



Bendroji perrinkimo technika (kombinatorinių algoritmų elementai)

GTT

GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA GTG

TAA

p. 2

Pilnas perrinkimas:

- –Kaip perrinkti visus aibės poaibius?
- -Taikymo pavyzdys:
 - Objektų poaibis, atitinkantis "gerus" požymius;

GTG ··· TAA

010

000

ATG CTT

011

GTT

GTC GTA GTG

TAA

000

GTG

TAA

GTA

o. 3

Pilnas *poaibių* perrinkimas. Algoritmo elementai:

- -Dvejetainis skaitliukas
 - •a[i] dvejetainiai skaitmenys, realizuojame *Kitas(int[] a)*;
- -Dvejetainė sistema

GTG

TAA

000

GTG

- • $for(int \ i = 0; \ i < (1 << N); \ i++)$
 - DvejetainisKodas(a,i).....

Pilnas Dekarto sandaugos perrinkimas:

- –Kaip perrinkti visus aibės AxB elementus?
 (A ir B yra realizuoti, pavyzdžiui, kaip masyvai)
- -... aibės AxBxC?

011

GTG

000

GTG

TAA

GTA

- -... aibės A1xA2x...xAN?
- -Taikymo pavyzdys: "receptas", t.y., objektas iš A1xA2x…xAN, kurį įmanoma atrasti tik perrenkant visus įmanomus variantus

Pilnas Dekarto sandaugos perrinkimas:

- -Pavyzdys
 - •A1={1,2,3,4}
 - •A2={1,2,3}
 - •A3={1,2}
 - $A4=\{1,2,3\}$
 - •A5={1,2,3,4,5}

Klausimas: kiek variantų turi A1xA2x...xA5?

ATG CTT

010

000

011

GTT GTC GTA GTG

TAA
...
000
GTA

GTG ··· TAA ···

GTA GTG · · · TAA

Pilnas Dekarto sandaugos perrinkimas:

- Klausimas: kaip apibendrinti poaibių generavimo algoritmą?
- Pavyzdžiui, turime variantą iš sandaugos (1,1,1,1,1), koks bus kitas? (1,1,1,1,2)
- O jeigu variantas yra (1,1,1,3,5), tai koks kitas?

p. 7

ATC

010

011

GTC GTA GTG

000 GTA

GTG ••• TAA

GTA GTG

Pratimas

- Tarkime, kad mes sunumeravome pagal minėtą tvarką A1x...xA5 elementus nuo 1 iki 360.
 - Nurodykit elementus, kurie yra 10, 100, 200, 300
 - Suformuluokite algoritmo idėją

p. 8

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

GTA

Keitiniai...

Yra daug galimybių juos generuoti:

- pasinaudoti "cikliniais" postūmiais;
- pasinaudoti leksikografine tvarka;
- pasinaudoti faktorialinę skaičiavimo sistema

). 9

010 011 000

ATG CTI

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

GTA GTG

Cikliniai postūmiai

123

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000 GTA

GTG

TAA

GTA GTG

TAA

- 132
- 231
- 2 1 3
- 312
- 3 2 1

p. 10

Leksikografinė tvarka (idėja)

• abc

010

000

ATG CTT

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000 GTA

GTG

TAA

GTA GTG

TAA

- a c b
- bac
- bca
- cab
- cba

p. 11

Keitiniai (faktorialinė skaičiavimo sistema)...

Mūsų tradicinė skaičiavimo sistema gali būti pavadinta "geometrine".

010 011 000

ATG

CTT

011

GTT GTC

GTA

GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA

GTG

TAA

Bet galima konstruoti ir faktorialinę sistemą

$$\sum_{i=0}^{n} i \cdot i! = (n+1)! - 1.$$

18 ₁₀	3 ₃ 0 ₂ 0 ₁ 0 ₀
19 ₁₀	3 ₃ 0 ₂ 1 ₁ 0 ₀
2010	3 ₃ 1 ₂ 0 ₁ 0 ₀
21 ₁₀	3 ₃ 1 ₂ 1 ₁ 0 ₀
2210	3 ₃ 2 ₂ 0 ₁ 0 ₀
23 ₁₀	3 ₃ 2 ₂ 1 ₁ 0 ₀

011

GTC

000

GTG

TAA

Keitiniai (faktorialinė skaičiavimo sistema)...

- Pratimas. Užrašykite faktorialinėje skaičiavimo sistemoje skaičius:

 - **-8**
 - -64
 - -100

Keitiniai (faktorialinė skaičiavimo sistema)...

- Pratimas. Užrašykite faktorialinėje skaičiavimo sistemoje skaičius:

011

GTC

000

GTG

- **-8**
- -64
- -100

Jeigu naudojame STL iš C++

```
Arba tiesiog pasinaudoti STL :)
#include <algorithm>
#include <iterator>
#include <vector>
#include <iostream>
using namespace std;
int main(void) {
         vector<int> v;
         v.push back(1); v.push back(2); v.push back(3);
         while (next permutation(v.begin(), v.end() ) ) {
                     // pagal visus ketinius
                  copy(v.begin(), v.end(), ostream iterator<int>(cout, ""));
                  cout << endl;</pre>
         return 0;
```

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA ••• GTA

GTG ··· TAA

...

