

### TALLER DE BIOCOMPUTACIÓN

ARN y grafos

M.C. Hugo Armando Guillén Ramírez Grupo de Biocomputación, Ciencias de la Computación, CICESE.

M hugoagr@gmail.com / hguillen@cicese.edu.mx

\* https://hugoguillen.github.io

🕳 <u>/r/procrastinando</u>

# INTRODUCCIÓN

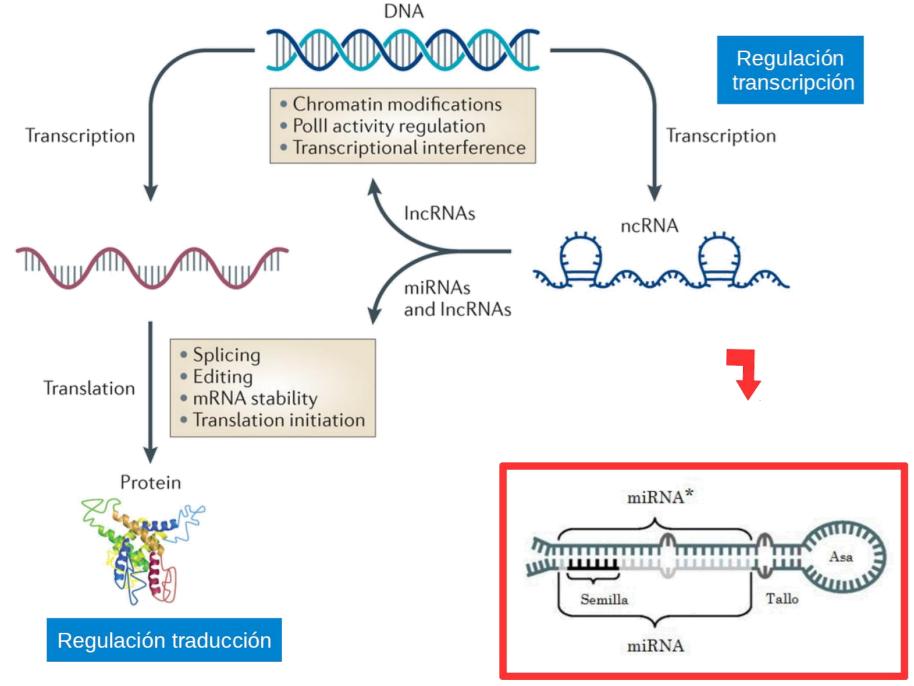


Imagen: ARN no codificante

#### CLASIFICACIÓN

Etiquetar ejemplos desconocidos a partir de ejemplos conocidos (ya etiquetados).



Miniature Pinscher



Miniature Schnauzer



Norfolk Terrier



Poodle (Toy / Miniature)



?



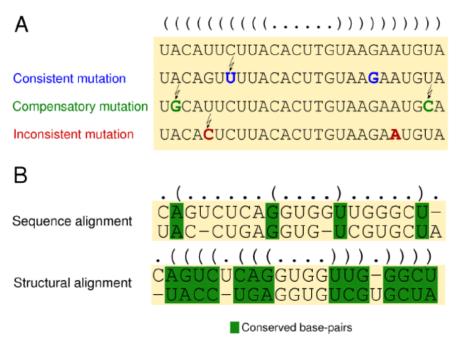
Schipperkee



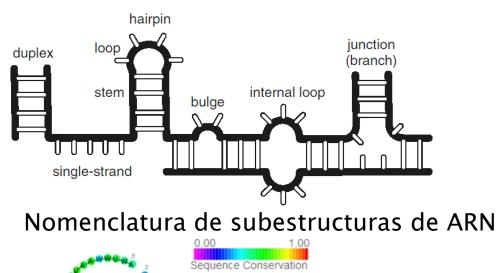
IN CS, IT CAN BE HARD TO EXPLAIN THE DIFFERENCE BETWEEN THE EASY AND THE VIRTUALLY IMPOSSIBLE.

