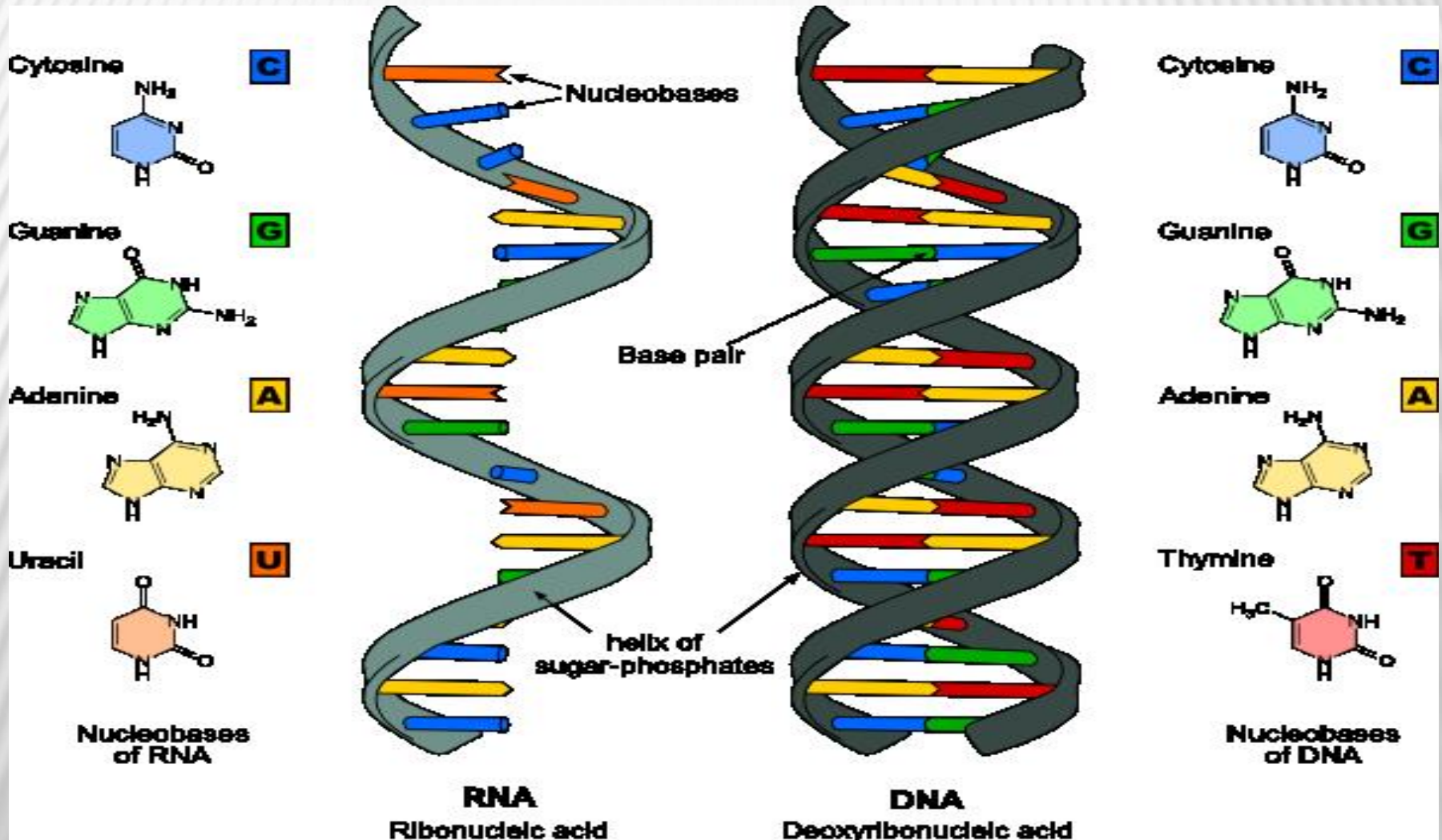


# SEKUNDARNA STRUKTURA RNA – DINAMIČKI ALGORITAM

Neven Grubelić

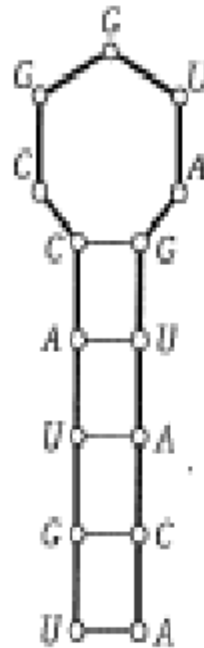
# BIOLOGIJA - PONAVLJANJE



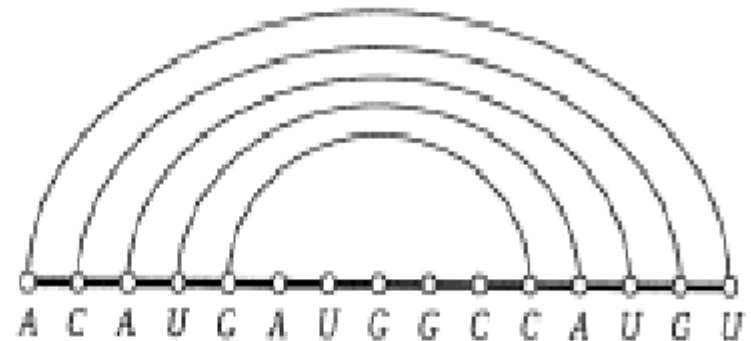


# MATEMATIČKI MODEL

- Niz znakova  $b_1, \dots, b_n$
- 4 pravila:
  - Zabrana križnog uparivanja (pseudo-čvorovi)
  - Bez “oštrih rubova”
  - $\{A, U\}$  ili  $\{C, G\}$
  - 1 baza, 1 par
- Želimo najveći mogući broj parova



(a)



(b)

# ALGORITAM - IDEJA

- Tražimo najveći mogući broj parova (Oznaka:  $OPT(1, n)$ )

-  $OPT(i, j)$  :

Ako  $i \geq j - 4$  onda  $OPT(i, j) = 0$

Inače

Ako  $b_j$  nije uparen s nijednim  $b_k, k < j$  onda  $OPT(i, j) = OPT(i, j-1)$

Ako je uparen s nekim  $b_t$

$$OPT(i, j) = 1 + OPT(i, t - 1) + OPT(t + 1, j - 1)$$

- Preciznije:

$$OPT(i, j) = \max( OPT(i, j - 1), \max( 1 + OPT(i, t - 1) + OPT(t + 1, j - 1) ) ) \quad (1)$$

pri čemu drugi max gledamo po svim  $t$  takvima da su  $b_t$  i  $b_j$  “uparive” baze

# ALGORITAM - PSEUDOKOD

## Nussinov algoritam

Inicijaliziramo  $OPT(i, j) = 0$  kada je  $i = j - 4$

Za svaki  $k = 5, 6, 7, \dots, n - 1$

    Za svaki  $i = 1, 2, \dots, n - k$

$j = i + k$

        Izračunaj  $OPT(i, j)$  koristeći **(1)**

Vrati  $OPT(1, n)$

Na ovaj način popunjavamo matricu svih podrješenja po dijagonalama

Iz **(1)** i iz matrice podrješenja se može rekonstruirati skup svih parova baza u konačnom rješenju (ne nužno u pravilnom poretku)

