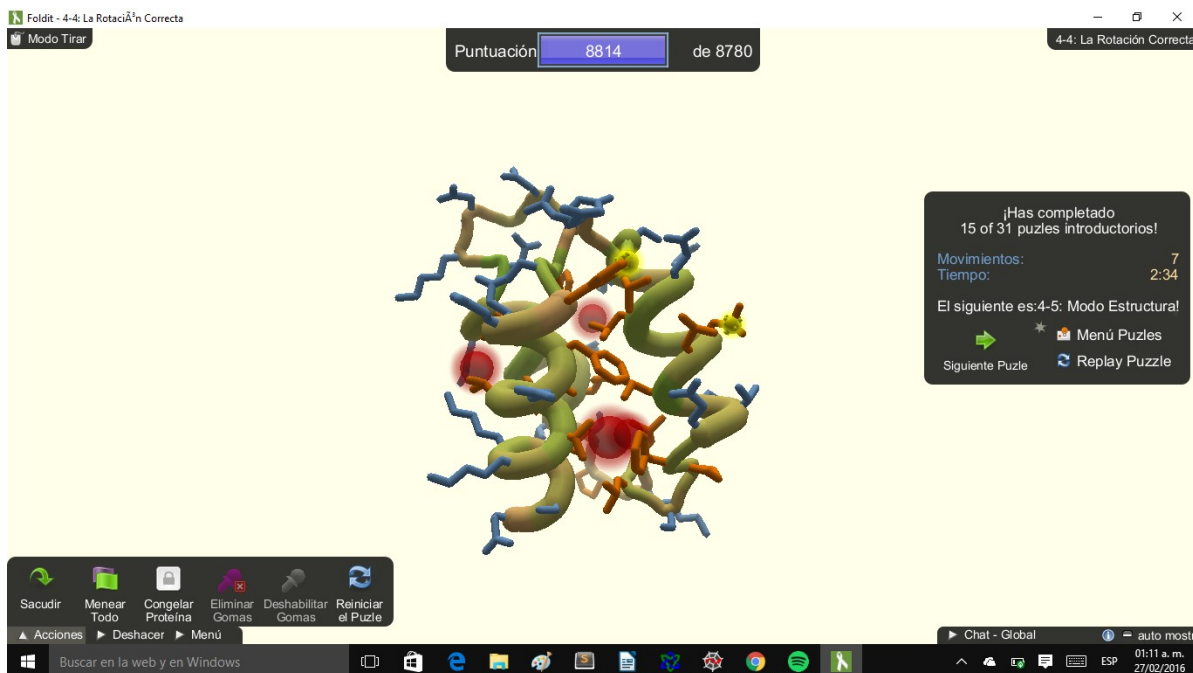
Chat - Global

01:01 a. m. 27/02/2016

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?



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.

Foldit - 4-2: Dale la Vuelta

Modo Tirar

Puntuación **9038** de 9020

4-2: Dale la Vuelta

After stopping the Tweak, shake and wiggle.
¡Eso es todo!

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

¡Has completado 16 of 31 puzles introductorios!

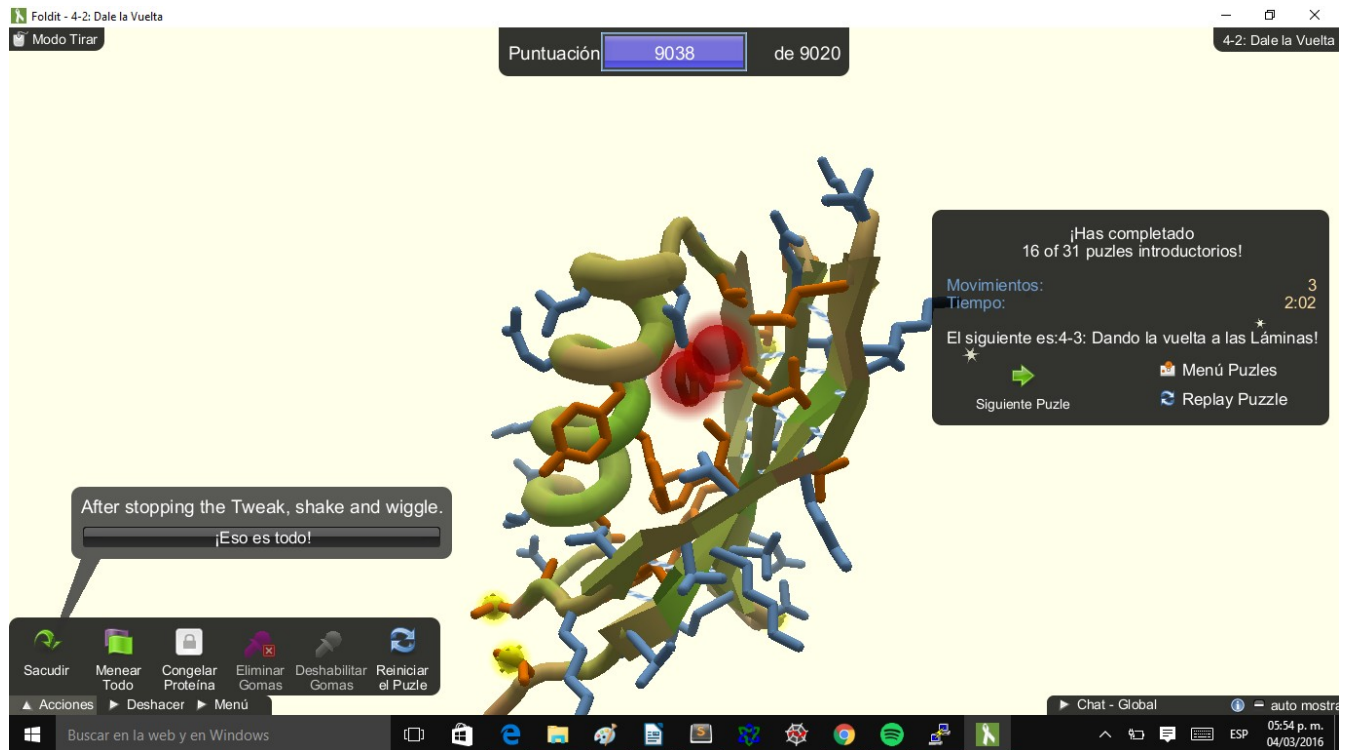
Movimientos: 3
Tiempo: 2:02

El siguiente es: 4-3: Dando la vuelta a las Láminas!

