

# *Анализ*

## *символьных последовательностей*

от биоинформатики до лингвистики

**М.А. Ройтберг**

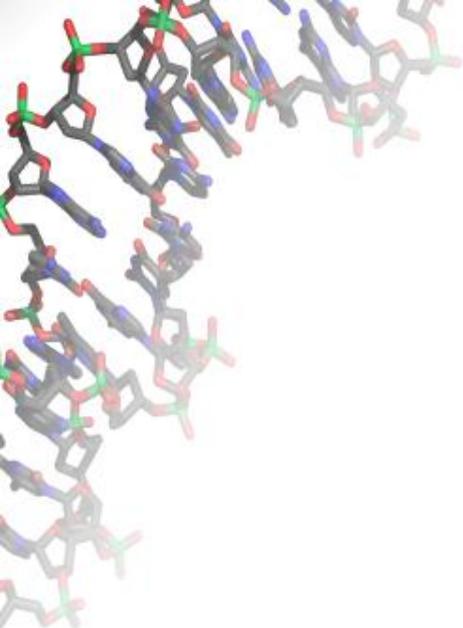
**Занятие 3**

**ГИПЕРГРАФЫ**

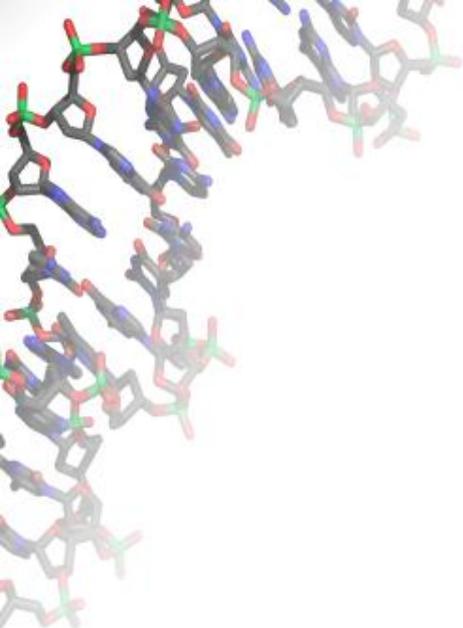
(часть 2)

**Я**ндекс

*25 февраля 2014*



# **ПОВТОРЕНИЕ. ЧТО БЫЛО НА 2-М ЗАНЯТИИ**



# **ГИПЕРГРАФЫ: ФОРМАЛЬНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ**

# 1. Гиперграф, гиперребро

Ориентированный гиперграф (ОГ-граф) над полукольцом  $A$  – это

пятерка  $G = (V, q_0, E, A, f)$ , где

$V$  – конечное множество вершин;

$q_0 \in V$  – стартовая вершина;

$E$  – конечное множество гиперребер,

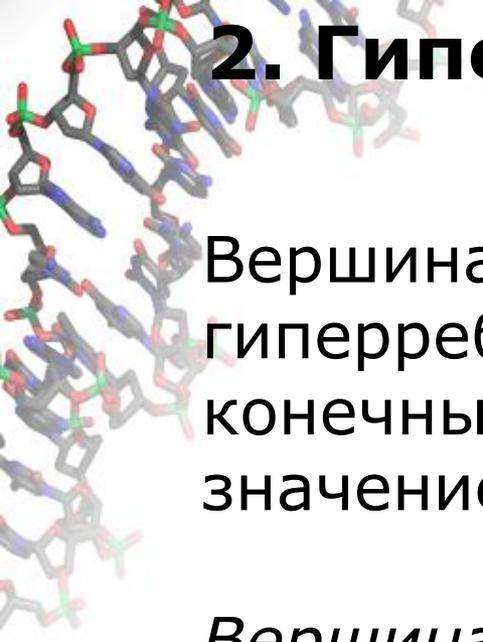
т.е. пар вида  $(v, W)$ , где

$v \in V$ ,

$W$  – упорядоченный список  
вершин из  $V$ ;

$A$  – полукольцо;

$f: E \rightarrow A$  – функция пометок на ребрах.



## 2. Гиперребро. Начальная вершина. Конечные вершины.

Вершина  $v$  называется *начальной* вершиной гиперребра  $e=(v, W)$ , вершины из  $W$  называются конечными вершинами этого гиперребра; значение  $f(e) \in A$  называется *весом* гиперребра  $e$ .

*Вершина  $v$  ОГ-графа  $G$  называется терминальной, если в  $G$  нет гиперребра, в котором  $v$  является начальной вершиной.*

Аналог пути в графе - гиперпуть в гиперграфе

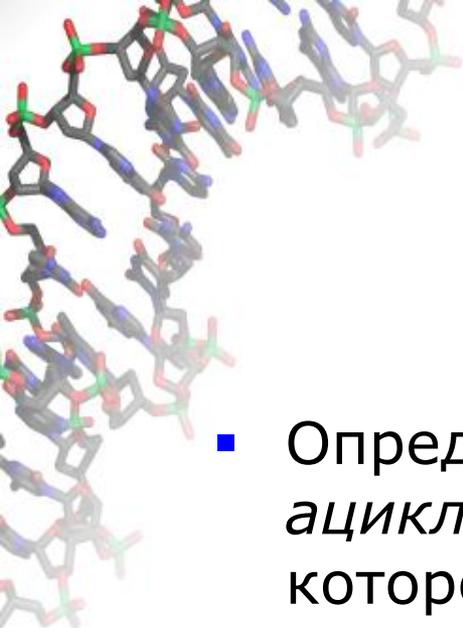
### 3. Гиперпуть.

Гиперпуть в ОГ-графе  $G = (V, q_0, E, f)$  – это такое конечное упорядоченное помеченное дерево  $T$ , что

- 1) каждый узел дерева  $T$  помечен вершиной ОГ-графа  $G$ ; одна вершина  $v$  из  $V$  может соответствовать нескольким узлам дерева  $T$ .
- 2) каждому внутреннему узлу  $g$  дерева  $T$  соответствует гиперребро  $e = (v, W)$ , причем узел  $g$  помечен вершиной  $v$ , а список пометок в сыновьях узла  $g$ , взятых в порядке, предписанном деревом  $T$ , совпадает со списком  $W$ .

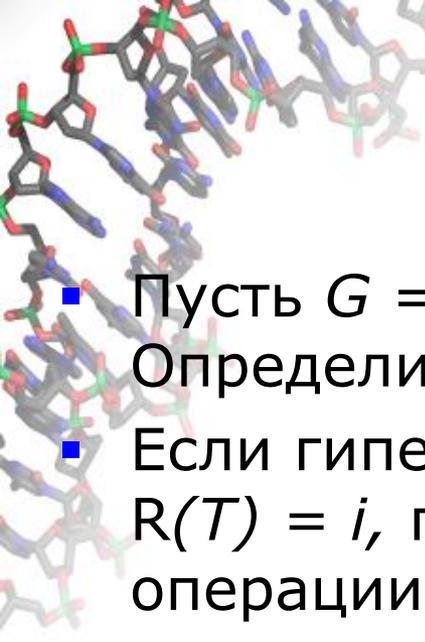
*Корневое гиперребро* гиперпути  $T$  – гиперребро, соответствующее корню  $T$ .

*Начальная (корневая) вершина* – вершина, соответствующее корню  $T$ .



## 4. Ацикличность

- Определение. ОГ-граф  $G = (V, q_0, E)$  называется *ациклическим*, если в  $G$  не существует потока, в котором корень помечен той же вершиной, что и еще какой-либо узел этого потока.
- Очевидно, в *ациклическом* ОГ-графе существует лишь конечное число различных потоков.
- **Вес  $R(T)$  гиперпути  $T$  (аналог веса пути на графах) определяется рекурсивно.**



## 5. Вес гиперпути: рекурсивное определение

- Пусть  $G = (V, q_0, E, f)$  – ОГ-граф;  $T$  – гиперпуть в  $G$ . Определим *вес*  $R(T)$  гиперпути  $T$  следующим образом.
- Если гиперпуть  $T$  состоит из единственного узла, то  $R(T) = i$ , где  $i$  – нейтральный элемент относительно операции  $*$  (умножения).
- Пусть корень  $T$  помечен гиперребром  $e = (v, W)$ ;  $x_1, \dots, x_N$  – упорядоченный список сыновей корня дерева  $T$ ;  $T_k$  – поддереву дерева  $T$  с корнем в узле  $x_k$  ( $k = 1, \dots, N = |W|$ ). Тогда

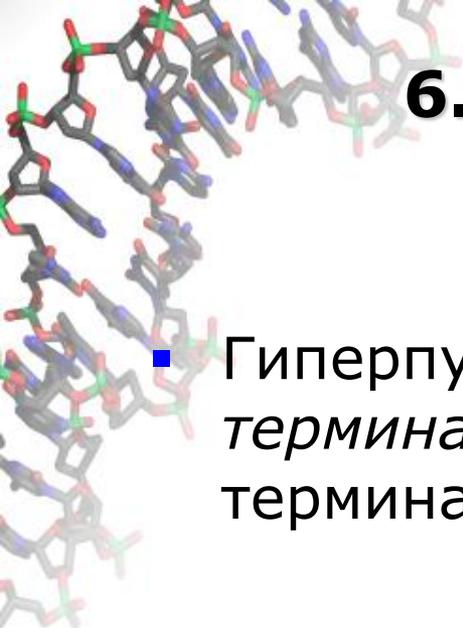
$$R(T) = f(e) * R(T_1) * \dots * R(T_N)$$

## 5. Вес гиперпути: явное определение

- Пусть  $G = (V, q_0, E, f)$  – ОГ-граф;  $T$  – гиперпуть в  $G$ . Пусть корень  $T$  помечен гиперребром  $e = (v, W)$ ;  $x_1, \dots, x_N$  – упорядоченный список сыновей корня дерева  $T$ ;  $T_k$  – поддереву дерева  $T$  с корнем в узле  $x_k$  ( $k = 1, \dots, N = |W|$ ). Тогда

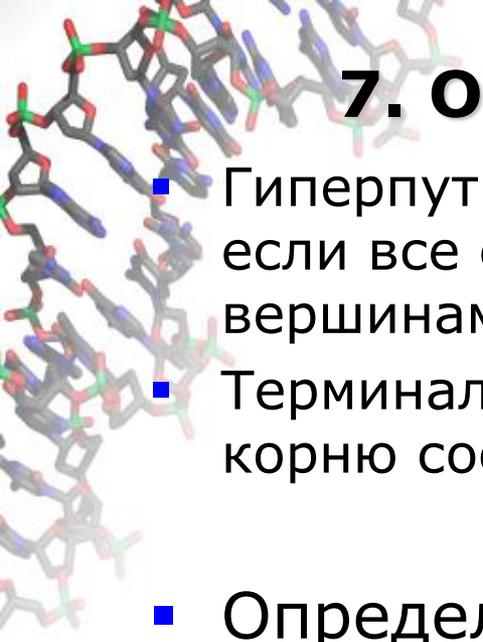
$$R(T) = f(e) * R(T_1) * \dots * R(T_N)$$

**Вес гиперпути  $T$  это произведение весов гиперребер (в смысле операции  $*$ ), соответствующих узлам  $T$ , причем порядок перемножения соответствует левому обходу дерева  $T$  в глубину.**



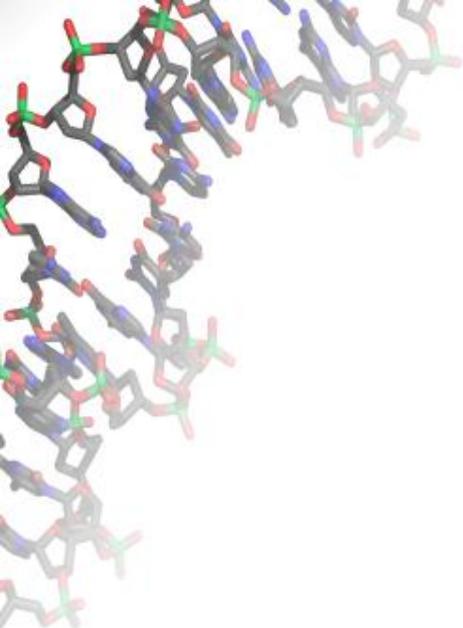
## 6. Терминальные и полные пути

- Гиперпуть  $T$  в ОГ-графе  $G$  называется *терминальным*, если все его листья соответствуют терминальным вершинам ОГ-графа  $G$ .
- Терминальный гиперпуть называется *полным*, если его корню соответствует стартовая вершина ОГ-графа  $G$ .

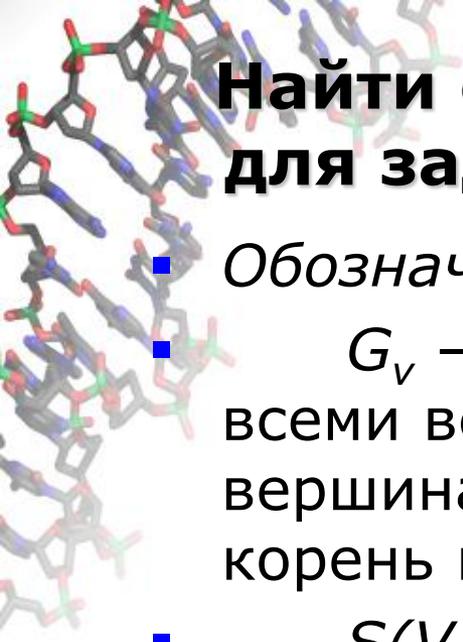


## 7. Основная задача на гиперграфах

- Гиперпуть  $T$  в ОГ-графе  $G$  называется *терминальным*, если все его листья соответствуют терминальным вершинам ОГ-графа  $G$ .
- Терминальный гиперпуть называется *полным*, если его корню соответствует стартовая вершина ОГ-графа  $G$ .
- Определение 6.2. *Обобщенной статистической суммой* ОГ-графа  $G$  называется сумма (в смысле операции  $+$ )  $S(G)$  весов всех его полных гиперпутей.
- **Задача.** Найти обобщенную статистическую сумму для заданного ациклического ОГ-графа  $G$



# РЕШЕНИЕ ОСНОВНОЙ ЗАДАЧИ



# Найти обобщенную статистическую сумму для заданного ациклического ОГ-графа $G$

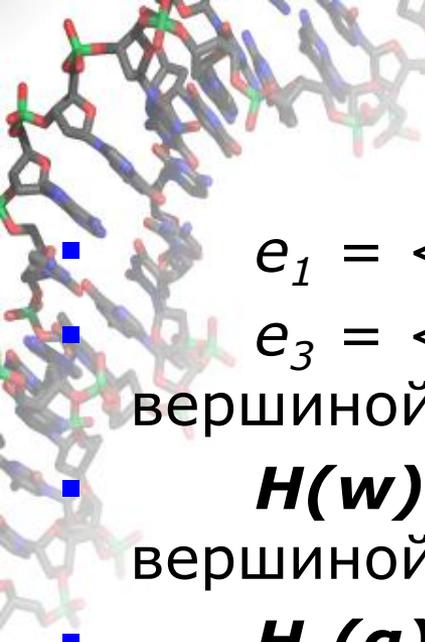
- *Обозначения. Пусть  $v \in V$ .*
- $G_v$  – это подграф ОГ-графа  $G$ , порожденный всеми вершинами  $G$ , достижимыми из  $v$ , т.е. вершинами, которые встречаются в гиперпутях, корень которых соответствует вершине  $v$ .
- $S(V)$  – значение обобщенной статистической суммы для гиперграфа  $G_v$  – т.е. сумма весов всех полных путей в  $G_v$



# Вычисление $S(V_0)$ ОГ-графа $G (V_0, q_0, E, f)$

## Общее описание алгоритма

- Перебираем вершины ОГ-графа  $G$  в обратном топологическом порядке и для каждой вершины  $v \in V$  вычисляем  $S(v)$ .
- Для любой терминальной вершины  $v$  положим  $S(v)=i$ , где  $i$  – правый нейтральный элемент относительно «умножения».
- **Как вычислять  $S(v)$ , если  $v$  - не терминальная вершина?**



## Вычисление $S(v)$ для внутренней вершины $v$ .

- $e_1 = \langle v; x_1, \dots, x_k \rangle$ ,  $e_2 = \langle v; y_1, \dots, y_m \rangle$ ,
- $e_3 = \langle v; z_1, \dots, z_n \rangle$  - все гиперребра с начальной вершиной  $v$
- $H(w)$  – множество всех гиперпутей с начальной вершиной  $w$
- $H_e(g)$  – множество всех гиперпутей с корневым гиперребром  $g$ 
  - $H(v) = H_e(e_1) + H_e(e_2) + H_e(e_3)$
- Пусть  $S_e(e_r)$  обозначает сумму весов всех гиперпутей из  $H_e(e_r)$ ,  $r = 1, 2, 3$ .
  - $S(v) = S_e(e_1) + S_e(e_2) + S_e(e_3)$