Java kodas

http://code.google.com/p/algorithms-java/source/browse/trunk/src/main/java/com/google/code/Permutations.java?r=3

```
package com.google.code;
 3
    * Works with <a href='http://en.wikipedia.org/wiki/Permutation'>permutations</a>
    public class Permutations {
         * Accepts an array of <b>ints</b> and reorders it's elements
 8
 9
         * to recieve lexicographically next permutation
10
         * @param p permutation
11

    * @return false, if given array is lexicographically last permutation, true otherwise

12
13
14
        public static boolean nextPermutation(int[] p) {
15
            int a = p.length - 2;
            while (a >= 0 \& p[a] >= p[a + 1]) {
16
17
                a--;
18
19
            if (a == -1) {
                return false;
20
21
22
            int b = p.length - 1;
23
            while (p[b] \leq p[a]) {
24
                b--;
25
26
            int t = p[a];
27
            p[a] = p[b];
28
            p[b] = t;
29
            for (int i = a + 1, j = p.length - 1; i < j; i++, j--) {
30
                t = p[i];
31
                p[i] = p[j];
32
                p[j] = t;
33
34
            return true;
35
```

010 011 000

ATG CTT

011

GTT

GTC

GTA

GTG

TAA

000

GTA

GTG

TAA

GTA

GTG

TAA

36 }

p. 16

O kaip su deriniais?

 Pavyzdys. Reikia išrinkti iš aibės skaičių, reprezentuojamos masyvo A[0..99], tris tokius, kad f(A[i1],A[i2],A[i3]) tenkina tam tikrą nurodytą sąlygą, indeksai i1,i2,i3 tarpusavyje skirtingi.

011

000

Kaip spręsti? (Mokyklinis uždavinys:))

Bendras atvejis

for
$$i_1 := 0$$
 to N do

for $i_2 := i_1 + 1$ to N do

for $i_k := i_{k-1} + 1$ to N do

If $<$ sąlyga $> ...$

010

000

ATG CTT

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000

GTA GTG

TAA

GTA GTG

TAA

Bet tiesiogiai kalbos sintaksė taip neleidžia parašyti

Sprendimas

- 1) Rekursija
- 2) Iteracija

Stekas: jis parodys atitinkamo indekso reikšmes.

```
[i1][i2][i3]...[ik]
```

Einamasis indeksas asocijuojamas su SP(steko rodykle). Kai tam tikras indeksas jau "prabėgo" visas reikšmes, tiesiog darome pop operaciją, po to – push su pradine "vidinio" indekso reikšme, t.y., vienetu didesne, negu esantis indeksas

p. 19

CTT

010

000

ATG

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA
...
GTA
GTG

Dar vienas sprendimas

Jis remiasi leksikografine derinių tvarka. Pabandykit suformuluoti šią idėją

Tarkime abėcėlė yra {a,b,c,d,e}, o domina 3 raidžių žodžiai, kur raidės "didėja" (nes jie ir bus atitinkamų *derinių atstovai*)

abc

010

000

ATG

011

GTT

GTC GTA

GTG

TAA

000 GTA

GTG

TAA

GTA GTG

TAA

a b d

a b e

a c d

аcе

a d e

bcd

bce

b d e

cde

p. 20



Restriktazės padengimo uždavinys

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA GTG

Restrikcijos fermentai

- Tam tikrų fermentų pagalba galima sukarpyti DNR tam tikrose vietose;
- Pavyzdys: HindIII fermentas turi kirpimo schemą:

```
5'-A | A G C T T-3'
3'-T T C G A | A-5'
```

011

000

GTG

Problemos formulavimas

- Tarkime, kad turime L ilgio DNR seką, kuri yra kerpama mums nežinomuose vietose tam tikro restrikcijos fermento pagalba;
- Elektroforezės pagalba mes galime sužinoti sukarpytų dalių ilgius: jų aibę žymėsime ΔX;

000

 Uždavinys: pagal ΔX reikia rasti bent vieną galima X variantą.

Kur sunkumai?



p. 24

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA
...
GTA
GTG

Pratimai

- Tarkime, kad X yra {1, 5, 7, 10}
 - Raskite ΔX;

010

011

GTC

GTG

000

GTG

- Tarkime, kad X yra sudaryta iš N skaičių. Kiek elementų gali turėti ΔX?
- Įrodykite teiginį: jeigu X yra {t1,t2,..., tN}, ο Y yra {t1+a,t2+a., tN+a}, tai ΔX = ΔΥ
- Sukurkite dvi vienodo dydžio nesutampančias aibes X ir Y, kurios prasideda nuo 0 taip, kad būtų ΔX = ΔΥ

Pastaba

 Toliau visur tarsime, kad X visada prasideda nuo 0

000 ATG

010

AT(CTI

011

GTT GTC GTA

GTG · · · TAA

000 GTA GTG

TAA
...
GTA

GTG · · · TAA

Kaip ieškoti X pagal ΔX?

Pirma idėja:

- Kadangi X prasideda nuo 0, tai galime rasti didžiausią skaičių iš ΔX, pažymėkime jį L ir taip pat aibės X elementų skaičių pagal ΔX elementų skaičių N (kaip?);
- Tada imame visas įmanomus N-2 ilgio vektorius V(v1,v2,...vN-2) tokius, kad:
 - 0<v1<v2<..<v{N-2}<L
 - $\Delta V = \Delta X \{0,L\};$
- Bet kuris iš minėtų vektorių ir bus uždavinio sprendinys

ATG CTT

010 011

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

Aptarimas

- Pagrindinis techninis klausimas: kaip ieškoti minimus vektorius?
 - Atsakymas: rekursija;
- Kada sustoti?

010

011

GTT

 GTC

TAA

000

GTG

TAA

GTA

TAA

 Kai radome bent vieną tinkamą vektorių arba "baigėsi" variantai;

Pratimas

 Tarkime DX={2,3,4,5,7,9}. Reikia rasti X pagal pateiktą algoritmą.

