

Arquivo de ajuda - Atividade 4: As caixas abaixo mostram parte do arquivo de saída para 3 modelos: M0, M3 e M8, com informações que vão te ajudar a completar a Atividade 4. Repare que estes exemplos são para um dataset menor do que o que você vai usar na Atividade 4 (isso foi feito para que pudessem caber nas páginas deste arquivo de ajuda).

Caixa 1 - parte dos resultados para o modelo de codon **M0**, com comentários:

```
.
.
.
TREE # 1: (((((3, 4), 1), 2), 5); MP score: 154
This is a rooted tree. Please check!
lnL(ntime: 8 np: 10): -1055.334638
  6..7    7..8    8..9    9..3    9..4
  0.600255 0.085489 0.209403 0.355149 0.794944 1.801114 0.079244

Note: Branch length is defined as number of substitutions per codon (not per nucleotide site).

tree length = 3.10091

(((3: 0.355149, 4: 0.794944): 0.209403, 1: 0.249128): 0.085489, 2: 0.231447): 0.600255, 5: 0.575094);

(((rabbit: 0.355149, rat: 0.794944): 0.209403, human: 0.249128): 0.085489, goat-cow: 0.231447): 0.600255,
marsupial: 0.575094);

Detailed output identifying parameters

kappa (ts/tv) = 1.80111
omega (dN/dS) = 0.07924
.
.
.
```

Este é o valor de log likelihood (lnL), calculado para um dataset com 5 sequências

Esta é a estimativa de ML (máximo likelihood) do parâmetro kappa, para o modelo M0

Esta é a estimativa de ML do parâmetro ômega, para o modelo M0

Caixa 2 - Veja aqui parte dos resultados para o modelo de códon **M3**, com $k=3$ classes de sítio:

```

.
.
.
Model 3: discrete (3 categories)

TREE # 1: (((3, 4), 1), 2), 5); MP score
This is a rooted tree. Please check!
lnL(ntime: 8 np: 14): -1045.839986 ← +0
  6..7      7..8      8..9      9..3      9..4
  0.695909 0.078848 0.194592 0.373577 0.883911 0.285355 0.219268 0.631211 1.823190 0.464043 0.514623
  0.008677 0.142536 1.344918

Note: Branch length is defined as number of nucleotide substitutions per codon (not per nucleotide site).
tree length = 3.36267

(((3: 0.373577, 4: 0.883911): 0.194592, 1: 0.285355): 0.078848, 2: 0.219268): 0.695909, 5: 0.631211);
(((rabbit: 0.373577, rat: 0.883911): 0.194592, human: 0.285355): 0.078848, goat-cow: 0.219268): 0.695909,
marsupial: 0.631211);

Detailed output identifying parameters

kappa (k) = 319
      p0      p1      p2
dN/dS for site classes (K=3)
p:  0.46404  0.51462  0.02133
w:  0.00868  0.14254  1.34492
.
.
.
      ω0      ω1      ω2

```

Este é o valor de log likelihood (lnL), calculado para o modelo M3 usando o mesmo dataset

Estimativas ML das **proporções** de sítios nas classes 1, 2 e 3

Estimativas ML do **ômega** nas classes de sítio 1, 2 e 3

Caixa 3 - Veja aqui parte dos resultados para o modelo de códon **M8**:

```
.
.
.

Model 8: beta&w>1 (11 categories)

TREE # 1: (((((3, 4), 1), 2), 5); MP score
This is a rooted tree. Please check!
lnL(ntime: 8 np: 13): -1046.003808 ← +0
    6..7    7..8    8..9    9..3    9..4
    0.694589 0.081476 0.198355 0.369476 0.877899 0.279892 0.219450 0.635145 1.831201 0.984555 0.693123
    7.401686 1.438893

Note: Branch length is defined as number of nucleotide substitutions per codon (not per nucleotide site).
tree length = 3.35628

((((3: 0.369476, 4: 0.877899): 0.198355, 1: 0.279892): 0.081476, 2: 0.219450): 0.694589, 5: 0.635145);
(((rabbit: 0.369476, rat: 0.877899): 0.198355, human: 0.279892): 0.081476, goat-cow: 0.219450): 0.694589,
marsupial: 0.635145);

Detailed site identifications
kappa (t = 1.8)

Parameters in M8 (beta&w>1):
  p0= 0.98456  p= 0.69312  q= 7.40169
  (p1= 0.01544) w= 1.43889
```

Este é o valor de log likelihood (lnL), calculado para o modelo M8 usando o mesmo dataset

p_0

Parâmetro beta p

Parâmetro beta q

p_1

$\omega > 1$

OBS:

p e q são parâmetros de forma para a distribuição Beta

p_0 é a **proporção** de sítios beta-distribuídos

p_1 é a **proporção** de sítios com $\omega > 1$

Um dos valores ω é restrito para ficar acima de 1