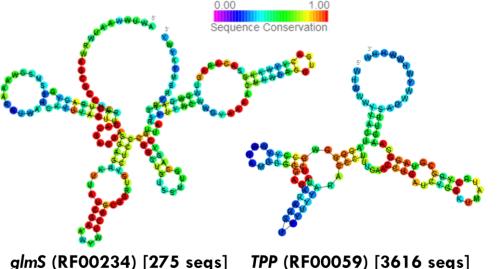
Características

## PLEGAMIENTO, ESTRUCTURA SECUNDARIA Y ALINEAMIENTOS

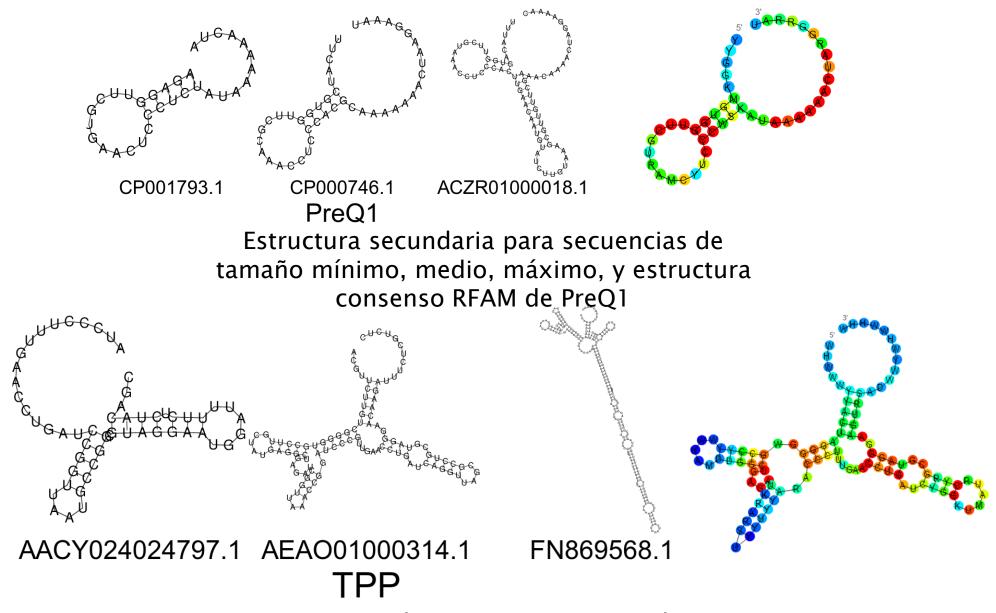


- A) 3 secuencias que se pliegan en un hairpin alineadas.
- B) Alineamientos a nivel de secuencia vs estructural.





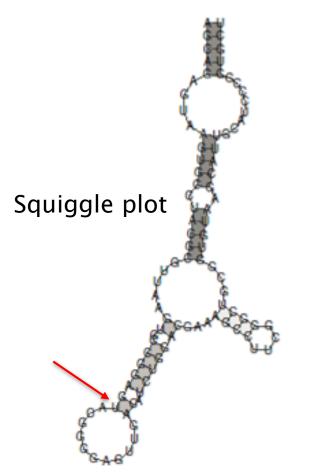
RFAM's consensus secondary structure of glmS and TPP.

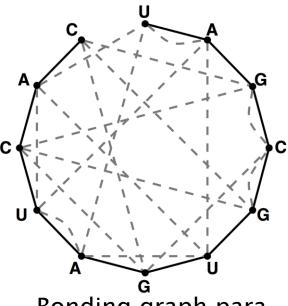


Estructura secundaria para secuencias de tamaño mínimo, medio, máximo, y estructura consenso RFAM de TPP

## PLEGAMIENTO DE ARN

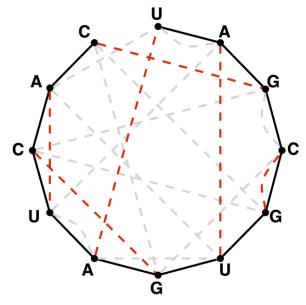
#### **PLEGAMIENTO**





Bonding graph para UAGCGUGAUCAC.

