# TP1: Introducción a la Bioinformática

#### Alumnos:

- Kevin Cortes
- Daniel Lobo
- Magdalena Vega

### Ejercicio 1: Procesamiento de secuencias

- <u>Ejercicio realizado en dos lenguajes:</u> BioRuby y BioPerl
- Objetivo: Realizar un script, en los lenguajes ya mencionados, que tenga por input un archivo de GenBank y traducirlo a un formato "FASTA" como una secuencia de aminoácidos.

### Ejercicio 1: Procesamiento de secuencias

### **Genbank:**

- Encabezamiento
- Referencias bibliográficas
- Tabla de características
- Secuencias

#### **FASTA:**

- Formato basado en texto
- Representa secuencias de ácidos nucleicos, péptido, o aminoácidos

### Ejercicio 1: Procesamiento de secuencias

### Secuencia de aminoácidos:

 Recibe como input el archivo Genbank.

```
require 'bio'
if ARGV.length != 2
  puts 'Parametros: <NOMBRE.gb> <SALIDA>'
  exit
end
entries = Bio::GenBank.open(ARGV[0])
File.open(ARGV[1], 'w') do |f|
entries.each_entry do |entry|
  definition = "#{entry.definition}"
  val = entry.seg.translate
  f.puts val.to fasta(definition)
end
end
```

### Ejercicio 2A: BLAST

- Objetivo: Realizar un script que tenga por entrada el archivo de salida del ejercicio 1, y tenga por salida una lista de las posibles coincidencias en la secuencia de aminoácidos, con otros valores (Accesion, Definition, Número de coincidencias, etc...)
- Uso de BioRuby

### Ejercicio 2A: BLAST

```
if ARGV[2].eql?('--local')
  blast = Bio::Blast.local('blastp', '/home/kevin/Desktop/ex2/swissprot')
elsif ARGV[2].eql?('--remoto')
  blast = Bio::Blast.remote('blastp', 'swissprot', '-e 0.0001', 'genomenet')
else
  puts 'No es valido'
 exit
end
entries = Bio::FlatFile.open(Bio::FastaFormat, ARGV[0])
```

### Ejercicio 2B: Interpretación del resultado del BLAST

- BLAST toma la secuencia de aminoácidos original y lo compara con una base de datos, devuelve una lista de todos las secuencias que tienen similitudes con la original.
- En el archivo. blast que se obtiene como salida se devuelve cada hit separado con líneas. En donde se puede ver: #numero de hit.
- El número de accesión que el que identifica un registro de secuencia en la base de datos GenBank 5 como también la definición del hit que lo describe.

### Ejercicio 2B: Interpretación del resultado del BLAST

```
File.open(ARGV[1], 'w') do |f|
  entries.each_entry do |entry|
    report = blast.query(entry.seg)
    report.hits.each_with_index_do |hit, hit_index|
      f.puts '-
      f.puts "Hit #{hit index}"
      f.puts hit.accession
      f.puts hit.definition
      f.puts " - Query length: #{hit.len}"
      f.puts " - Number of identities: #{hit.identity}"
      f.puts " - Length of Overlapping region: #{hit.overlap}"
      f.puts " - % Overlapping: #{hit.percent identity}"
      f.puts " - Query sequence: #{hit.query_seq}"
      f.puts " - Subject sequence: #{hit.target_seq}"
      hit hsps each_with_index do |hsps, hsps_index|
        f.puts " - Bit score: #{hsps.bit_score}"
        f.puts " - Gaps: #{hsps.gaps}"
  end
```

```
Hit 0
26435
P11532.3 RecName: Full=Dystrophin
- Query length: 3685
- Number of identities: 29
- Length of Overlapping region: 31
- % Overlapping:
- Query sequence: LQAIEREKAEKFRKLQDASRSAQALVEQMVN
- Subject sequence: VNAIEREKAEKFRKLQDASRSAQALVEQMVN
- Bit score: 59.6918
- Gaps: 0
```

- https://www.ebi.ac.uk/Tools/msa/muscle/
  - MUSCLE stands for MUltiple Sequence Comparison by Log-Expectation.
- A mayor diferencia entre "Query length", menos alineadas están las secuencias.
- Se creó un archivo BLAST con 500 hits:
  - 1) Se compararon las secuencias de los primeros 3 hits
  - 2) Se compararon las secuencias de los hits número 0, 250, 500

- https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein/O47885/
- Query length: 378
- Number of identities: 251
- Length of Overlapping region: 284
- Bit score: 500.745
- Gaps: 0

>sp|O47885.1|CYB\_ELEMA RecName: Full=Cytochrome b; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Ubiquinol-cytochrome-c reductase complex cytochrome b subunit

