18. Übung

Einführung in die Bioinformatik I, 2. Teil
Sommersemester 2021

Aufgabe 1 (5 Punkte): Beweisen Sie formal die Äquivalenz der folgenden Aussagen über einen ungerichteten Graphen $G = (V, E)$:

1. G ist ein Baum, d.h. zwischen zwei beliebigen Knoten gibt es genau einen Pfad.
2. G ist zusammenhängend und kreisfrei.

Aufgabe 1 (5 Punkte): Beweisen Sie formal die Äquivalenz der folgenden Aussagen über einen ungerichteten Graphen $G = (V, E)$:

1. G ist ein Baum, d.h. zwischen zwei beliebigen Knoten gibt es genau einen Pfad.
2. G ist zusammenhängend und kreisfrei.

1 → 2:
G ist ein Baum, d. h. es existiert genau ein Pfad zwischen beliebigen Knoten u, v.
→ Es kann keine zwei Knoten geben, die in verschiedenen Zusammenhangskomponenten sind
→ G ist zusammenhängen.

Wenn es einen Kreis $u_1u_2,u_2u_3,\ldots,u_nu_1$ der Länge n gäbe, dann wäre u_n von u_1 aus, auf den verschiedenen Pfaden u_1u_n und $u_1u_2\ldots u_n$ erreichbar.
→ Widerspruch zur Voraussetzung das es **genau** einen Pfad zwischen beliebigen Knoten u, v gibt
→ G ist kreisfrei.

Aufgabe 1 (5 Punkte): Beweisen Sie formal die Äquivalenz der folgenden Aussagen über einen ungerichteten Graphen $G = (V, E)$:

1. G ist ein Baum, d.h. zwischen zwei beliebigen Knoten gibt es genau einen Pfad.
2. G ist zusammenhängend und kreisfrei.

1 → 2:
G ist ein Baum, d. h. es existiert genau ein Pfad zwischen beliebigen Knoten u, v.
→ Es kann keine zwei Knoten geben, die in verschiedenen Zusammenhangskomponenten sind
→ G ist zusammenhängen.

Wenn es einen Kreis $u_1u_2,u_2u_3,\ldots,u_nu_1$ der Länge *n* gäbe, dann wäre u_n von u_1 aus, auf den verschiedenen Pfaden u_1u_n und $u_1u_2\ldots u_n$ erreichbar.
→ Widerspruch zur Voraussetzung das es **genau** einen Pfad zwischen beliebigen Knoten u, v gibt
→ G ist kreisfrei.

2 → 1:
G ist zusammenhängend.
→ Zwischen zwei beliebigen Knoten u,v existiert **mindestens** ein Pfad.
Noch zu zeigen: Es existiert **höchstens** ein Pfad zwischen u, v.
Angenommen es existieren zwei verschiedene Pfade $P = u\ldots u'p_1\ldots p_mw\ldots v$ und $Q = u\ldots u'q_1\ldots q_nw\ldots v$ zwischen den Knoten u, v.
→ Dann besitzt G mindestens den Kreis $u'p_1\ldots p_mwq_n\ldots q1u'$
→ Widerspruch zur Voraussetzung das G kreisfrei ist.
→ Es gibt also **genau** einen Pfad zwischen beliebigen Knoten u, v. → G ist ein Baum.

Aufgabe 2 (6 Punkte): Zeichnen Sie alle phylogenetischen Wurzelbäume mit vier Objekten A, B, C, D. Beachten Sie, dass die Bäume nicht unbedingt binär (voll aufgelöst) sein müssen. Wie viele phylogenetische Wurzelbäume gibt es? Zwei Bäume seien *benachbart*, wenn der eine aus dem anderen durch Kontraktion[1] genau einer Kante hervorgeht. Zeichnen Sie den Nachbarschaftsgraphen[2] der zugehörigen Baumtopologien ohne Berücksichtigung der Knoten-Label

[1]Kontraktion (Zusammenziehen) einer Kante $\{u, v\}$ bedeutet, dass u und v zu einem Knoten verschmolzen werden, wobei die Kante $\{u, v\}$ verschwindet. Alle Kanten, die vorher inzident zu u oder v waren, sind dann inzident zum neuen Knoten.

