Homework #2

Introduction

HW#1에서는 genome에서 frequent한 k-mer를 찾아내는 작업을 수행했습니다. HW#2에서는 이 작업을 확장하여 두 genome 간의 alignment를 수행합니다.

- Frequent k-mer는 alphabet처럼 사용되어 genome sequence를 단순화합니다.
- Dynamic programming 기반의 알고리즘을 구현해 두 genome의 Longest Common Subsequence (LCS)를 찾아냅니다.

Task Instructions

Frequent k-mer 계산:

Genome으로부터 frequent한 k-mer를 추출하기 위해, 제시된 Python 코드를 사용하세요.

실행 명령어는 다음과 같습니다:

\$ python cnt_kmer.py [k] [fasta file]

실행 예시:

\$ python cnt_kmer.py 17 NZ_CP009072.fasta

출력 결과 예시:

GTAGGCCGGATAAGGCG, 43 TAGGCCGGATAAGGCGT, 40 AGGCCGGATAAGGCGTT, 39 TTCACGCCGCATCCGGC,32 CGTCTTATCAGGCCTAC, 31 GCGTCTTATCAGGCCTA,31 GGCGTTCACGCCGCATC,31 AAGGCGTTCACGCCGCA,30 AGGCGTTCACGCCGCAT, 30 CGTTCACGCCGCATCCG, 30 GCGTTCACGCCGCATCC, 30 GTTCACGCCGCATCCGG, 30 TAAGGCGTTCACGCCGC, 30 TGTAGGCCGGATAAGGC, 30 ATAAGGCGTTCACGCCG, 29 GATAAGGCGTTCACGCC, 29

```
TTTTTCCTGAGCTCACG,5
TTTTTTAATATTTCATT,5
TTTTTTCATTATGGCAC,5
TTTTTTCCAGTATCGAT,5
TTTTTTTCATTATGGCA,5
```

Algorithms Fall 2024
Seoul National University Homework #2

• Dynamic Programming을 활용한 Alignment:

두 genome sequence (예시)

- o genome1: "AGT"CGA"TCG"AGT"ACG"ATC"GTT"CGA"
- o genome2: "CGA"GTT"CGA"TCG"AGT"CGA"AGT"TCG"

1. Frequent k-mer 추출 (예시: k=3)

제시된 Python 코드 $cnt_kmer.py$ 를 실행한 결과, 두 genome에서 가장 빈도가 높은 k-mer를 추출했다고 가정합니다.

o genome1_3mer_top1000.txt:

```
CGA
TCG
AGT
ATC
```

o genome2_3mer_top1000.txt:

```
CGA
TCG
AGT
GAG
```

2. k-mer 필터링

두 genome을 align하기 위해서는 k-mer 필터링이 필요합니다.

- 이 필터링은 다음과 같은 기준에 따라 진행됩니다:
 - (1) A k-mer should occur reasonably frequently, not too frequent or not unique.
 - (2) k-mers should be distinct, non-overlapping.

그렇다면 overlapping과 frequent를 정의할 필요가 있습니다.

이 예시

Overlapping

- k-mer가 이미 선정된 k-mer와 절반 이상 겹치면 제거합니다.
- 예시:다음 데이터를 고려하면:

ATGAC: 20 TGCTT: 12

GACAG: 10

TGCTT는 ATGAC와 절반 이상 겹치지 않으므로 유지됩니다. GACAG는 ATGAC와 절반 이상 겹치므로 제거됩니다.

Too Frequent

■ Genome의 크기와 무작위 발생 확률을 고려하여, 빈도가 기준치를 초과하 는 k-mer를 제거합니다.

Homework #2

■ 예시:

N = 1Mbp (genome 크기), k = 10, $\alpha = 5$ 인 경우, 무작위 발생 빈도 = $\frac{1,000,000}{4^{10}} \approx 0.95$ 기준 빈도 = 5 × 0.95 ≈ 4.75

즉, k = 10인 k-mer가 genome 내에서 5회 이상 나타나면 "too frequent" 로 판단하여 제거합니다.

