

---

## PROYECTO 1

---

202004743 – Mariana Elizabeth Sulecio Rosales

### Resumen

El proyecto aborda la implementación de un sistema computacional para la simulación de el experimento de eliminar células cancerígenas mediante reacciones entre proteínas. Se desarrollo en Python, haciendo uso de TDA's. Posee gran relevancia en la actualidad, aplicando la informática al campo de la medicina, ofreciendo soluciones innovadoras para problemas complejos de la salud. El impacto técnico radica en la eficiencia de los algoritmos implementados y el impacto social se refleja en las posibles aplicaciones de estas simulaciones en el tratamiento contra el cáncer, reduciendo costos de investigación al minimizar experimentos físicos. En resumen, se destaca la implementación de TDA's personalizados, dando un mayor control sobre la gestión de memoria y el rendimiento. Además, se evidencia que la visualización de datos mediante herramientas como Graphviz facilita significativamente la interpretación de resultados experimentales, permitiendo a los investigadores tomar decisiones más informadas sobre la efectividad de los medicamentos simulados mientras que se ahorra tiempo.

### Palabras clave

Estructuras de datos, Programación orientada a objetos, Simulación médica, Proteínas, Células cancerígenas.

### Abstract

*The project addresses the implementation of a computational system for simulating the experiment of eliminating cancer cells through protein interactions. It was developed in Python, utilizing TDA's (Topological Data Analysis). It holds significant relevance today by applying computer science to the field of medicine, offering innovative solutions to complex health problems. The technical impact lies in the efficiency of the implemented algorithms, while the social impact is reflected in the potential applications of these simulations in cancer treatment, reducing research costs by minimizing physical experiments. In summary, the implementation of customized TDA's stands out, providing greater control over memory management and performance. Additionally, it is evident that data visualization using tools like Graphviz significantly facilitates the interpretation of experimental results, enabling researchers to make more informed decisions about the effectiveness of simulated drugs while saving time.*

### Keywords

*Data structures, object-oriented programming, medical simulation, proteins, cancer cells.*

Introducción

La aplicación de la computación en los procesos biológicos representa un campo de creciente relevancia en la aplicación de la informática a la medicina. Este proyecto explora el desarrollo de un sistema que simula experimentos de eliminación de células cancerígenas mediante reacciones entre proteínas a través de la implementación de TDA's.

Este proyecto analiza la implementación de listas enlazadas y matrices para representar tejidos biológicos y sus interacciones. Su enfoque radica en la capacidad para modelar sistemas complejos con estructuras optimas, evitando las limitaciones predefinidas del lenguaje.

El propósito es demostrar como la implementación correcta de estructuras de datos impacta directamente en la precisión de las simulaciones médicas.

Desarrollo del tema

La simulación de tejidos biológicos es esencial en la investigación médica y la bioingeniería. Para modelar estas estructuras, se emplean TDAs como listas enlazadas y matrices tal y como se aplicó en la práctica. La implementación de matrices basadas en listas enlazadas permite la representación eficiente de células en una rejilla, facilitando la simulación del comportamiento de los tejidos.

Estructura de Datos	Aplicación
Listas	Almacenamiento de filas.
Matrices	Simulación de células

Tabla 1: Estructuras de datos utilizadas

En el contexto de la simulación de tejidos biológicos, las estructuras lineales como listas enlazadas ofrecen ventajas significativas sobre los arreglos convencionales. Las listas enlazadas permiten una gestión dinámica de la memoria, característica esencial cuando se modelan sistemas que evolucionan temporalmente

Subtemas:

- 1. Fundamentos teóricos de las estructuras de datos abstractas
- 2. Algoritmos para la Simulación de Reacciones entre Proteínas.
- 3. Interpretación de las proteínas.
- 4. Visualización y análisis de resultados experimentales.

1. Fundamentos teóricos de las estructuras de datos abstractas.

Las estructuras de datos abstractas (TDA) constituyen un paradigma fundamental en la ciencia de la computación, permitiendo la representación y manipulación de datos de manera independiente de su implementación subyacente. Según Cormen et al. (2022), "un tipo de dato abstracto es un modelo matemático junto con un conjunto de operaciones definidas en ese modelo" (p. 87). Esta abstracción facilita el desarrollo de soluciones computacionales complejas, como la simulación de sistemas biológicos.

En el contexto de la simulación de tejidos biológicos, las estructuras lineales como listas enlazadas ofrecen ventajas significativas sobre los arreglos convencionales. Las listas enlazadas permiten una gestión dinámica de la memoria, característica esencial cuando se modelan sistemas que evolucionan temporalmente, como las reacciones entre proteínas en tejidos cancerígenos.

