

SOFTWARE PARA IDENTIFICACIÓN DE ANOMALÍAS NO COMUNES EN LA
PROTEÍNA P53 Y CASOS DE HEPATOCARCINOMA CELULAR

MANUAL DE USUARIO

LUIS CARLOS TOVAR GARRIDO
JAVIER DAVID CASTILLO BELTRAN
DANIEL ANDRES OROZCO MENDEZ

UNIVERSIDAD DE CARTAGENA
FACULTAD DE INGENIERÍA
PROGRAMA DE INGENIERÍA DE SISTEMAS
CARTAGENA
2017

Contenido

1.	Introducción.....	3
2.	Requisitos del sistema.....	4
3.	Guía de instalación.....	5
4.	Manual de usuario de la aplicación.....	6
4.1	Lobby	6
4.2	Agregar archivo FASTA	6
4.3	Ver análisis de la mutación	8
4.4	Comparar resultados con otros estudios de p53	9
4.5	Modelo 3D de la proteína mutada	10
4.6	Funciones del modelo 3D.....	11
4.6.1	Seleccionar la mutación en el modelo 3D	11
4.6.2	Mover, acercar o alejar el modelo 3D	11
4.6.3	Activar y desactivar rotación automática	12
4.6.4	Exportar como imagen el modelo 3D	12
4.7	Archivos FASTA	13
4.9	Salir de la aplicación.....	15
5	Mantenimiento de la base de datos	15

1. Introducción

En este documento se describirá de forma clara y concisa como utilizar la aplicación **ClustalUDC**.

La aplicación **ClustalUDC**, fue desarrollada por estudiantes y profesores de la Universidad de Cartagena del programa ingeniería de sistema, con el fin de mejorar los estudios de mutaciones en la proteína p53.

Es de mucha importancia consultar este manual antes y/o durante el uso del software, teniendo en cuenta que lo guiará paso a paso en el manejo de la aplicación.

Con el fin de facilitar la comprensión del manual, se incluye gráficos explicativos.

2. Requisitos del sistema

Para el correcto funcionamiento del programa es necesario tener cubierto una serie de requisitos del software y hardware.

Los requerimientos del software para poder ejecutar el programa correctamente son:

- Computador con cualquier versión del sistema operativo Windows

Los requisitos del hardware para poder ejecutar el programa correctamente son:

- 100MB de espacio en el disco duro.
- Al menos 128mb de ram.

3. Guía de instalación

Pasos para la instalación del programa:

1. Ejecutar el archivo ClustalUDC_Instalador.exe
2. Seleccionar carpeta de instalación.
3. Una vez se instale la aplicación, se puede proceder a usar la misma.

4. Manual de usuario de la aplicación

4.1 Lobby

Esta interfaz cuenta con una región en la parte izquierda donde se encuentra la información de los archivos FASTA que se agreguen al software, una región en el centro donde muestra la estructura aminoacídica original de la proteína p53 y de las mutaciones que se agreguen al software, el logo de la Universidad de Cartagena con un botón de “más información” y un menú en la parte superior donde se puede acceder a las funcionalidades.

