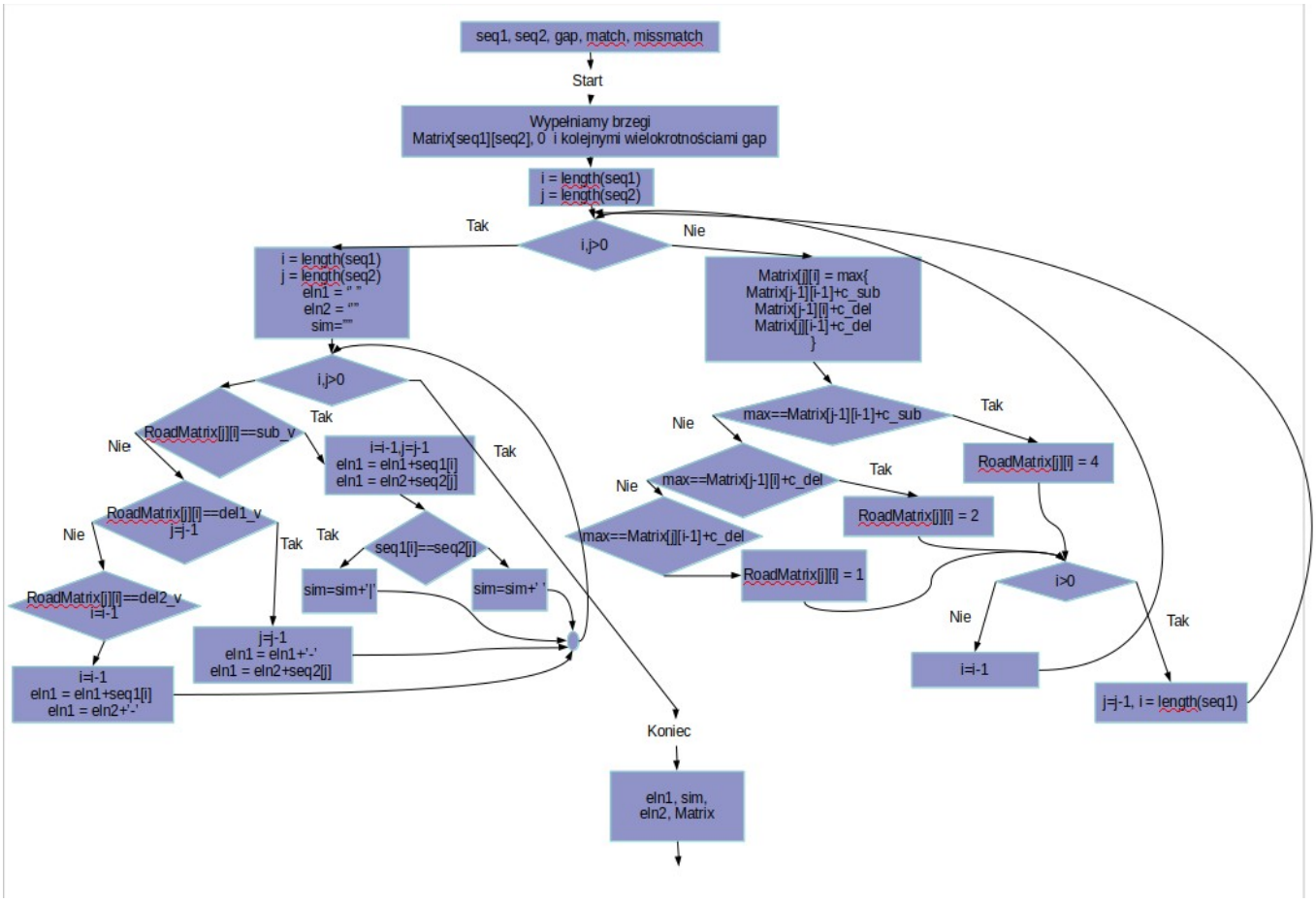
Bioinformatyka, zadanie nr2,
Dopasowanie Globalne
Anna Lasota 236727

