1η Εργασία βιοπληροφορικής

Άσκηση 1

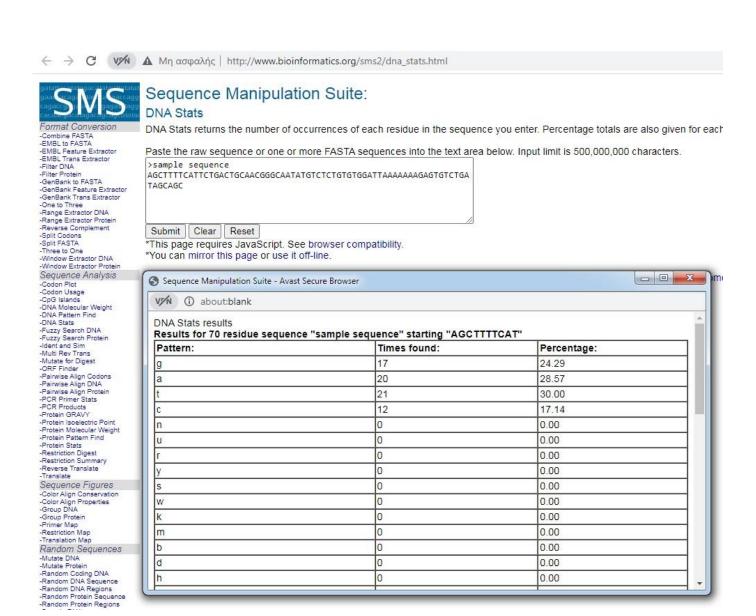
Το πρώτο πρόβλημα είναι δεδομένης μίας αλληλουχίας DNA να μετρήσουμε τις εμφανίσεις του κάθε αμινοξέος.

Ας δούμε πρώτα με χρήση biopython

```
1
    from Bio.Seq import Seq
                                                                                                         Adenine :20
                                                                                                         Cytosine :12
2
                                                                                                         Guanine :17
3
   my_seq = Seq("AGCTTTTCATTCTGACTGCAACGGGCAATATGTCTCTGTGTGGATTAAAAAAAGAGTGTCTGATAGCAGC")
                                                                                                         Thymine :21
4
   print("Adenine :" + str(my_seq.count("A")))
5
6 print("Cytosine :" + str(my_seq.count("C")))
    print("Guanine :" + str(my_seq.count("G")))
7
   print("Thymine :" + str(my_seq.count("T")))
```

Το Seq είναι μια δομή που βολεύει όταν διαχειριζόμαστε αλληλουχίες διότι μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε έτοιμες συναρτήσεις. Η str() είναι απαραίτητη διότι έχουμε δύο διαφορετικού τύπου αντικείμενα.

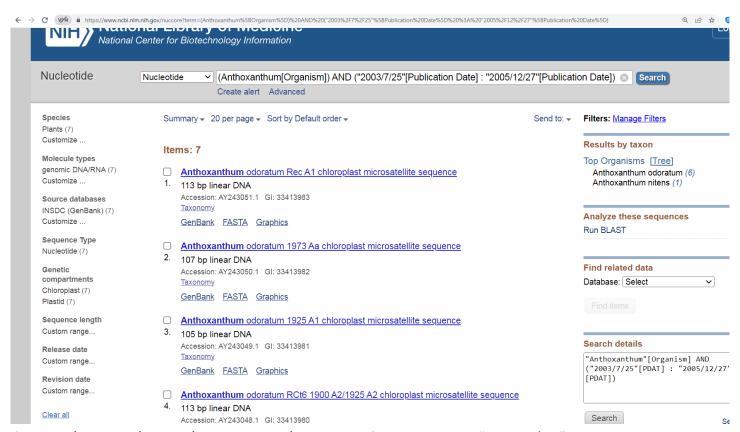
Θα δοκιμάσουμε και το Sequence Manipulation Suite ένα γνωστό εργαλείο για ανάλυση αλληλουχιών. Θα χρησιμοποιήσουμε το DNA stats που είναι online.



Όπως βλέπουμε αυτό το εργαλείο μας δείχνει και τα ποσοστά ύπαρξης του κάθε αμινοξέος.

Έπειτα θα αναζητήσουμε όλες τις καταχωρίσεις ενός γένους που έγιναν μεταξύ 2 ημερομηνιών, στην GenBank του NCBI.

