

Übungen zur Vorlesung Algorithmische Bioinformatik

Freie Universität Berlin, WS 2004/05

Utz J. Pape · Ben Rich · Dr. Stefan Röpcke · Prof. Dr. Martin Vingron

Blatt 12 · Ausgabe am 17.01.2005

Abgabe am 24.01.2005 vor Beginn der Vorlesung

Aufgabe 42 (RNA Sekundärstrukturen). In der Vorlesung haben Sie RNA Sekundärstrukturen kennengelernt. Beim Nussinov-Algorithmus ist eine Struktur definiert durch die Menge der gepaarten Basenpaare. Wieviele verschiedene Strukturen gibt es bei einer Sequenz der Länge n ? Stellen Sie eine rekursive Gleichung auf, berechnen Sie das Ergebnis für $1 \leq n \leq 20$ und stellen Sie es als Graph dar.

Aufgabe 43 (Backtracking Nussinov). Der in der Vorlesung vorgestellte Algorithmus berechnet nur die maximale Anzahl von gepaarten Basen. Nun sind wir aber an der Struktur interessiert. Beschreiben Sie, wie man das Backtracking beim Nussinov Algorithmus vollführen kann.

Aufgabe 44 (Programmieraufgabe: Nussinov). Implementieren Sie den Nussinov-Algorithmus und testen Sie ihn mit sinnvollen Beispielsequenzen. Abgabe ist am 31. Januar.

Aufgabe 45 (Gewöhnliche Differentialgleichungen). Bestimmen Sie die analytische Lösung der folgenden Differentialgleichung für $x \in \mathbb{R}^{\geq 1}$ mit dem Anfangswert $y(1) = \sqrt{2}$, wobei wir voraussetzen, dass $y > 0 \quad \forall x$:

$$y'(x) = 1/y(x)$$

Stellen Sie die Trajektorie der analytischen Lösung graphisch dar. Benutzen Sie nun den expliziten Euler erster Ordnung und lösen Sie die Differentialgleichung numerisch. Stellen Sie beiden Lösungen gemeinsam dar und interpretieren Sie das Ergebnis.

Aufgabe 46 (Molekulare Dynamik). Wir betrachten ein harmonisch oszillierendes Teilchen der Masse m , dessen Ort zum Zeitpunkt t durch $x(t)$ gegeben ist. Die erste Ableitung nach der Zeit \dot{x} entspricht der Geschwindigkeit v , die zweite Ableitung \ddot{x} der Beschleunigung a . Folgender Zusammenhang gilt zwischen der potentiellen Energie $U(x)$ und der Kraft F :

$$F = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

Die Gesamtenergie E ist die Summe der potentiellen U und der kinetischen Energie:

$$E = U + \frac{m}{2}v^2$$

Da wir die Hamilton'sche Formulierung benutzen, wird E oft H genannt.

- Zeigen Sie, dass der Energieerhaltungssatz gilt, benutzen Sie dafür Newton's zweites Gesetz, dass die Kraft F gleich dem Produkt von Masse m und Beschleunigung a ist.

- Die Kraft bei unserem Teilchen ist gegeben durch $F = -xD$ wobei D eine Kraftkonstante ist. Stellen mit Hilfe des zweiten Newton Gesetzes eine Differentialgleichung für den Ort auf und substituieren Sie $D = \omega^2 m$, so dass wir eine Gleichung in Abhängigkeit der Kreisfrequenz ω bekommen. Lösen Sie die Differentialgleichung analytisch. Setzen Sie analog zum Tutorium $x = Ce^{\lambda t}$ an.
- *Bonus*: Beweisen Sie: Mit den Anfangswerten $x = 0$ und $v = v_0$ zum Zeitpunkt $t = 0$ erhält man die Lösung $x(t) = \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t$.
- Berechnen Sie die potentielle Energie U des Teilchens.
- Berechnen Sie die analytische und numerische (expliziter Euler erster Ordnung) Lösung der Bewegungsgleichungen

$$v = \frac{\partial E}{\partial p}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial E}{\partial x}$$

Dabei ist $p = mv$ der Impuls. Benutzen Sie die Werte $m = 1g/mol$, $D = 250000kJ/mol/nm^2$, $x(0) = 0nm$ und $v(0) = 2km/s$ und stellen Sie die numerische und analytische Lösung gemeinsam dar. Interpretieren Sie das Ergebnis! *Bonus*: Stellen Sie auch die Trajektorie der Energie dar.

Anmerkung: Die letzten beiden Aufgaben werden in den Tutorien diese Woche ausführlich durchgesprochen und z.T. mit ähnlichen Aufgabenbeispielen durchgerechnet.