

Relatório

1. Desenvolva um algoritmo que leia duas sequências n e m ;
2. Implemente o algoritmo de Smith-Waterman para alinhar estas sequências;
3. O programa deve imprimir na tela a tabela final de alinhamento, as duas cadeias alinhadas e a identidade do alinhamento;
4. Regras:
 - Valor para gap: -2
 - Valor para match: +1
 - Valor para mismatch: -1
 - $S_{i,j} = \max \{ 0, S_{i-1,j-1} + s(a_i, b_j); \text{match/mismatch } S_{i,j-1} + w; \text{gap seq1 } S_{i-1,j} + w; \text{gap seq2 } S_{i,j-1} + w \}$
5. O que se pode concluir a partir do alinhamento da urease de *C. ensiformis* com as demais?

Pseudocódigo:

Função smithWaterCreate recebe duas sequências e cria uma matriz com índices m e n para cada sequência

Preenche a matriz com a primeira linha e a primeira coluna com zeros

Utiliza as posições acima, à esquerda e à diagonal e as fórmulas:

$$S_{i,j} = \max \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ S_{i-1,j-1} + s(a_i, b_j); \text{match/mismatch} \\ S_{i,j-1} + w; \text{gap seq1} \\ S_{i-1,j} + w; \text{gap seq2} \end{array} \right\}$$

$$s(a_i, b_j) = 1 \text{ se } a_i = b_j$$

$$s(a_i, b_j) = -1 \text{ se } a_i \neq b_j$$

$$w = -2 \text{ gap penalty}$$

para calcular as maiores valorações possíveis (calcula as três e guarda a maior na matriz, o maior valor será no mínimo zero)

Retorna a matriz

Função smithWaterBacktrack recebe uma matriz e duas sequências

Utiliza a matriz invertida e calcula novamente as valorações para descobrir de qual posição ela surgiu (acima, à esquerda ou à diagonal)

Enquanto isso a variável score é modificada de acordo com a maior valoração da posição

Retorna as duas sequências alinhadas e o score

Função identidade recebe duas strings

Conta o total de caracteres iguais e retorna o % de identidade entre as sequências

Função biggerIndex recebe a matrix e retorna a posição do maior valor dela

UREA X URE1

ensiformis X subunit alpha

```

urea
ure1
GPTVGDKVRLADTELWIEVEDDLTTYGEEVKFGGGKVIRDGMGQGMQLA-ADCVDLVLTNALIVDHWGIKADIGVKDGRIFAIGKAGNPDIQPNVTIP-I-GAATEVIAAEGKIVTAGG
IDTHIHWICPQQAEEALVSGVTTMVGGGTGPAAGTHATTCTPGPWYISRMLQAADSLPVNIGLLGKGNVSQPDALREQVAAGVIGLKIHEDWGATPAAIDCALTVADEMDIQVALHSDTL
NESGFVEDTLAAIGGRTIHTFHTEGAGGGHAPDIITACAHPNILPSSTNPTLPYTLNTIDEHLDMLMVCHHLDPDIAEDVAFAESRIRRETIAAEDVLHDLGAFSLTSSDSQAMGRVGEV
ILRTWQVAHRMKVQRGALAEETGDNDNFRVKRYIAKYTINPALTHGIAHEVGSIEVGKLADLVVWSPAFFGVKPKATVIKGGMIAIAPMGDINASIPTPQPVHYRPMFGALGSA

GPTTGDKIRLGDTNLLAEIEKDIALYGDECVFGGGKVIRDGMGQSGHPPAISLDTVITNAVIIDYTGTIHKADIGIKDGLIASIGKAGNPDIMNGVFSNMIIGANTEVIAGEGLIVTAGA
IDCHVHYICPQLVYEAISSGITTLVGGGTGPAAGTRATTCTPSPTQMRLMLQSTDDLPLNFGFTGKGSSSKPDELHEIHKAGAMGLKLHEDWGSTPAAIDNCLTIAEHHDIQINIHTDTL
NEAGFVEHSIAAFKGRITHTYHSEGAGGGHAPDIIVCGIKNVLPSSSTNPTPLTSNTIDEHLDMLMVCHHLDREIPEDLAFHSRIRKKTIAAEDVLNDIGAISSISDSQAMGRVGEV
ISRTWQTADKMKATGPLKCDSSDNDNFRIRRYIAKYTINPAIANGFSQYVGSVEVGKLADLVWKPSPFFGTPKEMVIKGGMVAWADIGDPNASIPTPEPVKMRPMYGTLGKA

score: 150
identidade: 66.17336152219873%

```

UREA X URE2

ensiformis x subunit beta

```

urea
ure2
GDRPIQVGSYHFAEVPNALKFDRQQAAGYRLNIPAGTAVRFEPG

GDRPIQVGSYHFIEVNPYLTFDRRKAYGMRLNIAAGTAVRFEPG

score: 29
identidade: 82.2222222222221%

```

UREA X URE3

ensiformis x subunit gamma

```

urea
ure3
RLARGLKLNPESVALISAFIMEGARDG-KSVASLMEEGRHVLTREQVMEGVPEMIPDIQVEATFPDGSKLVTVHNPI

RLARGVRLNYTEAVALIASQIMEYARDGEKTVAQLMCLGQHLLGRRQVLPVAPHLNNAVQVEATFPDGTKLVTVHDPI

score: 21
identidade: 64.1025641025641%

```

URE1 X URE2

subunit alpha x subunit beta

```

ure1
ure2
VAFA

VAFA

score: 4
identidade: 100.0%

```

URE1 X URE3

subunit alpha x subunit gamma

```
ure1
ure3
DIQV
DIQV
score: 4
identidade: 100.0%
```

URE2 X URE3

subunit beta x subunit gamma

```
ure2
ure3
IQV
IQV
score: 3
identidade: 100.0%
```

A partir dos resultados obtidos, nota-se que a urease *C. ensiformis* tem a identidade menor com as outras ureases do que elas entre si. Sabe-se que a urease é sintetizada em fungos, algas, bactérias e invertebrados, além de existir no solo, então, a partir dessas informações, pode-se assumir que devido a diferença na identidade dos alinhamentos, as ureases subunit alpha, beta e gamma são produzidas por seres similares, enquanto a urease *ensiformis* é produzida por algum outro tipo de ser.