

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO ABAD DEL CUSCO ASIGNATURA: BIOINFORMÁTICA PRÁCTICA: ALINEAMIENTO MÚLTIPLE



Código: 210940

Nombre: Jhon Esau Pumachoque Choquenaira

PROPÓSITO:

• Reforzar los conocimientos del algoritmo BLAST.

• Utilizar el algoritmo BLAST de NCBI para alinear secuencias de ADN y proteínas

Tabla 1: Secuencia para alineamiento múltiple

Secuencia

MMALGRAFAIVFCLIQAVSGESGNAQDGDLEDADADDHSFWCHSQLEVDGSQHLLTCAFNDSDINTANLEFQICGA LLRVKCLTLNKLQDIYFIKTSEFLLIGSSNICVKLGQKNLTCKNMAINTIVKAEAPSDLKVVYRKEANDFLVTFNA PHLKKKYLKKVKHDVAYRPARGESNWTHVSLFHTRTTIPQRKLRPKAMYEIKVRSIPHNDYFKGFWSEWSPSSTFE TPEPKNQGGWDPVLPSVTILSLFSVFLLVILAHVLWKKRIKPVVWPSLPDHKKTLEQLChKPKTSLNVSFNPESFL DCQIHEVKGVEARDEVESFLPNDLPAQPEELETNIPQGHRAAVHSANRSPETSVSPPLNKLRESPLRCLATCNAPP LLSSRSPDYRDGDRNRPPVYQDLLPNSGNTNVPVPVPQPLPFQSGILIPVSQRQPISTSSVLNQEEAYVTMSSFYQ NK

NRGETGAPAGPAGPAGSSGKDGVGGLPGPIGPPSPRGRTGDIGPAGPPGTPGPPGPPGPPGGGFDFSFVAQPS QEKAPDPFRHYRADDANVARDRDLEVDTTLKSLSQQKDLAIENIRSPEGTKKDPARSCRDLKMCHPEWKSGEYFVD PNQGCDEDAVKVYCNMETGETCVYPTQANIPQKNWYTSKNAKDKKHVWFGETMSDGFQFEYGGEGSDAADVNIQLT FLRLMATEASQNITYHCKNSIAYMDQQAGNLKKALLLQGSNEIEIRAEGNSRFTYSEETEDGYTRHTGAWGKTVID ADYKTTKTSRLPIIDIAPMDVGAPDQEFGIDVGP

 ${\tt TGGGATGATTCCACACCCGCGCCCGGCACCCGCGTCCGCGCCGTAGCCATCAACAAGCAGTCACAGCACATGACGGAGGTTGTGAGGCGCTGCCTCCACGATGAGCGCTACTCAGATAGCGATA}$

 ${\tt ACTATAAAGGCGTCTAGATAATAATAAGTATTGGGCAACTTATTAGTCTCCGGTCCAACAACCTGAACGGATTTGATGAAATGGGC}$

INDICACIONES:

- 1. Para cada actividad realizar las acciones solicitadas y responder las interrogantes
- 2. Elaborar un informe completando las acciones solicitas y respondiendo a las interrogantes
- 3. Realizar captura de pantalla de resultados de ejecución para documentar el informe
- 4. Entregar el informe por el aula virtual en formato PDF

Actividad 1: Responder a las siguientes interrogantes

1. ¿Qué es alineamiento múltiple?

El alineamiento múltiple de secuencias (MSA) es un método bioinformático que permite alinear tres o más secuencias biológicas (de ADN, ARN o proteínas) de manera simultánea, con el objetivo de identificar regiones de similitud, conservación evolutiva o patrones funcionales.

Este tipo de alineamiento es esencial para:

- Estudiar relaciones filogenéticas.
- Identificar dominios funcionales en proteínas.
- Predecir la estructura o función de secuencias desconocidas.

2. ¿Qué diferencias tienen los algoritmos de alineamiento múltiple, frente a alineamiento local y global?.