## Вычисление $S_e(e_1) - 1$

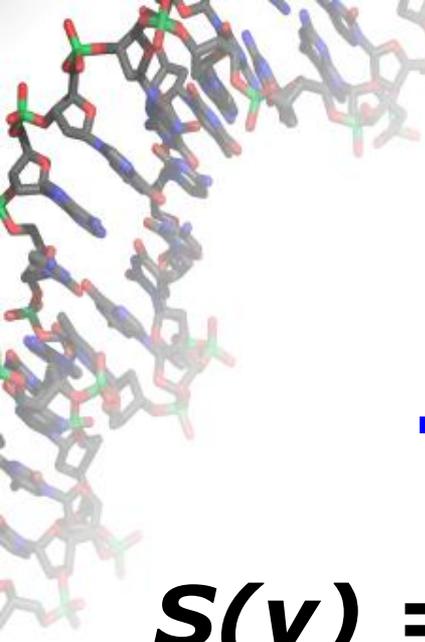
- $e_1 = \langle v; x_1, \dots, x_k \rangle$ ;  $H_e(e_1)$  – множество всех гиперпутей с корневым гиперребром  $g$
- $S_e(e_1)$  – сумма весов всех гиперпутей из  $H_e(e_1)$ .
  - **$S_e(e_1) = \text{SUM}(R(T) \mid T \in H_e(e_1))$**
- Пусть  $T$  – гиперпуть из  $H_e(e_1)$ ; Пусть корень  $T$  помечен гиперребром  $e = (v, W)$ ;  $T_j$  – поддереву дерева  $T$  с корнем  $j$ -м сыне корня  $T$ . Тогда  $T_j$  лежит в  $H(x_j)$  и
  - **$R(T) = f(e_1) * R(T_1) * \dots * R(T_k)$**
- Отсюда
- **$S_e(e_1) = \text{SUM}(f(e_1) * R(T_1) * \dots * R(T_k) \mid T \in H_e(e_1)) =$**
- **$= f(e_1) * \text{SUM}(R(T_1) * \dots * R(T_k) \mid T \in H_e(e_1))$**

## Вычисление $S_e(e_1)$ - 2

- $S_e(e_1) = \text{SUM}(f(e_1) * R(T_1) * \dots * R(T_k) \mid T \in H_e(e_1)) =$
- $= f(e_1) * \text{SUM}(R(T_1) * \dots * R(T_k) \mid T \in H_e(e_1))$

$$\begin{aligned} & \text{SUM}(R(T_1) * \dots * R(T_k) \mid T \in H_e(e_1)) = \\ & = \text{SUM}(R(X_1) * \dots * R(X_k) \mid X_1 \in H(X_1); \dots; X_k \in H(X_k)) = \\ & = \text{SUM}(R(X_1) \mid X_1 \in H(X_1)) * \dots * \text{SUM}(R(X_k) \mid X_1 \in H(X_k)) = \\ & \quad = S(x_1) * \dots * S(x_k) \end{aligned}$$

- $S_e(e_1) = f(e_1) * S(x_1) * \dots * S(x_k)$



**Вычисление  $S(v)$  для внутренней вершины  $v$ . Окончание**

- $S(v) = S_e(e_1) + S_e(e_2) + S_e(e_3)$

- $S_e(e_1) = f(e_1) * S(x_1) * \dots * S(x_k)$

▪

$$S(v) = f(e_1) * S(x_1) * \dots * S(x_k) + \\ + f(e_2) * S(y_1) * \dots * S(y_m) + \\ + f(e_3) * S(z_1) * \dots * S(z_n)$$

▪

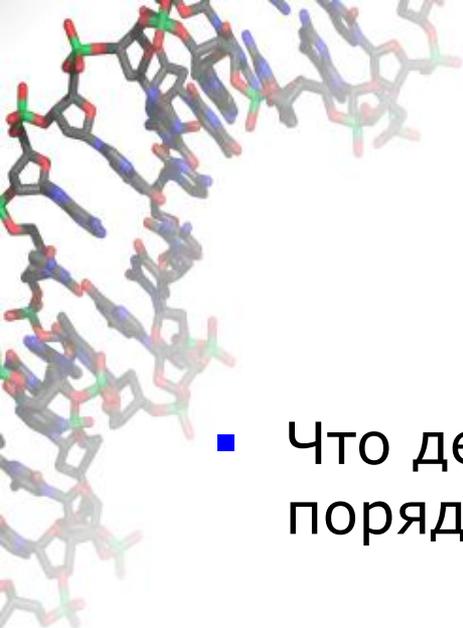
## Время работы алгоритма

**Предполагаем: время перехода к обработке очередной вершины и время доступа к ранее вычисленным суммам не зависят от размера графа.**

$$\begin{aligned} S(v) = & f(e_1) * S(x_1) * \dots * S(x_k) + \\ & + f(e_2) * S(y_1) * \dots * S(y_m) + \\ & + f(e_3) * S(z_1) * \dots * S(z_n) \end{aligned}$$

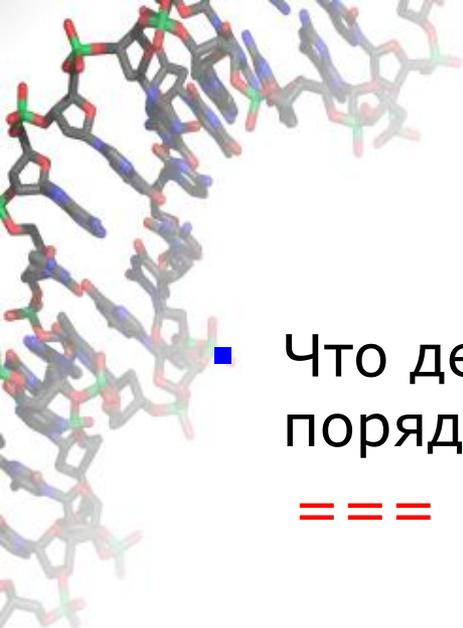
**$T$**  – сумма времен обработки гиперребер. Время обработки гиперребра  $\sim$  количества его концевых вершин  $\Rightarrow$   **$T$**   $\sim$  суммарное количество концевых вершин всех гиперребер.

- Если степени всех гиперребер ограничены, то  **$T$**   $\sim$  количество гиперребер.



## ОСТАЛОСЬ ПОСЛЕ 2-ГО ЗАНЯТИЯ:

- Что делать, если обратный топологический порядок на множестве вершин неизвестен?
- Как вычислить сумму весов всех гиперпутей, содержащих данное гиперребро или данную вершину?
- Как перенести алгоритм Дейкстры на гиперграфы?



## ОСТАЛОСЬ ПОСЛЕ 2-го ЗАНЯТИЯ:

- Что делать, если обратный топологический порядок на множестве вершин неизвестен?

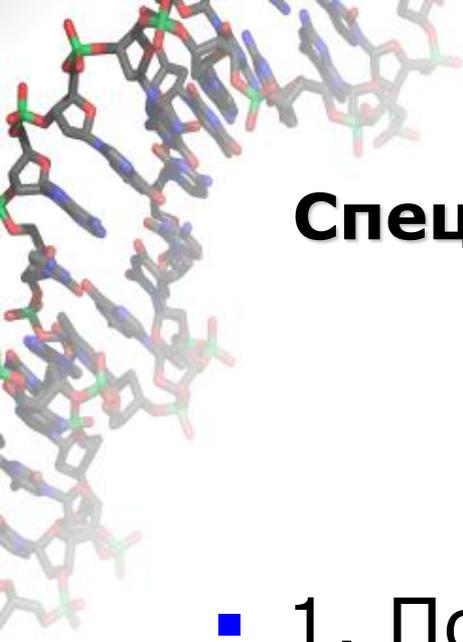
=== Рассмотрено на семинаре.

- Как вычислить сумму весов всех гиперпутей, содержащих данное гиперребро или данную вершину?

=== **БУДЕТ СЕГОДНЯ**

- Как перенести алгоритм Дейкстры на гиперграфы?

=== Если успеем...

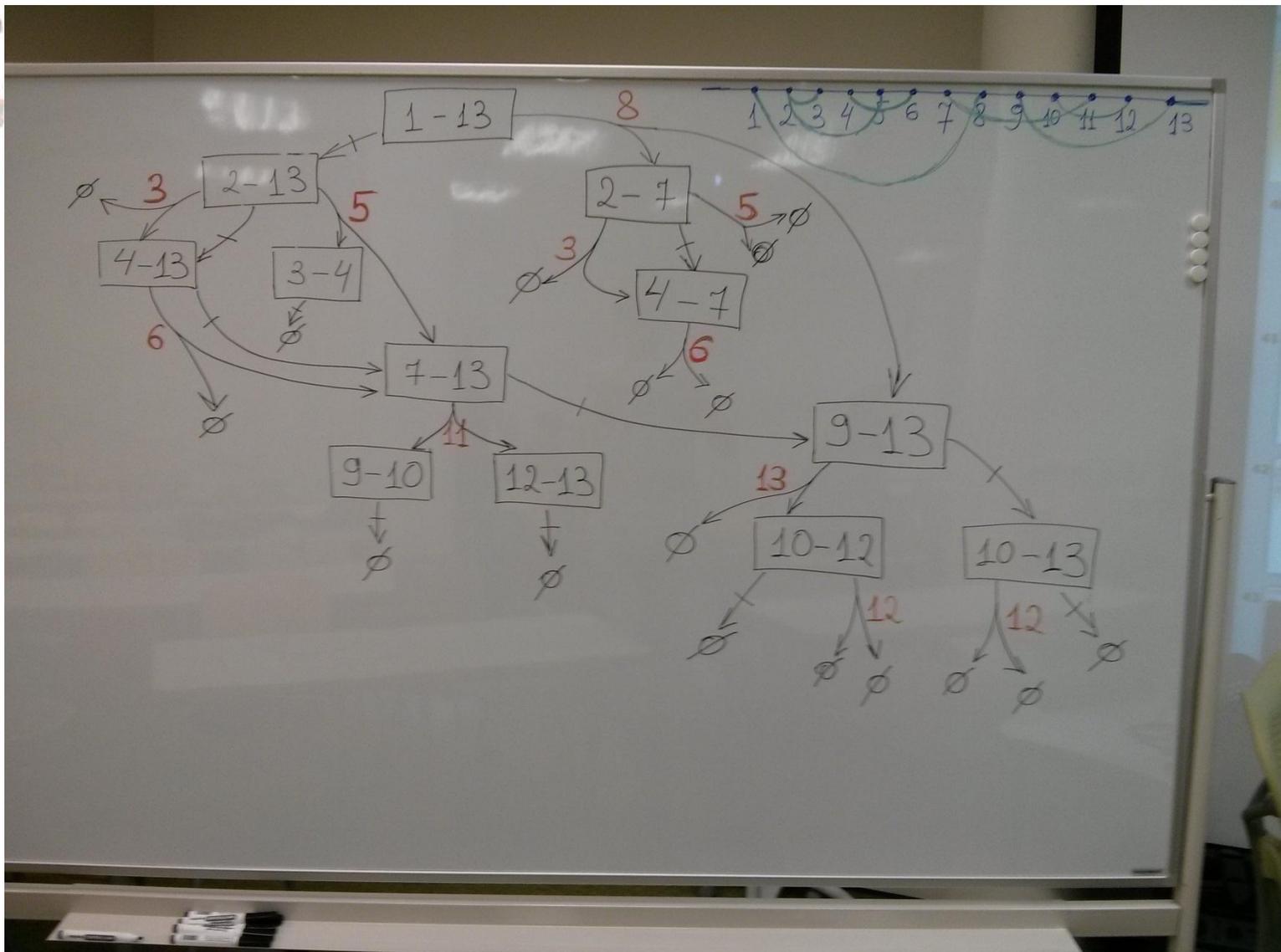


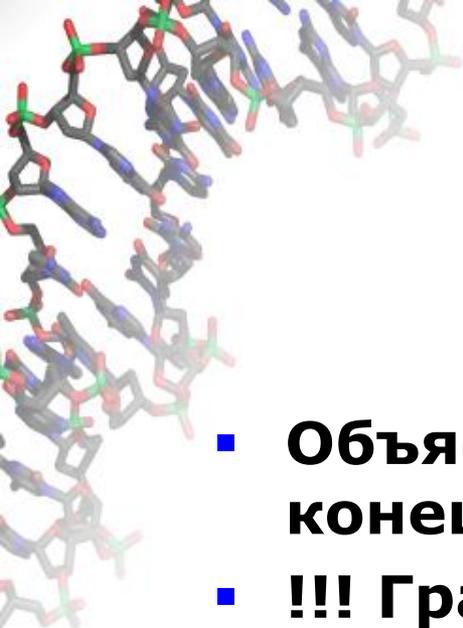
## Специальные суммы для гиперграфов

- 1. Постановка задачи. Воспоминания о графах.

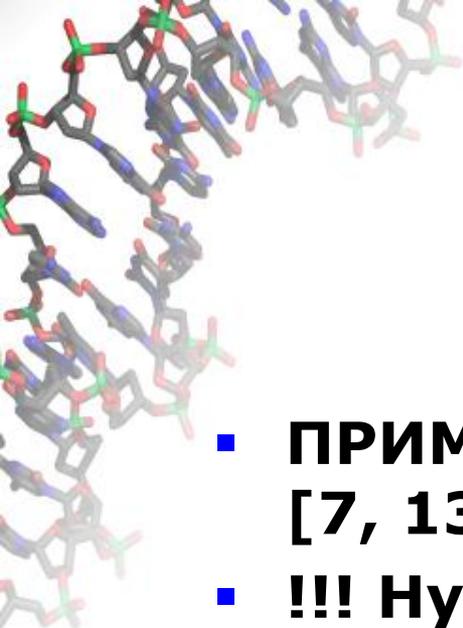


# Пример: гиперграф для задачи о дугах

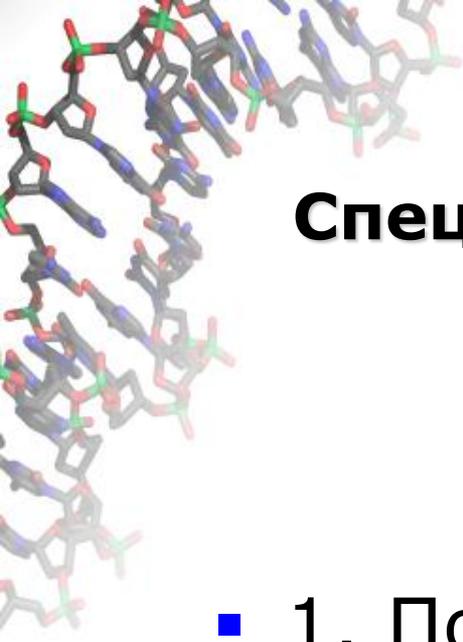




- **Объяснить обозначения (красная цифра – конец дуги, начало дуги – начало отрезка)**
- **!!! Граф – сильно ациклический**
- **Кольцо – коммутативное.**
  
- **ДОДЕЛАТЬ!**
  
-



- **ПРИМЕР: Все гиперпути, проходящие, через [7, 13].**
- **!!! Нужен более сложный пример – чтобы слева от [7, 13] что-то было**
  - **ДОДЕЛАТЬ!**



## Специальные суммы для гиперграфов

- 1. Постановка задачи. Воспоминания о графах.



## Специальные суммы для гиперграфов

■ Пусть дан ОГ-граф  $G = (V, v_0, E, K, f)$

$V$  – конечное множество вершин;

$v_0 \in V$  – стартовая вершина;

$E$  – конечное множество гиперребер,  
т.е. пар вида  $(v, W)$ , где  $v \in V$ ,

$W$  – упорядоченный список вершин из  $V$ ;

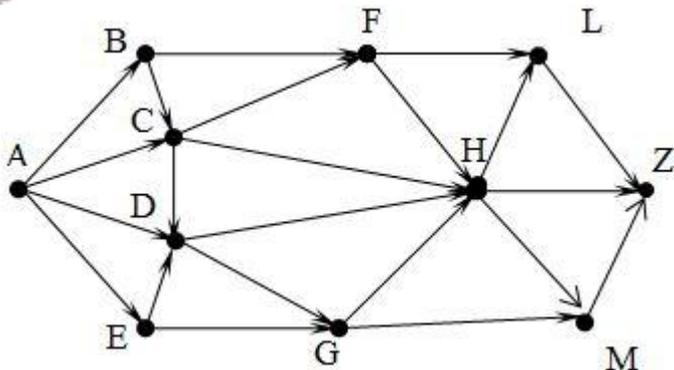
$K$  – полукольцо;

$f: E \rightarrow A$  – функция пометок на ребрах.

