### ALGORITME BIOINFORMATIKA



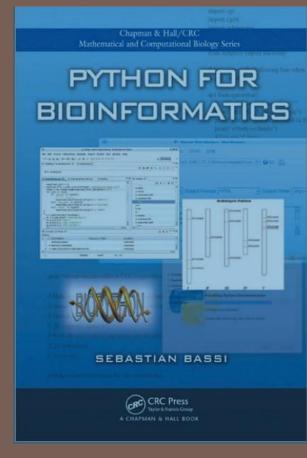
Departemen Ilmu Komputer Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Institut Pertanian Bogor 2016

Praktikum: Algoritme Bioinformatika

## Praktikum

Pertemuan	Topik
1	Pengantar Python
2	Format data : FASTA, FASTQ, PDB Next Generation Simulator (MetaSIM)
3	Basisdata : NCBI GenBank, SRA, PDB Pengantar mengenai BLAST
4	Pairwise alignment dengan python
5	Aplikasi sekuens alignment dan Multiple Sequence Alignment
6	Ugene
7	phylogenetic tree dengan Clustal
8	Bowtie
9	SAMTools
10	Projek
11	I-Tasser
12	Tassel, R
13	R utk graph mining
14	Presentasi

### PYTHON: PENDAHULUAN





Departemen Ilmu Komputer
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Institut Pertanian Bogor
2016

Praktikum : Algoritme Bioinformatika

# Mengapa Python

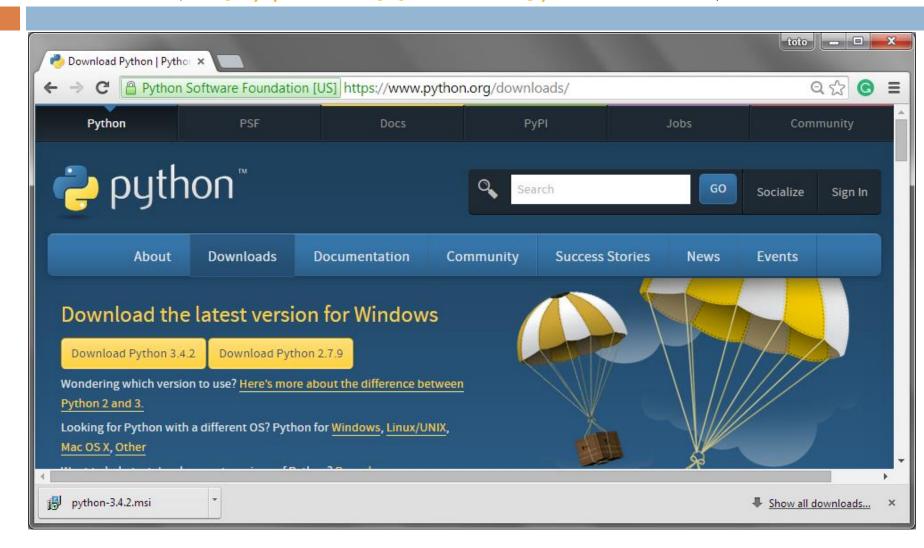
- Readability
- Built-in feature
- Availability of third party modules
- High level built-in data structure
- Multi-paradigm
- Extensibility
- Open Source
- Cross Platform
- Thriving community

## Di mana Python digunakan?

- □ Generic OS Service (os,io, time)
- File and directory access (shutil, tempfile,glob)
- Data compression and archiving (zipfilem, gzip, bz2)
- Internet data handling (email,mimetools,rfc822)
- Internet Protocol (cgi,urllib,urlparse)
- String service (string, codec, re,unicodedata)

## Instalasi Python

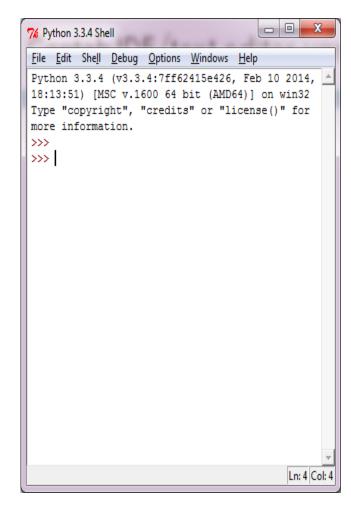
Webite: (<a href="http://www.python.org/download">http://www.python.org/download</a>)