AТС

CT:

011

GTT GTC GTA

GTG · · · TAA

000 GTA GTG

TAA TAA GTA

GTG ••• TAA

Patobulinimas

- Galime labai paprastai patobulinti paiešką:
 - Reikia ieškoti tokių vektorių V, kurių komponentės priklauso ΔX (kodėl?)
- Kodėl toks būdas tobulesnis?

011

GTC

TAA

000

GTG

TAA

 Tiesiog elementų skaičius pačiame DX ir visos sekos ilgis L gali labai skirtis: dažniausiai L būna labai didelis palyginus su #ΔX.

Kaip dar galima patobulinti?

Panaudosime šakų ir rėžių metodą

 Jo pagrindinė idėja bendru atveju: jeigu skaičiavimo medžio mazge matome, kad sprendinio "jau nesigaus", tai nėra prasmės leistis žemyn – reikia grįžti prie prieš tai buvusio mazgo

o. 31

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

GTA

Pavyzdys ("iš kitos operos").

Tarkime, kad turime rasti skaičių aibės {n1,n2,...,nk} poaibį, kurio elementų suma yra duotas skaičius S

011

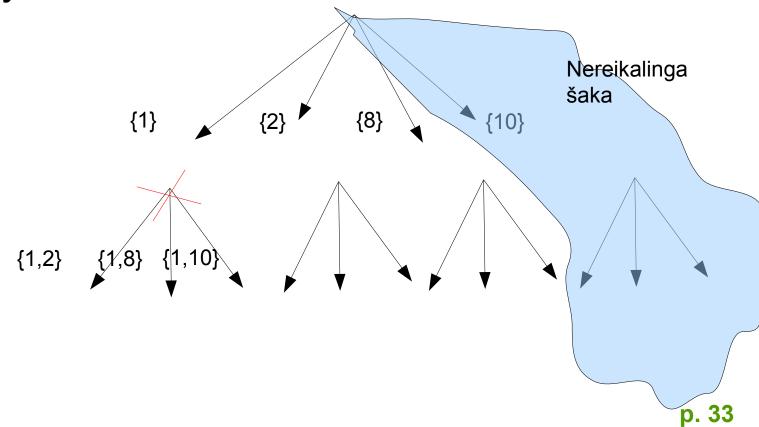
000

GTG

 Jeigu kuriame nors paieškos medžio (kita skaidrė) mazge suma jau viršijo S, tai nėra prasmės ieėkoti toliau;

Paieškos medis

Tarkime kad S = { 1,2,8,10 }.Reikia rasti poaibį, kurio elementų suma yra 9:



010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA GTG



Praktikoje *tinkamas* restrikcijos padengimo algoritmas

GTT

GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA GTG

TAA

p. 34

"Tinkamas" algoritmas (S. Skiena) Pavyzdys

$$\Delta X = \{2,2,3,3,4,5,6,7,8\}$$

p. 35

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

··· TAA

000 GTA GTG

TAA
...
GTA
GTG

"Tinkamas" algoritmas (S. Skiena) Pavyzdys

$$X=\{0,10\}, \Delta X = \{2,2,3,3,4,5,6,7,8\}$$

Ir lieka:

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000

GTA GTG

TAA

GTA

TAA

arba x4 = 8 arba x2 = 2. kadangi abu atvejai simetriniai – imame x2 = 2;

Šaliname iš ΔX visus atstumus tarp x2 ir X narių.

"Tinkamas" algoritmas (S. Skiena) Pavyzdys

011

GTT

 GTC

GTG

000

GTG

GTA

TAA

 $X=\{0,2,10\}, \Delta X =$ {2,3,3,4,5,6,7} Ir lieka: arba x4 = 7 arba x3 = 3.Kadangi x3-x2=1, o 1 nėra aibėje *∆x*, tai x4=7. p. 37

"Tinkamas" algoritmas (S. Skiena) Pavyzdys

CTT

011

GTT

 GTC

GTG

000

GTG

GTA GTG

TAA

$$X = \{0, 2, 7, 10\}, \Delta X = \{2, 3, 4, 6\}$$

Ir lieka: arba x3 = 4, arba x3 = 6. Jeigu x3=6,tai x4-x3 = 1 turėtų priklausyti Δx. Lieka x3=4

Rezultatas

$$X = \{0, 2, 4, 7, 10\}$$

p. 39

011

CTT

GTT GTC GTA

GTG ··· TAA

000 GTA GTG

TAA TAA GTA

GTG ··· TAA

Formalus algoritmas

PADENGIMASSUGRIZIMAIS(ΔX)

- 1. plotis \leftarrow Max(Δ X)
- 2. TRINK(plotis, ΔX)
- 3. $X \leftarrow (0, plotis)$

010

000

011

GTT

GTC GTA

GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA

TAA

4. BANDYKPADENGTI(ΔX, X)

Rekursinis, žr. kitą skaidrę

Formalus algoritmas

Žymėjimas: $\Delta(y,X)$ – visi atstumai tarp y ir visų X elementų:

$$\Delta(2, \{1, 3, 4, 5\}) = \{1, 1, 2, 3\}$$

000 GTA GTG

Formalus algoritmas

```
BANDYKPADENGTI(\Delta X, X)
1. Jeigu ΔX yra tuščia
          Rašyk X
          Baigti
2. y \leftarrow Max(\Delta X)
3. Jeigu \Delta(y,X) yra poaibis iš \Delta X
          Pridėk y prie X ir pašalink visus ilgius \Delta(y,X) iš \Delta X
           BANDYKPADENGTI(\Delta X, X)
           Išmesk y iš X ir pridėk atgal visus ilgius \Delta(y,X) iš \Delta X
4.y1 \leftarrow plotis - y
5. Jeigu \Delta(y,X) yra poaibis iš \Delta X
          Pridėk y1 prie X ir pašalink visus ilgius \Delta(y1,X) iš \Delta X
           BANDYKPADENGTI(\Delta X, X)
           Išmesk y1 iš X ir pridėk atgal visus ilgius \Delta(y1,X) iš \Delta X
```