*(Полная) Специальная (обобщенная статистическая) сумма  $S(v)$  для вершины  $v$  – это сумма весов всех полных гиперпутей, содержащих вершину  $v$*

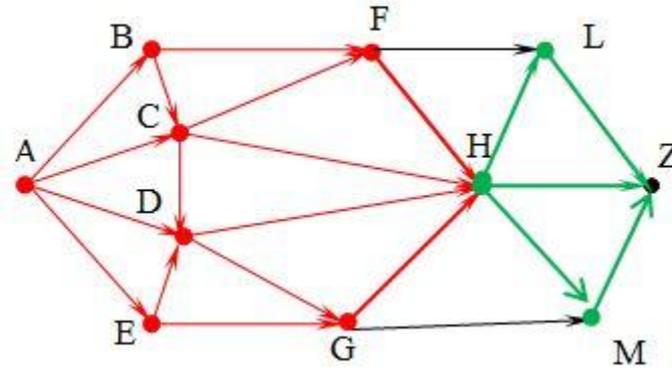
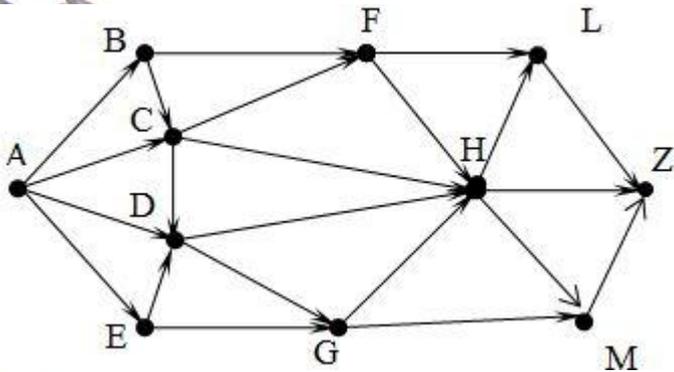
**Задача. Найти значение  $S(v)$  для всех вершин ОГ-графа  $G$**

## Как это было у графов



*(Полная) Специальная (обобщенная статистическая) сумма  $S(v)$  для вершины  $v$  – это сумма весов всех полных путей, содержащих вершину  $v$*

# Как это было у графов



(Полная) Специальная (обобщенная статистическая) сумма  $S(v)$  для вершины  $v$  – это сумма весов всех полных путей, содержащих вершину  $v$ .

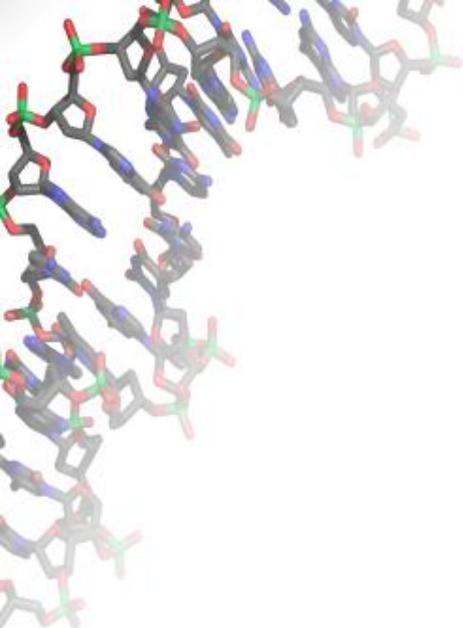
**$v$ -инициальный** путь – инициальный путь,  
который заканчивается в  $v$

$S_I(v)$  – это сумма весов всех  $v$ -инициальных путей

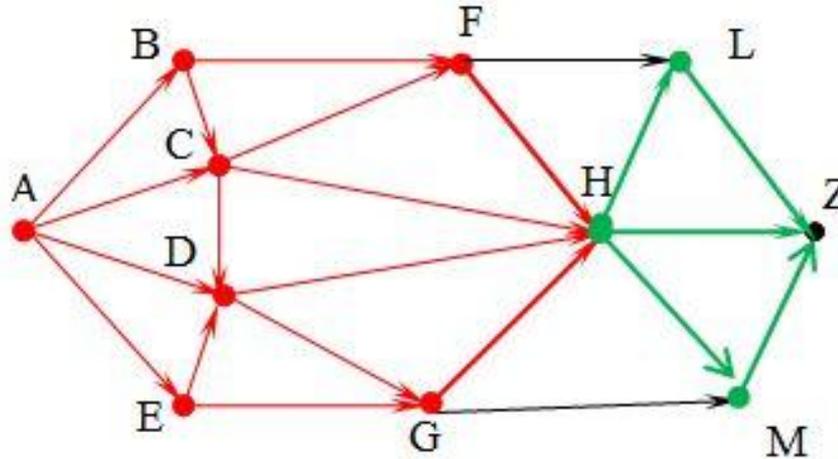
**$v$ -терминальный** путь – терминальный путь,  
который начинается в  $v$

$S_T(v)$  – это сумма весов всех  $v$ -терминальных путей.

$$S(v) = S_I(v) * S_T(v)$$



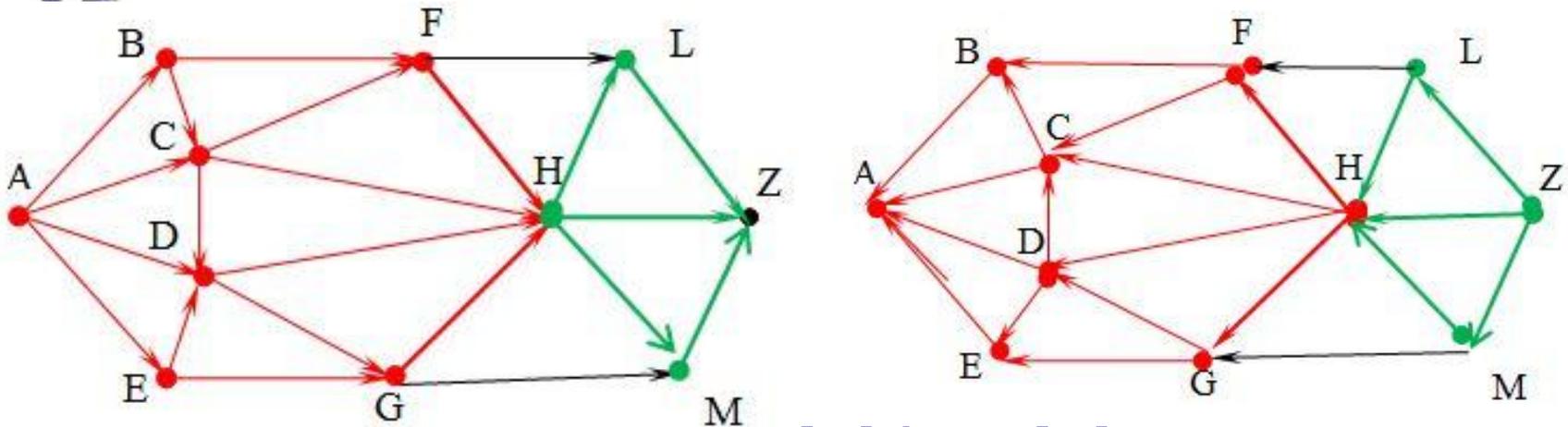
## Как это было у графов



$$S(v) = S_I(v) * S_T(v)$$

$$\begin{aligned} S(H) &= \sum_{i,j} \{P(St_i(H)) \cdot Term_j(H)\} = \\ &= \sum_{i,j} \{P(St_i(H)) * P(Term_j(H))\} = \\ &= \sum_i \{P(St_i(H))\} * \sum_j \{P(Term_j(H))\} = \\ &= S_I(H) * S_T(H) \end{aligned}$$

## Как это было у графов



$$S(v) = S_I(v) * S_T(v)$$

Значение  $S_T(v)$  для всех вершин  $v$  находим с помощью алгоритма ДП.

Значения  $S_I(v)$  для всех вершин  $v$  находим с помощью алгоритма ДП для «обращенного» графа.

# Для гиперграфов стрелки обращать нельзя!

Значение  $S_T(v)$  для всех вершин  $v$  гиперграфа находим с помощью алгоритма ДП.

НО:

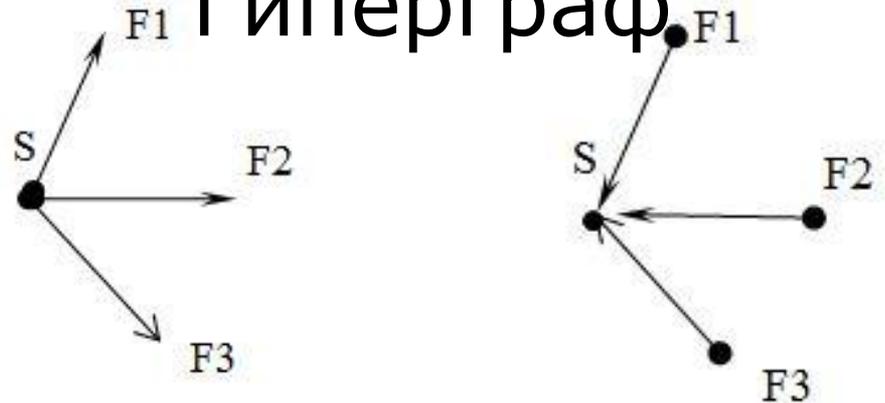
Значения  $S_I(v)$  для всех вершин  $v$  гиперграфа **НЕ МОЖЕМ** найти с помощью алгоритма ДП для «обращенного» гиперграфа.

## Граф



Ребро

## Гиперграф



Гиперребро

НЕ гиперребро

# Для гиперграфов стрелки обращать нельзя!

Значение  $S_T(v)$  для всех вершин  $v$  гиперграфа находим с помощью алгоритма ДП.

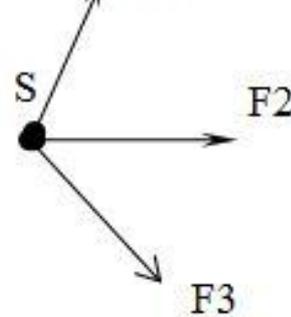
## ЧТО БУДЕТ АНАЛОГОМ $S_I(v)$ ДЛЯ ГИПЕРГРАФОВ?

Граф

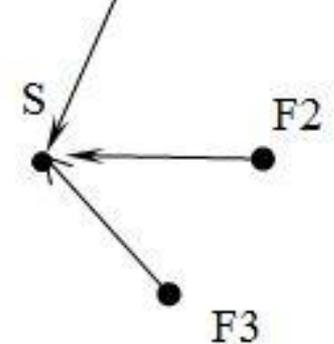


Ребро

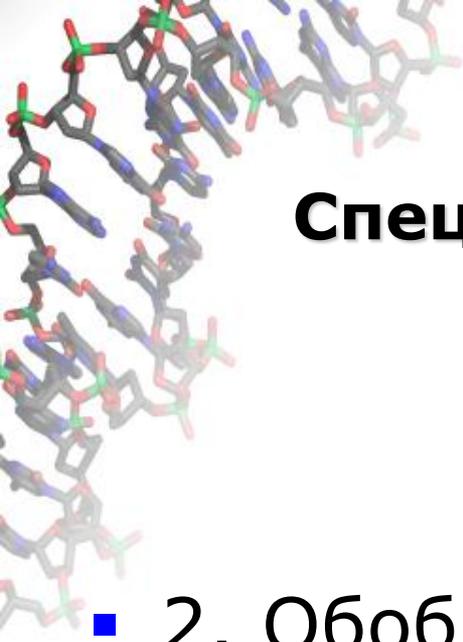
Гиперграф



Гиперребро



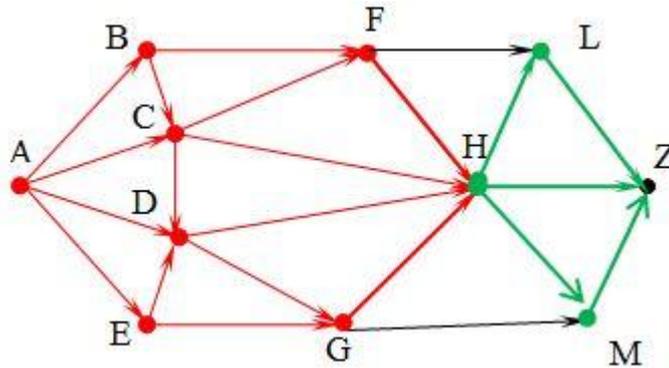
НЕ гиперребро



## Специальные суммы для гиперграфов

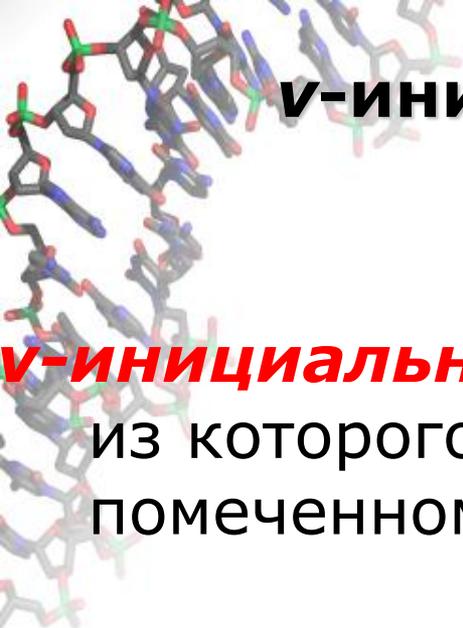
- 2. Обобщение понятия  $v$ -инициального пути и алгоритм

# Как это было у графов: переформулировка определения



**Опр. 1.  $v$ -инициальный** путь – это  
инициальный путь, который заканчивается в  $v$

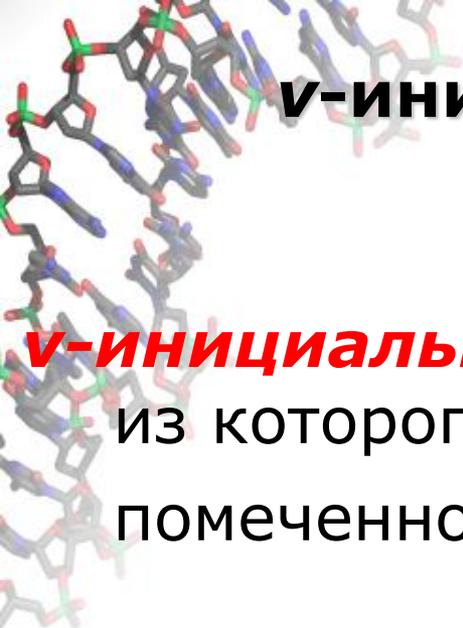
**Опр.2.  $v$ -инициальный** путь – это  
полный путь, из которого удалена часть пути,  
которая начинается в  $v$  (если в пути нет узла,  
помеченного  $v$ , то для этого полного пути  $v$ -  
инициальный путь не существует).



## **$v$ -инициальный путь для гиперграфов**

**$v$ -инициальный** гиперпуть – это полный гиперпуть, из которого удалено поддерево с корнем в узле, помеченном вершиной  $v$ .

*Для полного гиперпути,  
в котором нет узлов с пометкой  $v$ ,  
 $v$ -инициального пути не существует.*



## **v-инициальный путь для гиперграфов**

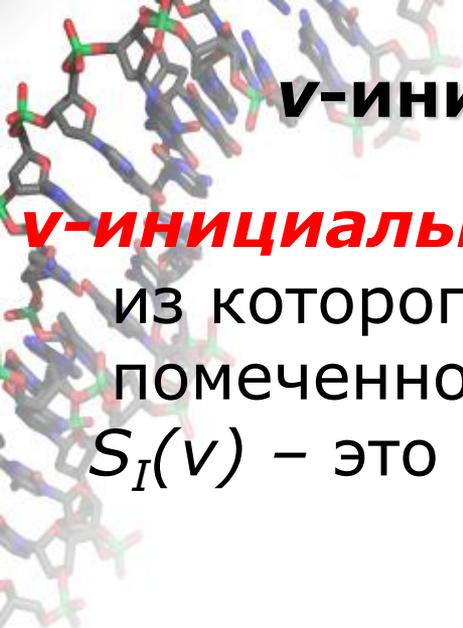
**v-инициальный** гиперпуть – это полный гиперпуть, из которого удалено поддерево с корнем в узле, помеченном вершиной **o**  $v$ .