MTHTRKFHPLFKIINKSFIDLPTPSNISTWWNFGSLLGACLITQILTGLFLAMHYTPDTMTAFSSMSHIC RDVNYGWIIRQLHSNGASIFFLCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLLLITMATAFMGYVLPWGQMSF WGATVITNLFSAIPYIGTNLVEWIWGGFSVDKATLNRFFAFHFILPFTMVALAGVHLTFLHETGSNNPLG LTSDSDKIPFHPYYTIKDFLGLLILILLLLLALLSPDMLGDPDNYMPADPLNTPLHIKPEWYFLFAYAI LRSVPNKLGGVLALFLSILILGLMPLLHTSKHRSMMLRPLSQVLFWTLTMDLLTLTWIGSQPVEHPYIII GQMASILYFSIILAFLPIAGMIENYLIK

- https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein/P24958/
- Query length: 378
- Number of identities: 249
- Length of Overlapping region: 284
- Bit score: 477.248
- Gaps: 0

>sp|P24958.2|CYB\_LOXAF RecName: Full=Cytochrome b; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Cytochrome b-c1 complex subunit 3; AltName: Full=Ubiquinol-cytochrome-c reductase complex cytochrome b subunit

MTHIRKSHPLLKIINKSFIDLPTPSNISTWWNFGSLLGACLITQILTGLFLAMHYTPDTMTAFSSMSHICRDVNYGWIIRQLHSNGA SIFFLCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLLLITMATAFMGYVLPWGQMSFWGATVITNLFSAIPYIGTNLVEWIWGGFSVDKA TLNRFFALHFILPFTMIALAGVHLTFLHETGSNNPLGLTSDSDKIPFHPYYTIKDFLGLLILILLLLLLLLSPDMLGDPDNYMPADPL NTPLHIKPEWYFLFAYAILRSVPNKLGGVLALLLSILILGLMPLLHTSKHRSMMLRPLSQVLFWTLTMDLLTLTWIGSQPVEYPYIIIG QMASILYFSIILAFLPIAGVIENYLIK

- https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein/P92658/
- Query length: 378
- Number of identities: 247
- Length of Overlapping region: 284
- Bit score: 475.322
- Gaps: 0

>sp|P92658.3|CYB\_MAMPR RecName: Full=Cytochrome b; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Ubiquinol-cytochrome-c reductase complex cytochrome b subunit

MTHIRKSHPLLKILNKSFIDLPTPSNISTWWNFGSLLGACLITQILTGLFLAMHYTPDTMTAFSSMSHICRDVNYGWIIRQLHSNGA SIFFLCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLLLITMATAFMGYVLPWGQMSFWGATVITNLFSAIPYIGTDLVEWIWGGFSVDKA TLNRFFALHFILPFTMIALAGVHLTFLHETGSNNPLGLTSDSDKIPFHPYYTIKDFLGLLILILFLLLLALLSPDMLGDPDNYMPADPL NTPLHIKPEWYFLFAYAILRSVPNKLGGVLALLLSILILGIMPLLHTSKHRSMMLRPLSQVLFWTLATDLLMLTWIGSQPVEYPYIIIG QMASILYFSIILAFLPIAGMIENYLIK

