Sprawozdanie z laboratorium 2

Wstęp do bioinformatyki

Piątek 09.15

Maciej Hołub 236518

15.05.2019

Link do Githuba: https://github.com/Holub0816/Bioinformatics/tree/Zadanie2

1. **Cel**

Celem laboratorium było napisanie programu znajdującego optymalne dopasowanie pary sekwencji DNA. Przeprowadzenie jakościowej analizy złożoności obliczeniowej czasowej i pamięciowej dla kilku przykładów kodu. Porównanie przykładowych par sekwencji ewolucyjnie powiązanych i niepowiązanych.

2. **Funkcjonalność programu**

Program posiada możliwość wczytania sekwencji nukleotydów w formacie FASTA z pliku tekstowego, bezpośrednio z bazy danych NCBI lub wczytując kod z klawiatury. Sekwencje są parsowane w celu oddzielenia sekwencji od ich identyfikatora. Następnie za pomocą funkcji matrix() tworzona jest macierz punktacji dopasowania wypełniana według algorytmu Needlemanna-Wunscha oraz pomocnicza macierz pokazująca globalną ścieżkę dopasowania (funkcja generateHelpMatrixx()). Funkcja wyświetla macierz pomocniczą w formie graficznego wykresu przedstawiającego wszystkie ścieżki dopasowania oraz zapisuje go do pliku z rozszerzeniem .png. Funkcja equations() wyświetla parametry programu i dopasowania dla ścieżki o najdłuższej długości (wynik, długość dopasowania, liczbę przerw, liczbę pasujących nukleotydów). Parametry te można zapisać do pliku tekstowego używając funkcji saveToFile(). Program jest wywoływany z linii komend.

3. Analiza złożoności obliczeniowej

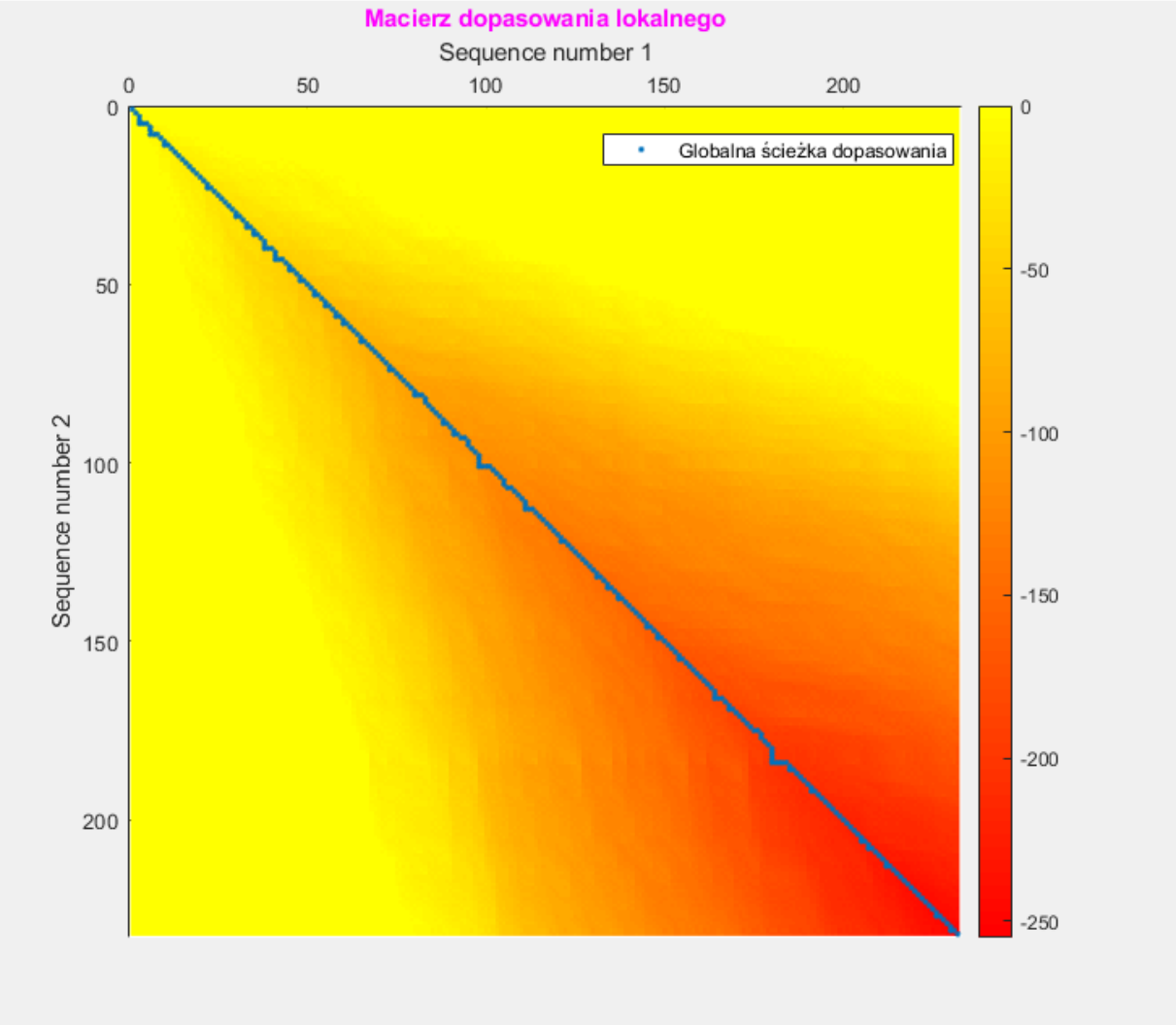
Obliczone złożoności obliczeniowe i przestrzenne są podane na koniec każdej metody. Analiza została przeprowadzona dla wszystkich metod użytych w programie. W każdym z wypadków obliczona została złożoność dla największej możliwej ilości operacji. Dodatkowo szacuję złożoność obliczeniową korzystając z notacji dużego O. Dla funkcji points() generującej macierz dopasowania złożoność obliczeniowa wynosi : O(n2).
Dla funkcji generateHelpMatrixx() złożoność obliczeniowa wynosi O(n).
Złożoność pamięciowa wynosi O(2n2) i wynika to z przechowywania w postaci tablic dwóch macierzy – macierzy punktacji oraz macierzy przedstawiającej ścieżkę optymalnego dopasowania.

