

Prof. Dr. Knut Reinert
Thimo Wellner
Sascha Meiers

Institut für Informatik
AG Algorithmische Bioinformatik

Algorithmen und Datenstrukturen in der Bioinformatik

Zusatzprogrammieraufgabe WS 13

Abgabe Montag, 17.02., 15:00 Uhr per SVN

In dieser Programmieraufgabe sollen sie ein multiples Alignment mit dem (*weighted sum of pairs*) Schema bewerten. Die Abgabe ist nicht verpflichtend, es gibt aber bis zu 8 Zusatzpunkte für diese Aufgabe.

Einlesen von multiplen Alignments Schreiben Sie zunächst eine Funktion um ein multiples Alignment im Fasta-Format in einen `vector<string>` einzulesen. Diesmal betrachten wir Peptidsequenzen, wobei keine Unterscheidung zwischen Groß- und Kleinschreibung erfolgen soll. Alle Buchstaben die nicht zum Aminosäurealphabet gehören (z.B. “.” oder “-”) sollen als Gaps verstanden werden. Beachten Sie, dass eine Sequenz diesmal auf mehrere Zeilen aufgeteilt sein kann. Unter `svn.imp.fu-berlin.de/aldabi/WS13/material/aufgabe6` finden Sie ein Beispiel mit 2304 Sequenzen der Länge 277 sowie ein Code-Snippet das Ihnen beim Einlesen behilflich sein kann.

Sum-of pairs scoring Berechnen Sie den Score des Alignments gemäß dem sum of pairs Score und geben Sie diesen aus. Die Gewichte aller Sequenzen sind 1. Verwenden Sie als Distanzmaß die Blosom62 Matrix und beachten Sie, dass Gaps einen Score von -2, aber Gaps gegen Gaps immer einen Score von Null erhalten. Dies Ausgabe des Score ist obligatorisch.

Freiwillig: Cache-lokales Programmieren Schreiben Sie die Funktion zum Score-Berechnen in 2 verschiedenen Versionen in denen der Score einmal **spaltenweise** und einmal **zeilenweise** berechnet wird. Messen Sie dann die Laufzeiten der beiden Funktionen mit dem `clock()`-Befehl an einem ausreichend großen Beispiel und geben Sie diese wie im unten gezeigten Format aus. Beachten Sie die Umrechnung in Millisekunden (siehe auch `CLOCKS_PER_SEC`):

```
sascha@sascha $ ./aufgabe6 ../../material/aufgabe6/PF00240_rp15.txt
Row time:1980ms
Column time:2810ms
Score:218930916
```

Praktikumshinweise Beachten Sie die Hinweise unter <https://www.mi.fu-berlin.de/w/ABI/AlDaBiWS13Praktikum>.