*Предположение: АОГ-граф **сильно** ациклический.*



## ПРИМЕР.

- 6 полных деревьев – 2 v-инициальных и 3 v-терминальных.
- Рисунок.
- **ДОДЕЛАТЬ!!**



## **v-инициальный путь для гиперграфов**

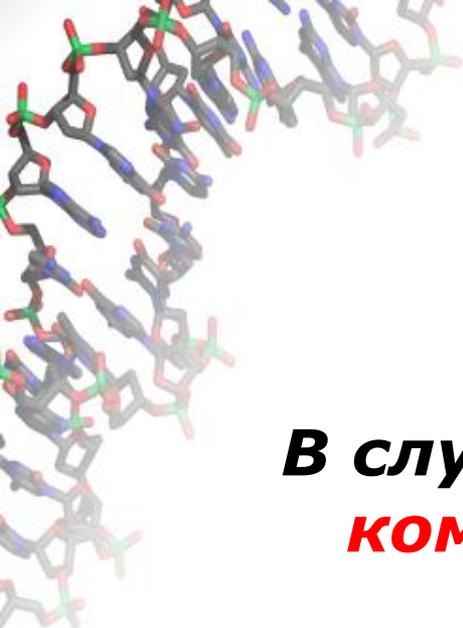
**v-инициальный** гиперпуть – это полный гиперпуть, из которого удалено поддерево с корнем в узле, помеченном вершиной  $v$ .

$S_I(v)$  – это сумма весов всех  $v$ -инициальных путей.

**v-терминальный** путь - терминальный путь, который начинается в  $v$

$S_T(v)$  – это сумма весов всех  $v$ -терминальных путей.

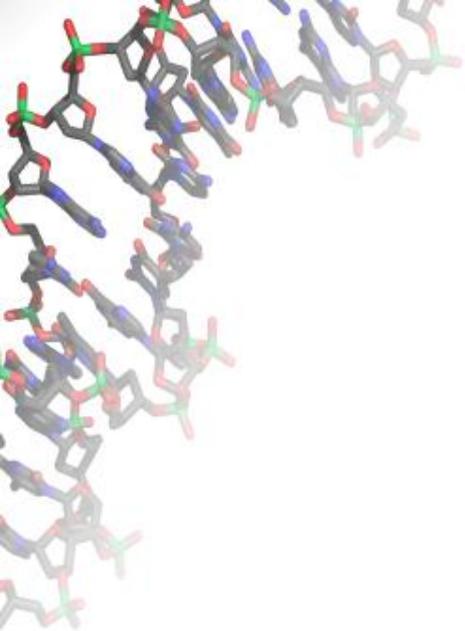
$$S(v) = S_I(v) * S_T(v)$$

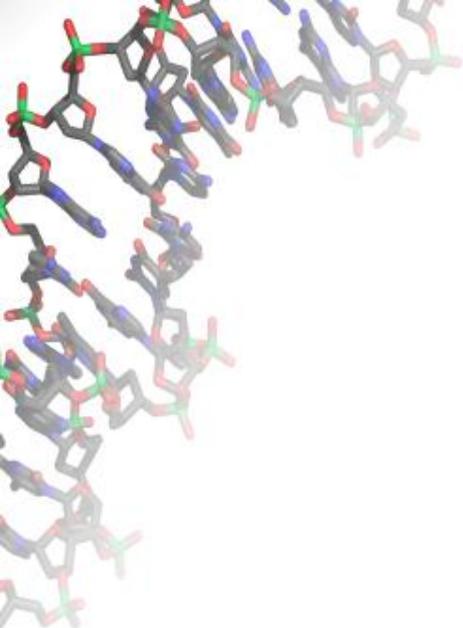


## **v-сумма для гиперграфов**

$$S(v) = S_I(v) * S_T(v)$$

**В случае гиперграфов требуется  
*КОММУТАТИВНОСТЬ УМНОЖЕНИЯ***

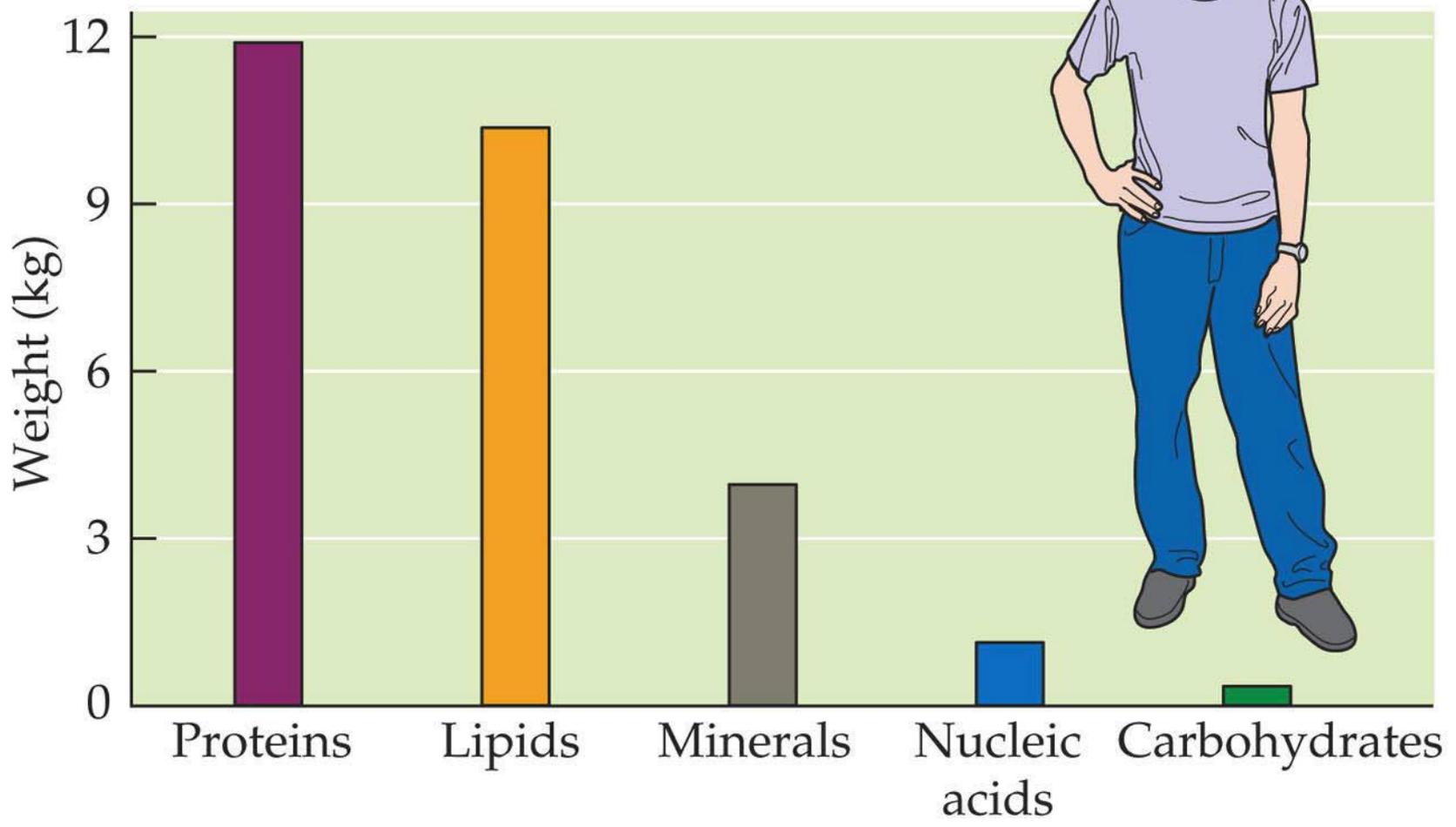




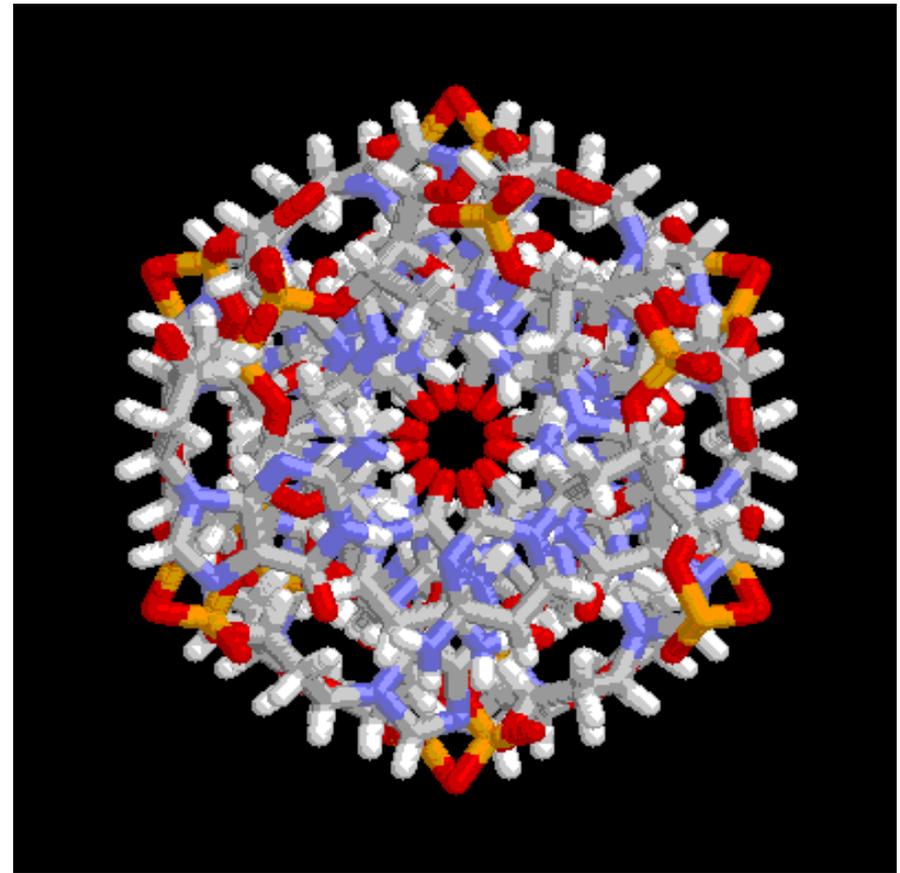
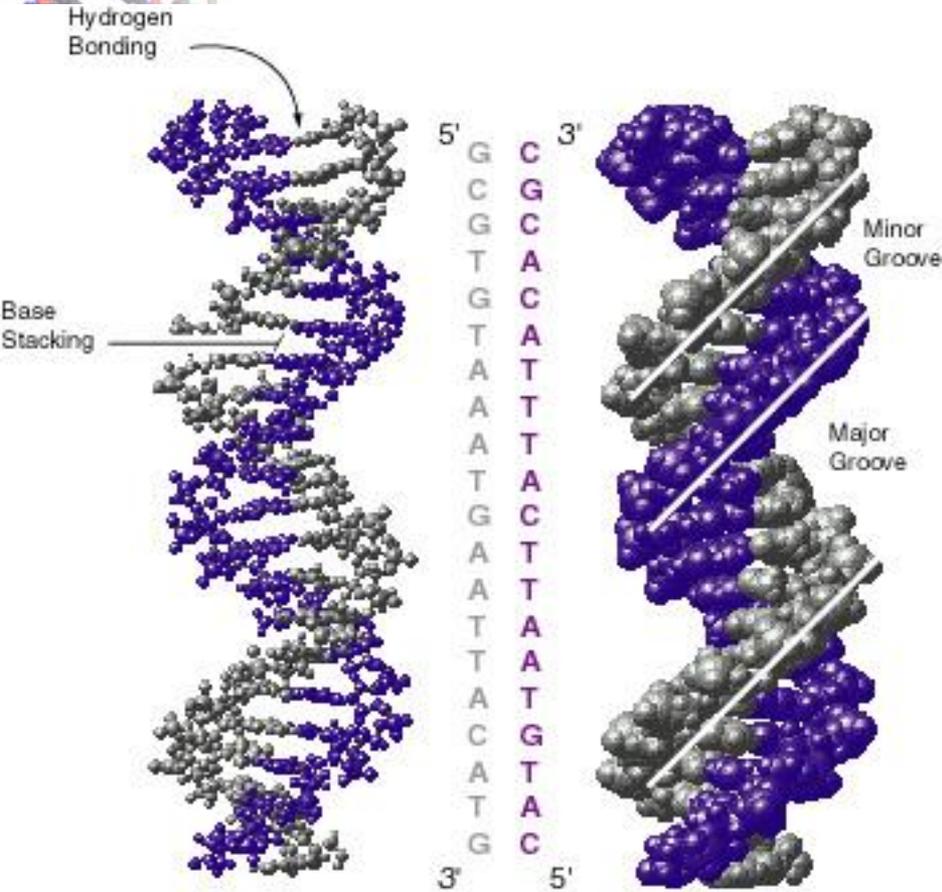
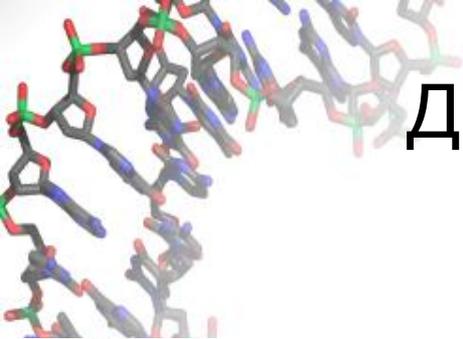
# **Отступление**

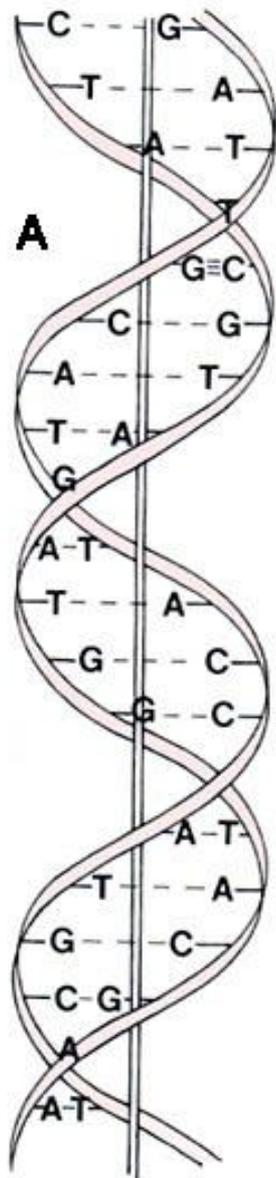
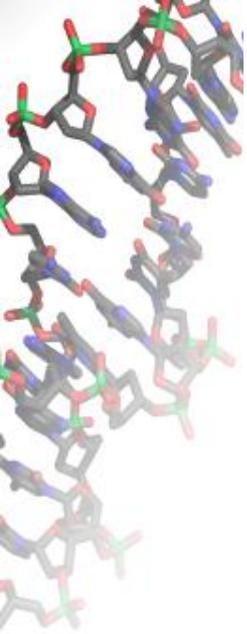
## *Немного биологии*

Average adult: 70 kg (42 kg water + 28 kg organic + other)