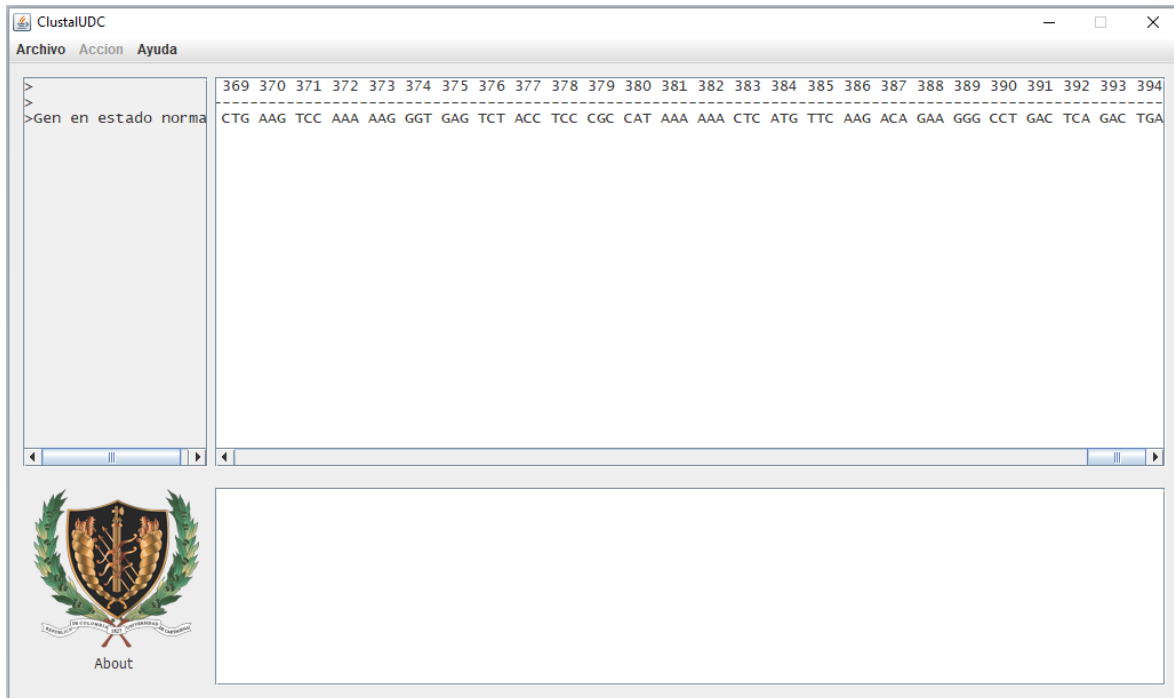



Figura 1: Interfaz lobby

Al presionar en “About”, se muestra un resumen del proyecto y del software.

4.2 Agregar archivo FASTA

Para buscar se deben seguir los siguientes pasos:

1. Se presiona en el menú de la parte superior, el botón Archivo -> Abrir.
2. Se selecciona el archivo en formato FASTA dependiendo su ubicación en carpeta. (figura 2)
3. Se presiona el botón .

Una vez seleccionado el archivo, el sistema redirige a la interfaz del lobby con cambios en la descripción y se habilitan las demás funcionalidades del software.

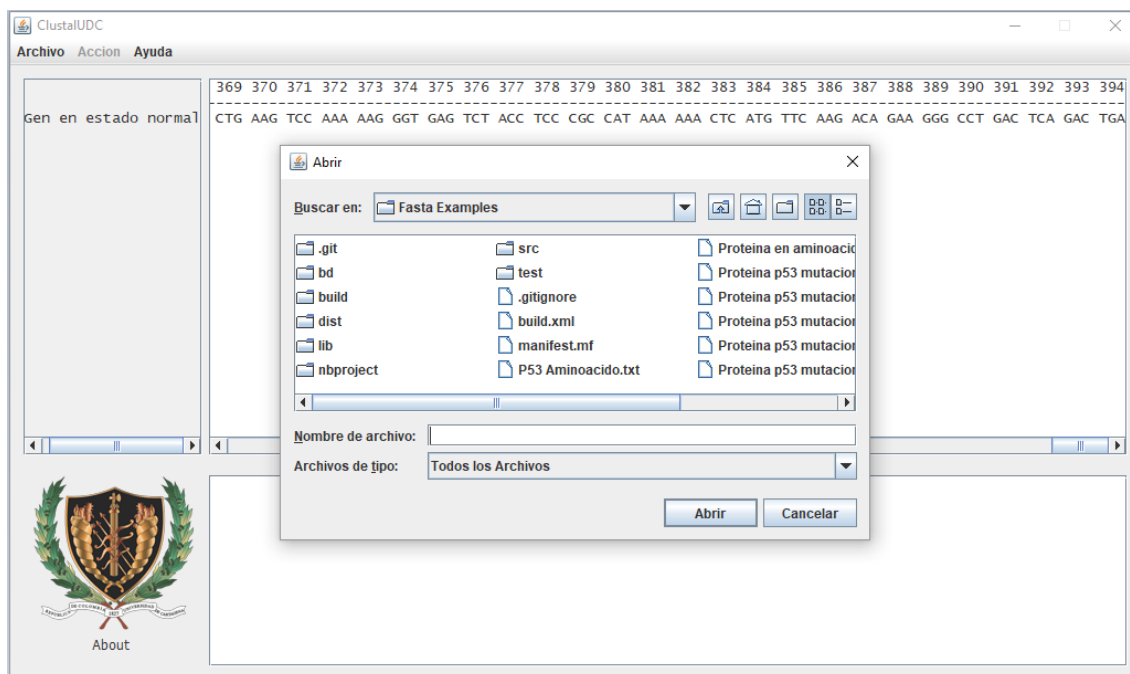


Figura 2: Agregar archivos FASTA.

En caso de que el archivo ingresado no tenga el formato FASTA, un mensaje de información aparecerá indicando la advertencia.