4. **Porównanie przykładowych par sekwencji ewolucyjnie powiązanych i niepowiązanych**

Do zaprezentowania analizy par sekwencji powiązanych ewolucyjnie wykorzystano sekwencję kodującą białko cytochrom b u *Słonia Azjatyckiego* oraz u *Mamuta*. W tym przypadku ustawimy rodzaj dopasowania na tryb 'DISTANCE'.

Wywołanie:

```
interface('filename1','AsiaticElephant.txt','filename2','Mammoth.txt','mode
','DISTANCE','match',-1,'missmatch',1,'gap',2);
```



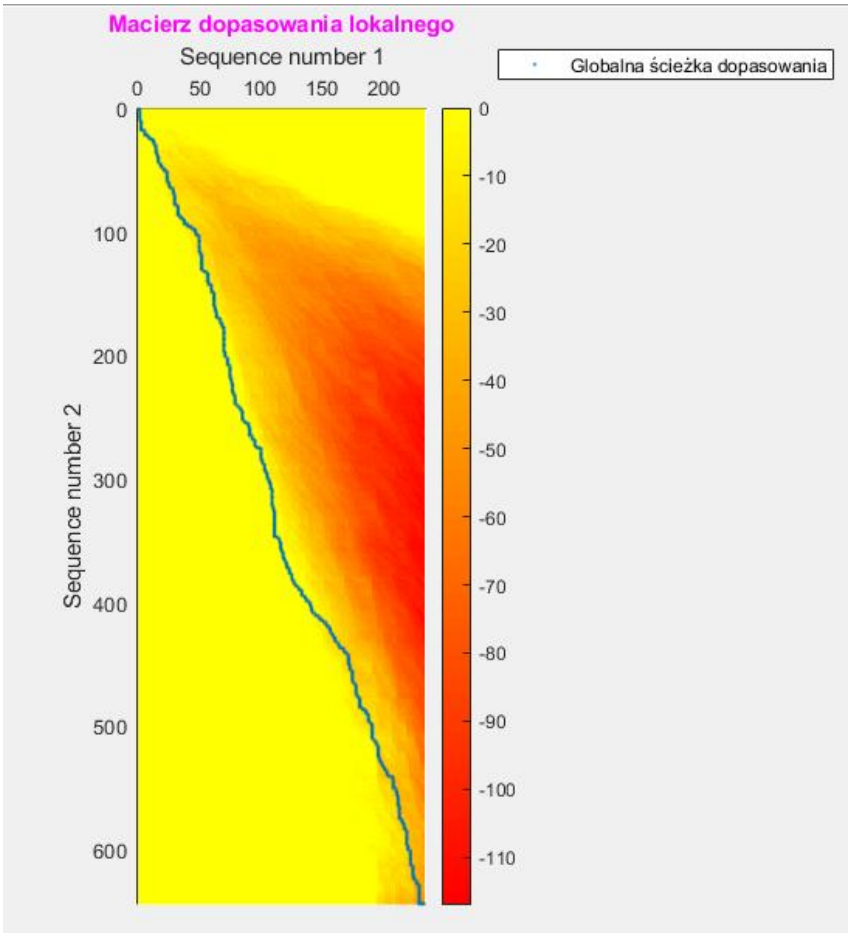

```
      modestr: '# Mode:DISTANCE'
    matchstr: '# Match:-1'
missmatchstr: '# Missmatch:1'
      gapstr: '# Gap:2'
    scorestr: '# Score:-255'
   lengthstr: '# Length:286'
     gapsstr: '# Gaps:30/242   (12%)'
 identitystr: '# Identity:204/242   (84%)'
```

Na Rysunku można zauważyć wyraźną przekątną świadczącą o powiązaniu ewolucyjnym obu sekwencji. Jak można zauważyć z drugiej części mutacje zachodziły najczęściej za pomocą substytucji. Sekwencje są zgodne w 84% co jest dosyć zadowalającym wynikiem a przerwy stanowią 12 całych sekwencji.

Do zaprezentowania analizy par sekwencji powiązanych ewolucyjnie wykorzystano sekwencję kodującą białko cytochrom b u *Mamuta* oraz białko POMP u *Xenopus laevis*. W tym przypadku ustawimy rodzaj dopasowania na tryb 'DISTANCE'.

Wywołanie:

```
interface('filename1','fasta.txt','filename2','Mammoth.txt','mode','DISTANCE','match',-1,'missmatch',1,'gap',2);
```



```
      modestr: '# Mode:DISTANCE'
     matchstr: '# Match:-1'
 missmatchstr: '# Missmatch:1'
       gapstr: '# Gap:2'
     scorestr: '# Score:-52'
    lengthstr: '# Length:698'
      gapsstr: '# Gaps:433/645   (67%)'
  identitystr: '# Identity:67/645   (10%)'
```

6. Schemat blokowy algorytmów użyty do wygenerowania optymalnej macierzy dopasowania

Schemat blokowy znajduje się w folderze pod nazwą algorytm1.png. Algorytm dotyczy funkcji generateHelpMatrixx(), która tworzy macierz dopasowania.