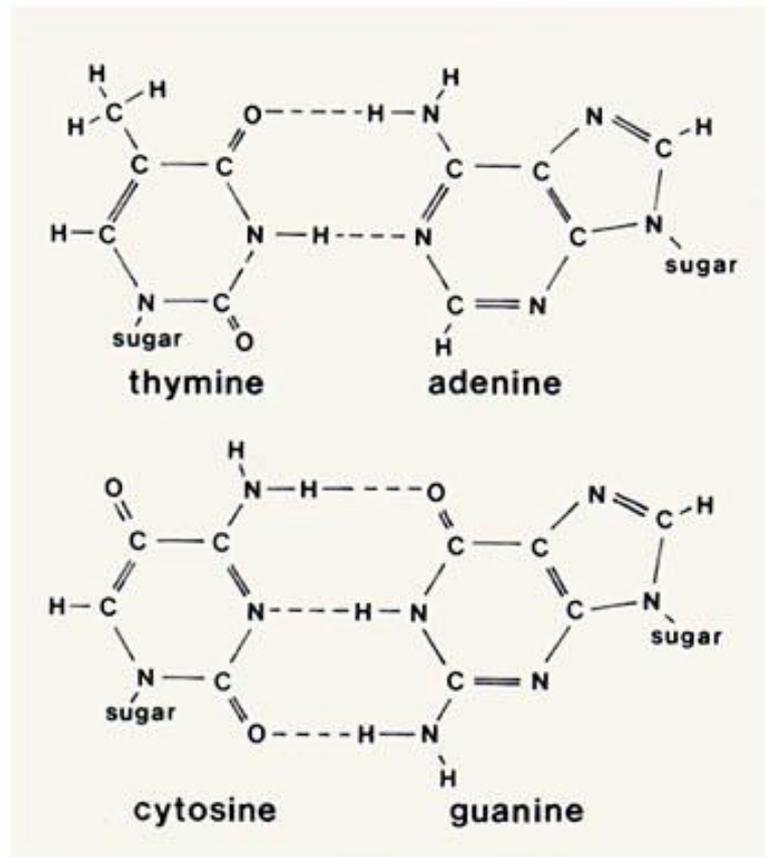


ДНК: 2 нити;  $L \sim 10^5 - 10^9$   
**нуклеотиды (4)**





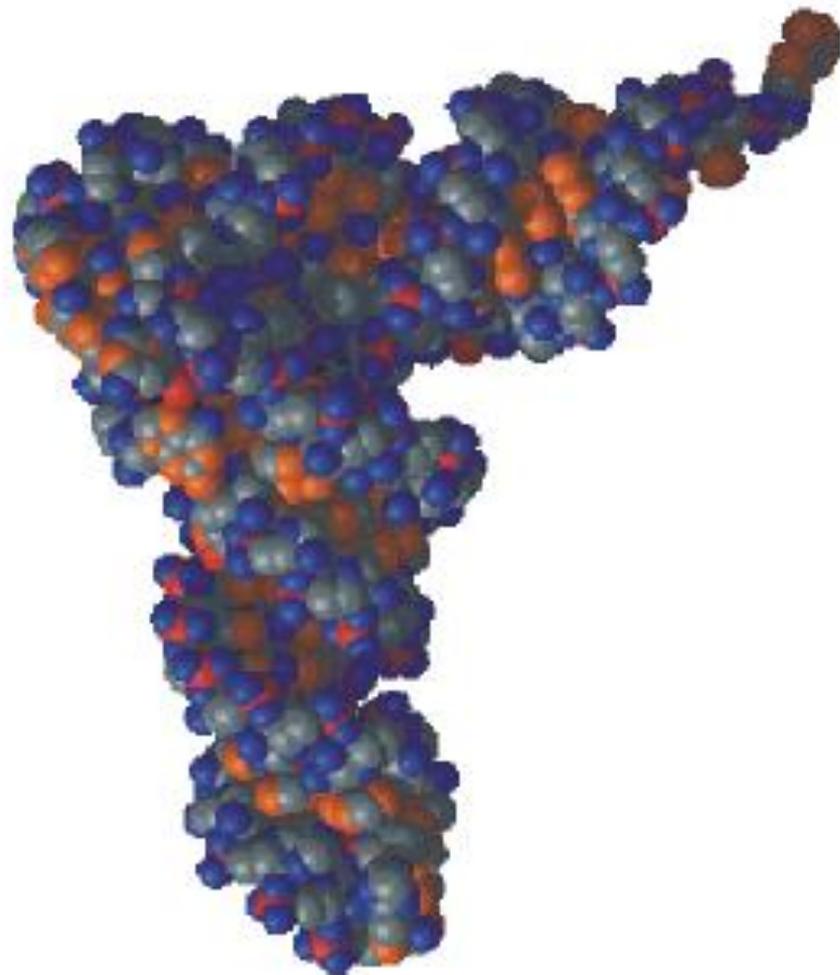
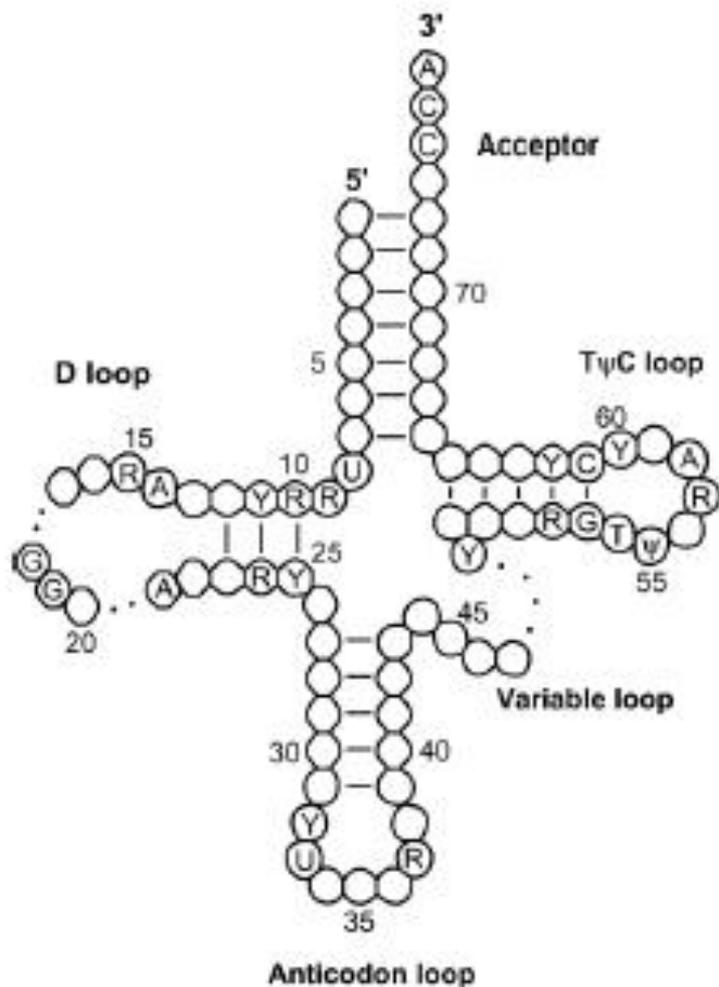
**B**



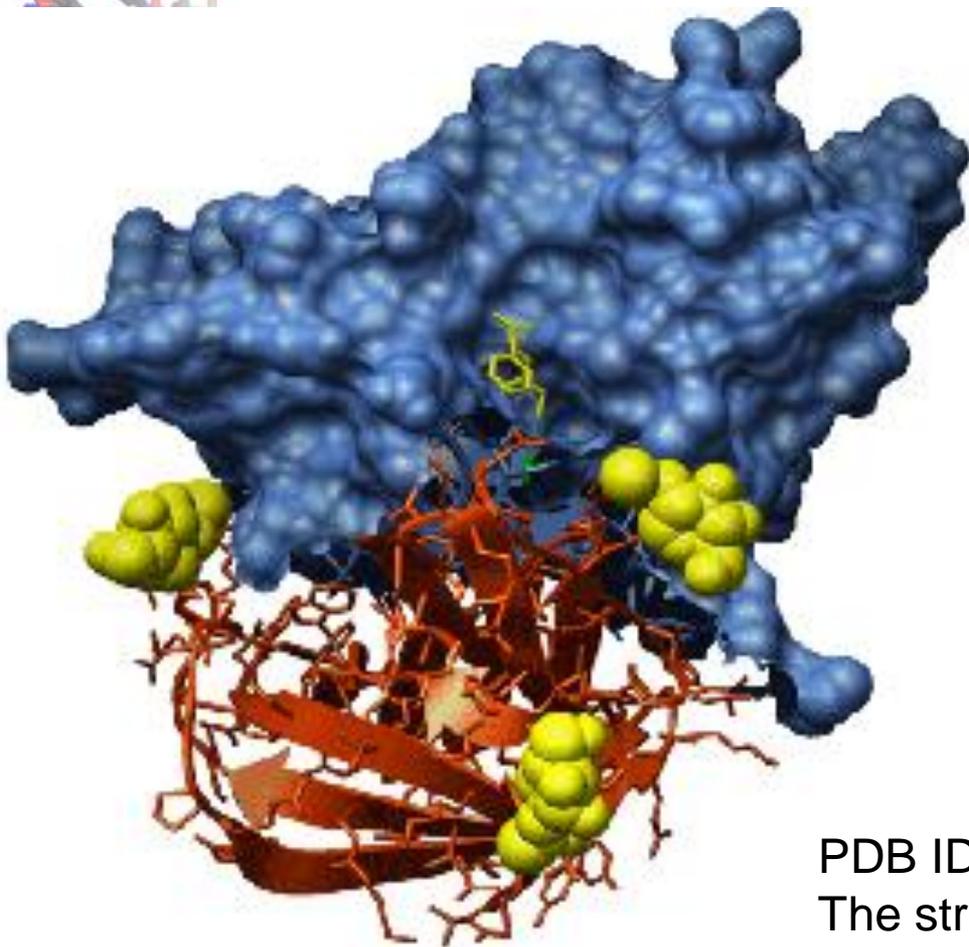
**C**



# РНК: 1 нить; $L \sim 10^2 - 10^3$ нуклеотиды (4)



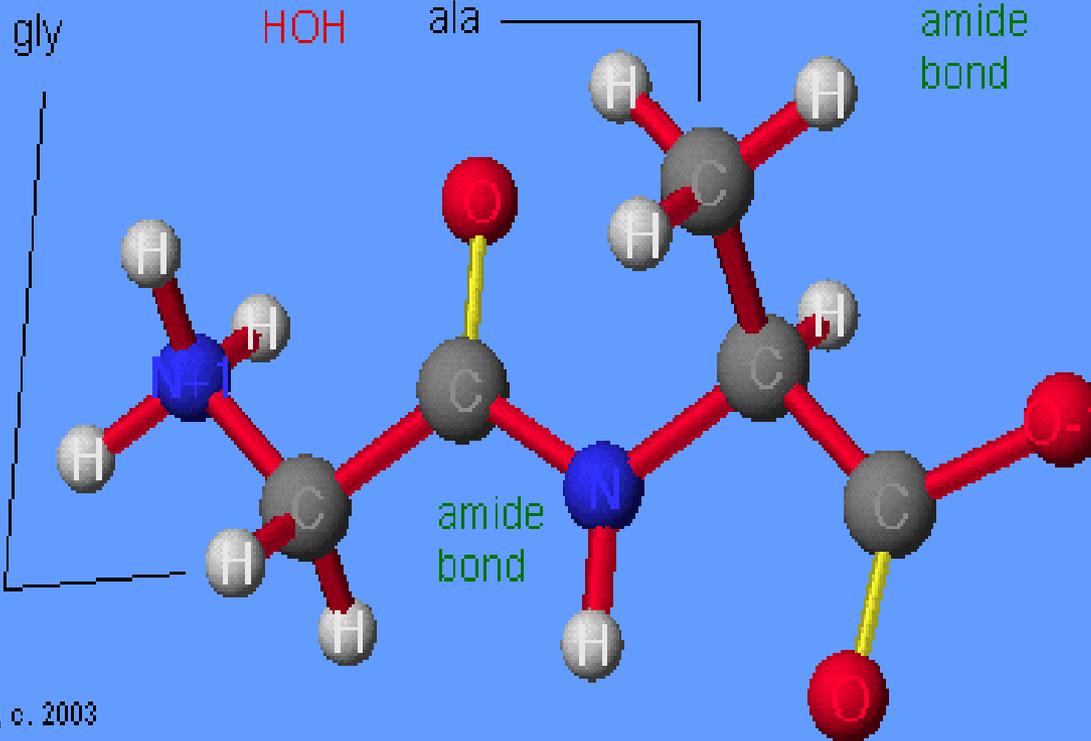
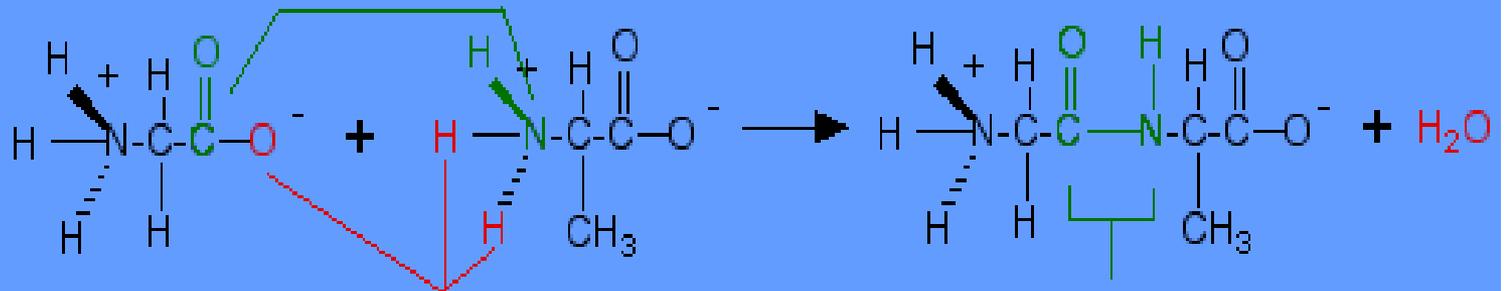
**Белки: 1 нить;  $L \sim 10^2 - 10^3$   
аминокислоты (20)**



PDB ID: **2act** E.N. Baker, E.J. Dodson (1980):  
The structure of actinidin at 1.7 Ångstroms

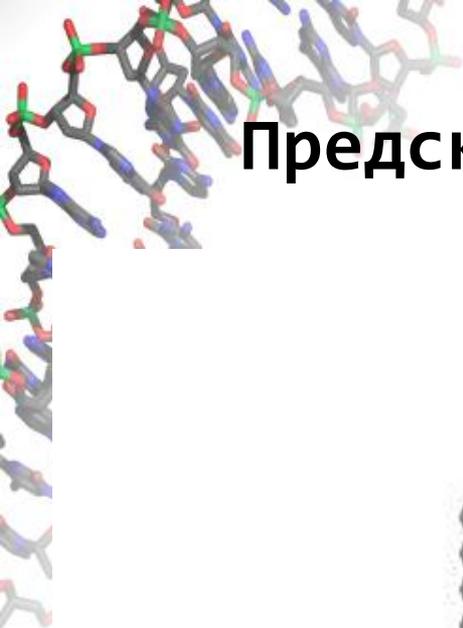
# ...Gly + Ala... = ...GA...