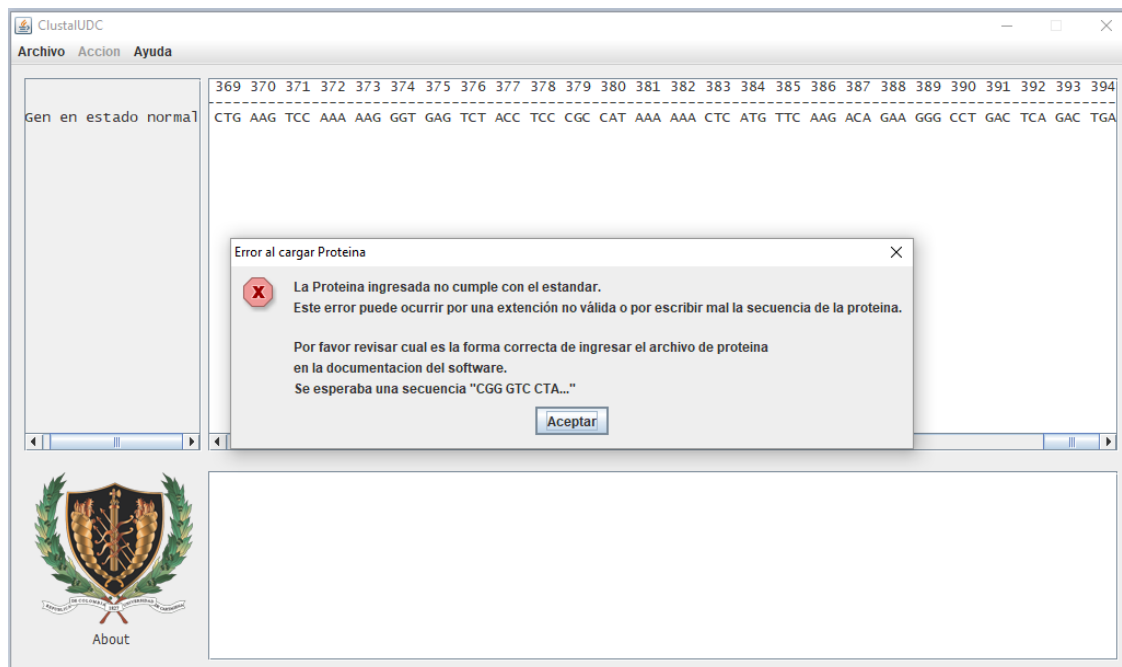


Figura 3: Mensaje de error al cargar proteína.

4.3 Ver análisis de la mutación

Un mensaje de información es mostrado en pantalla con los detalles del análisis, así se haya presentado o no una mutación.

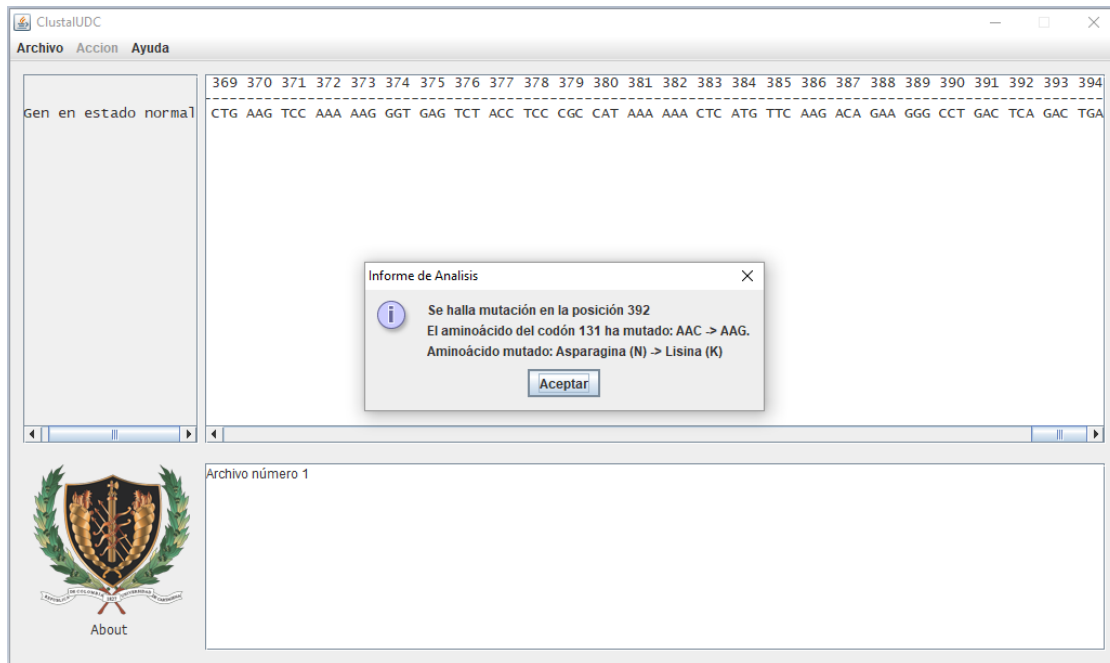


Figura 4: Mensaje de información de análisis.

Además, en el lobby, en la ventana inferior, aparecerá la información detallada de la mutación.