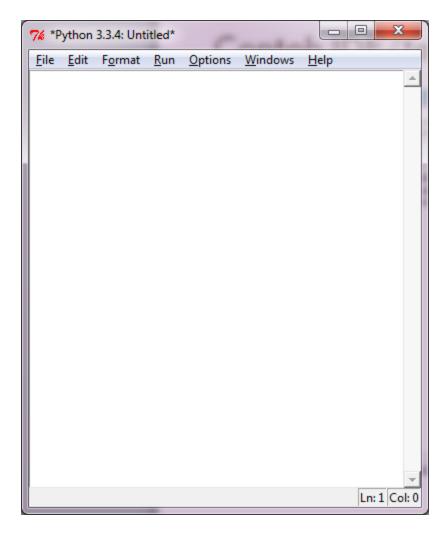


# Contoh IDE/text editor yang digunakan

#### 







# Python: First Use

Mencetak Hello World

```
76 Python 3.3.4: latihan.py - E://engajaran/2013-2014/GENAP/S2... 😑 😐
File Edit Format Run Options Windows Help
print ("Hello World!")
print ("Hello", "World!")
                                                                                                  76 Python 3.3.4 Shell
print ("Hello", "World!", sep=",")
print ("Hello", "World!", sep=";")
                                                   File Edit Shell Debug Options Windows Help
                                                    Hello World
                                                   >>>
                                                   Hello World!
                                                   Hello World!
                                                   Hello, World!
                                                   >>>
                                                   Hello World!
                                                   Hello World!
                                                   Hello, World!
                                                   Hello: World!
                                                   >>>
                                                                                                      Ln: 17 Col: 4
```

Compiler/shell

# Raw Input

Membaca masukan dari standar input pada Python versi 3.x

```
name = input ("Enter Your Name:")
```

```
7% Python 3.3.4 Shell
File Edit Shell Debug Options Windows
>>>
Hello World!
Hello World!
Hello, World!
Hello; World!
>>> name = input("Enter Your Name :")
Enter Your Name : Toto
>>> namr
Traceback (most recent call last):
  File "<pyshell#1>", line 1, in <module>
     namr
NameError: name 'namr' is not defined
>>> name
'Toto'
>>>
                                               Ln: 26 Col: 4
```

# Evaluasi suatu expersi

#### Contoh

```
input(" Operation :")
Eval (input("operation"))
```

```
76 Python 3.3.4 Shell
File Edit Shell Debug Options Windows Help
  File "<pysnell#1>", line 1, in <module>
    namr
NameError: name 'namr' is not defined
>>> name
'Toto'
>>> input("operation:")
operation:2+2
12+21
>>> eval(input("operation"))
operation2+2
>>> eval(input("operation :"))
operation:4+4
>>>
                                              Ln: 35 Col:
```

## example

```
>> 1 + 1
>> '1'+'1'
>> 'The Answer is ' + 42
>> 'The Answer is ' + str(42)
>> 'the Answer is %s' %42
>> n = 42
>> 'the Answer is %s', %n
```

```
76 Python 3.3.4 Shell
File Edit Shell Debug Options Windows Help
operation:4+4
>>> 1+1
>>> '1'+'1'
'11'
>>> 'the Answer is' + 42
Traceback (most recent call last):
 File "<pyshell#8>", line 1, in <module>
    'the Answer is' + 42
TypeError: Can't convert 'int' object to str i
mplicitly
>>> 'the Answer is ' + str(42)
'the Answer is 42'
>>> 'the Answer is %s'%42
'the Answer is 42'
>>> n = 42
>>> 'the Answer is %s'%n
'the Answer is 42'
>>>
                                              Ln: 51 Co
```

# Operasi Matematika

### Tabel Sintaks Operasi Matematika

Symbol	Deskrpsi
+	Penjumlahan
-	Pengurangan
*	Perkalian
/	Pembagian
**	Pangkat
%	Sisa bagi

# Beberapa Ketentuan

 Parentheses: Menunjukkan urutan operator yang akan dievaluasi oleh kompiler.