# POPUNJAVANJE MATRICE

RNA sequence ACCGGUAGU

|         |         |   |   |   |
|---------|---------|---|---|---|
| 4       | 0       | 0 | 0 |   |
| 3       | 0       | 0 |   |   |
| 2       | 0       |   |   |   |
| $i = 1$ |         |   |   |   |
|         | $j = 6$ | 7 | 8 | 9 |

Initial values

|         |         |   |   |   |
|---------|---------|---|---|---|
| 4       | 0       | 0 | 0 | 0 |
| 3       | 0       | 0 | 1 |   |
| 2       | 0       | 0 |   |   |
| $i = 1$ | 1       |   |   |   |
|         | $j = 6$ | 7 | 8 | 9 |

Filling in the values  
for  $k = 5$

|         |         |   |   |   |
|---------|---------|---|---|---|
| 4       | 0       | 0 | 0 | 0 |
| 3       | 0       | 0 | 1 | 1 |
| 2       | 0       | 0 | 1 |   |
| $i = 1$ | 1       | 1 |   |   |
|         | $j = 6$ | 7 | 8 | 9 |

Filling in the values  
for  $k = 6$

|         |         |   |   |   |
|---------|---------|---|---|---|
| 4       | 0       | 0 | 0 | 0 |
| 3       | 0       | 0 | 1 | 1 |
| 2       | 0       | 0 | 1 | 1 |
| $i = 1$ | 1       | 1 | 1 |   |
|         | $j = 6$ | 7 | 8 | 9 |

Filling in the values  
for  $k = 7$

|         |         |   |   |   |
|---------|---------|---|---|---|
| 4       | 0       | 0 | 0 | 0 |
| 3       | 0       | 0 | 1 | 1 |
| 2       | 0       | 0 | 1 | 1 |
| $i = 1$ | 1       | 1 | 1 | 2 |
|         | $j = 6$ | 7 | 8 | 9 |

