

BIBS/CASM : TP SÉANCE 2

YANN PONTY

1. TRAVAUX PRATIQUES

Le sujet de cette deuxième séance de TP fait suite et utilise les résultats du TP 1. On commencera par le terminer si nécessaire.

1.1. **Fonction de partition.** Implémenter une fonction `partitionFunction` qui prend en argument un ARN ω et renvoie la fonction de partition

$$\mathcal{Z}_\omega = \sum_{s \in S_\omega} e^{\frac{-E_{s,\omega}}{RT}}$$

définie en cours, dans le modèle d'énergie de Nussinov. On rappelle que

$$E(G, C) = -3 \quad E(A, U) = -2 \quad E(G, U) = -1.$$

On pourra se baser sur l'algorithme de comptage précédemment implémenté dans la fonction `countSecStr`.

1.2. **Probabilité de Boltzmann.** Implémenter une fonction `eval` qui prend en argument un ARN ω , une structure s et une température optionnelle, et renvoie l'énergie du couple structure/séquence.

En déduire une fonction `proba`, qui renvoie la probabilité de Boltzmann d'un couple structure/séquence

$$\mathbb{P}(s \mid \omega) = \frac{e^{\frac{-E_{s,\omega}}{RT}}}{\mathcal{Z}_\omega}.$$

1.3. **Structures sous-optimales.** Implémenter une fonction `subopts` qui prend en argument un ARN ω et une énergie Δ et renvoie la liste des repliements pour ω à au plus Δ de la structure d'énergie minimale s_0 . En d'autres termes, on renverra toute structure $s \in S_\omega$ compatible avec ω telle que

$$E(s) - E(s_0) \leq \Delta.$$

1.4. **Échantillonnage statistique.** Implémenter une fonction `sampling` qui prend en argument un ARN ω et un nombre k et engendre k structures indépendamment selon une distribution de Boltzmann

$$\mathbb{P}(s \mid \omega) = \frac{e^{\frac{-E_{s,\omega}}{RT}}}{\mathcal{Z}_\omega}.$$

Comme les tirages sont indépendants, des structures sont éventuellement récurrentes parmi les k structures engendrés. Comment engendrer k structures distinctes ?

E-mail address: `yann.ponty@polytechnique.fr`