Ψάχνουμε στην online σελίδα.



Όπως βλέπουμε βάλαμε φίλτρο για αναζήτηση στην GenBank, με το "nucleotide".

Η συνάρτηση Bio.Entrez.esearch() της biopython μπορεί να ψάξει όλες τις βάσεις δεδομένων του NCBI.

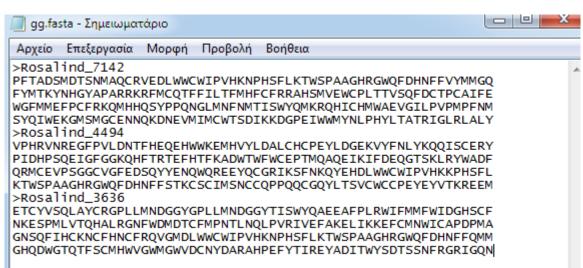
Το επόμενο πρόβλημα είναι να δώσουμε στην genBank 3 id και να μας επιστραφεί η μικρότερη αλληλουχία σε FASTA format. Θα ξεκινήσουμε με την biopython. Στην αρχή δοκιμάσαμε τον παρακάτω κώδικα ο οποίος δεν χρησιμοποιεί όλα τα εργαλεία που προτείνονται στο Rosalind. Σύντομα παρατηρήσαμε ότι παρόλο που δίνει σωστό αποτέλεσμα αυτός ο κώδικας μετράει και το μέγεθος της περιγραφής μαζί με αυτό της αλληλουχίας.

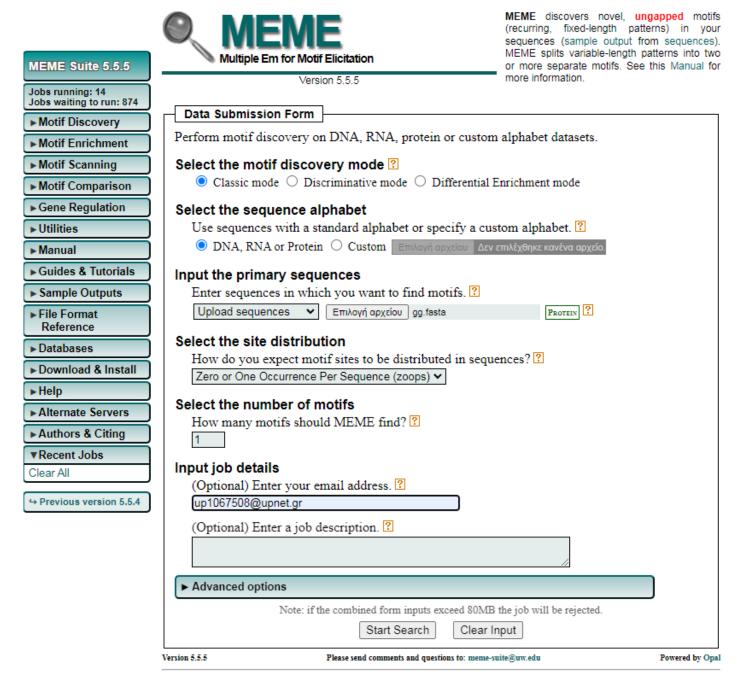
```
from Bio import SeqIO
                                                                                                           >JX469983.1 Zea mays subsp. mays clone UT3343 G2-like transcription factor mRNA, parti
from Bio import Entrez
                                                                                                           ATGATGTATCATGCGAAGAATTTTTCTGTGCCCCTTTGCTCCGCAGAGGGCACAGGATAAT
                                                                                                          def fetch_and_convert(ids):
    fasta_records = []
    for id in ids:
                                                                                                           TCAATTAAGGCTTCTGAGGATCAGAAGCTTTCTGATTCACCTCCAAGCTTAGATGACTA
        handle = Entrez.efetch(db="nucleotide", id=id, rettype="gb", retmode="text")
record = SeqIO.read(handle, "genbank")
                                                                                                           CCAGAGAGCATGCAACCTTCTCCCAAGAAACCAAGGATAGACGCATTATCACCAGATTCA
                                                                                                           GAGCGCGATACAACACAACCTGAATTCGAATCCCATTTGATCGGTCCGTGGGATCACGGC
ATTGCATTCCCAGTGGAGGAGTTCAAAGCAGGCCCTGCTATGAGCAAGTCA
        handle.close()
        # format to FASTA
        fasta_record = record.format("fasta")
        fasta_records.append(fasta_record)
    # return shorter
   return min(fasta_records, key=len)
ids = ["FJ817486", "JX069768", "JX469983"]
print(fetch_and_convert(ids))
```

Άρα αλλάζουμε τον κώδικα σε:

Και πλέον ο κώδικας είναι σωστός διότι μετράει μόνο το μήκος της αλληλουχίας.

