Interfaz de programación de aplicaciones (API) e Interfaz gráfica (GUI) para algoritmos de String­Matching.

Resumen:

Una de la tareas más frecuentes en la biología molecular es el análisis de secuencias (ácido desoxirribonucleico y/o aminoácidos). El fin de dicho análisis es encontrar características, intrínsecas en las secuencias, que permitan determinar si dicha secuencia tiene alguna función biológica o no. Dicho análisis puede ser abordado por un área de la ciencias computacionales conocido como Bioinformática.

El presente proyecto modular tiene como objetivo desarrollar una API, utilizando el paradigma orientada a objetos, que permita a los bioinformáticos construir componentes de software para el análisis de secuencias, utilizando algoritmos de string-matching. Además, con el fin de que esta herramienta sea utilizada por profesionales del área de biología molecular (sin conocimientos de programación), se desarrollará una interfaz gráfica de usuario (GUI) que utilice el API antes mencionada.

Antecedentes:

La bioinformática es la ciencia que se encarga de aplicar métodos computacionales para hacer descubrimientos biológicos. Se trata de un campo interdisciplinario que engloba la biología, ciencias de la computación, matemáticas y estadística.

[1]

Existen diferentes algoritmos computacionales aplicados para el análisis de secuencias por ejemplo String-matching, entre los que se encuentran alineamiento de secuencias, memorias asociativas, redes neuronales, entre otros, los cuales sirven a diversos propósitos como clasificación de proteínas, identificación de genes, etc.

[1, 3].

String-matching busca encontrar las ocurrencias de un patrón determinado dentro de una secuencia de caracteres, dicha búsqueda puede tener como objetivo encontrar ocurrencias de una cadena específica, lo que se conoce como *exact matching,* o un conjunto de cadenas que cumplan con un criterio determinado, posiblemente mediante expresiones regulares, lo que se conoce como *inexact matching.*

[2]

Desde un punto de vista computacional, las secuencias de ADN pueden ser vistas de un modo más abstracto como cadenas de caracteres este enfoque nos permite traducir problemas de bioinformática a problemas de *string-matching.*

Existen diferentes algoritmos para String-matching como Z-algorithm, set matching using keyword trees, suffix trees, suffix arrays que ayudan a resolver problemas como longest common substring, k-mismatches, entre otros.

[2]

Nosotros nos enfocaremos en algoritmo1, algoritmo2.

Actualmente existen diferentes API’s para el análisis de secuencias, algunos ejemplos son BioPerl, BioPhyton, BioJava, Bioc++, SeqAn entre otros. Algunos de éstos no fueron modelados utilizando el paradigma orientado a objetos (BioPerl, BioPhyton, BioJava, Bioc++) [Verificar si esto es cierto: me parece que sí son orientados a objetos]. En los casos antes mencionados, el principal objetivo fue el de mantener un mejor desempeño y eficacia de los algoritmos por sobre la facilidad en la construcción de nuevos componentes de software; la razón de esto último es que el paradigma orientado a objetos implicaría una disminución en el eficiencia de los algoritmos.

Objetivos:

1. Objetivo general: Desarrollar una biblioteca de funciones con utilidades especialmente diseñadas para trabajar con secuencias de ADN así como un entorno de trabajo que con la capacidad de hacer uso de dichas funciones de manera intuitiva y visual.
2. Objetivos específicos: La biblioteca de funciones será escrita con el propósito de que se utilizada para la implementación de nuevos programas de análisis y alineamiento de secuencias. Por otro lado el entorno de trabajo visual tiene como objetivo facilitar las tareas cotidianas de aquellos que trabajen usualmente con los algoritmos proporcionados por la biblioteca.
3. Productos:

* El primer producto es la biblioteca de funciones junto con su documentación correspondiente. La biblioteca estará escrita en el lenguaje C++ para mantener un diseño intuitivo orientado a objetos y al mismo tiempo conseguir un manejo eficiente de los recursos computacionales disponibles. Se procurará que la biblioteca esté lo más completa posible y los algoritmos sean eficientes tanto en tiempo como en memoria. Además para facilitar la ampliación y mejora de esta API, esta será de código abierto.
* El segundo producto es un entorno de trabajo visual basado en el IDE “Eclipse”, el cuál tendrá las funcionalidades necesarias para hacer un uso completo de las funciones en la API antes mencionada de una manera intuitiva y que permita trabajar con distintos formatos de archivos como *.gb* y *.fasta*. Este programa será también de código abierto.

Metodología:

El primer paso es investigar los algoritmos y técnicas de programación que se utilizan en el alineamiento de secuencias y otros problemas similares del campo al que se dedica este proyecto, para luego identificar aquellos que deban codificarse e integrarse en nuestra API.

Una vez identificados los algoritmos que se deben incluir es estudiar cada uno de ellos para entender su complejidad computacional y ser capaz de implementarlos.

El siguiente paso es hacer el diseño y la documentación de la biblioteca, pensando en las interfaces y las clases que serán necesarios, a partir de este punto tendremos en cuenta los detalles de la implementación.

Después de eso se procederá a la codificación, es decir, a la implementación de las interfaces. Con este paso realizado solamente resta publicar la biblioteca en Internet.

En el caso del entorno de trabajo para investigadores el primer paso es el diseño del sistema teniendo en cuenta la comunicación con API y pensando en cuál es la forma de hacer uso de ella de una manera sencilla e intuitiva.

A partir del diseño se llevará a la fase de desarrollo del entorno de trabajo y será publicado también en Internet.

Justificación:

Este proyecto se lleva a cabo con la finalidad de integrar un entorno de trabajo en dos niveles diferentes: 1) nivel *intermedio* orientado a desarrolladores de aplicaciones del área de bioinformática; y 2) nivel *alto* una interfaz gráfica de usuario, para especialistas y estudiantes del campo de la biología molecular, para que tenga herramientas (i.e. algoritmos de string-matching) que faciliten su trabajo. Además, dicha interfaz gráfica tendrá la facilidad de ampliarse a través de componentes de software conocidos como plugins.

Prototipo:

Referencias:

1. Baldi, P. & Brunak, S. (1998) *Bioinformatics: the machine learning approach.* MIT Press, Cambridge.
2. Haubold B. & Wiehe, T . (2006). *Introduction to Computational Biology: An Evolutionary Approach*. Alemania: Birkäuser.
3. Mount, D. W. (2004). *Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis*. (2da ed.) New York: Cold Spring Harbor Laboratory Press.

Firmas: El documento será firmado al calce por el solicitante y el asesor.