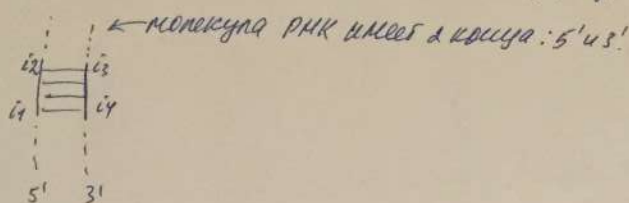


Ждаль. Проверь структуру ДНК и РНК. Тожева Александра 409.

2. Оценка числа степеней и числа вершинных структур.

Степень.

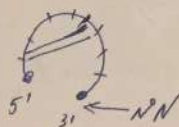


$$i_2 - i_1 = i_4 - i_3$$

нуклеотиды  $i_1 + j$  и  $i_4 - j$  - комплементарны.

Подерши способ представления: на остр.  $n$ :

$N$  нуклеотидов на равных расстояниях



Угелен - кривоугольные связи = хорды между соотв. вершинами.

Сферическое правило: хорды не пересекаются.

Оценка числа степеней

Если первичная структура =  $TTTCC...T$  - мет. нуклеотиды.

то молекула имеет длину  $n$  - а число степеней имеет другое.

мы считаем, что если мы берем нуклеотид  $i$  и нуклеотид  $j$ ,

то они комплементарны с вер-то-то  $i_4$  - так в паре с парами  $i_1$  и  $i_2$ .

то если мы берем степень с  $n$  вершинами,

то вер-то-то, что все эти степени с  $n$  вершинами нуклеотиды

комплементарны - равны  $\frac{1}{4^n}$

то мы считаем среднюю оценку числа степеней, в предт, что  $A, G, C, T$  - равновероятны.

$V(n, N)$  - число степеней длины  $n$  для молекулы длины  $N$ .

$$V(1, N) = \frac{C_n^2}{2!} = \frac{n(n-1)}{2} - \text{число хорд}$$



число степеней имеет длину  $n$ .

нам надо на остр. расположить начало левой степенки и начало правой степенки,

то выделим два отрезка длины  $n$  каждый, причем чтобы они в дугу не попали.

Сначала забудем про дугу.

мы начало степенки - в модуль  $n$  парим.

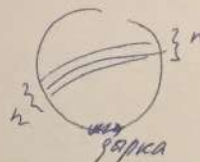
остаток  $N-n$  свободных нуклеотидов.

у них надо выделить один, который будет началом правой степенки

это  $N-n+1$  вариантов (т.е. если  $N=n$  - то ровно 1 способ начертить начало правой степенки)

и еще надо выделить пополам, т.е. не важно, какой из них правая степенка, а что левая.

$$\Rightarrow \frac{N(N-2n+1)}{2} \leftarrow \text{число степеней, включая число неправильных степеней, те которые попали в дугу.}$$





исключим неправильные средки,  
т.е. такие, которые попали в ярыгов.



плохо, если в  $N$  попали  $i_1, i_2, \dots, i_{n-1}$ .

Если  $i_2$  — по-прежнему хорошо — т.к.



$\Rightarrow$  плохих поместившихся для левой стенки:  $n-1$ .

А правая стенка уже хороша, так как левая плоха.

$\Rightarrow$  плохих:  $(n-1)(N-2n+1)$

$$\Rightarrow \text{Хороших средних} = \frac{N(N-2n+1)}{2} - (n-1)(N-2n+1) = \frac{(N-2n+1)(N-2n+2)}{2}$$

$$\Rightarrow V(n, N) = \frac{(N-2n+1)(N-2n+2)}{2}$$

$$\Rightarrow U(N) = \sum_{n=1}^N U(n, N) = \sum_{n=1}^N \frac{2 \cdot (4n)}{2} = \frac{2}{3} (N^3)$$

$$1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + n^2 = \frac{n(n+1)(n+2)}{6} = O(n^3)$$

$\Rightarrow$  в среднем число средних растет от квадрата до куба.

Оценка числа структур

$V(n, N)$  — число структур, если уже есть  $N$ -к связей,  $N$ -значная молекула.

$$V(1, N) = U(1, N) = \frac{N(N-1)}{2 \cdot 4} = \frac{N(N-1)}{8}$$

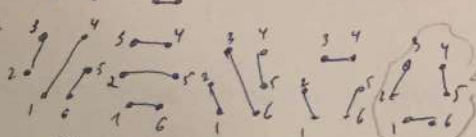
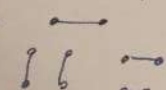
мы имеем  $n$   $N$  водородных пар нуклеотидов,  
которые соединены  $N$ -к связями.

Теперь надо внутри  $2n$ -угольника провести  $n$  непересекающихся хорд: это  $C_{2n}^{2n}$ .

$$n=1: S(1)=1$$

$$n=2: S(2)=2$$

$$n=3: S(3)=5$$



$S(n)$  — число Каталана.

$(( ))(( ))$

$$S(n) = C_{2n}^n - C_{2n}^{n+1} = \frac{(2n)!}{n!n!} - \frac{(2n)!}{(n+1)!(n-1)!} = \frac{(2n)!}{n!n!(n+1)} \left( \frac{1}{n} - \frac{1}{n+1} \right) = \frac{(2n)!}{n!n!(n+1)} = \frac{1}{n+1} \cdot C_{2n}^n = \# \text{ правильных скобочных послед-ств}$$

$$\Rightarrow V(n, N) = C_{2n}^{2n} \cdot \frac{1}{4n} \cdot S(n)$$

$$\Rightarrow V(n, N) \geq \frac{N!}{(2n)!(N-2n)! \cdot 4^n} = \frac{N(N-1) \dots (N-2n+1)}{(2n)! \cdot 4^n} \sim \frac{N^{2n}}{4^n}$$

$S(n) \geq 1$

$\Rightarrow$  число структур растет быстрее полинома любой степени.