sp P92658.3 CYB_MAMPR sp O47885.1 CYB_ELEMA sp P24958.2 CYB_LOXAF	MTHTRKSHPLLKI1NKSFIDLPTPSNISTWWNFGSLLGACLITQILTGLFLAMHYTPDTM MTHTRKFHPLFKIINKSFIDLPTPSNISTWWNFGSLLGACLITQILTGLFLAMHYTPDTM MTHTRKSHPLLKIINKSFIDLPTPSNISTWWNFGSLLGACLITQILTGLFLAMHYTPDTM
sp P92658.3 CYB_MAMPR	TAFSSMSHICRDVNYGWIIRQLHSNGASIFFLCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLL
sp O47885.1 CYB_ELEMA	TAFSSMSHICRDVNYGWIIRQLHSNGASIFFLCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLL
sp P24958.2 CYB_LOXAF	TAFSSMSHICRDVNYGWIIRQLHSNGASIFFLCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLL
sp P92658.3 CYB_MAMPR	LITMATAFMGYVLPWGQMSFWGATVITNLFSAIPYIGTdLVEWIWGGFSVDKATLNRFFA
sp O47885.1 CYB_ELEMA	LITMATAFMGYVLPWGQMSFWGATVITNLFSAIPYIGTNLVEWIWGGFSVDKATLNRFFA
sp P24958.2 CYB_LOXAF	LITMATAFMGYVLPWGQMSFWGATVITNLFSAIPYIGTNLVEWIWGGFSVDKATLNRFFA
sp P92658.3 CYB_MAMPR sp O47885.1 CYB_ELEMA sp P24958.2 CYB_LOXAF	$ \begin{array}{l} \textbf{L} \textbf{HFILPFTMIALAGVHLTFLHETGSNNPLGLTSDSDKIPFHPYYTIKDFLGLLILIL \\ \textbf{fHFILPFTMvALAGVHLTFLHETGSNNPLGLTSDSDKIPFHPYYTIKDFLGLLILILL \\ \textbf{L} \textbf{HFILPFTMIALAGVHLTFLHETGSNNPLGLTSDSDKIPFHPYYTIKDFLGLLILIL \\ \textbf{L} \textbf{L} \textbf{L} \textbf{L} \textbf{L} \textbf{L} \textbf{L} \textbf{L}$
sp P92658.3 CYB_MAMPR	LLALLSPDMLGDPDNYMPADPLNTPLHIKPEWYFLFAYAILRSVPNKLGGVLAL <mark>L</mark> LSILI
sp O47885.1 CYB_ELEMA	LLALLSPDMLGDPDNYMPADPLNTPLHIKPEWYFLFAYAILRSVPNKLGGVLAL <b>f</b> LSILI
sp P24958.2 CYB_LOXAF	LLALLSPDMLGDPDNYMPADPLNTPLHIKPEWYFLFAYAILRSVPNKLGGVLAL <mark>L</mark> LSILI
sp P92658.3 CYB_MAMPR	LGimpllhtskhrsmmlrplsQvlfwtlatdllmltwigsQpveypyiiigQmasilyfs
sp O47885.1 CYB_ELEMA	LG <mark>L</mark> mpllhtskhrsmmlrplsQvlfwtl <mark>tm</mark> dll <mark>t</mark> ltwigsQpvehpyiiigQmasilyfs
sp P24958.2 CYB_LOXAF	LG <mark>L</mark> mpllhtskhrsmmlrplsQvlfwtl <mark>tm</mark> dll <mark>t</mark> ltwigsQpveypyiiigQmasilyfs
sp P92658.3 CYB_MAMPR	IILAFLPIAGMIENYLIK
sp O47885.1 CYB_ELEMA	IILAFLPIAGMIENYLIK
sp P24958.2 CYB_LOXAF	IILAFLPIAGVIENYLIK

- https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein/O47885/
- Query length: 378
- Number of identities: 251
- Length of Overlapping region: 284
- Bit score: 500.745
- Gaps: 0

>sp|O47885.1|CYB\_ELEMA RecName: Full=Cytochrome b; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Ubiquinol-cytochrome-c reductase complex cytochrome b subunit

MTHTRKFHPLFKIINKSFIDLPTPSNISTWWNFGSLLGACLITQILTGLFLAMHYTPDTMTAFSSMSHIC RDVNYGWIIRQLHSNGASIFFLCLYTHIGRNIYYGSYLYSETWNTGIMLLLITMATAFMGYVLPWGQMSF WGATVITNLFSAIPYIGTNLVEWIWGGFSVDKATLNRFFAFHFILPFTMVALAGVHLTFLHETGSNNPLG LTSDSDKIPFHPYYTIKDFLGLLILILLLLLALLSPDMLGDPDNYMPADPLNTPLHIKPEWYFLFAYAI LRSVPNKLGGVLALFLSILILGLMPLLHTSKHRSMMLRPLSQVLFWTLTMDLLTLTWIGSQPVEHPYIII GQMASILYFSIILAFLPIAGMIENYLIK

- https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein/Q9T4R0/
- Query length: 380
- Number of identities: 201
- Length of Overlapping region: 283
- Bit score: 416.387
- Gaps: 0

>sp|Q9T4R0.1|CYB\_ELIMA RecName: Full=Cytochrome b; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Cytochrome b-c1 complex subunit 3; AltName: Full=Ubiquinol-cytochrome-c reductase complex cytochrome b subunit

MTNIRKSHPLLKIINHSFIDLPTPSNISSWWNFGSLLGICLILQIATGLFLAMHYTSDTTTAFSSVTHIC RDVNYGWLIRYLHANGASMFFICLFIHVGRGMYYGSYMSIETWNMGIILLFAVMATAFMGYVLPWGQMSF WGATVITNLLSAIPYIGTTLVEWIWGGFSVDKATLTRFFAFHFILPFIIVALVMVHLLFLHETGSNNPSG LNSDADKIPFHPYYTIKDILGVLLLFLFLISLVLFAPDLLGDPDNYTPANPLNTPPHIKPEWYFLFAYAI LRSIPNKLGGVLALILSILVLALIPHLHTSKLQSLMFRPLTQALYWILVADLLILTWIGGQPVEYPFIII GQLASVLYFAIILIFMPMAGMIEDSILKMD

- https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein/Q7JE02/
- Query length: 379
- Number of identities: 203
- Length of Overlapping region: 283
- Bit score: 407.142
- Gaps: 0