1. Schemat blokowy algorytmu dopasowania globalnego:



2. Analiza złożności:

a) Obliczeniowej

```
@classmethod  #25+(s1+1)*(seq2+1)*2+16*s1+15*s2+s1*(23*s2+2)

def sequence_match(self, sequence1, sequence2):
    self.sequence1 = sequence1                          # 1 przypisanie (1)
    self.sequence2 = sequence2                          # 1 przypisanie (1)
    matrix = numpy.zeros((len(sequence2) + 1, len(sequence1) + 1), dtype="int")
#(seq1+1)*(seq2+1) przypisań
    roadMatrix = numpy.zeros((len(sequence2) + 1, len(sequence1) + 1),
dtype="int")         #(seq1+1)*(seq2+1) przypisań
    for i in range(len(sequence1) + 1):
        matrix[0][i] = i * self.gap           #s1 mnożeń, s1 przypisań  = 2*s1
    for j in range(len(sequence2) + 1):       #s2 mnożeń, s2 przypisań  = 2*s2
        matrix[j][0] = j * self.gap
    for j in range(1, matrix.shape[0]):       #s1 wykonań ciała pętli, s1+1
sprawdzenia warunku, 1 inicjalizacja licznika
        for i in range(1, matrix.shape[1]):   #s2 wykonań ciała pętli, s2+1
sprawdzenia warunku, 1 inicjalizacja licznika
```

```
            self.get_score(i, j, matrix, roadMatrix)
#wykonanie metody  (22)
    coords = self.get_path(roadMatrix, sequence1, sequence2)     # 1
przypisanie + wykonanie metody 8+seq1+seq2+(seq1+seq2+1)*12
    return coords, matrix
@classmethod #(22)
def get_score(self, i, j, matrix, roadMatrix):
    substitution = matrix[j - 1][i - 1] + self.similarity(self.sequence2[j - 1],
self.sequence1[i - 1]) #1 przypisanie 1 dodawanie, 4 wykonanie metody  (6)
    deletion1 = matrix[j - 1][i] + self.similarity(self.sequence1[i - 1], '-')
#1 przypisanie 1 dodawanie, 4 wykonanie metody  (6)
    deletion2 = matrix[j][i - 1] + self.similarity('-', self.sequence2[j - 1])
#1 przypisanie 1 dodawanie, 4 wykonanie metody  (6)
    matrix[j][i] = max(substitution, deletion1, deletion2)
#4 porównania   (4)
    if max(substitution, deletion1, deletion2) == substitution:
#3 porównania, 1 przypisanie (4)
        roadMatrix[j][i] = 4
    if max(substitution, deletion1, deletion2) == deletion1:
        roadMatrix[j][i] = 2
    if max(substitution, deletion1, deletion2) == deletion2:
        roadMatrix[j][i] = 1
@classmethod #(4)
def similarity(self, a, b):
    if a == '-':                        #4 porównania = 1*4
        return self.gap
    if b == '-':
        return self.gap
    if a == b:
        return self.match
    if a != b:
        return self.missmatch
@classmethod #8+seq1+seq2+(seq1+seq2+1)*12
def get_path(self, roadMatrix, sequence1, sequence2):
    j = roadMatrix.shape[0] - 1    #6 przypisania (6)
    i = roadMatrix.shape[1] - 1
    coordinates = []
    seq1 = ''
    seq2 = ''
    self.sim = ''
    coordinates.append(tuple([0, 0]))  #2 przypisania (2)
    coordinates.append(tuple([j, i]))
    while i != 0 and j != 0:         # seq1 + seq2 wykonań, seq1+seq2+1
sprawdzeń
        if roadMatrix[j][i] == 4:    #3 porównania (3)
            i -= 1
            j -= 1
            seq1 = seq1 + sequence1[i]
            seq2 = seq2 + sequence2[j]
            if sequence1[i] == sequence2[j]:
                self.sim += "|"
            else:
                self.sim += " "
        elif roadMatrix[j][i] == 2:
            j -= 1
            seq1 = seq1 + "-"
            seq2 = seq2 + sequence2[j]
            self.sim += " "
        elif roadMatrix[j][i] == 1:
```

```
            i -= 1                          #1 dekrementacja, 1 przypisanie (2)
            seq1 = seq1 + sequence1[i]      #1 konkatenacja, 1 przypisanie (2)
            seq2 = seq2 + "-"               #1 konkatenacja, 1 przypisanie (2)
            self.sim += " "                 #1 konkatenacja, 1 przypisanie (2)
        coordinates.append(tuple([j, i])) #1 przypisanie (1)
```