Πρώτα φτιάχνουμε ένα fasta αρχείο με τις ακολουθίες μας.

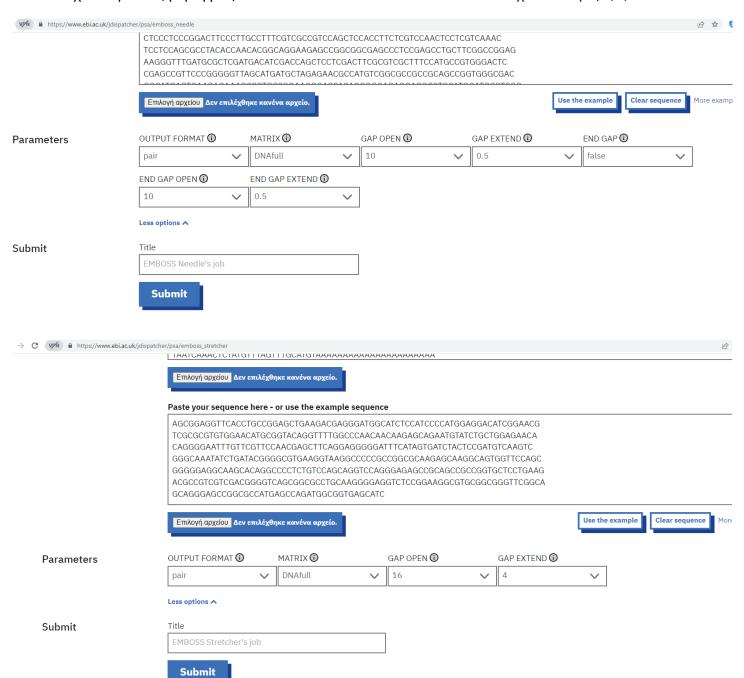




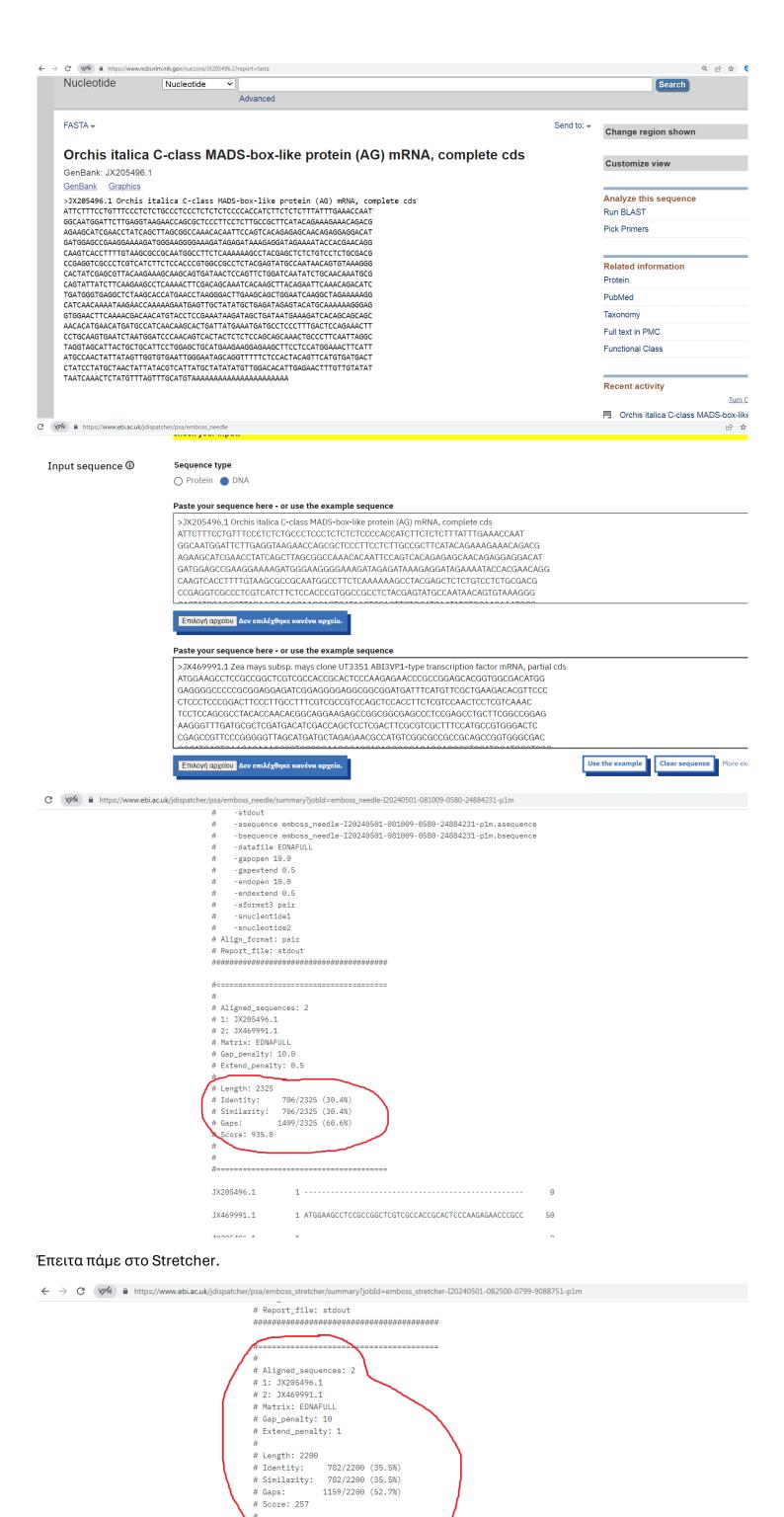
Στην επόμενη άσκηση ψάχνουμε να βρούμε αν 2 αλληλουχίες έχουν κοινούς προγόνους. Έτσι θέλουμε να κάνουμε ευθυγράμμιση και να δούμε τι σκορ λαμβάνουν.

Θα χρησιμοποιήσουμε τα εργαλεία Needle και Stretcher. Μια διαφορά τους είναι ότι το Stretcher χρησιμοποιεί διαφορετική βαθμολόγηση όταν τελειώνουν τα κενά ενώ το Needle δεν το έχει ως

προεπιλογή. Επίσης στις επιλογές που μας δίνουν τα δύο εργαλεία έχουν διαφορετικά νούμερα. Πχ το Needle έχει στην αναζήτησή μας GAP EXTEND=0.5 ενώ το Stretcher έχει επιλογές 1,2,3 κτλ.



Ξεκινάμε με το Needle, βρίσκουμε το Fasta Format των ID που θέλουμε να εισάγουμε.



Εδώ βρήκαμε 35.5% ομοιότητα. Άρα βρήκαμε μεγαλύτερη επιτυχία παρόλο που έχοντας λιγότερες παραμέτρους.

Ш

1 ATGGAAGCCTCCGCCGGCTCGTCGCCACCGCACTCCCAAGAGAACCCGCC

Το επόμενο ζητούμενο είναι να μετατρέψουμε ένα fastq αρχείο σε fasta μορφή.