- 필터링 후(예시):
 - genome1: AGT, CGA, TCG, ...
 - genome2: CGA, TCG, AGT, ...

3. k-mer의 발생 위치 검색

두 genome의 서열에서 추출된 k-mer의 발생 순서를 alphabet처럼 사용합니다.

선정된 k-mer를 기반으로 두 genome을 다시 스캔하여, 각 k-mer의 발생 위치를 기 록합니다. 예를 들어, k-mer "CGA"가 genome1에서 1003번째 위치, genome2에서 103 번째 위치에 나타났다면, 아래와 같이 저장합니다.

genome1 변환 결과(예시):

genome1 = <AGT (102) - CGA (1003) - TCG (5003) - AGT (9013) - CGA (15003) - TCG (21003)>

genome2 변환 결과(예시):

genome2 = <CGA (103) - TCG (1203) - TGT (4903) - TCG (8003) - AGT (13003) - CGA (21093)>

4. Dynamic Programming으로 LCS 계산

Dynamic Programming 알고리즘을 사용하여 Longest Common Subsequence (LCS)를 계산합니다.

o LCS (예시):

LCS = <CGA-TCG-AGT>

- 각 genome의 LCS 발 생 위치도 함께 출력합니다(예시):
 - genome1에서의 위치:

<CGA(1003)-TCG(5003)-AGT(9013)>

■ genome2에서의 위치:

<CGA(103)-TCG(1203)-AGT(13003)>

5. 결과물 저장

- 결과는 LCS 서열과 함께 각 genome에서의 LCS 발생 위치를 포함해야 합니다.
- 결과를 3개의 파일로 분리하여 저장합니다.
 - 1. LCS 정보만 저장하는 파일

파일명: [your_student_id]_[k]_[geneome1]_[genome2]_LCS.txt

형식: 단일 텍스트 파일

파일 내용 예시:

CGA-TCG-AGT

2. genome1의 LCS와 위치 정보 파일

파일명: [your_student_id]_[genome1]_[k]_LCS_positions.csv

형식: CSV 파일

파일 내용 예시:

LCS k-mer,Position

CGA,1003

TCG,5003

AGT,9013

3. genome2의 LCS와 위치 정보 파일

파일명: [your_student_id]_[genome2]_[k]_LCS_positions.csv

형식: CSV 파일

파일 내용 예시:

LCS k-mer,Position

CGA,103

TCG,1203

AGT,13003

Algorithms Fall 2024
Seoul National University Homework #2

Example Run Command

제출한 코드는 다음 명령어로 실행되어야 합니다:

\$ sh run.sh [k] [genome1.fasta] [genome2.fasta]

예시:

\$ sh run.sh 17 NZ_CP009072.fasta NZ_CP064387.fasta

Expected Output Format

결과 파일은 "5. 결과물 저장"에서 언급된 바와 같이 3개의 파일로 분리하여 본인의 학번이 반드 시 파일명에 포함되도록 저장되어야 합니다.

파일명:

- 1. [your_student_id]_[k]_[geneome1]_[genome2]_LCS.txt (예시: 2024-00001_17_NZ_CP009072_NZ_CP064387_LCS.txt)
- 2. [your_student_id]_[k]_[genome1]_LCS_positions.csv (예시: 2024-00001_17_NZ_CP009072_LCS_positions.csv)
- 3. [your_student_id]_[k]_[genome2]_LCS_positions.csv (예시: 2024-00001_17_NZ_CP064387_LCS_positions.csv)

Submission Guidelines

- 제출물 요구사항:
 - Python 또는 Java로 작성된 코드
 - 실행 스크립트(run.sh)
 - o 제출물은 zip파일로 압축(예:2024-00001.zip)

Grading criteria

- 1. Genome 내 LCS의 유무와 위치
- 2. LCS의 길이
- 3. Run time