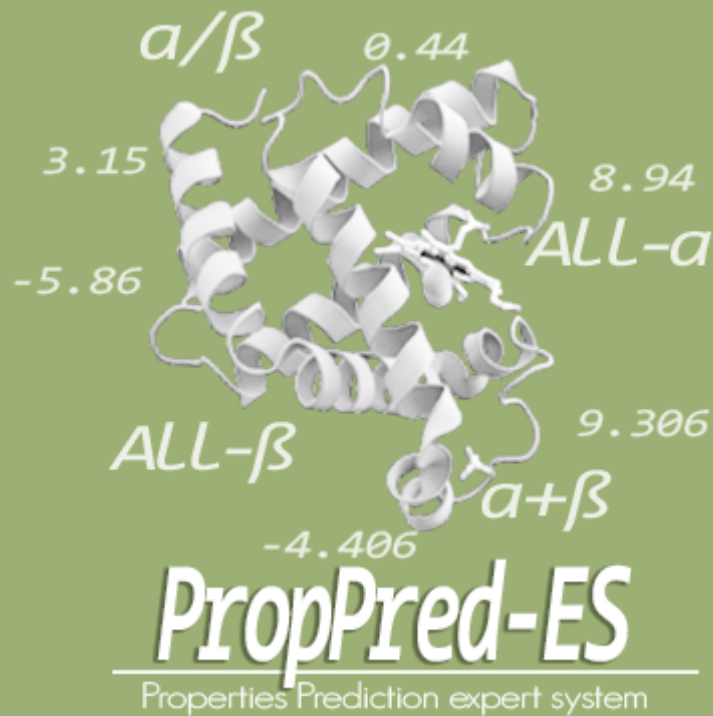


Manual de Usuario de PropPred-ES v1.0



Índice

Detalles de los modelos integrados en PropPred-ES1

Requerimientos del Sistema3

Modo de uso.4

Detalles de los modelos integrados en PropPred-ES

PropPred-ES es un sistema experto basado en modelos de rasgos 2-lineales y matrices de similitud-disimilitud para predecir las clases estructurales y la velocidad de plegamiento de cadenas polipeptídicas de las proteínas.

Modelo de clasificación para la predicción de la clase estructural de las proteínas.

El modelo fue obtenido a partir de la representación de proteínas 3D CEA (átomo de carbón del enlace Amida) mediante la técnica Random Forest, utilizando los siguientes descriptores.

Tabla 1. Descriptores utilizados en el modelo de clasificación.