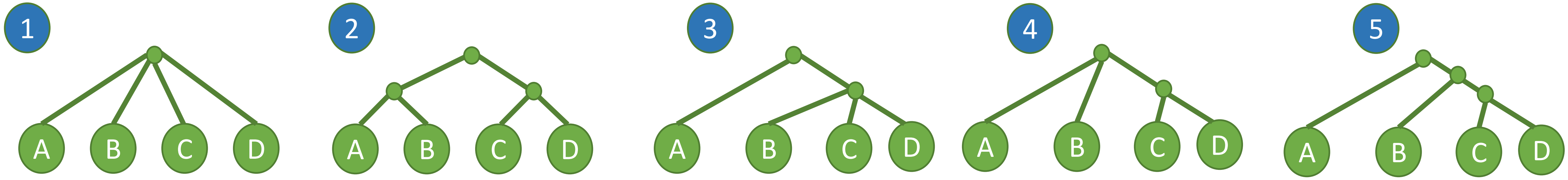
[2]Jeder Knoten steht für eine der Baumtopologien (ohne Berücksichtigung der Blatt-Labels). Zwei Knoten werden verbunden, wenn die beiden entsprechenden Baumtopoligien benachbart sind.

Aufgabe 2 (6 Punkte): Zeichnen Sie alle phylogenetischen Wurzelbäume mit vier Objekten A, B, C, D. Beachten Sie, dass die Bäume nicht unbedingt binär (voll aufgelöst) sein müssen. Wie viele phylogenetische Wurzelbäume gibt es? Zwei Bäume seien *benachbart*, wenn der eine aus dem anderen durch Kontraktion[1] genau einer Kante hervorgeht. Zeichnen Sie den Nachbarschaftsgraphen[2] der zugehörigen Baumtopologien ohne Berücksichtigung der Knoten-Label

[1]Kontraktion (Zusammenziehen) einer Kante $\{u, v\}$ bedeutet, dass u und v zu einem Knoten verschmolzen werden, wobei die Kante $\{u, v\}$ verschwindet. Alle Kanten, die vorher inzident zu u oder v waren, sind dann inzident zum neuen Knoten.

[2]Jeder Knoten steht für eine der Baumtopologien (ohne Berücksichtigung der Blatt-Labels). Zwei Knoten werden verbunden, wenn die beiden entsprechenden Baumtopoligien benachbart sind.

Mögliche Baumtopologien für phyl. Wurzelbäume mit vier Objekten:



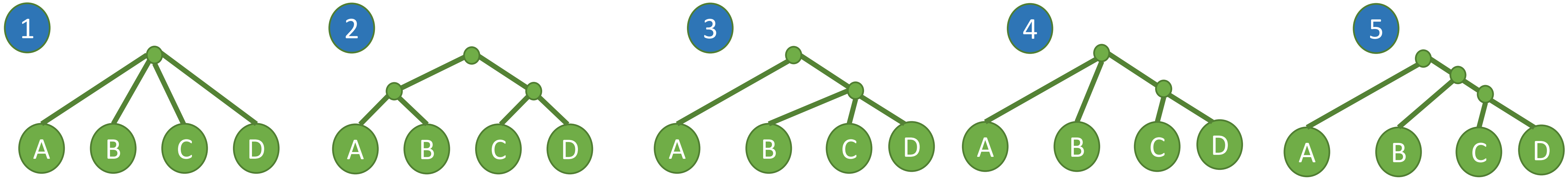
#1 #3 #4 #6 #12

Aufgabe 2 (6 Punkte): Zeichnen Sie alle phylogenetischen Wurzelbäume mit vier Objekten A, B, C, D. Beachten Sie, dass die Bäume nicht unbedingt binär (voll aufgelöst) sein müssen. Wie viele phylogenetische Wurzelbäume gibt es? Zwei Bäume seien *benachbart*, wenn der eine aus dem anderen durch Kontraktion[1] genau einer Kante hervorgeht. Zeichnen Sie den Nachbarschaftsgraphen[2] der zugehörigen Baumtopologien ohne Berücksichtigung der Knoten-Label