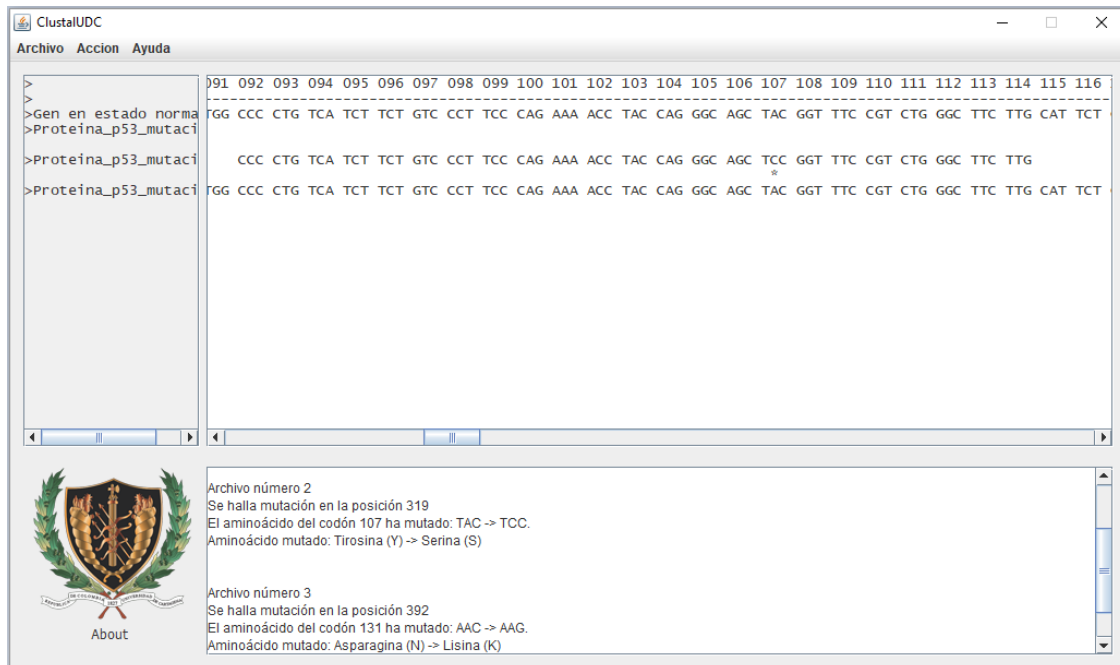


Figura 5: Lobby al agregar archivos FASTA al software

En la ventana izquierda aparece el nombre de la mutación como lo especifica el archivo FASTA agregado

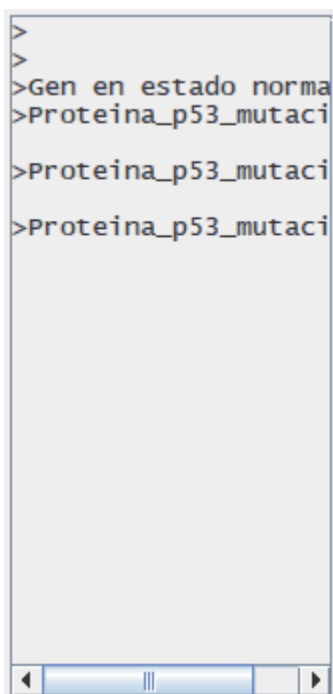


Figura 6: Información de la mutación en los archivos FASTA

Además se indica la posición donde se encuentra una mutación y cuál es el nuevo aminoácido formado tras la mutación (en caso de que se forme uno nuevo)

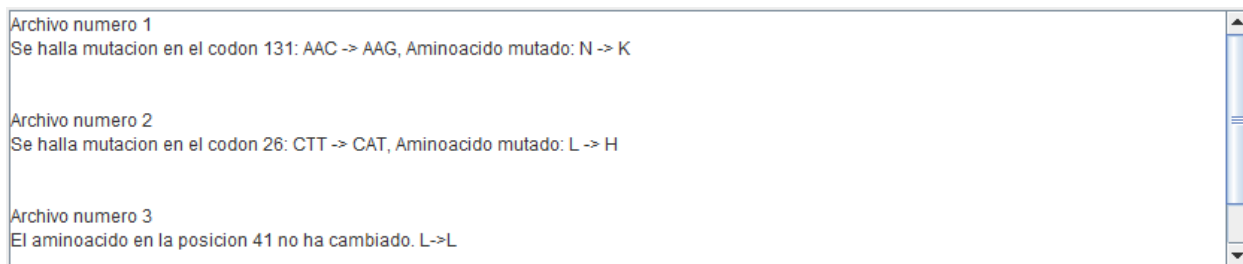


Figura 5: descripción de la mutación encontrada en los archivos FASTA

El botón acción en el menú principal se habilita para mostrar los resultados del último archivo FASTA subido.