Característica	Alineamiento Múltiple	Alineamiento Global (Needleman-Wunsch)	Alineamiento Local (Smith-Waterman)
Número de secuencias	3 o más secuencias.	2 secuencias.	2 secuencias.
Objetivo	Encontrar regiones conservadas en varias secuencias.	Alinear secuencias completas (óptimo global).	Encontrar segmentos similares locales (sin necesidad de alinear toda la secuencia).
Complejidad	Computacionalment e costoso (NP-duro).	Menos complejo (O(n^2)).	Menos complejo (O(n^2)).
Aplicación	Evolución, predicción de estructura, familias de proteínas.	Comparación de genes homólogos completos.	Búsqueda de motivos o dominios funcionales.
Posibles usos	Alinear secuencias de hemoglobina en distintas especies.	Comparar dos genes ortólogos completos.	Encontrar un sitio activo en dos enzimas.

Actividad 2: Utilizar el algoritmo Blast de NCBI para alinear las secuencias de la tabla 1 Secuencia 1(proteína):

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	NP_032398.3
Nombre de la muestra	interleukin-7 receptor subunit alpha isoform 1 precursor
Tipo de molécula	Proteína
Especie a la que pertenece	Mus musculus (ratón de laboratorio)
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	Esta proteína es la subunidad alfa del receptor de la interleucina-7 (IL-7Rα), una glicoproteína que forma parte del receptor funcional de IL-7 junto con la cadena gamma común. Este receptor es crucial para la señalización celular en linfocitos, regulando el desarrollo, la supervivencia y la homeostasis de células T y B.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	Cromosoma 15
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	II7r (interleukin 7 receptor)
Función biológica de la muestra de	Media la señalización celular en respuesta a la IL-7, promoviendo la supervivencia y proliferación de linfocitos. La subunidad alfa es esencial para eventos específicos de señalización intracelular, contribuyendo a la regulación de la linfopoyesis y al mantenimiento de células T de memoria.
Indicar si es región codificante o no codificante	Región codificante (es una proteína)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	919
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- SHP:1 - MSP:1
Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	- Dominio: Eukaryota - Reino: Metazoa - Filo: Chordata - Clase: Mammalia - Orden: Rodentia - Familia: Muridae - Género: Mus - Especie: Mus musculus

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	BAC30571.1
Nombre de la muestra	unnamed protein product, partial
Tipo de molécula	Proteína
Especie a la que pertenece	Mus musculus (ratón común)
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	Producto proteico parcial obtenido mediante clonación de cDNA completo, correspondiente a un gen de ratón aún no completamente caracterizado. Forma parte del proyecto FANTOM del RIKEN.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	No especificado directamente; se requiere alineamiento con el genoma de Mus musculus para determinarlo.
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	No determinado explícitamente; el gen aún no tiene nombre asignado.
Función biológica de la muestra de la base de datos NCBI Indicar si es región codificante o no codificante	No definida; es una proteína no caracterizada (uncharacterized). Posiblemente implicada en funciones celulares aún no estudiadas. Región codificante (cDNA proteína parcial)
Councaine	Integral Countralité (CDIVA proteina parcial)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	Score: 835 bits (2127), E-value: 0.0 (alineamiento con proteína homóloga en Mus musculus)
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- HSP: 1- MSP: 1
Taxonomía en base al score más alto	Eukaryota Metazoa Chordata Craniata Vertebrata Mammalia Eutheria Glires Rodentia Muridae Murinae
(clasificación biológica)	Mus

Secuencia 2(proteína):

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	BAR72358.1
Nombre de la muestra	type1 collagen alpha1 chain
Tipo de molécula	Proteína
Especie a la que pertenece	Acipenser schrenckii (Esturión de Amur)
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	La muestra corresponde a la cadena alfa 1 del colágeno tipo I, una proteína estructural clave en tejidos conectivos, clonada molecularmente a partir de Acipenser schrenckii. La proteína contiene dominios típicos de colágeno como COLFI y regiones glicina-ricas.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	No especificado en la entrada.
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	Col1a1
Función biológica de la muestra de la base de datos NCBI	Participa en la estructura del colágeno tipo I, importante para la formación de tejido conectivo como huesos, piel, tendones y cartílago. Contiene dominio COLFI involucrado en la formación de fibras de colágeno.
Indicar si es región codificante o no codificante	Región codificante (CDS presente: codificada por LC008483.1:14374)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	658
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- HSP: 1 - MSP: 1
Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	- Dominio: Eukaryota - Reino: Metazoa - Filo: Chordata - Clase: Actinopterygii - Orden: Acipenseriformes - Familia: Acipenseridae - Género: Acipenser - Especie: Acipenser schrenckii

