

---

Instituto Politécnico Nacional  
Escuela Superior de Cómputo  
Bioinformatics  
Aplicaciones de la  
Bioinformática.  
Tinoco Videgaray Sergio Ernesto  
Jorge Luis Rosas Trigueros  
Fecha de realización de la práctica:  
26/02/24  
Fecha de entrega del reporte:  
29/02/2

---

## 1. China

- MultiRNAmute:

Los programas java interactivos RNAmute y MultiRNAmute se desarrollaron para predecir mutaciones puntuales nocivas en secuencias de ARN, que provocan intencionadamente un reordenamiento conformacional global de la estructura secundaria de las moléculas de ARN funcionales y, por lo tanto, alteran su función. RNAmute fue diseñado para lidiar solo con mutaciones puntuales mediante fuerza bruta, mientras que la herramienta MultiRNAmute utiliza un enfoque eficiente para lidiar con mutaciones puntuales múltiples.

El enfoque utilizado en MultiRNAmute se basa en la estabilización de las soluciones de plegamiento de ARN subóptimas y/o la desestabilización de la estructura MFE óptima de la molécula de ARN de tipo salvaje. Ambos programas utilizan el paquete Vienna RNA para encontrar las estructuras secundarias de ARN óptimas y subóptimas (en el caso de MultiRNAmute). La principal limitación de ambos programas es su capacidad para predecir únicamente mutaciones de sustitución y estos programas no fueron diseñados para funcionar con mutaciones de eliminación o inserción. Con un enfoque eficiente, basado en soluciones de plegado subóptimas, para predecir múltiples mutaciones puntuales que consisten en eliminaciones, inserciones y mutaciones de sustitución. Todos los algoritmos de RNAmute se validaron en el TPP-riboswitch y algunos otros ARN funcionales.

- Detección de inhibidores de Sonic Hedgehog (Shh) en la vía de señalización de Hedgehog a partir de la base de datos de la medicina tradicional china (MTC) mediante un diseño de farmacóforo basado en estructuras

El cáncer colorrectal (CCR) es el segundo cáncer que más muertes provoca en el mundo. El desarrollo del CCR está estrechamente relacionado con la vía de señalización de hedgehog. La activación anormal de la vía iniciará la unión de Sonic Hedgehog (Shh) a Ptch1, que puede desencadenar el crecimiento de células anormales que causan el CCR. Se utilizaron compuestos de la Medicina Tradicional China (MTC) para inhibir Shh mediante un diseño de farmacóforo basado en estructuras. Esta investigación se inició encontrando la característica farmacófora de Shh y continuó con la simulación de acoplamiento de Shh con compuestos de MTC. Los tres mejores compuestos de TCM, que son TCM-8941, TCM-28794 y TCM-32808, brindan la mejor interacción de ligando y tienen la energía de enlace libre de Gibbs más baja. También tienen buenas propiedades farmacológicas que se han analizado utilizando Toxtree v2.6.13, SwissADME y admetSAR. Para futuras investigaciones, estos compuestos de la MTC pueden usarse como candidatos a fármacos en el cáncer colorrectal.

## 2. Portugal

- Extracción de interacciones entre sustancias químicas y proteínas de la literatura utilizando redes neuronales y representación de instancia estrecha:

La literatura científica contiene gran cantidad de información sobre genes, proteínas, sustancias químicas y sus interacciones. La extracción e integración de esta información en bases de conocimiento seleccionadas ayuda a los investigadores a respaldar sus resultados experimentales, lo que conduce a nuevas hipótesis y descubrimientos. Esto es especialmente relevante para la medicina de precisión, cuyo objetivo es comprender la variabilidad individual entre grupos de pacientes para seleccionar los tratamientos más adecuados. Por lo tanto, se requieren métodos para mejorar la recuperación y la extracción automática de relaciones de la literatura biomédica para recopilar información estructurada del creciente número de trabajos publicados.

En este proyecto, se utiliza un enfoque de aprendizaje profundo para extraer menciones de interacciones entre sustancias químicas y proteínas de artículos biomédicos, basado en varias mejoras en nuestra participación en la tarea BioCreative VI CHEMPROT. Un aspecto importante de este método es el uso de un modelo simple de aprendizaje profundo junto con una representación muy estrecha de las instancias de relación, utilizando solo hasta 10 palabras de la ruta de dependencia más corta y los respectivos bordes de dependencia. Para construir modelos de aprendizaje profundo se utilizan redes bidireccionales recurrentes de memoria a largo plazo o redes neuronales convolucionales.

