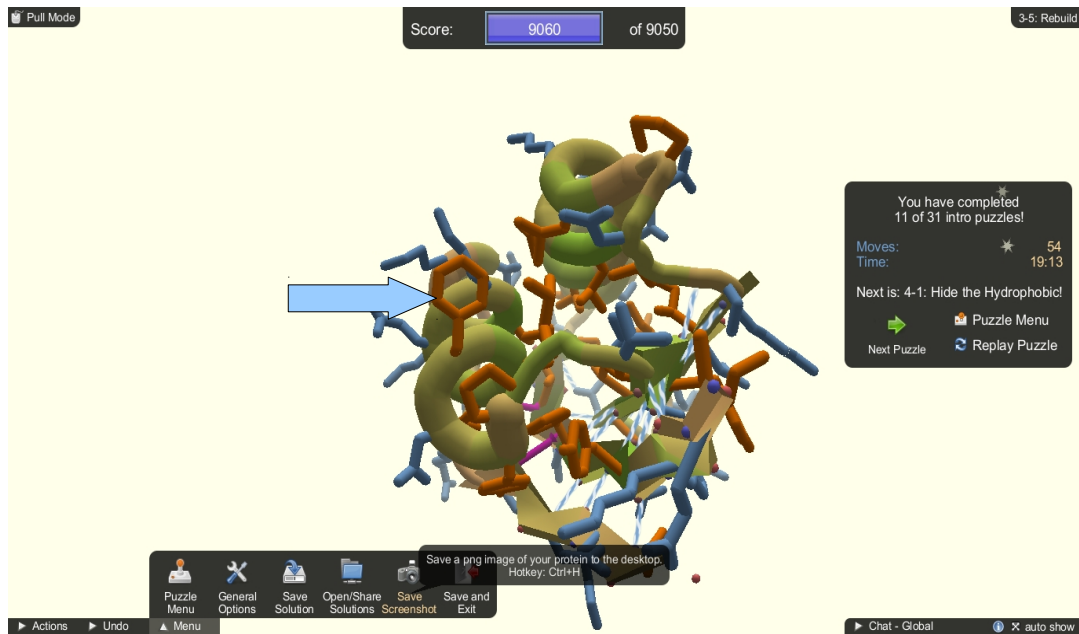


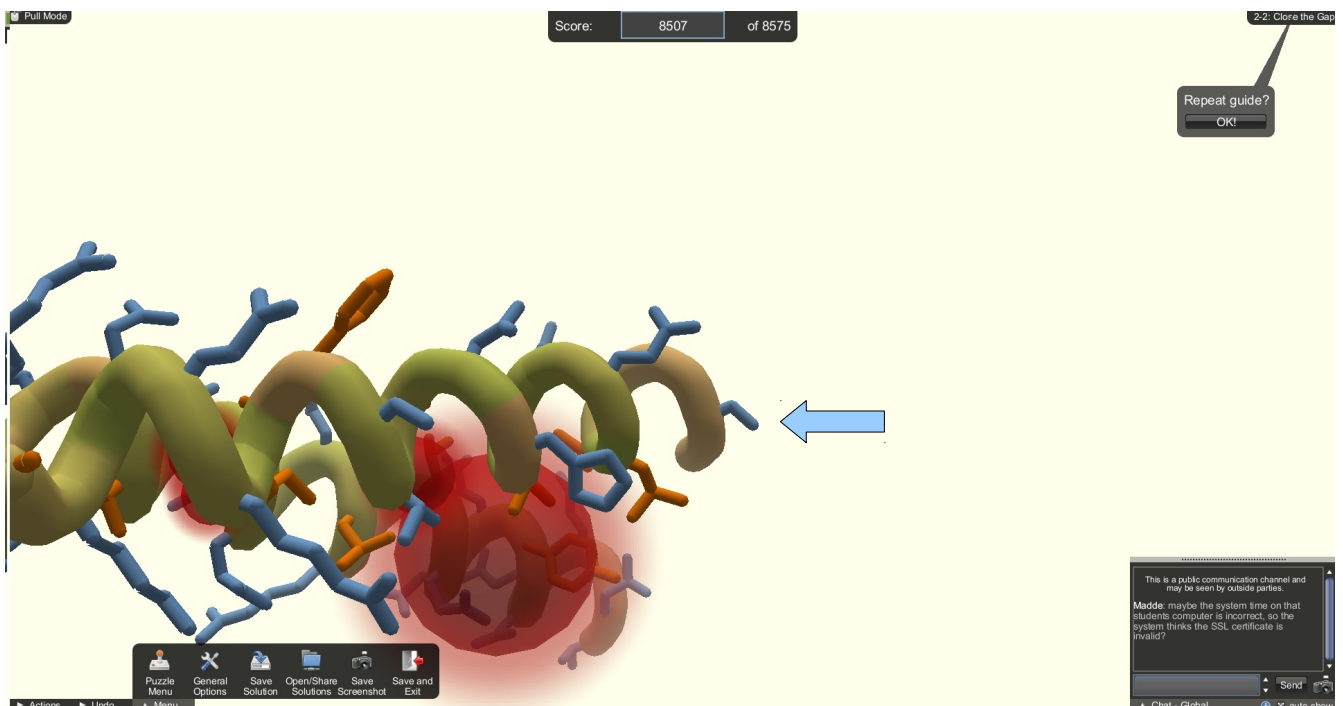
Tarea 1: Ejercicios Fold it

Puzzles de Fold it completados hasta el nivel 4-5

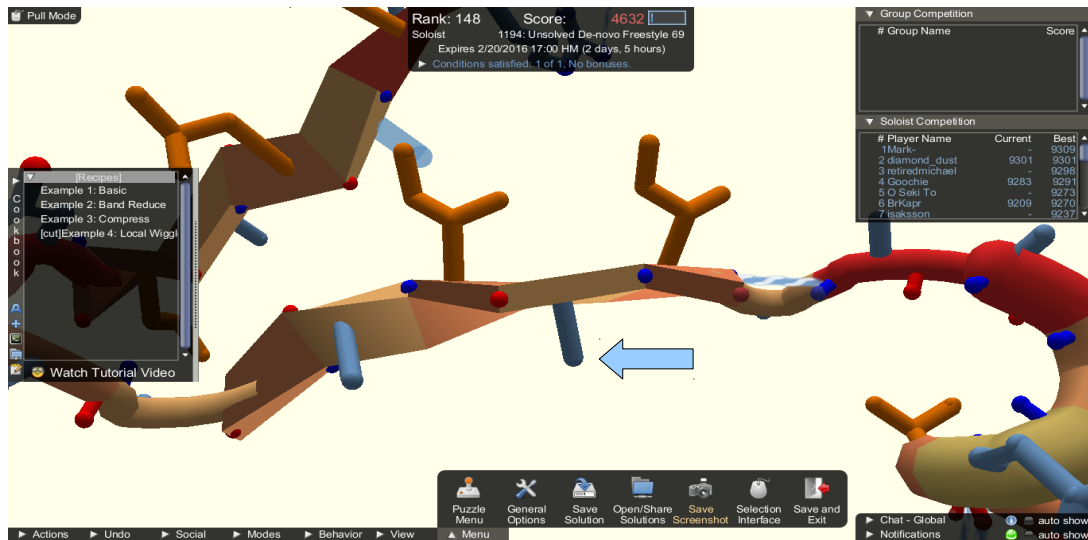
2.1) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral aromática: **fenilalanina** (indicado por la flecha azul)



2.2) Ejemplo de aminoácido con cadena lateral chica: **serina** (indicado con la flecha azul)