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC

GTA

GTG

TAA

000

GTA

GTG

TAA

GTA GTG

TAA

6. Baigti

Pratimas

Tegul ΔX yra $\{2,3,3,3,5,6,6,8,9,11\}$. Raskit X pagal Skienos algoritmą

p. 43

010 011 000

CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG ··· TAA

GTA

Greitis

Jeigu turėtume TIK vieną altternatyvą, tai T(n)=T(n-1)+O(n),O jeigu kiekvieną kartą – dvi alternatyvos, tai T(n)=2*T(n-1)+O(n)

011

GTC

GTG

000

GTA

Klausimas

Kokią išvadą apie galima iš to padaryti?

Pastaba: 2002 metais atrastas polinominis algoritmas šiam uždaviniui (Maurice Nivat)

A. Duarat, Y. Gerard, and M. Nivat. The chords problem. *Theoretical Computer Science*, 282:319–336, 2002.

011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

p. 46



Motyvo paieškos problema

p. 47

000

CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA GTG

[vadas

Reguliatoriniai motyvai DNR sekose. Kaip patikrinti imuninės sistemos atsaką. Transkripcijos faktoriai ir reguliatoriniai motyvai.

Motyvai tekstuose (bendrai)

p. 48

011

ATC CTT

01

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

Pvz. (nebiologinis). Kas čia parašyta?

000

011

GTC

000

TAA

HSN OBTGBZ PUBY J KXJLW DTMBD GOTMNU TG JKBAH PTPHNNZ HTYNG YBUN OBHNZH HSJZ JZ NRAJX JYBAZH PUBY J UJHHXNGZJWN.

Atsakymas

The poison from a black widow spider is about fifteen times more potent than an equal amount from a rattlesnake.

o. **50**

CTT

011

GTT GTC GTA GTG

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

TA*P*

Motyvacija.

Koks ilgiausias bendras fragmentas gali būti rastas visose eilutėse?

CGGGGCTGGGTCGTCACATTCCCCCTTTCGATA TTTGAGGGTGCCCAATAACCAAAGCGGACAAA GGGATGCCGTTTGACGACCTAAATCAACGGCC AAGGCCAGGAGCGCCTTTGCTGGTTCTACCTG AATTTTCTAAAAAGATTATAATGTCGGTCCTC CTGCTGTACAACTGAGATCATGCTGCTTCAAC TACATGATCTTTTGTGGATGAGGGAATGATGC

GTA GTG

000

GTG

000

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

GTA

ΓAA

Koks ilgiausias fragmentas gali būti rastas visose eilutėse, jeigu galimos mutacijos?

Motyvacija.

CGGGGCTGGGTCGTCACATTCCCCCTTTCGATA TTTGAGGGTGCCCAATAACCAAAGCGGACAAA GGGATGCCGTTTGACGACCTAAATCAACGGCC AAGGCCAGGAGCGCCTTTGCTGGTTCTACCTG AATTTTCTAAAAAGATTATAATGTCGGTCCTC CTGCTGTACAACTGAGATCATGCTGCTTCAAC TACATGATCTTTTGTGGATGAGGGAATGATGC

010 011 0000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000

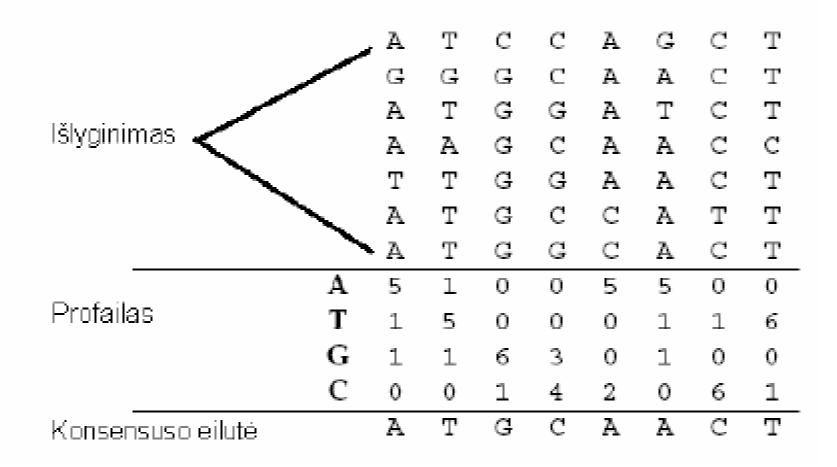
GTA GTG

TAA

GTA GTG

TAA

Kaip elgtis su mutacijomis? Konsensuso eilutė



Superpozicijos ir profiliai

Kiekvienai superpozicijai skaičiuojame konsensuso eilutės svorį: mūsų atveju tai bus 5+5+6+4+5+5+6+6 = 42

CGGGGCTATCCAGCTGGGTCGTCACATTCCCCTT...

TTTGAGGGTGCCCAATAAggGCAACTCCAAAGCGGACAAA

GGATGGAtCTGATGCCGTTTGACGACCTA...

AAGGAAGCAACcCCAGGAGCGCCTTTGCTGG...

