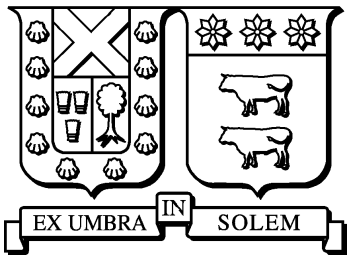
UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA

SANTIAGO – CHILE




# "ALGORITMO PARA EL CÁLCULO DE FRAGMENTOS DE PROTEÍNAS EN LOS ORGANISMOS SECUENCIADOS"

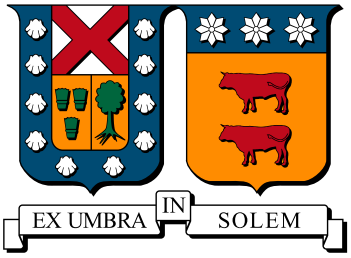
FELIPE NICOLÁS ARAYA BARRERA

MEMORIA DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL INFORMÁTICO

PROFESOR GUÍA: LIOUBOV DOMBROVSKAIA

OCTUBRE 2017

**UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA**
**DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA**
**SANTIAGO – CHILE**




# "ALGORITMO PARA EL CÁLCULO DE FRAGMENTOS DE PROTEÍNAS EN LOS ORGANISMOS SECUENCIADOS"

**FELIPE NICOLÁS ARAYA BARRERA**

**MEMORIA DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL INFORMÁTICO**

**PROFESOR GUÍA: LIOUBOV DOMBROVSKAIA**
**PROFESOR CORREFERENTE: DIEGO ARROYUELO BILLIARDI**

**OCTUBRE 2017**

# Agradecimientos

Se escribirán los agradecimientos una vez este documento haya sido terminado.

# Dedicatoria

Se escribirá la dedicatoria una vez este documento haya sido terminado.

# Resumen

Se completará este capítulo una vez que el cuerpo de este trabajo haya finalizado.

# Abstract

Same thing as the previous section.

# Índice de Contenidos

# Índice de cuadros

# Índice de figuras

# Glosario

# Introducción

Para el actual documento, las razones que motivaron al alumno presente a realizar la investigación de su tesis son la de comenzar a entrar en una rama que en los últimos años ha tomado bastante importancia en la informática, conocido como la *Bioinformática* [4], la cual aplica las tecnologías computacionales contemporáneas a datos biológicos que pueden pertenecer a estructuras como ADN, proteínas, entre otras estructuras biológicas complejas y los cuales están a la mano del ser humano como archivos de cadenas de secuencias (en varios formatos) y que pueden ser usados a voluntad.

En el caso puntual de esta memoria, se trabajarán con proteínas (compuestas de combinaciones de 20 aminoácidos) que están distribuidas en un *dataset* cuyo formato del archivo está en **.fasta**, donde cada cadena de polipéptido está compuesto por un ID o código identificador, su nombre taxonómico y su posterior secuencia de aminoácidos.

Hablando de las proteínas, se han realizado numerosos análisis [5, 6] en bases de datos de secuencias con respecto a la cantidad de aminoácidos que se encuentran en total en este tipo de estructuras, distribuyéndolos según su tamaño o para determinar cuál es el aminoácido que más aparece en este tipo de archivos; también según el año de descubrimiento de las proteínas o el tipo de proteína. Todo esto usando fuentes como UniProt y EROP-Moskow.

Como una derivación directa, existe una variabilidad casi infinita de combinaciones llamadas residuos (fragmentos) de aminoácidos (*amino acid residues* o AAR de manera simplificada en inglés) que se determinan según su tamaño $k$ y por las posibles opciones a obtener, que sigue la regla de combinatoria $20^k$ ya que son 20 los animoácidos base que existen en la

actualidad (para dipéptidos serían $20^2 = 400$, para tripéptidos serían $20^3 = 8000$ y así sucesivamente).