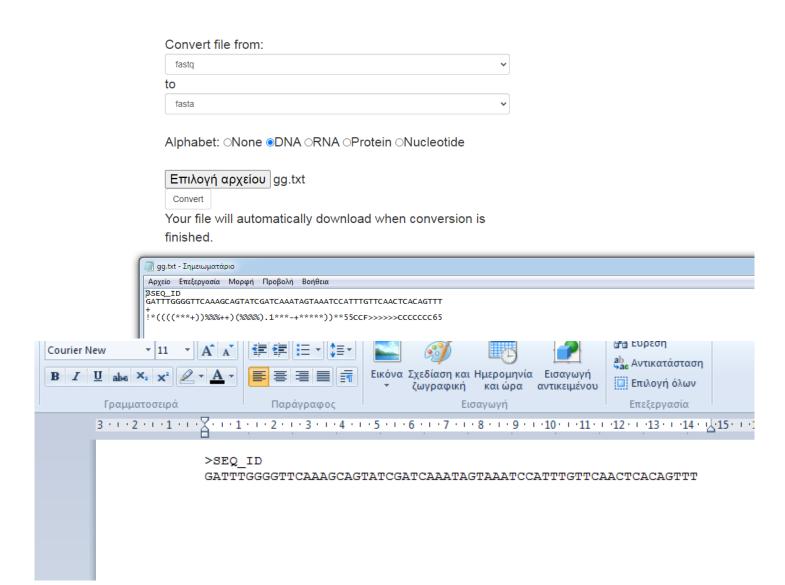
JX469991.1

JX205496.1

Χρησιμοποιούμε πρώτα το εργαλείο <u>Sequence conversion website</u> και βλέπουμε ότι μας δίνει το επιθυμητό output.

Fastq to Fasta Sequence Converter

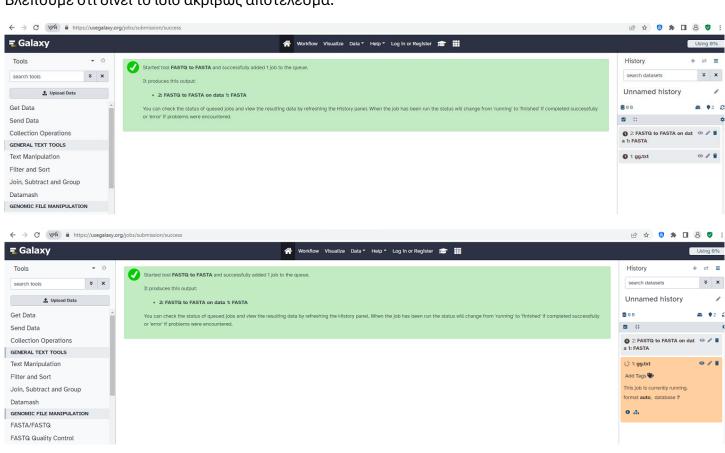
Provided by bugaco.com

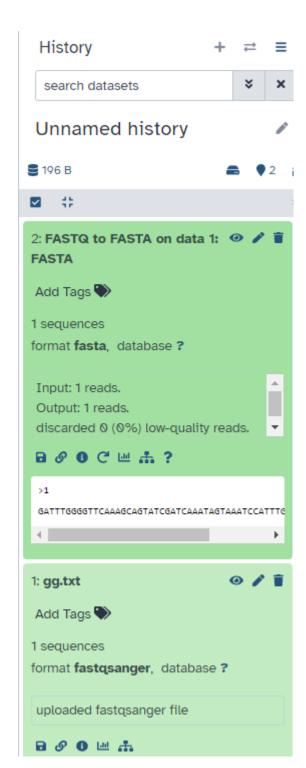


Αποφεύγουμε να χρησιμοποιήσουμε το BlastStation διότι απαιτεί λήψη και αγορά.

Θα δοκιμάσουμε όμως με galaxy.

Βλέπουμε ότι δίνει το ίδιο ακριβώς αποτέλεσμα.





Επίσης θα δοκιμάσουμε και σε biopython.

Input format: **fastq** FASTQ files are a bit like FASTA files but also include sequencing qualities. In Biopython, 'fastq' refers to Sanger style FASTQ files which encode PHRED qualities using an ASCII offset of 33. See also the incompatible 'fastq-solexa' and 'fastq-illumina' variants.

Output format: **fasta** This refers to the input FASTA file format introduced for Bill Pearson's FASTA tool, where each record starts with a '>' line. Resulting sequences have a generic alphabet by default.

How to convert from fastq to fasta?

You can also convert between these formats by using command line tools.

On Windows install WSL, on Mac or Linux start terminal

- On vvindows insta
 Install BioPython
- Run following script:

```
from Bio import SeqIO

records = SeqIO.parse("THIS_IS_YOUR_INPUT_FILE.fastq", "fastq")

count = SeqIO.write(records, "THIS_IS_YOUR_OUTPUT_FILE.fasta", "fasta")

print("Converted %i records" % count)
```

Or you can use this site as online fastq to fasta converter by selecting your formats & file.

