# Alignment Scores für Proteine

……a……  
……b……

Wahrscheinlichkeit, dass aus Aminosäure a Aminosäure b wird:

P(a⬄b)=fa\*fb

fa=Anzahl der AS a/Anzahl aller Aminosäuren in der Sequenz (Bei zufälliger Entwicklung!)

qab=Aminosäurenab/Summe aller Aminosäuren

odds ratio r=qab/fa\*fb (Beobachtete Veränderung vs erwartete zufällige Veränderung)

odds ratio >1 -> positiv selektiert, häufiger als Zufalls

=1 -> zufällig

<1 -> negativ selektiert, seltener als Zufall

Bei mehreren Aminosäuren in einer Sequenz kann alles aufmultipliziert werden

Sab = log(qab/(fa\*fb)) S=Score Substitution Matrix Element

SAB=Summe aller Sab in der Sequenz -> Summer aller Substitution Scores der Aminosäuren darin

SAB… Alignment Score der beiden Sequenzen

Odds Ratio aus Score: o=2^(S/2) (halfbit/logit)

Aa,b=Anzahl der Substitutionen a->b

mb…relative Mutierbarkeit einer Aminosäure b

mb=Summe über alle anderen AS a (Aa,b /fb) -> Normiert auf mAlanin

Ma,b=Λ\*mb\*Aa,b/Summe über alle anderen AS a (Aa,b)

->Ma,b Eintrag in die PAM 1 an der Stelle a,b

PAM2ab = (PAM1ab)2

PAM1-Wert: Wahrscheinlichkeit, dass diese Substitution in einer 100 BP-Sequenz einmal auftritt.