Lo que se pretende realizar para esta memoria consiste en obtener de un conjunto predeterminado de proteínas el número máximo de fragmentos de péptidos (AAR) que existen asociado a un valor $k$ determinado, donde $k$ se ubicará en el intervalo entre 2 hasta 50, y en base a aquello obtener y determinar para cada $k$ cuáles son los fragmentos de aminóácidos que más se repiten para posteriormente realizar un análisis tanto matemático y biológico de los resultados obtenidos. Para realizar esta tarea se usará como *dataset* la base de datos de proteínas de SwissProt (550100 proteínas) y de TrEMBL (88032926 proteínas).

A partir de esto las implementaciones de código para trabajar estos archivos fueron realizados en los lenguajes de programación **C++** y **Python**, con diferentes finalidades que serán explicados a medida que se avance en el documento.

# Capítulo 1

# Definición del Problema

## 1.1. Información previa a considerar

Para entrar de lleno en la tema, es necesario conocer de antemano varios aspectos básicos de la biología.

### 1.1.1. Biomoléculas

Cada vez que se habla de la biología, este concepto se relaciona directamente con la ciencia que estudia a los seres vivos. Ahora bien, las estructuras o compuestos que constituyen una parte esencial de los seres vivos son conocidas como **biomoléculas**. Estas biomoléculas están principalmente constituidas por elementos químicos como el carbono (C), hidrógeno (H), oxígeno (O), nitrógeno (N), fósforo (P) y azufre (S) [7] y se pueden clasificar en biomoléculas inorgánicas, que se encuentran tanto en seres vivos como en los cuerpos inertes, no obstante son imprescindibles para la vida; y las biomoléculas orgánicas, que son sintetizadas por los seres vivos y tienen una estructura con base en carbono. Estas biomoléculas orgánicas se pueden separar en 4 grandes grupos:

1. Glúcidos (hidratos de carbono o carbohidratos): son la fuente de energía primaria que

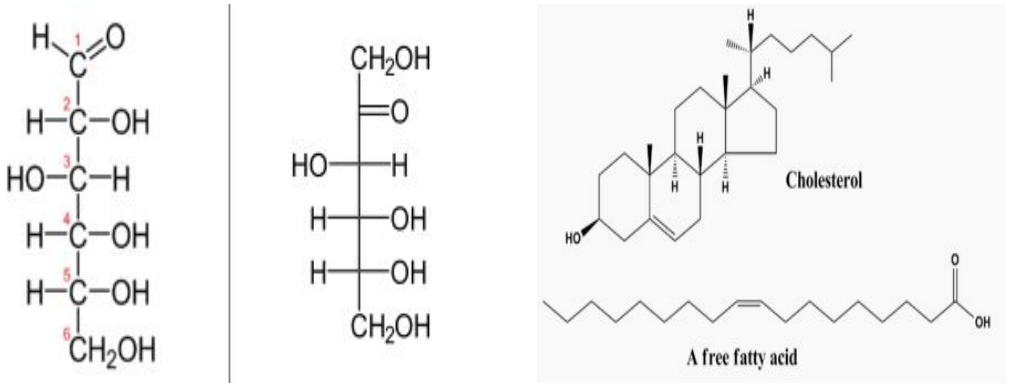
utilizan los seres vivos para realizar sus funciones vitales. Los ejemplos más conocidos son la glucosa, el almidón y el glucógeno.

2. Lípidos: conforman el principal almacén de energía de los animales y desempeñan funciones reguladores de enzimas y hormonas.

3. Ácidos nucleicos: El ácido desoxirribonucleico y el ácido ribonucleico, mayormente conocidos como ADN (DNA) y ARN (RNA y sus derivados) desarrollan posiblemente la función más importante para la vida: contener, de manera codificada, las instrucciones necesarias para el desarrollo y funcionamiento de la célula. El ADN tiene la capacidad de replicarse, transmitiendo así dichas instrucciones a las células hijas que heredarán la información.

