Propuesta de Trabajo Final Para la Carrera de Licenciatura en Ciencias de la Computación

Franco G. Riberi

19 de marzo de 2012

Título: RNAemo.

Director: Laura Tardivo.

Co-director: Daniel Gutson.

Co-director: Guillermo Biset.

Tesista: Franco Gaspar Riberi.

1. Descripción del problema

La bioinformática es una disciplina dedicada al análisis de elementos biológicos utilizando la informática como herramienta principal para generar simulaciones, probar teorías, realizar cálculos mas complejos, etcétera. En particular una de las áreas estudiada es la virología, la cual estudia la acción de un virus y cómo pueden ser aplicados ciertos fármacos para su tratamiento.

Este proyecto nace como sugerencia de $FuDePAN^1$. El principal objetivo es contrastar una teoría postulada y encomendada por el Dr. Roberto

 $^{^1{\}rm Fundación}$ para el desarrollo de la programación en Ácidos Nucleícos. http://www.fudepan.org.ar/

Daniel Rabinovich², que involucra principalmente la molécula de RNA³.

Dado un conjunto de small-RNA $_s^4$ y una colección de RNA $_m$ de un determinado virus, dado que hay un RNA $_m$ por cada gen, determinar si existen small-RNA $_s$ que se van a pegar al RNA $_m$. Luego contabilizar la cantidad de small-RNA $_s$ que se pegan tanto a la secuencia de RNA $_m$ original como a la secuencia complementaria. De manera similar, recorrer el degradé de deshumanización total a humanización total 5 contabilizando la cantidad de small-RNA $_s$ que se pegan. Discriminar en cuanto a la célula.

Que se pegue o no un small-RNA_s a un determinado RNA_m involucra distintas reglas, siendo la más importante la complementariedad de bases. Pero además, existen otras tales como la estructura secundaria de la molécula.

Dadas estas dos reglas, la cuantificación de small-RNA $_s$ se determinará teniendo en cuenta:

- 1. Complementariedad.
- 2. Estructura secundaria.

Determinar el impacto de la estructura secundaria puede dar respuesta a lo siguiente:

- 1. Estabilidad del RNA_m: $\Delta(G)$. (Cantidad de bases apareadas o desapareadas).
- 2. Unión entre m_i RNA con RNAm. (miRNA / RNAm).
- 3. Estabilidad de (miRNA / RNAm). Es decir, cuan buena es la unión según la estructura secundaria.

A partir de las conclusiones obtenidas, se podrá diseñar RNA que expresen secuencias sensibles al modificar un factor como la temperatura. Las utilidades pueden ser múltiples, desde el diseño de vacunas hasta un potencial uso tanto en investigación como en industria.

²Miembro del INBIRS(Instituto Biomedico en Retrovirus y SIDA). Anteriormente CNRS, Centro Nacional de Referencia para el SIDA(Departamento Microbiología UBA). Profesor Titular de Virología (Departamento Ciencias Biológicas, CAECE). Colaborardor de *FuDePAN*.

³Ácido Ribonucleico. Es un tipo de ácido nucleico compuesta por nucléotidos esencial para la vida.

 $^{^4}$ Moléculas de RNA muy pequeñas, dentro de las cuales se encuentra la $_{mi}$ RNA, $_{si}$ RNA, entre otras.

⁵La deshumanización total y humanización total refiere a reemplazar nucleótidos en los tripletes que forman la secuencia de RNA. La diferencia radica en si los tripletes mutados son los preferenciales o no.

El sistema será desarrollado utilizando el framework FuD^6 para el desarrollo de forma distribuída.

2. Recursos

Para la obtención del material bibliográfico se cuenta con la biblioteca de la Universidad Nacional de Río Cuarto en conjunto con la amplia cantidad de información que se puede encontrar en Internet y la bibliografía disponible en el Departamento de Computación mediante suscripciones a publicaciones científicas.

Además de contar con todo el material bibliográfico, se contará con un equipo interdisciplinar de trabajo, conformado por profesionales de las diferentes áreas involucradas, tanto Biologá como Computación.

La redacción en formato digital de la tesis se llevará cabo mediante la utilización del procesador de textos LATEX. El sistema operativo a utilizar será GNU/Linux y el producto final deberá ser software libre (bajo licencia GPL [5], versión 3 o superior).

3. Resultados esperados

Se espera obtener un gráfico con resúmenes estadísticos a través del cual se podrá determinar ciertas conclusiones según la tendencia de las curvas.

Referencias

- [1] G. Biset, D. Gutson, and M. Arroyo, "A framework for small distributed projects and a protein clusterer application", 2009.
- [2] G. Biset, D. Gutson, and M. Arroyo, "Fud: Design and implementation of a framework for small distributed applications", 2009.
- [3] B. Meyer, "Object-Oriented Software Construction", Second Edition, Santa Barbara: Prentice Hall Professional Technical Reference, 1997.
- [4] G. Booch, J. Rumbaugh, and I. Jacobson, "Unified Modeling Language User Guide", Second Edition, 2005.

⁶FuDePAN Ubiquitous Distribution[1]. http://code.google.com/p/fud/

- [5] GNU General Public License. http://www.gnu.org/licenses/
- [6] H. Curtis, N. Sue Barnes, A. Schnek and G. Flores, "Biología", Editorial Médica Panamericana S.A, 2006, ISBN: 950-06-0423-X.
- [7] B. Pierce, "Genética. Un enfoque conceptual", Tercera Edición, Editorial médica panamericana S.A, ISBN: 978-84-9835-216-0.
 - [8] A. Blanco, "Química Biológica", Séptima Edición, Editorial El Ateneo.