## Peptide or Amide Synthesis



## ИСТОРИЯ и ДЛИНЫ

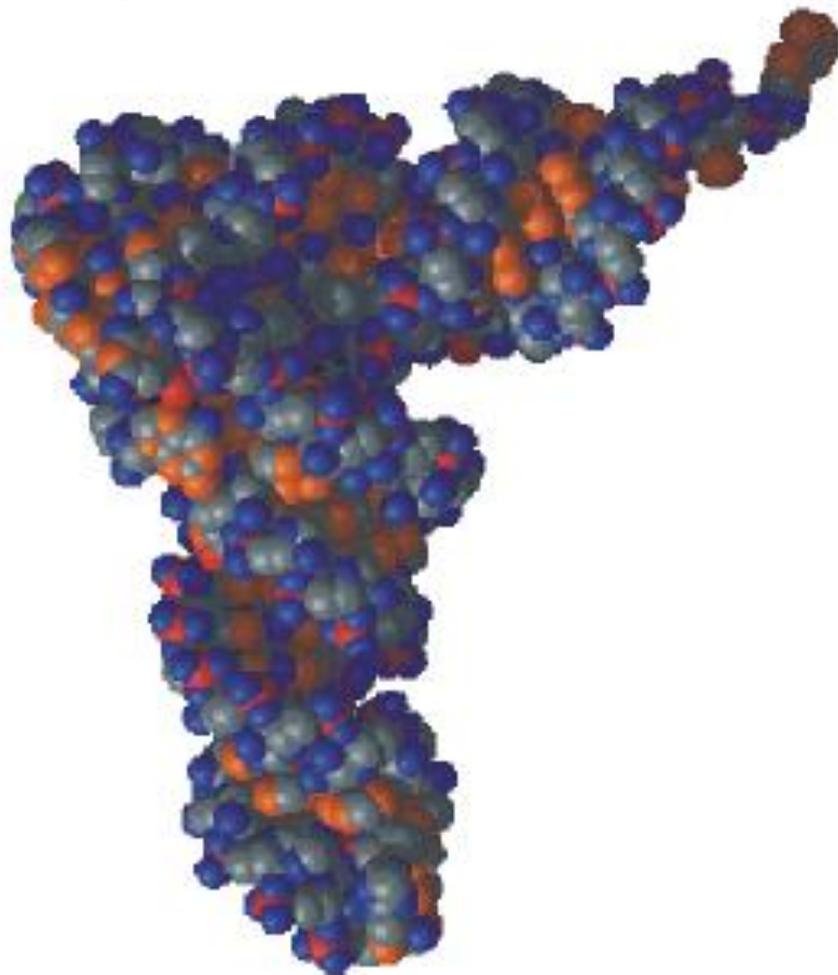
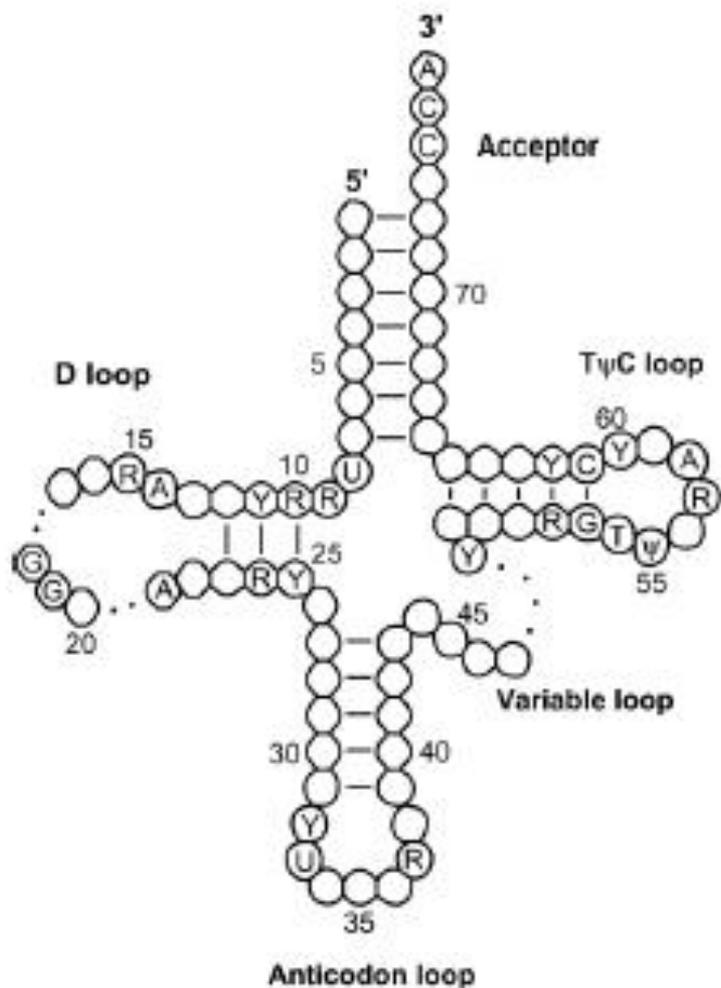
- tRNA - (**1964**) - **75** bases (old, slow, complicated method)
- First complete DNA genome: X174 DNA (**1977**) - **5386** bases
- human mitochondrial DNA (**1981**) - **16,569** bases
- tobacco chloroplast DNA (**1986**) - **155,844** bases
- First complete bacterial genome (*H. Influenzae*)(**1995**) - **1.9 x 10<sup>6</sup>** bases
- Yeast genome (eukaryote at  $\sim 1.5 \times 10^7$ ) completed in **1996**
- Several archaeobacteria
- *E. coli* -- **4 x 10<sup>6</sup>** bases [**1998**]
- Several pathogenic bacterial genomes sequenced
  - *Helicobacter pylori*, *Treponema pallidum*, *Borrelia burgdorferi*, *Chlamydia trachomatis*, *Rickettsia prowazekii*, *Mycobacterium tuberculosis*
- Nematode *C. elegans* (  $\sim 4 \times 10^8$  ) - December **1998**
- Human genome (rough draft completed **2000**) - **3 x 10<sup>9</sup>** base
- **2010** – rat, mouse, pig, fugu, etc, full genomes **50 x 10<sup>9</sup>**
- **~2015** – individual human genomes (“\$1000 per genome”)



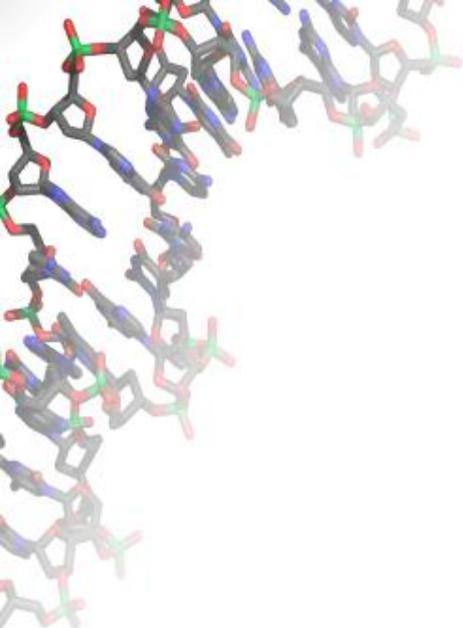
# Раздел 3.

## Предсказание вторичной структуры РНК.

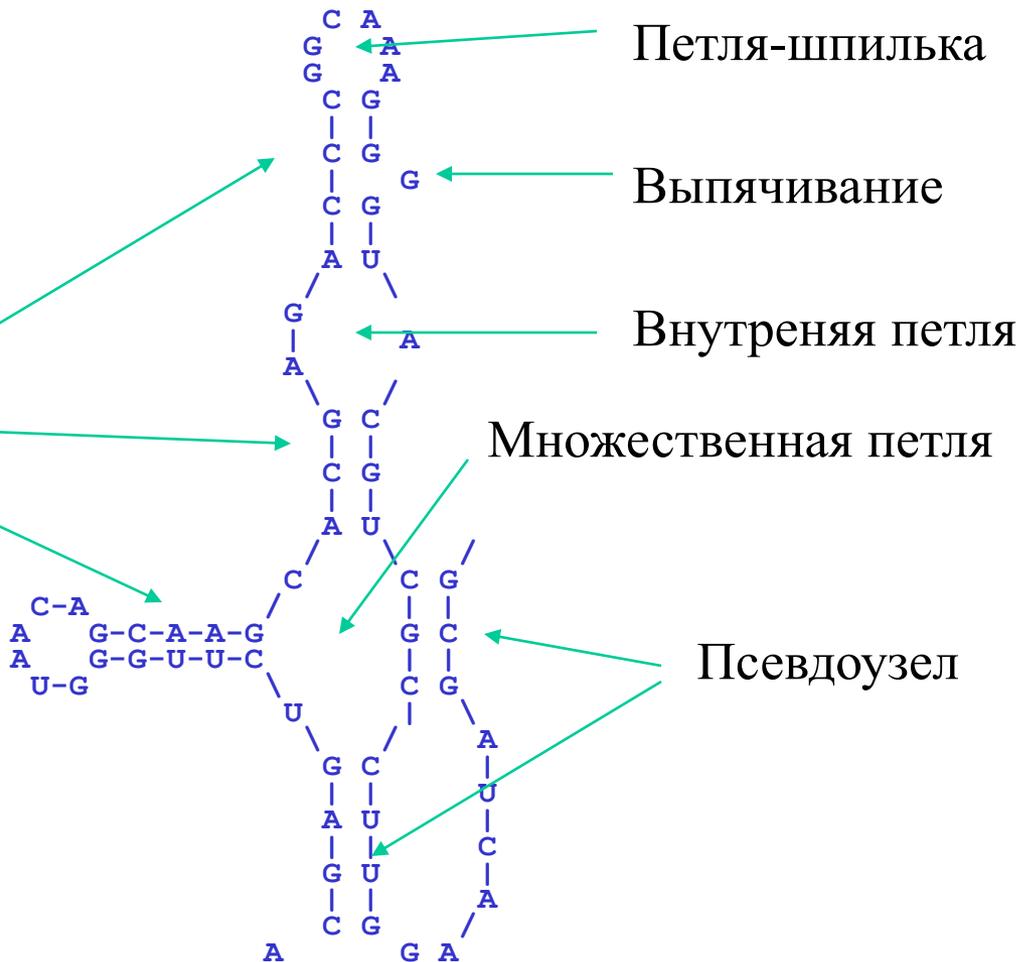
### 3.1. История



# Элементы вторичной структуры

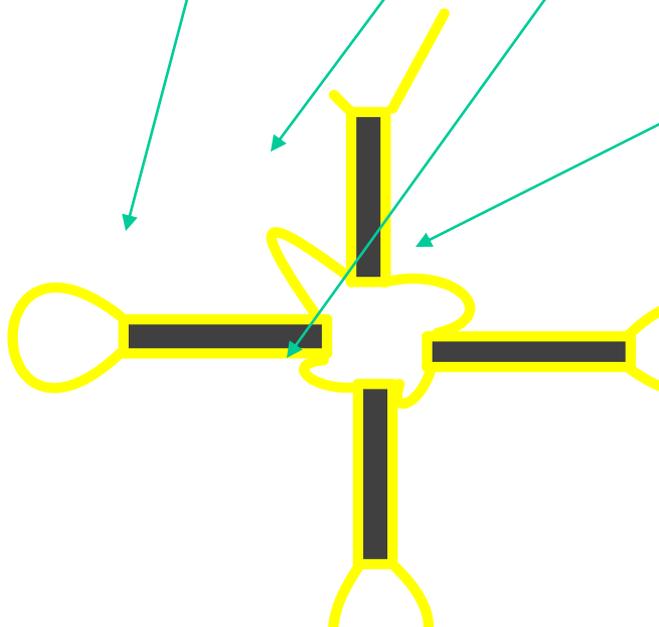


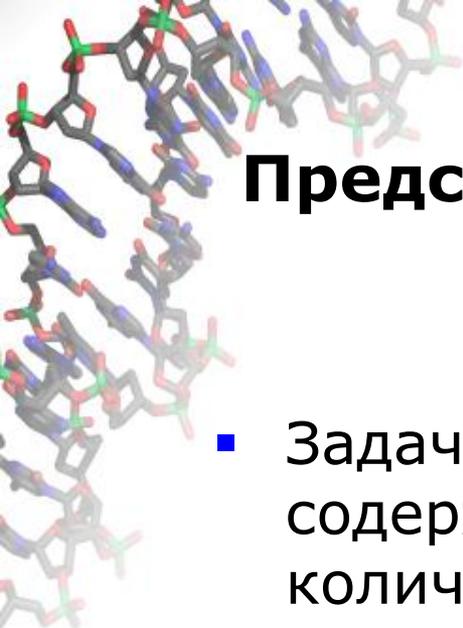
Спирали



# Представление вторичной структуры без псевдоузлов. "Скобочная структура"

gggctaTAGCTCAGcTGGGAGAGCgcctgctTtgcACgcaggagGTCtgcGGTTCGAtCCCgcatagctccaCCA

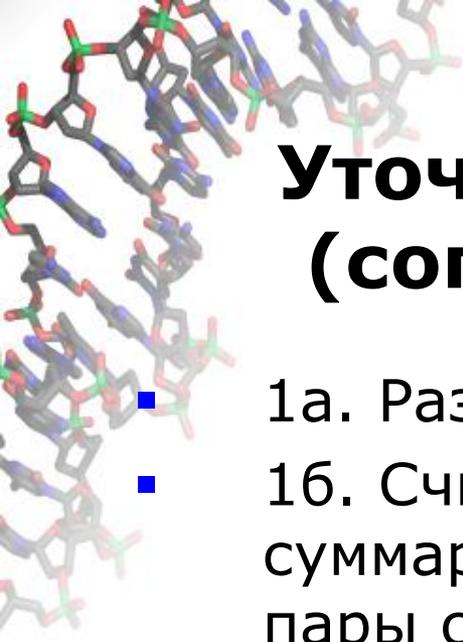




## Предсказание вторичной структуры РНК, свободной от псевдоузлов

- Задача 1. Найти скобочную структуру, содержащую максимально возможное количество скобок.

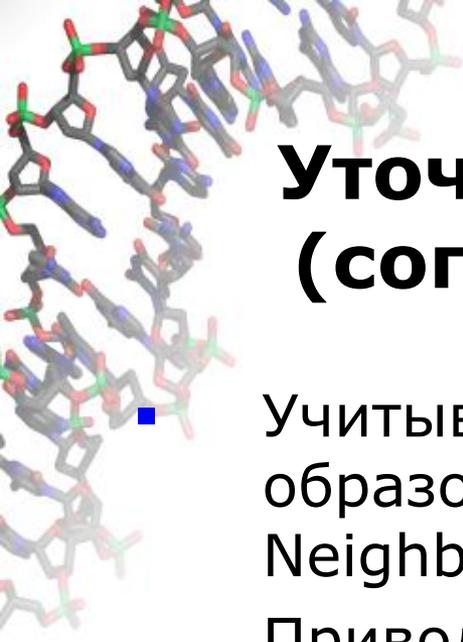
- $T = O(L^3)$



# Уточнение постановки задачи – 1 (согласование с экспериментом)

- 1а. Разрешать связи, отличные от А-Т, G-C.
- 1б. Считать не количество связей, а их суммарную энергию, энергия каждой возможной пары считается известной.

С алгоритмической точки зрения задача практически не меняется.



## Уточнение постановки задачи – 2 (согласование с экспериментом)

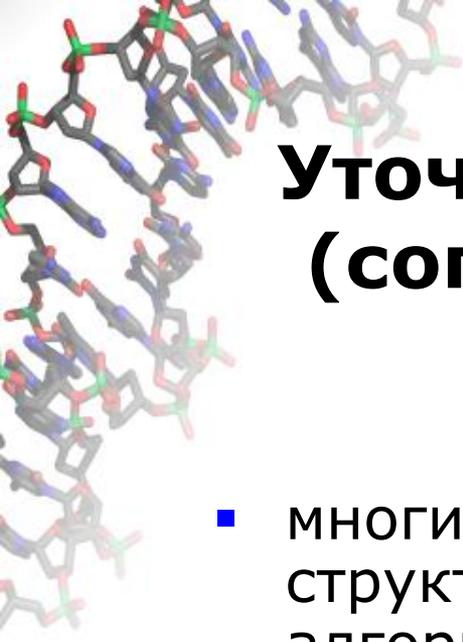
- Учитывать вклад нуклеотидов, не участвующих в образовании водородных связей (“Nearest Neighbor model”).

Приводит к существенному усложнению алгоритма, однако порядок сложности не меняется  $T = O(L^3)$



## Уточнение постановки задачи – 3 (согласование с экспериментом)

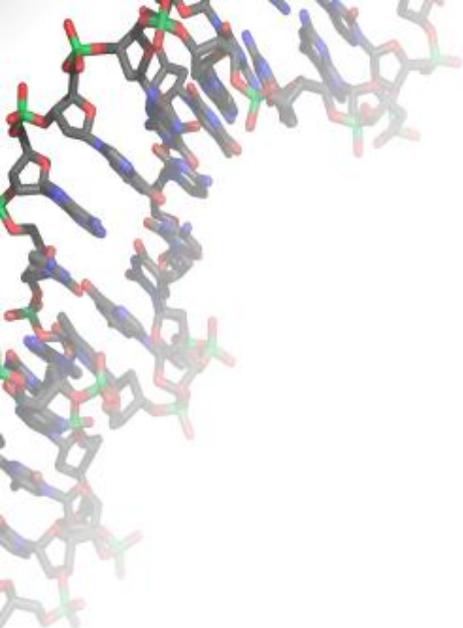
- Молекула РНК может принимать не ту структуру, которой мы приписали оптимальную энергию, а несколько иную, например, из-за того, что мы не знаем точных значений энергетических параметров. Поэтому полезно не искать одну «оптимальную» структуру, а проанализировать все возможные структуры и оценить вероятность образования каждой отдельной связи («статистический вес» связи). Это также можно решить методом динамического программирования.



