BioSequenceAnalyzer by Leon Davis

Un analizador de secuencias biológicas en C# que identifica ADN, ARN y proteínas, además de traducir secuencias de ADN a proteínas. github:

Características Principales

- Identificación del tipo de secuencia (ADN, ARN o Proteína)
- Traducción de secuencias de ADN a proteínas
- · Reconocimiento de codones STOP
- Soporte para selenocisteína (U) en proteínas
- Validación de secuencias inválidas

Instalación

1. Clona el repositorio:

```
git clone https://github.com/tu-usuario/BioSequenceAnalyzer.git
```

2. Abre la solución en Visual Studio o ejecuta:

```
dotnet build
```

Uso Básico

Identificación de Tipo de Secuencia

```
var sequence = "ATGCGTA";
var type = BiologicalSequenceAnalyzer.IdentifySequenceType(sequence);
// Devuelve SequenceType.DNA
```

Traducción de ADN a Proteína

```
var dna = "ATGGAAGTATTTAAAGCGCCACCTATTGGGATATAAG";
var protein = BiologicalSequenceAnalyzer.TranslateDnaToProtein(dna);
// Devuelve "Met-Glu-Val-Phe-Lys-Ala-Pro-Pro-Ile-Gly-Ile"
```

Identificación de Aminoácidos

```
var aminoAcid = BiologicalSequenceAnalyzer.IdentifyAminoAcid("AUG");
// Devuelve "Met"
```

Estructura del Proyecto

```
BioSequenceAnalyzer/ # Proyecto principal
```

Implementación

Clase BiologicalSequenceAnalyzer

Esta clase proporciona funcionalidades para analizar secuencias biológicas, identificando su tipo (ADN, ARN o proteína) y traduciendo secuencias de ADN a proteínas.

Enumeración SequenceType

```
public enum SequenceType { DNA, RNA, Protein, Unknown }
```

Define los posibles tipos de secuencias biológicas que el analizador puede identificar.

Método IdentifySequenceType

```
public static SequenceType IdentifySequenceType(string sequence)
```

Propósito: Identifica el tipo de secuencia biológica (ADN, ARN o proteína).

Lógica de funcionamiento:

- 1. Convierte la secuencia a mayúsculas y verifica si está vacía
- 2. Crea conjuntos de caracteres válidos para cada tipo de secuencia
- 3. Implementa un proceso de decisión en 5 pasos:
 - Rechaza mezclas que contengan tanto T como U
 - Verifica si es ADN puro (solo contiene A, C, G, T)
 - Verifica si es ARN puro (solo contiene A, C, G, U)
 - Verifica si es proteína (contiene caracteres de aminoácidos, incluyendo U para selenocisteína)
 - Retorna Unknown para cualquier otro caso

Método IdentifyAminoAcid

```
public static string IdentifyAminoAcid(string codon)
```

Propósito: Identifica el aminoácido correspondiente a un codón de 3 letras.

Características:

- Usa una tabla de código genético completo (diccionario)
- Soporta tanto ADN (T) como ARN (U)
- · Maneja codones inválidos o de longitud incorrecta
- Incluye los 3 codones STOP (TAA, TAG, TGA)

Método TranslateDnaToProtein

```
public static string TranslateDnaToProtein(string dnaSequence, bool includeStop = false)
```

Propósito: Traduce una secuencia de ADN a su correspondiente secuencia proteica.

Funcionamiento:

- 1. Divide la secuencia de ADN en codones de 3 nucleótidos
- 2. Para cada codón:
 - Usa IdentifyAminoAcid para obtener el aminoácido correspondiente
 - Maneja codones STOP según el parámetro includeStop
 - Detiene la traducción si encuentra un codón inválido
- 3. Retorna la secuencia proteica como cadena de aminoácidos separados por guiones

Parámetro opcional:

• includeStop: Controla si se incluyen los codones STOP en el resultado

Pruebas

Estructura de las Pruebas

Las pruebas están organizadas en regiones que cubren las diferentes funcionalidades del analizador:

- 1. Pruebas de Identificación de Tipo de Secuencia
- 2. Pruebas de Identificación de Aminoácidos
- 3. Pruebas de Traducción de ADN a Proteína
- 4. Pruebas de Casos Límite

1. Pruebas de Identificación de Tipo de Secuencia

```
[Theory]
[InlineData("ATGCGTA", BiologicalSequenceAnalyzer.SequenceType.DNA)]
[InlineData("AUCGAUCG", BiologicalSequenceAnalyzer.SequenceType.RNA)]
[InlineData("ACDEFGHIKLMNPQRSTVWY", BiologicalSequenceAnalyzer.SequenceType.Protein)]
[InlineData("ATGCGU", BiologicalSequenceAnalyzer.SequenceType.Unknown)] // Mezcla ADN/ARN
public void IdentifySequenceType_VariousSequences_ReturnsCorrectType(...)
```

Propósito: Verificar que el método IdentifySequenceType clasifica correctamente diferentes tipos de secuencias.

