

Übungen zur Vorlesung Sequenzanalyse

Universität Bielefeld, WS 2024

Prof. Dr. Jens Stoye · Leonard Bohnenkämper

<https://gi.cebitec.uni-bielefeld.de/teaching/2024winter/sa>

Übungsblatt 5 vom 14.11.2024

Abgabe am 21.11.2024 bis 10:00 Uhr (morgens)

Aufgabe 1 (Affine Gapkosten)

(6 Punkte)

1. Warum sollten bei affinen Gapkosten die Gap-open-Kosten d nicht niedriger gewählt als die Gap-extension-Kosten e , also $d \geq e$?
2. Zeige, dass affine Gapkosten subadditiv sind, also dass gilt: $g(\ell_1 + \ell_2) \leq g(\ell_1) + g(\ell_2)$
3. Berechne ein optimales globales Alignment mit affinen Gapkosten der Sequenzen $x = \text{CAGT}$ und $y = \text{CAAGCTGA}$ effizient mit Hilfe des Gotoh-Algorithmus (berechne die Matrizen S , V und H) und gib dessen Gesamtscore an. Verwende dabei: Score für Match = 3, Score für Mismatch = 0, Kosten für Gap-open $d = 3$, sowie Kosten für Gap-extension $e = 1$.

Aufgabe 2 (Suboptimale Alignments)

(6 Punkte)

1. Beschreibe in eigenen Worten, was man unter *überlappenden* lokalen Alignments versteht.
2. Warum ist man bei der Bestimmung von suboptimalen Alignments in erster Linie an *nichtüberlappenden* Alignments interessiert? Welche Probleme möchte man vermeiden?
3. Gegeben seien die Sequenzen $x = \text{ACAGCTTA}$ und $y = \text{ATTCATGTG}$ sowie die folgende Score-Funktion: Match = 3, Mismatch = -2, Indel = -2.
 - (a) Berechne die Alignment-Matrix für lokale Alignments mit dem Smith-Waterman-Algorithmus und gib ein optimales Alignment an.
 - (b) Berechne die Matrix für nichtüberlappende, suboptimale lokale Alignments nach *Waterman-Eggert* und gib das erste suboptimale Alignment an.
 - (c) Aktualisiere die Matrix und gib das nächste suboptimale Alignment an.

Aufgabe 3 (Forward-Backward Technik)

(8 Punkte)

Gegeben seien die Sequenzen $x = \text{ATGCAATC}$ und $y = \text{CTCAGAT}$. Verwende **Einheitskosten** für globale Alignments. Für die Matrizen kannst du die Vorlage auf der nächsten Seite nutzen.

1. Berechne die Edit-Matrix D und die Edit-Matrix D^{rev} der reversen Strings.
2. Berechne die Gesamtkostenmatrix T und die Zusatzkostenmatrix C .
3. Gib ein optimales globales Alignment von s und t an und markiere es in D , D^{rev} , T und C .
4. Erkläre die Hirschberg-Methode an diesem Beispiel.
 - (a) Welche Teile von D , D^{rev} und T werden jeweils berechnet? Markiere es in der jeweiligen Matrix.
 - (b) An welchem Punkt in T "schneidet" der Algorithmus? Markiere auch diesen Punkt.
 - (c) Welche Alignments werden danach rekursiv berechnet?

| | | | | | | | | |
|------------|------------|---|---|---|---|---|---|---|
| <i>D</i> | ϵ | C | T | C | A | G | A | T |
| ϵ | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| G | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |

| | | | | | | | | |
|------------|---|---|---|---|---|---|---|------------|
| <i>D'</i> | C | T | C | A | G | A | T | ϵ |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| G | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |
| ϵ | | | | | | | | |

| | | | | | | | | |
|------------|------------|---|---|---|---|---|---|---|
| <i>T</i> | ϵ | C | T | C | A | G | A | T |
| ϵ | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| G | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |

| | | | | | | | | |
|------------|------------|---|---|---|---|---|---|---|
| <i>C</i> | ϵ | C | T | C | A | G | A | T |
| ϵ | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| G | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| A | | | | | | | | |
| T | | | | | | | | |
| C | | | | | | | | |