4.4 Comparar resultados con otros estudios de p53

Para realizar la comparación con la base de datos de otros estudios relacionados con la proteína p53 se deben realizar los siguientes pasos:

1. Desde la interfaz de lobby (figura 3) se presiona en el menú de la parte superior, el botón Acción -> Comparar Resultados.
2. Aparece una nueva ventana con la información encontrada.

No.	Mutatio...	Exon	Codon	WT Co...	Mutant ...	WT AA	Mutant ...	Origin	Cancer	Authors
1	393.0	5.0	131.0	AAC	AAG	Asn	Lys	Tumour	Bladder carcinoma	Spruck CH, Rideo...
2	393.0	5.0	131.0	AAC	AAG	Asn	Lys	Tumour	Esophageal ADC	Soslow RA, Altorki...
3	393.0	5.0	131.0	AAC	AAG	Asn	Lys	Tumour	Esophageal SCC	Goan YG, Chang ...

Figura 7: Estudios similares a la mutación agregada, comparados con base de datos del software.

4.5 Modelo 3D de la proteína mutada

Para ver el modelo 3D se deben seguir los siguientes pasos:

1. Desde la interfaz de lobby (figura 3) se presiona en el menú de la parte superior, el botón Acción -> Modelo 3D -> Mutación.
2. Aparecen dos ventanas con los modelos de la proteína p53 resaltando la posición donde se presenta la mutación (un modelo en la estructura primaria y otro en la estructura secundaria).

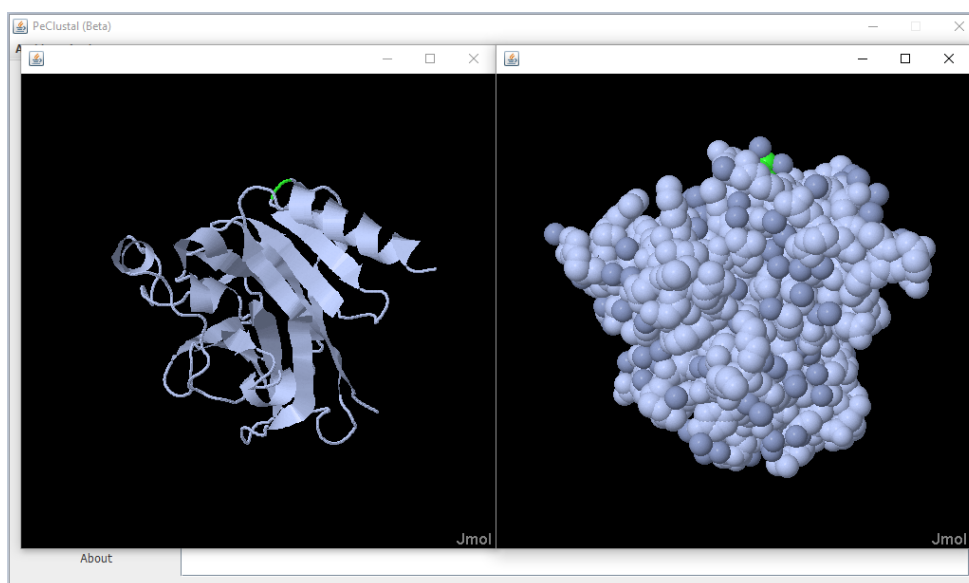


Figura 8: Modelo 3D de la mutación encontrada en p53

4.6 Funciones del modelo 3D

En la interfaz del modelo 3D (figura 6) se encuentran dos ventanas similares las cuales permiten ver el modelo 3D de la estructura primaria y secundaria de p53. Esta interfaz posee funcionalidades para acercar, alejar, rotar, e incluso exportar como imagen el modelo que se está visualizando. Además de que se puede ver toda la estructura o solo la parte donde se encuentra la mutación.

4.6.1 Seleccionar la mutación en el modelo 3D

Para seleccionar específicamente la parte del modelo 3D donde se presenta la mutación de p53 encontrada, se debe presionar click derecho en la interfaz del modelo 3D (figura 6) y hundir la opción Select(#) -> Display selected only. Automáticamente se modifica el modelo 3D para realizar lo solicitado.