No	Descriptores
1	AB_Q2_B_M32_MP3_T_KA_PBS-EPS_MCoMPAs
2	AB_I50_Q_M2_MP-4_FBS_LGL[4-5.9]_MM_MCoMPAs
3	AB_I50_B_M19_MP-2_T_LGL[4-5.9]_Z3-EPS_MCoMPAs
4	AB_Q2_F_M20_MP5_RAP_LGL[4-5.9]_PTT_MCoMPAs
5	AB_Q2_Q_M20_NS5_T_LGL[6-8]_MM_MCoMPAs
6	AB_S_B_M5_MP5_PRO_LGL[4-5.9]_Z1-KDS_MCoMPAs
7	AB_I50_Q_M5_NS1_FBS_LGL[6-8]_PTT_MCoMPAs
8	AB_Q2_B_M2_NS-1_T_LGL[6-8]_PTT-EPS_MCoMPAs
9	AB_Q2_Q_M5_MP1_RAP_LGL[4-5.9]_PTT_MCoMPAs
10	AB_S_F_M32_MP6_FAH_LGL[8.1-11]_EPS_MCoMPAs
11	AB_I50_B_M19_MP6_T_LGL[4-5.9]_Z1-Z2_MCoMPAs
12	AB_S_F_M2_MP-1_RAP_LGL[4-5.9]_PAH_MCoMPAs
13	AB_I50_Q_M5_MP-1_ALA_KA_PAH_MCoMPAs
14	AB_Q2_B_M32_SS-1_FAH_LGP[+12.0]_LGL[4-5.9]_Z1-PBS_MCoMPAs
15	AB_I50_B_M2_MP-5_FBS_LGL[8.1-11]_PBS-EPS_MCoMPAs
16	AB_S_B_M19_MP3_FAH_LGP[+12.0]_LGL[4-5.9]_MM-Z1_MCoMPAs
17	AB_I50_F_M20_MP4_ALA_LGL[8.1-11]_PTT_MCoMPAs
18	AB_Q2_B_M2_MP1_RAP_LGL[4-5.9]_PTT-EPS_MCoMPAs
19	AB_I50_B_M5_MP-3_UFG_KA_MM-PTT_MCoMPAs
20	AB_S_B_M5_NS2_FBS_LGL[6-8]_PAH-EPS_MCoMPAs
21	AB_I50_B_M5_MP-5_RAP_LGL[8.1-11]_KDS-PAH_MCoMPAs
22	AB_Q2_B_M19_MP-2_FAH_LGL[6-8]_MM-PBS_MCoMPAs
23	AB_K_B_M19_SS-1_FBS_KA_KDS-PAH_MCoMPAs
24	AB_I50_Q_M19_NS-2_FAH_LGL[6-8]_MM_MCoMPAs
25	AB_I50_B_M5_NS-2_FAH_LGL[6-8]_MM-PAH_MCoMPAs
26	AB_S_B_M2_MP1_FAH_LGL[4-5.9]_MM-PTT_MCoMPAs
27	AB_Q2_B_M32_SS-1_FAH_LGL[6-8]_PBS-PTT_MCoMPAs
28	AB_I50_F_M19_SS2_T_LGL[4-5.9]_EPS_MCoMPAs
29	AB_I50_F_M5_SS4_T_LGL[4-5.9]_EPS_MCoMPAs
30	AB_Q2_F_M5_NS-5_RAP_KA_PBS_MCoMPAs
31	AB_Q2_F_M2_NS4_FBS_LGL[6-8]_PAH_MCoMPAs
32	AB_I50_Q_M19_NS2_FBS_LGL[6-8]_PTT_MCoMPAs

33	AB_I50_Q_M19_NS-3_FAH_LGL[4-5.9]_KDS_MCoMPAs
----	--

Tabla 2. Parámetros estadísticos del modelo de clasificación utilizado.

Conjunto	Exactitud global Q(%)	Sensibilidad (%)		Especificidad (%)	
SE	100	clases		clases	
		$\alpha+\beta$	100	$\alpha+\beta$	100
		α/β	100	α/β	100
		All- β	100	All- β	100
		All- α	100	All- α	100
SP	98	clases		clases	
		$\alpha+\beta$	100	$\alpha+\beta$	98
		α/β	100	α/β	100
		All- β	100	All- β	100
		All- α	93	All- α	100

Modelo de regresión para la predicción de la velocidad de plegamiento de cadenas polipeptídicas de las proteínas

El modelo fue obtenido a partir de la representación de proteínas 3D CEA (átomo de carbón del enlace Amida) con 3 variables, mediante la técnica regresión lineal múltiple, utilizando los siguientes descriptores.

Tabla 3. Descriptores utilizados en el modelo de regresión.

No	Descriptores
1	AB_K_Q_M20_NS6_TYR_KA_Z1_MCoMPAs
2	AB_I50_B_M2_SS-6_RAP_LGL[6-8]_KDS-EPS_MCoMPAs
3	AB_Q2_F_M2_NS2_T_LGL[6-8]_EPS_MCoMPAs

Tabla 4. Parámetros estadísticos del modelo de regresión utilizado.

Dimensión	R ²	Q ² _{loo}	Q ² _{boot}	a(Q ²)	Q ² _{ext}	SDEP _{ext}
3	0.7832	0.7612	0.7584	-0.107	0.7263	1.563

Ecuación de regresión lineal.

$$\begin{aligned}
 \ln(kf) = & 22.240811 + [(-0.12087 * \text{AB_K_Q_M20_NS6_TYR_KA_Z1_MCoMPAs}) \\
 & + (-0.00611 * \text{AB_I50_B_M2_SS-6_RAP_LGL[6-8]_KDS-EPS_MCoMPAs}) \\
 & + (0.00001 * \text{AB_Q2_F_M2_NS2_T_LGL[6-8]_EPS_MCoMPAs})]
 \end{aligned}$$

Requerimientos del Sistema

Hardware:

Microprocesador: como mínimo Intel(R) Dual-Core.