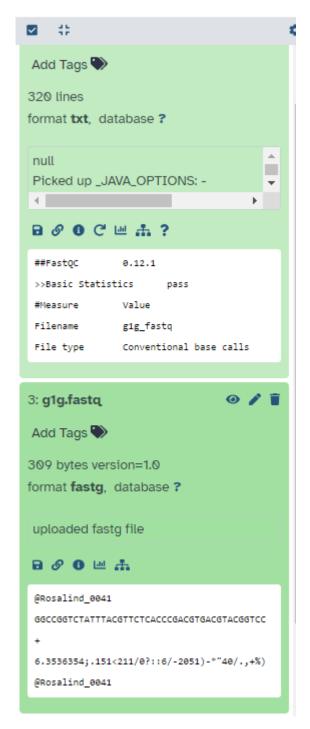
Sequence Converter Home page



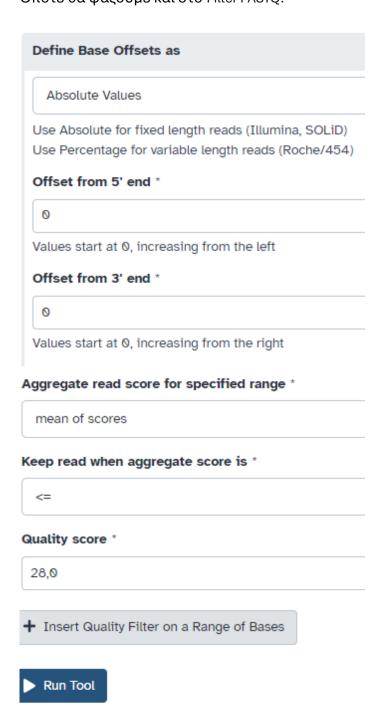
Θα χρησιμοποιήσουμε το εργαλείο fastqc που βρίσκεται online στο site galaxy. Στόχος η ανάλυση ποιότητας ενός fastq αρχείου.

```
@Rosalind_0041
GGCCGGTCTATTTACGTTCTCACCCGACGTGACGTACGGTCC
+
6.3536354;.151<211/0?::6/-2051)-*"40/.,+%)
@Rosalind_0041
TCGTATGCGTAGCACTTGGTACAGGAAGTGAACATCCAGGAT
+
AH@FGGGJ<GB<<9:GD=D@GG9=?A@DC=;:?>839/4856
@Rosalind_0041
ATTCGGTAATTGGCGTGAATCTGTTCTGACTGATAGAGACAA
+
@DJEJEA?JHJ@8?F?IA3=;8@C95=;=?;>D/:;74792.
```

Δυστυχώς με αυτό το εργαλείο δεν καταφέραμε να δούμε πολλά.



Οπότε θα ψάξουμε και στο Filter FASTQ.