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	XP_033913598.1
Nombre de la muestra	collagen alpha-1(I) chain-like
Tipo de molécula	Proteína
Especie a la que pertenece	Acipenser ruthenus (Esturión esterlete)
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	Proteína colágeno tipo I alfa 1 de Acipenser ruthenus, generada por predicción computacional (modelo RefSeq). Es una proteína estructural importante en tejidos conectivos. Presenta una región rica en glicina y un dominio COLFI, característico de los colágenos fibrilares, implicado en la formación de fibras colágenas. Su peso molecular estimado es de 137,238 Da.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	28
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	LOC117434956
Función biológica de la muestra de la base de datos NCBI	Participa en la formación del colágeno tipo I, esencial en el soporte estructural de tejidos como huesos, piel y cartílago. Interviene en la adhesión celular y el mantenimiento de la matriz extracelular.
Indicar si es región codificante o no codificante	Región codificante (contiene CDS anotado que codifica proteína funcional)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	- Identidad: 96.9% - Cobertura: 96.2% - Mismatches: 10 - Gaps: 3 - Unaligned regions: 4 - Span alineado: 332 aminoácidos
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- HSP: 1 (un solo segmento de alineamiento significativo) - MSP: 1 (único segmento alineado con alta puntuación)
Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	- Dominio: Eukaryota - Reino: Metazoa - Filo: Chordata - Clase: Actinopterygii - Orden: Acipenseriformes - Familia: Acipenseridae - Género: Acipenser - Especie: Acipenser ruthenus

Secuencia 3(proteína):

Respuesta
WP_004793776.1
HU family DNA-binding protein
Proteína
Borreliella
Proteína conservada en múltiples especies de Borreliella. Pertenece a la familia HU, una proteína bacteriana similar a las histonas, implicada en la compactación del ADN.
No especificado (común en anotaciones bacterianas donde los cromosomas no están definidos para proteínas individuales)
No especificado en el registro; proteína presente en múltiples genomas RefSeq de Borreliella
Unión al ADN (GO:0003677), condensación del cromosoma (GO:0030261)
Región codificante
- Score: 162 bits - Identidades: 86/97 (89%) - Positivos: 87/97 (89%) - Gaps: 8/97 (8%)
- HSP: 1- MSP: 1
- Bacteria - Pseudomonadota - Spirochaetota - Spirochaetia - Spirochaetales - Borreliaceae - Borreliella

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	AEH96144.1
Nombre de la muestra	HbbU, partial
Tipo de molécula	Proteína
Especie a la que pertenece	Borreliella garinii
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	Proteína similar a histonas bacterianas (HU/IHF), parcial, conocida como HbbU. Se une al ADN, estabiliza su estructura y participa en la regulación de la expresión génica.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	hbb
Función biológica de la muestra de la base de datos NCBI	Proteína con función de unión al ADN, actúa como factor estructural tipo histona, implicada en la condensación del cromosoma y regulación génica (GO:0003677, GO:0030261).
Indicar si es región codificante o no codificante	Codificante
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	- Score: 162 bits - Identidades: 86/97 (89%) - Positivos: 87/97 (89%) - Gaps: 8/97 (8%)
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- HSP: 1 - MSP: 1
Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	Dominio: Bacteria Filo: Pseudomonadota (anteriormente Proteobacteria) Clase: Spirochaetia Orden: Spirochaetales Familia: Borreliaceae Género: Borreliella

Secuencia 4(AND):

