Aufgabe 2:

Human Hemoglobin subunit alpha:

MVLSPADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAEALERMFLSFPTTKTYFPHFDLS-HGSAQVKGHG KKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLHAHKLRVDPVNFKLLS-HCLLVTLAAHLPAEFTP AVHASLDKFLASVSTVLTSKYR

Human Hemoglobin subunit beta:

MVHLTPEEKSAVTALWGKVNVDEVGGEALGRLLVVYPWTQRFFESFGDLSTPDA-VMGNPK VKAHGKKVLGAFSDGLAHLDNLKGTFATLSELHCDKLHVDPENFRLL-GNVLVCVLAHHFG KEFTPPVQAAYQKVVAGVANALAHKYH

Aufgabe 3:

- 1) Globales Alignment vergleicht die vollständigen Sequenzen miteinander, während beim lokalen Alignment nur Teile der Sequenzen verglichen werden.
- Das Globale Alignment wird genutzt, wenn die Sequenzen die gleiche Länge und starke Sequenzhomologien aufweisen. Beim Lokalen Alignment ist dies nicht notwendig.

Aufgabe 4:

Globales Alignment mit voreingestellten Parametern:

Matrix: EBLOSUM62 Gap_penalty: 10.0 Extend_penalty: 0.5

Length: 149

Identity: 65/149 (43.6%) Similarity: 90/149 (60.4%) Gaps: 9/149 (6.0%)

Score: 292.5

#=======							
EMBOSS_001	1 MV-LSPADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAEALERMFLSFPTTKTYFPHF-D	48					
EMBOSS_001	1 MVHLTPEEKSAVTALWGKVNVDEVGGEALGRLLVVYPWTQRFFESFGD	48					
EMBOSS_001	49 LSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLHAHKLR	93					
EMBOSS_001	49 LSTPDAVMGNPKVKAHGKKVLGAFSDGLAHLDNLKGTFATLSELHCDKLH	98					
EMBOSS_001	94 VDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHASLDKFLASVSTVLTSKYR 1.	42					
EMBOSS_001		47					
#							
#							

Abbildung 1: Globales Alignment mit voreingestellten Parametern. (https://www.ebi.ac.uk/Tools/services/web/toolresult.ebi?jobld=emboss_needle-I20180710-141626-0482-44073887-p1m 10.07.18, 15:23 Uhr)

Globales Alignment mit einer anderen Substitution MATRIX:

Matrix: EPAM30 Gap_penalty: 10.0 Extend_penalty: 0.5

Length: 149

Identity: 65/149 (43.6%) Similarity: 74/149 (49.7%) Gaps: 9/149 (6.0%)

Score: 236.5

#=======	=======================================	
EMBOSS_001	1 MV-LSPADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAEALERMFLSFPTTKTYFPHF-D	
EMBOSS_001	1 MVHLTPEEKSAVTALWGKVNVDEVGGEALGRLLVVYPWTQRFFESFGD	
EMBOSS_001	49 LSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLHAHKLR	
EMBOSS_001	49 LSTPDAVMGNPKVKAHGKKVLGAFSDGLAHLDNLKGTFATLSELHCDKLH	
EMBOSS_001	94 VDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHASLDKFLASVSTVLTSKYR	14
EMBOSS_001	99 VDPENFRLLGNVLVCVLAHHFGKEFTPPVQAAYQKVVAGVANALAHKYH	14
#		

Abbildung 2: Globales Alignment mit einer anderen Substitution MATRIX. (https://www.ebi.ac.uk/Tools/services/web/toolresult.ebi?jobld=emboss_needle-I20180710-142444-0975-94593223-p1m, 10.07.18, 15:28 Uhr)

Globales Alignment mit einer anderen GAP OPEN penalty:

Matrix: EBLOSUM62 Gap_penalty: 20.0 Extend_penalty: 0.5

Length: 149

Identity: 61/149 (40.9%) Similarity: 87/149 (58.4%) Gaps: 9/149 (6.0%)

