Uniwersytet Warszawski
Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki

Aleksander Mućk
Nr albumu: 382184

Algorytmy do klastrowania duplikacji genomowych

Praca licencjacka
na kierunku BIOINFORMATYKA I BIOLOGIA SYSTEMÓW

Praca wykonana pod kierunkiem
dra hab. Pawła Góreckiego

Sierpień 2019

Oświadczenie kierującego pracą

Potwierdzam, że niniejsza praca została przygotowana pod moim kierunkiem i kwalifikuje się do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

Data Podpis kierującego pracą

Oświadczenie autora (autorów) pracy

Świadom odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przeze mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

Oświadczam również, że przedstawiona praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem tytułu zawodowego w wyższej uczelni.

Oświadczam ponadto, że niniejsza wersja pracy jest identyczna z załączoną wersją elektroniczną.

Data Podpis autora pracy

Streszczenie

Niniejsza praca przedstawia podstawowe propozycje rozwiązań algorytmicznych dla problemów klastrowania duplikacji genomowych w oparciu o scenariusze ewolucyjne. W części pierwszej wprowadzane są pojęcia dotyczące drzew genów, gatunków, modeli ich uzgadniania oraz tworzenia scenariuszy ewolucyjnych. Omówiony został również problem przeliczania i klastrowania duplikacji genomowych w scenariuszach ewolucyjnych. W części drugiej opisana została proponowana heurystyka wraz z przykładowymi testami oraz jej implementacja w języku Python.

Słowa kluczowe

duplikacja genu, drzewo genów, drzewo gatunków, analiza filogenetyczna, drzewo uzgadniające, Python, scenariusz ewolucyjny, strata genu, minimalizacja kosztu ewolucyjnego

Dziedzina pracy (kody wg programu Socrates-Erasmus)

11.9 Inne nauki matematyczne i informatyczne

Klasyfikacja tematyczna

Computional biology, Applied computing, Life and medical sciences

Tytuł pracy w języku angielskim

Algorithms for the clustering of genomic duplication

Spis Treści

Wprowadzenie

Analizy drzew filogenetycznych są, przez rozmiar danych i coraz bardziej skomplikowane modele, niezwykle złożone zarówno obliczeniowo jak i koncepcyjnie.

Drzewo genów zawiera geny. Drzewo gatunków zawiera gatunki.

Krótki opis zależności na bardzo podstawowym poziomie.

Praca składa się z czterech rozdziałów i dodatków. W rozdziale 1 przedstawiono podstawowe pojęcia dotyczące drzew genów, drzew gatunków oraz modeli i scenariuszy ewolucyjnych. Rozdział 2 przedstawia propozycję heurystyki wraz z jej testami na rzeczywistych danych. W rozdziale 3 opisano implementację i sposób użycia programu napisanego na podstawie przybliżonej we wcześniejszym rozdziale heurystyki. Ostatni rozdział zawiera przemyślenia dotyczące możliwego użycia algorytmu i perspektyw jego rozwoju. W dodatkach umieszczono fragmenty kodu, przykładowe dane wejściowe i wyniki działania algorytmu.

Rozdział 1

Podstawowe pojęcia

Pojęciem pierwotnym dla scenatiuszy ewolucy

1.1. Drzewa genów i gatunków

Opis drzewa ogólny

Definicja 1.1.1 *Opis.*

Definicja 1.1.2 *Opis.*

1.2. Uzgodnienie drzewa

Podstawowy opis idei.

1.3. Modele scenariuszy drzew

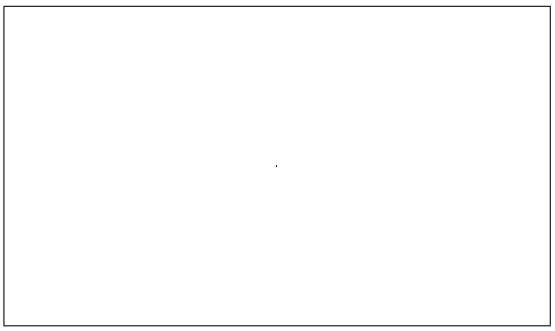
Podstawowy opis idei. Podział ruchów:

Definicja 1.3.1 *Opis.*

Definicja 1.3.2 *Opis.*

Dozwolone modele:

1. PG
2. FHS;



Rysunek 1.1: Obrazek scenariusza

Rozdział 2

Heurystyka

Dane na wejściu : drzewa genów G1...Gk dla każdego Gi jest mi scenariuszy opisanych jako wektory vi1 vi2 ... vim z epizodami (wg outputu ze skryptu)

Zróbmy wektor przybliżające rozwiązanie ME, nazwijmy je v*, które pasuje do każdego scenariusza. Wystarczy brać max po współrzędnych z każdego wektora v.... Oczywiście jest to rozwiązanie słabe bo kosztowne ale pasuje do każdego scenariusza.

Teraz w pętli spróbujmy poprawiać współrzędne z wektora v*: - obniż jedna z wartości w wektorze v - zaakceptuj w/w zmianę jeśli dla każdego drzewa genów istnieje scenariusz, który jest zgodny z takim wektorem epizodów Zakończ jeśli nie da się poprawić żadnej współrzędnej.

Wybór współrzędnej do obniżki: testować np. od końca wektora (od korzenia), od początku (od liści), losowo.

Rozdział 3

Dokumentacja użytkowa i opis implementacji

Opis działania programu.

Rozdział 4

Podsumowanie

W pracy przedstawiono pierwszą heurystykę.

Trudno przewidzieć wszystkie nowe możliwości, ale te co bardziej oczywiste można wskazać już teraz. Są to:

- opisy naszych algorytmów optymalizacyjnych,
- opisy naszych algorytmów optymalizacyjnych,
- opisy naszych algorytmów optymalizacyjnych,

4.1. Perspektywy wykorzystania

DOPYTAĆ

Dodatek A

Główna pętla programu zapisana w języku Python

```
max_trees = []
        for scenario in self:
            all_dup_pref = [tree.duplication_prefix for tree n scenario]
            max_trees.append(self.rate_scenario(all_dup_pref))
        max_tree = self.rate_scenario(max_trees)

        if select_type == "random":

            index_list = [x for x in range(len(max_tree)) if x != 0]

            while index_list:
                index_list_position = random.randint(0, len(index_list) - 1)
                index = index_list[index_list_position]

                max_tree_temp = max_tree[:]
                max_tree_temp[index] -= 1

                for scenario in self:
                    for tree in scenario:
                        for i in range(len(tree.duplication_prefix)):
                            if max_tree_temp[i] - tree.duplication_prefix[i] < 0:
                                break
                        else:
                            break
                    else:
                        index_list.pop(index_list_position)
                        break
                else:
                    max_tree = max_tree_temp
            return max_tree, sum(max_tree)
```

Dodatek B

Przykładowe drzewo gatunków

(prot,(fung,((chlo,embr),(arth,((acoe,anne),(echi,(chon,(oste,(amph,(moll,((mamm,(aves,rept)),agna)))))))))

Dodatek C

Przykładowe drzewa genów

(((aves,mamm),amph),chon)
(((amph,aves),mamm),chon)
((((acoe,mamm),chlo),fung),prot)
(((((echi,arth),mamm),embr),fung),prot)
((((echi,arth),mamm),prot),embr)

Dodatek D

Przykładowy wynik działania programu (dla zbioru guigo)

——————FHS——————

Data loaded. 0.0total random
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 2, 3, 4], 18)
Done in 2.3286948204040527 .
start
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 5], 5)
Done in 0.0676581859588623 .
end
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 3], 4)
Done in 0.24111151695251465 .
index random
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2, 3], 5)
Done in 0.0971217155456543 .
——————PG——————-
Data loaded. 0.0total random
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 3], 8)
Done in 0.18230891227722168 .
start
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 3], 6)
Done in 0.006891012191772461 .
end
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 3], 6)
Done in 0.006652355194091797 .
index random
([0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 3], 6)
Done in 0.007452487945556641 .

Bibliografia

[Zen69] Zenon Zenon, *Użyteczne heurystyki w analizie*, Młody Technik, nr 11, 1969.