Menú Puzles
Replay Puzzle

Chat - Global

05:54 p. m.
04/03/2016



Foldit - 4-2: Dale la Vuelta

Modo Tirar

Puntuación **9042** de 9020

4-2: Dale la Vuelta

Sacudir Menear Todo Congelar Proteína Eliminar Gomas Deshabilitar Gomas Reiniciar el Puzle

Acciones Deshacer Menú

¡Has completado 15 of 31 puzles introductorios!

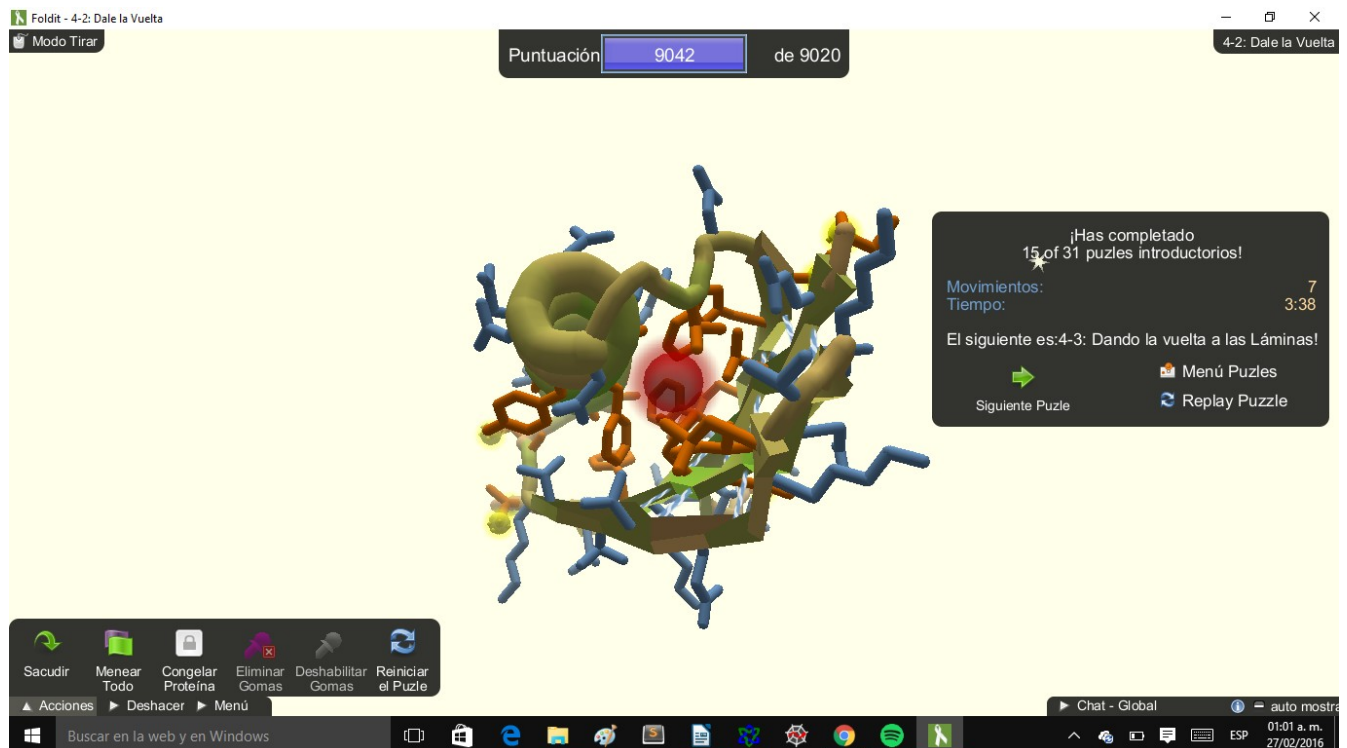
Movimientos: 7
Tiempo: 3:38

El siguiente es: 4-3: Dando la vuelta a las Láminas!

Menú Puzles
Replay Puzzle

Chat - Global

01:01 a. m.
27/02/2016



Aunque es la misma proteína y en ambos casos se alcanza el umbral esperado de estabilidad, podemos notar que las proteínas tienen conformaciones ligeramente distintas.

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.

Si tenemos 100 aminoácidos (ya que menos de cien aminoácidos no se considera proteína, se denominan polipéptidos) y si proponemos que cada aminoácido pudiese tomar 3 conformaciones distintas por decir algo porque realmente el aminoácido puede tomar muchas conformaciones distintas. Entonces el número de conformaciones que tendría la proteína sería 3^{100} . Pero debemos considerar el tiempo que tarda la proteína en cambiar de conformación para poder estimar el tiempo, en promedio el tiempo que le toma a un enlace girar para formar una nueva conformación es de aproximadamente. 10^{-15} segundos.

Entonces el tiempo calculado sería $3^{100} \times 10^{-15} \text{ s} = 5 \cdot 10^{32} \text{ s}$ ($1,6 \cdot 10^{25}$ años).