Memoria RAM: como mínimo 1 GB.

Software:

PropPred-ES está diseñado para correr en el sistema operativo Windows y/o Linux.

Requiere la máquina Virtual de Java 1.7 como mínimo.

Modo de uso.

lo sistema.

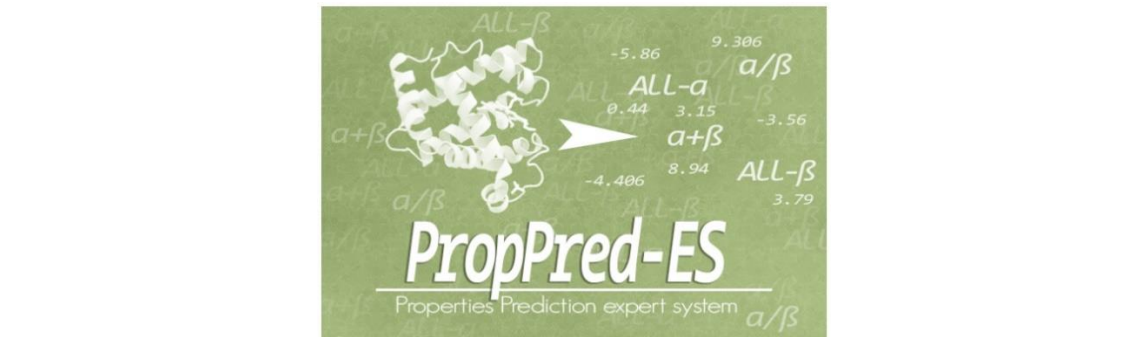


Fig. 1. Pantalla de carga de PropPred-ES.

d-ES Interfaz gráfica de usuario.

z de PropPred-Es cuenta con las siguientes áreas.

título: Contiene el nombre del programa, PropPred-ES.

menú: Contiene los menús relacionados con las distintas tareas que se pueden realizar por -ES.

Selección: Contiene las características disponibles a predecir y un botón para realizar la predicción.

Resultados: Contiene los resultados de las predicciones realizadas.

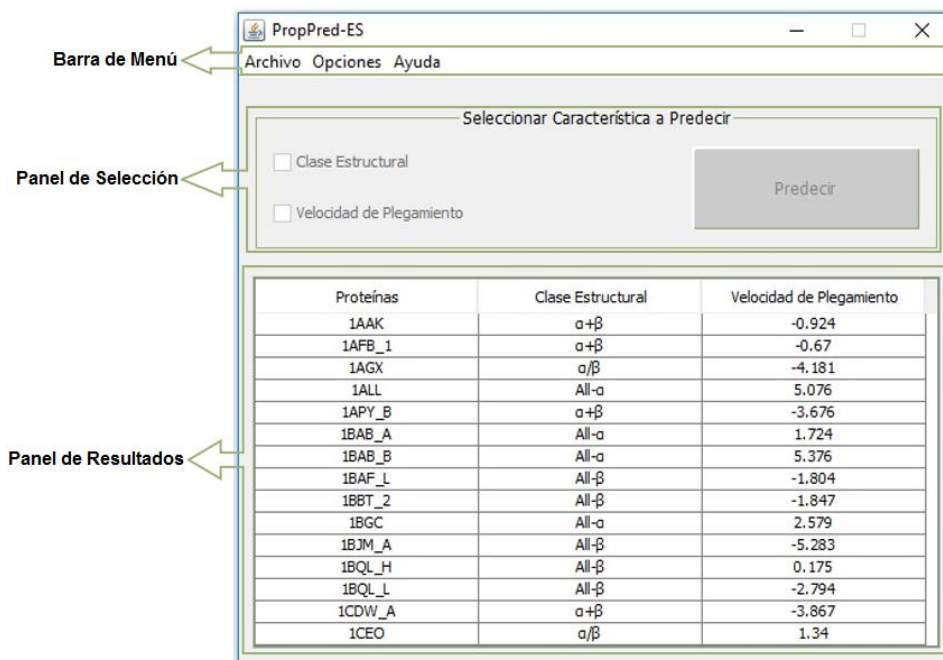


Fig. 2. Interfaz gráfica de usuario de PropPred-ES.