- Exponensial (Pangkat): 2\*\*2+1 akan menghasilkan 5 bukan 8
   >> 2 \*\* 2 + 1
- Multiplication (perkalian) dan Division (pembagian) memiliki derajat yang sama: 2\*2-1 akan menghasilkan 3 bukan 2
- Addition (penambahan) dan Substraction (pengurangan) memilikai derjat yang sama. Dibandingkan operasi lainnya, operasi ini yang paling akhir dievaluasi
- Disingkat : PEMDAS

# Latihan Operasi Matematika

```
>> y = 10/3
>> x = 10/2
Bedakan
>> y = 10//3
>> x = 10//2
```

```
76 Python 3.3.4 Shell
File Edit Shell Debug Options Windows
>>> n = 42
>>> 'the Answer is %s'%n
'the Answer is 42'
>>> 2* (3-2)
>>> 2**2 + 1
>>> y = 10/3
>>> y
3.333333333333333
>>> y = 10//3
>>> y
>>> x = 10/5
>>> x
2.0
>>> x = 10//2
>>> x
>>>
                                               Ln: 67 Col: 4
```

# Basic Programming: Data Types

#### **STRING**

- Merupakan serangkaian simbol yang dibatasi dengan tanda single quote ('), double quote (""), single triple quote("") atau double triple quote(""")
- Ilustrasi

'This is a String in Python'

```
7% *Python 3.3.4: string.py - E:/pengajaran/2013-2014/GENAP/S...

File Edit Format Run Options Windows Help

#String: Komentar

print ('This is a String in Python')

print ("This is a String in Python")

print ('''This is a String in Python')

print ('''This is a String in Python''')

print ("""This is a String in Python'''')
```

# Kombinasi antar jenis string

```
>>> print (' Kami memiliki "string double quote" di dalam string single quote')

Kami memiliki "string double quote" di dalam string single quote

>>> |

Ln:77 Col:4
```

>> print (" Harus konsisten delimiternya ')

```
File Edit Shell Debug Options Windows Help

Python 3.3.4 (v3.3.4:7ff62415e426, Feb 10 2014, 18:13:51) [MSC v.16 00 64 bit (AMD64)] on win32

Type "copyright", "credits" or "license()" for more information.

>>> print("Harus konsisten delimiternya")

SyptaxError: EOL while scanning string literal

print(value, ..., sep=' ', end='\n', file=sys.stdout, flush=False)

Ln:6 Col:4
```

# Manipulasi String

- String are immutable. Once a string is created, it can't be modified.
- If we need change a string, what we can do is to make a derivated string
- To become string as parameter in function and get the return value

# Manipulasi String: Contoh

```
>> signal_peptide ="MASKATILLAFTLLFACTIA"
>> signal_peptide.lower()
>> signal_peptide
>> signal_peptide = signal_peptide.lower()
>> signal_peptide
```

# Teknik Asosiasi String

- replace
- count
- find
- Index
- Split
- Join
- □ Etc...

# Replace

- Bentuk umum : replace(old,new[,count])
- Untuk melakukan bagian di dalam string (old) dengan suatu nilai baru (new)

```
>> DNA_Seq = "TTGCTAGTTT"
>> mRNA_Seq = DNA_Seq.replace("T","U")
>> mRNA Seq
```

### Count

- Bentuk umum : count(sub[,start[,end]])
- Menghitung berapa kali substring itu muncul yang terletak antara start dan end

```
>> DNA_Seq = "TTGCTAGTTT"
>> t=DNA_Seq.count("T")
>> g=DNA_Seq.count("G")
>> float(t+q)/len(DNA_Seq)*100
```

### Find

- Bentuk umum : find(sub[,start[,end]])
- Mengembalikan informasi posisi substring sub yang terletak antara start dan end
- start :default =0, end: length of string
- Jika tidak ada maka bernilai -1

```
str1 = "ATGTCC";
str2 = "C";
print (str1.find(str2));
print (str1.find(str2, 1));
print (str1.find(str2, 2));
```

### index

- Sama dengan find, tapi jika tidak ditemukan compiler akan memberikan peringatan, BUKAN dengan -1
- Contoh

```
str1 = "ACGTCC";
str2 = "A";
print (str1.index(str2));
print (str1.index(str2, 1));
print (str1.index(str2, 2));
```

### llustrasi index

```
str1 = "ACGTCC";
str2 = "A";
print (str1.index(str2));
print (str1.index(str2, 1));
print (str1.index(str2, 2));
```

# split

- Bentuk umum : split([sep [,maxsplit])
- Membagi string dengan separator dan mengemblikan dalam bentuk LIST
- Default separator: white space

```
>> "this string has words separated by space".split()
>> "Toto Haryanto, Ilmu Komputer, FMIPA, IPB ".split(",")
>> "Toto Novianto; Teknik Kimia; FT; UNDIP".split(";")
```

### Join

- □ Bentuk umum : join(seq)
- □ Inverse dari split
- □ Kegunaan: menggabungkan

```
''.join(['A','C','G','T'])
```

### **TUGAS**

- Download file format .FASTA dari NCBI
- Lakukan ekstraksi informasi dari file tersebut.