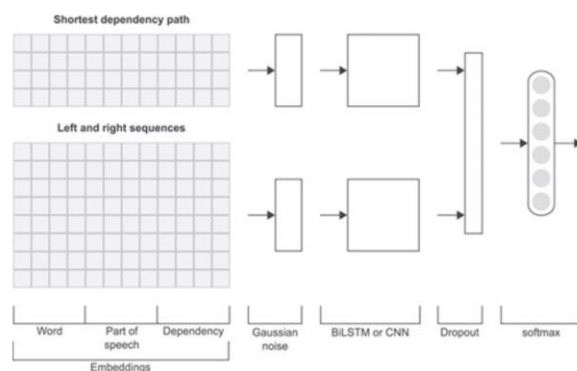


Figura 1. Arquitectura de la red neuronal recurrente-convolucional

### 3. MEXICO

- Secuencias acústicas en animales no humanos: revisión y prospecto del tutorial:

La comunicación acústica animal suele adoptar la forma de secuencias complejas, formadas por múltiples unidades acústicas distintas. Aparte del conocido ejemplo del canto de los pájaros, otros animales como insectos, anfibios y mamíferos (incluidos murciélagos, roedores, primates y cetáceos) también generan secuencias acústicas complejas. En ocasiones, como ocurre con el canto de los pájaros, el papel adaptativo de estas secuencias parece claro (por ejemplo, atracción de pareja y defensa territorial). Sin embargo, lo más frecuente es que los investigadores apenas hayan comenzado a caracterizar –y mucho menos a comprender– la importancia y el significado de las secuencias acústicas. Abundan las hipótesis, pero hay poco acuerdo sobre cómo deberían definirse y analizarse las secuencias. La revisión tiene como objetivo esbozar métodos adecuados para probar estas hipótesis y describir las principales limitaciones de nuestro conocimiento actual y futuro sobre cuestiones de secuencias acústicas. Esta revisión y prospecto es el resultado de un esfuerzo de colaboración entre 43 científicos de los campos del comportamiento animal, la ecología y la evolución, el procesamiento de señales, el aprendizaje automático, la lingüística cuantitativa y la teoría de la información, que se reunieron para un taller en 2013 titulado "Análisis de secuencias vocales". en animales'. El objetivo es presentar no sólo una revisión del estado del arte, sino proponer un marco metodológico que resuma lo que se sugiere como las mejores prácticas para la investigación en este campo, en todos los taxones y en todas las disciplinas. También se proporciona una introducción estilo tutorial a algunos de los enfoques algorítmicos más prometedores para analizar secuencias.

Se dividió la revisión en tres secciones:

- Identificar las distintas unidades de una secuencia acústica
- Describir las diferentes formas en que la información puede estar contenida dentro de una secuencia.
- Analizar la estructura de esa secuencia.

Cada una de estas secciones se subdivide para abordar las preguntas y enfoques clave en esa área.

---

#### Conclusiones y recomendaciones.

Las aplicaciones de la bioinformática abarcan múltiples áreas tanto en investigación como en implementaciones tecnológicas, algunas de las cuales se complementan con otras áreas como el aprendizaje de máquina, el procesamiento de señales, el procesamiento de lenguaje natural, etc.

La bioinformática es un campo de estudio que promete revolucionar el mundo de las ciencias biológicas y si se aplica de forma correcta, tendrá el potencial de dar solución a muchas enfermedades y padecimientos en la sociedad.

---

## Referencias.

Zhang, F. Cai, Z. Skums, P. Zhang S. (2018). "Bioinformatics Research and Applications" R. Antunes and S. Matos

"Extraction of chemical–protein interactions from the literature using neural networks and narrow instance representation".

Kershenbaum, A., Blumstein, D., Roch, M., Akçay, Ç., Backus, G., Bee, M., Bohn, K., Cao, Y., Carter, G., Cäsar, C., Coen, M., Deruiter, S., Doyle, L., Edelman, S. (2019). "Acoustic sequences in non-human animals: A tutorial review and prospectus"

Dagoberto Armenta-Medina, Christian Díaz de León-Castañeda, Brenda Valderrama-Blanco, PLoS One. 2020; 15(12): e0243531. Published online 2020 Dec 15.

---