

# Парные выравнивания биологических последовательностей

*А.Б.Рахманинова, С.А.Спирин*

*2008*

*(продолжение)*

# Змей-Горыныч биоинформатики

**Биологическая задача –  
поставить друг под другом  
гомологичные позиции**

**Математическая задача –  
формализация биологической,  
например, найти способ  
количественного  
сравнения качества  
выравниваний.**

**Программирование – создание  
эффективного алгоритма и  
его реализация**



# При заданных параметрах существует единственное оптимальное парное выравнивание !

Построение парного выравнивания по алгоритму Нидельмана-Вунша  
(пример из упр. студента ФББ)

## Оптимальное выравнивание

**seq1 : MA-RR**

**seq2 : CADRQ**

при условии, что  
вес совпадения: 2  
вес замены: -1  
штраф за делецию: -2

		M	A	R	R	
		0	← -2	← -4	← -6	← -8
C		↑ -2	↖ -1	↖ -3	↖ -5	↖ -7
A		↑ -4	↑ -3	↖ 1	← -1	← -3
D		↑ -6	↑ -5	↑ -1	↖ 0	← -2
R		↑ -8	↑ -7	↑ -3	↖ 1	↖ 2
Q		↑ -10	↑ -9	↑ -5	↑ -1	↖ 0

# Перемешивание и дубликация «удачных» доменов

3

бе

EC 4.1.2.25

~~243~~  
50  
белка



EC 2.7.6.3

бе



EC 2.5.1.15

ЛК

• 25 белков



• 9 белков



• 2 белка



• 12 белков

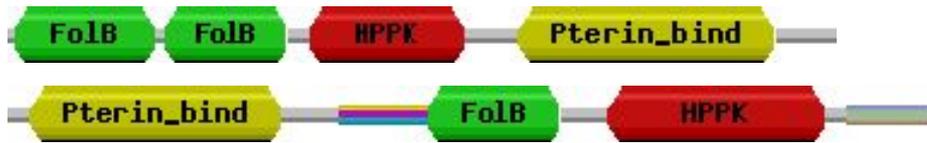


**Домен – единица эволюции, структуры и функции белков.**

Домен – компактная, относительно независимо сворачивающаяся структура, относительно консервативная в процессе эволюции.

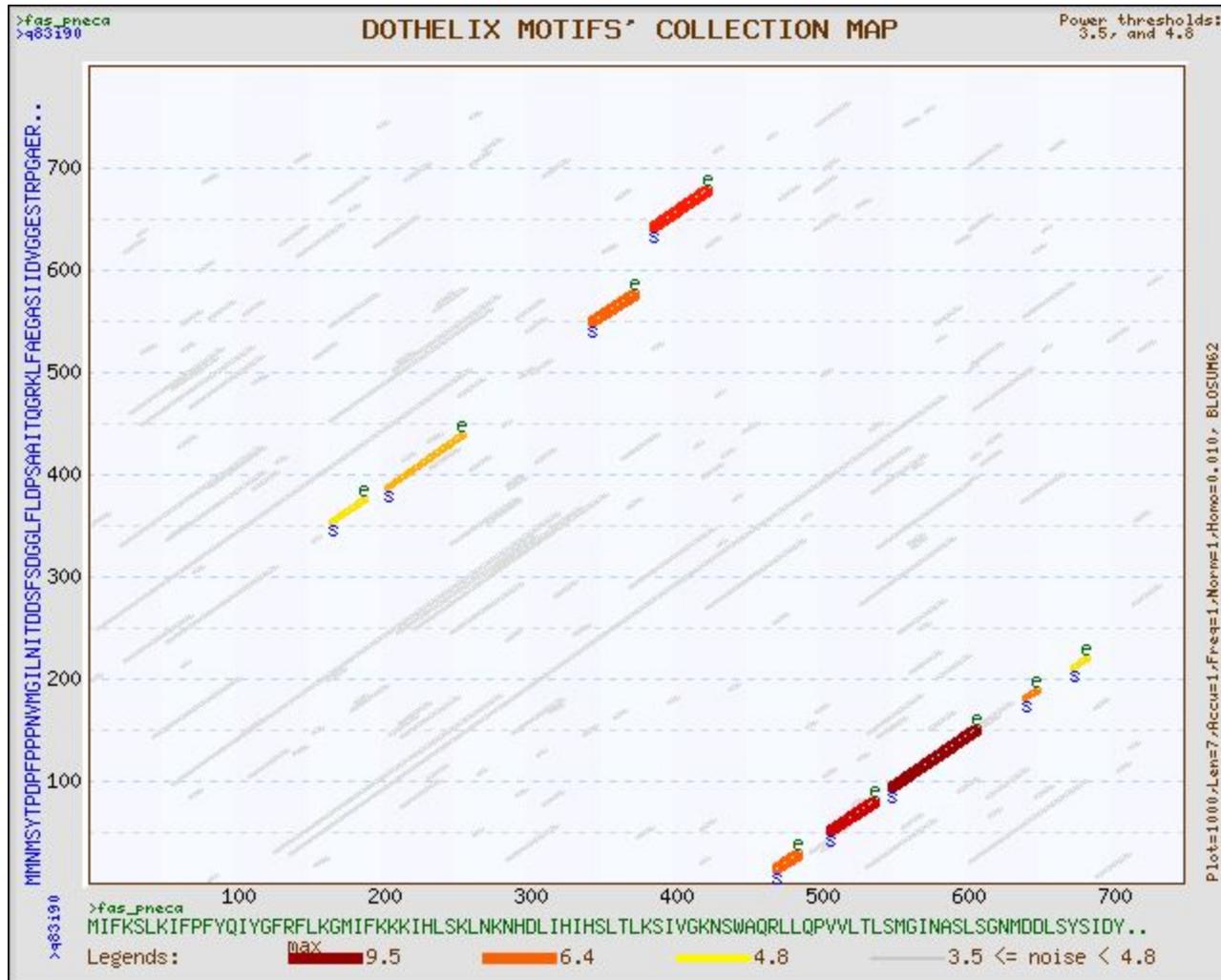
Белок может состоять из одного или многих доменов.

# Карта локального сходства



FAS\_PNECA (по горизонтали)

Q83I90\_TROW8 (по вертикали)



# Типы выравниваний

	Глобальные (полные)	Локальные (частичные)
Парные	<i>needle, .....</i>	<i>water, matcher...</i>
Множественные		

Выбор способа выравнивания  
зависит от биологической задачи!