>sp|Q7JE02.1|CYB\_MUSEV RecName: Full=Cytochrome b; AltName: Full=Complex III subunit 3; AltName: Full=Complex III subunit III; AltName: Full=Cytochrome b-c1 complex subunit 3; AltName: Full=Ubiquinol-cytochrome-c reductase complex cytochrome b subunit

MTNIRKTHPLTKIINNSFIDLPAPSNISAWWNFGSLLGICLIIQILTGLFLAMHYTSDTATAFSSVTHIC RDVNYGWIIRYMHANGASMFFICLFLHVGRGLYYGSYMFTETWNIGIILLFAVMATAFMGYVLPWGQMSF WGATVITNLLSAIPYIGTNLVEWIWGGFSVDKATLTRFFAFHFILPFIISALAAVHLLFLHETGSNNPSG IPSDSDKIPFHPYYTIKDILGALLLILMLTLLVLFSPDLLGDPDNYIPANPLNTPPHIKPEWYFLFAYAI LRSIPNKLGGVLALIFSILILAIIPLLHTSKQRSMMFRPLSQCLFWLLVADLLTLTWIGGQPVEHPFIII GQLASILYFMILLVLMPIISIIENNMLKW

sp 047885.1 CYB_ELEMA	MThtrkfhplfkiinksfidlptpsnistwwnfgsllgaclitQiLtglflamhytpdtm
sp Q9T4R0.1 CYB_ELIMA	MTNIRKshpllkiinhsfidlptpsnisswwnfgsllgiclilQiatglflamhytsdtt
sp Q7JE02.1 CYB_MUSEV	MTNIRKthpltkiinnsfidlpapsnisawwnfgsllgicliiQiLtglflamhytsdta
sp 047885.1 CYB_ELEMA	TAFSSmsHICRDVNYGWIIRqLHsNGASiFFlCLytHiGRnIYYGSYlysETWNtGImLL
sp Q9T4R0.1 CYB_ELIMA	TAFSSVTHICRDVNYGWIIRYLHANGASMFFICLFiHVGRGmYYGSYMsiETWNmGIILL
sp Q7JE02.1 CYB_MUSEV	TAFSSVTHICRDVNYGWIIRYmHANGASMFFICLFlHVGRGLYYGSYMftETWNiGIILL
sp 047885.1 CYB_ELEMA	litmatafmgyvlpwgqmsfwgatvitnlfsaipyigt <mark>n</mark> lvewiwggfsvdkatlnrffa
sp Q9T4R0.1 CYB_ELIMA	favmatafmgyvlpwgqmsfwgatvitnl <mark>l</mark> saipyigttlvewiwggfsvdkatl <mark>t</mark> rffa
sp Q7JE02.1 CYB_MUSEV	favmatafmgyvlpwgqmsfwgatvitnl <mark>l</mark> saipyigt <mark>n</mark> lvewiwggfsvdkatl <mark>t</mark> rffa
sp 047885.1 CYB_ELEMA	FHFILPFtmvALAgVHLtFLHETGSNNPlGLtSDSDKIPFHPYYTIKDfLGlLiLILlL
sp Q9T4R0.1 CYB_ELIMA	FHFILPFIIvALvmVHLLFLHETGSNNPsGLnSDaDKIPFHPYYTIKDILGvLLLfLFLi
sp Q7JE02.1 CYB_MUSEV	FHFILPFIIsALAaVHLLFLHETGSNNPsGipSDSDKIPFHPYYTIKDILGaLLLILmLt
sp 047885.1 CYB_ELEMA	llall <mark>spdmlgdpdnympadplntplhikpewyflfayailrsvpnklggvlalfl</mark> sili
sp Q9T4R0.1 CYB_ELIMA	sl <mark>vlfapdl</mark> lgdpdnytpanplntpphikpewyflfayailrsipnklggvlal <mark>il</mark> silv
sp Q7JE02.1 CYB_MUSEV	llvlfspdllgdpdnyipanplntpphikpewyflfayailrsipnklggvlal <mark>i</mark> fsili
sp 047885.1 CYB_ELEMA sp Q9T4R0.1 CYB_ELIMA sp Q7JE02.1 CYB_MUSEV	LgLmPlLHTSKhRSMMlRPLSQvLFWtLtmDLLTLTWIGsQPVEHPyIIIGQmASILYFs LALIPhLHTSKlqSlMFRPLtQaLyWiLVADLLiLTWIGGQPVEYPFIIIGQLASvLYFa LAiIPlLHTSKqRSMMFRPLSQcLFWlLVADLLTLTWIGGQPVEHPFIIIGQLASILYFm
sp 047885.1 CYB_ELEMA sp Q9T4R0.1 CYB_ELIMA sp Q7JE02.1 CYB_MUSEV	IILAF1PIAGMIENYLiK IILiFMPmAGMIEdsILKmd IlLv1MPIisiIENnmLKw-