AATTTTCTAAAAAGATTATAATGTCGGTCCtTGgAACTTC

CTGCTGTACAACTGAGATCATGCTGCATGCCAtTTTCAAC

TACATGATCTTTTGATGGCACTTGGATGAGGGAATGATGC

FTG

000

011

TAA

p. 54

Motyvo paieškos problema

- Duota t DNR sekų, kurių visų ilgis yra n. Reikia rasti I-merų aibę – po vieną iš kiekvienos sekos, tokią, kad ji maksimizuoja konsensuso eilutės svorį;
- Algoritmo argumentai:
 - t x n matrica, I ieškomo fragmento (motyvo) ilgis
- Algoritmo rezultatai:
 - Pradinių pozicijų s1,s2,..., st masyvas.

Klausimas

 Jeigu norėtume spręsti "brute-force" metodu: perrinkti visus variantus, tai kiek jų yra?

011

GTT

GTC

GTG

TAA

000

GTG

GTG

-Ats.:
$$(n - l + 1)^{t}$$

 $(1,1,1,...,1,1) \rightarrow (1,1,1,...,1,2) \rightarrow ... \rightarrow (1,1,1,...,1,n-l+1)$
 $\rightarrow (1,1,1,...,2,1) \rightarrow (1,1,1,...,2,2) \rightarrow ... \rightarrow (n-l+1,n-l+1,n-l+1)$

Variantų perrinkimas

```
\label{eq:maxsvoris} \begin{split} \text{MotyvoPaieška}_1(\textit{DNR}, \ t, \ n, \ l) \\ \text{maxSvoris} &\leftarrow 0 \\ \text{for } (s_1, \ . \ . \ . \ , \ s_t) \ \text{from } (1, \dots, 1) \ \text{to } (n-l+1, \dots, n-l+1) \\ \text{if Svoris}(\textit{s}, \textit{DNR}) &> \text{maxSvoris} \\ \text{maxSvoris} &\leftarrow \text{Svoris}(\textit{s}, \textit{DNR}) \\ \text{geriausiasMotyvas} &\leftarrow (s_1, s_2, \dots, s_t) \\ \text{return geriausiasMotyvas} \end{split}
```

p. 57

CTT

011

GTT GTC GTA

GTG ··· TAA ···

000 GTA GTG ...

GTA GTG

Klausimas

```
Kaip perrinkinėti, t.y., kaip parašyti minėtą ciklą for?
```

010 011

GTT GTC

GTG

000

GTG

```
VisiLapai (s,t,n,l)

s \leftarrow (1, ..., 1)

while forever

rašyk s

s \leftarrow KitasLapas(s,t,n, k)

if s = (1, 1, ..., 1)

return
```

... kitas lapas...

011

011

000

```
KitasLapas(s,t,n,l)
  k \leftarrow n - 1 + 1
   for i \leftarrow t to 1
     if s_i < k
          s_i \leftarrow s_i + 1
          return s
     Si ←
 return s
```

Pratimas

- Paaiškinkite kaip veikia paskutiniųjų dviejų skaidrių algoritmas
- Kaip jį galima būtų perrašyti panaudojant mod operaciją?

p. 60

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA

··· TAA

000 GTA GTG

GTA

Klausimas?

- Kodėl šis algoritmas lėtas?
- Kaip galima būtų jį pagreitinti?
 - Pagrindinė idėja perrinkimo uždavinių pagreitinimo:
 - Pabandyti išsivaizduoti visus variantus kaip tam tikrą kryptinį medį, kuriame paieška prasideda nuo šaknies, o variantai – lapai. Tada jeigu yra sugalvota tam tikra šakų atmetimo strategija, tai galima žymiai pagreitinti perrinkimą

010 011 000

ATG CTI

011

GTT GTC GTA GTG

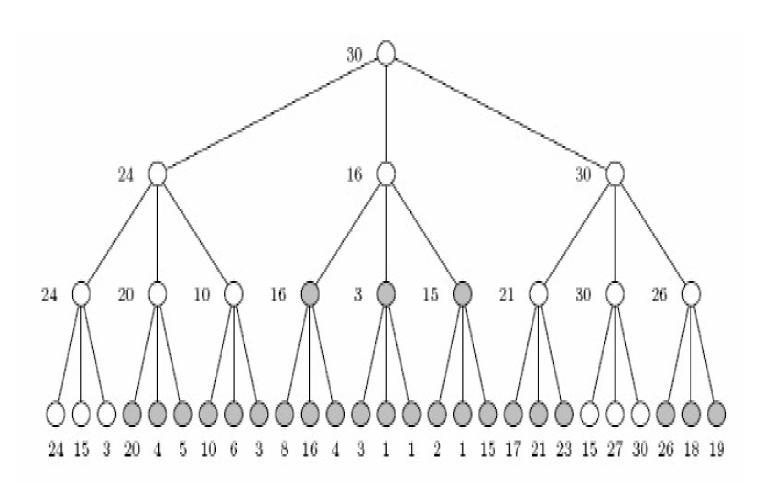
TAA

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

··· TAA

Variantų medis



p. 62

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG ...

GTA GTG

Kaip gaunamas medis?

 Tarkime, kad visi variantai yra tiesiog aibių A1xA2x ...An Dekarto sandauga. Tada galima vaizduoti medį, iš kurio šaknies išeina |A1| šakų, iš jų - |A2| šakų ir t.t.

011

000

GTG

TAA

GTA

GTG

- Pratimas. Sukonstruokit pilnojo perrinkimo medį uždaviniui: rasti visus triženklius skaičius, kurių skaitmenų sandauga yra 15. (A1={1..9},A2=A3={0..9}).
 - Pažymėkite sukonstruotame medyje "beviltiškas" šakas.