Score: 270.0

#=======	=======================================	
EMBOSS_001	1 -MVLSPADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAEALERMFLSFPTTKTYFPHF :. : :: : . :	47
EMBOSS_001	1 MVHLTPEEKSAVTALWGKVNVDEVGGEALGRLLVVYPWTQRFFESFGD	48
EMBOSS_001	48DLSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLHAHKLR	93
EMBOSS_001	49 LSTPDAVMGNPKVKAHGKKVLGAFSDGLAHLDNLKGTFATLSELHCDKLH	98
EMBOSS_001	94 VDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHASLDKFLASVSTVLTSKYR 1	.42
EMBOSS_001		.47
"		
#		

Abbildung 3: Globales Alignment mit einer anderen GAP OPEN penalty. (https://www.ebi.ac.uk/Tools/services/web/toolresult.ebi?jobld=emboss_needle-I20180710-143055-0087-10527696-p1m, 10.07.18, 15:34 Uhr)

Lokales Alignment mit voreingestellten Parameter:

Matrix: EBLOSUM62 Gap_penalty: 10.0 Extend_penalty: 0.5

Length: 145

Identity: 63/145 (43.4%) Similarity: 88/145 (60.7%) Gaps: 8/145 (5.5%)

Score: 293.5

#									
#======									
EMBOSS 001	3	LSPADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAEALERMELSEPTTKTYEPHE-D	15-	50					
LI-10033_001	,			50					
		: -: :- - - : - - - :-:- - :-: -							
EMBOSS_001	4	LTPEEKSAVTALWGKVNVDEVGGEALGRLLVVYPWTQRFFESFGD	LST	51					
EMBOSS 001	51	HGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLHAHKLR	VDP	96					
_			111						
EMBOSS 001	52	PDAVMGNPKVKAHGKKVLGAFSDGLAHLDNLKGTFATLSELHCDKLH		101					
LIID033_001	32	T DAVIGNI KVKANGKKVEGAL SDGEANEDNEKGTI AT ESEENEDKEN	VDI	101					
EMBOCC 001	0.7	VALENT I CHOLLIVITI A AUL DAFETDAVILIACI DVEL ACVICTVI TOVV	1.41						
EMBOSS_001	97	VNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHASLDKFLASVSTVLTSKY	141						
		- : -:- : - - - :- -: - :							
EMBOSS_001	102	ENFRLLGNVLVCVLAHHFGKEFTPPVQAAYQKVVAGVANALAHKY	146						
#									
••									
π									

Abbildung 4: Lokales Alignment mit voreingestellten Parameter. (https://www.ebi.ac.uk/Tools/services/web/toolresult.ebi?jobld=emboss_water-I20180710-143631-0511-31291125-p1m, 10.07.18, 15:59)

<u>Vergleich:</u> Vergleicht man die Matrizes mit denen aus der Vorlesungsfolie 9, so fällt auf, dass auf den Vorlesungsfolien eine höhere Übereinstimmung vorzufinden ist. Dies wurde durch einfügen von Gaps erreicht.

<u>BLOSUM62</u>: Unter einer BLOSUM versteht man eine Substitutionsmatrix, die verwendet wird um Sequenzen zu vergleichen. BLOSUM mit höheren Nummern werden verwendet, um ähnliche Sequenzen miteinander zu vergleichen, wohingegen die mit niedrigeren Zahlen verwendet werden, um stark unterschiedliche Sequenzen zu vergleichen. Die BLOSUM62 wird so genannt, da alle Sequenzen mit mindestens 62 % gleicher Sequenzidentität als eine Sequenz dargestellt werden.

PAM30: Unter einer PAM30 versteht man, die berechnete Substitutionsmatrix für zwei Sequenzen die 30 PAM (1 PAM: Einheit für den Abstand von Proteinsequenzen → eine Sequenz wurde in eine andere Sequenz überführt mit X Punktmutationen pro 100 AS) entfernt sind. Dabei muss darauf geachtet werden, dass damit nicht 30 Punktmutationen pro 100 AS gemeint sind, da Doppelmutationen, Rückmutationen etc. mit beachtet werden müssen.

<u>Gap Penalty</u>: Verringert den Score beim Einfügen von Gaps. Ist die Gap Penalty höher wird der Score schlechter, da höhere negative Zahlen einberechnet werden. Deswegen ist der Score in Abbildung 3 auch wesentlich schlechter als der in Abbildung 1.