Łączna liczba operacji wynosi:

$$T(s1,s2) = 25+(s1+1)*(s2+1)*2+16*s1+15*s2+s1*(23*s2+2)$$

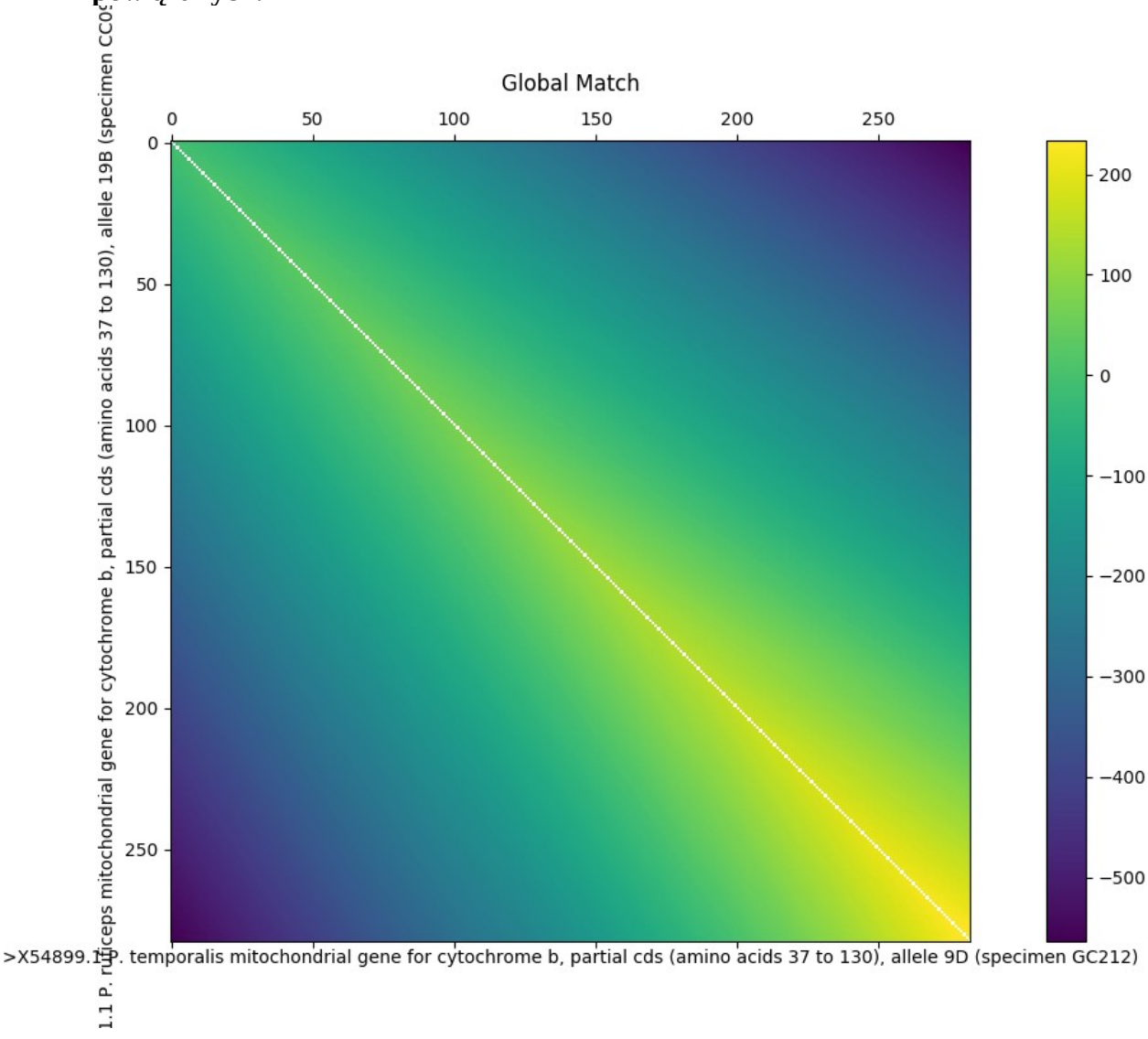
Złożoność czasowa algorytmu dopasowania globalnego jest rzędu co najwyżej s1*s2 co w notacji dużego O możemy zapisać: O(s1s2), gdzie s1 i s2, są sekwencjami wejściowymi.

