

## LISTA DE EXERCÍCIOS II

### Instruções:

- A resolução do exercício deve ser feita **individualmente**. Cópias evidentes entre trabalhos não serão aceitas.
- A entrega deve ser online via Moodle (exclusivamente), somente até a data especificada.
- Para cada uma das tarefas deve-se entregar o com código fonte. O nome do arquivo deve identificar a tarefa, exemplo "e2-1a.py" referente ao item "1a" da tarefa. Arquivos corrompidos serão desconsiderados.
- Além do código fonte deve-se entregar um único arquivo PDF com o nome "e1-il.pdf" apresentando o pseudocódigo do algoritmo desenvolvido e os resultados encontrados.
- Não serão aceitos trabalhos atrasados.
- Data de entrega: 23.08.2018 (quinta-feira) até as 13:00 via Moodle (<https://moodle.ufrgs.br/login/index.php>).

NOME: ..... CARTÃO: .....

*A hemoglobina dos vertebrados, o transportador de oxigênio nas hemácias, é constituída por quatro cadeias polipeptídicas, duas de um tipo, e duas de outro. As quatro são mantidas juntas por ligações não covalentes. Cada uma contém um grupo heme e um só centro de ligação ao oxigênio. A hemoglobina A, a principal dos adultos, é constituída por duas cadeias alfa ( $\alpha$ ) e duas beta ( $\beta$ ). A seguir está listada a sequência de aminoácidos da hemoglobina  $\alpha$  (apenas uma cadeia) em diferentes espécies. Nota-se que ocorrem variações de uma sequência quando comparada a outra, entretanto a hemoglobina exerce a mesma função independente da espécie: é responsável pelo transporte de oxigênio e gás carbônico.*

Human (Homo sapiens) [TaxId: 9606]

2DN3:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

VLSPADKTNVKAAGWGVGAHAGEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNAL  
SALSDDLHAHKLRLVDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHASLDKFLASVSTVLTSKY

Horse (Equus caballus) [TaxId: 9796]

2D5X:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

VLAAADKTNVKAAGWGVGAHAGEYGAELERMFLGFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKAHGKKVGDALTAVGHLLDLPGL  
SNLSDDLHAHKLRLVDPVNFKLLSHCLLVTLAVHLPNDFTPAVHASLDKFLSSVSTVLTSKYR

Deer (Odocoileus virginianus) [TaxId: 9874]

1HDS:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

VLAAANKSNVKAAGWGVGNAPAYGAQALQRMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKAHGQKVANALTKAQHLLNDLPGL  
SNLSNLHAHKLRLVDPVNFKLLSHSLLVTLASHLPTNFTPAVHANLNKFLANDSTVLTSKYR

Cow (Bos taurus) [TaxId: 9913]

2QSS:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

VLAAADKGNVKAAGWGVGAHAGEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGAKVAAALTKAVEHLDDLPGL  
SELSDDLHAHKLRLVDPVNFKLLSHSLLVTLASHLPSDFTPAVHASLDKFLANVSTVLTSKYR

Pig (Sus scrofa) [TaxId: 9823]

1QPW:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

VLSAADKANVKAAGKVGQAGAHGAEALERMFLGFPTTKTYFPHFNL SHGSDQVKAHGQKVADALTKAVGHLDDLPGAL  
SALSDDLHAKLRVDPVNFKLLSHCLLVTLAAHHPDDFNPSVHASLKD KFLANVSTVLTSKYR

Maned wolf (*Chrysocyon brachyurus*) [TaxId: 68728]

1FHJ:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

VLSPADKTNIKSTWDKIGGHAGDYGGEALDRTFQSFPTTKTYFPHFDLSPGSAQVKAHGKKVADALT TAVAHLLDDLPGAL  
SALSDDLHAYKLRVDPVNFKLLSHCLLVTLACHHPTEFTPAVHASLKDFFTAVSTVLTSKYR

Chicken (*Gallus gallus*) [TaxId: 9031]

1HBR:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

MLTAEDKKLIQAWWEKAASHQEFGAEALTRMFTTYPQTKTYFPHFDLSPGSDQVRGHGKKVLGALGNAVKNVDNLSQAM  
AELSNLHAYNLRVDPVNFKLLSQCIQVVLAVHMGKDYTPEVHAAFDKFLSAVSAVLAEKYR

Trout (*Oncorhynchus mykiss*) [TaxId: 8022]

1OUT:A|PDBID|CHAIN|SEQUENCE

XSLTAKDKSVVKAFWGKISGKADVVGAEALGRMLTAYPQTKTYFSHWADLSPGSGPVKKHGGIIMGAIGKAVGLMDDL VG  
GMSALSDDLHAFKLRVDPGNFKILSHNLTALAIHFPSDFTPEVHIAVDKFLAAVSAALADKYR

Implemente um conjunto de rotinas computacionais para realizar as tarefas que seguem:

1. Desenvolva um algoritmo que leia duas seqüências  $n$  e  $m$ .
2. Implemente o algoritmo de Needleman-Wunsch para alinhar estas seqüências.
3. O programa deve imprimir na tela a tabela final de alinhamento, as duas cadeias alinhadas e identidade do alinhamento.
4. O programa deve imprimir na tela o score do alinhamento.
5. Regras:
  - Valor para GAP: -4
  - Valor para Match: +5
  - Valor para Mismatch: -3
  - $S_{i,j} = \text{MAX} \begin{bmatrix} S_{i-1,j-1} + s(a_i, b_j)(\text{match/mismatch}) \\ S_{i,j-1} + \text{gap}(\text{seq1}) \\ S_{i-1,j} + \text{gap}(\text{seq2}) \end{bmatrix}$
6. Com base na identidade e no score do alinhamento informe qual das espécies acima apresenta a maior semelhança, em termos de seqüência, com a espécie humana (*homo sapiens*)?

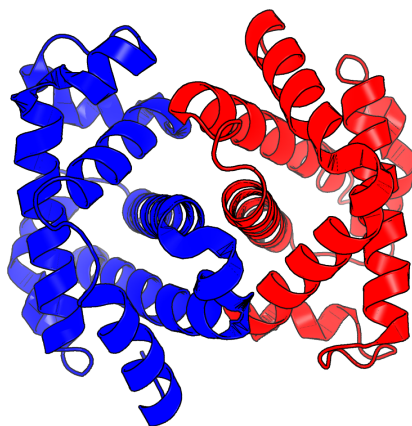


Figure 1: Human (*Homo sapiens*) Hemoglobin. PDB ID: 2DN3.