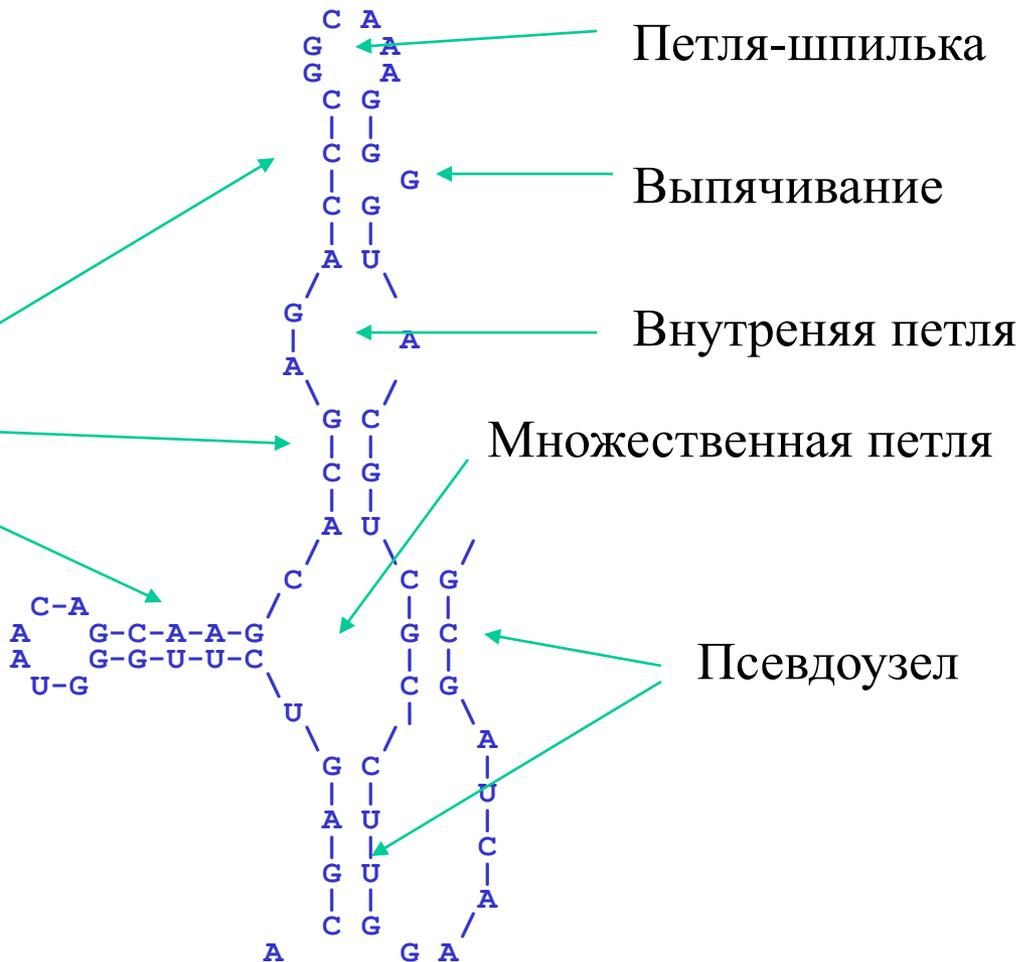
## Уточнение постановки задачи – 4 (согласование с экспериментом)

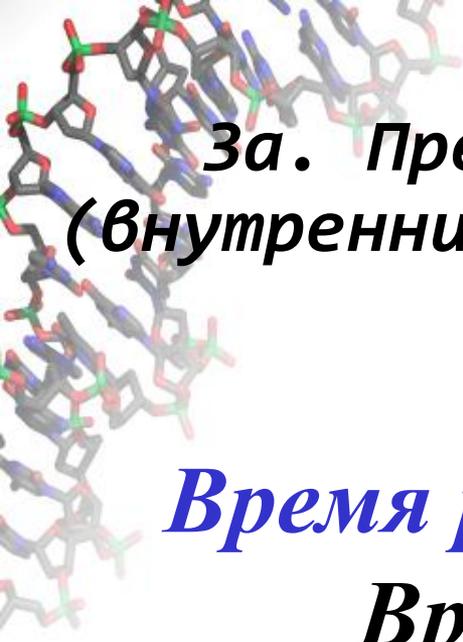
- многие авторы пытаются выяснить вторичную структуру РНК, не сводя ее к какой-либо алгоритмической оптимизационной задаче, а путем моделирования реального процесса «сворачивания» молекулы РНК (т. е. установления и исчезновения водородных связей).

# Элементы вторичной структуры



Спирали





**За. Предсказание вторичной структуры РНК  
(внутренние петли, неветвящиеся структуры)**

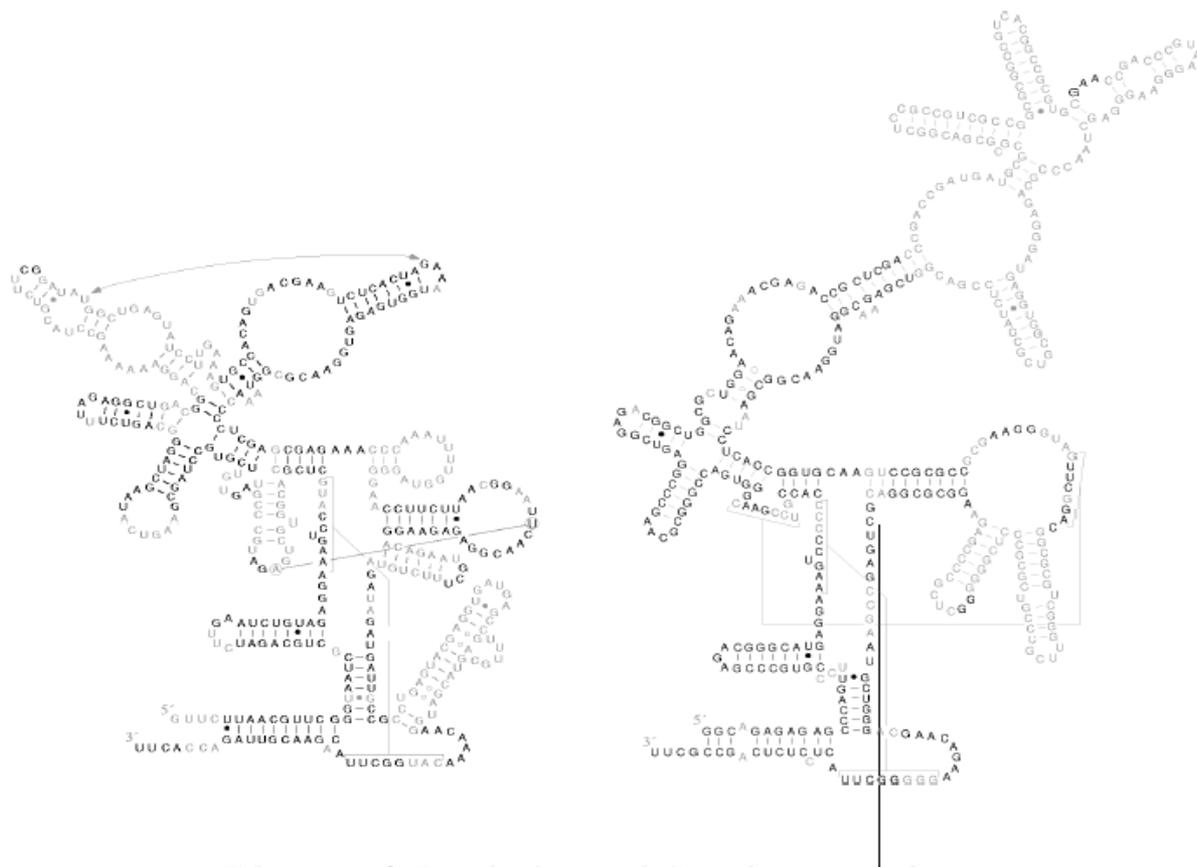
***Время работы алгоритма:***

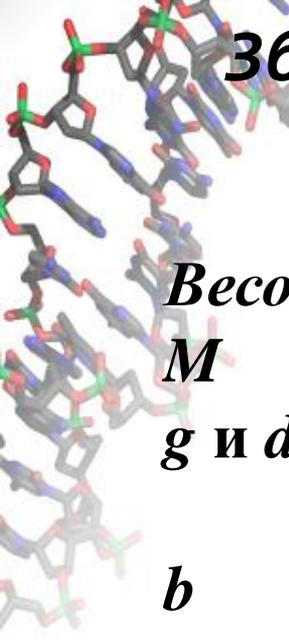
***Время:  $O(M \cdot \log(L))$ .***

***L – длина РНК***

***M – число возможных  
спариваний ( $M < L^2$ )***

# 36. Выравнивание последовательностей РНК с заданной вторичной структурой.





## 36. Выравнивание последовательностей РНК с заданной вторичной структурой.

*Весовая система* – это пятерка  $\langle M, g, d, b, c \rangle$ , где

$M$  – весовая матрица замен;

$g$  и  $d$  – коэффициенты аффинной весовой функции удалений фрагментов;

$b$  – бонус за одновременное сопоставление двух спаренных нуклеотидов,

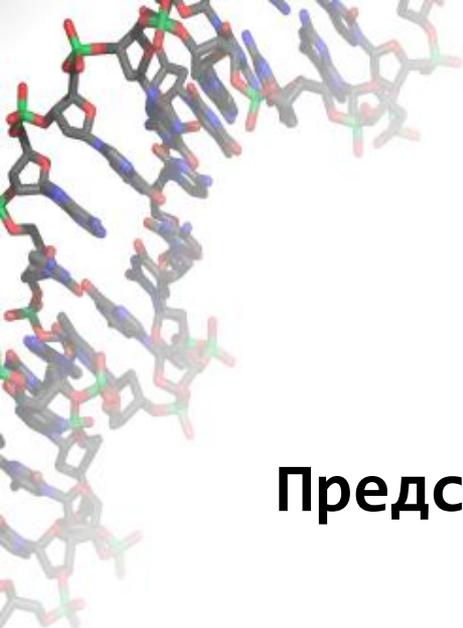
$c$  – штраф за «потерю» спаривания нуклеотидов

$$W(G) =$$

$$\sum_{k=1..n} M(S_1[p_k], S_2[q_k]) - g \cdot m - d \cdot l + b \cdot t - c \cdot k$$

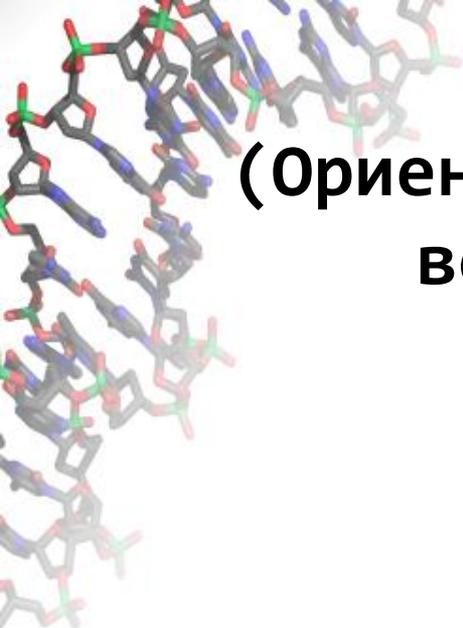
**Время:**  $O(m^2 n \log^2(n))$

**Память:**  $O(m^2 n \log(n))$

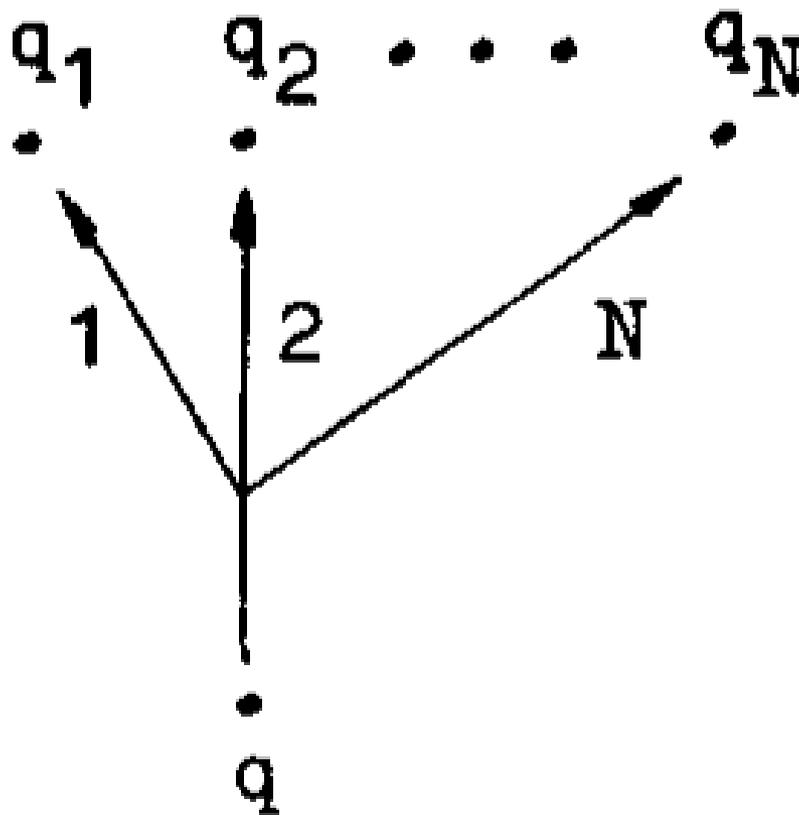


## Раздел 3. Предсказание вторичной структуры РНК.

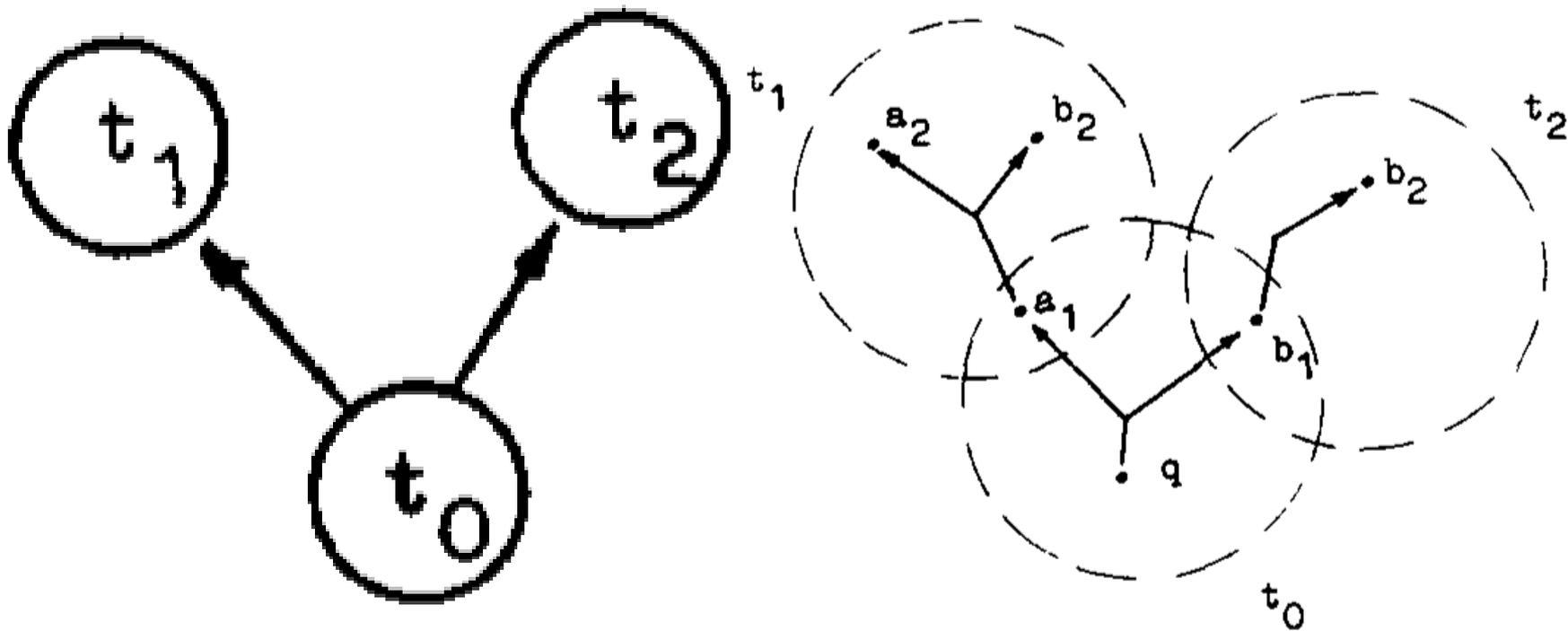
### 3.2. Оптимальная структура РНК и гиперграфы



**(Ориентированный) Гиперграф: множество вершин и множество гиперребер**

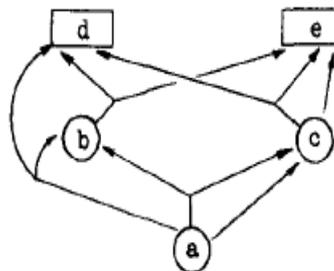


# Гиперпуть

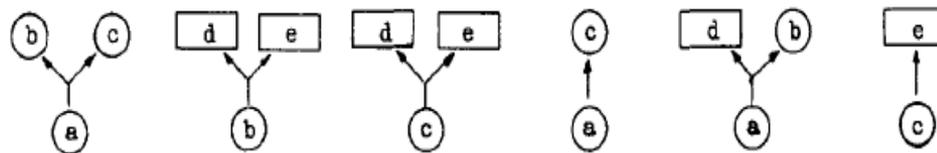


**Вес гиперпути – ПРОИЗВЕДЕНИЕ (\*)  
весов гиперребер**

(a)