b) Pamięciowej

W algorytmie złożoność przestrzenną możemy zapisać jako O(s1s2), ponieważ to głównie alokacja pamięci przez macierzą dopasowania jest najbardziej kosztowne pamięciowo.

3. Porównanie przykładowych par sekwencji ewolucyjnie:

- **powiązanych:**



Rys. 1 Porównanie genów kodujących cytochrom b dla ptaków z gatunków Pomatostomus temporalis i Pomatostomus ruficeps

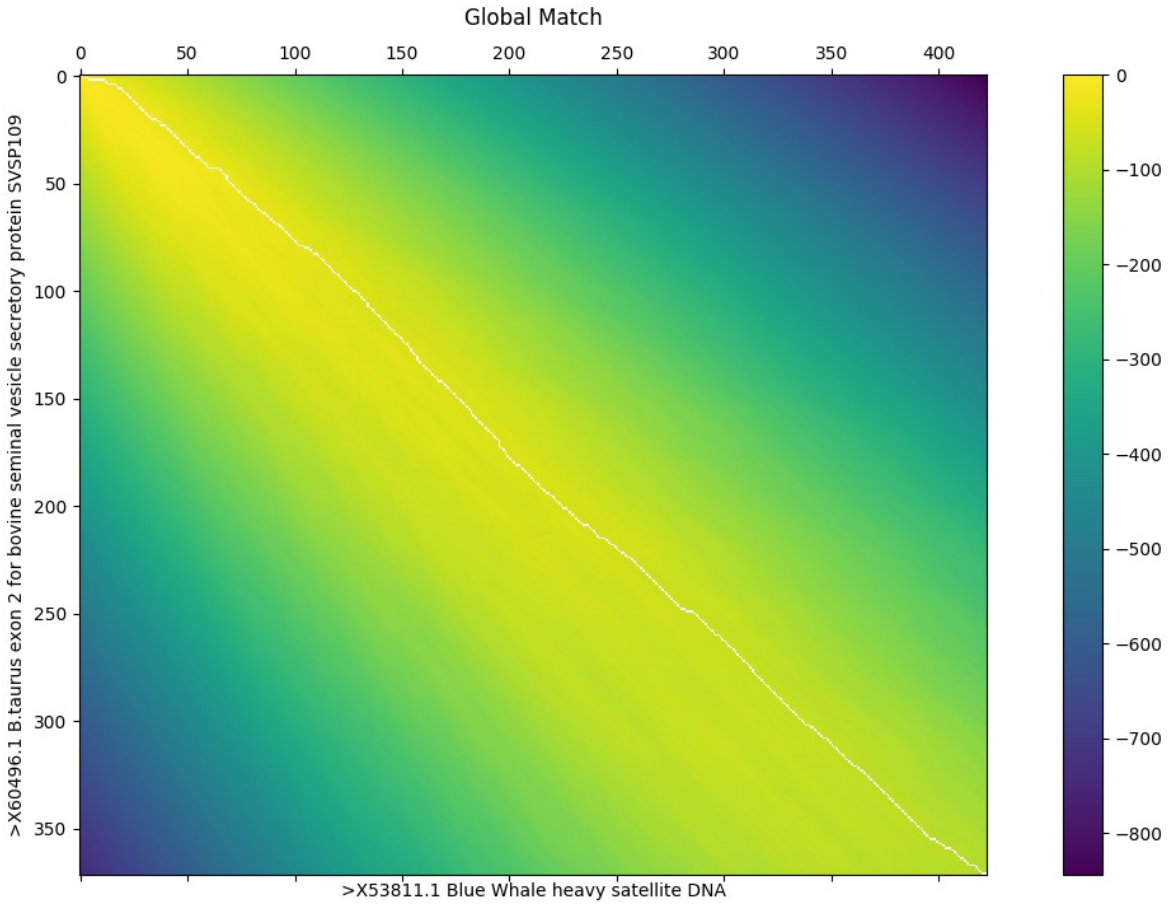
Fragment statystyk:

```
# Match: 1
# Mismatch: -1
# Gap: -2
# Score: 4
# Length: 282
# Idenity: 259/282 (91%)
# Gaps: 0/282 (0%)
```

```
CTAGGAATCTGCCTAATCGTACAAATCGTCACAGGCCTGCTCCTAGCTGCACACTACACAGCTGACACCTCCCTAGCCTTTGCCTCCGTAGCCCACATATGCCGCAACGTACAATTCGGATGACTAATCCGAAACCTACATGCTAACGGAGCTTCATTCTTTTTCATTTGC
 |||||||||||||| || |||||||||||||||||||| ||| |||| ||||| || |||||||||||| |||||||||||| || |||||| |||||||||||||||||||| |||||||||||||||||||||||||| ||||||||||||||||||||||| ||||| |||
TTAGGAATCTGCCTGATTGTACAAATCGTCACAGGCCTACTCTTAGCCGCACATTATACAGCTGACACTTCCCTAGCCTTCGCTTCCGTAACCCACATATGCCGCAACGTGCAATTCGGATGACTAATCCGAAACCTGCATGCTAACGGAGCTTCATTCTTCTTCATCTGC
```

```
ATCTACCTGCATATTGGACGAGGACTCTACTACGGCTCCTACTTAAACAAAGAAACCTGAAACATTGGAGTCATCCTGCTCCTAACCCTAATAGCAACTGCCTTTGTCGGC