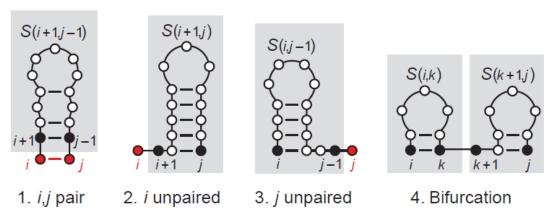
Matching perfecto que representa una posible estructura secundaria.



¿Cuántos matching perfectos hay para un bonding graph dado?

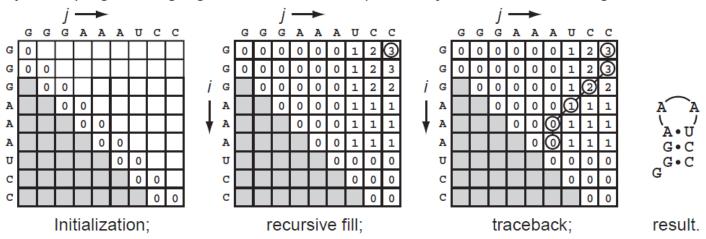
Notación dotbracket

**a** Recursive definition of the best score for a sub-sequence *i,j* looks at four possibilities:



$$S(i,j) = \max \begin{cases} S(i+1,j-1) + 1 & [\text{if } i,j \text{ base pair}] \\ S(i+1,j) \\ S(i,j-1) \\ \max_{i < k < j} S(i,k) + S(k+1,j) \end{cases}$$

Algoritmo de Nussinov y Jakobson (1980) **b** Dynamic programming algorithm for all sub-sequences *i,j*, from smallest to largest:



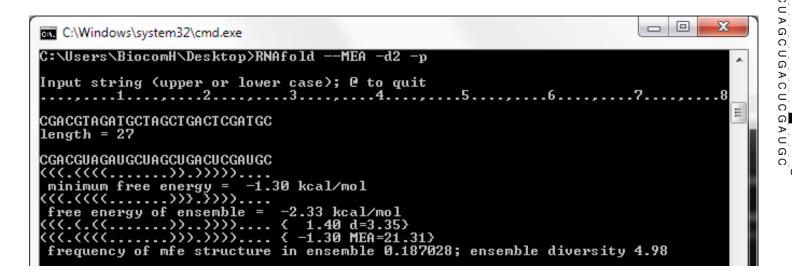
#### EJEMPLO: MIRNA

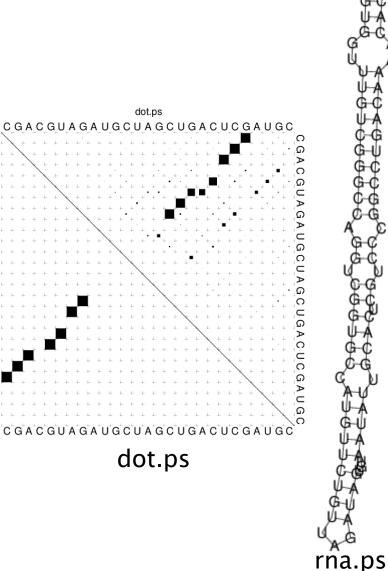
#### Xenoturbella bocki miR-92a stem-loop

- La búsqueda de herramientas no invasivas de diagnóstico y manejo de cancer es extremadamente importante.
- Los micro ARNs (miRNAs) muestran potencial como biomarcadores y pueden encontrarse circulando en suero. Algunos son específicos en pacientes de tumores.
- miR-92 está presente en individuos sanos en el suero pero en niveles variables y presenta cambios en respuesta a ciertos cánceres.

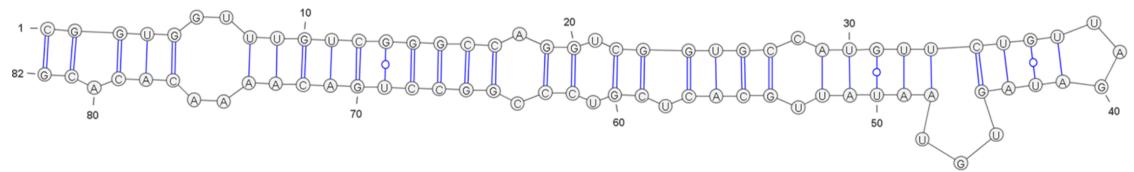
>xbo-mir-92a MI0017684 CGGUGGUUGCCAUGUUCUGUUAGAUAGUGUAAUAUUGCACUCGUCCCGGCCUGACAAACACACG

```
- g a u - c ---
5' cg gug uuugucgggcc gg cg gugc auguu cuguu
|| || || || || || || || || || || || a
3' gc cac aaacaguccgg cc gc cacg uauaa gauag
a a c u u u ugu
```