Kaip atlikti paieška medyje?

```
MotyvoPaieška 2(DNR, t, n, 1)
 s \leftarrow (1, \ldots, 1)
 maxSvoris \leftarrow 0
 i \leftarrow 1
 while i > 0
     if i < t
          (s, i) \leftarrow \text{KitaViršūnė}(s, t, n, l, i)
     else
          if Svoris(s,DNR) > maxSvoris
                maxSvoris \leftarrow Svoris(s,DNR)
                geriausiasMotyvas \leftarrow (s<sub>1</sub>, s<sub>2</sub>,...,s<sub>t</sub>)
               (s, i) \leftarrow \text{KitaViršūnė}(s, t, n, l, i)
 return geriausiasMotyvas
```

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

... kita viršūnė

```
KitaViršūnė (s,t,n,1,i)
  k \leftarrow n - 1 + 1
  if i < t
       s_{i+1} \leftarrow 1
       return (s, i + 1)
  else
       for j \leftarrow t to 1
       if s_i < k
           s_i \leftarrow s_i + 1
           return (s, j)
  return (s, 0)
```

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

TAA

p. 65

Kaip elgtis mūsų atveju?

010 011 000

ATG CTT

011

GTT

GTC

GTA GTG

TAA

000

GTA

GTG

TAA

GTA

GTG

```
MotyvoPaieška 3(DNR, t, n, 1)
 s \leftarrow (1, \ldots, 1)
 maxSvoris \leftarrow 0
 i \leftarrow 1
 while i > 0
     if i < t
         maxGeriausiasSvoris \leftarrow Svoris(s, i,DNR) + (t - i) · 1
         if maxGeriausiasSvoris < maxSvoris
            (s, i) \leftarrow \text{Atmesk}(s, t, n, l, i)
         else
            (s, i) \leftarrow \text{KitaViršūnė}(s, t, n, l, i)
     else
         if Svoris(s, DNR) > maxSvoris
             \max Svoris \leftarrow Svoris(s)
             qeriausiasMotyvas \leftarrow (s_1, s_2, ..., s_t)
          (s, i) \leftarrow \text{KitaViršūnė}(s, t, n, l, i)
 return geriausiasMotyvas
```

... atmesk

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA

GTG

TAA

000

GTA GTG

TAA

GTA GTG

```
Atmesk(s,t,n,l,i)
k \leftarrow n - l + 1
for j \leftarrow i to 1
if s_j < k
s_j \leftarrow s_j + 1
return (s, j)
return (s, 0)
```

Kaip elgtis mūsų atveju?

010 011 000

ATG CTT

011

GTT | GTC

GTA GTG

TAA

000

GTA GTG

TAA

GTA

GTG

TAA

```
MotyvoPaieška 3(DNR, t, n, 1)
 s \leftarrow (1, \ldots, 1)
 maxSvoris \leftarrow 0
 i \leftarrow 1
 while i > 0
      if i < t
         maxGeriausiasSvoris \leftarrow Svoris(s, i, DNR) + (t - i) · 1
          if maxGeriausiasSvoris < maxSvoris
             (s, i) \leftarrow \text{Atmesk}(s, t, n, l, i)
          else
             (s, i) \leftarrow \text{KitaViršūnė}(s, t, n, l, i)
     else
          if Svoris(s, DNR) > maxSvoris
              \max Svoris \leftarrow Svoris(s)
              geriausiasMotyvas \leftarrow (s<sub>1</sub>, s<sub>2</sub>, ..., s<sub>t</sub>)
          (s, i) \leftarrow \text{KitaViršūnė}(s, t, n, l, i)
 return geriausiasMotyvas
```

p. bo

... atmesk

```
Atmesk(s,t,n,l,i)
  k \leftarrow n - 1 + 1
  for j \leftarrow i to 1
      if s_i < k
          s_i \leftarrow s_i + 1
          return (s, j)
  return (s, 0)
```

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA

GTG

TAA

000 GTA

GTG

TAA

GTA GTG

010 011 0000 ATG

011

GTT

GTC

GTG

TAA

000

GTG

TAA

GTA

TAA

Godieji algoritmai

Kas yra godieji algoritmai?

- Tai algoritmai, kurie remiasi kokią paprastą (lokalią) optimizavimo einamosios būsenos idėją
- Pavyzdys: "burbulo" rūšiavimo algoritmas;
- Labiausiai užimtam(-i) žmogui/auditorijai tvarkaraštį reikia sukurti pačioje pradžioje
- etc.

011

000

O10 O11 O000 ATG

011

GTT

GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA GTG

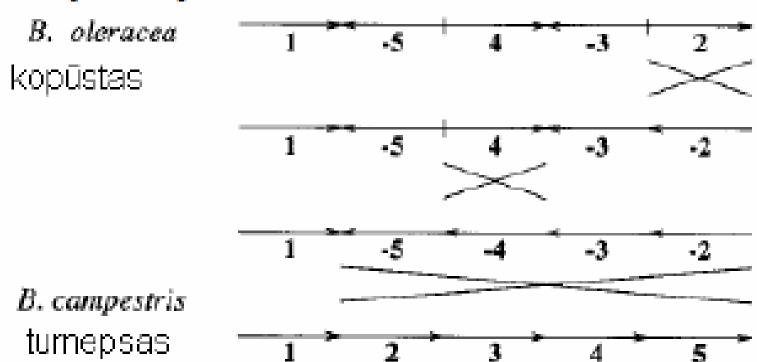
TAA

Genomo perstatos

Motyvacija 1.

