

## MÉTODOS ESTATÍSTICOS EM BIOINFORMÁTICA<sup>(1)</sup> MÉTODOS ESTATÍSTICOS EM GENÉTICA<sup>(2)</sup>

 $2.^{\circ}$  semestre – 2023/2024

Projeto - Parte 1 Prazo: 30 de junho de 2023

(1) individual (ponderação: 15% da nota final do projeto)

(2) grupos de 2 elementos (ponderação: 15% da nota final do projeto)

A estrutura secundária das proteínas é dada pelo arranjo espacial de aminoácidos próximos entre si na sequência primária da proteína. Esta estrutura diz respeito aos padrões regulares e repetitivos que ocorrem localmente no enovelamento do esqueleto da proteína. Os dois arranjos locais mais comuns nas proteínas são:  $\alpha$ -hélice ( $\alpha$ -helix) e folha- $\beta$  ( $\beta$ -sheet)<sup>1</sup>.

Suponha que se pretende predizer a estrutura secundária de uma proteína com base numa cadeia de Markov escondida. Dessa proteína conhece-se apenas a estrutura primária (sequência de aminoácidos) e sabe-se que os primeiros aminoácidos (N-terminal) se dispõem na em folha- $\beta$ . Tendo em conta o conteúdo da Fig.1, responda às seguintes questões:

<sup>1</sup>http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo4/modulo4/topico1.php http://www.particlesciences.com/news/technical-briefs/2009/protein-structure. html

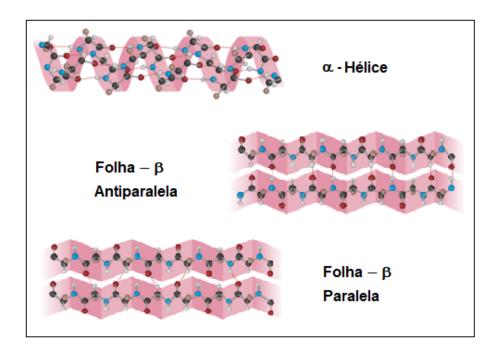


Fig. 1 - Representação de três estruturas secundárias possíveis, para a proteína em estudo.

- a. Descreva e defina o conjunto de estados possíveis da cadeia de Markov. Considere três estados.
- b. Indique o conjunto de sinais emitidos pelos estados. Justifique.
- c. Construa o vetor da distribuição inicial e indique a forma das matrizes das probabilidades de transição e emissão.

**Nota:** Use letras sempre que necessário e indique todas as restrições sobre os parâmetros.

- d. Contrua o esquema da cadeia de Markov escondida referente à estrutura em estudo, indicando estados e sinais possíveis, assim como as transições, as emissões e as respetivas probabilidades.
- e. Avalie a cadeia considerada quanto a: estacionariedade, irredutibilidade e reversibilidade. Justifique.