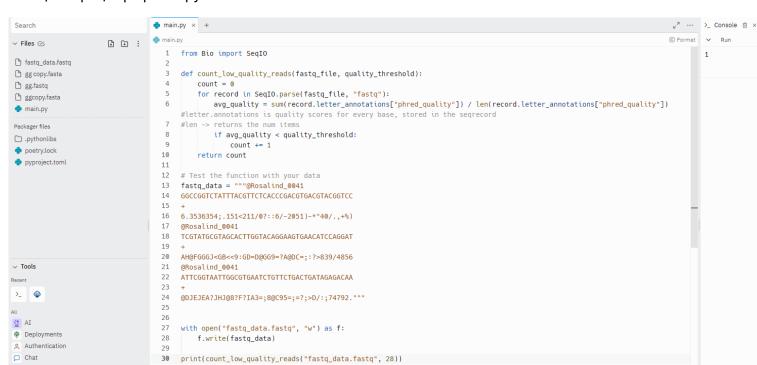


Help



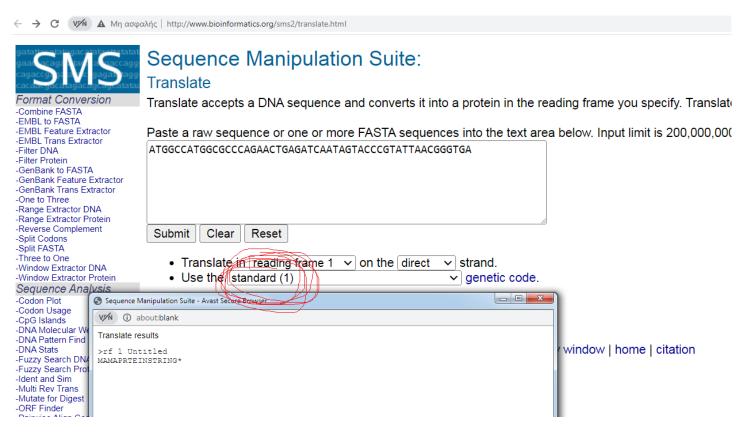
Εδώ βλέπουμε το επιθυμητό αποτέλεσμα.

Τέλος δοκιμάζουμε με biopython.



Τώρα θα μεταφερθούμε στο επόμενο πρόβλημα. Μέσω της σελίδας

http://www.bioinformatics.org/sms2/translate.html, του εργαλείου μετάφρασης του SMS 2. Βλέπουμε ότι για την ακολουθία dna που δώσαμε, παράγεται η ζητούμενη πρωτείνη με το γεννετικό κώδικα 1. Αυτός ο τρόπος είναι αργός καθώς χρειάζεται να κάνουμε πολλά ερωτήματα μέχρι να πετύχουμε το σωστό κώδικα.

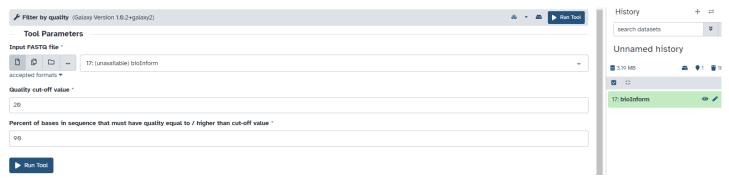


Θα δοκιμάσουμε να λύσουμε το ίδιο πρόβλημα στην biopython.



Τώρα πάμε στο επόμενο πρόβλημα, την εύρεση ποιότητας μέσω του fastg quality filter.

Η απάντηση είναι η αναμενόμενη, 2.





Στο επόμενο πρόβλημα κοιτάμε αν οι 2 ακολουθίες μας είναι ίδιες με τις αντίστροφες συμπληρωματικές τους. Όπως βλέπουμε μόνο η 1 είναι.

Χρησιμοποιήσαμε το Reverse Complement εργαλείο της sms2. Θα χρησιμοποιήσουμε και biopython.

Sequence Manipulation Suite:

Reverse Complement

Reverse Complement converts a DNA sequence into its reverse, complement, or reverse-complement counterpart. The case of each input sequence character is maintained. You may want to work with the reverse complement of a sequence Sequence Manipulation Suite - Avast Secure Browser V/N (i) about:blank Paste the raw sequence or one ers Reverse Complement results >Rosalind_64 ATAT >Rosalind_64 reverse complement >Rosalind_48 **GCATA** >Rosalind_48 reverse complement Submit Clear Reset reverse-complement ✓ *This page requires JavaScript. *You can mirror this page or use Sun 14 Jun 00:37:00 2020 Valid XHTML 1.0; Valid CSS

```
⊌" ··· >_ Console ⊕ ×
main.py × +
                                                                                                                       🔷 main.py > ...
  1 from Bio.Seq import Seq
                                                                                                                               Number of DNA s
  3 dna_strings = {
         "Rosalind_64": "ATAT",
  5 "Rosalind_48": "GCATA"
  6
  8