Casos probados:

- Secuencias puras de ADN (contienen solo A, C, G, T)
- Secuencias puras de ARN (contienen solo A, C, G, U)
- Secuencias de proteínas (contienen caracteres de aminoácidos)
- Secuencias mixtas inválidas
- Secuencias vacías o nulas

2. Pruebas de Identificación de Aminoácidos

```
[Theory]
[InlineData("ATG", "Met")] // ADN
[InlineData("AUG", "Met")] // ARN
[InlineData("TAA", "STOP")] // Codón de parada
public void IdentifyAminoAcid_ValidCodons_ReturnsCorrectAminoAcid(...)

[Theory]
[InlineData("XYZ")] // Codón inválido
[InlineData("AU")] // Muy corto
public void IdentifyAminoAcid_InvalidCodons_ReturnsInvalidCodon(...)
```

Propósito: Verificar la correcta traducción de codones a aminoácidos.

Casos probados:

- · Codones válidos de ADN y ARN
- Codones STOP
- Codones inválidos (caracteres incorrectos)
- · Codones de longitud incorrecta
- · Entrada nula

3. Pruebas de Traducción de ADN a Proteína

```
[Fact]
public void TranslateDnaToProtein_ValidDnaSequence_ReturnsCorrectProtein()
{
    var dna = "ATGGAAGTATTTAAAGCGCCACCTATTGGGATATAAG";
    var expected = "Met-Glu-Val-Phe-Lys-Ala-Pro-Pro-Ile-Gly-Ile";
    // ...
}

[Fact]
public void TranslateDnaToProtein_SequenceWithStopCodon_StopsTranslation()
{
    var dna = "ATGGATTGATAGCCGTA"; // Contiene TAG (STOP)
    var expected = "Met-Asp-STOP";
    // ...
}
```

Propósito: Verificar la traducción completa de secuencias de ADN.

Casos probados:

- Secuencias largas válidas
- Secuencias con codones STOP (con y sin inclusión del STOP)
- Secuencias cortas (longitud no divisible por 3)
- Secuencias vacías
- · Secuencias con caracteres inválidos

4. Pruebas de Casos Límite

```
[Fact]
public void IdentifySequenceType_LowerCaseInput_ReturnsCorrectType()
{
    var sequence = "atgcgta";
    // ...
}

[Fact]
public void TranslateDnaToProtein_LowerCaseInput_ReturnsCorrectProtein()
{
    var dna = "atggaagtatttaaagcgccacctattgggatataag";
    // ...
}
```

Propósito: Verificar el manejo correcto de casos especiales.

Casos probados:

- Entradas en minúsculas
- Conversión entre formatos (ADN/ARN)
- · Robustez frente a formatos inesperados

Pruebas con Archivos FASTA

```
[Fact]
public void IdentifySequenceType_FromMultipleFastaFiles_ValidProteinSequences()
{
    var fastaFolder = Path.Combine(Directory.GetCurrentDirectory(), "TestData");
    var fastaFiles = Directory.GetFiles(fastaFolder, "*.fasta");
    // ...
}
```

Propósito: Verificar el análisis de secuencias reales obtenidas de la base de datos RCSB PDB.

Características:

- Lee archivos FASTA del directorio TestData
- Verifica que todas las secuencias sean identificadas como proteínas
- Ignora las líneas de descripción (que comienzan con >)
- Concatena las líneas de secuencia para su análisis

Estructura del directorio de prueba:

```
TestData/
├── 4CiW_1.fasta # Ejemplo de archivo FASTA real
├── 4CS4_1.fasta # Otro ejemplo
└── ... # Más archivos de prueba
```

Cobertura de Pruebas

Las pruebas cubren:

• 100% de los casos de identificación de secuencias

- Todos los codones estándar del código genético
- · Casos válidos e inválidos
- Archivos reales en formato FASTA
- Comportamiento en condiciones límite

Ejecución de Pruebas

Para ejecutar las pruebas:

```
dotnet test
```

Evidencia de Pruebas Exitosas

Ejecución en Terminal

```
BioSequenceAnalyzer -> /home/leon/Documentos/UNSA/BIOINFORMATICA/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer.Tests -> /home/leon/Documentos/UNSA/BIOINFORMATICA/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenceAnalyzer/BioSequenc
```

Figura 1: Salida de consola mostrando 32 pruebas ejecutadas con 0 errores - verificación completa de todas las funcionalidades principales

Confirmación en Editor

Figura 2: Vista del editor con indicadores visuales de pruebas exitosas (ticks verdes) - validación durante el desarrollo

Conclusiones

1. El sistema identifica con precisión ADN, ARN y proteínas (incluyendo casos especiales) y traduce secuencias según estándares científicos, validado con pruebas y datos reales de RCSB PDB.

- 2. Implementación robusta con cobertura de pruebas del 100%, arquitectura modular y uso de xUnit, asegurando mantenibilidad y escalabilidad para futuras extensiones.
- 3. Base sólida para bioinformática, útil en educación e investigación, con potencial para integrar análisis de mutaciones o herramientas profesionales como BLAST.

License

This project is licensed under the MIT License - see the <u>LICENSE</u> file for details.