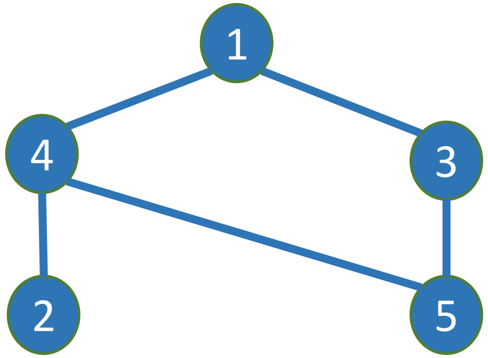
[1]Kontraktion (Zusammenziehen) einer Kante $\{u, v\}$ bedeutet, dass u und v zu einem Knoten verschmolzen werden, wobei die Kante $\{u, v\}$ verschwindet. Alle Kanten, die vorher inzident zu u oder v waren, sind dann inzident zum neuen Knoten.

[2]Jeder Knoten steht für eine der Baumtopologien (ohne Berücksichtigung der Blatt-Labels). Zwei Knoten werden verbunden, wenn die beiden entsprechenden Baumtopoligien benachbart sind.

Mögliche Baumtopologien für phyl. Wurzelbäume mit vier Objekten:



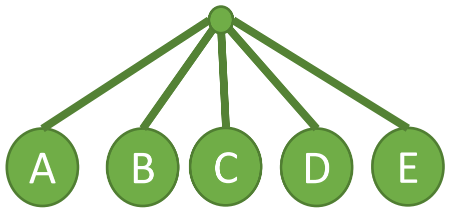
#1 #3 #4 #6 #12



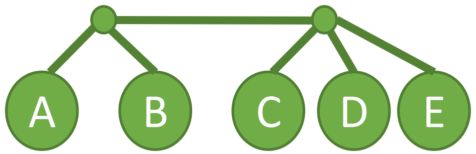
Aufgabe 3 (3 Punkte): Wie viele phylogenetische Bäume (nicht-gewurzelt) mit 5 Objekten gibt es? Beachten Sie, dass auch hier die Bäume nicht notwendig binär (voll aufgelöst) sein müssen. Was fällt Ihnen im Vergleich zur Aufgabe 2 (auch strukturell) auf?

Aufgabe 3 (3 Punkte): Wie viele phylogenetische Bäume (nicht-gewurzelt) mit 5 Objekten gibt es? Beachten Sie, dass auch hier die Bäume nicht notwendig binär (voll aufgelöst) sein müssen. Was fällt Ihnen im Vergleich zur Aufgabe 2 (auch strukturell) auf?

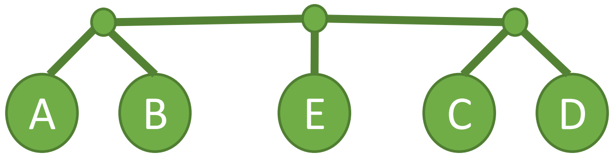
Mögliche Baumtopologien für ungewurzelte phyl. Bäume mit fünf Objekten:



#1



#10



#15

Aufgabe 3 (3 Punkte): Wie viele phylogenetische Bäume (nicht-gewurzelt) mit 5 Objekten gibt es? Beachten Sie, dass auch hier die Bäume nicht notwendig binär (voll aufgelöst) sein müssen. Was fällt Ihnen im Vergleich zur Aufgabe 2 (auch strukturell) auf?