     # Initialize a counter for the matches
  9 matches = 0
 10
     # Iterate over the DNA strings
 11
 for name, dna_string in dna_strings.items():
         # Create a Seq object for the DNA string
 13
 14
         my_seq = Seq(dna_string)
 15
 16
         # Get the reverse complement of the DNA string
 17
         reverse_complement = my_seq.reverse_complement()
 18
 19
         # If the DNA string matches its reverse complement
 20
         if str(my_seq) == str(reverse_complement):
 21
            matches += 1
 22
 23
 24
     print("Number of DNA strings that match their reverse complements:", matches)
```

```
from Bio.Seq import Seq
my_seq =
print("Adenine :" + str(my_seq.count("A")))
print("Cytosine:" + str(my_seq.count("C")))
print("Guanine :" + str(my_seq.count("G")))
print("Thymine:" + str(my_seq.count("T")))
from Bio import Entrez
Entrez.email = "up1067508@upnet.gr"
handle = Entrez.esearch(db="nucleotide", term="Anthoxanthum" + "[Organism] AND (2003/7/25 :
2005/12/27 [Publication Date])")
record = Entrez.read(handle)
print("\n[GenBank gene database]:", record["Count"])
from Bio import SeqIO
from Bio import Entrez
def fetch_and_convert(ids):
 fasta_records = []
 for id in ids:
   handle = Entrez.efetch(db="nucleotide", id=id, rettype="gb", retmode="text")
   record = SeqIO.read(handle, "genbank")
   handle.close()
   # format to FASTA
   fasta_record = record.format("fasta")
   fasta_records.append(fasta_record)
 # return shorter
 return min(fasta_records, key=len)
Entrez.email = "up1067508@upnet.gr"
ids = ["FJ817486", "JX069768", "JX469983"]
print(fetch_and_convert(ids))
from Bio import Entrez
from Bio import SeqIO
Entrez.email = "up1067508@upnet.gr"
handle = Entrez.efetch(db="nucleotide", id=["FJ817486, JX069768, JX469983"], rettype="fasta")
records = list(SeqIO.parse(handle, "fasta")) # Get the list of SeqIO objects in FASTA format
length = [0, 0, 0]
length[0] = len(records[0].seq) # First record ID
length[1] = len(records[1].seq)
length[2] = len(records[2].seq)
last = min(length)
if last == length[0]:
 print(records[0])
elif last == length[1]:
 print(records[1])
```