2. Algoritmos para la Simulación de Reacciones entre Proteínas.

El análisis de reacciones entre proteínas es fundamental para comprender procesos bioquímicos. La implementación de las listas en el proyecto 1 permite almacenar combinaciones de proteínas reactivas y determinar si una reacción ocurrirá. Utilizando estructuras de listas enlazadas, el sistema

verifica interacciones y simula cambios en la rejilla celular.

Uno de los algoritmos implementados sigue la lógica de marcado de pares reactivos:

- 1. Se recorre la matriz en busca de pares de proteínas.
- 2. Si una pareja es reactiva, ambas proteínas se marcan como inertes ('X').
- 3. Se colapsan filas y columnas eliminando células inertes.

El núcleo del sistema es el algoritmo que simula las reacciones entre proteínas adyacentes en el tejido tiene una complejidad temporal  $O(n^2)$ . En aplicaciones biológicas, la eficiencia algorítmica debe equilibrarse con la fidelidad del modelo.

3. Interpretación de las proteínas

En los experimentos de simulación de reacciones entre proteínas, se utilizan códigos de una letra para representar aminoácidos. La siguiente tabla muestra la correspondencia entre los aminoácidos y sus códigos:

Aminoácido	Código de 1 letra
Alanina	A
Arginina	R
Asparagina	N
Ácido aspártico	D
Cisteína	C
Glutamina	Q
Ácido glutámico	E
Glicina	G
Histidina	H
Isoleucina	I
Leucina	L

Lisina	K
Metionina	M
Fenilalanina	F
Prolina	P
Serina	S
Treonina	T
Triptófano	W
Tirosina	Y
Valina	V

Tabla 2: Interpretación de proteínas.

Estos aminoácidos juegan un papel crucial en la bioquímica celular, ya que forman las proteínas responsables de procesos metabólicos, estructurales y funcionales dentro del organismo. En las simulaciones, la interacción entre estos aminoácidos permite evaluar el comportamiento de proteínas en un ambiente controlado, facilitando el diseño de medicamentos y tratamientos personalizados.

4. Visualización y análisis de resultados experimentales

La interpretación de los resultados de la simulación se facilita mediante la visualización gráfica utilizando Graphviz. Esta herramienta permite representar el estado inicial y final del tejido, así como los estados intermedios durante la ejecución paso a paso.

Para poder hallar la efectividad del experimento propuesto se utilizó la siguiente formula:

$$Efectividad = \frac{CI}{CT} * 100\%$$

donde:

- Efectividad = porcentaje de efectividad del medicamento
- CI = número de células transformadas a estado inerte
- CT= número total de células en el tejido

Según la ecuación, se clasificaron los tres posibles resultados:

- Medicamento exitoso:  $30\% \leq \text{Efectividad} \leq 60\%$
- Medicamento no efectivo:  $\text{Efectividad} < 30\%$
- Medicamento fatal:  $\text{Efectividad} > 60\%$

## Conclusiones

El uso de tipos de datos abstractos implementados mediante listas enlazadas proporciona una flexibilidad superior a las estructuras nativas de Python, permitiendo una representación más precisa de los tejidos biológicos y sus interacciones. Esta ventaja se manifiesta especialmente en la capacidad de adaptar las estructuras a las necesidades específicas del problema.

El algoritmo iterativo para la simulación de reacciones entre proteínas demuestra ser eficaz para modelar la propagación de células inertes en el tejido. La implementación paso a paso permite observar la evolución temporal del sistema, proporcionando insights valiosos sobre los mecanismos de acción de los medicamentos simulados.

Finalmente, la clasificación de resultados basada en el porcentaje de células inertes ofrece un marco interpretativo claro para evaluar la efectividad de diferentes combinaciones de proteínas reactivas. Esta metodología podría extenderse a otros contextos de

investigación biomédica, contribuyendo al desarrollo de tratamientos más efectivos contra el cáncer.

Este trabajo demuestra que la intersección entre la ciencia de la computación y la biología molecular puede generar herramientas poderosas para la investigación médica, destacando la importancia de la programación orientada a objetos y las estructuras de datos personalizadas en la simulación de sistemas biológicos complejos.

## Referencias bibliográficas

Cormen, T. H., Leiserson, C. E., Rivest, R. L., & Stein, C. (2022). *\*Introduction to Algorithms\** (4th ed.). MIT Press.

Goodrich, M. T., Tamassia, R., & Goldwasser, M. H. (2020). *\*Data Structures and Algorithms in Python\**. John Wiley & Sons.

Martínez, A., & López, R. (2021). Simulación computacional de interacciones proteicas en tejidos cancerígenos. *\*Revista Latinoamericana de Biotecnología\**