

Bioinformática

Exercícios TP4: Algoritmos de alinhamento e matrizes de score

1. Considere as duas sequências:

HEAGAWGHEE

PAWHEAE

- a) Construa a matriz de alinhamento para estas sequências e calcule o alinhamento global ótimo pelo algoritmo de Needleman-Wunsch, considerando uma gap penalty de -8 e uma matriz de score BLOSUM50.
 - b) Construa um alinhamento semelhante, mas usando o método de alinhamento local de Smith-Waterman.
2. Obtenha as sequências da tripsina humana e de ratazana. Produza o seu alinhamento global com o programa “needle” (www.ebi.ac.uk/emboss/Tools/psa). O software usa por defeito uma matriz BLOSUM62 para fazer este alinhamento, mas qual lhe parece que deveria ser a matriz apropriada para esta situação. Volte a correr “needle” com esta matriz e compare com o resultado anterior. Obtenha a sequência da tripsina de *Litopenaeus vannamei* (white leg shrimp) e faça o alinhamento desta com a humana. Qual seria a matriz de alinhamento mais apropriada nesta situação?... Repita o alinhamento com esta última e compare.
3. Utilize o site [DALI](http://www.ebi.ac.uk/EMBL-BLAST/) para fazer o alinhamento estrutural das duas proteínas tripsina 1 humana e tripsina da bactéria *Streptomyces griseus*. Compare este alinhamento com o obtido com a ferramenta EMBOSS ([water](http://www.ebi.ac.uk/EMBL-BLAST/)). Modifique os valores por defeito das penalidades de abertura e extensão de *gaps* e observe o efeito sobre o score o alinhamento, procurando encontrar os valores que melhor fazem corresponder o alinhamento observado ao alinhado estrutural.