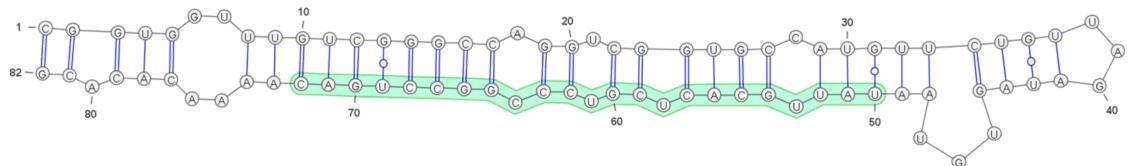




ACG

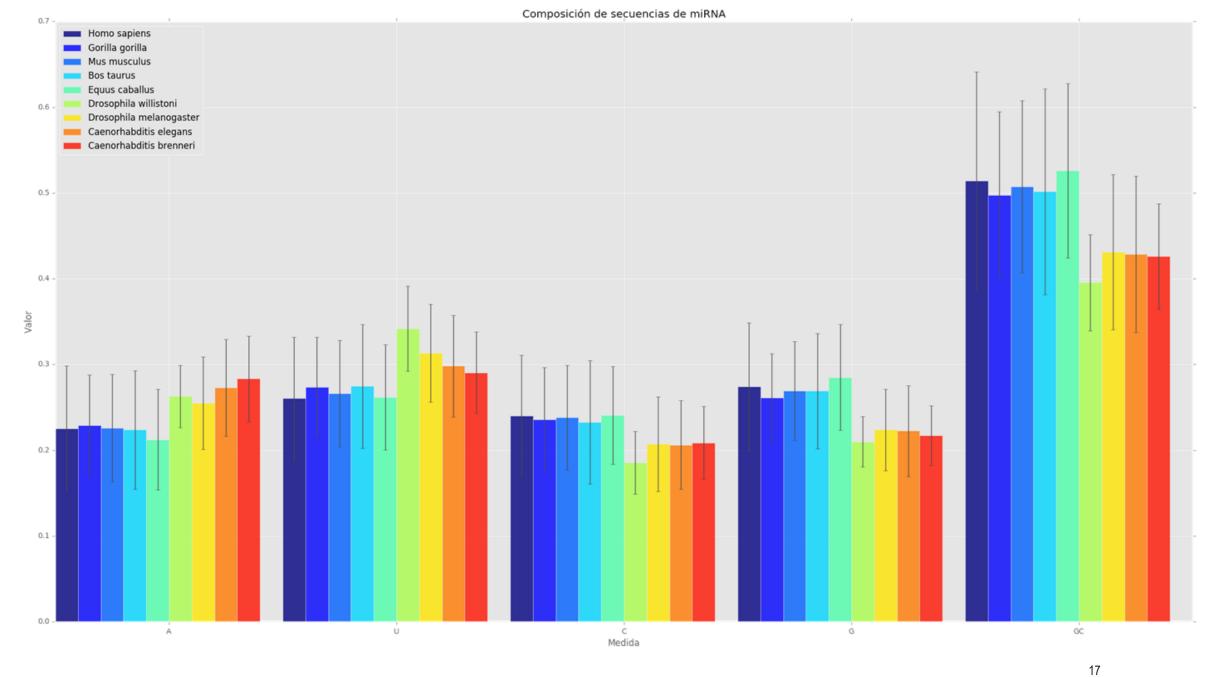


Visualización de xbo-mir-92a MI0017684 en VARNA usando el algoritmo NAView.



Marcado de la secuencia madura, region 50-72.

Representación de la estructura del miRNA en miRBase.



## ¡GRACIAS POR SU ATENCIÓN!