Barra de menú

En esta sección se describe en términos generales el primer encuentro con el menú del sistema, y cada una de sus partes.

Menú Archivo



Fig. 3. Menú Archivo.

Menú Cargar Archivo: Permite cargar los archivos necesarios para realizar la predicción, estos archivos estarán en formato PDB o ENT y contendrán características estructurales, químicas y bioquímicas de una proteína específica.

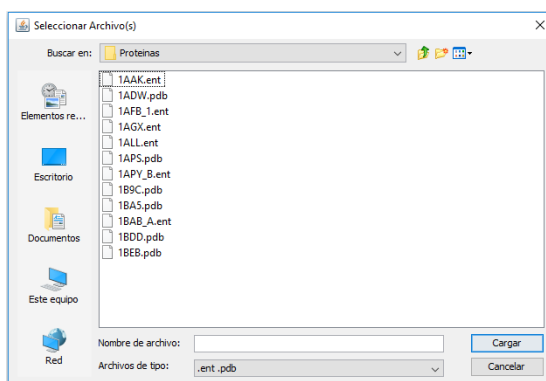


Fig. 4. Cargar Archivo.

Menu Cerrar: Cierra la aplicación.

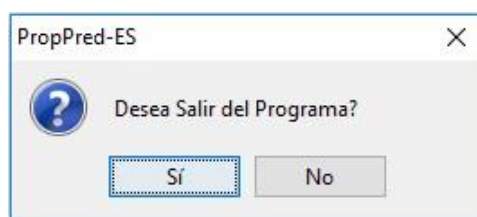


Fig. 5. Cerrar.

Menú Opciones

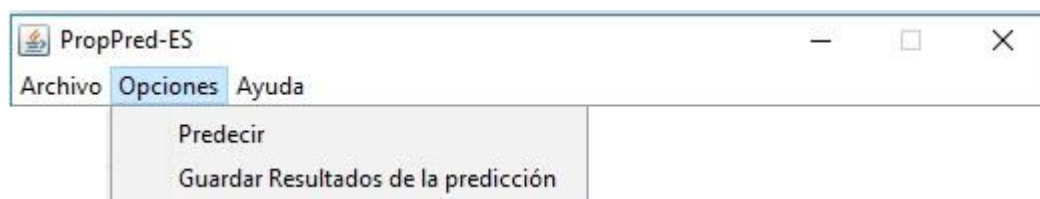


Fig. 6. Menú Opciones.

Menú Predecir: Predice la clase estructural y/o la velocidad de plegamiento de cadenas polipeptídicas de la o las proteínas cargadas.

Menú Guardar Resultados de la Predicción: Exporta los resultados de la predicción a un archivo XLS para guardar los datos de las predicciones obtenidas.

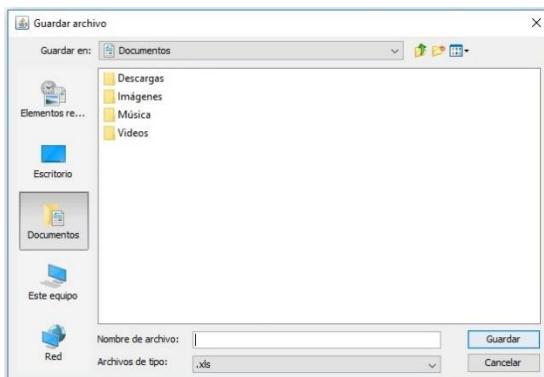


Fig. 7. Menú Guardar.

Menú Ayuda



Fig. 8. Menú Ayuda.

Menú Ayuda: Accede a un PDF que contiene información del programa y una ayuda para su uso.

Menú Acerca de: Contiene la información referente al software PropPred-ES.

Utilizando el sistema

Cargar el o los archivos en formato PDB o ENT que contienen la información de una o varias proteínas de interés para predecir la característica clase estructural y/o la velocidad de plegamiento de cadenas polipeptídicas.