Contoh file.fasta

>4LFU:A | PDBID | CHAIN | SEQUENCE

MQDKDFFSWRRTMLLRFQRMETAEEVYHEIELQAQQLEYDYYSLCVRHPVPF TRPKVAFYTNYPEAWVSYYQAKNFLAIDPVLNPENFSQGHLMWNDDLFSEAQ PLWEAARAHGLRRGVTQYLMLPNRALGFLSFSRCSAREIPILSDELQLKMQL LVRESLMALMRLNDEIVMTPEMNFSKREKEILRWTAEGKTSAEIAMILSISE NTVNFHOKNMOKKINAPNKTOVACYAAATGLILEHHHHHH

# List: Tipe data pada Python

- List merupakan tipe data yang paling banyak digunakan di dalam bidang bioinformatika
- List direpresentasikan dalam dengan format: [,]
- List dapat dihasilkan dari penggunaan fungsi split
- contoh :

```
>>> "Toto Haryanto, Ilmu Komputer, FMIPA, IPB".split(",")
```

### List

- $\square >>>$  first\_list = [1,2,3,4,5]
- Contoh list dengan tipe data yang berbeda
- >>> list\_lain = [1,"dua",3,4,"akhir"]
- List Bersarang
- >>>list\_bersarang = [1,"dua",first\_list,3,4,"akhir"]
- List Kosong: terkadang dibutuhkan untuk inisialisasi saat akan menambah data
   list\_kosong = []

### Inisialisasi List

Kalau kita mengatahui list akan memiliki 5 element,
 maka dapat didefinisikan sbb.

>>> codons

### Cara Lain Inisialisasi List

List dapat dibuat dari list lain

Dianalogikan sebagai suatu set himpunan dalam notasi matematika

Misalkan A adalah suatu himpuanan dengan anggota

$$1,2,3,4,5 \rightarrow A = \{0,1,2,3,4,5\}$$
. Kemudian B didefinisikan  $B = \{3*x /x \in A\}$ . Maka  $B = \{0,3,6,9,12,15\}$ 

$$>>> A = [1, 2, 3, 4, 5]$$

$$>>> B = [3*x for x in A]$$

# Mengakses Elemen List

```
>>> first_list = [1,2,3,4,5]
>>> first list[0]
>>> first list[1]

    List dapat diakses dari kanan menggunakan

  bilangan negatif
  >>> first_list = [1,2,3,4,5]
  >>> first_list[-1]
  >>> first list[-4]
```

# Menjadikan Objek Sebagi List

 Apabila kita memiliki sekuens yang belum memiliki tipe data list dapat dibuat dengan menggunakan fungsilist()

```
>>> sequences = "accgtaaaccttt"
>>> make list = list(sequence)
```

# Copy Reference List

```
>>> a = [1,2,3,4]
>>> b = a
>>> b.pop()
>>> a
```

#### □ Keterangan:

tanda "=" tidak berarti men-copy value dari a, namun yang di-copy adalah reference/pointer

# 2 Cara Meng-Copy Value List

□ Cara 1 : dengan menggunakan module copy

```
>>> import copy
>>> a = [1,2,3,4]
>>> b=copy.copy(a)
>>> b.pop()
>>> a
```

□ Cara 2 : tanpa menggunakan modul copy

```
>>> a = [1,2,3,4]
>>> b=a[:]
>>> b.pop()
>>> a
```

## Modifikasi List

Nama Fungsi	Deskripsi Fungsi
s.append(x)	menambahkan elemen x pada list s
s.insert(posi- tion,x)	menyisipkan pada posisi <i>posisi</i> suatu elemet x
s.count(x)	menghitung berapa banyak elemen x pada list s
s.index(x)	mengembalikan posisi elemen x pada list s
s.remove(x)	menghapus elemen x pada list s
s.reverse(x)	membalik list s
s.sqrt(x)	mengurutkan list s