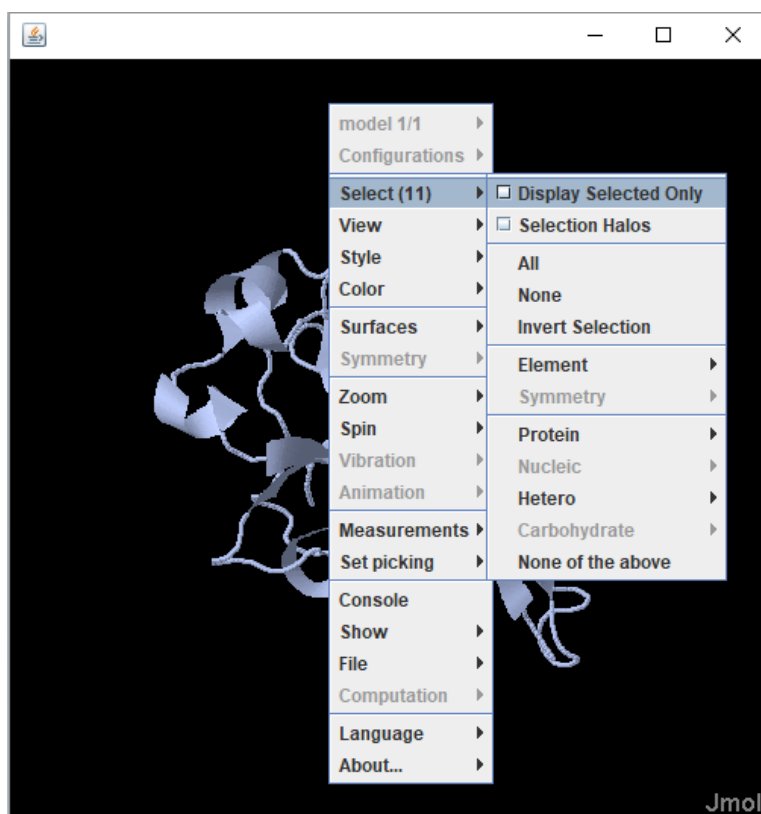


Figura 9: Activar y desactivar funcionalidad “Solo mostrar mutación”

Esta función se puede revertir o regresar al modelo completo nuevamente al desactivar la opción Select(#) -> Display selected only.

4.6.2 Mover, acercar o alejar el modelo 3D

Para mover el modelo 3D, basta con mantener presionado el click izquierdo en la interfaz del modelo 3D (figura 6) y mover el mouse.

Para acercar o alejar el modelo 3D, basta con mover la rueda central del mouse en la interfaz del modelo 3D (figura 6).

4.6.3 Activar y desactivar rotación automática

Esta interfaz también incluye un modo para rotar automáticamente el modelo. Para activar esta funcionalidad es necesario presionar click derecho en la interfaz del modelo 3D (figura 6) y hundir la opción Spin -> On. Esta funcionalidad también se puede desactivar hundiéndola nuevamente en Spin -> Off.

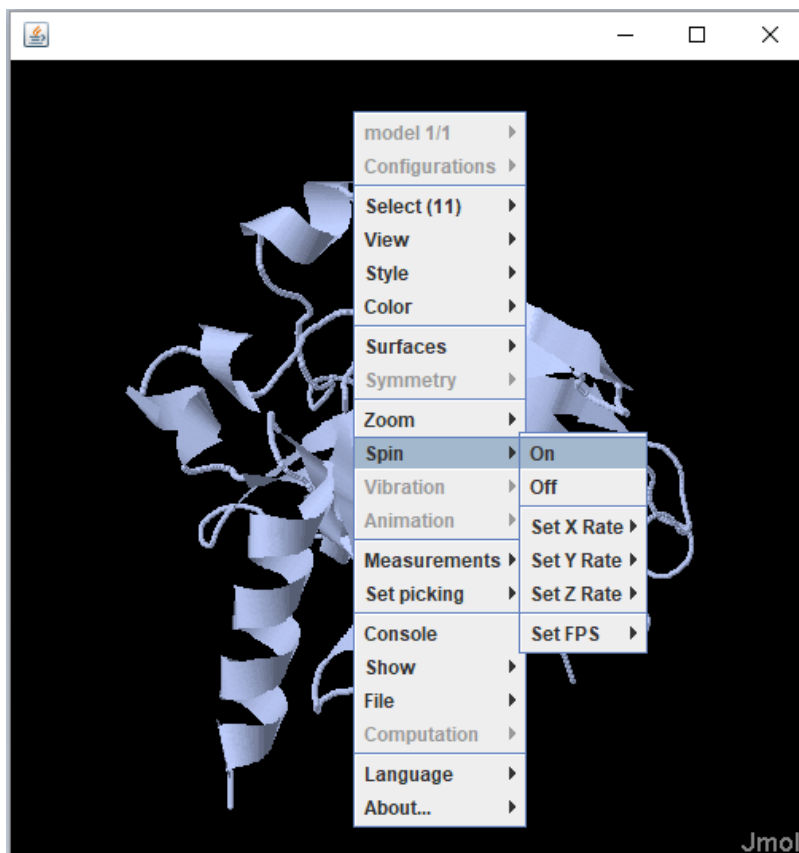


Figura 10: Activar y desactivar funcionalidad “Rotar automáticamente el Modelo”

4.6.4 Exportar como imagen el modelo 3D

Para exportar como imagen el modelo 3D estos son los pasos a seguir:

1. Desde la interfaz de modelo 3D (figura 6) se oprime click derecho en la ventana y se selecciona la opción File -> Export GIF Image / Export JPG Image / Export PNG Image. Dependiendo del formato al cual se desea exportar.