Para esto ir a Archivo/Cargar Archivo

Si alguno de los archivos cargados esta corrupto el sistema mostrará una notificación con los archivos que no se pudieron cargar.

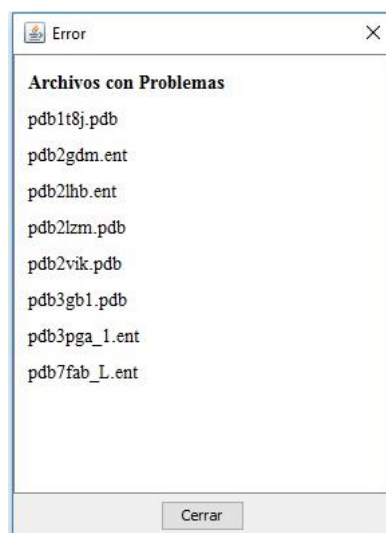


Fig. 9. Notificación de error.

Una vez cargados los archivos para realizar la predicción se podrá seleccionar la característica a predecir: Clase estructural, velocidad de plegamiento o ambas y pulsar el botón Predecir o ir a Menú/Opciones/Predecir.

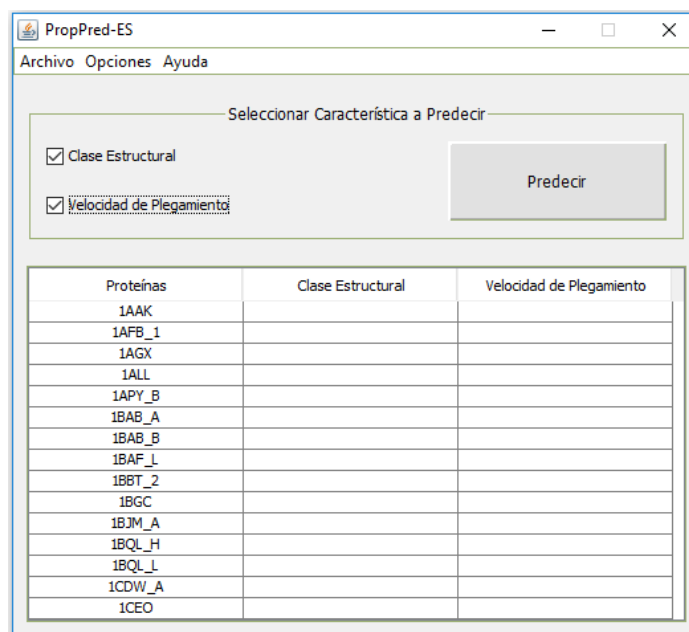


Fig. 10. Clase estructural seleccionada.

Si se desea se puede cancelar la predicción pulsando el botón cancelar que aparece en la barra de progreso.

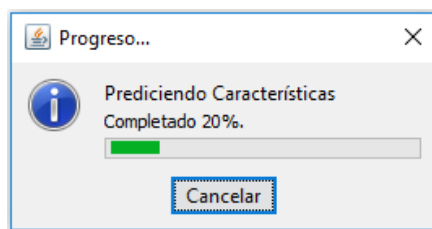


Fig. 11. Progreso de la predicción.

Terminada la predicción se muestra en el panel de resultado las predicciones obtenidas.

Proteínas	Clase Estructural	Velocidad de Plegamiento
1AAK	$\alpha + \beta$	-0.924
1AFB_1	$\alpha + \beta$	-0.67
1AGX	α / β	-4.181
1ALL	All- α	5.076
1APY_B	$\alpha + \beta$	-3.676
1BAB_A	All- α	1.724
1BAB_B	All- α	5.376
1BAF_L	All- β	-1.804
1BBT_2	All- β	-1.847
1BGC	All- α	2.579
1BJM_A	All- β	-5.283
1BQL_H	All- β	0.175
1BQL_L	All- β	-2.794
1CDW_A	$\alpha + \beta$	-3.867
1CEO	α / β	1.34

Fig. 12. Resultados de la Predicción.

Si lo desea puede guardar los resultados obtenidos para consultarlos más tarde. Estos se guardarán en formato XLS. Esto podrá realizarlo seleccionando el Menú\Opciones\Guardar resultados de la predicción.