|||||||| || ||||||||||||||||||||||||||||||| |||||||||| ||||||||||||||||||||||| |||||||||||||||||||||||||||| || |||
ATCTACCTACACATTGGACGAGGACTCTACTACGGCTCCTACCTAAACAAAGAGACCTGAAACATTGGAGTCATCCTACTCCTAACCCTAATAGCAACTGCCTTCGTAGGC
```

- **niepowiązanych:**



Rys. 2 Porównanie dwóch przypadkowych genów

Fragment statystyk:

```
# Match: 1
# Mismatch: -1
# Gap: -2
# Score: 1
# Length: 430
# Idenity: 200/430 (46%)
# Gaps: 68/430 (15%)
```

Wnioski:
W dopasowaniu globalnym dwóch sekwencji ewolucyjnie powiązanych możemy dostrzec podobieństwa całych fragmentów łańcucha (np. 27 takich samych nukleotydów w jednym fragmencie). Dodatkowo nie ma żadnych przerw a podobieństwo sekwencji wynosi nawet 91%. Można stwierdzić iż w danym genie u dwóch wybranych ptaków (blisko spokrewnionych), dochodziło jedynie do substytucji w łańcuchu. Wybrane geny są zatem dobrze zakonserwowane.

W przypadku genów niepowiązanych ewolucyjnie, możemy dostrzec stosunkowo małe podobieństwo (46%), dużą przypadkowość, w kwestii podobieństwa łańcuchów (najdłuższy podobny fragment składa się z 6 nukleotydów) i bardzo duży procent przerw (12%).