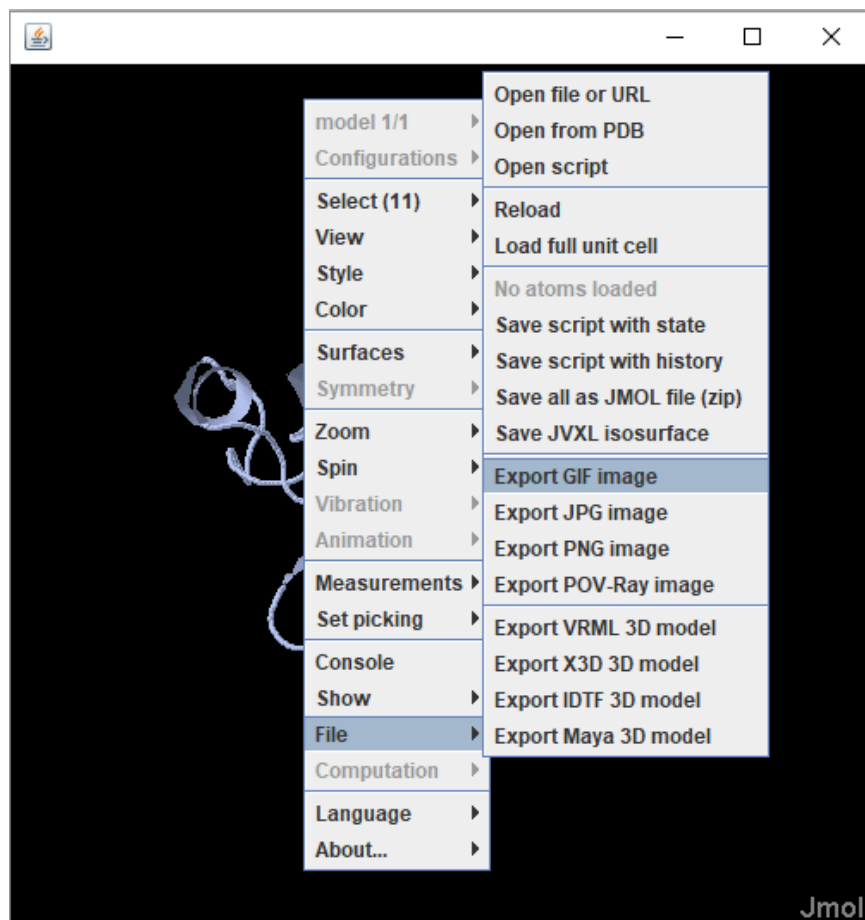
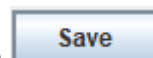


Figura 11: Funcionalidad “Exportar modelo a imagen”

2. En la nueva ventana abierta se configura la calidad de la imagen.

3. Se especifica la dirección donde se guardará la imagen y se presiona el botón



4.7 Archivos FASTA

La estructura de un archivo FASTA se conoce de manera global como un archivo de texto que en su primera línea posee el código o nombre del archivo/mutación y en una segunda línea una cadena sin espacios ni salto de línea donde está la estructura aminoacídica a ingresar. En este caso, sería un fragmento o porción de la estructura aminoacídica de p53 donde se presenta una mutación.