### Latihan: Teladan Modifikasi List

```
>>>  first list = [1,2,2,2,3,3,3,3,4]
>>> first list.pop()
>>> first list = [1,2,2,2,3,3,3,3,4]
>>> first list.remove(3)
>>> first list = [1,2,2,3,3,3,3,4]
>>> first list.reverse()
>>> first list = [ 6,7,3,5,1,2,8,7,9,3]
>>> first list.sort()
```

### Latihan: Teladan Modifikasi List

```
>>>  first list = [1,2,3,4]
>>> first list.append(98)
>>>  first list = [1,2,3,4]
>>> first list.insert(2,55)
>>> first list = [1,2,2,3,3,3,3,4]
>>> first list.count(3)
>>> first list = [1,2,2,3,3,3,3,4]
>>> first list.index(2)
>>> first list.index(3)
>>> first list.index(4)
```

#### Slicing

- Notasi (:)
- Slicing digunakan untuk memilih sebagian dari sequence yang kita miliki

```
>>> my_seq = "Python"
>>> part = my_seq[0:2]
>>> part = my_seq[:2]
>>> part = my_seq[4:6]
>>> part = my_seq[4:]
>>> part = my_seq[1:5:2]
```

#### MEMBERSHIP TEST

 Untuk memeriksa apakah dalam suatu elemen ada di dalam sequence atau tidak

```
>>> point = (23,56,11)
>>> 11 in point
>>> my_seq = "MVALLLLASSTTAA"
>>> "X" in my seq
```

#### CONCATENATION

Untuk menggabungkan dua atau lebih sequence

```
>>> point = (23,56,11)
>>> point2 = (2,6,7)
>>> gabung = point+point2
>>> DNASeq = "ATGCTGTAGTAGCTGGATTA"
>>> TATAbox = "TATAA"
>>> gabung = DNASeq+TATAbox
```

#### LEN, MAX, MIN

```
>>> point = (55,23,11)
>>> len(point)
>>> max(point)
>>> min(point)
```

#### MAX AND MIN FOR STRING

```
>>> MySeq = "ACCTAGGTTATATAGG"
>>> max(MySeq)
>>> min(MySeq)
```

Pengelolan File (I/O) dengan Python

### MENGELOLA FILE

- □ Terminologi : Parsing
- Memahami unit data dari file teks
- Dua aktivitas :
  - Baca (Read)
  - Tulis (Write)

## Membaca File

- Terdapat tiga tahap dalam membaca file pada python
  - Membuka File :
    - > Fungsi yang digunakan : open
    - > Sebagai filehandle yang merujuk pada file yang sedang kita buka
    - Memiliki dua parameter, yaitu file\_name dan mode
  - Membaca File (Terdapat tiga cara):
    - Read() : membaca file secara keseluruhan
    - Readline() : membaca per baris dalam bentuk string
    - Readlines(): membaca keseluruhan dan menjadikan suatu list dengan element setiap barisnya
  - 3. Menutup file
    - Sintaks : filehandle.close()

#### Teladan Membuka File

```
# operasi file
# membuka file lengkap dengan direktori (path)
buka_file = open('E:/Latihan_Pyhton/helloworld.py')
buka file
# membuka file di dalam folder yang sama
buka_file1 = open('coba.txt')
buka_file1
```

### Membaca file dalam format FASTA

- Salah satu format file yang banyak digunakan untuk menyimpan data biologi adalah format Fasta.
- Secara umum file dengan format Fasta adalah
  - Pada baris pertama diawali dengan tanda ">" lalu identifier
  - Baris berikutnya adalah sequence
- contoh file dalam format fasta dapat diunduh di :
  - http://www.rcsb.org/pdb/explore/remediatedSequence.do?str uctureId=2LZP&bionumber=1

>2LZP:A | PDBID | CHAIN | SEQUENCE
DTEIIGGLTIPPVVALVVMSRFGFFAHLLPR

#### Teladan

Diketahui File dalam format FASTA sebagai berikut Nama file : seqA.fas

>000626|HUMAN Small inducible cytokine A22.