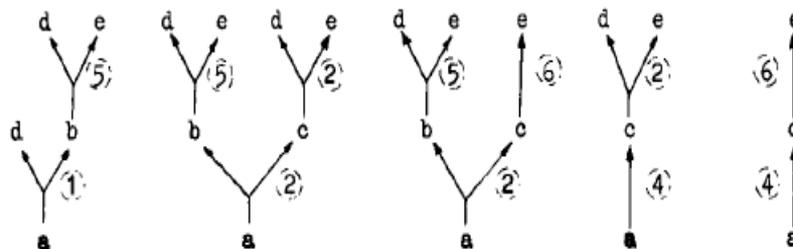
(b)



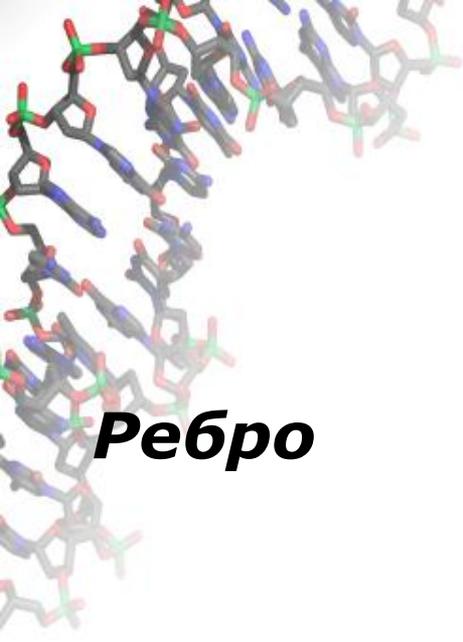
$U=(a,\{b,c\})$   $V=(b,\{d,e\})$   $W=(c,\{d,e\})$   $X=(a,\{c\})$   $Y=(a,\{d,b\})$   $Z=(c,\{e\})$

$r(U)=2$   $r(V)=5$   $r(W)=2$   $r(X)=4$   $r(Y)=1$   $r(Z)=6$

(c)



$(+,min):::6$   $(+,min):::9$   $(+,min):::13$   $(+,min):::6$   $(+,min):::10$   
 $(x,+):x:5$   $(x,+):x:20$   $(x,+):x:60$   $(x,+):x:8$   $(x,+):x:24$



# Графы и гиперграфы

## Основные понятия

**Вершина**

**Ребро**

**Гиперребро**

**Вершина-источник**

**Тупиковая вершина (сток)**

**Путь**

**Гиперпуть**

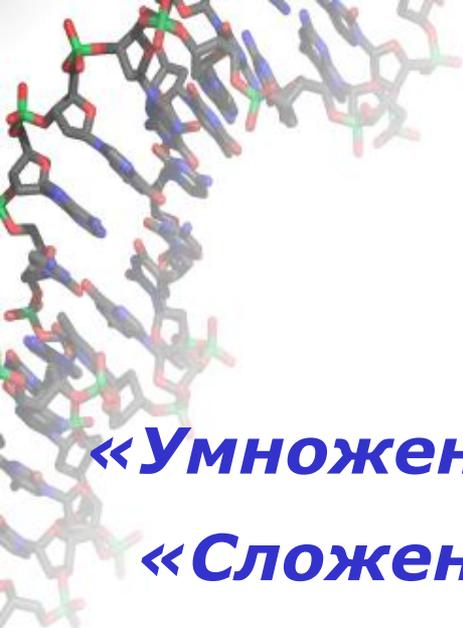
**Инициальный (гипер)путь**

**Терминальный (гипер)путь**

**Полный (гипер) путь:**

**Начальная вершина – источник;**

**Конечные вершины - тупиковые**



# Графы и гиперграфы

## Основные понятия

### *Вес гипер(ребра)*

*«Умножение»: как вычислять вес (гипер)пути*

*«Сложение»: целевая функция [коммутат.]*

*Дистрибутивность:*

$$a*(b+c) = a*b+a*c; (b+c)*a = b*a+c*a$$

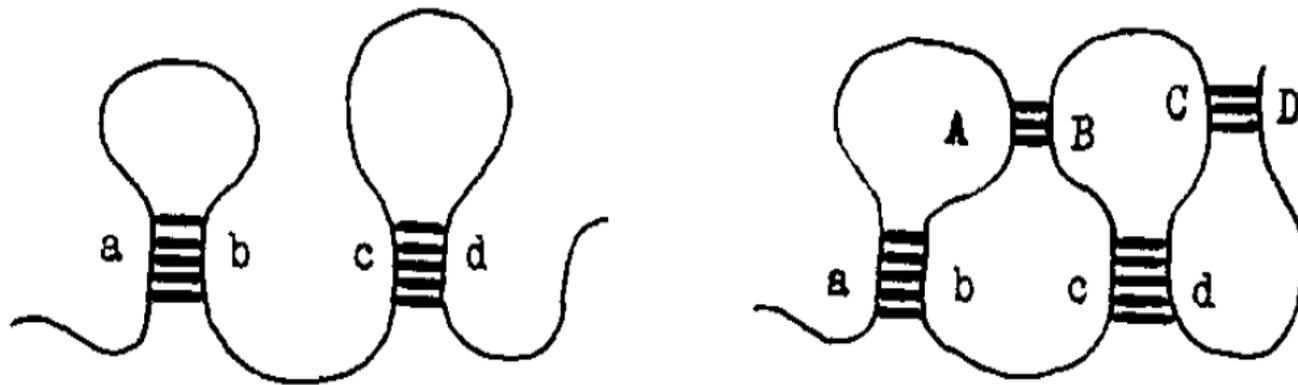
*Вес пути*

*Вес гиперпути*

***ПРОБЛЕМА:***

***НАЙТИ «СУММУ» ВЕСОВ  
ВСЕХ ПОЛНЫХ (ГИПЕР)ПУТЕЙ***

# Вторичная структура РНК (оптимальная скобочная структура)



## 4.1. Prediction of the optimal RNA secondary structure.

Currently many formal statements of the search for the  
DNA structure are known. These statements differ in the



## ВТОРИЧНАЯ СТРУКТУРА строки $P[1..N]$

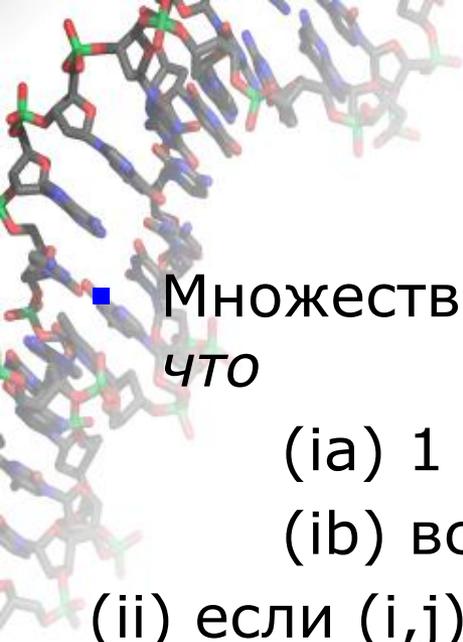
Алфавит:  $\{A, T; G, C\}$

Комплементарные буквы:

$A \leftrightarrow T;$

$G \leftrightarrow C$

Пара (=дуга)  $(i, j)$  разрешена, если буквы  
 $P[i]$  и  $P[j]$  комплементарны

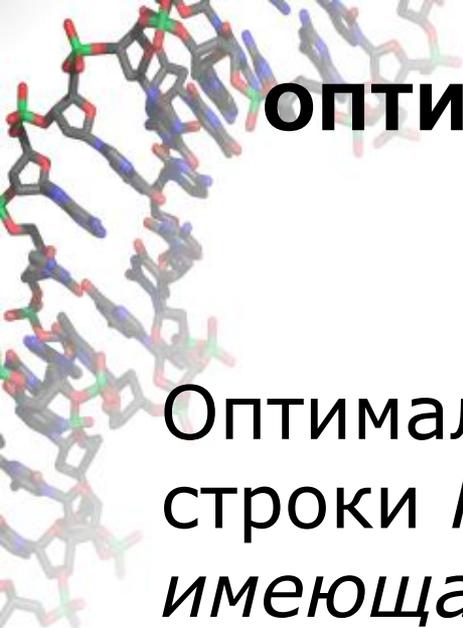


## ВТОРИЧНАЯ СТРУКТУРА строки $P[1..N]$

- Множество пар  $S = \{(i_1, j_1), \dots, (i_K, j_K)\}$  такое, что
  - (ia)  $1 \leq i_r < j_r \leq N$  ( $r = 1, \dots, K$ );
  - (ib) все пары в  $S$  разрешены
  - (ii) если  $(i, j) \in S$  и  $(i', j') \in S$ , то отрезки  $[i, j]$  и  $[i', j']$  либо вложены один в другой, либо не пересекаются

*Вес структуры*  $S$  – количество пар в ней.

$$W(S) = K$$



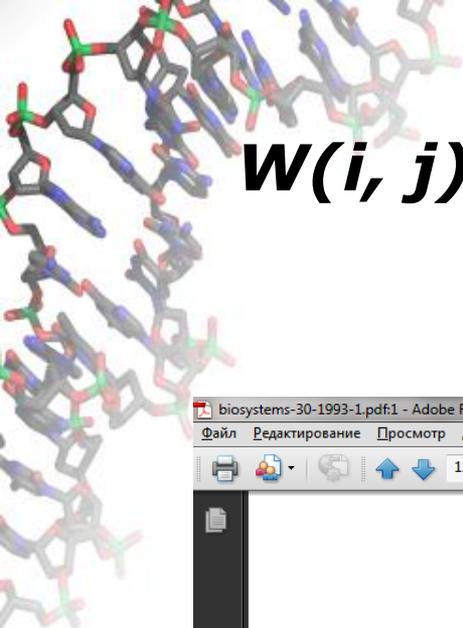
# ОПТИМАЛЬНАЯ ВТОРИЧНАЯ СТРУКТУРА строки $P[1..N]$

Оптимальная вторичная структура для строки  $P$  – вторичная структура для  $P$ , имеющая наибольший возможный вес.

$W(P) = \max\{W(S) \mid S \text{ – структура для } P\}$

$W(P) = 0$ , если длина  $P$  равна 0 или 1

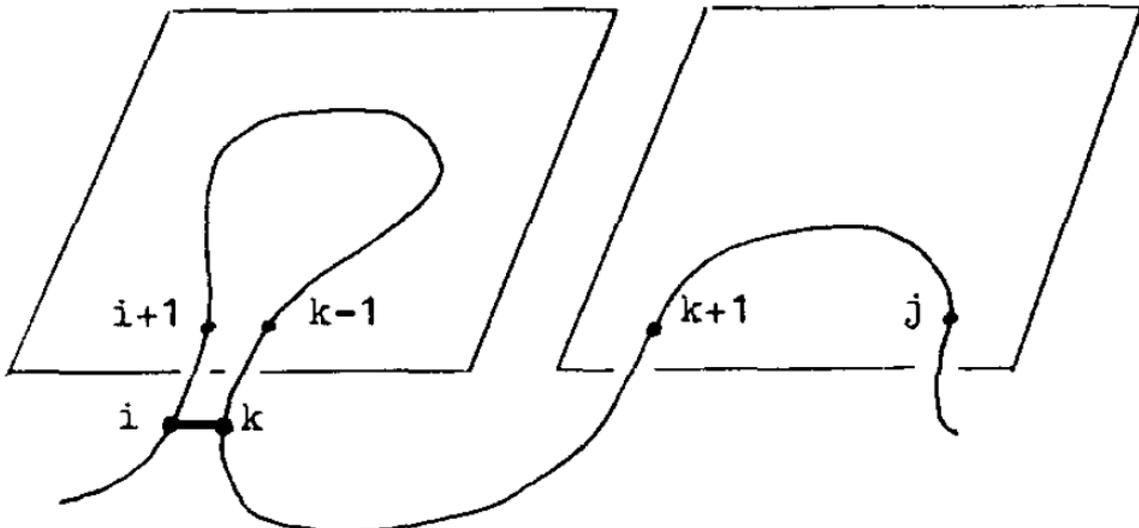
**ЗАДАЧА:** Найти оптимальную структуру для данной строки


$$W(i, j) = \max\{\text{«склейка» } (i, k) \text{ допустима} | 1 + W(i+1, k-1) + W(k+1, j)\}$$

biosystems-30-1993-1.pdf:1 - Adobe Reader

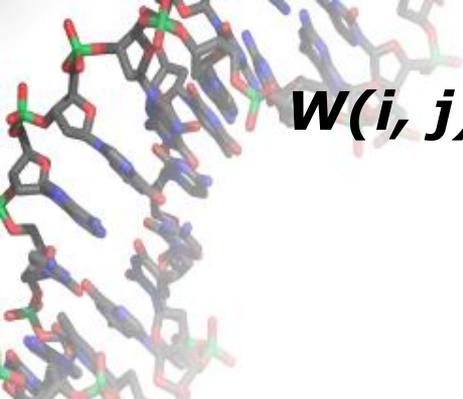
Файл Редактирование Просмотр Документ Инструменты Окно Справка

12 / 19 300% Найти

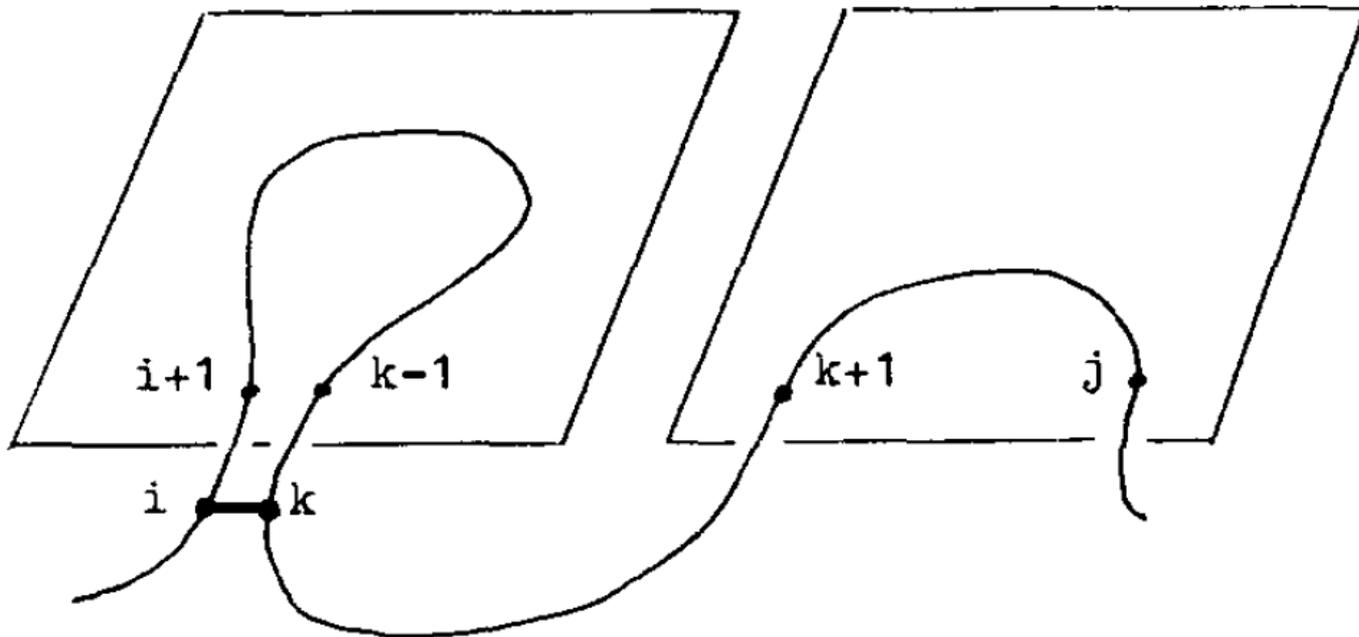


For each segment  $B(i, j)$  we retain the value  $E(i, j)$  and

190.5 x 261.8 мм



$$W(i, j) = \max\{W(i+1, j), \max\{k: \text{«склейка» } (i, k) \text{ допустима} \mid 1 + W(i+1, k-1) + W(k+1, j)\}\}$$



For each segment  $B(i, j)$  we retain the value  $E(i, j)$  and

# Пример: РНК и гиперпуть