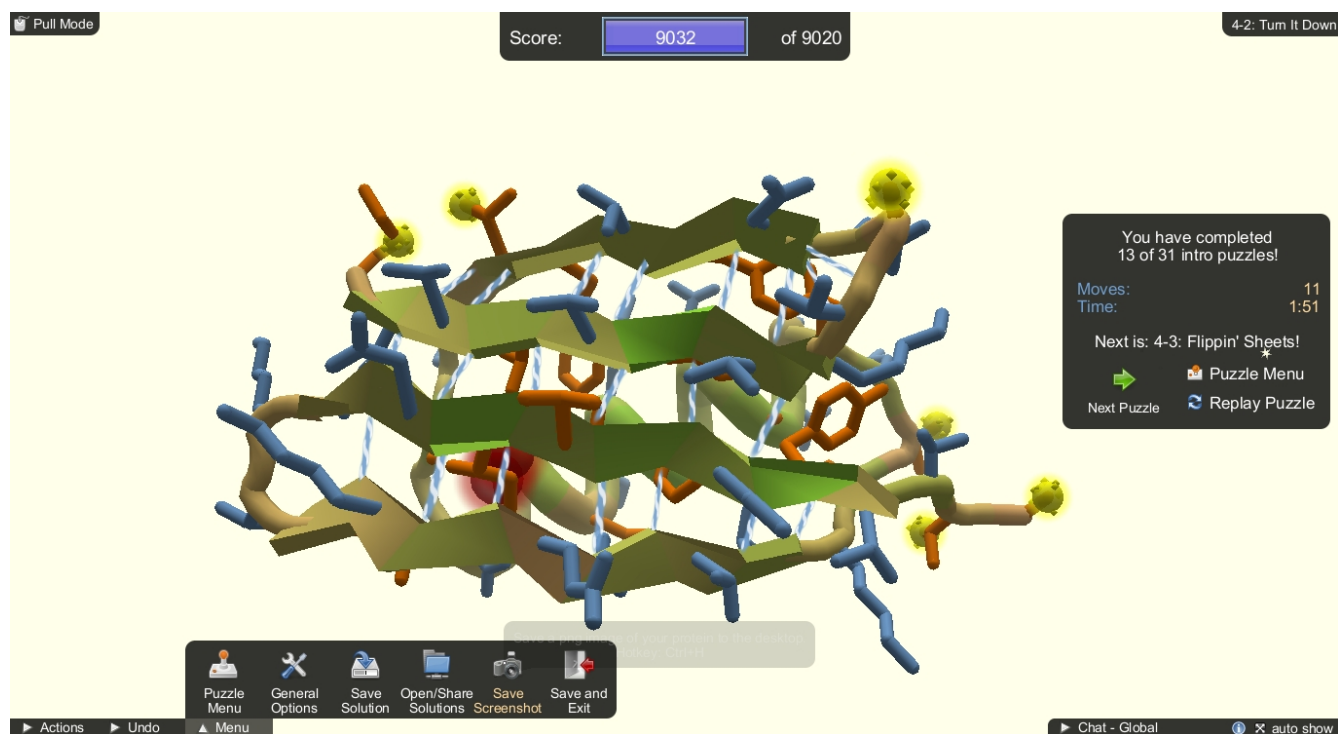
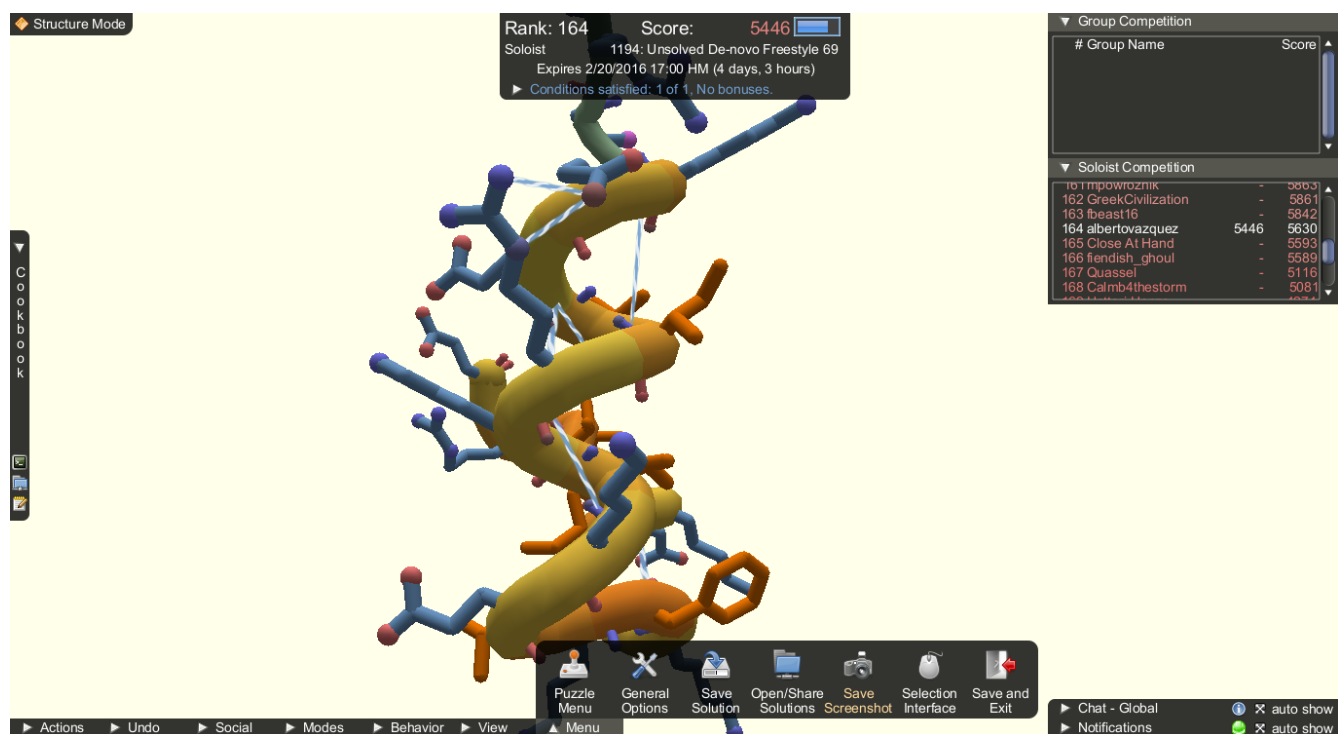
2.3) Ejemplo de giro en torno a los ángulos ϕ/ψ de un residuo seleccionado