4. Proteínas: poseen la mayor diversidad de funciones que realizan en los seres vivos; prácticamente todos los procesos biológicos dependen de su presencia y/o actividad. Son proteínas casi todas las enzimas, catalizadores de reacciones metabólicas, hemoglobina, anticuerpos, entre otros. Su unidad base es el *aminoácido*, por el cual se van formando los péptidos según la cantidad de unidades bases enlazadas.

Dentro de estas biomoléculas, el análisis detallado de los carbohidratos y los lípidos depende en demasía de su estructura química (elementos químicos asociados y tipo de enlaces entre ellos), por lo mismo es una materia más ligada a los químicos (ver Figura 1.1).

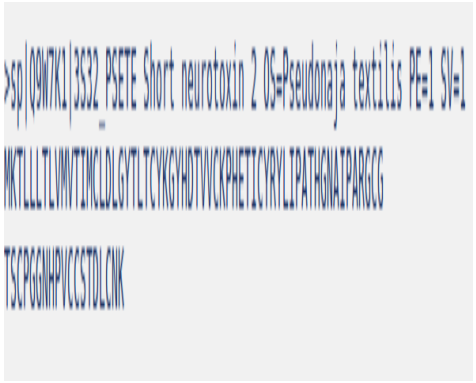



(a) Glúcidos (glucosa y fructosa) (b) Lípidos (colesterol y un ácido graso)

Figura 1.1: Estructura química de los carbohidratos y lípidos.

Sin embargo, el ADN y los polipéptidos poseen unidades base que pueden ser codificadas como letras, por consiguiente pueden ser secuenciados como *cadenas de strings* y en donde los avances computacionales y la evolución informática toman una importante relevancia (ver Figura 1.2).


(a) Cadena de ADN aleatoria



(b) Cadenas $\alpha$ y $\beta$ de hemoglobina bovina

Figura 1.2: Biomoléculas de ADN y péptidos llevadas a cadenas de strings.

Con respecto a estas 2 últimas estructuras, la diferencia visual más notoria radica en la cantidad de diferentes letras (strings) que las componen, para el ADN son 4 [8] y son denominadas **bases nitrogenadas** que son las siguientes:

1. Adenina
2. Timina
3. Citosina
4. Guanina

Para las proteínas, su elemento básico, como ya se mencionó anteriormente es el **aminoácido**, pero ahora se adentrará en más detalle sobre esta molécula.

### 1.1.2. Aminoácidos

Continuar

# Capítulo 2

# Estado del Arte

# Capítulo 3

# Propuesta

# Capítulo 4

# Implementación

# Conclusiones

# Bibliografía


[1] Michel Goossens, Frank Mittelbach, and Alexander Samarin. *The LaTeX Companion*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1993.

[2] Albert Einstein. *Zur Elektrodynamik bewegter Körper*. (German) [*On the electrodynamics of moving bodies*]. Annalen der Physik, 322(10):891–921, 1905.

[3] Knuth: Computers and Typesetting,
`http://www-cs-faculty.stanford.edu/~uno/abcde.html`

[4] Rafael Lahoz-Beltrá. *BIOINFORMÁTICA, simulación, vida artificial e inteligencia artificial*. Ediciones Díaz de Santos S.A., Madrid, España, 2004.

[5] Bruce C. Orcutt, Winona C. Barker. *Searching the protein sequence database*. National Biomedical Research Foundation, Georgetown University Medical Center, Washington, D.C., *Bulletin of Mathematical Biology*, 46(4):545-552, 1984.

[6] Alexander A. Zamyatnin. *The Features of an Array of Natural Oligopeptides*. Bakh Institute of Biochemistry, Russian Academy of Sciences, Moskow, Russia; Departamento de Informática, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile, *Neurochemical Journal*, 10(4):249-257, 2016.

[7] Wikipedia, Definición de biomolécula,
`https://es.wikipedia.org/wiki/Biomolécula`.