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	MH011443.1
Nombre de la muestra	TP53 gene, exon 5 and partial coding sequence (cds)
Tipo de molécula	ADN genómico (genomic DNA)
Especie a la que pertenece	Homo sapiens (humano)
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	Secuencia parcial del gen TP53, correspondiente al exón 5. El gen TP53 codifica la proteína p53, que es un supresor tumoral clave en la regulación del ciclo celular y la apoptosis.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	Cromosoma 17 (lugar cromosómico: 17p13.1)
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	TP53
Función biológica de la muestra de la base de datos NCBI	Supresor de tumores; regula el ciclo celular, activa la reparación del ADN y puede inducir apoptosis. Actúa como "guardián del genoma".
Indicar si es región codificante o no codificante	Codificante (parcial del CDS, incluye exón 5)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	Score: 189 bits (102) Expect (E-value): 7e-44 Identidades: 116/123 (94%) Gaps: 0/123 (0%)
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- HSP: 1 - MSP: 1
Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	Dominio: Eukaryota Reino: Metazoa Filo: Chordata Clase: Mammalia Orden: Primates Familia: Hominidae Género: Homo Especie: Homo sapiens

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	KR709866.1
Nombre de la muestra	Synthetic construct Homo sapiens clone CCSBHm_00006983 TP53 (TP53) mRNA
Tipo de molécula	DNA (otros DNA)
Especie a la que pertenece	Homo sapiens (constructo sintético)
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	Se trata de un constructo sintético que representa una secuencia de ADN de Homo sapiens correspondiente al gen TP53. El clon CCSBHm_00006983 fue generado como parte del proyecto hmORFeome1.1 y se clonó usando el sistema Gateway para estudiar interacciones proteicas. La secuencia codifica una proteína completa.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	El gen TP53 se encuentra en el cromosoma 17 en el genoma humano, pero esta secuencia es un constructo sintético.
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	TP53
	El gen TP53 codifica una proteína supresora de tumores que regula el ciclo celular y actúa como guardián del genoma, previniendo mutaciones. Está implicado en muchos tipos de cáncer humanos.
Indicar si es región codificante o no codificante	Codificante (contiene CDS - secuencia codificante completa sin codón de parada)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	- Score: 183 bits (99) - Identidades: 115/123 (93%) - Gaps: 0/123 (0%) - Strand: Plus/Plus
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair) Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	- HSP: 1 - MSP: 1 - Dominio: Eukaryota - Reino: Metazoa - Filo: Chordata - Clase: Mammalia - Orden: Primates - Familia: Hominidae - Género: Homo - Especie: Homo sapiens

Secuencia 5(AND):

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	AB011005.1
Nombre de la muestra	Oryctolagus cuniculus CFTR mRNA, exon 5, partial cds
Tipo de molécula	mRNA
Especie a la que pertenece	Oryctolagus cuniculus (conejo)
Explicación detallada de la muestra de la base de datos de NCBI	Esta muestra corresponde a una secuencia de mRNA del gen CFTR de Oryctolagus cuniculus (conejo). Es un fragmento parcial del exón 5 del gen CFTR, el cual codifica una proteína relacionada con el transporte de iones a través de membranas celulares.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	El gen CFTR se encuentra en el cromosoma 7 en el genoma de Oryctolagus cuniculus, pero esta muestra es un fragmento de mRNA de un gen.
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	CFTR (Cystic Fibrosis Transmembrane Conductance Regulator)
Función biológica de la muestra de la base de datos NCBI	El gen CFTR codifica una proteína que regula el transporte de iones (como cloro) a través de las membranas celulares. Su mal funcionamiento está relacionado con la fibrosis quística en humanos y otras especies.
Indicar si es región codificante o no codificante	Codificante (contiene CDS - secuencia codificante del exón 5)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	- Score: 128 bits (69 - Identidades: 84/91 (92%) - Gaps: 1/91 (1%) - Strand: Plus/Plus
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- HSP: 1 - MSP: 1
Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	- Dominio: Eukaryota - Reino: Metazoa - Filo: Chordata - Clase: Mammalia - Orden: Lagomorpha - Familia: Leporidae - Género: Oryctolagus - Especie: Oryctolagus cuniculus

