



# Biología Molecular Computacional CB309

## Laboratorio 02a: Estructura Secundaria en ARN

Yván Jesús Túpac Valdivia  
Universidad Católica San Pablo, Arequipa – Perú

24 de octubre de 2024

### 1 Objetivos

- Implementar, en un lenguaje de programación, el algoritmo de búsqueda de la estructura secundaria en ARN que se vio en clase [Nussinov and Jacobson, 1980] considerando bases independientes.
- Artículo Fast algorithm for predicting the secondary structure of single-stranded RNA.
- Verificar su funcionamiento y comportamiento computacional ante diversos tamaños y cantidades de cadenas
- Analizar la complejidad del algoritmo

### 2 Desarrollo

#### 2.1 Algoritmo de Predicción de Estructura Secundaria en ARN

- Conforme se vio en clase, se tiene el algoritmo de alineamiento de predicción de estructura secundaria para ARN [Nussinov and Jacobson, 1980]
- Implementar el algoritmo en C++ preferentemente.
- Evalúe qué recursos del lenguaje deberían aprovecharse, utilícelos. [SO1, SO2]

#### 2.2 Algoritmo de Predicción Estructura Secundaria: Pruebas y ajustes

- Probar su implementación en el ejemplo visto en clase GGAAAUCC y usando las siguientes funciones de energía:

$$\alpha(r_i, r_j) = \begin{cases} -5 & \text{si } r_i r_j = \text{CG ó GC} \\ -4 & \text{si } r_i r_j = \text{AU ó UA} \\ -1 & \text{si } r_i r_j = \text{GU ó UG} \\ 0 & \text{en los demás casos} \end{cases} \quad \alpha(r_i, r_j) = \begin{cases} -1 & \text{si } r_i r_j = \text{CG ó GC} \\ -1 & \text{si } r_i r_j = \text{AU ó UA} \\ 0 & \text{en los demás casos} \end{cases}$$

- Implementar un mecanismo de visualización de los pares emparejados [SO6]
- Probar con otras secuencias de ARN como ACUCGAUCCGAG

### 2.3 Emparejamiento de pares ARN: Valorización

- Encuentre una relación entre los modelos de predicción de estructuras ARN y la búsqueda de palíndromos.
- ¿Cómo la energía libre afecta a los resultados encontrados?
- Revise en la literatura buscando qué logros ha permitido alcanzar este algoritmo en el área de Biología Molecular Computacional y revise también las diversas mejoras que se han ido alcanzando en este mismo algoritmo. Indique cuál de las mejoras le parece la más relevante. [S07]

## 3 Entrega

- Deberá entregar dentro del plazo que aparece en el Aula Virtual un informe (PDF) con lo realizado respondiendo las preguntas y mostrando los funcionamientos.
- Las implementaciones deberán estar en repositorio, cuyo URL debe indicarse en el informe.

## References

[Nussinov and Jacobson, 1980] Nussinov, R. and Jacobson, A. B. (1980). Fast algorithm for predicting the secondary structure of single-stranded RNA. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 77(11):6309–6313.