Waardenburgo sindromas, genomo perstatos, inversijos (arba kas bendra tarp žmonių ir pelių).

Turnepsas ir kopūstas



p. 73

010 011 000

CTT

011

ATG

GTT GTC

GTA GTG · · · TAA

000 GTA GTG

TAA

TAA

GTA

GTG

Genomo perstatos: motyvacija

Evoliucijos metu genų nuskaitymo tvarka gali pasikeisti. Mūsų domins kol kas tik inversijos. Uždavinys – gauti trumpiausią inversijų seką, kuri perveda viena genomo elementą prie kito. Tame reikalingas tam tikras formalizavimas.

Keitinio π inversija $\rho(i,j)$ vadinsime naują keitinį, kurio elementai nuo i iki j eina priešinga kryptimi:

```
\pi_1, \pi_2, \dots \pi_i \dots \pi_j \dots \pi_n * \rho(i,j) \rightarrow \pi_1, \pi_2, \dots \pi_j \dots \pi_i \dots \pi_n
Pavyzdys: (1 \ 2 \ 3 \ 5 \ 4) * \rho(2,4) = (1 \ 5 \ 3 \ 2 \ 4)
```

010

000

ATG

011

GTT

GTC

GTG

000

GTG

TAA

GTA GTG

```
5' ATGCCTGTACTA 3'
3' TACGGACATGAT 5'

5' ATGTACAGGCTA 3'
3' TACATGTCCGAT 5'
```



011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA

GTA

GTG

TAA

Inversijų atstumo problema: Duotiems dviems keitiniams π ir σ reikia rasti trumpiausią inversijų seką $\rho_1, \rho_2, ..., \rho_t$ po kurios nuo vieno keitinio pereinama prie kito. *Tos sekos narių skaičius vadinamas atstumu tarp* π ir σ *ir žymimas* $d(\pi, \sigma)$. Paprastai patogu spręsti šią problema šiek tiek ją performulavus: vietoje σ galima imti (1 2 3 ... n) keitinį ir tada problema tampa *rikiavimu inversijų pagalba*.

p. 75

"Prastas" algoritmas

```
PrastasInversijuRikiavimas(p)
1 for i ← 1 to n - 1
2    j ← elemento i pozicija keitinyje p (t.y., pj = i)
3    if j ≠i
4         p ← p * r(i, j)
5         rašyk p
6    if p yra identiškas keitinys
7    return
```

010 011 000

CTT

011

GTT

GTC GTA

GTG

TAA

000

GTG

TAA

GTA GTG

Pavyzdys

Pavyzdys: turime 6 1 2 3 4 5 . Algoritmas:

Bet:

010 011 000

ATG

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000

GTA GTG

TAA

GTA GTG

TAA

1. 543216

123456

Pratimas

Pratimas. Kaip veiktų prastas inversijų rikiavimas tokiam atvejui: 3 5 7 1 2 4 6

p. 78

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

000 GTA GTG

TAA ••• GTA GTG

Prastas Inversiju Rikiavimas yra tikrai prastas, nes jam reikia n - 1 inversijos keitiniui (n 1 2 3 ... n - 1), o reliai 6 iam keitiniui reikia 2 inversijų.

Panaši problema: "Blynų dėstymas"

011

000

ATG

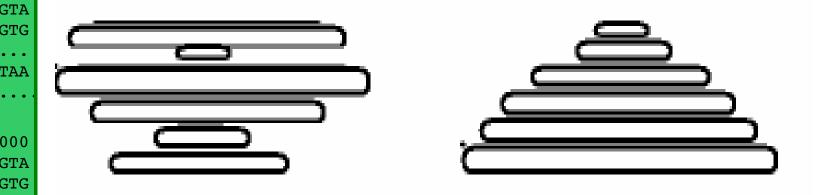
011

GTT GTC

TAA

GTA GTG

TAA



Šiuo atveju leidžiama daryti *tik* priešdėlių inversijas, t.y., apvertinėti tik viršutinę dali boštelio.

Apie blynų rikiavimą

```
Analogas viršutinio algoritmo atlieka tai blogiausiu atveju per 2(n-1) inversijų (pvz., 123645 \rightarrow 632145 \rightarrow 541236 \rightarrow 321456 \rightarrow 123456).
```

Pratimas. Suformuluokit šį algoritmą.

010

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000

GTA GTG

TAA

GTA GTG

TAA

W.Gates ir Ch.Paradimitriuou : blynus galima surikiuoti per daugiausiai (5/3)(n+1) inversijų

Sąvokos

Aproksimacijos algoritmai. <....>
Aproksimacijos koeficientai. <....>

Minimizacijos problema	Maksimizacijos problema
$\max_{ \pi =n} \frac{\mathcal{A}(\pi)}{OPT(\pi)}.$	$\min_{ \pi =n} \frac{\mathcal{A}(\pi)}{OPT(\pi)}$

p. 81

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG ...

GTA GTG

"Prasto" inversijų rikiavimo algoritmo aproksimacijos koeficientas

Prastas Inversiju Rikiavimas turi aproksimacijos koeficientą, kuris yra bent (n-1)/2 (bet gal ir didesnis?).

"Protingesnis godumas"

Sąvokos: Išplėstinis keitinys. Kaimyninai elementai. Lūžio taškai. Kaimynų atkarpa.

Pavyzdys.

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000

GTA GTG

...tęsinys (0 2 1 3 5 6 7 4 8)

Kaimyniniai elementai: 21, 56, 67

ATG CTT

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

TAA
GTA
GTG
TAA

Lūžio taškai: 0 2, 1 3, 3 5, 7 4, 4 8.