XM_070069813.1 PREDICTED: Oryctolagus cuniculus CF transmembrane conductance regulator (CFTR), transcript variant X2, mRNA mRNA Oryctolagus cuniculus (conejo) Esta muestra corresponde a una transcripción del gen CFTR (regulador de la conductancia transmembrana de la fibrosis
PREDICTED: Oryctolagus cuniculus CF transmembrane conductance regulator (CFTR), transcript variant X2, mRNA mRNA Oryctolagus cuniculus (conejo) Esta muestra corresponde a una transcripción del gen CFTR
conductance regulator (CFTR), transcript variant X2, mRNA mRNA Oryctolagus cuniculus (conejo) Esta muestra corresponde a una transcripción del gen CFTR
Oryctolagus cuniculus (conejo) Esta muestra corresponde a una transcripción del gen CFTR
Esta muestra corresponde a una transcripción del gen CFTR
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
quística) en el conejo. Es una variante de transcripción X2 predicha por análisis computacionales.
Cromosoma 3
CFTR (Cystic fibrosis transmembrane conductance regulator)
El gen CFTR codifica para una proteína que regula el transporte de iones a través de las membranas celulares, esencial en la regulación de la hidratación en diversas superficies epiteliales, y está involucrado en la fibrosis quística.
Región codificante (CDS)
- Score: 122 bits (66) - Identidades: 83/91 (91%) - Gaps: 1/91 (1%) - Strand: Plus/Plus
- HSP: 1 - MSP: 1
Eukaryota Metazoa Chordata Craniata Vertebrata Euteleostomi Mammalia Eutheria Euarchontoglires Glires Lagomorpha Leporidae
CA O EINTE FOR SOME SENDONE

Secuencia 6(AND):

Campo	Respuesta
Código de la muestra (Accession)	OQ161686.1
Nombre de la muestra	Homo sapiens isolate AC10 ACE2 (ACE2) gene, promoter region and partial cds
Tipo de molécula	DNA (genomic DNA)
Especie a la que pertenece	Homo sapiens (human)
	Muestra del gen ACE2 de un aislado de Homo sapiens (AC10), que incluye la región promotora y parte del CDS.
Cromosoma al que pertenece (de ser el caso)	No especificado explícitamente, pero se relaciona con la región promotora del gen ACE2.
Gen o genes que expresa (de ser el caso)	ACE2 (Angiotensin-converting enzyme 2)
Función biológica de la muestra de la base de datos NCBI	El gen ACE2 codifica para una enzima involucrada en la regulación del sistema renina-angiotensina, que afecta la vasodilatación y tiene un rol en la entrada de ciertos virus en células humanas, incluyendo el SARS-CoV-2.
Indicar si es región codificante o no codificante	Región codificante (parte del CDS) y no codificante (región promotora)
Resultado del alineamiento (score, alineamiento)	Score: 1181 bits (639), Identidades: 690/714 (97%), Gaps: 5/714 (0%)
Cantidad de HSP (High-scoring Segment Pair) y MSP (Maximal Segment Pair)	- SHP: 1 - MSP: 0
	Eukaryota Metazoa Chordata Craniata Vertebrata Euteleostomi Mammalia Eutheria Euarchontoglires Primates Haplorrhini Catarrhini
Taxonomía en base al score más alto (clasificación biológica)	Hominidae Homo

Respuesta
OQ161685.1
Homo sapiens isolate AC1 ACE2 (ACE2) gene, promoter region and partial cds
DNA (genomic DNA)
Homo sapiens (human)
Muestra del gen ACE2 de un aislado de Homo sapiens (AC1), que incluye la región promotora y parte del CDS.
No especificado explícitamente, pero se relaciona con la región promotora del gen ACE2.
ACE2 (Angiotensin-converting enzyme 2)
El gen ACE2 codifica para una enzima involucrada en la regulación del sistema renina-angiotensina, que afecta la vasodilatación y tiene un rol en la entrada de ciertos virus en células humanas, incluyendo el SARS-CoV-2.
Región codificante (parte del CDS) y no codificante (región promotora)
- Score: 732 bits (396)- - Identidades: 428/443 (97%) - Gaps: 3/443 (0%)
- SHP: 1 - MSP: 0
Eukaryota Metazoa Chordata Craniata Vertebrata Euteleostomi Mammalia Eutheria Euarchontoglires Primates Haplorrhini Catarrhini; Hominidae Homo