elif last == length[2]:

```
from Bio import Entrez
from Bio import SeqIO
from Bio import SeqIO
records = SeqIO.parse("gg.fastq", "fastq")
count = SeqIO.write(records, "ggcopy.fasta", "fasta")
print("Converted %i records" % count)
from Bio import SeqIO
def count_low_quality_reads(fastq_file, quality_threshold):
 count = 0
 for record in SeqIO.parse(fastq_file, "fastq"):
   avg_quality = sum(record.letter_annotations["phred_quality"]) /
len(record.letter_annotations["phred_quality"]) #letter.annotations is quality scores for every base,
stored in the segrecord
#len -> returns the num items
   if avg_quality < quality_threshold:
     count += 1
 return count
# Test the function with your data
fastq_data = """@Rosalind_0041
GGCCGGTCTATTTACGTTCTCACCCGACGTGACGTACGGTCC
6.3536354;.151<211/0?::6/-2051)-*"40/.,+%)
@Rosalind_0041
TCGTATGCGTAGCACTTGGTACAGGAAGTGAACATCCAGGAT
AH@FGGGJ<GB<<9:GD=D@GG9=?A@DC=;:?>839/4856
@Rosalind_0041
ATTCGGTAATTGGCGTGAATCTGTTCTGACTGATAGAGACAA
@DJEJEA?JHJ@8?F?IA3=;8@C95=;=?;>D/:;74792."""
with open("fastq_data.fastq", "w") as f:
 f.write(fastq_data)
print(count_low_quality_reads("fastq_data.fastq", 28))
from Bio.Seq import translate
# Given DNA string
dna_string = "ATGGCCATGGCGCCCAGAACTGAGATCAATAGTACCCGTATTAACGGGTGA"
# Loop over the genetic code tables
for gen_table in range(1, 26): # There are 25 known genetic code tables
 protein_string = translate(dna_string, table = gen_table, to_stop=True) # table -> function of translate
 if protein_string == "MAMAPRTEINSTRING":
   print("The index of the genetic code variant used for translation is "+ str(gen_table))
   break
```

print(records[2])

from Bio.Seq import Seq

```
"Rosalind_64": "ATAT",

"Rosalind_48": "GCATA"

# Initialize a counter for the matches
matches = 0

# Iterate over the DNA strings

for name, dna_string in dna_strings.items():

# Create a Seq object for the DNA string

my_seq = Seq(dna_string)

# Get the reverse complement of the DNA string

reverse_complement = my_seq.reverse_complement()

# If the DNA string matches its reverse complement

if str(my_seq) == str(reverse_complement):

matches += 1
```

dna_strings = {

print("Number of DNA strings that match their reverse complements:", matches)