La flecha azul indica el residuo seleccionado. A pesar de que en Foldit es complicado visualizar los ángulos ϕ/ψ , algo que es muy notorio es que el giro en torno al residuo seleccionado ocasiona choques entre las cadenas laterales de los aminoácidos vecinos, dichos choques son más notorios (y afectan más el score del plegamiento) cuando los residuos tienen cadenas laterales grandes, como se puede observar en la siguiente captura de pantalla:



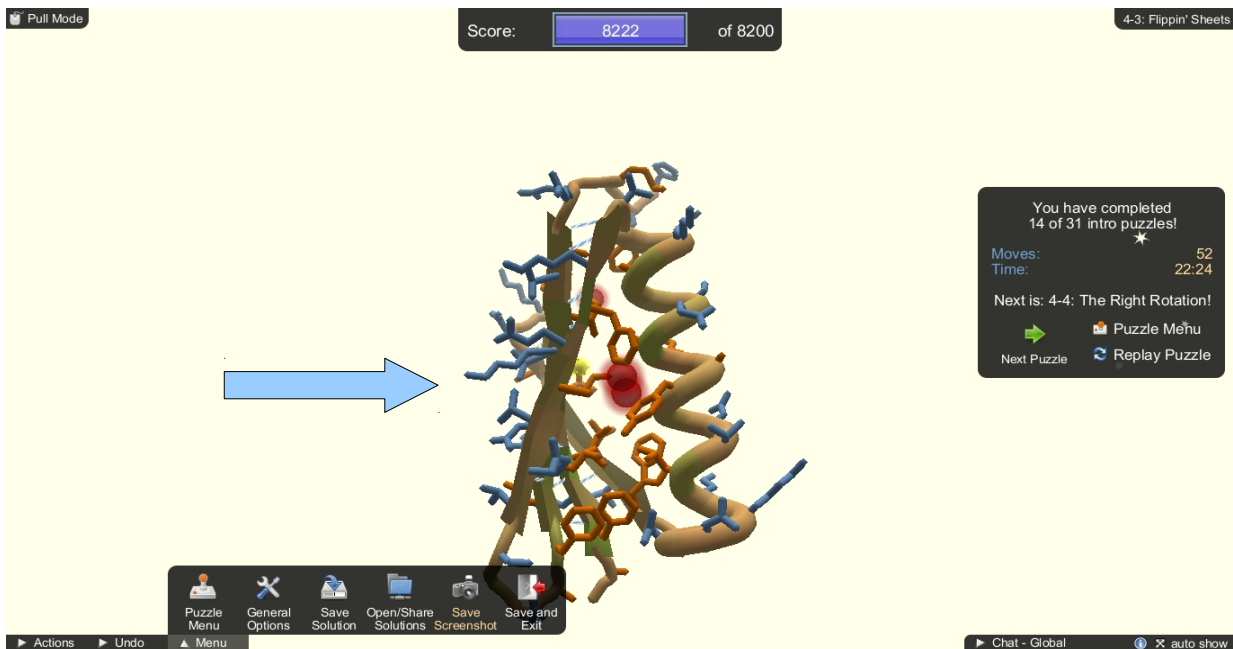
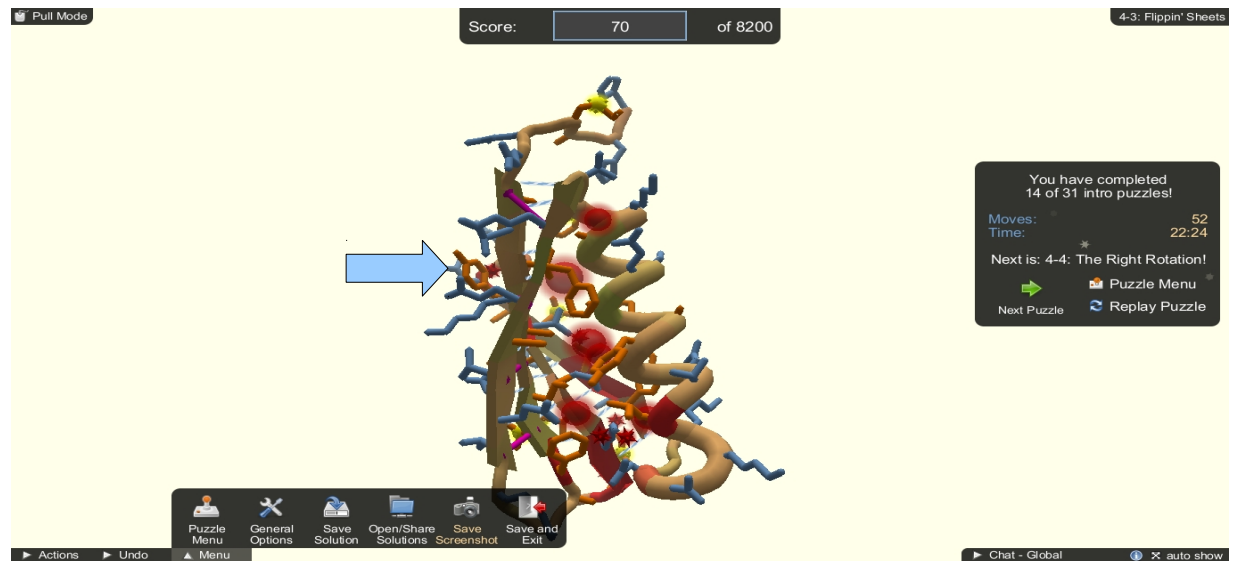
2.4) Ejemplo de puentes de hidrógeno entre residuos de una alfa-hélice y entre hojas de una lámina beta.



Desde el punto de vista algorítmico, cuál de los estados de estructura secundaria les parece más difícil de programar?

Ambas estructuras secundarias deben ser complejas de programar; sin embargo, creemos que la más difícil deben ser las láminas beta, pues éstas pueden ser paralelas o antiparalelas, así como muy extensas y con una amplia gama de residuos involucrados. Las hélices (de cualquier tipo) deberían ser más sencillas de programar si se toman en cuenta los residuos que rompen o impiden su formación, así como el número de residuos que necesita una vuelta, etc.