MARLQTALLVVLVLLAVALQATEAGPYGANMEDSVCCRDYVRYRL

PLRVVKHFYWTSDS<=

CPRPGVVLLTFRDKEICADPR

VPWVKMILNKLSQ

### Instruksi

- Baca file tersebut
- Pisahkan Nama Identifier dan Sequence-nya
- Gabungkan sequencenya

#### JAWAB 1: Teladan

```
# MEMBACA FASTA DENGAN READ
# membuka file seqA.fas
fh = open('seqA.fas')
myfile = fh.read() # membaca keseluruhan file
# mengambil list indeks 0
# lalu di dalam list indeks 0 tsb diambil dari indeks 1 s.d newline
name = myfile.split('\n')[0][1:]
# melakukan penggabungan sequence mulai indeks 1 s.d EOF yang terpisah oleh
newline
sequence = ''.join(myfile.split('\n')[1:])
print("The name is : %s " %name) # cetak inisial
print("The sequence is %s" %sequence) # cetak sequence
fh.close()
                                            # tutup
```

#### JAWAB 2: Teladan

```
# MEMBACA FASTA DENGAN READLINE
# ingat sifat dari readline
# mengembalikan nilai string hanya 1 baris dalam 1 file
fh = open('seqA.fas')
baris pertama = fh.readline()
# mendefinisikan baris pertama dari indeks 1 sampai paling
kanan (-1)
name = baris pertama[1:-1]
sequence = ""  # inisialiasi string kosong
while True:
   baris = fh.readline()
    if baris == "":
            break
    else :
                sequence += baris.replace('\n','')
print("The name is %s " %name) # cetak name
print("The sequence is %s " %sequence) # cetak sequence
fh.close()
```

## JAWAB 3: Teladan

```
# Menggunakan fungsi FOR untuk looping
fh = open("seqA.fas")
name = fh.readline()[1:-1]
sequence = ""
for baris in fh:
   sequence += baris.replace('\n','')
print("The name is %s " %name) # cetak name
print("The sequence is %s " %sequence) # cetak sequence
fh.close()
```

#### Membaca file CSV (Comma Separated Values)

#### Contoh File CSV

- # Membaca file csv dengan python
- # Format data sbb

```
MarkerID, LenAmpForSeq, MotifAmpForSeq
TKO001, 119, AG(12)
TKO002, 255, TC(16)
TKO003, 121, AG(5)
TKO004, 220, AG(9)
TKO005, 238, TC(17)
```

## Jawab 1: Teladan 2

#### Program Membca file CSV

```
# inisialiasi
tlen = 0; n=0
fh = open('seqB.csv')
fh.readline()
for line in fh:
    data = line.split(",")
    tlen += int(data[1])
    n += 1
print("Rata-rata panjang adalah ", tlen/float(n))
fh.close()
```

## Jawab 2: Teladan 2

#### # Menggunakan modul CSV

```
import csv
tlen = 0
data = list(csv.reader(open('seqB.csv')))

for x in range(1,len(data)):
    tlen += int(data[x][1])

print (float(tlen)/(len(data)-1))
```

## Menulis File

- Secara umum, sama dengan proses membaca file
  - Membuka File :
    - > Fungsi yang digunakan : open
    - Sebagai filehandle yang merujuk pada file yang sedang kita buka
    - Memiliki dua parameter, yaitu file\_name dan mode
  - 2. Menulis ke dalam File (Terdapat tiga cara):
    - Filehandle.write(string)
  - 3. Menutup file
    - Sintaks: filehandle.close()

## Teladan 3

```
# MENULIS FILE
fh = open('newfile.txt','w')
fh.write(">4LFU:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE")
fh.close()
fh = open('newfile.txt', 'a')
fh.write("DTEIIGGLTIPPVVALVVMSRFGFFAHLLPR ")
fh.close()
```

## Pertanyaan

- Lakukan pembacaan file fasta di atas ?
- 2. Ambil informasi nama protein dari file tersebut
- 3. fragmen asam amino dari file fasta tersebut
- Hitung prosentasi setiap asam amino yang terdapat pada fragment tersebut
- 5. dikumpulkan pekan depan dalam softcopy .doc sebagai laporan dan .py sebagai sourcecode

#### **TUGAS**

- Download file fasta dari PDB ID pada database http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do
  - ▶ 2mk2
  - ▶ 3w6a
  - 3beq
  - ▶ 3smb
  - ▶ 2Iw7
  - ▶ 2lxh
- Lakukan ekstraksi sequence setiap kelas
- Hitung distribusi asam amino setiap kelas dan simpan hasilnya dalam suatu file

## **SELESAI**

Semangtlah terhadap segala sesuatu yang bermanfaat bagi mu Mintalah pertologan kepada Robmu Janganlah merasa lemah