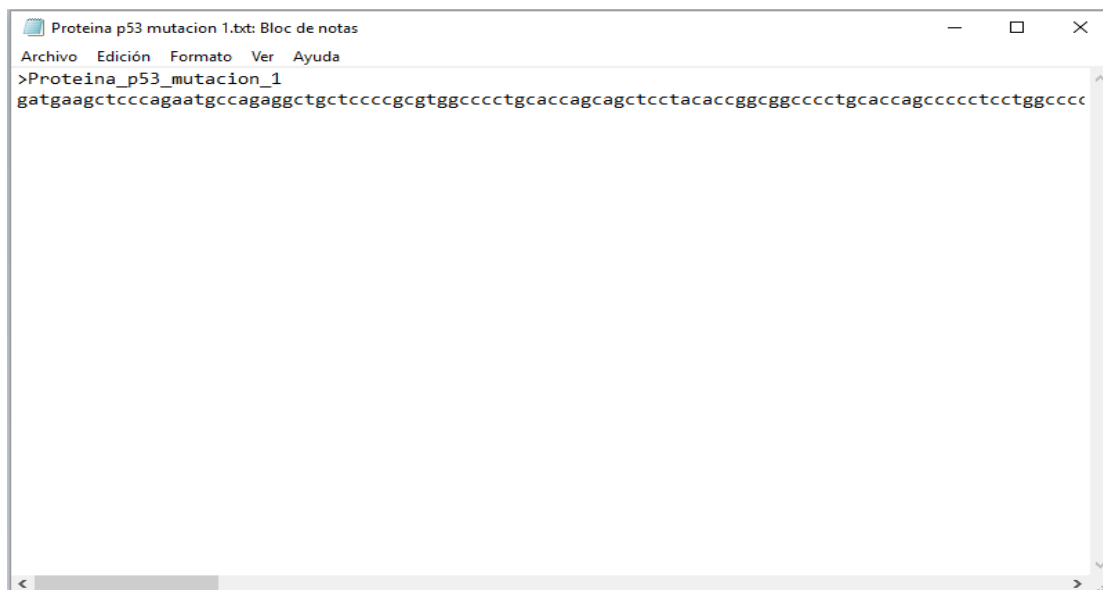


Figura 12: Ejemplo de la estructura de un archivo FASTA

4.9 Menú Ayuda

1. Ayuda -> Manual de usuario: Esta opción visualiza en formato PDF el manual de usuario del software ClustalUDC, el cual es este documento.
2. Ayuda -> Abrir tutorial: Esta opción abre dentro del software una nueva ventana con un tutorial interactivo de cómo utilizar ClustalUDC.

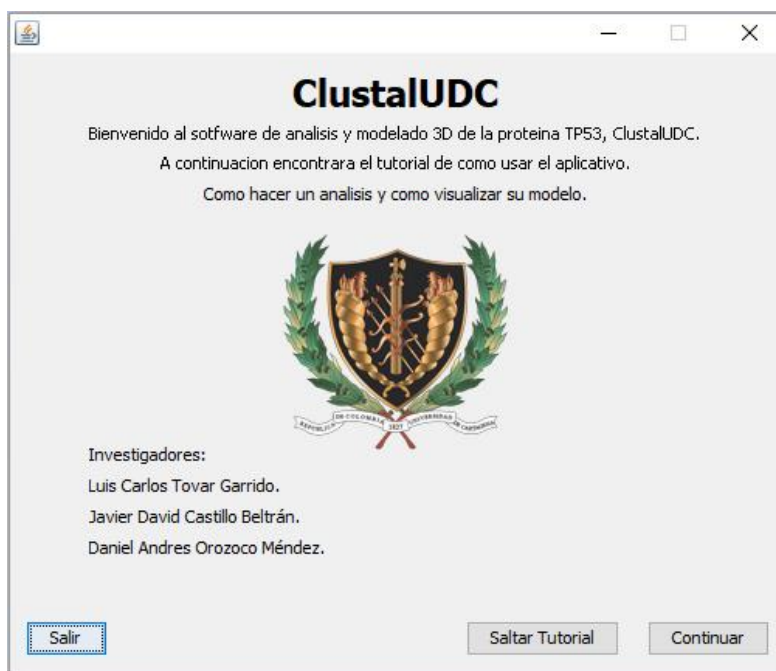


Figura 13: Ventana tutorial.

3. Ayuda -> About: Esta opción muestra una ventana con información general del software, su objetivo principal y los investigadores participantes.

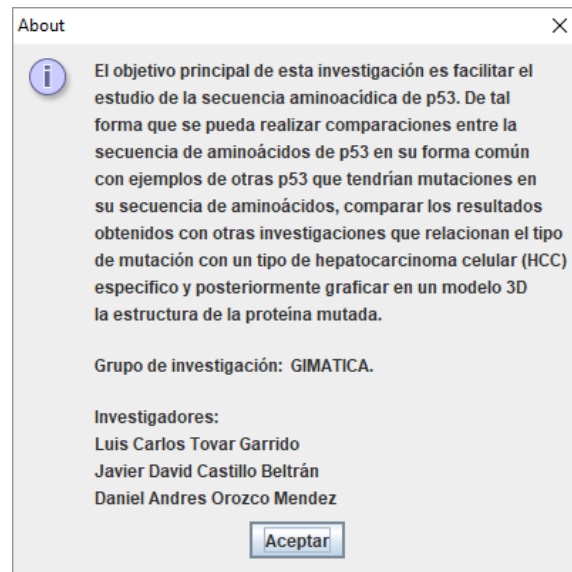



Figura 14: Ventana "About"

4.10 Salir de la aplicación

En cualquier momento se puede salir de la aplicación al cerrar la(s) ventana(s) del software presionando en el botón .

5 Mantenimiento de la base de datos

No es necesario actualizar la base de datos utilizada en el software ya que internacionalmente esta no es actualizada por nadie desde hace varios años. Sin embargo se tendrá en cuenta para futuras versiones del software, por parte de los desarrolladores, actualizar la base de datos en caso de que internacionalmente esta base de datos sea actualizada.