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

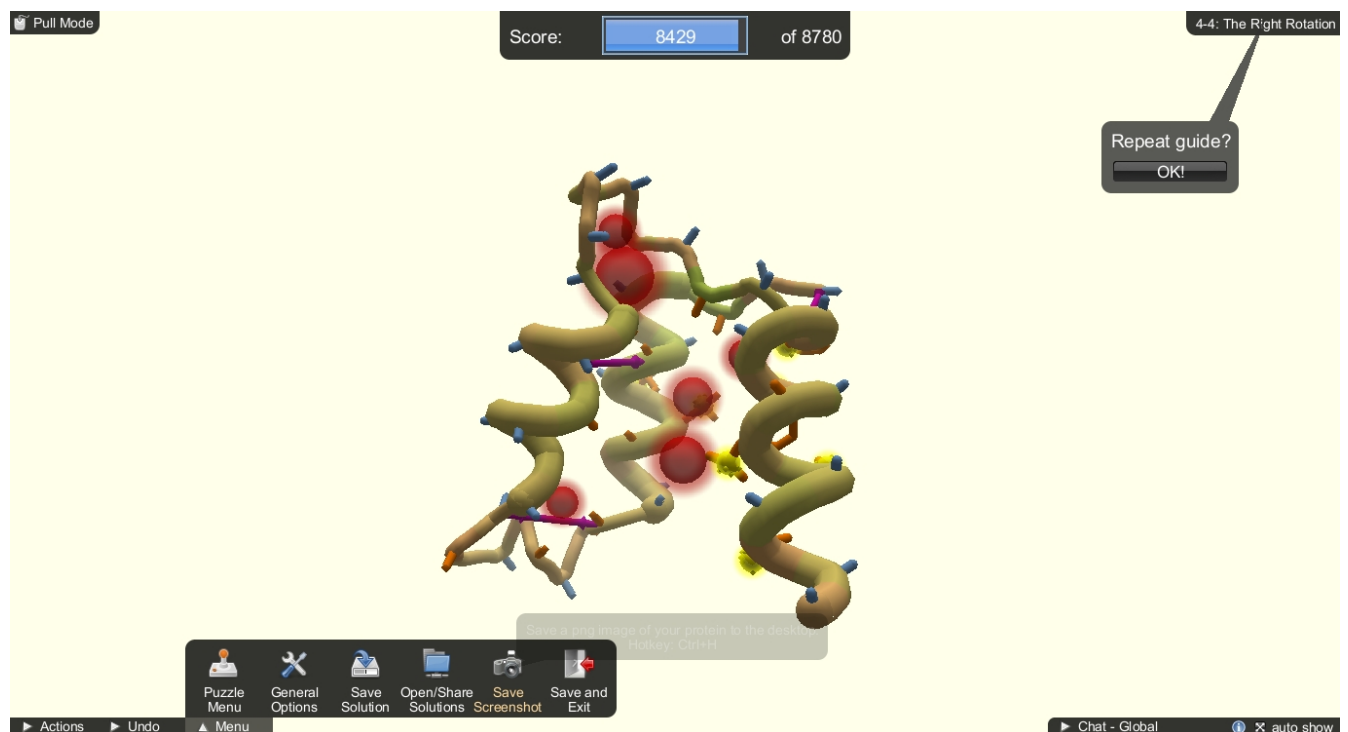


2.6) Ejemplo de conformaciones distintas con puntuaciones similares, para hacer patente el problema de evaluar lo correcto de una conformación.

A_Score: 8412



B_Score: 8429



C_Score: 8780 (Conformación correcta)

Score: 8780 of 8780

4-4: The Right Rotation

You have completed 15 of 31 intro puzzles!

Moves: 46
Time: 17:55

Next is: 4-5: Structure and Rebuild!

Next Puzzle Puzzle Menu Replay Puzzle

Save a png image of your protein to the desktop. Hotkey: Ctrl+H

Puzzle Menu General Options Save Solution Open/Share Solutions Save Screenshot Save and Exit

Actions Undo Menu Chat - Global auto show

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 utilizan en los puzzles.

El puzzle seleccionado para este ejercicio fue el 6-1, cuya secuencia es la siguiente:

GFGCNGPWDEDOMQCHNHCKSIKGYKGGYCAKGGFVCK

Longitud; 38 aa

Entonces, tomando en cuenta el ejemplo de la página web citada arriba:

$\text{texpl } 10^{13} \text{ s} \cdot 10^{12} = 10^{25} \text{ s}$

El tiempo que tomaría probar todas las conformaciones de un péptido de 38 residuos es de 10^{25} s .