

# 5. Übung zur Vorlesung “Einführung in die Bioinformatik I, 2. Teil”

Sommersemester 2016

Prof. Peter Dittrich, Marcus Ludwig

Ausgabe: 12. Mai 2016,  
Abgabe: 19. Mai 2016 zu Beginn der Übung

**Aufgabe 1 (4 Punkte):** Beweisen Sie formal die Äquivalenz der folgenden Aussagen über einen ungerichteten Graphen  $G = (V, E)$ :

1.  $G$  ist ein Baum, d.h. zwischen zwei beliebigen Knoten gibt es genau einen Pfad.
2.  $G$  ist zusammenhängend und kreisfrei.

**Aufgabe 2 (6 Punkte):** Zeichnen Sie alle phylogenetischen Wurzelbäume mit vier Objekten A, B, C, D. Beachten Sie, dass die Bäume nicht unbedingt binär (voll aufgelöst) sein müssen. Wie viele phylogenetische Wurzelbäume gibt es? Zwei Bäume seien *benachbart*, wenn der eine aus dem anderen durch Kontraktion<sup>1</sup> genau einer Kante hervorgeht. Zeichnen Sie den Nachbarschaftsgraphen<sup>2</sup> der Bäume.

**Aufgabe 2 (10 Punkte):** Implementieren Sie den Smith-Waterman-Algorithmus für lokale Alignments in Python<sup>3</sup>. Es soll ein optimales Alignment ausgegeben werden. Benutzen Sie dabei die Ähnlichkeitsfunktion  $S : \{A, C, G, T\} \times \{A, C, G, T\} \rightarrow \mathbb{R}$ :

- $S(A, A) = 2, S(C, C) = S(G, G) = S(T, T) = 1,$
- $S(C, G) = S(G, C) = 1, S(a, b) = -1$  für alle anderen  $a \neq b,$  und
- $S(a, -) = S(-, b) = -1.$

---

<sup>1</sup>Kontraktion (Zusammenziehen) einer Kante  $\{u, v\}$  bedeutet, dass  $u$  und  $v$  zu einem Knoten verschmolzen werden, wobei die Kante  $\{u, v\}$  verschwindet. Alle Kanten, die vorher inzident zu  $u$  oder  $v$  waren, sind dann inzident zum neuen Knoten.

<sup>2</sup>Jeder Knoten steht für einen der phylogenetischen Bäume. Zwei Knoten werden verbunden, wenn die beiden entsprechenden Bäume benachbart sind. *Achtung:* Die Beschriftung der Blätter muss beachtet werden.

<sup>3</sup>Einige Webseiten zu Python:

- [www.activestate.com/activepython/downloads](http://www.activestate.com/activepython/downloads) - Guter Installer für Windows
- [www.linux-user.de/ausgabe/2006/09/080-python-1](http://www.linux-user.de/ausgabe/2006/09/080-python-1) - Übersicht
- [www.freiesmagazin.de/freiesMagazin-2011-04-02](http://www.freiesmagazin.de/freiesMagazin-2011-04-02) - Umfangreiche Einführung
- [docs.python.org/tutorial](http://docs.python.org/tutorial) - Ausführliches Tutorial

Testen Sie das Programm mit Strings aus der Übung und weiteren Beispielen. Abgabe via E-Mail. Matrizen werden in Python am besten durch geschachtelte Listen umgesetzt.

**Wichtig: Wir benutzen Python oder Java!**

**Bonusaufgabe (6 Punkte):** Zeichnen Sie alle (nicht-gewurzelten) phylogenetischen Bäume mit 5 Objekten A, B, C, D, E. Beachten Sie, dass auch hier die Bäume nicht notwendig binär (voll aufgelöst) sein müssen. Wie viele phylogenetische Bäume gibt es? Was fällt Ihnen im Vergleich zur Aufgabe 2 auf?