Filling in the values  
for  $k = 8$

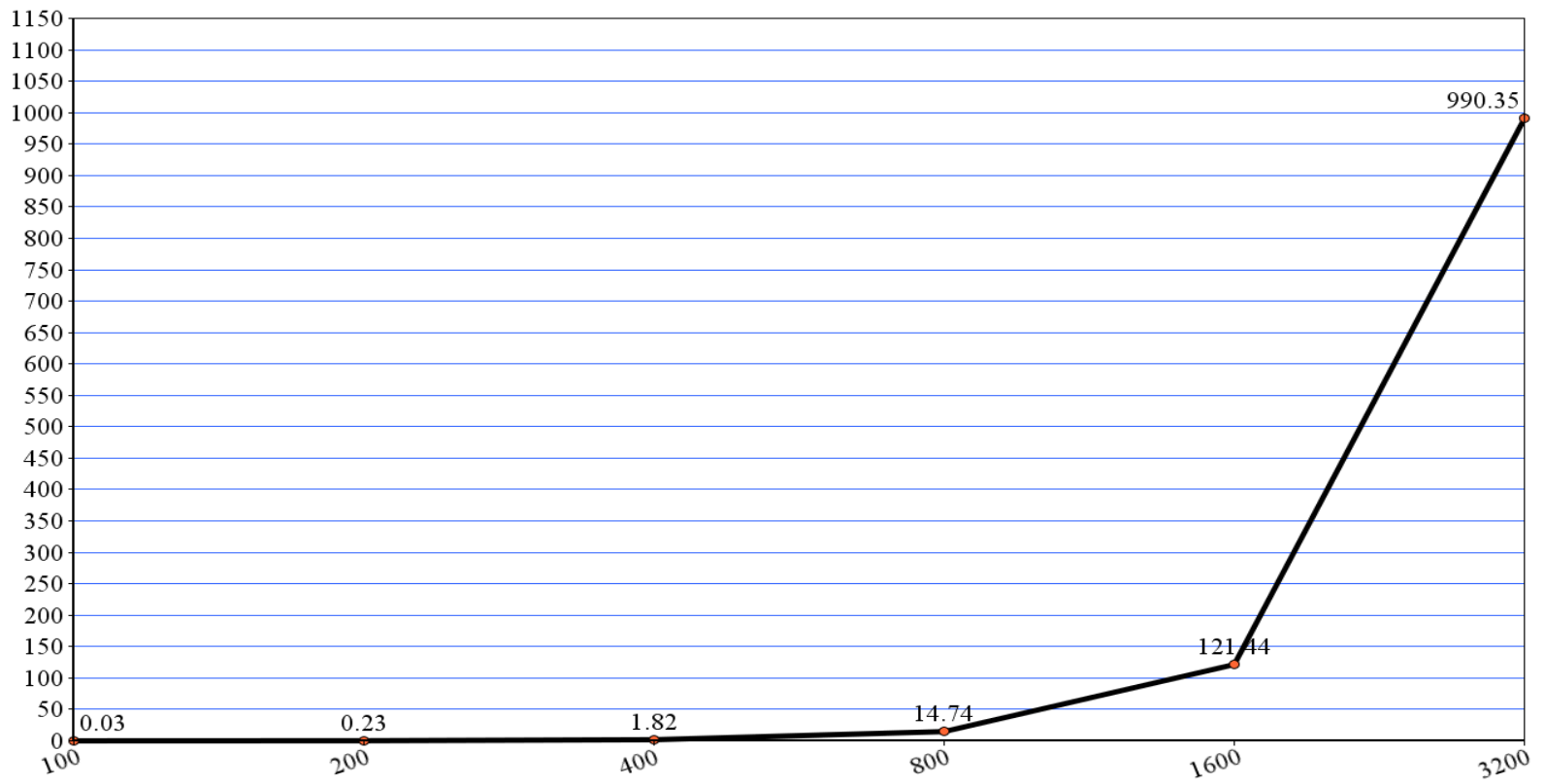
# SLOŽENOST

---

- × Ima  $n^2$  potproblema
- × Svaki potproblem se evaluira u  $O(n)$  (maksimizacija po svim  $t$ )
- × => Složenost je  $O(n^3)$
  
- × Rekonstrukcija baznih parova je složenosti  $O(n^2)$



# REZULTATI



# GTOVI SOFTVER

<http://rna.urmc.rochester.edu/RNAstructureWeb/Servers/Predict1/Predict1.html>

<http://rna.urmc.rochester.edu/RNAstructureWeb/Servers/Predict1/ResultsPages/2021632557735595743/Results.html>

# LITERATURA

- ✦ Kleinberg, J., & Tardos, E. (2005.). *Algorithm Design*.
- ✦ <http://math.mit.edu/classes/18.417/Slides/rna-prediction-nussinov.pdf>