Kaimynų atkarpa (atkarpa tarp gretimų lūžio taškų): 0, 2 1, 3, 5 6 7, 4, 8

Naujo algoritmo idėja: požingsniui mažinti lūžio taškų skaičių.

Inversija gali pašalinti daugiausiai du lūžio taškus. Todėl $d(\pi) \ge b(\pi)/2$, kur $b(\pi) - lūžio taškų skaičius$

Idėja: reikia remtis lūžio taškais

```
LūžiųTaškųInversijuRikiavimas(π)
|1 \text{ while } b(\pi)| > 0
2 rask inversiją \rho, kuri sumažina lūžio taškų skaičių b(\pi \cdot \rho)
3 π ← π • ρ (i, j)
    rašyk T
```

Kas yra blogai šioje idėjoje?

010 011 000

011

GTT GTC

GTG

000

GTG

TAA

GTA GTG

...tiesiog reikia idėją pagrįsti

Teorema 1. Jeigu keitinys π turi bent vieną mažėjančią kaimynų atkarpą, tai egzistuoja ρ , kuris sumažina lūžio taškų skaičių (t.y. $b(\pi \cdot \rho) < b(\rho)$)

$$\begin{array}{llll} (\underbrace{0}_{1} & \underbrace{8}_{1} & \underbrace{2}_{1} & \underbrace{7}_{1} & \underbrace{6}_{2} & \underbrace{5}_{1} & \underbrace{4}_{1} & \underbrace{3}_{2} & \underbrace{9}_{1}) & b(\pi) = 6 \\ (\underbrace{0}_{1} & \underbrace{2}_{1} & \underbrace{8}_{1} & \underbrace{7}_{1} & \underbrace{6}_{2} & \underbrace{5}_{1} & \underbrace{4}_{1} & \underbrace{3}_{2} & \underbrace{9}_{1}) & b(\pi) = 5 \\ (\underbrace{0}_{1} & \underbrace{2}_{1} & \underbrace{3}_{1} & \underbrace{4}_{1} & \underbrace{5}_{1} & \underbrace{6}_{1} & \underbrace{7}_{1} & \underbrace{8}_{2} & \underbrace{9}_{1}) & b(\pi) = 3 \\ (\underbrace{0}_{1} & \underbrace{4}_{2} & \underbrace{3}_{2} & \underbrace{1}_{1} & \underbrace{5}_{1} & \underbrace{6}_{1} & \underbrace{7}_{1} & \underbrace{8}_{2} & \underbrace{9}_{1}) & b(\pi) = 2 \\ (\underbrace{0}_{1} & \underbrace{1}_{2} & \underbrace{3}_{1} & \underbrace{4}_{1} & \underbrace{5}_{1} & \underbrace{6}_{1} & \underbrace{7}_{1} & \underbrace{8}_{2} & \underbrace{9}_{1}) & b(\pi) = 0 \end{array}$$

010

011

ATG CTT

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000

GTG

TAA

GTA GTG

Patobulintas algoritmas

010 011 000

ATG CTT

011

GTT GTC

GTA GTG

TAA

000

GTA GTG

TAA

GTA GTG

TAA

```
LūžiųTaškųInversijuRikiavimasX(π)
1 while b(\pi) > 0
   if π mažėjančią kaimynų atkarpą
         rask inversija, \rho, kuri mažina b(\pi \cdot \rho)
     else
         rask inversiją \rho, kuri "padaro" bent vieną mažėjančią kaimynų atkarpą
         \pi \leftarrow \pi \cdot \rho
     rašyk π
  return
```

p. 86

Apie patobulinto algoritmo aproksimacijos koeficientą

Teorema 2. LūžiųTaškųInversijuRikiavimasX(p) yra korektiškas aproksimacijos algoritmas, kurio aproksimacijos koeficientas yra 4

Kadangi $d(\pi) \ge b(\pi)/2$, o blogiausiu atveju algoritmas turi daryti po du žingsnius (sudaryti mažėjančią atkarpą ir mažinti lūžio taškų skaičių), tai aproksimacijos koeficientas neviršija $2b(\pi)/d(\pi) \le 2b(\pi)/(b(\pi)/2) = 4$.

Nes kiekviena inversija gali panaikinti max du lūžio taškus

p. 87

011

GTT GTC GTA GTG

TAA

000 GTA GTG

GT*E*

Dar kartą apie motyvų paiešką

010 011 000

ATG CTT

011

GTT

GTC GTA

GTG

TAA

000

GTA

GTG

TAA

GTA

GTG

TAA

```
GreedyMotifSearch(DNA, t, n, l)
      bestMotif \leftarrow (1, 1, ..., 1)
     s \leftarrow (1, 1, ..., 1)
     for s_1 \leftarrow 1 to n-l+1
           for s_2 \leftarrow 1 to n-l+1
 5
                 if Score(s, 2, DNA) > Score(bestMotif, 2, DNA)
 6
                       BestMotif_1 \leftarrow s_1
                      BestMotif_2 \leftarrow s_2
 8
     s_1 \leftarrow BestMotif_1
     s_2 \leftarrow BestMotif_2
 9
      for i \leftarrow 3 to t
10
11
           for s_i \leftarrow 1 to n-l+1
12
                 if Score(s, i, DNA) > Score(bestMotif, i, DNA)
13
                      bestMotif_i \leftarrow s_i
14
           s_i \leftarrow bestMotif_i
15
      return bestMotif
```

p. 88