Anzahl ungewurzelter Bäume

n	3	4	5	6
#				

Anzahl gewurzelter Bäume

n	2	3	4	5
#				

Aufgabe 3 (3 Punkte): Wie viele phylogenetische Bäume (nicht-gewurzelt) mit 5 Objekten gibt es? Beachten Sie, dass auch hier die Bäume nicht notwendig binär (voll aufgelöst) sein müssen. Was fällt Ihnen im Vergleich zur Aufgabe 2 (auch strukturell) auf?

Die Anzahl aller möglichen gewurzelten Bäume lässt sich mit der folgenden Rekurrenz berechnen, wobei n die Anzahl der Objekte im Baum und m die Anzahl innerer Knoten ist:

$$T(n,m) = \begin{cases} T(n-1,1) & (m=1) \\ \underbrace{m * T(n-1,m)}_{\text{\#Möglichkeiten ein Objekt an einen inneren Knoten zu hängen}} + \underbrace{(n+m-1) * T(n-1,m-1)}_{\text{\#Möglichkeiten eine innere Kante zu teilen und dort ein Objekt anzuhängen.}} & (m>1) \end{cases}$$

Aufgabe 3 (3 Punkte): Wie viele phylogenetische Bäume (nicht-gewurzelt) mit 5 Objekten gibt es? Beachten Sie, dass auch hier die Bäume nicht notwendig binär (voll aufgelöst) sein müssen. Was fällt Ihnen im Vergleich zur Aufgabe 2 (auch strukturell) auf?

Die Anzahl aller möglichen gewurzelten Bäume lässt sich mit der folgenden Rekurrenz berechnen, wobei n die Anzahl der Objekte im Baum und m die Anzahl innerer Knoten ist:

$$T(n,m) = \begin{cases} T(n-1,1) & (m=1) \\ \underbrace{m * T(n-1,m)}_{\text{\#Möglichkeiten ein Objekt an einen inneren Knoten zu hängen}} + \underbrace{(n+m-1) * T(n-1,m-1)}_{\text{\#Möglichkeiten eine innere Kante zu teilen und dort ein Objekt anzuhängen.}} & (m>1) \end{cases}$$

Wie sieht die Rekurrenz für **binäre** Wurzelbäume aus?

Aufgabe 3 (3 Punkte): Wie viele phylogenetische Bäume (nicht-gewurzelt) mit 5 Objekten gibt es? Beachten Sie, dass auch hier die Bäume nicht notwendig binär (voll aufgelöst) sein müssen. Was fällt Ihnen im Vergleich zur Aufgabe 2 (auch strukturell) auf?

Die Anzahl aller möglichen gewurzelten Bäume lässt sich mit der folgenden Rekurrenz berechnen, wobei n die Anzahl der Objekte im Baum und m die Anzahl innerer Knoten ist:

$$T(n,m) = \begin{cases} T(n-1,1) & (m=1) \\ \underbrace{m * T(n-1,m)}_{\substack{\text{\#Möglichkeiten ein Objekt an} \\ \text{einen inneren Knoten zu hängen}}} + \underbrace{(n+m-1) * T(n-1,m-1)}_{\substack{\text{\#Möglichkeiten eine innere} \\ \text{Kante zu teilen und dort ein} \\ \text{Objekt anzuhängen.}}} & (m>1) \end{cases}$$

Wie sieht die Rekurrenz für **binäre** Wurzelbäume aus?

Um ein neues Objekt in einen binären Wurzelbaum zu hängen, muss eine Kante geteilt und das neue Objekt dort einen neuen inneren Knoten gehangen werden (sonst wäre der Baum nicht mehr binär).
→ Wir haben also $T(n,m) = (n+m-1) * T(n-1,m-1)$ Möglichkeiten.
→ Da binäre Bäume immer $m = n-1$ innere Knoten haben, folgt: $T(n) = (2n-2) * T(n-1)$

Warum interessieren wir uns überhaupt für die Anzahl an möglichen (un)gewurzelten Bäumen?

Wie unterscheiden sich phylogenetische Wurzelbäume von phylogenetischen ungewurzelten Bäumen in ihrer Interpretation?