

Prof. Dr. Knut Reinert
Sascha Meiers
Thimo Wellner

Institut für Informatik
AG Algorithmische Bioinformatik

Algorithmen und Datenstrukturen der Bioinformatik

Neuntes Übungsblatt WS 13/14

Abgabe Montag, 20.12., 15:00 Uhr

Name:

Matrikelnummer:

Niveau I

Progressives Alignment mit Guide-Tree

Gegeben seien die Sequenzen $S1 = \text{ATCT}$, $S2 = \text{AGCT}$, $S3 = \text{TGCT}$, sowie folgendes Scoring-scheme:

- +2 for match
 - -3 or mismatch
 - -1 for gap
 - -1 otherwise
- a) Matchen Sie zuerst paarweise zwei Sequenzen und geben Sie die DP-Matrix an. Matchen Sie danach dieses Alignment paarweise mit der dritten Sequenz, auch hier mit DP-Matrix.
- b) Erläutern Sie, warum bei diesen 3 Sequenzen mit diesem Scoring-scheme ein Guide-Tree unnötig ist. Gehen Sie dabei auf die Komplikationen des Alignens entfernter Sequenzen ohne Guide-Tree ein.
-

MSA im 3-Dimensionalen

Wie aus Vorlesung und Übung bekannt, ist die Rekursion im globalen multiplen Sequenzalignment in 3 Dimensionen:

$$F(i, j, k) = \max \begin{cases} F(i-1, j-1, k-1) + s(a_{1i}, a_{2j}, a_{3k}), \\ F(i-1, j-1, k) + s(a_{1i}, a_{2j}, -), \\ F(i-1, j, k-1) + s(a_{1i}, -, a_{3k}), \\ F(i, j-1, k-1) + s(-, a_{2j}, a_{3k}), \\ F(i-1, j, k) + s(a_{1i}, -, -), \\ F(i, j-1, k) + s(-, a_{2j}, -), \\ F(i, j, k-1) + s(-, -, a_{3k}), \end{cases}$$

for $1 \leq i \leq n_1; 1 \leq j \leq n_2; 1 \leq k \leq n_3;$

- a) Überlegen Sie sich, wie die Initialisierung aussehen muss, damit die Rekursion funktioniert.
- b) Bei DP wird die Rekursion ja durch Speichern der Werte eigentlich Bottom-Up ausgeführt. Überlegen Sie sich und beschreiben Sie eine "Reihenfolge", in der der Quader ausgefüllt werden kann, sodass einer Rekursion nie die benötigten Felder fehlen.

Niveau II

MSA im n-Dimensionalen

Die Anzahl der benötigten Aufrufe (Rekursionsmöglichkeiten) steigt mit $n = \text{Anzahl der Sequenzen}$ rasant an.

- a) Geben sie eine Bildungsvorschrift für diese Anzahl der zu betrachtenden Felder pro einzeltem Feld in Abhängigkeit zu n an.
- b) Stellen Sie eine Vermutung für eine beschreibende Schranke auf.